グラフ上の散歩パターンの数理

倉田　和浩

平成19年11月3日

目 次

1　グラフの上の散歩ルートを数えよう　1

2　グラフと隣接行列　3

3　極限で見えてくる隠れたパターン　5

1　グラフの上の散歩ルートを数えよう

ここでいう**グラフ**とは, 関数のグラフではなく, **頂点**の集合 $V = \{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$ とそれらの結ぶ**辺**の集合 E をセットにしたもので, $G = (V, E)$ という表示をすることにします. 例えば, ある人が散歩をするとして, めぼしいスポット場所を地図にマークした地点を頂点の集合と見ることができ, 2つの頂点（スポット場所）を結ぶ道路を辺として見なすことができます. このとき, 1つの**散歩のルート**は, ある頂点から出発していくつかの辺（道路）と頂点を通りながら、またもとの位置にもどることに対応させることができます. ここで, 何度も同じ道路を行ったりきたりしてもよいものとします.

今, 頂点 v_i を出発して頂点 v_j を結ぶ辺を (v_i, v_j) と書くことにしよう. そうすると, 例えばグラフ G_1 において, 頂点 v_1 から出発して辺 (v_1, v_3) を通って頂点 v_3 に立ち寄り, 次に辺 (v_3, v_2) を通って v_2 に立ち寄り, さらに辺 (v_3, v_1) を通って頂点 v_1 に戻る散歩ルートは (v_1, v_3) (v_3, v_2) (v_2, v_1) として表すことができます.

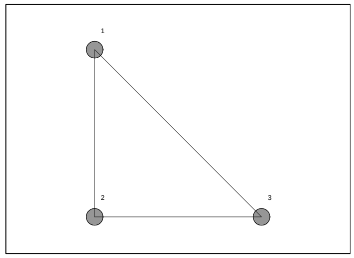

図 1: G_1

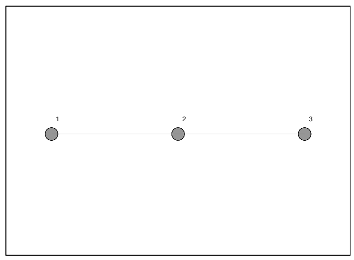

図 2: G_2

グラフによっては, G_2 のように v_1 と v_3 を結ぶ辺（道路）がない場合もあります. v_1 と v_3 を結ぶ辺がある場合, v_3 を出発して v_1 に向かう辺（道路）を (v_3, v_1) と表すことにします. また, 簡単のためすべての辺（道路）の長さは 1 であるとし, 2 つの頂点を結ぶ辺はないかまたはあっても 1 本のみであり, さらに v_1 を出発して v_1 にもどるループのような辺（道路）はないものとします.（こういうグラフを**単純グラフ**といいます.）また, 勝手な 2 つの頂点は何個かの辺でつながっているものとします.

さて, k 個の辺を通る散歩ルートを**長さ k の散歩ルート**と呼ぼう. 例えば, 先ほどの頂点 v_1 を出発してまた v_1 に戻る散歩 (v_1, v_3) (v_3, v_2) (v_2, v_1) は長さ 3 の散歩ルートであるといえます.

グラフが与えられると（散歩スポット一覧とそれらをつなぐ道路網が与えられることに対応します）, 1 つの頂点 v_1 を出発して頂点 v_1 にもどるような, 一般に長さ k の散歩ルートはいくつもありうることになります. 今日はこの散歩ルートを通って, 明日は別の散歩ルートを通ろうとかいうようにです. 散歩時間は一定になるようにという意味で散歩の長さは一定 k と定めておくものとします.

問題:　グラフ G が与えられたとき, k を指定して, 1 つの頂点 v_1 を出発して頂点 v_1 にもどるような長さ k の散歩ルートはいくつあるのでしょ

うか？k を増やせば, 長さ k の散歩ルートの総数はどんどん増加しそうですが, どのくらい増加するのでしょうか？増加の度合いは何で決まるのでしょうか？

この問題にひそむ隠れたパターンを探そう！

散歩ルートの総数が大きいということは, それだけ散歩コースがたくさんあるという意味で, よいグラフであるとも言えるでしょう. グラフ G_1 と G_2 ではどちらがいいグラフと言えるでしょうか？

例. 簡単のため, $[i,j]=(v_i,v_j)$ と表すこととします. グラフ G_1 で v_1 を出発してまた v_1 にもどるような長さ 2 の散歩ルートは, $R_1=[1,2]\ [2,1]$ と $R_2=[1,3]\ [3,1]$ の 2 通り. 長さ 3 の散歩ルートは $R_1=[1,2]\ [2,3]\ [3,1]$; $R_2=[1,3]\ [3,2]\ [2,1]$ の 2 通り. 長さ 4 の散歩ルートは $R_1=[1,2]\ [2,1]\ [1,2]\ [2,1]$; $R_2=[1,2]\ [2,1]\ [1,3]\ [3,1]$; $R_3=[1,3]\ [3,1]\ [1,3]\ [3,1]$; $R_4=[1,3]\ [3,1]\ [1,2]\ [2,1]$; $R_5=[1,2]\ [2,3]\ [3,2]\ [2,1]$; $R_6=[1,3]\ [3,2]\ [2,3]\ [3,1]$; の 6 通り. 実は, 長さ $5,6,7,8,9,10$ の散歩ルートは, それぞれ 10, 22, 42, 86, 170, 342 通りとなります.

2　グラフと隣接行列

ここでは, 先の問いに答えるために, 興味深い関係について触れることとしよう.

それは与えられたグラフ $G=(V,E)$ の持つ情報は, 行列の言葉で表現できるということです.

グラフ G に頂点 v_i と v_j を結ぶ辺があるとき $a_{ij}=1$ とし,　結ぶ辺がないとき $a_{ij}=0$ と置きます. 頂点の数は n 個であるとして, このとき, a_{ij} を (i,j) 成分に持つような $n\times n$ 行列を $A=A_G=(a_{ij})_{i,j=1}^{n}$ と書いて, グラフ G の**隣接行列**と呼びます.

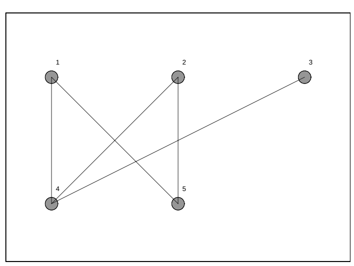

図 3: G_3

例. グラフ G_3 の隣接行列は, 例えば $a_{11} = a_{12} = a_{13} = 0, a_{14} = a_{a5} = 1$ なので, 次のとおりとなります.

$$A = A_{G_3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

ちなみにグラフ G_1, G_2 の隣接行列は次のとおり.

$$A_{G_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_{G_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

さて, 一般に行列 $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ と行列 $B = (b_{ij})_{i,j=1}^n$ に対して, その**行列の積** $C = AB$ は, $C = (c_{ij})_{i,j=1}^n$ として,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}, \quad i, j = 1, 2, \cdots, n$$

で定めます. 今, A^k の (i,j) 成分を $a_{ij}^{(k)}$ と書くことにします. このとき次が成り立つことがわかります.

命題: $a_{ij}^{(k)}$ は頂点 v_i を出発して頂点 v_j を終点とするような長さがちょうど k の散歩ルートの総数に一致する.

説明: k に関する数学的帰納法により説明しよう. $k = 1$ のときは, $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$ で, a_{ij} の定義より命題の成立がわかります. $k-1$ で命題が成り立つとして, k の場合の成立を示そう. $A^k = AA^{k-1}$ なので, 成分表示で書くと次が成りたつことになります.

$$a_{ij}^{(k)} = \sum_{p=1}^n a_{ip}^{(1)} a_{pj}^{(k-1)}.$$

この式の右辺は,v_i を出発して, 辺 (v_i, v_p)（それがあるものとして）を経由して v_p に到達し, v_p を出発して頂点 v_j に至る長さ $k-1$ であるようなルートの総数を p に関して場合分けして数えたものであるので, 意味からして, v_i を出発して頂点 v_j に至る長さ k であるようなルートの総数に等

しいことになります．よって k に関する数学的帰納法によって, 主張が正しいことがわかります．

上の命題は, 言われればそう難しくない事実であることがわかりますが, とても有益な関係です．なぜなら, v_i を出発して頂点 v_j に至る長さ k であるようなルートの総数をカウントするのに, グラフを見ながら１つ１つしらみつぶししていかなくても, 行列 A^k を計算すればその (i,j) 成分として求めるルート総数が機械的にわかってしまうからです．

例. 例えば, グラフ G_1 の隣接行列 $A = A_{G_1}$ に対して,

$$A^2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^3 = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 3 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^4 = \begin{pmatrix} 6 & 5 & 5 \\ 5 & 6 & 5 \\ 5 & 5 & 6 \end{pmatrix},$$

$$A^5 = \begin{pmatrix} 10 & 11 & 11 \\ 11 & 10 & 11 \\ 11 & 11 & 10 \end{pmatrix}, \cdots, A^{10} = \begin{pmatrix} 342 & 341 & 341 \\ 341 & 342 & 341 \\ 341 & 341 & 342 \end{pmatrix}.$$

3　極限で見えてくる隠れたパターン

一般に $f(n)$ が n を大きくしたとき $+\infty$ に増大するとして, どの程度のスピードで大きくなるか？という問題が興味深いこともあります．例えば,

$$S_p(n) = 1^p + 2^p + 3^p + \cdots + n^p$$

を考えてみましょう． 明らかに, 各自然数 p を固定するとき, $S_p(n) \to +\infty$ $(n \to +\infty)$ であることがわかります．$S_1(n) = 1 + 2 + 3 + \cdots + n = \frac{n(n+1)}{2}$ なので

$$\lim_{n \to +\infty} \frac{S_1(n)}{n^2} = \frac{1}{2}.$$

これより, $S_1(n)$ はおよそ $\frac{1}{2}n^2$ 程度のスピードで増大する, ということができます．一般に, $S_p(n)$ の具体的な表示式を知らなくても, 区分求積法の考え方で $n \to +\infty$ において

$$\frac{S_p(n)}{n^{p+1}} = \frac{1}{n}\left((\frac{1}{n})^p + (\frac{2}{n})^p + \cdots + (\frac{n}{n})^p \right) \to \int_0^1 x^p\, dx = \frac{1}{p+1}$$

となることがわかります．つまり, $S_p(n)$ は n が十分大きいとき, おそよ $\frac{1}{p+1}n^{p+1}$ 程度のスピードで増大するといえます．そこには p に関するきれ

いなパターンが見て取れます．これは $n \to +\infty$ という極限操作で見えてくるパターンの１つです．

さて，もとの問題に戻ろう．今，$N(k;G) = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}^{(k)}$ とおくと，これはいろいろな頂点を出発点とする長さ k の散歩ルート総数に他ならないことに注意します．実は，**$N(k;G)$ は k が十分大きいとき，ある定数 $d = d_G$ が存在して，ほぼ $(d_G)^k$ の値に近いことがわかります**．定数 d がグラフ G からどう決まるのかを説明しましょう．それには，行列の固有値という量が重要な役割を果たします．

• **行列の固有値**: 行列 A に対して，ある定数 λ とゼロベクトルでないベクトル $\mathbf{x}$ があって，$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ が成り立つとき，λ を A の**固有値**，また $\mathbf{x}$ を**固有値 λ に付随する固有ベクトル**といいます．

行列 A の性質は多くの場合，その固有値と固有ベクトルの組で完全に決まってしまいます．従って，A の固有値という量は行列 A の特徴をよく反映したものです．行列 A が $n \times n$ 行列の場合，一般にその固有値は n 個存在することが知られています．$n = 2$ のときに，2×2 行列において固有値が一般に２つ出てくることを既に知っている人もいるかもしれませんが，大学１年でこのことを一般的に学ぶこととなります．

例. A_{G_1} の固有値は，$-1, -1, 2$ の 3 つであり，A_{G_2} の固有値は，$-\sqrt{2}, 0, \sqrt{2}$ の 3 つです．

実は，長さ k の散歩ルート総数 $N(k;G)$ の k が十分大きいときの増加の振る舞いについては，次のことが成り立つことがわかります．**極限操作によって，$N(k;G)$ の振る舞いを決定している要因はグラフ G の隣接行列 A_G の最大の固有値であることが見えてくる!**

定理: いかなるグラフ G に対しても，ある定数 $d = d_G$ が存在して次が成り立つ:

$$\lim_{k \to +\infty} (N(k;G))^{\frac{1}{k}} = d_G.$$

ここで，$d = d_G > 0$ は，G の隣接行列 $A = A_G$ の**最大の固有値**です．

注 1: ある条件のもとでは，各 i, j に対しても次が成り立つ:

$$\lim_{k \to +\infty} (a_{ij}^{(k)})^{\frac{1}{k}} = d_G.$$

例えば，ある k 番目ですべての (i,j) 成分 $a_{ij}^{(k)}$ が正となるならば，上のことが成立します．**つまり，例えば頂点 v_1 を出発してまた v_1 にもどってくるような長さ k の散歩ルートの総数 $a_{11}^{(k)}$ は k が十分大きいときおよそ $(d_G)^k$ のスピードで増大することなるわけです．**

注 2: グラフの頂点から出ている辺の数をその**頂点の次数**という. すべての次数が一定値 p であるグラフを $p-$ **正則グラフ**という (図 7.4 は 3− 正則グラフ). さらに, 頂点の数が n 個で, $(n-1)-$ 正則グラフであるもの

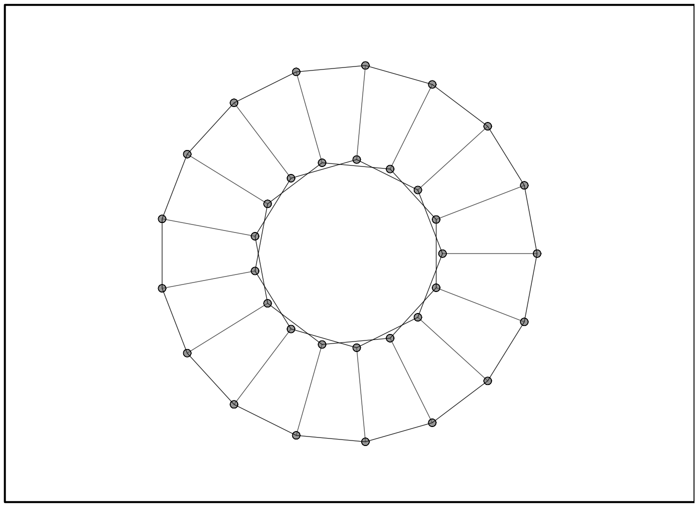

図 4: G_4

を, 特に**完全グラフ**と呼び K_n で表します (図 7.5,7.6 を参照).

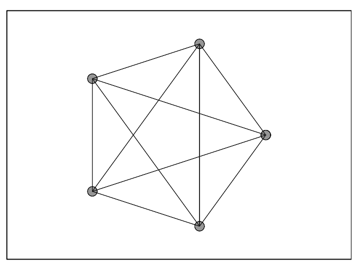

図 5: K_5

グラフ G の頂点の数が n 個で辺の数が m 個のとき, 隣接行列 $A = A_G$ の最大固有値 d_G は $d_G \leq \sqrt{\frac{2m(n-1)}{n}}$ を満たし, 等号成立は G が完全グラフのときに限ることが知られています. また, $\Delta(G)$ および $\delta(G)$ でグラフ G の頂点の次数の内で最大のものおよび最小のものとするとき, $\delta(G) \leq d_G \leq \Delta(G)$ が成りたち, 右の等号成立は G が正則グラフであるときに限ることも知られています. (従って, $p-$ 正則グラフの最大固有値は p です.) このことは, グラフの最大次数 $\Delta(G)$ が一定であるようなありとあらゆ

るグラフの中で, 正則グラフがよいグラフであることを裏付けているとも言えます.

一般のグラフに対しても, 最大固有値 d_G という量が十分大きな k に対して, 長さ k の散歩ルートの総数を決定づけていることは興味深いことだと思いませんか？グラフのつながり具合を見ても (すなわち, 隣接行列 A_G の形を見ても), その最大固有値 d_G という量は見えませんが, 長さ k の散歩ルートの総数を統制しているわけです.

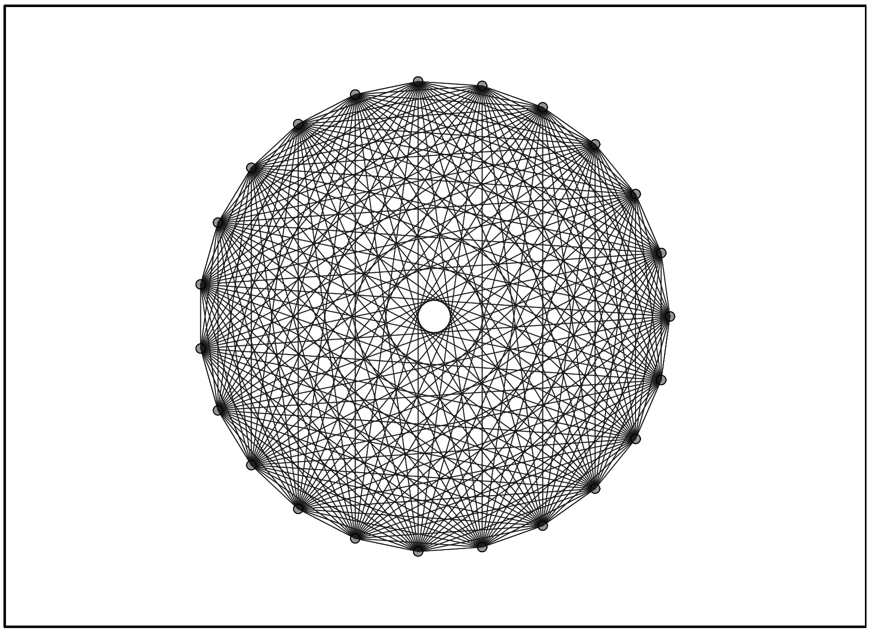

図 6: K_{23}

参考文献.

[1]. 漸近挙動入門, 高橋　陽一郎著, 日本評論社, 2002.

[2]. 離散数学への招待 (上・下）, マトウシェク・ネシェトリル著, 根上生也・中本敦浩訳, Springer, 2002.

[3]. 数学からの７つのトピックス, 竹中　淑子著, 培風館, 2005.