グラフ同型判定における極細分の有効性の検証

中川　雄希†　　神保　秀司††
†岡山大学工学部情報工学科　　††岡山大学大学院自然科学研究科

1. はじめに

2 つのグラフが与えられた時, それらが同型か否かを判定する問題はグラフ同型判定問題と呼ばれる. この問題は NP 完全ではないと予想され, その有力な根拠が示されているものの[1], 未だ証明されていない. 最近ではグラフの構造によって特徴付けられる指標に関する研究も行われ, 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[2]. 本研究では, グラフ同型判定の有力な材料として新たな概念を提案し, その有効性を検証する.

2. 構造的平方と極細分

入力として与えるグラフ G は隣接行列で表現する. 2 つのグラフ G と H が同型であることは,

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

を満たす置換行列 P が存在することと同値である.

非負整数 n 次対称行列 $M = (a_{i,j})$ に対して以下に定義する非負整数 n 次対称行列 $\sigma(M) = (c_{i,j})$ を求める操作を構造的平方と呼ぶことにする. この操作では, n 個の点からなるグラフ G の各点及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を行う. 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」

$$\begin{aligned} l_M(i) = (a_{i,i}, sort((a_{1,1}, a_{i,1}), (a_{2,2}, a_{i,2}), \\ \dots, (a_{i-1,i-1}, a_{i,i-1}), (a_{i+1,i+1}, a_{i,i+1}), \\ \dots, (a_{n,n}, a_{i,n}))) \end{aligned}$$

を点の識別のための指標とする. ここで, $sort(L)$ 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, 各点から見た辺の組の昇順列 $m_i(i, j)$ と $m_j(i, j)$ を使って得られる

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

を識別のための指標とする. n 次対称行列 $M' = (b_{i,j})$ について, 対角成分が $b_{i,i} = l_M(i)$, 非対角成分が $b_{i,j} = m_M(i, j)$ と定義する. M' の異なる対角成分全てからなる集合と非対角成分全てからなる集合に順序を導入してそれぞれ全順序集合 S, T を定義する. 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. さらに, 全順序集合 X における各要素 $x \in X$ の順位 $\nu_X(x)$ を以下により定義する.

$$\nu_X(x) = |\{ y \in S \mid y <_X x \}| \tag{2}$$

$\sigma(M) = (c_{i,j})$ は, M' の $b_{i,i}$ を $c_{i,i} = \nu_S(b_{i,i})$ に, $b_{i,j}$ を $c_{i,j} = \nu_T(b_{i,j})$ に置き換えることにより得られる. ここで, 非負整数対称行列 M に対する操作 σ を $\sigma^k(M) = \sigma^{k+1}(M)$ が成り立つまで非負整数 k 回繰り返して得られたものを極細分と呼ぶ.

3. 固有値集合による非同型グラフの識別

極細分の有効性を検証するため, 極細分の固有値集合を指標として非同型グラフを識別する実験を行った. 結果は, 小規模な単純グラフにおいて先行研究[2]より高い識別能力を得ることができ, クラスを制限した場合 16 点以下の正則グラフにおいて完全に識別することが可能であった. 図 1 に今回見つかった反例を示す.

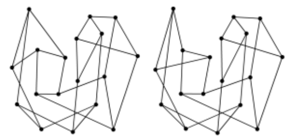

図1. 固有値集合で識別できなかった 18 点 3-正則グラフ

4. まとめ

固有値集合による識別の結果から, 極細分という概念がグラフ同型判定において有効なものであると考えられる. しかし, グラフのクラスによっては識別能力が著しく低下することが判明した. 適用可能なクラスを拡張することが今後の課題であり, 2 点の組合せに着目して定義した構造的平方を 3 点の組合せに着目する形に拡張した構造的立方操作についても検討中である.

参考文献

[1] 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.

[2] 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.