グラフに対する構造的平方操作に基づいたグラフ同型問題を解く乱択アルゴリズムの提案

中川 雄希[1,a)]　神保 秀司[1,b)]

概要：グラフ同型判定問題は，重要でありながら，それが NP 完全であることもそれを解く多項式時間アルゴリズムの存在も示されていない．本報告では，点及び辺にラベルが付いた完全グラフに対する構造的平方と呼ぶ操作とラベル付きグラフが変化しなくなるまで構造的平方を適用して得られる極細分と呼ぶラベル付き完全グラフを定義し，それらに基づいたグラフ同型判定問題を解く乱択アルゴリズムを提案する．構造的平方は，グラフの隣接行列の二乗の演算を拡張した概念である．現在計算機実験により性能評価をしている段階である．理論面では，単純無向グラフに対する新しい制約の下での多項式時間乱択アルゴリズムの開発を検討している．

キーワード：グラフ同型判定問題，乱択アルゴリズム，計算機実験，構造的平方，極細分

A proposal of a randomized algorithm for the graph isomorphism based on the structural square of a graph

Keywords: the graph isomorphism problem, randomized algorithms, computer simulation, structural square, ultimate refinement

1. はじめに

与えられた 2 つのグラフが同型であるか否かを判定する問題をグラフ同型判定問題と呼ぶ．グラフ同型判定問題は NP 完全ではないと強く予想され，その有力な根拠が見付かっているが [10]，多項式時間で計算可能であるか否かは現時点で未解決である．現在知られているグラフ同型判定問題の最悪計算量は，グラフの点の個数を n で表したとき $\exp\left(n^{1/2}\right)$ である [3]．

入力対象となるグラフのクラスを制限した場合のグラフ同型判定問題の計算量について多数の研究があり，重要なグラフのクラスについて多項式時間アルゴリズムの存在が証明されている．例えば，対象とするグラフが木や平面的グラフの場合である [1][7]．さらに，次数が有界なグラフや隣接行列の固有値の多重度が有界なグラフのクラスに対してもグラフ同型判定問題を解く多項式時間アルゴリズムが得られている [8][2]．

また，グラフの構造によって特徴付けられる指標，すなわち，点集合に対する置換操作についての不変量に関する研究も行われている．例えば Balaban の J 指標, Wienner 指標 などが知られている．しかし，現時点でグラフ同型判定問題を解く多項式時間アルゴリズムが知られていないことから明らかなように，既存研究において提案されている指標の中に同一の指標をもつ 2 つの非同型のグラフの組が存在しない (その指標でグラフが完全に識別可能である) ことが理論的に証明されているものは存在しない．しかしながら，大量のグラフについての同型判定処理については，不完全であっても高い識別能力をもつ指標の利用は，実用上有用であると考えられる．最近では，Emms らによってグローバー遷移行列に基づいて得られる行列の固有値の多重集合 (固有値集合) による指標が提案されている [6]．Emms らはグローバー遷移行列や，そこから非負値のみを

1　岡山大学
Okayama University, Kita-ku, Okayama-shi, Okayama 700–8530, Japan
†1　現在，情報処理大学
Presently with Johoshori Uniersity
a)　en422634@s.okayama-u.ac.jp
b)　jimbo-s@okayama-u.ac.jp

取り出した正値化行列の固有値集合を調べ，強正則グラフがグローバー遷移行列の3乗の正値化行列の固有値集合だけで識別可能であるという予想を提案した．実際，既知の64個以下の点からなる強正則グラフ G すべてについて，G と同型でない同次数の強正則グラフ H で G と Emms の指標が等しいものが存在しないことが計算機を使った実験で検証されている．しかしながら，13個の点からなる同次数の同型でない2つの正則グラフで等しい Emms の指標をもつ例が Emms らにより示されている．さらに，Dehmer らによって既存の指標を組合せて識別能力を向上させる試みが為されている [5]．この研究では小規模な単純グラフを対象として少数の既存の指標を組合せてその識別能力を調べている．

本報告では，グラフ同型判定アルゴリズム設計の補助手段として点及び辺にラベルが付いた完全グラフに対する構造的平方と呼ぶ操作とラベル付きグラフが変化しなくなるまで構造的平方を適用して得られる極細分と呼ぶラベル付き完全グラフを定義し，それらを応用したグラフ同型判定問題を解く乱択アルゴリズム及びグラフを識別するための指標を提案する．構造的平方の操作は，グラフの隣接行列の二乗の演算を拡張した形になっている．現在計算機実験により性能評価をしている段階である．理論面では，単純無向グラフに対する極細分に基づいた新しい制約の下での多項式時間乱択アルゴリズムの開発を検討している．

本報告の構成は，次の通りである．次節では，本報告で使われる用語，表記法，及び原理のうち本報告固有のもの及び重要なものについて述べる．第3節では，本報告で提案するアルゴリズムの設計の原理であるラベル付き完全グラフに対する構造的平方の操作及びそれに基づいて定義する極細分の概念，並びに，ラベル付き完全グラフの点の辺ラベル繰り込み除去と呼ぶ操作について述べる．第4節では，第3節で述べた概念と原理を使ってグラフ同型判定問題を解く再帰的乱択アルゴリズムを提案し，さらにグラフを識別するための指標を提案する．第5節では，本論をまとめ，今後の課題について述べる．

2. 準備

本節では，本報告で使われる用語，表記法，及び原理のうち本報告固有のもの及び重要なものについて述べる．グラフ理論の用語や表記法のうち一般的なものについては，割愛する．

単にグラフというときは，無向単純グラフを表す．正則グラフとは，すべての点の次数が等しいグラフであり，正規グラフとも呼ぶ．各点の次数が d である正則グラフを d 正則グラフと呼ぶ．例えば，n 個の点からなる完全グラフは，$n-1$ 正則グラフである．正則グラフのうち次の条件を満たすもの $G=(V,E)$ は，4つのパラメータの組 (n,k,λ,μ) をもつ**強正則グラフ**と呼ぶ．

- G は n 個の点からなる．すなわち，$|V|=n$ を満たす．
- G の各点の次数は k である．すなわち，G は k 正則グラフである．
- G の任意の2点 v と w について，v と w を結ぶ辺が存在すれば，v と w どちらにも隣接している点が丁度 λ 個存在する．
- G の任意の2点 v と w について，v と w を結ぶ辺が存在しなければ，v と w どちらにも隣接している点が丁度 μ 個存在する．

すべての点と辺に非負整数のラベルが付いた完全グラフを，本報告では，**点辺ラベル付き完全グラフ**と呼ぶ．n 個の点からなるグラフ $G=(V,E)$ は，同じ点集合をもつ完全グラフ K_n の部分グラフと見做せる．K_n のすべての点にラベル0を割り当て，K_n の辺のうち G の辺であるものには1を，G の辺でないものには0を割り当てることにより点辺ラベル付き完全グラフが得られる．この写像は，すべてのグラフからなる集合からすべての点辺ラベル付き完全グラフからなる集合への単射である．このようにして，グラフを点辺ラベル付き完全グラフと見做すことができる．本報告で提案するグラフ同型判定アルゴリズムは，点辺ラベル付き完全グラフに対する同型判定アルゴリズムである．

グラフ G は，0または1を成分とし対角成分がすべて0である対称行列 $A(G)$ として一意に表現でき，この行列 $A(G)$ を G の**隣接行列**と呼ぶ．点辺ラベル付き完全グラフについても隣接行列が定義でき，その場合対角成分は点ラベルであり，非対角成分は辺ラベルである．本報告では，特に混乱が生じないと考えられるときは，グラフとその隣接行列を同一視してよいことにする．2つの点辺ラベル付き完全グラフ G と H が同型であることは，

$$A(H)=P^{\mathrm{T}}A(G)P=P^{-1}A(G)P \qquad (1)$$

を満たす置換行列 (各行各列に丁度一つ値が1である成分が存在し，かつ，残りの成分がすべて0である行列) P が存在することと同値である．この文書では，一般に行列 M の転置を M^{T} で表し，M の逆行列が存在すれば，それを M^{-1} で表す．任意の置換行列 P について $P^{\mathrm{T}}=P^{-1}$ が成り立つことが知られている．

3. 構造的平方と極細分

本節では，本報告で提案するアルゴリズム設計の原理である点辺ラベル付き完全グラフに対する構造的平方の操作及びそれに基づいて定義する極細分の概念，並びに，ラベル付き完全グラフに対する点の辺ラベル繰り込み除去と呼ぶ操作について述べる．

n 個の点からなる点辺ラベル付き完全グラフに対する**構造的平方**を非負整数を成分とする $n\times n$ 対称行列 $M=(a_{i,j})$ に対して非負整数を成分とする $n\times n$ 対称行列

$\sigma(M) = (c_{i,j})$ を求める操作として次のように定義する．構造的平方の用語は，同一の対称行列の二乗 (平方) に類似した操作によって構造的平方の行列の成分を求めることから命名した．具体的な操作は，n 個の点からなる点辺ラベル付き完全グラフ G の各点および各辺について他の点や辺の見え方の情報に基づいて区別できるものに異なるラベルを付け直すことである．

点 i については，i のラベルと
　i 以外の点 j のラベルと i と j を結ぶ辺のラベル
　の組 $(a_{j,j}, a_{i,j})$ の昇順列
の組

$$l_M(i) = (a_{i,i}, \mathrm{sort}((a_{1,1}, a_{i,1}), (a_{2,2}, a_{i,2}), \ldots, (a_{i-1,i-1}, a_{i,i-1}), (a_{i+1,i+1}, a_{i,i+1}), \ldots, (a_{n,n}, a_{i,n})))$$

を点の識別のための指標とする．ただし，$\mathrm{sort}(L)$ は，列 L の要素を昇順に並べ替える関数である．辺 $\{i, j\}$ $(i \neq j)$ については，2 つの昇順列

$$m_i(i,j) = \mathrm{sort}((a_{k(1),k(1)}, a_{i,k(1)}, a_{j,k(1)}), \ldots, (a_{k(n-2),k(n-2)}, a_{i,k(n-2)}, a_{j,k(n-2)}))$$

及び

$$m_j(i,j) = \mathrm{sort}((a_{k(1),k(1)}, a_{j,k(1)}, a_{i,k(1)}), \ldots, (a_{k(n-2),k(n-2)}, a_{j,k(n-2)}, a_{i,k(n-2)}))$$

を使って識別のための指標

$$m_M(i,j) = \min\{(a_{i,j}, a_{i,i}, a_{j,j}, m_i(i,j)), (a_{i,j}, a_{j,j}, a_{i,i}, m_j(i,j))\}$$

を作る．ただし，$(k(1), k(2), \ldots, k(n-2))$ は，i でも j でもない $n-2$ 個の点を成分とする長さ $n-2$ の列である．例えば，$A(G) = (a_{i,j})$ において $a_{k,k} = a_{l,l}$ であっても，$l(k) \neq l(l)$ であれば，G の構造的平方 $\sigma(A(G)) = (b_{i,j})$ においては，$b_{k,k} \neq b_{l,l}$ となる．同様に，$A(G) = (a_{i,j})$ において $a_{p,q} = a_{r,s}$ であっても，$m(p,q) \neq m(r,s)$ であれば，G の構造的平方 $\sigma(A(G)) = (b_{i,j})$ においては，$b_{p,q} \neq b_{r,s}$ となる．

M の構造的平方の正確な定義のために，$n \times n$ 対称行列 $M' = (b_{i,j})$ を
　M' の任意の対角成分は $b_{i,i} = l_M(i)$ であり，M'
　の任意の非対角成分は $b_{i,j} = m_M(i,j)$ である
として定義する．

次に，M' の異なる対角成分すべてからなる集合に順序を導入して全順序集合を S 定義し，同様に，M' の異なる非対角成分すべてからなる集合に順序を導入して全順序集合 T を定義する．以下，全順序集合 X に対してその全順序を $\leqq_X$ で表し，等号を含まない全順序を $<_X$ で表す．すなわち，$a <_X b$ は，$a \neq b$ かつ $a \leqq_X b$ と同値である．等号を含まない全順序 $<_S$ 及び $<_T$ は，列構造に再帰的に辞書式順序を適用することにより定義する．例えば，単純な数列の辞書式順序を $\prec$ で表せば，$(a, (u_1, \ldots, u_{n-1})) \in S$，$(b, (v_1, \ldots, v_{n-1})) \in S$ のとき，

$$(a, (u_1, \ldots, u_{n-1})) <_S (b, (v_1, \ldots, v_{n-1}))$$

であることは，

$$a < b, \quad \text{または}$$
$$(a = b \ \text{かつ}\ (u_1, \ldots, u_{n-1}) \prec (v_1, \ldots, v_{n-1}))$$

と同値であり，

$$(a, u_1, \ldots, u_{n-1}) \prec (b, v_1, \ldots, v_{n-1})$$

と同値である．全順序集合 T についても同様である．さらに，全順序集合 X における各要素 $x \in X$ の順位 $\nu_X(x)$ を

$$\nu_X(x) = |\{y \in S \mid y <_X x\}|$$

により定義する．すなわち，x は X の中の小さい方から $\nu_X(x) + 1$ 番目に小さい要素である．$n \times n$ 対称行列 $\sigma(M) = (c_{i,j})$ は，M' の各対角成分 $b_{i,i}$ を $c_{i,i} = \nu_S(b_{i,i})$ に置き換え，さらに，各非対角成分 $b_{i,j}$ を $c_{i,j} = \nu_T(b_{i,j})$ に置き換えることにより得られる．構造的平方の定義より，次の命題が容易に導かれる．

命題 1　任意の n 次非負整数対称行列 M について，その構造的平方 $\sigma(M)$ の対角成分の値は n 未満であり，非対角成分の値は $\binom{n}{2}$ 未満である．

さらに，次の命題が成り立つ．

命題 2　サイズが等しい非負整数対称行列 M の対角成分の最大値を m とし，非対角成分の最大値を n とする．もし，M の対角成分に $0, 1, 2, \ldots, m$ がすべて現れ，かつ，M の非対角成分に $0, 1, 2, \ldots, n$ がすべて現れるならば，M の各成分 $a_{i,j}$ で，$\sigma(M)$ の各成分を $b_{i,j}$ で表したとき，

$$b_{i,j} \geqq a_{i,j}$$

が成り立つ．

系 3　任意の非負整数対称行列 M について，$\sigma(M)$ の各成分を $a_{i,j}$ で，$\sigma(\sigma(M))$ の各成分を $b_{i,j}$ で表したとき，

$$b_{i,j} \geqq a_{i,j}$$

が成り立つ．

一般に有限集合 S の集合族 $\mathcal{X} = \{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ が

$$\forall i, \forall j, X_i \cap X_j = \varnothing, \quad \text{かつ}, \quad \bigcup_{i=1}^{n} X_i = S$$

を満たすとき $\mathcal{X}$ は S の**分割**であるという．分割 $\mathcal{X}$ のサイズ (部分集合の個数) が n であるとき，$\mathcal{X}$ は n 分割で

あるという．有限集合 X を定義域とする写像 $f : X \to Y$ から X の分割

$$f^{\mathrm{par}}(X) = \{\{x \in X \mid f(x) = y\} \mid y \in f(X)\}$$

が得られる．ただし，$f(X)$ は写像 f の値域 $\{f(x) \mid x \in X\}$ を表す．有限集合 S の 2 つの分割 $\mathcal{X} = \{X_1, X_2, \ldots, X_m\}$ 及び $\mathcal{Y} = \{Y_1, Y_2, \ldots, Y_n\}$ に対して，$n \geqq m$ かつ $\mathcal{Y}$ の m 分割 $\mathcal{Z} = \{Z(1), Z(2), \ldots, Z(m)\}$ が存在して，各 X_i について $X_i = \bigcup_{W \in Z(i)} W$ が成り立つとき，$\mathcal{Y}$ は $\mathcal{X}$ の**細分**であるという．特に，$m = n$ であるとき $\mathcal{Y}$ は $\mathcal{X}$ の**自明な細分**であるという．

定理 4 任意の非負整数対称行列 $M = (a_{i,j})$ について，M 及び $\sigma(M) = (c_{i,j})$ がどちらも集合 $[n] \times [n] = \{1, 2, \ldots, n\} \times \{1, 2, \ldots, n\}$ を定義域とする写像と見做し，それぞれ $f(i, j)$ 及び $g(i, j)$ で表す．f 及び g の定義域を $D_n = \{(1, 1), (2, 2), \ldots, (n, n)\}$ に制限して得られる写像を，それぞれ f_1 及び g_1 で表し，$[n] \times [n] - D_n$ に制限して得られる写像を，それぞれ f_2 及び g_2 で表す．
このとき，D_n の分割 g_1^{par} 及び $[n] \times [n] - D_n$ の分割 g_2^{par} は，それぞれ D_n の 分割 f_1^{par} 及び $[n] \times [n] - D_n$ の分割 f_2^{par} の細分である．

証明． M の構造的平方 $\sigma(M)$ の定義において M' の部分集合になっている 2 つの全順序 S と T の定義より明らかである． □

定理 5 任意の $n \times n$ 非負整数対称行列 M と $n \times n$ 置換行列 P について，

$$\sigma(P^{\mathrm{T}} M P) = P^{\mathrm{T}} \sigma(M) P$$

が成り立つ．

証明． 省略． □

定理 5 より，任意の非負整数対称行列 A と B について，A と B が同型であるならば $\sigma(A)$ と $\sigma(B)$ が同型であるという命題が導かれる．従って，$\sigma(A)$ と $\sigma(B)$ が同型でないならば，A と B も同型でない．

定理 4 及び 定理 5 より次の定理が導かれる．

定理 6 G 及び H はどちらも n 個の点からなる点辺ラベル付き完全グラフであり，それらの点ラベル多重集合 (要素数は n に等しい) と辺ラベル多重集合 (要素数は $\binom{n}{2}$ に等しい) の組が等しいとする．このとき，
G 及び H の構造的平方 $\sigma(G)$ 及び $\sigma(H)$ が点辺ラベル付き完全グラフとして同型である
ことは，
G と H が点辺ラベル付き完全グラフとして同型であるための必要十分条件である．

非負整数対称行列 M に対する操作 σ の k 回の繰り返しを

$$\sigma^k(M) = \overbrace{\sigma(\sigma(\cdots\sigma}^{k}(M)\cdots))$$

で表す．命題 1，2，及び 系 3 より，任意の非負整数対称行列 M について非負整数 k が存在して

$$\sigma^k(M) = \sigma^{k+1}(M)$$

が成り立つ．このとき，$\sigma^k(M)$ を M の**極細分**と呼び $\sigma^{\infty}(M)$ で表す．また，対称行列 M がそれ自身の極細分であるとき M は**極細分行列**である，あるいは，単に極細分であるという．命題 1，2，及び 系 3 より，

$$\sigma^k(M) = \sigma^{\infty}(M)$$

を満たす k は，任意の n 次非負整数対称行列 M について $\binom{n}{2} + n$ 以下である．

グラフの次数と次数列の概念を次のように拡張する．グラフの点 v について v の次数 $\deg(v)$ は，v の周りにどのように辺が接続しているかを表している．グラフの各辺 vw に辺ラベル $l(vw)$ 付いていれば，v に接続している辺のラベルを昇順に並べた列

$$(l(vw_1), l(vw_2), \ldots, l(vw_n))$$

が v の次数を拡張した概念になっている．この列を**接続辺ラベル列**と呼び $\deg^+(v)$ で表す．さらに，すべての点 v について点 v ラベル $m(v)$ と v の接続辺ラベル列 $\deg^+(v)$ の順序対 $(m(v), \deg^+(v))$ をつくり，それらを辞書式順序に関して昇順に並べた列

$$((m(v_1), \deg^+(v_1)), (m(v_2), \deg^+(v_2)), \\ \ldots, (m(v_n), \deg^+(v_n)))$$

を**点ラベル接続辺ラベル列対列**と呼ぶことにする．点ラベル接続辺ラベル列対列は，グラフの次数列を拡張した概念と見做せる．次の定理が容易に導かれる．

定理 7 任意の点辺ラベル付き完全グラフ G の極細分 $\sigma^{\infty}(G)$ の任意の異なる 2 つの点 v と w の点ラベルが等しいならば，それらの接続辺ラベル列も等しい ($\deg^+(v) = \deg^+(w)$ が成り立つ)．
さらに定理 6 より次の定理が導かれる．

定理 8 G 及び H はどちらも n 個の点からなる点辺ラベル付き完全グラフであり，それらの点ラベル多重集合 (要素数は n に等しい) と辺ラベル多重集合 (要素数は $\binom{n}{2}$ に等しい) の組が等しいとする．このとき，それらの隣接行列の極細分 $\sigma^{\infty}(A(G))$ と $\sigma^{\infty}(A(H))$ が置換同型であることは，G と H が同型であるための必要十分条件である．

系 9 G 及び H はどちらも単純グラフであり，辺の本数が等しいとする．このとき，それらの隣接行列の極細分 $\sigma^{\infty}(A(G))$ と $\sigma^{\infty}(A(H))$ が置換同型であることは，G と H が同型であるための必要十分条件である．

以下，M は，n 次非負整数対称行列であるとする．一般に行列 M の行列式を $\det(M)$ で表す．さらに，M の成

分の非負整数 i を変数 x_{i+1} に置き換えてできる行列 (多変数行列値関数) を $x(M)$ で表し M の**変数化行列**と呼ぶ．行列式 $\det((a_{i,j}))$ の定義

$$\sum_{\rho} \mathrm{sgn}(\rho) a_{1,\rho(1)} a_{2,\rho(2)} \cdots a_{n,\rho(n)} \qquad (2)$$

より，$\det(x(M))$ は，n 次の多変数斉次多項式である．また，M の対角成分の非負整数 $a_{i,i}$ を x を変数とする一次式 $a_{i,i} - x$ に置き換えてできる行列 $M - xI$ の行列式 $\det(M - xI)$ は，M の固有多項式の $(-1)^n$ 倍であり，M の固有値の組合せを決定する．$\det(M - xI)$ は，n 次多項式であり，$n+1$ 個の異なる変数値に対する関数値の組合せで決定する．長さ $n+1$ の整数列 $(\det(M), \det(M-I), \det(M-2I), \ldots, \det(M-nI))$ を M の**固有値指標**と呼ぶことにする．次の 2 つの定理が成り立つ．証明は，省略する．

定理 10 n 個の点からなる任意の 2 つの点辺ラベル付き完全グラフ G と H について，

$$\det(x(\sigma^\infty(A(G)))) \neq \det(x(\sigma^\infty(A(H))))$$

ならば，G と H は同型でない．ただし，上式は，両辺が多項式として異なることを表す．

定理 11 G と H は，n 個の点からなる点辺ラベル付き完全グラフであるとし，それらの固有値指標をそれぞれ $\lambda(G)$ と $\lambda(H)$ で表す．このとき，

$$\lambda(G) \neq \lambda(H)$$

ならば G と H は同型でない．ただし，上式は，両辺が列として異なることを表す．

これらの定理がグラフの識別のために有効であるのは，対象とするグラフの極細分のラベルの種類が多い場合である．空グラフ (辺を全くもたないグラフ) でも完全グラフでもないグラフは，点ラベルと辺ラベルを区別するので丁度 3 つのラベルをもつ．極細分によってラベルの種類が増えることが望ましい．しかしながら，ある程度以上の個数の点をもつ強正則グラフの多くに対してグラフの隣接行列自体が極細分になっていることが判明している．

現在，64 個以下の点をもつ強正則グラフがすべて発見されている [9][4]．例えば，$(35, 18, 9, 9)$ のパラメータをもつ強正則グラフが 3854 個存在することが知られている．強正則グラフの定義から，異なる任意の 2 点 v と w について v と w 以外の点のうち v と w の両方に隣接しているものの個数は丁度 9 個でなければならないが，v とだけ隣接しているものの個数や w とだけ隣接しているものの個数やどちらとも隣接していないものの個数についての制約はない．しかしながら，3854 個のグラフすべてについてこれらの個数がすべて 8 であることが確認できる．さらに，3854 個のグラフすべてについてそのグラフと固有値指標が等しい同型でないグラフの存在が確認できる．現時点で完全に確認していないが，現在発見されている強正則グラフについて，同一のパラメータをもつ複数の強正則グラフが存在する殆どの場合，それらの強正則グラフの極細分が自分自身であることを確認している．

上記のように構造的平方では十分に特徴を抽出できない場合があるので，構造的立方と呼べる異なる 3 個の点から他の $n-3$ 個の点を見たときの見え方に相当するもので特徴を抽出することも考えられる．n 個の点からなるグラフに対して $0 \leq i < j < k < n$ を満たす 3 つの整数 (点) の $n(n-1)(n-2)/6$ 通りの組合せ C すべてについて 0 または 1 とする n 個の 3 次元ベクトルを昇順に並べた列を i, j, k の順列 P に対応して 6 通り作り，それらの列の先頭に順列 P の点のラベル 3 個の並びを連接する．このようにして各 C について得られる 6 通りの列のうち辞書式順序で最小のものを C に対する特徴量 $v(C)$ として C に属する各点及び C に属する各 2 点の組に割り当てる．このような方針は，実用上の処理を著しく困難にすることが懸念される．

本報告では，構造的平方で十分に特徴を抽出できない場合の対策として，点辺ラベル付き完全グラフ G とその点 $v \in V(G)$ について，点 v に接続している辺の情報を残しながら点 v を除去して点辺ラベル付き完全グラフ $r(G, v)$ を得る操作を次のように定義する．この操作を点辺ラベル付き完全グラフ G に対する点 v の**辺ラベル繰り込み除去**と呼び，この操作を施すことを**隣接点に辺ラベルを繰り込みながら**点 v を G から除去するという．

- $V(r(G, v)) = V(G) - \{v\}$ である．
- 任意の $r(G, v)$ の 2 点 x, y について $r(G, v)$ における辺 xy のラベルは，G における辺 xy のラベルに等しい．
- G における各点 z のラベルを $l(z)$ で表し，各辺 xy のラベルを $l(xy)$ で表す．さらに，G のすべての点ラベルからなる集合を L で，G のすべての辺ラベルからなる集合を M で表す．任意の $r(G, v)$ の点 w について，$r(G, v)$ における点 w のラベルは，

$$|\{y \in L \times M \mid (\exists x \in V)(y = (l(x), l(xv)), \\ \text{かつ，} y \prec (l(w), l(wv)))\}|$$

である．ただし，上の式における記号 $\prec$ は，辞書式順序において左辺が右辺よりも真に小さいことを表している．

上の定義より $r(G, v)$ の点ラベルによる点集合の分割は，G の点ラベルによる点集合の分割の細分になっていることが分かる．さらに，次の定理が成り立つ．

定理 12 点辺ラベル付き完全グラフ G 及び H，並びにそれらの点 $v \in V(G)$ 及び $w \in V(H)$ が与えられたとき，点辺ラベル付き完全グラフ $r(G, v)$ と $r(H, w)$ が同型であ

ることは，v を w に対応させる $V(G)$ から $V(H)$ への同型対応が存在するための必要十分条件である．

2 つの対称行列 M と N の変数化行列 の行列式 $\det(x(M))$ と $\det(x(N))$ で作られる多項式が同一か否かは，各変数に乱数を代入して得られる関数値を比較することにより実用上高確率で正しい判定結果が得られることが期待できる．行列式 $\det((a_{i,j}))$ の定義 (2) よりこれらの多項式の項数は高々 $n!$ であり，このような形の 2 つの異なる多項式の値が一致する変数値の組合せの数は高々 $n!$ である．一方，変数の個数が n 程度であれば，例えば 2^{16} 未満の非負整数から各変数の値を一様分布に従ってランダムに選べば 2^{16n} 程度の変数値の組合せから変数値の組合せを選ぶことになる．現在対象にしているグラフの点数は，大きくても $n = 2^{10}$ 程度なので $n! < en^{n+(1/2)}e^{-n} < 2^{10n}$ が成り立ち，従って $\det(x(M))$ と $\det(x(N))$ が異なるにも拘わらずランダムに選んだ変数値の組合せ $(x_1, x_2, \ldots, x_k)$ に対して

$$\det(x(M))(x_1, x_2, \ldots, x_k) = \det(x(N))(x_1, x_2, \ldots, x_k)$$

が成り立つ確率は，2^{6n} よりも小さい．ただし，行列式の値を多倍長計算により正確に求めるのは，実用上時間が掛かるので，変数値を十分に大きい素数 p によって決まる有限体 $\mathbb{Z}_p = \mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ から選んで計算することが望ましいと考える．例えば，C 言語のコンパイラ GCC を使えば 32 ビット長の非負整数同士の乗算結果を正確に格納できる 64 ビット長の非負整数型を処理できるので，2^{32} 未満のなるべく大きい素数を使うことが望ましい．2^{32} 未満の最大素数は $2^{32} - 5$ であり，その次に大きい素数は $2^{32} - 17$ である．2 つの異なる多項式 $\det(x(M))$ と $\det(x(N))$ の各変数が $\mathbb{Z}_p$ の値を取るときに関数値が一致する変数値の組合せの個数については，現在調査中である．

4. 確率的同型判定アルゴリズムの設計

本節では，前節で述べた概念と原理を使ってグラフ同型判定問題を解く再帰的乱択アルゴリズムを設計し，さらにグラフを識別するための指標を提案する．

定理 12 に基づいて次の点辺ラベル付きグラフ G と H に対する確率的再帰的同型判定アルゴリズム LISO を提案する．予め再帰終了のための定数 $n_{\min}$ 及び確率的判定のための試行回数を表す定数 τ を定める．例えば，$i_{\min} = 4$, $\tau = 3$ とする．

LISO(G, H)
1. $|V(G_i)| \leqq i_{\min}$ ならば，直接 H と G が同型であるか否かを判定して終了する．
2. そうでなければ，G と H の点ラベル接続辺ラベル列対列を比較し，異なれば，「G と H は同型でない」という答を返して終了する．
3. そうでなければ，$G' = \sigma^\infty(G)$，$H' = \sigma^\infty(H)$ とおく．
4. ランダムに変数値を与えて $\det(x(A(G'))) = \det(x(A(H')))$ が成り立つか否かを τ 回調べる．1 回でも成り立たなければ，「G と H は同型でない」という答を返して終了する．
5. 最小のラベルをもつ G' の点 v を任意に 1 つ選び，v のラベルと同じラベルをもつ H' の点を $w_1, w_2, \ldots, w_k$ とする．
6. LISO$(r(G, v), r(H, w_1))$, LISO$(r(G, v), r(H, w_2))$, $\ldots$, LISO$(r(G, v), r(H, w_k))$ の中に「引数の 2 つのグラフが同型である」という答を返すものがあれば「G と H は同型である」という答を返して終了し，そうでなければ「G と H は同型でない」という答を返して終了する．

アルゴリズム LISO が 2 つの点辺ラベル付き完全グラフの同型判定の正解を常に返すことは，明らかである．計算の効率については，前節に書いたように強正則グラフのように極細分の変数化行列の行列式が識別できない行列が存在するが，点の辺ラベル繰り込み除去によりこのような悪い性質が消えることを予想している．すなわち，2 つの点辺ラベル付き完全グラフ G と H が同型でなければ，比較的少ない対応点を辺ラベルを繰り込みながら除去して $\tilde{G}$ と $\tilde{H}$ を作ることにより

$$\det(x(\sigma^\infty(A(\tilde{G})))) \neq \det(x(\sigma^\infty(A(\tilde{H}))))$$

が成り立つようになることを予想している．そうであれば，アルゴリズム LISO の計算の木の幅があまり増えず LISO の実行時間は小さい．詳しくは，次の予想を提案する．

予想 1 アルゴリズム LISO のステップ 3. における $\det(x(A(G'))) = \det(x(A(H')))$ が成り立つか否かの判定がすべて正しいと仮定すれば，どのような入力についても LISO の計算の木のサイズは，入力グラフの点の個数の多項式オーダーである．

さらに，点辺ラベル付き完全グラフの点の辺ラベル繰り込み除去の操作に基づいた点辺ラベル付き完全グラフの識別のための指標として

点辺完全グラフ G の極細分の固有値指標と G のすべての点 v に対する $r(G, v)$ の極細分の固有値指標の昇順列の組

を提案する．

5. おわりに

本報告では，点及び辺にラベルが付いた完全グラフに対する構造的平方と呼ぶ操作とラベル付きグラフが変化しなくなるまで構造的平方を適用して得られる極細分と呼ぶラベル付き完全グラフを定義し，それらに基づいたグラフ同型判定問題を解く再帰的乱択アルゴリズムを提案した．構造的平方と極細分は，各点および各辺について他の点や辺

の見え方の情報に基づいた区別を徹底することを目標にしている．さらに，点辺ラベル付き完全グラフに対する点の辺ラベル繰り込み除去の操作を導入し，極細分の変数化行列の行列式で定義される多項式の相違を乱数を使って確率的に判定することにより再帰的乱択アルゴリズムを設計した．また，点辺ラベル付き完全グラフの点の辺ラベル繰り込み除去の操作が強正則グラフに対して対称性を崩す点に着目してグラフの識別のための指標を設計し提案した．

本報告執筆時点では，計算機による十分な検証実験が為されていないが，研究会では，その時点までの検証実験の結果を報告する．特に，点の個数と次数が大きい正則グラフに対する十分な検証が必要であると考える．

また，提案アルゴリズム及びその周辺の理論についての理論面での十分な検討が望ましい．当面の課題の一つとして，第 3 節で述べたように極細分の変数化行列の行列式の多項式が 2 つあり，それらが異なる場合に，関数値が一致する変数値の組合せがどの程度存在するかの解明が挙げられる．この個数は，グラフの点の個数を n としたときの自明な上界である $n!$ よりもかなり小さいのではないかと予想している．課題のもう一つとして，次の予想の証明を挙げる．この予想は，有界な次数のグラフのクラスに対する多項式時間同型判定アルゴリズムの存在の証明 [8] に類似した議論により証明できることを期待している．

予想 2 c を正整数とし，グラフのクラス $S(c)$ は，次の条件を満たすグラフ G すべてから成り立っているとする．
$\sigma^{\infty}(A(G))$ のどの行についても，その行に含まれる同一成分数は，高々 c である．
このとき，$S(c)$ に属するグラフに対する多項式時間同型判定アルゴリズムが存在する．

参考文献

[1] A.V. Aho, J.E. Hopcroft, and J.D. Ullman. *The design and analysis of computer algorithms*. Addison-Wesley series in computer science and information processing. Addison-Wesley Pub. Co., 1974.
[2] László Babai, D Yu Grigoryev, and David M Mount. Isomorphism of graphs with bounded eigenvalue multiplicity. In *Proceedings of the fourteenth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 310–324. ACM, 1982.
[3] László Babai and Eugene M Luks. Canonical labeling of graphs. In *Proceedings of the fifteenth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 171–183. ACM, 1983.
[4] Kris Coolsaet, Jan Degraer, and Edward Spence. The Strongly Regular (45,12,3,3) Graphs. *Electronic Journal of Combinatorics*, Vol. 13, No. R32, p. 1, 2006.
[5] Matthias Dehmer, Martin Grabner, Abbe Mowshowitz, and Frank Emmert-Streib. An efficient heuristic approach to detecting graph isomorphism based on combinations of highly discriminating invariants. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 39, No. 2, pp. 311–325, 2013.
[6] David Emms, Edwin R Hancock, Simone Severini, and Richard C Wilson. A matrix representation of graphs and its spectrum as a graph invariant. *Electr. J. Comb*, Vol. 13, No. 1, 2006.
[7] John E Hopcroft and Jin-Kue Wong. Linear time algorithm for isomorphism of planar graphs (preliminary report). In *Proceedings of the sixth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 172–184. ACM, 1974.
[8] Eugene M Luks. Isomorphism of graphs of bounded valence can be tested in polynomial time. In *Foundations of Computer Science, 1980., 21st Annual Symposium on*, pp. 42–49. IEEE, 1980.
[9] Brendan D McKay and Edward Spence. Classification of regular two-graphs on 36 and 38 vertices. *Australasian Journal of Combinatorics*, Vol. 24, pp. 293–300, 2001.
[10] 戸田誠之助. グラフ同型性判定問題の計算量. 電子情報通信学会論文誌 D, Vol. 85, No. 2, pp. 100–115, 2002.

正誤表

- 第 1 ページ左側下欄外:

(訂正内容) 下の箇所を削除

†1 現在，情報処理大学
Presently with Johoshori Uniersity

- 第 1 ページ左側下から 6 行目:

(誤) 問題の最悪計算量 $\rightarrow$ (正) 問題の最悪時間計算量

- 第 1 ページ左側下から 5 行目:

(誤) $\exp\left(n^{1/2}\right)$ $\rightarrow$ (正) $\exp\left(n^{1/2+o(1)}\right)$

- 第 3 ページ左側下から 15 行目:

(誤) $l(k) \neq l(l)$ $\rightarrow$ (正) $l_M(k) \neq l_M(l)$

- 第 3 ページ左側下から 13 行目:

(誤) $m(p,q) \neq m(r,s)$ $\rightarrow$ (正) $m_M(p,q) \neq m_M(r,s)$

- 第 3 ページ右側上から 15 行目:

(誤) $\nu_X(x) = |\{y \in S \mid y <_X x\}|$
$\rightarrow$ (正) $\nu_X(x) = |\{y \in X \mid y <_X x\}|$

- 第 4 ページ左側上から 12 行目:

(誤) $\sigma(M) = (c_{i,j})$ がどちらも
$\rightarrow$ (正) $\sigma(M) = (c_{i,j})$ をどちらも

- 第 4 ページ右側上から 19 行目:

(誤) について点 v ラベル $m(v)$
$\rightarrow$ (正) について点 v のラベル $m(v)$

- 第 4 ページ右側下から 13 行目:

(訂正内容) 「次の定理が導かれる.」の直後に段落を変えずに次を挿入

> ただし，同次の 2 つの行列 M と N について，置換行列 P が存在して $M = P^{\mathrm{T}}NP$ が成り立つとき，M と N は**置換同型**であるという.

- 第 5 ページ右側上から 11 行目から 12 行目:

(誤) 0 または 1 とする n 個の 3 次元ベクトル
$\rightarrow$ (正) 辺ラベルを成分とする n 個の 3 次元ベクトル

- 第 6 ページ左側上から 19 行目:

(誤) 2^{6n} よりも小さい. $\rightarrow$ (正) 2^{-6n} よりも小さい.

- 第 6 ページ右側下から 11 行目:

(誤) 点辺完全グラフ G の
$\rightarrow$ (正) 点辺ラベル付き完全グラフ G の