包除原理とモジュラ関数

基礎数理　室田

1　包除原理 (基本形)

有限集合 S の部分集合 A_1,A_2, $\cdots$, A_k が与えられたとき，その要素数に関して

$$|A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_k| = \sum_i |A_i| - \sum_{i<j} |A_i \cap A_j| + \cdots + (-1)^{k-1} |A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_k| \quad (1)$$

が成り立つ．例えば，$k = 3$ の場合にこの式を書くと，

$$\begin{aligned} |A_1 \cup A_2 \cup A_3| &= (|A_1| + |A_2| + |A_3|) - (|A_1 \cap A_2| + |A_1 \cap A_2| + |A_2 \cap A_3|) \\ &\quad + |A_1 \cap A_2 \cap A_3| \end{aligned} \quad (2)$$

である．部分集合 A_i の S に関する補集合を $\overline{A_i}$ と表すと

$$|A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_k| = |S| - |\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \cdots \cap \overline{A_k}|$$

であるから，上の公式から

$$|\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \cdots \cap \overline{A_k}| = |S| - \sum_i |A_i| + \sum_{i<j} |A_i \cap A_j| - \cdots + (-1)^k |A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_k| \quad (3)$$

も得られる．これらの公式を**包除公式** (inclusion-exclusion formula) といい，これに基づいた数え上げの方法を**包除原理** (principle of inclusion and exclusion, inclusion-exclusion principle) と呼ぶ.

包除原理は与えられた条件を満たす集合の要素数や確率を計算するのに利用される．部分集合 A_i が性質 P_i を満たす要素の集合を表しているとすると，第 1 の公式 (1) の左辺は P_1, P_2, $\cdots$, P_k の少なくとも一つの性質をもつ要素の個数であり，第 2 の公式 (3) の左辺は P_1, P_2, $\cdots$, P_k のどの性質ももっていない要素の個数を表している.

2　集合関数

定義（集合関数）　集合 S の部分集合に実数を対応させる関数 $f : 2^S \to \mathbf{R}$ を（S 上の）**集合関数** (set function) という.

定義（加法的関数）　$A \cap B = \emptyset$ である任意の A, B $(\subseteq S)$ に対して

$$f(A) + f(B) = f(A \cup B) \quad (4)$$

が成り立つとき，f を**加法的関数** (additive function) という.

関数 f が加法的ならば，$f(\emptyset) = 0$ である（証明：式 (4) で $A = B = \emptyset$ とすると，$2f(\emptyset) = f(\emptyset)$ となるので，$f(\emptyset) = 0$）.

例1：$S = \{1,2,\ldots,n\}$ の各要素の重みを表す実数 $w_1,\ldots,w_n$ が与えられているとする．S の部分集合 A に対して，$f(A) = \sum_{i \in A} w_i$ と定義される集合関数 f は加法的である．ただし，空集合上の和 ($A = \emptyset$ のときの $\sum_{i \in A}$) は 0 と約束する．

定義（モジュラ関数）　任意の $A, B\ (\subseteq S)$ に対して

$$f(A) + f(B) = f(A \cup B) + f(A \cap B) \tag{5}$$

が成り立つとき，f を**モジュラ関数** (modular function) という．また，式 (5) を**モジュラ等式** (modular equality) という．

定義（劣モジュラ関数）　任意の $A, B\ (\subseteq S)$ に対して

$$f(A) + f(B) \geq f(A \cup B) + f(A \cap B) \tag{6}$$

が成り立つとき，f を**劣モジュラ関数** (submodular function) という．また，式 (6) を**劣モジュラ不等式** (submodular inequality) という．

例2：$S = \{1,2,\ldots,n\}$ の各要素の重みを表す実数 $w_1,\ldots,w_n$ が与えられたとする．S の部分集合 A に対して，$f(A) = \max_{i \in A} w_i$ と定義される集合関数 f は劣モジュラである．

例3：ベクトル $\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{a}_n$ が与えられたとき，その部分集合の張る部分空間の次元を考える．$S = \{1,2,\ldots,n\}$ とおくとき，

$$f(A) = \dim \mathrm{span}\{\boldsymbol{a}_j \mid j \in A\} \qquad (A \subseteq S)$$

で定義される関数 $f : 2^S \to \mathbf{R}$ は劣モジュラである．

3　加法的関数とモジュラ関数

定理 1 加法的関数とモジュラ関数の間には次の関係がある:

$$f \text{ が加法的} \iff f \text{ がモジュラ，かつ，} f(\emptyset) = 0. \tag{7}$$

（証明）[$\Leftarrow$]　モジュラ等式 (5) で $A \cap B = \emptyset$ の場合を考えると，$f(A \cap B) = f(\emptyset) = 0$ より式 (4) が導かれる．

[$\Rightarrow$]　f が加法的とする．$f(\emptyset) = 0$ は既に示した（定義の直後）．モジュラ等式 (5) は，以下のように導かれる．

$$A = (A \setminus B) \cup (A \cap B), \quad B = (B \setminus A) \cup (A \cap B)$$

と考えると，式 (4) より

$$f(A) = f(A \setminus B) + f(A \cap B), \quad f(B) = f(B \setminus A) + f(A \cap B)$$

となるので，

$$\begin{aligned} f(A) + f(B) &= [f(A \setminus B) + f(A \cap B)] + [f(B \setminus A) + f(A \cap B)] \\ &= [f(A \setminus B) + f(A \cap B) + f(B \setminus A)] + f(A \cap B) \\ &= f(A \cup B) + f(A \cap B). \end{aligned}$$

なお，最後の等式では，式 (4) を 2 回使って得られる式

$$f(A \setminus B) + f(A \cap B) + f(B \setminus A) = f(A \cup B)$$

を使っている． ■

定理 2 任意のモジュラ関数 $f : 2^S \to \mathbf{R}$ は，ある実数 w_0, w_i $(i \in S)$ を用いて

$$f(A) = w_0 + \sum_{i \in A} w_i \qquad (\forall A \subseteq S) \tag{8}$$

と表現できる．（★重み w が A に依存していないことがポイント）

（証明） $w_0 = f(\emptyset), w_i = f(\{i\}) - w_0$ $(i \in S)$ と定義する．このとき，式 (8) が $|A| \leq 1$ を満たす任意の A に対して成り立つ．

式 (8) を $|A|$ に関する帰納法で証明しよう．$|A| \geq 2$ のとき，A の要素を任意に一つ選んで j とする．$A' = A \setminus \{j\}, B' = \{j\}$ とおくと，$f(A' \cap B') = f(\emptyset) = w_0$ であり，帰納法の仮定により

$$f(A') = w_0 + \sum_{i \in A'} w_i, \quad f(B') = w_0 + w_j$$

が成り立つ．モジュラ等式 (5) を使って計算すると

$$\begin{aligned} f(A) &= f(A' \cup B') = f(A') + f(B') - f(A' \cap B') \\ &= [w_0 + \sum_{i \in A'} w_i] + [w_0 + w_j] - w_0 = w_0 + \sum_{i \in A} w_i \end{aligned}$$

となる． ■

4 包除原理 (モジュラ関数に対する一般形)

包除原理は，モジュラ関数 f に対して拡張される．

定理 3 モジュラ関数 f に対して

$$f(A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_k) = \sum_i f(A_i) - \sum_{i<j} f(A_i \cap A_j) + \cdots + (-1)^{k-1} f(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_k) \tag{9}$$

が成り立つ．

●加法的関数はモジュラ関数だから，加法的関数に対しても包除原理が成り立つ．
●式 (9) で $k = 2$ の場合がモジュラ等式 (5) である．
●式 (9) で $k = 3$ の場合を書くと，

$$\begin{aligned} f(A_1 \cup A_2 \cup A_3) &= [f(A_1) + f(A_2) + f(A_3)] - [f(A_1 \cap A_2) + f(A_1 \cap A_2) + f(A_2 \cap A_3)] \\ &\quad + f(A_1 \cap A_2 \cap A_3). \end{aligned} \tag{10}$$

定理 3 の証明[1]：定理 2 の表現式 (8) を用いる．

まず，式 (9) の両辺で w_0 が何回カウントされるかを考える．左辺では 1 回である．右辺での回数は $\sum_{j=1}^{k}(-1)^{j-1}\binom{k}{j}$ であるが，この値は 1 に等しい（証明：恒等式 $(1+x)^k = \sum_{j=0}^{k} x^j \binom{k}{j}$ で $x=-1$ とおく）．

次に，$i \in S$ として，w_i が何回カウントされるかを考える．i が $A_1, A_2, \ldots, A_k$ のうちの丁度 m 個に含まれるとする $(0 \le m \le k)$．$m=0$ のときには，w_i は両辺に現れない．$m \ge 1$ のときには，左辺では 1 回である．右辺での回数は $\sum_{j=1}^{m}(-1)^{j-1}\binom{m}{j}$ であるが，この値は 1 に等しい（証明：上と同じで，恒等式 $(1+x)^m = \sum_{j=0}^{m} x^j \binom{m}{j}$ で $x=-1$ とおく）．以上で定理 3 の証明を終わる．

以上 (2009-09-07)

[1] まず，$k=3$ として理解せよ．