研　究　速　報

UDC 513.83

グラフと隣接行列についての基礎的研究

Fundamental Study of Undirected Graph and Adjacency Matrix

── 隣接行列の最大固有値（Frobenius根）について ──

On Maximum Eigenvalue of Adjacency matrix

原　広　司*・瀬　口　哲　夫**

Hiroshi HARA and Tetsuo SEGUCHI

は じ め に

本研究は，近年建築計画学において応用されるようになったグラフを，その隣接行列から検討しようとする試みである．建築計画学では，ある空間の単位（たとえば部屋）を点で表現し，その連結状態を枝で示すのが，基本であり，すでに様々な成果があがっている（注1）．本研究の発端は，それとは違って，池辺研究室ですすめられている設計方法論において，空間の容態を表現する設計者の言葉を体系化し，設計段階において表現される断片的な言語を，総体的なコンテクストとして明らかにするために，グラフを描いた経緯がある．その後，グラフの構造的な特性をとらえようとする方向が生まれた．

グラフ理論は，現在広汎に応用されつつある(注2)．

グラフの構造特性をとらえる角度は多々ある．それらの中で，グラフの複雑さ，あるいは凝集性といった側面から特性をとらえる方向があり，本報告は，その点についての関心を展開しようとしている．

1. 隣接行列とフロベニウス根

ここでとりあつかうグラフは，無向グラフである．その隣接行列 A（Aの要素を a_{ij} で表わす）は，ごく普通の記述法によって，i 番目の点と j 番目の点が，連結する枝を持てば，$a_{ij}=1$ であり，枝がなければ，$a_{ij}=0$ とする．また $i=j$ なら $a_{ij}=0$，つまりある点は，それ自身には結びついていないとする．従って，(イ)もしグラフが n 個の点からなれば，A は $n\times n$ の正方行列である．(ロ)対角項はすべて0である．(ハ)すべての要素は0または1である．(ニ)Aは対称行列である．隣接行列は以上の著しい特性をもっている．

この行列Aは，非負の要素からなり，もし既約であれば，固有方程式の単純な根となる正の固有値 r を持つ．そして他の固有値の絶対値は r を越えず，しかもこの最大の固有値には，すべての正の成分をもつ固有ベクトルが，その定数倍を除き，ただひとつ対応する（フロベニウスの定理）．グラフに孤立点あるいは孤立した部分があれば，Aは可約になるが，対称行列であるため，この時，固有多項式は，互いに孤立した系 S_1，S_2，……，S_n についてのそれぞれの多項式の積として表わされることに留意する．操作上では，連結したグラフごとに区切って扱えば，その隣接行列は，正の最大固有値とこれに対応する固有ベクトルを持つ（また対称行列であるから，全ての根が実数であることもなにかと明快である）．これらがグラフの形態の特性をどれほど示すかを見定めることが課題である．

* 東京大学生産技術研究所第5部
** 名古屋大学

2. コンピューターによる計算と四つの基本パターン

検討の方法は単純で，様々なグラフについて，コンピューターによって固有値や固有ベクトル（隣接行列という説明を以後は省略する）を計算し，そこからある推論をたてて，規則性を探り，説明するというプロセスをふむ．様々なグラフについて，計算を行い，現在いくつかの推測がたてられている．それらの推測の基礎となる

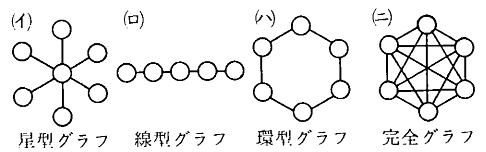

図1　基本パターン

四つのグラフの基本パターンの最大固有値の性格が現在では，明らかとなっている．

図1は，この四つの基本パターンを示すが，それらをさしあたり，星型（状），線型，環型，完全グラフと呼ぶことにする．最初の三つは二組グラフであり，環型，完全グラフは正則グラフである．無向グラフは，最初の三つのグラフのなんらかのかたちでの複合したものであると考えられる．完全グラフは，これ以上枝を増やせない無向グラフの最終状態である．これらのグラフは．さしあたり便宜上選ばれたとしておいてかまわない．四つの基本パターンの隣接行列の最大固有値が，点の数の増加にともなって，どのように増加するかが，図2に示されている．この図は，n 個の点からなる連結したグラフ

と対応する隣接行列の最大固有値が，四つの基本パターンのあいだでどのような値を持つかを見定めるための相対的な尺度であるとみなせる．

3. 基本パターンの最大固有値曲線の説明

3–1．図に示した曲線を説明するためには，多少の準備がいる．正方行列$A=(a_{ij})$のあるひとつの要素a_{pq}がb_{pq}に変わった行列をBとする．おのおのの行列の行列式を$\det A$，$\det B$で示せば，

$$\det B=\det A+(b_{pq}-a_{pq})\Delta_{pq} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ①$$

（ただしΔ_{pq}はAのa_{pq}に対応する余因子）

となる．さらに行列Bのq行p列の要素a_{qp}がc_{qp}に変った行列をCで示せば，

$$\det C=\det A+(b_{pq}-a_{pq})\Delta_{pq}+(c_{qp}-a_{qp})\Delta_{qp}+(b_{pq}-a_{pq})(c_{pq}-a_{qp})\Delta\binom{p}{q}\binom{p}{q} \cdots ②$$

（ただし，$\Delta\binom{p}{q}\binom{p}{q}$は$A$から$p$，$q$行と$q$，$p$列とを除いた行列の行列式に，かつ負の符号をつけたもの）

となる．もしAが対称行列で，$b_{pq}=c_{pq}=c$ならば，②は，

$$\det C=\det A+2(c-a_{pq})\Delta_{pq}+(c-a_{pq})^2\Delta\binom{p}{q}\binom{p}{q} \quad \cdots\cdots ③$$

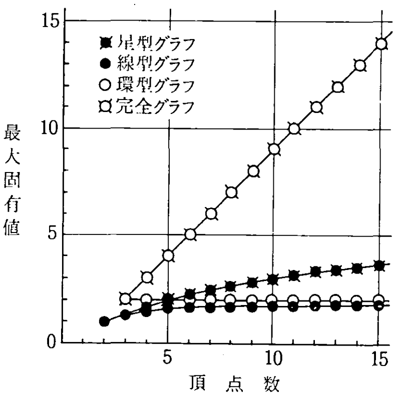

図2　基本パターンの隣接行列の最大固有値

となる．さらにAが隣接行列で，a_{pq}が0で，それが1に置きかわる場合には，③は，

$$\det C=\det A+2\Delta_{pq}+\Delta\binom{p}{q}\binom{p}{q} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ④$$

となる．

3–2．上記④式の関係を使って，n個の点からなる星型グラフ，線型グラフなどの固有多項式の一般型を求めてみる．

(イ)　星型グラフの固有多項式$Sn(-\lambda)$：$(n-1)$個の点の星型グラフと一つの孤立点からなるグラフの隣接行列をAとすれば，

$$\det(A-\lambda E)=(-\lambda)S_{n-1}(-\lambda)$$

（ただし$S_{n-1}(-\lambda)$は$(n-1)$個からなる星型グラフの固有多項式）$(n\geqq 3)$

④式を使って，孤立点を星型グラフの中心点に結びつければ，このグラフは，n個からなる星型グラフとなって，

$$S_n(-\lambda)=\det(A-\lambda E)+2\Delta_{pq}-(-\lambda)^{n-2}$$

この場合$\Delta_{pq}=0$であるから

$$S_n(-\lambda)=(-\lambda)S_{n-1}(-\lambda)-(-\lambda)^{n-1} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots ⑤$$

一般式は

$$S_n(-\lambda)=(-\lambda)^n\left\{(-\lambda)^2-(n-1)\right\} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ⑥$$

となる．　$(n\geqq 3)$

(ロ)　線型グラフの固有多項式$L_n(-\lambda)$：同様な手続きをほどこし，$(n-1)$個の点の線型グラフと一つの孤立点からなるグラフから$L_n(-\lambda)$を求めると，

$$L_n(-\lambda)=(-\lambda)L_{n-1}(-\lambda)-L_{n-2}(-\lambda) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots ⑦$$

一般式は

$$L_n(-\lambda)=\begin{cases} (n=2N\text{の時}) \\ \displaystyle\sum_{k=0}^{N}(-1)^{N-k}\cdot\frac{(N+k)!}{(N-k)!(2k)!}\cdot(-\lambda)^{2k} \\ (n=2N+1\text{の時}) \\ \displaystyle\sum_{k=0}^{N}(-1)^{N-k}\cdot\frac{(N+k+1)!}{(N-k)!(2k+1)!}\cdot(-\lambda)^{2k+1} \\ (n\geqq 2)(N=1,2,\cdots\cdots)(k=0,1,\cdots\cdots,N) \end{cases} \cdots ⑧$$

となる．

(ハ)　環状グラフの固有多項式$R(\lambda)$：n個の点からなる線型グラフの両端を結ぶことによって，環状グラフを作ることができる．このことを利用すると環状グラフの固有多項式は，線型グラフの固有多項式で表わすことができる．

$$\begin{aligned} R_n(-\lambda)&=L_n+(-1)^{n+1}\cdot 2-L_{n-2} \\ &=(-\lambda)L_{n-1}-2L_{n-2}+(-1)^{N+1}\cdot 2 \quad \cdots\cdots ⑨ \end{aligned}$$

$(n\geqq 3)$

(ニ)　完全グラフの固有多項式$P_n(\lambda)$：これは直接，一般式を求めることができる．

$$\begin{aligned} P_n(-\lambda)&=(-\lambda-1)^{n-1}\left\{(-\lambda)+(n-1)\right\} \cdots\cdots\cdots\cdots ⑩ \\ &=(-\lambda-1)\left\{P_{n-1}(-\lambda)+1\right\} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ⑪ \end{aligned}$$

$(n\geqq 3)$

3–3．星型グラフ，線型グラフ等の四つの典型的なグラフ（基本パターン）についての最大固有値は，図2に示されているが，この図の曲線は，次のようにして説明される．

まず，一般的に隣接行列は，対称行列であるから，実数の固有値を持ち，さらに非負の行列であるから，正の最大根を持つ（フロベニウスの定理）．

(イ)の星型グラフは，式⑥から$\sqrt{n-1}$の最大根を持ち(ニ)の完全グラフは，式⑩から，$n-1$の最大根を持つことは明らかである．

完全グラフの隣接行列の固有値の最大根は，同数の点

からなる様々なグラフのうちで，最も大きな値をとる．なぜなら，実数行列$A=(a_{ij})$の固有値λは$|\lambda-a_{ij}|\leqq\sum_{j\neq i}|a_{ij}|$を満足し，$A$が隣接行列なら，この関係は，$\lambda\leqq\sum_{j\neq i}a_{ij}=$（$i$番目の点の枝の数）となる．従って，$n$個の点からなるグラフの隣接行列のとりうる固有値の最大の値は$n-1$である．つまりこれは完全グラフの固有多項式の最大根の値と一致している．

(ハ)の環状グラフの隣接行列の最大固有値は，常に2である．$\lambda\leqq\Sigma a_{ij}$なる関係から，固有値の上限は2である．式⑦と⑨によって，数学的帰納法を使えば，$R_3(-\lambda)$では，最大値は2であることが成立している．いま，

$$R_{n-1}(-2)=L_{n-1}(-2)-L_{n-3}(-2)+(-1)\cdot 2$$
$$=(-2)\left\{L_{n-2}(-2)+L_{n-3}(-3)+(-1)^{n-1}\right\}=0$$

を仮定すれば，

$$R\ (-2)=(-2)\left\{L_{n-1}(-2)+L_{n-2}(-2)+(-1)^{n}\right\}$$
$$=(-2)\left\{L_{n-1}(-2)-L_{n-3}(-2)-(-1)^{n-1}+(-1)^{n}\right\}$$
$$=(-2)\left\{L_{n-1}(-2)-L_{n-3}(-2)+(-1)^{n}\cdot 2\right\}=0$$

となる．従って$R_n(-\lambda)$の最大根は2である．このことは今，環状グラフだけについてみたが，一般に正則グラフならば，固有値λに対する固有ベクトルを$(x_1, x_2, \cdots x_n)$とすれば，

$$(\lambda-a_{rr})\,x_r=\sum_{k\neq r}a_{rk}\,x_k$$

であり，r個の式を加えれば，

$$\sum_r(\lambda-a_{rr})\,x_r=\sum_r\sum_{k\neq r}a_{rk}\,x_k$$

となる．ここで$a_{rr}=0$，正則グラフの各点にP本の枝があれば，右辺において，x_kはP回あらわれるから，

$$\lambda\sum_r x_r=P\sum_r x_r$$

となる．従って，もし$\Sigma x_r\neq 0$ならば$\lambda=P$となる．非負の正方行列では，最大固有値に対する固有ベクトルの値は正となるから，$\lambda=P$が成り立つ．

(ロ)の線型グラフの隣接行列の最大固有値が，2に漸近することは，次のように説明できる．$R_n(-\lambda)$の場合と同様にして$\lambda\leqq 2$はわかる．式⑦において，$L_{n-1}(-\lambda)$は正の最大固有値を持つから，これをαとすれば

$$L_n(\alpha)=-L_{n-2}(\alpha)$$

$L_{n-1}(-\lambda)=\lambda^{n-1}+\cdots\cdots$ であるから，$\alpha<x$に対しては，

$$L_{n-1}(x)>0$$

したがって，$L_{n-1}(-\lambda)$の最大根より，αが大きいなら，

$$L_{n-1}(\alpha)>0$$

従って$L_n(\alpha)<0$　とすれば，十分大きな値β，つまり$\alpha<\beta$をとれば，$L_n(\beta)>0$となるから，平均値の定理によって，$L_n(\lambda_n)=0$　となるλ_nがαとβの間にある．つまり$\alpha=\lambda_{n-1}<\lambda_n$．この関係が，$n$の小さな値で言えて，漸次

$$\lambda_2<\lambda_3<\cdots\cdots<\lambda_n<\cdots\cdots\cdots<2\qquad\text{となる．}$$

3−4. 以上で曲線の説明はできたが，ここから誘導できる事項をとりまとめておく．

(A)　n個の点からなるグラフの最大固有値は，$n-1$をこえない．

(B)　n個の点からなるグラフがすべて孤立点であれば最大固有値は0である．連結したグラフの最小の最大根は1である．（この場合枝の数は1）

(C)　基本パターンの最大固有値の大きさの順序は，$n\geqq 6$の時，完全グラフ＞星型グラフ＞環型グラフ＞線型グラフであり，$n=4$の時は，星型グラフと環型グラフの最大固有値の大きさが逆転する．

(D)　グラフの中に一つでもリング（サイクル）があれば，線型グラフの最大固有値より，そのグラフの最大固有値は大きくなる．（証明は容易）

コンピューターによる試算結果では，次のことが言えそうである（なお演算には名古大学大型計算機センター Facom 230−60を利用した）．

(E)　n個の点からなる，孤立点がない樹状グラフ（サイクルを持たないグラフ）の隣接行列の最大固有値をλとする．同数の点からなる星型グラフと線型グラフの最大固有値をλ_S，λ_Lとすれば，$\lambda_S\leqq\lambda\leqq\lambda_L$である．

(F)　(E)が言えれば，λ_Lはn個の孤立点がないグラフ，（連結グラフ）の最大固有値の下限となる．

従って，同じ点の数からなるグラフの性質が，その隣接行列の最大固有値を比較することによって，とらえられる見通しが立つ．

点の数の異なるグラフの比較は，今後の課題として残される．

4.　コンピューター試算による推測と問題設定

上述した通り，グラフをその隣接行列の最大固有値によって判断するためには，例えば（3−4）の(E)が$n\geqq 3$について説明されなくてはならない．その他知るべき事項を要約して問題設定すると次のように要約される．

(i)　グラフGがある．Gから孤立した点Pと，Gに含まれる点Qとを結んでできる新しいグラフG'の隣接行列の固有値を最大にする問題．この場合，G'とGそして点Qを除いたグラフをG_1とし，それぞれの行列の固有多項式を$G'(\lambda)$，$G(\lambda)$，$G_1(\lambda)$とすれば，

$$G'(\lambda)=\lambda G(\lambda)-G_1(\lambda)\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\quad ⑫$$

なる関係にある（図3）．この問題にたいしては，コン

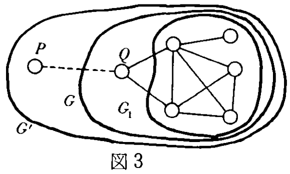

図3

ピューター試算では，次のような推測が成り立っている．Gの隣接行列の最大根に対応する固有ベクトルを（x_1, x_2, $\cdots x_n$)とする．max（$x_1, x_2, \cdots x$）$= x_k$ とすれば，x_kに対応する点が，上の問題を満足する．つまり，この時の最大固有値をλ_kとすれば，点Pとj番目の点を結んだグラフの隣接行列の最大固有値λ_jの中でλ_kは，$\lambda_k \geqq \lambda_j$なる関係にある．

(ii)　互に孤立した二つのグラフG_AとG_Bがある．$P \in G_A$ $Q \in G_B$なる二つの点を適当に結んでできるグラフG'の隣接行列の最大固有値を最大にする問題．(i)と同様にグラフの固有多項式の関係を示すと，

$$G'(\lambda) = G_A(\lambda) \cdot G_B(\lambda) - G_{A1}(\lambda) \cdot G_{B1}(\lambda) \quad \cdots\cdots \quad ⑬$$

となり，$G'(\lambda)$の最大根を最大にする問題である(図4)．

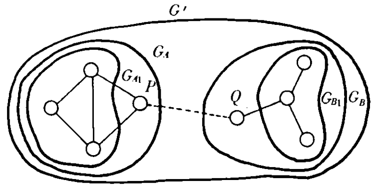

図4

ただし，$G_{A1}(\lambda)$，$G_{B1}(\lambda)$ はそれぞれ，G_AからPを除いたグラフとG_BからQを除いたグラフの隣接行列の固有多項式である．この問題に対しては，コンピューター試算から，次のような推測が成り立つ．G_A，G_B の隣接行列の最大固有値に対応する固有ベクトル（x_{A1}, $\cdots\cdots$ [x_{An})，($x_{B1}, \cdots\cdots x_{Bm}$) とすれば，max ($x_{Ai}$) ($_{i=1,2,\cdots n}$) と max ($x_{Bj}$) ($_{j=1,2,\cdots m}$) となる二つの点を選んで連結すれば，$G'(\lambda)$の最大根は最大となる．

(iii)　連結したグラフGがある．互いに直接連結していない二つの点P，Q（$\in G$）を結んでできる新しいグラフG'の隣接行列の最大固有値を最大にする問題．これを固有多項式で表わすと，式④に対応した関係式になる．これをグラフで説明すると，二つの点PとQを除いたグラフの隣接行列の多項式を$G_2(\lambda)$とすれば，$\Delta_{\binom{p}{q}\binom{p}{q}} = -G_2(\lambda)$．$G^*(\lambda) = \begin{vmatrix} O & (Q) \\ (P) & G_2 \end{vmatrix}$（ただし，$(P)$，$(Q)$はそれぞれ点$P$，点$Q$と$G_2$との結びつきをあらわす列ベクトル，行ベクトルである．）とすれば，$\Delta_{pq} = -G^*(\lambda)$ である．式④を固有多項式になおしてあらためて書けば，

$$G'(\lambda) = G(\lambda) - 2G^*(\lambda) - G_2(\lambda) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad ⑭$$

この問題については，様々な場合があるので，現在の段階では，解答の推測は確かではない．

以上三つの問題は，いずれもあるグラフに一本の枝を加えた時の，隣接行列の変化を最大にする問題である．

しかし，例えば(i)において，$x_i \geqq x_j$なら，$\lambda_i \geqq \lambda_j$ といったかたちに拡大される可能性はある．このような一般化が行われないと，(iii)は解けない．

しかも(iii)のような問題では，固有ベクトルの値だけに頼っていては，解けない場合がある．例えば環状グラフの結ばれていない二点を新たに結ぶ場合が，それである．

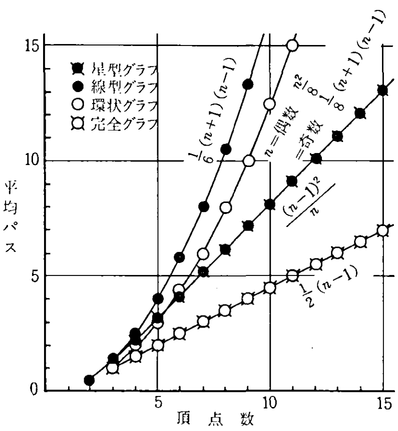

図5　基本パターンの平均パス

そうした場合に備えて，＜平均パス＞の概念をもって補完することが考えられる．パスとは連結したグラフ上の二点を結ぶ最小の枝の数である．＜平均パス＞はグラフの二点R，SのパスをP_{rs} とすれば，$\sum_{r,s}^{n} P_{rs} / n$（$r \neq s$）で表わされる．＜平均パス＞は，グラフのある種の凝縮度を示す．これは径の概念に近い．図5は，先に最大固有値の曲線について選んだ四つのグラフのパターンについて，＜平均パス＞をグラフの点との対応で示してある．図から知られる通り，大きさの順序は最大固有値の場合と逆転し，星型と環型グラフの曲線が交叉する位置も近い．

つまり，グラフの＜平均パス＞と隣接行列の最大固有値とは，なんらかの関係があることが推測され，この推測は，ある程度コンピューター試算で確められてはいる．また環型グラフのように，それに対応する固有ベクトルの要素の値が同じになるような場合にも，平均パスの概念が有効であることも確められている．従って，

(iv)　平均パスと隣接行列の最大固有値の関係をとらえる問題，あるいは平均パスにかわりうるグラフの特性値を探す問題が派生する．

本報告では，グラフの形態上の複雑さや凝集性を示すと思われるグラフに固有な数量を，隣接行列の最大固有値に限って，指針を述べてきた．上述の通り，数学的証明が残されたままでいるのが現状であり，あるいは，こうした着想も，すでに深く解明されているのではないかという不安もあって，速報した次第である．多くのご教唆をいただければ幸いである．（1976年4月23日受理）

注1　太田利彦「数学的解析による平面計画」1966，造；Yona Friedman [Toward a Scientific Architecture]」1975, MIT Press　外

注2　細矢治夫「化学とトポロジーの出会い」1972, vol 26,No12「化学の領域」；服部嘉雄：小沢孝夫，1974. 11昭晃堂　外