対称行列の添字の置換による同値性判定の試み

A Trial of Determination of Equivalence of Symmetric Matrices by Permutation of Induces

東京都立大学・数理科学専攻　　村上弘*1

Hiroshi Murakami

Department of Mathematical Sciences, Tokyo Metropolitan University

Abstract

For two numerically given real symmetric matrices, we derive a procedure that determines whether there exists a symmetric index substitution that transforms one matrix into the other and explicitly returns it if such a substitution exists. To make such a procedure efficient, we use the eigenvalue decomposition of a real symmetric matrix. There are some unfortunate cases where the current procedure cannot reach a decision. Some experimental results are presented.

1　はじめに

数値で与えられた 2 つの N 次実対称行列が対称な添字の置換により一致可能であるかを判定して，一致可能である場合にはそれを実現する置換の例を具体的に示すことを考える．行列の次数 N としてはたとえば数十から数千程度を想定している．N の階乗通りの置換すべてについて試すという自明な解法は，計算量の面から N が少し大きくなると現実には実行できない．そこで計算量を抑えた方法が強く望まれる．

今回は簡単のために行列の固有値単純な場合を主に扱うが，そのような場合に限定してもうまく判定できない場合があるので現在の方法と実装ではまだ判定法としては不完全である．なお候補となる置換を得たらそれを実際に適用して行列が一致するかの検査は容易なので，間違った置換を答として返さないことは保証される．

2　対称行列の間の対称な添字の置換による一致性の判定

対称行列 A と B がある対称な添字の置換で一致可能であるか，つまり $B = PAP^T$ を満たす置換行列 P が存在するかの判定と，そのような置換行列 P が存在する場合にそれを具体的に求めることを考える．

まず双方の行列の次数が同じであることが必要である．さらに双方の行列が含む要素の値の種類とそれら値の出現度数が同じであることが必要である．また特に双方の行列の対角要素の値の種類とそれら値の出現度数が同じであることが必要である．

要素の値は区別ができさえすれば数値に限られず，たとえば記号や文字列などでもよい．両方の行列に現れる相異なる要素の値がたとえば赤，緑，青のように 3 種類であれば，それらを相異なる 3 つの実数値たとえば 0，1，2 に置き換えれば扱うことができる．要素の値を数値に置き換えて扱うことで，行列の固有値分解などの数値計算手法が適用できるようになる．

*1 〒 191-0397 東京都八王子市南大沢 1-1　　E-mail: mrkmhrsh@tmu.ac.jp

3　実対称行列の固有値分解を利用する試み

同じ次数の実対称行列 A と B が対称な添字の置換により一致可能であるためには，まず両者の固有値分布が重複度も込めて同じであることが必要である．そのことが満たされていなければ，一致不可能として判定を終了する．そこで以下ではそのことは満たされているものとして，A と B の固有値分解をそれぞれ $A \to Q_A \Lambda Q_A^T$，$B \to Q_B \Lambda Q_B^T$ とする．ここで共通する Λ は固有値を昇順に並べた対角行列であり，Q_A と Q_B はそれぞれ A と B の単位固有ベクトルを固有値と同じ順序で列として並べた行列である．以下では「固有ベクトル」は長さが 1 のベクトルに規格化されているものとする．

行列 A と B のどちらも重複する固有値が無い場合には，それぞれの固有ベクトルには 2 通りの向きの選び方の不定性だけがある．もしも関係 $B = PAP^T$ が成り立つならば，ある固有値 λ に対応する Q_A の列ベクトルの添字を置換行列 P で置換したものは，同じ固有値 λ に対応する Q_B の列ベクトルに一致するかあるいはその向きを逆にしたものと一致するかのどちらかである．よって向きが同じか逆かを表す符号 ± 1 を対角要素に並べた対角行列 Σ を用いて $PQ_A = Q_B \Sigma$ となることが必要でありかつ十分でもある．つまり行列 A と B が重複する固有値を持たない場合には，A と B が対称な添字の置換で一致するための必要十分条件は，固有値と同じ順に固有ベクトルを並べた直交行列 Q_A と Q_B に対してある符号行列 Σ とある置換行列 P が存在して関係 $PQ_A = Q_B \Sigma$ が成り立つことである．

注　固有値分布が一致する 2 つの実対称行列 A と B がそれぞれ重複する固有値を持つ場合にも成り立つように一般化された必要十分条件は以下のようになる．A と B が対称な添字の置換で一致するための必要十分条件は，固有値の順に固有ベクトルを並べた直交行列 Q_A と Q_B に対して，ある「一般化された符号行列」Σ とある置換行列 P が存在して，関係 $PQ_A = Q_B \Sigma$ が成り立つことである．ただしこの一般化された符号行列 Σ はブロック対角行列であり，そのブロッック対角要素の個数は相異なる固有値の個数と等しく，各固有値に対応するブロック対角要素は，その固有値の重複度に等しい次数の直交行列である．それらの直交行列は同じ固有値を持つ固有ベクトルを並べた組に右側から作用する（固有値が単純な固有ベクトルに対する直交行列は符号である）．ただし今回は，このように一般化された形の必要十分条件は用いていない．

3.1　固有値が単純である固有ベクトル同士の間の相対符号の限定法

行列 A と B が対称な添字の置換により一致可能である場合には，単純な固有値に対応するそれぞれの行列の固有ベクトル同士の間には ± 1 のどちらか一方の値をとる「相対符号」がある．

ある単純な固有値 λ に対応する Q_A と Q_B の列をそれぞれ $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ と表すとき，少なくとも $\sigma = \pm 1$ のどちらかに対してある置換行列 P が存在して関係 $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ が成り立つことが必要である．

いま関数 $\mathrm{sort}(\mathbf{v})$ は引数のベクトル $\mathbf{v}$ の要素の値を昇順に並べ換えたベクトルを関数値として返すが，引数のベクトルは変更しないものとする．そのとき，任意の置換行列 π と任意のベクトル $\mathbf{v}$ について関係 $\mathrm{sort}(\pi\mathbf{v}) = \mathrm{sort}(\mathbf{v})$ が成立するから，条件 $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ が成り立つためには $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(\sigma\mathbf{y})$ であることが必要である．そこで $\sigma = \pm 1$ のそれぞれの場合について条件 $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(\sigma\mathbf{y})$ の成否を調べる．もしも条件が $\sigma = \pm 1$ のどちらでも成立しないなら，題意の置換行列 P は存在しないと判定して処理を終了する．もしも条件が $\sigma = \pm 1$ の片方だけで成立すれば，σ の値はその片方に限定できる．もしも条件が $\sigma = \pm 1$ の両方で成立するならば，σ の値はどちらも可能性があり，この方法では限定できない．この方法で限定できない場合には，固有ベクトル $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ はそれぞれ $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(-\mathbf{x})$ と $\mathrm{sort}(\mathbf{y}) = \mathrm{sort}(-\mathbf{y})$ を満たすことが容易に示せる．このような特殊な性質を持つ固有ベクトルは固有値が単純な固有ベクトル全体の中では少ないであろうと思われる．

3.2 行列に重複する固有値が無く，固有ベクトルの相対符号がすべて限定できた場合

行列の固有値に重複が無い場合には，直交行列 Q_A と Q_B で列番号の同じ列同士の間の相対符号がすべて限定できたならば，置換行列 P の候補は高々1 つになる．以下にそのことを示す．

相対符号を対応順に並べた対角行列を Σ とすると，置換行列 P に対する必要条件は $PQ_A = Q_B\Sigma$ である．この右辺を $Q'_B \equiv Q_B\Sigma$ とおくと，Q'_B もまた B の固有ベクトルを固有値の昇順に並べた直交行列であり，置換行列 P に対する必要条件は $PQ_A = Q'_B$ となる．すると P により Q_A の行の添字を置換したものが Q'_B である．P が行の添字 i を j に移す置換であれば，Q_A の第 i 行の内容と Q'_B の第 j 行の内容が一致する必要がある．そこで Q_A の第 i 行の内容と Q'_B の第 j 行の内容の一致不一致に従って P の要素 $p_{i,j}$ の値を 1 または零とする．このようにして構成した P が置換行列の形になること，すなわち P の行と列はどれも値 1 の要素を 1 つだけ含むことが必要である．いまの場合には Q_A と Q'_B はどちらも直交行列であるから，Q_A の各行の内容はすべて異なり，Q'_B の各行の内容もすべて異なる．そのことから構成された P の行や列はどれも値が 1 の要素を複数含まない．なぜならば $j_1 \neq j_2$ で $p_{i,j_1} = p_{i,j_2} = 1$ とすると，Q'_B の第 j_1 行と第 j_2 行の内容が一致していることになり矛盾であり，同様に $i_1 \neq i_2$ かつ $p_{i_1,j} = p_{i_2,j} = 1$ となることもない．しかし構成された P の行または列で要素がすべて零のものがあれば P は置換行列の形にならないので，問題の要求する置換は存在しないと判定できる．P が置換行列の形である場合には，十分条件 $B = PAP^T$ を調べて満たしていれば問題の要求する置換は存在して P がその唯一の置換となるが，満たしていなければ問題の要求する置換は存在しないと判定できる．

3.3 相対符号の限定ができない固有ベクトルが存在する場合

相対符号の限定ができない固有ベクトルには 2 つの場合がある．1 つは固有値が重複している固有ベクトルである場合であり，もう 1 つは固有値は単純だがその固有ベクトル $\mathbf{x}$ が特別な性質 $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(-\mathbf{x})$ を満たしているために（現在の方法では）限定ができない場合である．

いま Q_A と Q_B それぞれから，相対符号が限定できる固有ベクトルに対応する列だけを順に残して $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}_B$ を作り，$\widetilde{Q}_B$ の各列にそれに対応する相対符号を乗じて $\widetilde{Q}'_B$ を作ると，置換行列 P に対する必要条件は $P\widetilde{Q}_A = \widetilde{Q}'_B$ となる．$\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ はどちらも直交行列からいくつかの列を除外したものになるので，どちらの行列も同じ内容の行を複数持っている可能性がある．

いま N 次行列 R の行列要素 $r_{i,j}$ を $\widetilde{Q}_A$ の第 i 行と $\widetilde{Q}'_B$ の第 j 行の内容が一致するかしないかに従って 1 と零に設定する．このように作成された行列 R の行あるいは列は値 1 の要素を複数含んでいる可能性がある．

> なぜなら，もしも $\widetilde{Q}_A$ の第 i 行の内容と $\widetilde{Q}'_B$ の 2 つの行である第 j_1 行と第 j_2 行の内容が一致すれば $r_{i,j_1} = r_{i,j_2} = 1$ である．同様にもしも $\widetilde{Q}_A$ の 2 つの行である第 i_1 行と第 i_2 行の内容と $\widetilde{Q}'_B$ の第 j 行の内容が一致すれば $r_{i_1,j} = r_{i_2,j} = 1$ である．

そのとき，以下のことがわかる．

- もしも R の行あるいは列にすべての要素が零であるようなものが存在すれば，A を B に移すような置換行列は存在しない．
- もしも R のどの行も列も要素 1 をただ 1 つだけ含んでいれば R は置換行列の形であるが，その場合には置換行列 P の候補は R だけになる．その R を P として十分条件 $B = PAP^T$ を検証して，それが満たされていれば，A を B に移す置換行列が存在してその唯一の解が P になる．
- もしも R が上記の 2 通りの場合以外であれば，置換行列 P の候補は複数になる．現在はこの場合には判定の処理を中止にしている．この場合のより整った議論は副節 3.4 に記述した．

固有値が単純だが相対符号を限定できない固有ベクトルが全部で k 個ある場合には，それら k 個の値の組合せをとりあえず仮定して試す方法が考えられる．もしも行列の固有値に重複がなければ，それら k 個を仮定してとりあえず確定にすると,（副節 3.2 の議論により）仮定した組合せごとに置換行列 P の候補が高々1 つずつ得られて，その候補の P が十分条件 $B = PAP^T$ を満たすかをそれぞれ調べる.（行列の固有値に重複がある場合には，仮定した組合せごとに得られる置換行列 P の候補は一般には複数になる）．このような仮定による試行を組合せの総数 2^k 通りについて行うことが考えられる．ただしこの方法は個数 k がごく少数ならば実施可能だが，多くなると困難あるいは不可能になる．今回の実験ではこのような方法は取り入れていない.

ごく少数の固有ベクトルの情報からでも置換の候補が決まる場合がある．その極端な例は，行列 A の側かあるいは行列 B の側のどちらかに単純な固有値 λ に対応する固有ベクトルであってその要素の値がすべて異なっているものが（1 つ）存在する場合である．その固有値 λ に対応する Q_A と Q_B の列をそれぞれ $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ とすると，相対符号の値 $\sigma = \pm 1$ の 2 通りの場合のどちらかに対して置換行列 P は条件式 $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ を満たす必要がある．すると σ の 2 通りの値それぞれの場合について，この条件式だけから置換行列 P の候補は高々1 つに限られることがわかる．もしも固有ベクトルに相対符号 σ の値が限定できる場合ならば，その限定された σ の値についてだけ P の候補を決めれば良い（詳細省略）.

また同様に，行列 A の側かあるいは行列 B の側のどちらかに単純な固有値 λ に対応する固有ベクトルであってその要素の値の絶対値がすべて異なるものが（1 つ）存在すれば，その固有値 λ に対応する双方の行列の固有ベクトルの情報だけから置換行列 P の候補が高々1 つに限られることがわかる（詳細省略）.

3.4 $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ の「行の内容」の分類で決まる置換の候補とその数の上限

置換行列 P により $P\widetilde{Q}_A = \widetilde{Q}'_B$ が成立するためには，まず $\widetilde{Q}_A$ の「行の内容」の全体と $\widetilde{Q}'_B$ の「行の内容」の全体が重複度も込めて一致することが必要で，そうでなければ置換行列 P は存在しない.

そこで相異なる「行の内容」に $1, 2, \ldots, m$ と番号を付けてやり，r 番目の「行の内容」を持つ $\widetilde{Q}_A$ の行の添字の集合を $I_A^{(r)}$ とし，同様に r 番目の「行の内容」を持つ $\widetilde{Q}_B$ の行の添字の集合を $I_B^{(r)}$ とする.

仮定から $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ それぞれの r 番目の「行の内容」の重複度は一致するのでそれを N_r と書くと，$|I_A^{(r)}| = |I_B^{(r)}| = N_r$ であり，$N = N_1 + N_2 + \cdots + N_m$ である.

それらの条件を満たしている場合には，置換行列 P の候補の全体は $I_A^{(r)}$ から $I_B^{(r)}$ への N_r 次の置換をそれぞれ $r = 1, 2, ..., m$ について組み合わせたものになり，組合せの総数は $N_1! \times N_2! \times \cdots \times N_m!$ である.

注：後で示している現在の実験例では，$\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ から得られる必要条件を満たす置換行列の候補が複数になる場合には処理をそこで中止して判定を失敗扱いにしている．しかしできればここに述べた方法を用いて，組合せの総数があまり多くなりすぎなければ候補すべてに対して十分条件を満たせるかを順次調べて，満たせるものが 1 つ見つかったら，それを問題の答として示して終了するように改良することが望ましい.

もしも重複度 $N_1, N_2, \ldots, N_m$ のほとんどが 1 で，ごく少数個だけが小さい数であれば組合せの数はそれほど大きくならないので，全ての可能な置換の候補を具体的に列挙できる．すべての重複度が 1 であれば，もちろん置換の候補はただ 1 つになる.

4 実験例

実験に用いたプログラムは Python 言語とパッケージの numpy と scipy で記述した．現在のプログラムの行数は 400 行を少し下回る程度である．行列の次数 N を指定して要素が零と 1 からなる対称な行列 A を作る（ただし今回の方法の適用範囲は行列要素の値が 2 種類の場合に限るものではない）．A の対角要

素はすべて零とし，非対角要素には値 1 をランダムに，ただし行列の対称性を満たすように，指定された非零率で割り当てる．さらに添字に対する N 次のランダムな置換 π を生成して，添字の対称な置換操作 $b_{i,j} \leftarrow a_{\pi(i),\pi(j)}$ により行列 A から行列 B を作成する．このようにして作成された 0-1 対称行列 A と B だけを与えて，それらから関係 $B = PAP^T$ を満たす置換行列 P が存在するかを判定して，存在する場合にはそれを具体的に示すことが目標である.（この実験の例題で与えている A と B はその構成から，対称な添字の置換により一致可能である.）置換行列 P の候補が求まったら，それに対して十分条件 $B = PAP^T$ の成立を確認するので，間違った P を答とすることはないが，途中で現在の方法や実装上の不完全さに遭遇して処理をそこで中止する場合は判定は失敗扱いとしている（判定に失敗ということは「題意を満たす置換が存在しないと判定された」の意味ではない）．

倍精度浮動小数点数を用いた近似計算なので，必要条件に現れる実数同士やベクトル同士が等しいか否かの判断は，条件の緩和に相当するが，両者の間の距離が十分近いか否かに基づいて行っている（必要条件を緩和した影響により，置換行列 P の候補に偽物が混入しても，最後でその P を用いて実際の置換を行って十分条件を満たすかどうかを調べるので偽者は棄却される）．

今回の実験で，テスト用の行列として要素が 0-1 のランダム行列を用いた理由は，そのような行列は特徴が最も少ないので，置換による一致性の判定が難しいものになるだろうと考えたからである．これはグラフの隣接行列であるともみなせるが，グラフの連結性や頂点次数の上限などは考慮しておらず，単にまったくランダムなものである．ただし今回の方法にとってそのようなランダムに生成された行列の例題は都合の良いものになっている可能性がある．たとえば行列の固有ベクトルとして要素の絶対値がすべて異なっているものが 1 つあれば，そのベクトルの情報だけから置換行列の候補は高々1 つに決まる．大規模なランダム行列はそのような固有ベクトルを持ちやすい傾向があるかもしれない.

4.1 双方の行列の固有値分布の一致の確認と重複または極度な接近の検出

まず行列 A と B を固有値分解して，それぞれの固有値を昇順に並べ，またそれぞれの固有ベクトルを固有値の昇順に列に並べて行列 Q_A と Q_B を作成する（注：Q_A と Q_B はそれぞれ固有値分解の計算ルーチンが出してきた固有ベクトルをそのまま固有値の昇順に並べて固定する）．

まず A と B それぞれの同じ順位の固有値同士の差の大きさすべてについての最大値がある小さい正の閾値 ε_1 未満であるかを検証する（実験例ではこの閾値 ε_1 は 10^{-10} としている）．この条件が成立する場合には，両方の行列の固有値は重複度も込めて一致しているとみなして処理を続けるが，成立していなければ双方の行列には一致していない固有値が存在すると判断して，A と B は対称な添字の置換で一致させることは不可能であるとして判定を終了する.

次に A あるいは B の昇順に並べた固有値について，隣り合うものとの差の大きさがある小さい正の閾値 ε_2 未満の隙間がちょうど s 回連続していれば，それらの連続する s 個の隙間をはさむ全部で $(s+1)$ 個の固有値は重複であるか極端に近接しているとみなして扱うことにする（実験例ではこの閾値 ε_2 は 10^{-10} としている）．

4.2 重複していない固有値に対応する固有ベクトルの間の相対符号の限定法

重複していない固有値に対応する A と B の固有ベクトル同士の間でそれぞれのベクトルの 2 通りの向きの選び方の任意性に由来するくい違いを解消するために「相対符号」を用いる.

重複していない固有値 λ に対する Q_A の列を $\mathbf{x}$，Q_B の列を $\mathbf{y}$ として，題意を満たす置換行列を P とするとき，相対符号 $\sigma = \pm 1$ のどちらかについて，条件 $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ が満たされることが必要である.

関数 $\mathrm{sort}(\mathbf{v})$ は引数のベクトル $\mathbf{v}$ に対してその要素を昇順に並べた新たなベクトルを返すものとする．ただしこの関数は引数のベクトルは変更しないとする．そのとき任意の置換 π と任意のベクトル $\mathbf{v}$ について $\mathrm{sort}(\pi\mathbf{v}) = \mathrm{sort}(\mathbf{v})$ が常に成立する．よって $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ であるためには $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(\sigma\mathbf{y})$ となることが必要である．そこで $\sigma = \pm 1$ のそれぞれに対して $\mathrm{sort}(\mathbf{x}) = \mathrm{sort}(\sigma\mathbf{y})$ の成否を調べる．$\sigma = \pm 1$ のどちらでも成り立たなければ，置換 P は存在不可能なので判定を終了する．$\sigma = \pm 1$ の片方だけで成り立てば，σ はその片方の値に限定できる．$\sigma = \pm 1$ の両方で成り立てば，σ は ± 1 のどちらか一方には限定できない．

数値ベクトルの要素の昇順への並べ替えの際に用いる大小関係の比較には通常の浮動小数点数のものがそのまま使える．そうして 2 つのベクトルの一致判定は，数値誤差による影響を考慮して，2 つのベクトルの差のベクトルに対する最大値ノルム（成分の絶対値の最大値）が小さい正の閾値 ε_3 未満であるかどうかに基づいて行う（実験例ではこの閾値 ε_3 を 10^{-10} としている）．

4.3　行列には重複する固有値が無く，固有ベクトルの相対符号をすべて限定できた場合

行列 A と B の固有値はすべて単純であるとする．そのとき $\ell = 1, 2, \ldots, N$ について，Q_A と Q_B の第 ℓ 列の固有ベクトルの組である $\mathbf{x}^{(\ell)}$ と $\mathbf{y}^{(\ell)}$ の間の相対符号 σ_ℓ の限定を試みる．もしも相対符号を限定する手続きのなかで置換行列 P が存在しないことが導かれたならその段階で判定は終了する．あるいはもしも都合良くそれぞれの相対符号がどちらか片方だけに限定できたならば，Q_B の各 ℓ 列に対応する符号 σ_ℓ を乗じることで行列 $Q'_B \leftarrow Q_B\Sigma$ を作る．すると置換行列 P についての必要条件は $PQ_A = Q'_B$ になる．そこで，Q_A の第 i 行のベクトルと Q'_B の第 j 行のベクトルの差の最大値ノルムが，ある小さい正の閾値 ε_4 未満であれば $p_{i,j} = 1$ とし，そうでなければ $p_{i,j} = 0$ として行列 P を作成する（実験例ではこの閾値 ε_4 は 10^{-10} としている）．

作成した P の行または列に要素がすべての零のものがあれば，題意の置換行列は存在しないとして判定を終了するが，そうでなければ（行列の固有値がすべて単純であってしかも固有ベクトルの相対符号がすべて限定できた場合には行や列は要素に値 1 を複数含まないことが保証されるから）P は置換行列の形をしているから，あとは十分条件 $B = PAP^T$ の成否を調べる.（この比較の右辺 PAP^T の計算は添字の置換による操作でも行えるので，丸め誤差の影響を受けずに実行することが可能である）．

4.4　相対符号が限定できない固有ベクトルが存在する場合

固有ベクトルの相対符号を限定することができないのは，それが重複あるいは極端に接近している固有値に対応する固有ベクトルである場合か，あるいはそれが固有値が単純である固有ベクトルであっても特殊な性質を持つために相対符号を限定ができない場合か，のいずれかである．

Q_A と Q_B からそれぞれ相対符号が限定できる固有ベクトルの列だけを順番に集めて行列 $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}_B$ を作り，$\widetilde{Q}_B$ の各列に対応する相対符号を乗じて行列 $\widetilde{Q}'_B$ を作る．

すると置換行列 P に対する必要条件は $P\widetilde{Q}_A = \widetilde{Q}'_B$ になる．そこで，$\widetilde{Q}_A$ の第 i 行のベクトルと，$\widetilde{Q}'_B$ の第 j 行のベクトルの差の最大値ノルムが，小さい正の閾値 ε_4 未満であれば，とりあえず $p_{i,j} = 1$ とし，そうでなければ $p_{i,j} = 0$ とする（実験例ではこの閾値 ε_4 は 10^{-10} としている）．もしも P に要素がすべて零の行または列があれば，P は置換行列の形でないから題意を満たす P は存在しない．もしも P が置換行列の形をしていれば十分条件 $B = PAP^T$ を調べてそれが満たされていれば，題意を満たす置換行列はその P ただ 1 つである．ただし P の候補が複数になりうる場合には，現在の実験・実装では処理をそこで中止して，判定結果を失敗扱いにしている．

要素の値が零か 1 だけで対角要素がすべて零である N 次対称行列 A と B の例を図 1（$N = 100$，非対角要素の非零率 5%）に示す．この図では行列要素で値が零のものは白色，値が 1 のものは黒色で描いている．

図中の右側の行列 B は左側の行列 A からあるランダムな置換 π を用いて対称な添字の置換 $b_{i,j} = a_{\pi(i),\pi(j)}$ により作成したものである.

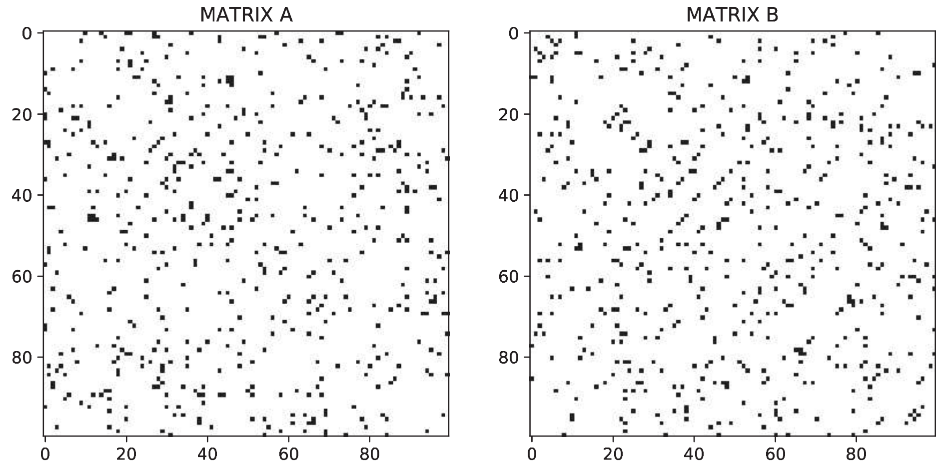

図 1: 0-1 対称行列 A と B の非零パターンの例（$N = 100$，非零率 5%）

実験例 1

実験例 1 では，与えられた 2 つの行列 A と B の固有値分布が一致しているとみなされた後に，行列の固有値に重複あるいは極端な近接が無いとみなされた場合に限って判定を行っている．そうでない場合には処理をそこで中止して判定を失敗の扱いにしている（後の実験例 2 では処理を中止していない）．そうして相対符号を限定できた固有ベクトルだけを用いて，置換行列 P の候補の構築を試みている．

得られた候補の P に対しては十分条件 $B = PAP^T$ を検証している．もしもその検証の前に P の行あるいは列の要素として複数の 1 が含まれている場合には，現在の実装ではそこで処理を中止して，判定結果を失敗の扱いにしている．

対称行列 A は対角要素はすべて零で，非対角要素の値は零と 1 のランダムな行列である．行列の次数 N をそれぞれ 20，40，80，160，320 とし，非対角要素の非零率をそれぞれ 2%，3%，4%，6%，8%，11%，16%，22%，32%として生成した．それから N 次のランダムな置換を生成して，それにより A から対称な添字の置換により行列 B を作成した．問題の要求はそのような 2 つの行列 A と B が与えられたときに，十分条件 $B = PAP^T$ を満たす置換行列 P が存在するかを判定し，存在すればそれを具体的に示すことである．

今の場合は与える A と B の構成からそのような置換 P は必ず（少なくとも 1 つ）存在するが，与えられた A と B の情報だけからそのような P を具体的に求めて示せるかを試した．そのような試行を各場合について 1000 回ずつ繰り返した場合の成功回数の例を表 1 に示す．

まず，行列 A と B それぞれの固有値が重複度を込めて許容誤差の範囲で一致するかを確認し，それから各行列が重複あるいは極端に近接する固有値を持たないかを調べている．実験例 1 では行列が重複あるい

表 1: N 次 0-1 行列の非対角の非零率と試行 1000 回中の成功回数（実験例 1）

非零率 (%)	$N = 20$	$N = 40$	$N = 80$	$N = 160$	$N = 320$
2	0	0	0	0	899
3	0	0	0	545	1000
4	0	0	15	970	1000
6	0	1	806	1000	1000
8	0	163	991	1000	1000
11	4	860	1000	1000	1000
16	366	995	1000	1000	1000
22	869	1000	1000	1000	1000
32	997	1000	1000	1000	1000

表 2: N 次 0-1 行列の非対角の非零率と試行 1000 回中の失敗回数（実験例 1）

非零率 (%)	$N = 20$	$N = 40$	$N = 80$	$N = 160$	$N = 320$
2	1000, 0	1000, 0	1000, 0	1000, 0	93, 8
3	1000, 0	1000, 0	1000, 0	411, 44	0, 0
4	1000, 0	1000, 0	975, 10	28, 2	0, 0
6	1000, 0	999, 0	135, 59	0, 0	0, 0
8	1000, 0	773, 64	3, 6	0, 0	0, 0
11	985, 11	94, 46	0, 0	0, 0	0, 0
16	535, 99	1, 4	0, 0	0, 0	0, 0
22	77, 54	0, 0	0, 0	0, 0	0, 0
32	2, 1	0, 0	0, 0	0, 0	0, 0

は極端に近接する固有値を持つと判断されたら，そこで処理を中止して判定を失敗の扱いにしている．非零率が小さいときには，行列の次数が小さいときには特に，要素がすべて零である行と列が複数生じて固有値に重複する零を持つ傾向が高い．元の行列 A と B それぞれから要素がすべて零である行と列を除去した行列を作れば，それら縮小された行列同士の間での添字の置換による一致可能性の判定に帰着できるので，そのようなやり方をとったならば処理を中止して失敗扱いになる割合がいくらか減らせたであろう．しかし今回の実験ではそのようなことはしていない．

表 2 の中の各場合の左側の数は 1000 回の試行のうちで，行列の固有値に重複あるいは極端な近接を検出したために処理をそこで中止して判定を失敗の扱いにした場合の回数であり，右側の数は行列は重複または極端に近接する固有値を持たなかったが，対応する固有ベクトルの間の相対符号に限定できないものがあり，置換行列 P の候補が複数となった場合に現在の実験ではそこで処理を中止して判定に失敗したと扱って数えている（候補が複数あっても十分条件を満たす解は 1 つになる場合もありえる）．

この実験例 1 では，表 2 中の左側の数字が零である場合，それはつまり行列の固有値に重複もしくは極端な近接が無い場合には，それに対応する表 1 中の成功回数はどれも 1000 になっており，試行 1000 回のすべてにおいて題意を満たす置換行列 P が得られていることになる．

対角要素が零である対称な 0-1 ランダム行列は，非零率が小さいと次数が小さい場合は特にそうであるが，要素すべてが零であるような行や列を複数持つ傾向が高くなるので，重複する固有値として零を持つ傾向が高い．あらかじめ行列からすべての要素が零である行や列を取り除いた問題に帰着させれば，そのような理由による重複固有値の数を減らせるが，今回の実験ではそのようなことは行っていない．

実験例 2

実験例 2 では実験例 1 の場合とは異なり，行列の固有値に重複あるいは極端な近接の存在が検出されても処理を中止にはしていない．そうして固有値が重複あるいは極端な近接をしていないと判断された固有ベクトルで相対符号を限定できたものだけを用いて必要条件を組み立てて，それから置換行列 P の候補を求める．各場合について試行を 1000 回ずつ行った場合の成功回数を表 3 に示す．なお現状ではこの実験例 2 についても，置換 P の候補が潜在的に複数になった場合には，処理をそこで中止して判定を失敗の扱いにしている．

表 1 と表 3 の数字を比較すると，行列の固有値に重複や重複に近い状況が検出されると処理を中止している実験例 1 の場合に比べて，実験例 2 では成功回数が少し増えていることが確認できる．

表 3: N 次 0-1 行列の非対角の非零率と試行 1000 回中の成功回数（実験例 2）

非零率 (%)	$N = 20$	$N = 40$	$N = 80$	$N = 160$	$N = 320$
2	0	0	0	0	899
3	0	0	0	556	1000
4	0	0	51	971	1000
6	0	8	810	1000	1000
8	0	331	991	1000	1000
11	31	881	1000	1000	1000
16	620	995	1000	1000	1000
22	923	1000	1000	1000	1000
32	999	1000	1000	1000	1000

4.5　単純固有値の固有ベクトルの相対符号を用いない弱い必要条件の使用について

現状では，固有値が単純な固有ベクトル同士の相対符号を固有ベクトルが特別な性質を持つ場合には限定することができていない．置換行列 P に対する必要条件を組み立てるのに際して，そのような相対符号を限定できない固有ベクトルが存在する場合に，その情報を使わないのはもったいないと思われる．そこで以下のことを考えた．いま $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ を同じ値の単純な固有値に対応する双方の行列の固有ベクトルとするとき，それらの相対符号を σ とすると題意を満たす置換行列 P に対しての必要条件は $P\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$ であるが，P が要素の置換であることから，この式から数値の符号の情報を捨てて作られる弱い必要条件 $P|\mathbf{x}| = |\mathbf{y}|$ が得られることがわかる．ここで $|\mathbf{x}|$ はベクトル $\mathbf{x}$ の各成分をその絶対値で置き換えたベクトルを表している．この形であれば相対符号が限定できない場合にも，制約としては弱いものになるが，P に対する必要条件が得られることになる．そこで Q_A と Q_B からそれぞれ列を順番に選別して $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ を作る際に，固有値が重複している固有ベクトルは取り入れないが，相対符号が限定できたものに対する列については従来どおりに $\widetilde{Q}_A$ の側には Q_A の列を $\widetilde{Q}'_B$ の側には Q_B の列に相対符号を乗じたものを入れる．しかし相対符号が限定できないものに対する列については $\widetilde{Q}_A$ の側には Q_A の列からその各要素を絶対値で置き換えたものを入れ，$\widetilde{Q}'_B$ の側にも Q_B の列からその各要素を絶対値で置き換えたものを入れる．このように構成された $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}'_B$ を用いた置換行列 P に対する必要条件 $P\widetilde{Q}_A = \widetilde{Q}'_B$ により P の候補を求めて，それから十分条件を調べることができる（ただし今回の実験では十分条件から決まる置換の候補の数が複数になる場合には処理を中止して判定を失敗としている）．そのように処理の内容を変更して，実験例 2 と同じテストを行って成功回数で測った成績の向上を期待した．しかし実際に行ってみると，成功回数は実験例 2 の表 3 の各場合についてなんと完全に同じになってしまった．

そこで，今度はさらに進んで，もしも相対符号をまったく用いずに必要条件を組み立てたならどのようなことになるかを調べることにした．行列 A と B それぞれの同じ値の単純な固有値に対応する固有ベクトル $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ について，置換行列 P に対して相対符号を用いない弱い必要条件である $P|\mathbf{x}| = |\mathbf{y}|$ を課すことにした．そこで Q_A と Q_B からそれぞれ列を順番に選別して行列 $\widetilde{Q}_A$ と $\widetilde{Q}_B$ を作る際に，固有値が重複している固有値に対応する列は取り入れず，固有値が単純な固有値に対応する列は $\widetilde{Q}_A$ の側には Q_A の列からその要素を絶対値で置き換えたものを入れ，$\widetilde{Q}_B$ の側にも Q_B の列からその要素を絶対値で置き換えたものを入れた．こうして構成された置換行列 P に対する必要条件 $P\widetilde{Q}_A = \widetilde{Q}_B$ から同様にして P の候補を求める．ただしこれも現状では十分条件から決まる置換の候補の数が複数になる場合には処理を中止して判定を失敗としている．実験を行う前は，必要条件が要求する制約が弱くなるから置換行列の候補の数が増えて複数になり，そのために現在の処理では中止する場合が増えるので，判定の「成功回数」が減るであろうと予想した．しかし実際に処理の内容をそのように変更して，実験例 2 と同じ行列の例題について試験を行ってみると，意外なことに成功回数は今度もまた実験例 2 の表 3 とすべての場合について完全に一致してしまった．間違ったプログラムの使用を疑ったがそうではなかった．ただしこれはあくまでも特定の次数 N と非零率を組合せた各場合について要素 1 をランダムに配置した行列で 1000 回実験を行った場合についてのことであり，このわずかな実験結果をもって弱めた必要条件を用いても結果が常に「まったく同じになる」ことを意味するわけではない．相対符号を用いることに意味が無いとは言えないはずである．また今後に複数の置換の候補をきちんと調べるように処理の内容を改良した場合には，弱い必要条件を用いると十分条件を満たさない候補が増えるといった可能性があるように思われる．現在の実験では候補が複数となった段階でただちに処理を中止して失敗の扱いにしてしまっているため，このあたりの事情が見えにくい．

5 おわりに

2 つの行列が対称な添字の置換により一致可能であると仮定すると，同じ値の単純な固有値に対する双方の行列の固有ベクトル同士について，固有ベクトルの向きの 2 通りの選択の任意性による向きのずれを表す「相対符号」をうまく選んで補正をすると，対応する双方の固有ベクトルは添字を置換した関係になる．今回の方法では，このことを用いて添字の置換に対する必要条件を構成し，その必要条件から添字の置換の候補を求め，得られた候補が問題の十分条件を満せるかを調べるという方針である．

現在用いている方法では，同じ値の単純な固有値に対する固有ベクトル同士の間の相対符号の値は，通常は ± 1 のどちらかに限定できるが，固有ベクトルがある性質を満たしている場合には限定することができない．ただしそのような特殊な性質を満たす固有ベクトルは全体の中では少数と思われる．

もしも行列の固有値がすべて単純で，さらに双方の行列の固有ベクトル同士の間の相対符号をすべて限定できるならば，それから得られる必要条件から置換行列の候補は高々1 つとなり，その後はその候補が十分条件を満たすことを確認できれば題意を満たす置換行列が得られる．

限定できない相対符号が全部で k 個あるとき，それら k 個の符号を仮定して必要条件を作れば，行列の固有値がすべて単純である場合にはそれを満たせる P の候補は高々1 つになる．(行列の固有値に重複するものがあれば一般には複数になる）そこで k 個の符号の組み合せである総数 2^k 通りのそれぞれの場合について置換行列 P の候補を求めて十分条件 $B = PAP^T$ の成否を調べるという方法が，k がごく少数である場合には実施可能である．しかし今回の実験ではそのような方法は採用していない．

現在のやり方では，重複または極端に近接している固有値に対応する固有ベクトルは用いていない．双方の行列で固有値が重複している固有ベクトルの組同士についての選び方の任意性からくるずれは，符号の一般化である直交変換であるが，それをうまく決めて補正する方法については，今後の検討すべき課題である．

固有ベクトルのうちで固有値が単純でかつ相対符号が限定できたものだけを用いて構成した必要条件から置換の候補を求めると，候補が存在しない場合や唯一になる場合もあるが，一般には候補が複数になる．現在は置換の候補が複数になる場合には，処理をそこで中止して判定は失敗の扱いにしている．双方の行列が「自分を自分自身に一致させる置換」として恒等以外のものを持つ場合には，双方の行列を一致させる置換は複数存在するので，置換の候補が複数になる場合に処理をそこで中止して失敗扱いにする現在のやり方では，そのような場合には解が得られない．

要素が 0-1 以外の行列に対する応用　行列の添字の置換による一致可能性の判定の応用例として，以下のものが考えられる．いまある分子が N 個の原子から構成されていて，各原子に 1 から N までの番号を付して，i 番目の原子の「元素番号」（水素は 1，炭素は 6，酸素は 8 など）が整数 d_i であり，i 番目の原子と j 番目の原子の間の結合の次数（1 重結合，2 重結合，3 重結合など，結合がなければ 0）が整数 $v_{i,j}$ であるである場合に，N 次の対称行列 A をその対角要素を $a_{i,i} = d_i$ とし，非対角要素を $a_{i,j} = -v_{i,j}$ とすれば，この分子を構成する元素の結合状況を原子に与えた特定の番号付けに基づいて表現したことになる．このとき同じ分子とその元素の結合状況を，原子への番号を付け替えて表した行列 B は番号付けの変更を表す N 次の置換 π を用いて $b_{i,j} = a_{\pi(i),\pi(j)}$ となる．そこで行列 A と B を与えたときに，行列 A が表している分子と行列 B が表している分子が原子の番号付けだけが異なるが同じものを表している関係にあるかどうかの判定を両者を一致させる置換の存在と構成を用いて行うことが考えられる．

今後の課題　今後の課題として，置換の候補に対する必要条件を組み立てる際に固有値が重複している固有ベクトルも利用できるように方法を改良することが望ましいことがあげられる．また置換行列に対する必要条件を求めた後に，置換の候補が複数となった場合にそこで処理を中止せずに，組合せの数がある程度少なければそれらについても十分条件を検査して題意を満たす解があれば少なくともその 1 つを出せるようにもしたい．

同じ形状をした一般行列 A と B が与えられたときに，行と列の添字それぞれ独立の置換により，A と B を一致させられるかという問題も同様に考えることができる．