数理解析研究所講究録
第561巻 1985年 79-90

グラフのある多項式不変量

東京工業大学　理学部　　根上生也（Seiya Negami）

本稿で扱うグラフには self-loopや多重辺があってもよいものとします。そのようなグラフＧに対して、次の（i),(ii）によって再帰的に３変数多項式 $f(G;t,x,y)$（t,x,y を省略して $f(G)$ と書くことがあります）を定義します。

（i）　Ｇが辺を持たず p個の孤立点からなるとき、

$$f(G) = t^p$$

（ii）　Ｇの辺 $e \in E(G)$ に対して、

$$f(G) = x\, f(G/e) + y\, f(G-e)$$

ここで、Ｇ／ｅはＧから辺ｅを縮約（contract）して得られるグラフです。つまり、Ｇからｅを除去した後、ｅの両端点を１つの頂点に同一視して得られるものです。従って、ｅが三角形の１辺のときはその縮約によって他の２辺が多重辺になります。また、ｅが self-loopのときにはその縮約（Ｇ／ｅ）と除去（Ｇ－ｅ）は同じことになります。

上の定義では $f(G)$ は辺ｅの取り方に依存していますが、実際にはグラフの同型類に対して１つの多項式が定まり、グラフの不変量になります。本稿では $f(G)$ の色々な性質を述べ、それがグラフの同型判定にどの程度有効なのかを示していきます。

1. f(G)の簡単な性質

この節では定義の漸化式だけから演繹できる事実を記します。が、最初に f(G)が辺eの取り方に依存せずに決定されることを示すべきでしょう。

命題1. f(G)は well-defined である。

《証明》 Gに辺が高々1本しかないときは f(G)の定義には不確定要素がなく、一意的に定まることは明かです。そこで、Gは少なくとも2辺e、dを持つものとします。このとき、辺の縮約と除去の可換性（$(G/e)-d = (G-d)/e$ 等）に注意すれば、

$$
\begin{aligned}
& x\, f(G/e) + y\, f(G-e) \\
&= x\,(x\, f((G/e)/d) + y\, f((G/e)-d)) + y\,(x\, f((G-e)/d) + y\, f((G-e)-d)) \\
&= x\,(x\, f((G/d)/e) + y\, f((G/d)-e)) + y\,(x\, f((G-d)/e) + y\, f((G-d)-e)) \\
&= x\, f(G/d) + y\, f(G-d)
\end{aligned}
$$

これから (ii) により f(G)を一意的に定義できます。■

p = 頂点数、q = 辺数とおくと、f(G)は定義から次の形に展開できます。

$$
f(G) = \sum_{i=0}^{q} a_i(t)\, x^{q-i}\, y^i, \quad a_i(t) = \sum_{j=1}^{p} b_{ij}\, t^j \ (b_{ij} \geqq 0)
$$

この非負整数 b_{ij} の意味は次節まで秘密にしておきますが、特に $a_0(t)$ と $a_q(t)$の正体は定義から自ずと明かでしょう。

命題２．（i） f（G）の x，y に関する次数 = q （辺数）。

（ii） r = Gの連結成分の個数とすると、 $a_0(t) = t^r$ 。

（iii） $a_q(t) = t^p$ （p = 頂点数）。

次の積公式は辺数に関する帰納法によって f（G）の定義式だけから導けます。実際、Gに辺がないときは明かに下の（i),(ii）が成り立ちます。

命題３．（i） Gが２つグラフG_1, G_2 の disjoint union $G_1 \cup G_2$ ならば、

$$f(G) = f(G_1) \cdot f(G_2)$$

（ii） Gが２つグラフG_1, G_2 の one-point join $G_1 \cdot G_2$ ならば、

$$f(G) = f(G_1) \cdot f(G_2)/t$$

グラフの不変量で辺の縮約と除去に関して再帰的に計算できるものがかなりあります。例えば、グラフの spanning treeの総数を計算する Cayley の公式がそれです。また、頂点の t色塗り分けの総数をあたえる <u>chromatic polynomial</u> や位数 tの環上の致るところ ”0”でない flow の総数を与える <u>flow polynomial</u>も同様です。次の命題が示すように、f（G）にはそれらの再帰的構造が総括して盛り込まれていると言えるでしょう。

命題４．（i）　$f(G;t,1,1)=\sum_{k=1}^{p} c_k t^k$　とおくと、

c_k ＝　連結成分がｋ個のＧの spanning forestの総数。

（ii）　$f(G;t,-1,1)$ = chromatic polynomial 。

（iii）　$f(G;t,t,-1)$ = flow polynomial・t^p 。

上の（iii)の帰結として、グラフＧが Eulerian であるための必要十分条件は（連結であることから）$a_0(t)=t$ かつ　$f(G;2,2,-1)\neq 0$（このとき必然的に $=2^p$ ）であることがわかります。なぜなら、 Euler閉路は位数 2の環 $\mathbf{Z}_2$ 上の flow と考えられるからです。

２．　f(Ｇ）の正体

procedure の再帰呼び出しが可能な言語でプログラムを記述すればコンピューター上では　f(Ｇ）を計算するのは（計算時間を無視すれば）比較的簡単です。が、手作業でしようとすると、構造の簡単なグラフでもかなりたいへんです。そこで、それを容易にするために　f(Ｇ）の意味を理解することにします。

そうするためには、与えられたグラフＧから出発して辺の縮約、除去をするたびに x,y のラベルを付加した辺によって左右に分岐していく２進木を考えると便利です。それをグラフの <u>resolution</u> と呼びます。 resolution の左端を辿っていくと、ラベ

ルは x,x,....,x と読まれ、最後に到達する端点にはGの全ての辺を縮約して得られるグラフが対応しています。そのグラフはGの各連結成分に対応した孤立点からなります。一方、右端を辿るとラベルは y,y,....,y となって、その終点はGから全ての辺を除去したグラフ、即ち、p 個の孤立点に対応しています。（図１参照）

$$f(G) = tx^2 + 2t^2xy + t^3y^2$$

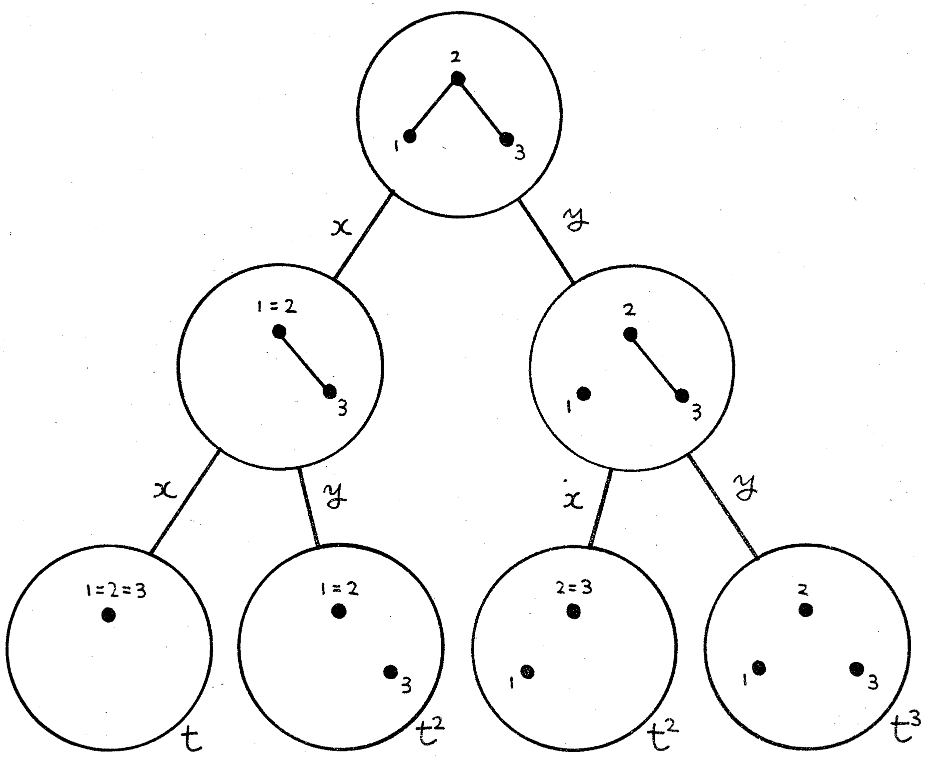

図１.　グラフの resolution

このように考えていくと、一般に resolution の各端点はGに対応した始点からそこに至る path のラベルに従って辺の縮約、除去を行なって得られる何個かの孤立点に対応しています。その孤立点の個数が n ならば、 t^n にラベルの x,y の積を掛

けて、それらを全てたし合わせたものが f(G) です。従って、ラベル "y"(辺の除去)、"x"(辺の縮約)の一方に着目して f(G) の係数の意味を考えると次のようになります。

命題5.(i) b_{ij} = G−Aの連結成分の個数が j になる i 本の辺からなる E(G) の部分集合Aの総数

(ii) b_{ij} = 連結成分の個数が j で q-i 本の辺をもつGの spanning subgraph の総数。

上の事実をもとにして、cutset や subgraph の構造が簡単なグラフに対しては容易に f(G) が求まります。特に、以下のグラフに関しては、f(G) の形からそれらのグラフの属が特徴付けられることを注意しておきましょう。

命題6.(i) G = q 本の辺を持つ tree であるための必要十分条件は

$$f(G) = t(x + ty)^q。$$

(ii) G = 長さ q の cycle であるための必要十分条件は

$$f(G) = (x + ty)^q + (t-1)x^q。$$

(iii) G = q 個の self-loopを持つ1頂点グラフであるための必要十分条件は

$$f(G) = t(x + y)^q。$$

(iv) G = q 本の多重辺からなる２頂点グラフであるための

必要十分条件は

$$f(G) = t(x+y)^q + t(t-1)y^q 。$$

f(G) だけからグラフが単純かどうかは一般にはわかりませんが、self-loop の存在は確認することができます。

命題７． グラフGが m 個の self-loop を持つための必要十分条件は $(x+y)^m$ が f(G) を割り切ることである。

《証明》 必要性：辺 e が self-loop のときは $f(G/e) = f(G-e)$ なので、$f(G) = x\,f(G/e) + y\,f(G-e) = (x+y)\,f(G-e)$ 。これを m 回繰り返せば $(x+y)^m$ をくくり出すことができる。

十分性：頂点数、辺数をそれぞれ p, q とすると、命題２(iii) により $a_q(t) = t^p$ となっています。もし f(G) が (x + y)を因子に持つならば $a_{q-1}(t)$ は t^p の項を含まなければなりません。これはある (q-1)本の辺を除去すると p 個の全ての頂点は孤立して、そのうちの１つに残りの１辺が接続しているという状況を意味しています。その最後の１辺 e が self-loop です。 $f(G-e) = f(G)/(x+y)$ だから、この議論を m 回繰り返せば、 m 個の self-loop が発見できます。■

上の命題は self-loop の付き方によらずに f(G) が決まるということも示しています。

3．　f(G）の同等性とグラフの同型性

以上で見たように、f(G）にはグラフの色々な情報（spanning forest の総数、染色数、flow、辺連結度‥‥）が乗っています。この事実から　f(G）の等しいグラフはグラフとしてもかなり近いと言えるでしょう。しかし、命題6にあるように辺数の等しい tree の　f(G）は共通なので、f(G）の同等性からグラフの同型を導くことは一般には不可能です。そこで、この節では　f(G）の等しいグラフの間にはどのような関係があるかを考察します。

A．One-point joinの修正：２つのグラフG_1, G_2 の one-point join $G_1 \cdot G_2$ は両者のどの頂点を同一視するかに依存しているので一意的には決まりません。が、命題３の(ii)からその多項式　$f(G_1 \cdot G_2)$　はG_1, G_2 のみに依存して１通りに定まります。言い換えれば、 one-point join の仕方を変更することにより、f(G）の等しい同型でないグラフを構成することができます。

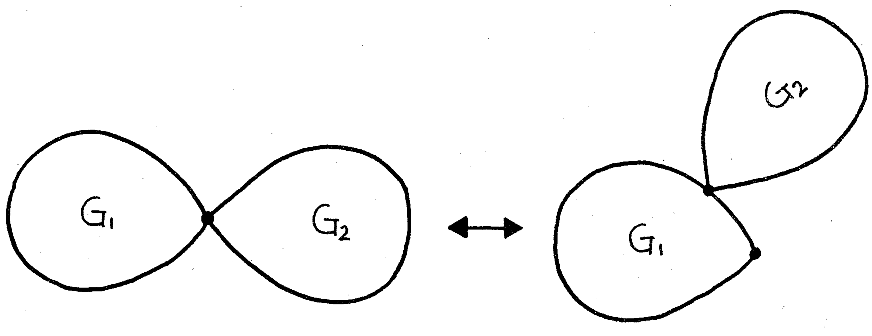

図２．　One-point joinの修正

Ｂ．<u>２頂点間の反転</u>：v,u をG_1 の２頂点、s,t をG_2 の２頂点として、{v, s}と{u, t}（{v, t}と{u, s}）のそれぞれの組を同一視して得られる two-point join を $G_1 : G_2$ （$G_1 : G_2$）とします。このとき $f(G_1 : G_2)$ と $f(G_1 : G_2)$ は等しくなります。なぜなら、両者の辺集合間の自然な１対１対応

$$\theta : E(G_1 : G_2) \rightarrow E(G_1 : G_2)$$

を介して、$G - A$ と $G - \theta(A)$ の連結成分個数が等しくなるからです。

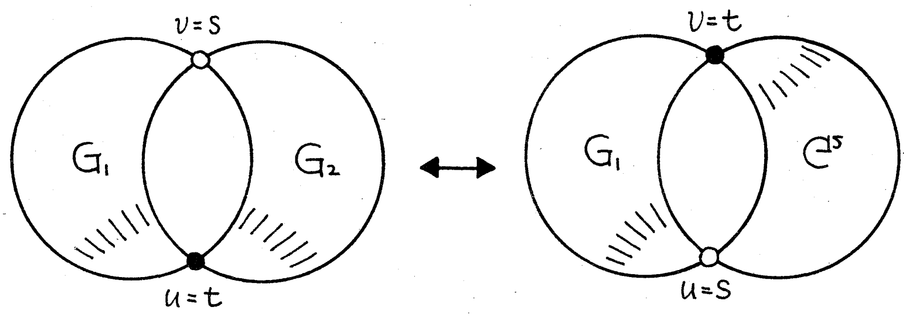

図３．　２頂点間の反転

Ｃ．<u>One-point joinの分解・結合</u>：命題３により

$$\begin{aligned} f(G_1 \cup G_2) &= f(G_1)f(G_2) \\ &= t(f(G_1)f(G_2)/t) \\ &= f(\{\cdot\})f(G_1 \cdot G_2) \\ &= f(\{\cdot\} \cup (G_1 \cdot G_2)) \end{aligned}$$

従って、孤立点を含むグラフＧを cut-vertex で２つに切断して孤立点を１つ除去す

ればＧと同じ多項式　f(Ｇ）を持つグラフを作ることができます。

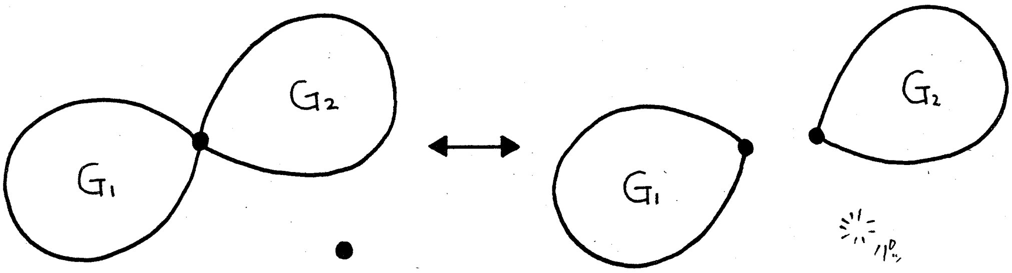

図４．　One-point joinの分解・結合

２つのグラフＧ　，Ｇ　が上の操作Ａ，Ｂ，Ｃを繰り返して互いに移り合えるとき、それらは 2-isomorphic であると言います。特に、G_1, G_2 が連結のときは操作Ｃは必要ありません。操作Ａ，Ｂ，Ｃは　f(Ｇ）を保存するので次の命題が成立します。

命題８．　２つのグラフG_1, G_2 が 2-isomorphic ならば、$f(G_1) = f(G_2)$ 。

現在、この命題の逆が証明できないかと奮闘しているところです。3-連結グラフに 2-isomorphic　なグラフは自分自身しかありませんから、もしその予想が正しければ 3-連結グラフに限れば多項式　f(Ｇ）を調べるだけで２つグラフの同型判定ができることになります。

この予想の根拠の１つとして次の Whitneyの定理が挙げられます。

定理（H. Whitney）２つの連結グラフG_1，G_2 の辺集合間に１対１写像

$$\theta : E(G_1) \rightarrow E(G_2)$$

で両者の cycleどうしの間の１対１対応を誘導するものが存在するならば、それらは 2-isomorphic である。更に、もしG_1 が3-連結ならば、その写像θを介して同型になる。

cycle と cutset の間の双対性により、上の定理は "cycle"を "cutset" で置き換えても成立します。命題５より f(G) には cutset に関する情報が乗せられています。もし $f(G_1) = f(G_2)$ならば、数の上では２つのグラフの cutset 間には１対１対応が存在します。その対応を辺の間の１対１写像に昇格させられるかどうかが問題なのです。それができるなら、

『命題８の逆も正しいだろう。』

と言う予想が証明されたことになるでしょう。

参考までに、頂点数が４以下の単純グラフの f(G) を記しておきます。それは東京工業大学の長田雅和氏の協力を得てコンピューターで計算したものです。そのプログラムは Prolog で書かれています。また、若干、出力形式に難があるので、以下はそれをもとに人間が見て分かりやすいように書き改めたものです。

G	f(G)
•	t
• •	t^2
• •	$tx + t^2 y$
• • •	t^3
• • •	$t^2 x + t^3 y$
• • •	$tx^2 + 2t^2 xy + t^3 y^2$
• • •	$tx^3 + 3tx^2 y + 3t^2 xy^2 + t^3 y^3$
• • • •	t^4
• • • •	$t^3 x + t^4 y$
• • • •	$t^2 x^2 + 2t^3 xy + t^4 y^2$
• • • •	$t^2 x^2 + 2t^3 xy + t^4 y^2$
• • • •	$t^2 x^3 + 3t^2 x^2 y + 3t^3 xy^2 + t^4 y^3$
• • • •	$tx^3 + 3t^2 x^2 y + 3t^3 xy^2 + t^4 y^3$
• • • •	$tx^3 + 3t^2 x^2 y + 3t^3 xy^2 + t^4 y^3$
• • • •	$tx^4 + (3t + t^2)x^3 y + 6t^2 x^2 y^2 + 4t^3 xy^3 + t^4 y^4$
• • • •	$tx^4 + 4tx^3 y + 6t^2 x^2 y^2 + 4t^3 xy^3 + t^4 y^4$
• • • •	$tx^5 + 5tx^4 y + (8t + 2t^2)x^3 y^2 + 10t^2 x^2 y^3 + 5t^3 xy^4 + t^4 y^5$
• • • •	$tx^6 + 6tx^5 y + 15tx^4 y^2 + (16t + 4t^2)x^3 y^3 + 15t^2 x^2 y^4 + 6t^3 xy^5 + t^4 y^6$