

1 グラフ

いくつかの対象と、それらの間の「つながり」を表すグラフについて学ぼう。グラフは、交通網や電気回路、通信ネットワーク、分子構造、人間関係など、「対象とその間の関係」をもつあらゆる場面を抽象化したものであり、現代の数学・情報科学において基本的な道具である。

● 1-1 : グラフと基本用語

定義 1.1. 空でない有限集合 V と有限集合 E , および写像

$$\psi: E \longrightarrow \{ \{u, v\} \mid u, v \in V \}$$

の三つ組 $G = (V, E, \psi)$ を **無向グラフ** (以下, 単にグラフ) という。ここで, V の元を G の **頂点** (vertex), E の元を G の **辺** (edge), 写像 ψ を G の **接続関数** (incidence function) という。 ψ の値域に現れる $\{u, v\}$ は順序を区別しない対であり, $u = v$ のときは 1 元集合 $\{v\}$ を表す (すなわち $\psi(e)$ は常に V の 1 元または 2 元の部分集合である)。 辺 $e \in E$ について $\psi(e) = \{u, v\}$ であるとき, u, v を e の **端点** といい, 「辺 e は u と v を結ぶ」という。 頂点集合・辺集合・接続関数を明示するときは, それぞれ $V(G), E(G), \psi_G$ と書く。

辺 e の端点が $\psi(e) = \{u, v\}$ であることを, 略して $e = uv$ とも書く。ただし多重辺 (下で定義する) があるときは, この記法だけでは辺は一意に定まらないことに注意する。

定義 1.2. グラフ $G = (V, E, \psi)$ について, 次のように呼ぶ。

- 2 頂点 u, v が **隣接する** (adjacent) とは, $\psi(e) = \{u, v\}$ となる辺 $e \in E$ が存在することをいう。また, 頂点 v と辺 e が **接続する** (incident) とは, $v \in \psi(e)$ であることをいう。
- $\psi(e)$ が 1 元集合となる辺 e , すなわち $\psi(e) = \{v\}$ ($= \{v, v\}$) となる辺 e を, 頂点 v における **ループ** (loop) という。
- $\psi(e_1) = \psi(e_2)$ を満たす相異なる 2 本以上の辺 e_1, e_2, \dots を, **多重辺** (または平行辺, multiple edges) という。
- ループも多重辺ももたないグラフを **単純グラフ** (simple graph) という。

本講義では, 特に断らない限り, ループや多重辺をもってもよい一般のグラフ (これを強調して **多重グラフ** ともいう) を扱う。単純グラフはその特別な場合である。

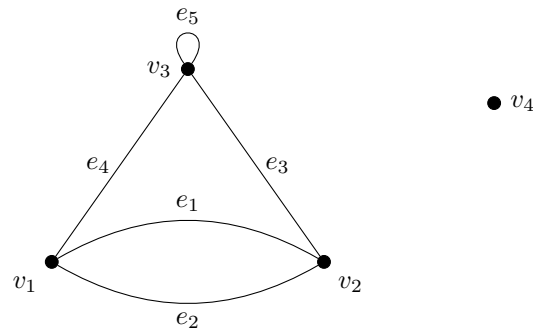
例 1-1 下図のグラフ $G_0 = (V, E, \psi)$ を考える。これは

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}, \quad E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\}$$

であり, 接続関数 ψ は

$$\psi(e_1) = \psi(e_2) = \{v_1, v_2\}, \quad \psi(e_3) = \{v_2, v_3\}, \quad \psi(e_4) = \{v_1, v_3\}, \quad \psi(e_5) = \{v_3\}$$

で与えられる。ここで $\psi(e_1) = \psi(e_2)$ だから e_1, e_2 は多重辺であり, $\psi(e_5) = \{v_3\}$ は 1 元集合だから e_5 は v_3 におけるループである。また, 頂点 v_4 はどの辺とも接続していない (すべての $e \in E$ について $v_4 \notin \psi(e)$ である)。このような次数 0 の頂点を **孤立点** という。



● 1-2 : 次数と握手定理

定義 1.3. グラフ $G = (V, E, \psi)$ の頂点 v に対して, 各辺 $e \in E$ が v に寄与する重み $m(v, e)$ を

$$m(v, e) = \begin{cases} 2 & (\psi(e) = \{v\}, \text{ すなわち } e \text{ は } v \text{ におけるループ}), \\ 1 & (\psi(e) = \{v, w\}, w \neq v), \\ 0 & (v \notin \psi(e)) \end{cases}$$

で定め, その総和

$$\deg(v) := \sum_{e \in E} m(v, e)$$

を v の **次数** (degree) といい, $\deg(v)$ または $\deg_G(v)$ で表す.

言い換えれば, $\deg(v)$ は v を端点とする辺の本数であって, ただし v におけるループのみは 2 本と数えたものである.

例 1-2 例 1-1 のグラフ G_0 について, 各頂点の次数は

$$\deg(v_1) = 3, \quad \deg(v_2) = 3, \quad \deg(v_3) = 4, \quad \deg(v_4) = 0$$

である. 実際, v_3 には辺 e_3, e_4 がそれぞれ 1 を, ループ e_5 ($\psi(e_5) = \{v_3\}$) が 2 を寄与するので $\deg(v_3) = 1 + 1 + 2 = 4$ となる. 孤立点 v_4 の次数は 0 である.

定理 1.4 (握手定理, handshaking lemma). 任意の有限グラフ $G = (V, E, \psi)$ に対して

$$\sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E|$$

が成り立つ.

証明. 次数の定義より $\sum_{v \in V} \deg(v) = \sum_{v \in V} \sum_{e \in E} m(v, e)$ であり, 和をとる順序を入れ替えると

$$\sum_{v \in V} \deg(v) = \sum_{e \in E} \left(\sum_{v \in V} m(v, e) \right)$$

となる. ここで各辺 $e \in E$ について $\sum_{v \in V} m(v, e)$ を計算する. $\psi(e) = \{u, v\}$ ($u \neq v$) ならば $m(u, e) = m(v, e) = 1$ であり他の頂点での重みは 0 だから和は 2 である. また $\psi(e) = \{v\}$ (ループ) ならば $m(v, e) = 2$ であり他の頂点での重みは 0 だから, やはり和は 2 である. いずれの場合も $\sum_{v \in V} m(v, e) = 2$ となるから,

$$\sum_{v \in V} \deg(v) = \sum_{e \in E} 2 = 2|E|$$

を得る. □

命題 1.5. 任意の有限グラフにおいて、次数が奇数である頂点の個数は偶数である。

証明. 頂点を次数の偶奇によって分け、偶数次数の頂点全体を V_e 、奇数次数の頂点全体を V_o とおく。握手定理より

$$\sum_{v \in V_e} \deg(v) + \sum_{v \in V_o} \deg(v) = 2|E|$$

である。右辺 $2|E|$ は偶数であり、第 1 項 $\sum_{v \in V_e} \deg(v)$ も偶数の和だから偶数である。ゆえに第 2 項 $\sum_{v \in V_o} \deg(v)$ も偶数でなければならない。これは奇数を $|V_o|$ 個加えた和であるから、 $|V_o|$ は偶数である。□

この命題は「握手定理」という名前の由来でもある。すなわち、何人かが集まって互いに握手をするとき、握手した回数が奇数である人は必ず偶数人いる（各人を頂点、各回の握手を辺とみなせばよい）。実際、例 1-2 のグラフ G_0 では次数が奇数の頂点は v_1, v_2 の 2 個であり、確かに偶数個である。

● 1-3 : 隣接行列

グラフを行列の形で表しておくと、計算機による処理や、線形代数を用いた解析が可能になる。

定義 1.6. n 個の頂点をもつグラフ $G = (V, E, \psi)$ の頂点全体に v_1, v_2, \dots, v_n と番号を付ける。このとき、 n 次正方行列 $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ を

$$a_{ij} = \begin{cases} |\{e \in E \mid \psi(e) = \{v_i, v_j\}\}| & (i \neq j), \\ 2|\{e \in E \mid \psi(e) = \{v_i\}\}| & (i = j) \end{cases}$$

で定め、これを（番号付け v_1, \dots, v_n に関する） G の **隣接行列** (adjacency matrix) という。ここで $|\cdot|$ は集合の要素数を表す。すなわち、 a_{ij} ($i \neq j$) は v_i と v_j を結ぶ辺の本数であり、 a_{ii} は v_i におけるループの本数の 2 倍である。

対角成分でループを 2 倍に数えるのは、次数との関係（命題 1.7）を簡潔にするための約束である。

例 1-3 例 1-1 のグラフ G_0 の、番号付け v_1, v_2, v_3, v_4 に関する隣接行列は

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

である。ここで $a_{12} = a_{21} = 2$ は $\psi(e_1) = \psi(e_2) = \{v_1, v_2\}$ なる多重辺 e_1, e_2 に、 $a_{33} = 2$ は $\psi(e_5) = \{v_3\}$ なるループ e_5 (1 本) の 2 倍に対応する。また第 4 行・第 4 列がすべて 0 なのは、 v_4 が孤立点だからである。

命題 1.7. グラフ $G = (V, E, \psi)$ の隣接行列 $A = (a_{ij})$ について、次が成り立つ。

- (1) A は対称行列である。すなわち、すべての i, j について $a_{ij} = a_{ji}$ である。
- (2) 第 i 行の成分の和は $\deg(v_i)$ に等しい。すなわち $\sum_{j=1}^n a_{ij} = \deg(v_i)$ 。
- (3) A のすべての成分の和は $2|E|$ に等しい。

証明. (1) $i \neq j$ のとき $\{v_i, v_j\} = \{v_j, v_i\}$ だから、 $\{e \mid \psi(e) = \{v_i, v_j\}\} = \{e \mid \psi(e) = \{v_j, v_i\}\}$ であり、その要素数をとって $a_{ij} = a_{ji}$ を得る。対角成分については $a_{ii} = a_{ii}$ で明らかに対称である。

(2) $\sum_{j \neq i} a_{ij}$ は $\psi(e) = \{v_i, w\}$ ($w \neq v_i$) なる辺、すなわち v_i を端点とするループ以外の辺の総数であり、これらは次数の定義で重み 1 をもつ。一方 a_{ii} は v_i におけるループの本数の 2 倍であり、ループは重み 2 をもつ。ゆえに $\sum_{j=1}^n a_{ij} = \sum_{e \in E} m(v_i, e) = \deg(v_i)$ である。

(3) (2) より全成分の和は $\sum_{i=1}^n \deg(v_i)$ に等しく、握手定理よりこれは $2|E|$ である。□

隣接行列は頂点の番号付けに依存し、番号付けを変えると行と列を同じ置換で並べ替えた行列になる。なお、隣接行列の累乗と歩道（次の 1-4 で定義する）の関係をはじめ、隣接行列は後の回でもグラフを調べる重要な道具となる。

● 1-4 : 歩道・連結性・連結成分

定義 1.8. グラフ $G = (V, E, \psi)$ において、頂点と辺が交互に並んだ有限列

$$W : v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_k, v_k$$

であって、各 $i = 1, \dots, k$ について $\psi(e_i) = \{v_{i-1}, v_i\}$ を満たすものを、 v_0 から v_k への長さ k の **歩道** (walk) という。このとき v_0 を **始点**、 v_k を **終点** という。特に、1 つの頂点 v のみからなる（辺を含まない）長さ 0 の歩道も認める。

歩道では、同じ頂点や同じ辺を何度通ってもよい。通る頂点がすべて相異なる歩道を特に **道** (path) というが、今回は主に歩道を用いる。

定義 1.9. グラフ G の任意の 2 頂点 u, v に対して、 u から v への歩道が存在するとき、 G は **連結** (connected) であるという。

命題 1.10. グラフ $G = (V, E, \psi)$ の頂点集合 V 上に、関係 \sim を

$$u \sim v \stackrel{\text{def}}{\iff} u \text{ から } v \text{ への歩道が存在する}$$

で定めると、 \sim は V 上の同値関係である。

証明. (反射律) 任意の $v \in V$ に対し、 v のみからなる長さ 0 の歩道があるから $v \sim v$ である。

(対称律) $u \sim v$ とし、 u から v への歩道 $v_0 (= u), e_1, v_1, \dots, e_k, v_k (= v)$ をとる。これを逆順に並べた列 $v_k, e_k, \dots, e_1, v_0$ は v から u への歩道である（各 i について $\psi(e_i) = \{v_{i-1}, v_i\} = \{v_i, v_{i-1}\}$ であり、辺には向きがないので逆向きにもたどれる）。ゆえに $v \sim u$ である。

(推移律) $u \sim v$ かつ $v \sim w$ とする。 u から v への歩道と v から w への歩道を、共通の頂点 v でつなげれば、 u から w への歩道が得られる。ゆえに $u \sim w$ である。□

定義 1.11. グラフ $G = (V, E, \psi)$ に対して、 $V' \subset V, E' \subset E$ が、 E' に属するどの辺 e についても $\psi(e) \subset V'$ を満たすとする。このとき、 ψ の E' への制限 $\psi|_{E'}$ は E' から $\{\{u, v\} \mid u, v \in V'\}$ への写像となり、三つ組 $G' = (V', E', \psi|_{E'})$ は再びグラフとなる。この G' を G の **部分グラフ** (subgraph) という。

上の同値関係 \sim による V の各同値類 C に対し、 C を頂点集合とし、 $\psi(e) \subset C$ を満たす G の辺 e すべてを辺集合とする部分グラフを、 G の **連結成分** (connected component) という。

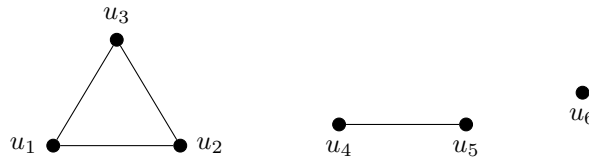
定義から、各連結成分はそれ自身が連結なグラフであり、相異なる連結成分に属する頂点を結ぶ辺は存在しない。また、グラフ G が連結であることと、 G の連結成分がちょうど 1 つであることは同値である。

例 1-4 例 1-1 のグラフ G_0 では、 v_1, v_2, v_3 は互いに歩道で結ばれるが、孤立点 v_4 へ至る歩道は存在しない。ゆえに連結成分は $\{v_1, v_2, v_3\}$ と $\{v_4\}$ の 2 つであり、 G_0 は連結ではない。

例 1-5 下図のグラフ H は、3 つの連結成分

$$\{u_1, u_2, u_3\} \text{ (三角形)}, \quad \{u_4, u_5\}, \quad \{u_6\} \text{ (孤立点)}$$

をもつ。よって H は連結ではない。



頂点を連結成分ごとにまとめて番号付けすると、異なる成分の間には辺がないため、隣接行列は各成分に対応する小行列を対角線上に並べた **ブロック対角行列** の形になる。このように、1-3 の隣接行列と本節の連結成分は密接に結びついている。

● 1-5 [発展] 隣接行列の核とラプラシアン

前項の最後で触れた「隣接行列と連結成分のつながり」は、線形代数を用いるとさらに明確な形になる。本項は発展的内容であり、行列の核 (kernel)・階数・固有値を用いる。以下では頂点を v_1, \dots, v_n と番号付けし、 A をその隣接行列とする。ベクトル $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ を、各頂点 v_i に実数 x_i を割り当てたものとみなす。

まず隣接行列の核 $\ker A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}$ を考えよう。 $Ax = 0$ とは各 i について $\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = 0$ となることだから、単純グラフの場合は「どの頂点でも、それに隣接する頂点に割り当てた値の総和が 0 になる」という条件を表す。 A は実対称行列なので $\ker A$ は固有値 0 に属する固有空間に一致し、その次元

$$\eta(G) := \dim \ker A$$

を G の **nullity** (零度) という。階数・退化次数定理より $\text{rank } A = n - \eta(G)$ である。

定義 1.12. グラフ $G = (V, E, \psi)$ の頂点を v_1, \dots, v_n と番号付けし、各頂点の次数を並べた対角行列を $D = \text{diag}(\deg(v_1), \dots, \deg(v_n))$ とする。このとき n 次正方行列

$$L := D - A$$

を G の **ラプラシアン行列** (Laplacian matrix) という。

命題 1.7 の (2) (A の行和が次数に等しいこと) より、 L の第 i 行の成分の和は $\deg(v_i) - \deg(v_i) = 0$ である。特に全成分が 1 のベクトル $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T$ は $L\mathbf{1} = 0$ を満たす。

定理 1.13. グラフ G のラプラシアン L について

$$\dim \ker L = (G \text{ の連結成分の個数})$$

が成り立つ。

証明. はじめに、任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$x^T Lx = \sum_{\substack{e \in E \\ \psi(e) = \{v_i, v_j\}}} (x_i - x_j)^2$$

が成り立つことを示す。定義より $x^T Lx = \sum_i (\deg(v_i) - a_{ii})x_i^2 - \sum_{i \neq j} a_{ij}x_i x_j$ である。ここで $\deg(v_i) - a_{ii}$ は、次数と a_{ii} がともに v_i のループを 2 回数えることから、 v_i に接続するループ以外の辺の本数に等しい。一方、この等式の右边を展開すると、ループ $\psi(e) = \{v_i\}$ は $(x_i - x_i)^2 = 0$ で寄与せず、非ループ辺 $\psi(e) = \{v_i, v_j\}$ は x_i^2, x_j^2 に各 1, $x_i x_j$ に -2 を寄与する。ゆえに両辺で x_i^2 の係数は上記の本数に、 $x_i x_j$ ($i \neq j$) の係数はともに $-2a_{ij}$ に一致し、上の等式が従う。

次に $\ker L$ を決定する. $x \in \ker L$ とすると $x^\top Lx = x^\top \mathbf{0} = 0$ だから, 上の等式より $\sum_e (x_i - x_j)^2 = 0$, すなわち辺 $\psi(e) = \{v_i, v_j\}$ をもつ任意の隣接頂点で $x_i = x_j$ である. 隣接頂点が等しい値をとるなら, 歩道でつながる頂点も等しい値をとるから, x は各連結成分上で定数である. 逆に x が各連結成分上で定数であるとすると, 各 i について $a_{ij} \neq 0$ となるのは v_j が v_i と隣接する (したがって同じ成分に属する) ときに限られ, そのとき $x_j = x_i$ だから, 命題 1.7 の (2) を用いて

$$(Lx)_i = \deg(v_i)x_i - \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = \deg(v_i)x_i - x_i \sum_{j=1}^n a_{ij} = \deg(v_i)x_i - x_i \deg(v_i) = 0$$

となり $x \in \ker L$ である. 以上より, $\ker L$ は「各連結成分上で定数であるベクトル全体」に一致する.

G の連結成分を C_1, \dots, C_c とすると, 各成分上で定数なベクトルは成分ごとの値 $(c_1, \dots, c_c) \in \mathbb{R}^c$ で一意に定まるから, この空間は \mathbb{R}^c と同型で次元は c である (成分の指示ベクトル $\mathbf{1}_{C_1}, \dots, \mathbf{1}_{C_c}$ が基底をなす). ゆえに $\dim \ker L = c$ である. \square

この定理は, 1-4 で同値関係を用いて定めた連結成分の個数が, 行列 L の核という線形代数の言葉で取り出せることを示している. 特に, G が連結であることと $\dim \ker L = 1$ は同値である.

最後に, 隣接行列の核 $\ker A$ そのものについて二点を補足しておく. 第一に, G が **森** (閉路をもたないグラフ) のときに限り

$$\eta(G) = n - 2\mu(G)$$

が成り立つ. ここで $\mu(G)$ は最大マッチング (共有点をもたない辺の最大本数) の辺数であり, このとき $\dim \ker A$ は「最大マッチングで被覆されずに余る頂点の個数」を表す (証明には特性多項式の係数に関する Sachs の定理を用いる). これは森に固有の現象で, 上の C_4 ($\mu = 2$ だが $\text{rank } A = 2$) のように一般には成り立たない. 第二に, 化学の Hückel 近似では分子骨格のグラフの隣接行列が Hamiltonian の役割を果たし, $\ker A$ (固有値 0 の固有空間) は非結合性軌道に対応する. このように隣接行列やラプラシアン核の固有値はグラフの構造や応用と深く結びついており, スペクトルグラフ理論で本格的に扱う.