Asir でのマルコフ基底計算とマルコフ基底によるパズルの解の列挙

中山 洋将 (**神戸大学**・JST CREST)

Risa/Asir Conference 2012
2011 **年** 3 **月** 22 **日** (11:00 – 11:30)

はじめに

代数統計に出てくる概念で，マルコフ基底というものがある．これを使うと，連立 1 次方程式の非負整数解を列挙することができる (整数計画問題の実行可能解の列挙). 代数統計ではこの非負整数解たちをある分布に従ってサンプリングするのに, マルコフ基底が使われる (マルコフ基底を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法).
パズル (魔方陣，ラテン方陣，数独など) を連立 1 次方程式の非負整数解を求める問題に定式化することができる．
ここでは，パズルの解をマルコフ基底を使い列挙することを考える.

Outline

1. マルコフ基底の復習
2. Asir でのマルコフ基底の計算 (`nk_4ti2` の紹介)
3. パズルの定式化
4. 計算結果

Definition (配置行列)

A を $d \times n$ 整数行列とする．A が配置行列とは，A の各列ベクトル $\mathbf{a}_i$ が原点を通らないある超平面にのっている時にいう.
すなわち,

$$\exists \mathbf{c} \in \mathbb{Q}^n \text{ s.t. } \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}_i = 1$$

Example (配置行列)

例えば,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

は配置行列. (各列ベクトルが, 原点を通らない超平面 $x_1 = 1$ にのっている.)

Example (配置行列)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

は配置行列. (各列ベクトルが, 原点を通らない超平面 $x_1 + x_2 + \cdots + x_5 = 2$ にのっている.)

ファイバー, move, 相互到達可能

Definition (t ファイバー)

配置行列 A とベクトル $\mathbf{t} \in \mathbb{Z}^d$ が与えられているとする．A の $\mathbf{t}$ ファイバーとは,

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}} = \{\mathbf{x} \in (\mathbb{Z}_{\geq 0})^n \mid A\mathbf{x} = \mathbf{t}\}$$

なるものである. すなわち, 連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{t}$ の非負整数解全体のことである．

Definition (move)

配置行列 A の move とは,

$$\mathcal{M}(A) = \mathrm{Ker}_{\mathbb{Z}} A = \{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^n \mid A\mathbf{x} = \mathbf{0}\}$$

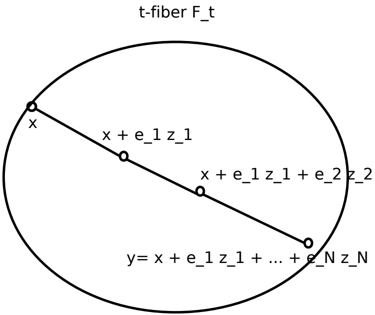
のことである．

Definition (相互到達可能)

move の集合を $B \subset \mathcal{M}(A)$ とする. t ファイバーの相異なる元 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ について, B により相互到達可能とは次の条件を満たすときにいう.

- $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \sum_{j=1}^{N} \epsilon_j \mathbf{z}_j \quad (\epsilon_j \in \{1, -1\}, \mathbf{z}_j \in B)$
- $\mathbf{x} + \sum_{j=1}^{l} \epsilon_j \mathbf{z}_j \in \mathcal{F}_{\mathbf{t}} \quad (l = 1, \cdots, N)$

要するに, $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ は B の元を足し引きして, $\mathcal{F}_{\mathbf{t}}$ 中で移り合う.



マルコフ基底

Definition (マルコフ基底)

move の集合 $B \subset \mathcal{M}(A)$ が A のマルコフ基底であるとは，任意の $\mathbf{t} \in \mathbb{Z}^d$ について，$\mathbf{t}$ ファイバーの任意の 2 つの元が B により相互到達可能である時にいう．
だから，$\mathbf{t}$ ファイバーの 1 つの元とマルコフ基底があれば，$\mathbf{t}$ ファイバーの元を全列挙できる.

2×3 分割表の配置行列, マルコフ基底

2×3 分割表を考える.

x_{11}	x_{12}	x_{13}	$t_{1\cdot}$
x_{21}	x_{22}	x_{23}	$t_{2\cdot}$
$t_{\cdot 1}$	$t_{\cdot 2}$	$t_{\cdot 3}$	

配置行列, 表の各成分のベクトル, 行和, 列和のベクトルを

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ x_{13} \\ x_{21} \\ x_{22} \\ x_{23} \end{pmatrix} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ \hline x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ \hline \end{array}, \quad \mathbf{t} = \begin{pmatrix} t_{1\cdot} \\ t_{2\cdot} \\ t_{\cdot 1} \\ t_{\cdot 2} \\ t_{\cdot 3} \end{pmatrix}$$

とおく. $\mathbf{t}$ ファイバー

$$\mathcal{F}_{\mathbf{t}} = \{\mathbf{x} \in (\mathbb{Z}_{\geq 0})^6 \mid A\mathbf{x} = \mathbf{t}\}$$

は, 行和, 列和が $\mathbf{t}$ である 2×3 分割表全体になる.

A のマルコフ基底は

$$z_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & -1 & 0 \\ \hline -1 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}, \quad z_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 0 & -1 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}, \quad z_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 0 & 1 & -1 \\ \hline 0 & -1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

となる. (実は一般の 2 元分割表についてマルコフ基底は知られている.)

$t = (3, 3, 2, 2, 2)^T$ として, t ファイバーを考える. (すなわち, 行和 3, 3, 列和 2, 2, 2 なる 2×3 分割表全体)

$B = \{z_1, z_2, z_3\}$ とおき, x, y を下のようにおく. x, y は相互到達可能.

$$\begin{array}{ccccccc} x & & x - z\_1 & & x - z\_1 - z\_1 & & \\ \boxed{\begin{matrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \end{matrix}} & \text{---} & \boxed{\begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{matrix}} & \text{---} & \boxed{\begin{matrix} 0 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \end{matrix}} & \text{---} & \boxed{\begin{matrix} 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \end{matrix}} \end{array}$$

y = x - z_1 - z_1 - z_3

アルゴリズム (マルコフ基底による t ファイバー $\mathcal{F}_t$ の元の列挙)

入力: マルコフ基底 $\mathcal{B}$, $\mathbf{x}^o \in \mathcal{F}_t$
出力: ファイバー $\mathcal{F}_t$ のすべての元

1. *Active* $\leftarrow \{\mathbf{x}^o\}$, *Fiber* $\leftarrow \{\mathbf{x}^o\}$
2. *Active* $\neq \phi$ **である限り以下を続ける**.
   - 2.1. $\mathbf{u} \leftarrow$ (*Active* **の元いづれか**), *Active* $\leftarrow$ *Active* $\setminus\{\mathbf{u}\}$
   - 2.2. $\mathcal{B}$ **の各元** $\mathbf{v} = \mathbf{v}^+ - \mathbf{v}^-$ **について**,
     - 2.2.1 $\mathbf{u} - \mathbf{v}^+ \geq 0$ **かつ** $\mathbf{u} - \mathbf{v} \notin$ *Fiber* **ならば**,
       Active $\leftarrow$ *Active* $\cup\{\mathbf{u} - \mathbf{v}\}$, *Fiber* $\leftarrow$ *Fiber* $\cup\{\mathbf{u} - \mathbf{v}\}$
     - 2.2.2 $\mathbf{u} - \mathbf{v}^- \geq 0$ **かつ** $\mathbf{u} + \mathbf{v} \notin$ *Fiber* **ならば**,
       Active $\leftarrow$ *Active* $\cup\{\mathbf{u} + \mathbf{v}\}$, *Fiber* $\leftarrow$ *Fiber* $\cup\{\mathbf{u} + \mathbf{v}\}$
3. *Fiber* **を出力**.

2×3 分割表の全列挙

行和が $2, 2$, 列和が $1, 1, 2$ なる 2×3 分割表

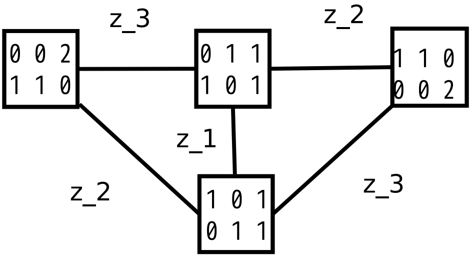
x_{11}	x_{12}	x_{13}	2
x_{21}	x_{22}	x_{23}	2
1	1	2	

を全列挙する. すなわち, 配置行列と行和, 列和のベクトルを

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{t} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

とおき, t ファイバー $\mathcal{F}_{\mathrm{t}}$ の元を全列挙する.

ファイバーの列挙



$$z_1 = \boxed{\begin{matrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{matrix}} \qquad z_2 = \boxed{\begin{matrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{matrix}}$$

$$z_3 = \boxed{\begin{matrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{matrix}}$$

トーリックイデアルとマルコフ基底

Definition (トーリックイデアル)

配置行列 A に対して, トーリックイデアル I_A とは,

$$I_A = \langle \mathbf{x}^{\mathbf{a}^+} - \mathbf{x}^{\mathbf{a}^-} \mid \mathbf{a} \in \mathrm{Ker} A \cap \mathbb{Z}^n \rangle$$

である. ここで, ベクトル $\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^-$ とはそれぞれ, ベクトル $\mathbf{a}$ の正成分だけをとりだしたもの, 負成分だけをとりだし -1 倍したものである. 例えば, $\mathbf{a} = (-1, 1, -1, 0, -1, 1)$ ならば,
$\mathbf{a}^+ = (0, 1, 0, 0, 0, 1), \mathbf{a}^- = (1, 0, 1, 0, 1, 0)$ である.

Theorem (トーリックイデアルの生成系とマルコフ基底)

次の 2 つは同値.

- $B = \{\mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_L\} \subset \mathcal{M}(A)$ が A のマルコフ基底である
- $\{\mathbf{x}^{\mathbf{z}_i^+} - \mathbf{x}^{\mathbf{z}_i^-} \mid i = 1, \cdots, L\}$ がトーリックイデアル I_A の生成系である

Theorem (トーリックイデアルの計算法)

A を非負成分のみからなる配置行列とする. (負成分を含む配置行列であっても, 非負成分のみからなる配置行列に直して, トーリックイデアルの生成系を計算可能) $t_1, \dots, t_d$ なる変数を導入. 多項式環 $\mathbb{Q}[\mathbf{x}, \mathbf{t}]$ のイデアル

$$J_A = \langle x_1 - \mathbf{t}^{\mathbf{a}_1}, \dots, x_n - \mathbf{t}^{\mathbf{a}_n} \rangle$$

を考え,

$$J_A \cap \mathbb{Q}[\mathbf{x}]$$

がトーリックイデアル I_A の生成系になる.

4ti2

- **作者は**, R. Hemmecke, M. Köppe, P. Malkin, M. Walter
- **トーリックイデアルの各種基底** (**グレブナー基底**, Graver **基底**, Markov **基底**, circuit, Hilbert **基底**...) **の計算**.
- **整数計画問題を解く**.
- Macaulay2, Singular **から呼び出すプログラムがある**.

Example (4ti2 によるトーリックイデアルの計算)

4ti2 のコマンド groebner により配置行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ の トーリックイデアル I_A のグレブナー基底を返す.

4ti2 の入力ファイル ex1.mat

```
2 3
1 1 1 1
0 1 2 3
```

4ti2 コマンド groebner の実行

```
$ groebner ex1.mat
```

4ti2 の出力ファイル ex1.mat.gro

```
3 4
-1 1 1 -1
-1 2 -1 0
0 -1 2 -1
```

Example (nk_4ti2.rr によるトーリックイデアルの計算)

4ti2 を Asir から呼び出すプログラム nk_4ti2.rr を作った. これは次のようにして計算を行う.

nk_4ti2.rr によるトーリックイデアルの計算

```
[1631] load("nk_4ti2.rr");
[1738] A=[[1,1,1,1],[0,1,2,3]];
[[1,1,1,1],[0,1,2,3]]
[1739] nk_4ti2.groebner(A); ...
[[-1,1,1,-1],[-1,2,-1,0],[0,-1,2,-1]]
[1740] L=@@;
[[-1,1,1,-1],[-1,2,-1,0],[0,-1,2,-1]]
[1741] map(nk_4ti2.v_to_binom, L, [x1,x2,x3,x4]);
[-x1*x4+x2*x3,-x1*x3+x2^2,-x2*x4+x3^2]
```

関数 nk_4ti2.groebner(A) で配置行列 A のトーリックイデアル I_A のグレブナー基底を返す. (ただしこれは 2 項式のベクトル表示) ベクトル表示を 2 項式に戻すには, 関数 nk_4ti2.v_to_binom(Vector, VarList) を用いる.

$3 \times 3 \times 3$ 分割表に付随するトーリックイデアルの計算

27×27 配置行列 A のトーリックイデアルの生成系 (A のマルコフ基底) を計算. (4ti2 だとすぐ計算できるが, 普通にグレブナー基底による消去法を使うと数時間かかる)

```
1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1
1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1
1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1
```

$J_A =$
$\langle x_1 - t_{19}t_{10}t_1, x_2 - t_{20}t_{11}t_1, x_3 - t_{21}t_{12}t_1, x_4 - t_{22}t_{10}t_2, x_5 - t_{23}t_{11}t_2,$
$x_6 - t_{24}t_{12}t_2, x_7 - t_{25}t_{10}t_3, x_8 - t_{26}t_{11}t_3, x_9 - t_{27}t_{12}t_3, x_{10} - t_{19}t_{13}t_4,$
$x_{11} - t_{20}t_{14}t_4, x_{12} - t_{21}t_{15}t_4, x_{13} - t_{22}t_{13}t_5, x_{14} - t_{23}t_{14}t_5, x_{15} - t_{24}t_{15}t_5,$
$x_{16} - t_{25}t_{13}t_6, x_{17} - t_{26}t_{14}t_6, x_{18} - t_{27}t_{15}t_6, x_{19} - t_{19}t_{16}t_7, x_{20} - t_{20}t_{17}t_7,$
$x_{21} - t_{21}t_{18}t_7, x_{22} - t_{22}t_{16}t_8, x_{23} - t_{23}t_{17}t_8, x_{24} - t_{24}t_{18}t_8, x_{25} - t_{25}t_{16}t_9,$
$x_{26} - t_{26}t_{17}t_9, x_{27} - t_{27}t_{18}t_9\rangle$
$I_A = J_A \cap \mathbb{Q}[\mathrm{x}]$ を計算すればよい.

パズルの定式化

ここで扱うパズルは, 魔方陣, ラテン方陣, 数独である. パズルを連立 1 次方程式の非負整数解を求める問題に定式化する. 定式化は次の文書に従った.

参考文献

岡本吉央「整数計画法によるパズル解法」

そこでは,

$$\text{パズル} \xrightarrow[\text{定式化}]{} \text{整数計画問題} \xrightarrow[\text{glpk}]{} \text{パズルの解}$$

ここでは, マルコフ基底を使い, 整数計画問題の実行可能解を求めることを考える.

$$\text{パズル} \xrightarrow[\text{定式化}]{} \text{整数計画問題} \xrightarrow[\text{マルコフ基底, ファイバー列挙}]{} \text{パズルの解}$$

半魔方陣

Example (3×3 半魔方陣)

半魔方陣とは,

- 行和, 列和, 対角和がすべて同じ.
- 各マスには非負整数が入る.

なる条件をみたすもの.

2	0	1
0	1	2
1	2	0

半魔方陣の定式化

半魔方陣を次のように定式化する. 各マスに入る非負整数を表す変数

$$x_{ij} \quad (1 \le i, j \le 3)$$

を用意する. たとえば, 行和, 列和, 対角和が 3 の半魔方陣の場合を考える. 行和, 列和, 対角和がすべて 3 である条件を x_{ij} を使って書けば 8 個の式が得られる.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ x_{13} \\ x_{21} \\ x_{22} \\ x_{23} \\ x_{31} \\ x_{32} \\ x_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

上の 8×9 行列を A とする. 右辺のベクトル $(3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3)^T$ を t とする. t ファイバーが半魔方陣全体となる.

半魔方陣に付随するマルコフ基底

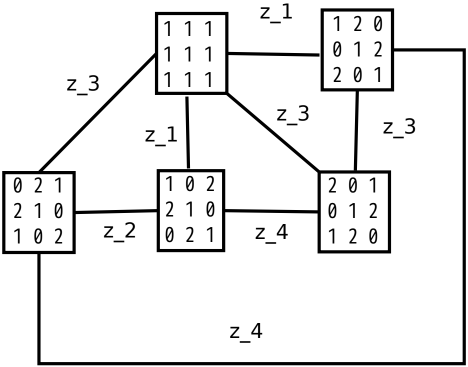
A のマルコフ基底は,

$$\mathbf{z}_1 = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 0 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline 1 & -1 & 0 \\ \hline \end{array}, \mathbf{z}_2 = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & -2 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 2 & -1 \\ \hline \end{array}, \mathbf{z}_3 = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & -1 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 & -1 \\ \hline \end{array}, \mathbf{z}_4 = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 0 & -1 \\ \hline -2 & 0 & 2 \\ \hline 1 & 0 & -1 \\ \hline \end{array}$$

となる.
このマルコフ基底を使い, $\mathbf{t}$ ファイバーの元を列挙すれば, 5 つの元が得られる.

- どこまでのサイズについて, マルコフ基底が求められるか.
- 一般のサイズについて, マルコフ基底はどうなるか.

ファイバーの列挙



$$z\_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad z\_3 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$z\_2 = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \qquad z\_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

魔方陣

Example (3×3 魔方陣)

魔方陣とは,

- 行和, 列和, 対角和がすべて同じ.
- 1 から方陣のマスの総数までの数を 1 回ずつ使う.

なる条件をみたすもの.

8	1	6
3	5	7
4	9	2

魔方陣の定式化

魔方陣を次のように定式化する．次のような変数 (81 個の変数) を用意する.

$$x_{ijk} = \begin{cases} 1 & (\text{マス } (i,j) \text{ に数 } k \text{ が入る}) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \qquad (1 \le i,j \le 3, \quad 1 \le k \le 9)$$

この変数を使い, 魔方陣の条件を定式化していく.

- 各マス (i, j) には 1 つしか数が入らない. (9 個の式)

$$\sum_{k=1}^{9} x_{ijk} = 1 \quad (1 \leq i, j \leq 3)$$

- 各数 k は 1 つのマスにしか入らない. (9 個の式)

$$\sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} x_{ijk} = 1 \quad (1 \leq k \leq 9)$$

- i 行和が 15. (3 個の式)

$$\sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{9} k x_{ijk} = 15 \quad (1 \leq i \leq 3)$$

- j 列和が 15. (3 個の式)

$$\sum_{i=1}^{3} \sum_{k=1}^{9} k x_{ijk} = 15 \quad (1 \leq j \leq 3)$$

- 対角和が 15. (2 個の式)

$$\sum_{i=1}^{3} \sum_{k=1}^{9} k x_{iik} = 15, \quad \sum_{i=1}^{3} \sum_{k=1}^{9} k x_{i4-ik} = 15$$

魔方陣のマルコフ基底

この連立 1 次方程式を行列 $A\mathbf{x} = \mathbf{t}$ の形に書き直す.
行列 A は次のような 26×81 行列.
この行列 A に対してマルコフ基底の計算は困難.

- 3×3 魔方陣のマルコフ基底はどうなるか.
- 一般のサイズについて, マルコフ基底はどうなるか.

ラテン方陣

Example (3×3 ラテン方陣)

ラテン方陣とは,

- 各行, 各列に重複なく数が入る.
- 各行, 各列には $1, \cdots, N$ (N は行サイズ) の数が入る.

なる条件をみたすもの.

1	2	3
2	3	1
3	1	2

ラテン方陣の定式化

ラテン方陣を次のように定式化する．次のような変数 (27 個の変数) を用意し, 式をたてる.

$$x_{ijk} = \begin{cases} 1 & (\text{マス } (i, j) \text{ に数 } k \text{ が入る}) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \qquad (1 \leq i, j, k \leq 3)$$

- 各マス (i, j) には 1 つしか数が入らない. (9 個の式)

$$\sum_{k=1}^{3} x_{ijk} = 1 \quad (1 \leq i, j \leq 3)$$

- 各行 i には各数 k がただ 1 つしか入らない. (9 個の式)

$$\sum_{j=1}^{3} x_{ijk} = 1 \quad (1 \leq i, k \leq 3)$$

- 各列 j には各数 k がただ 1 つしか入らない. (9 個の式)

$$\sum_{i=1}^{3} x_{ijk} = 1 \quad (1 \leq j, k \leq 3)$$

ラテン方陣のマルコフ基底

この連立 1 次方程式を行列 $A\mathrm{x} = \mathrm{t}$ の形に書き直す. 行列 A は次のような 27×27 行列. マルコフ基底を計算すると次の 81 個の元が得られる. t ファイバーの元を列挙すれば, 12 個のラテン方陣が得られる.

- $N \times N$ ラテン方陣の配置行列 A は, 3 元分割表 $N \times N \times N$ の無 3 因子交互作用モデルの配置行列と同じもの.
- どこまでのサイズについて, マルコフ基底が求められるか. (4ti2 で計算すると 4 まで)
- 一般のサイズについて, マルコフ基底はどうなるか. (実は一般のサイズについてマルコフ基底が知られている → ラテン方陣のランダムサンプリングに使われる
  M. T. Jacobson, P. Matthews : Generating Uniformly Distributed Random Latin Square, (1996))

数独

Example (4×4 数独)

4×4 数独とは,

- 各行, 各列に重複なく数が入る.
- 各行, 各列には $1, \cdots, 4$ の数が入る.
- 各ブロック (2×2) に $1, \cdots 4$ の数が入る.

なる条件をみたすもの.

1	2	3	4
3	4	1	2
4	3	2	1
2	1	4	3

数独の定式化

数独を次のように定式化する．次のような変数 (64 個の変数) を用意する.

$$x_{ijk} = \begin{cases} 1 & (\text{マス } (i,j) \text{ に数 } k \text{ が入る}) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \qquad (1 \leq i,j,k \leq 4)$$

この変数を使い, 数独の条件を定式化していく.

- 各マス (i,j) には 1 つしか数が入らない. (16 個の式)

$$\sum_{k=1}^{4} x_{ijk} = 1 \quad (1 \le i,j \le 4)$$

- 各行 i には各数 k がただ 1 つしか入らない. (16 個の式)

$$\sum_{j=1}^{4} x_{ijk} = 1 \quad (1 \le i,k \le 4)$$

- 各列 j には各数 k がただ 1 つしか入らない. (16 個の式)

$$\sum_{i=1}^{4} x_{ijk} = 1 \quad (1 \le j,k \le 4)$$

- 各ブロックに重複なく $1,\cdots,4$ の数が入る. (16 個の式)

$$x_{11k}+x_{12k}+x_{21k}+x_{22k}=1, x_{13k}+x_{14k}+x_{23k}+x_{24k}=1,$$
$$x_{31k}+x_{32k}+x_{41k}+x_{42k}=1, x_{33k}+x_{34k}+x_{43k}+x_{44k}=1$$
$$(1 \le k \le 4)$$

数独のマルコフ基底

この連立 1 次方程式を行列 $A\mathbf{x} = \mathbf{t}$ の形に書き直す. 行列 A は次のような 64×64 行列. マルコフ基底を計算すると次の 34920 個の元が得られる (2 時間程度かかる). $\mathbf{t}$ ファイバーを列挙すれば, 288 個の元が得られる.

- Fontana の結果.
- どこまでのサイズについて, マルコフ基底が求められるか. (4ti2 だと 2×2 まで)
  3×3 だと 324×729 なる配置行列のマルコフ基底を計算する必要が出てくる.
- 一般のサイズについて, マルコフ基底はどうなるか.

まとめ

- Asir から 4ti2 を呼び出すプログラム nk_4ti2.rr
- マルコフ基底の応用例としてパズルの解の列挙
- 他のパズル (ピクロス, カックロ, ...) の解をマルコフ基底で計算.
- 一般サイズの半魔方陣, 数独のマルコフ基底はどうなるか.

参考

- マルコフ基底と実験計画法プログラム
  http://www.math.kobe-u.ac.jp/~nakayama/gb_school_stat/
- 岡本吉央, 整数計画法によるパズル解法,
  http://www.is.titech.ac.jp/~okamoto/PDF/2007/puzzleip.pdf
- R. Fontana, F. Rapallo, M. P. Rogantin : Markov bases for sudoku grids, preprint