

木構造の性質とその応用

土屋 翔一

オペレーションズ・リサーチでは、決定木やゲーム木などのように、木構造を道具として議論を進めることがある。一方、グラフ理論では、木構造自体を研究対象とし、さまざまな定理が知られている。本稿では、木の基本的な定理や木の性質を用いた証明手法を示す。また、最小木問題やマッチングなどの応用面で有用な概念や問題なども紹介する。

キーワード：木構造、木、森、オイラーの公式、最小木問題、マッチング

1. 基本的な定義

頂点 (vertex) の集合 V と頂点同士を結ぶ辺 (edge) の集合 E によって構成される組をグラフ (graph) と呼ぶ。このとき、 V を頂点集合 (vertex set)、 E を辺集合 (edge set) と呼ぶ。また、グラフ G の頂点集合、辺集合がそれぞれ V, E であることを $G = (V, E)$ と表す。

図 1 のように、グラフ上で同一頂点を端点とする辺をループ (loop) と呼ぶ。また、2 点間に辺が 2 本以上あるとき、それらの辺を多重辺 (parallel edges) と呼ぶ。

ループや多重辺をもたないグラフを単純グラフ (simple graph) と呼び、特に断りのない場合、本稿では単純グラフのみを扱う。

グラフ G の頂点 v について、 v に接続している辺の本数を v の次数 (degree) と呼ぶ。 G の各頂点の次数のうち、最大のものを G の最大次数 (maximum degree) と呼び、 $\Delta(G)$ と表す。同様に、 G の各頂点の次数のうち、最小のものを G の最小次数 (minimum degree) と呼び、 $\delta(G)$ と表す。

グラフ $G = (V_G, E_G)$ と $H = (V_H, E_H)$ について、 $V_H \subseteq V_G$ かつ $E_H \subseteq E_G$ であるとき、 H は G の部分グラフ (subgraph) である。特に、 $V_H = V_G$ であるとき、 H は G の全域部分グラフ (spanning subgraph) と呼ばれる。

頂点 (v_i) と辺 (e_i) の交互列

$$W := v_0 e_0 v_1 e_1 v_2 \dots v_{k-1} e_{k-1} v_k$$

を歩道 (walk) と呼ぶ (図 2 (上) 参照)。また、 v_0 と

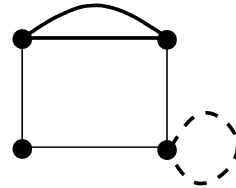


図 1 ループ (点線) と多重辺 (太線)

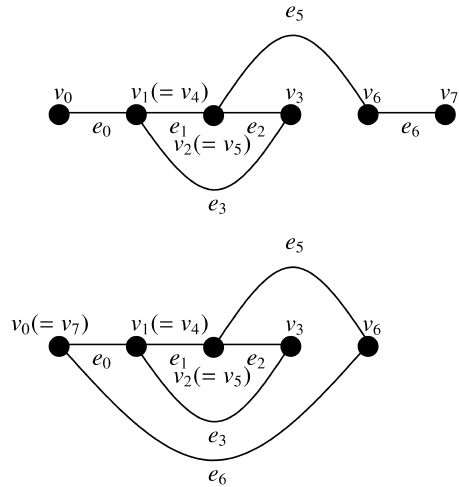


図 2 歩道 (上) と閉歩道 (下)

v_k が同一頂点であるとき、 W は閉歩道 (closed walk) と呼ばれる (図 2 (下) 参照)。

一方、

$$P := v_0 e_0 v_1 e_1 v_2 \dots v_{k-1} e_{k-1} v_k$$

が歩道であり、 $v_i \neq v_j (i \neq j)$ であるとき、 P を道 (path) と呼び、 v_0 と v_k を P の端点 (end または endpoint) と呼ぶ (図 3 (上) 参照)。また、 P に v_0 と v_k を結ぶ辺を加えた

$$C := v_0 e_0 v_1 e_1 v_2 \dots v_{k-1} e_{k-1} v_k e_k v_0$$

つちや しょういち
専修大学ネットワーク情報学部
〒 214-8580 神奈川県川崎市多摩区東三田 2-1-1
s.tsuchiya@isc.senshu-u.ac.jp

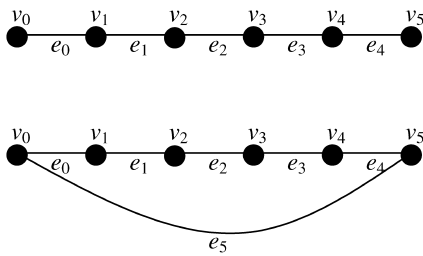


図3 道(上)と閉路(下)

を閉路 (cycle) と呼ぶ (図3 (下) 参照). 単純グラフの場合, v_i と $v_j (i \neq j)$ を結ぶ辺は高々1本なので, 上記のような歩道は辺を省略して,

$$v_0 v_1 v_2 \dots v_{k-1} v_k$$

と表記してもよい.

グラフ G の任意の2頂点 u, v について, u と v を端点とする道が (G の部分グラフとして) 存在するとき, G を連結 (connected) と呼ぶ. 連結なグラフを連結グラフ (connected graph) と呼び, 連結でないグラフを非連結グラフ (disconnected graph) と呼ぶ. G の連結な部分グラフのうち, 頂点数について極大なものを G の連結成分 (component) と呼ぶ. 閉路を含まないグラフを森 (forest) と呼ぶ. 特に, 連結な森を木 (tree) と呼ぶ (反対に各連結成分が木であるグラフを森と定義することもできる).

グラフ H がグラフ G の全域部分グラフであり, かつ H が木であるとき, H は G の全域木 (spanning tree) と呼ばれる. 与えられた連結グラフ G が全域木を含むことは簡単に証明できる. もし, G が閉路をもつならば, その閉路上の辺を1本だけ取り除く. この操作でグラフの連結性が崩れることはないで, 閉路がなくなるまで同様の操作を繰り返せば, G の全域木が得られる.

木や森についての基本的な研究の一つに, グラフ G が部分グラフとして特定の性質を満たす木構造をもつかを考える問題がある. すなわち, 与えられたグラフにおいて何らかの性質をもった木や森の存在性を保証することや, そういった木や森を見つけるための効率のよいアルゴリズムを発見することなどが研究対象となる. たとえば, ハミルトン道問題 (Hamilton path problem) は, グラフ G の中からすべての頂点を含む道を見つける問題だが, これは, G の中に最大次数2の全域木を見つける問題とみなすことができる (この問題の詳細は本特集で小関先生が執筆された「ハミルトン閉路について」を参照してほしい). また, 最大マッ

チング問題 (maximum matching problem) はグラフ G の中から端点を共有しない辺をできるだけ多く見つける問題だが, これは, G の中にすべての頂点の次数が高々1となるような森のうち, 辺数が最大のものを見つける問題に相当する.

2. 木の性質

木について, 次の定理が知られている.

定理1 (cf. [1]). T について, 以下は同値である.

- (i) T は木である.
- (ii) T の任意の2頂点 u, v について, u, v を端点とする道がただ一つ定まる.
- (iii) T は連結性に関して極小である (T は連結だが, どの辺を取り除いても T は非連結となる).
- (iv) T は閉路の非存在性に関して極大である (T は閉路を含まないが, どの非隣接2頂点 u, v に u と v を結ぶ辺 uv を追加しても, その結果得られたグラフは閉路を含む).

最小次数2以上のグラフは閉路をもつことが示せるため, 2頂点以上の木は必ず次数1の頂点を含む. 木から次数1の頂点とその頂点に接続する辺を除去して得られるグラフもまた木であることが知られている. この事実は, 数学的帰納法を用いて証明をする際に有用であり, 実際, 以下の定理が得られる.

定理2. T が n 頂点の木ならば, T は $n - 1$ 本の辺をもつ.

証明. 頂点数に関する数学的帰納法を用いて示す. T の頂点数が1であるとき, 命題が成り立つことは明らか. 次に, 頂点数が2以上の場合を示す. 頂点数が m 以下の木について命題が成り立つと仮定し, T の頂点数を $m + 1$ とする. T から次数1の頂点とその頂点に接続する辺を除去して得られる木を T' とすると, T' の頂点数は m である. 帰納法の仮定より, T' の辺数は $m - 1$ である. T' の構成方法より, T の辺数は T' より1つだけ大きい. したがって, T の辺数は m である.

以上により, 数学的帰納法によって T の頂点数が n のとき, 辺数は $n - 1$ であることがわかる. \square

また, 木の頂点の次数について, 次の定理が示せる.

定理3. 木 T において, d_i を次数 i の頂点の個数と

し、 T の最大次数を k とする。このとき、

$$d_1 = \sum_{i=3}^k (i-2)d_i + 2$$

が成り立つ。

証明. T の頂点数を n とすると、定理 2 より、 T の辺数は $n-1$ である。辺数の 2 倍と各頂点の次数の総和は等しい（握手補題）ので、

$$2(n-1) = \sum_{i=1}^k id_i$$

が成り立つ。これに $n = d_1 + \sum_{i=2}^k d_i$ を代入して整理すれば、与式が得られる。□

上記のように、木についてはさまざまな性質が成り立つことがすでに知られている。そのため、木の上では動的計画法 (dynamic programming) で効率よく解ける問題が多数存在する。

一方、木でないグラフに対しても木構造を導入するため、Halim [2] や Robertson and Seymour [3] は木分解 (tree decomposition) という概念を導入した。グラフ G がどれだけ木に近いかを表す尺度として、 G の木分解から木幅 (treewidth) という値が得られる (木分解や木幅の定義は省略するが、詳細は [1] などを参照してほしい)。木には木幅が 1 となる木分解が存在し、木幅の小さい木分解が存在するグラフほど木に近い構造をもつ。一般のグラフにおいて効率のよいアルゴリズムを見つけることが難しい問題でも、“よい木分解”をもつグラフについては、効率よく解ける場合がある。たとえば、頂点彩色問題や支配集合問題などは、木幅が定数の木分解が存在するグラフ上では、木上の動的計画法を拡張させ、効率よく解けることが知られている [4]。(頂点彩色問題についての詳細は、本特集で斎藤先生が執筆された「グラフの部分彩色とその拡張問題」を、支配集合問題についての詳細は、本特集で古谷先生が執筆された「線形計画問題による Vizing 予想へのアプローチ」をそれぞれ参照してほしい。)

3. 全域木を用いたオイラーの公式の証明

平面に辺の交差なく描画されたグラフを平面グラフ (plane graph) と呼ぶ (定義などの詳細は、本特集で野口先生が執筆された「平面グラフ・曲面上のグラフ」を参照してほしい)。グラフは、頂点と辺によって構成

されることは上述した。平面グラフの場合それらに加えて閉歩道で囲まれた領域、すなわち、面 (face) が定義される。また、平面グラフにおける面の集合を面集合 (face set) と呼ぶ。平面グラフについて、次の性質が知られている。

定理 4 (オイラーの公式 (Euler's formula)). 連結な平面グラフ G の頂点数を n 、辺数を m 、面数を l とする。このとき、

$$n - m + l = 2$$

が成り立つ。ただし、 l は G の外領域も一つの面とみなした値である。

木は平面に辺の交差なく描画できる。また、木は閉路を含まないため、平面上の木の面数は 1 である。これと定理 2 より、平面に描画された木はオイラーの公式を満たすことがわかる。一般に、オイラーの公式は、数学的帰納法を用いて証明することが多い。たとえば、[1] では辺数についての帰納法を、[5] では頂点数と辺数についての帰納法を用いた証明を紹介している。一方、[6] では、全域木を用いて証明を与えている。

全域木を用いた定理 4 の証明. 平面グラフ G の頂点集合を $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 、辺集合を $\{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ 、面集合を $\{f_1, f_2, \dots, f_l\}$ とする。このとき、 G の双対グラフ (dual graph) G^* とは、 G から次の手順で得られるグラフである (図 4 参照)。

1. 各面 f_i に頂点 v_i^* を置く。
2. 各辺 e_k に接する面 f_i と f_j に対応する v_i^* と v_j^* について、 v_i^* と v_j^* を結ぶ辺 e_{ij}^* を加える。
3. G の頂点と辺をすべて消す。

定義より、 G^* の頂点数は l 、面数は n である (G^* はループや多重辺をもつ場合があることに注意せよ)。また、 G の辺と G^* の辺の 1 対 1 対応が得られるので、 G^* の辺数も m である。

G の全域木を T とする。 T の頂点数は n であることと定理 2 より、 T の辺数は $n-1$ である。一方、 G と G^* の辺の 1 対 1 対応に関して、 T の辺に対応する G^* の辺をすべて取り除いた G^* の部分グラフを T' とする。

T' が閉路 C' をもつ場合、 C' は平面を二つの領域に分ける。双対グラフの定義より、 C' で分けられた領域は、いずれも G の頂点を含む。したがって、 G から (G と G^* の辺の 1 対 1 対応に関して) C' に対応す

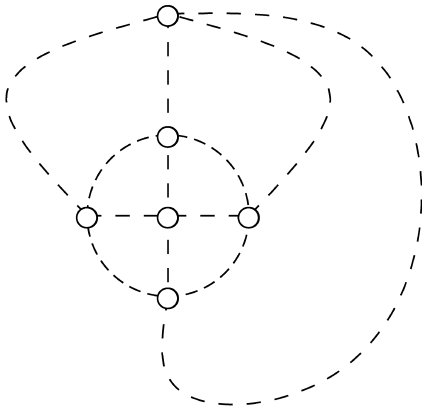
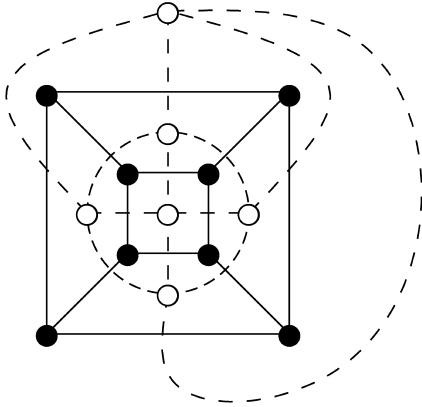
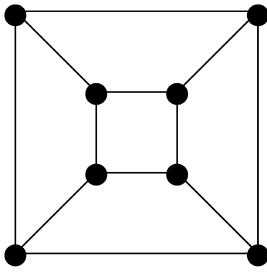


図4 グラフ G (上) と双対グラフ G^* (下) (中央は G と G^* を重ねたもの)

る辺を取り除いたグラフは非連結となり、 T が全域木 (連結な全域部分グラフ) であることに矛盾する。したがって、 T' は閉路をもたないことがわかる。

また、 T' が非連結である場合、(G と G^* の辺の 1 対 1 対応に関して) T に対応する G^* の辺集合 $E_{T'}$ を取り除くと G^* は非連結となる。したがって、双対グラフの定義より、(G と G^* の辺の 1 対 1 対応に関して) $E_{T'}$ に対応する T の辺集合は T' の連結成分を囲む閉路を含む (たとえば、図 4 で取り除くと G^* が非連結となる G^* の極小な辺集合を選ぶと、その辺集合に対応する G の辺集合は閉路となることが確認できる)。

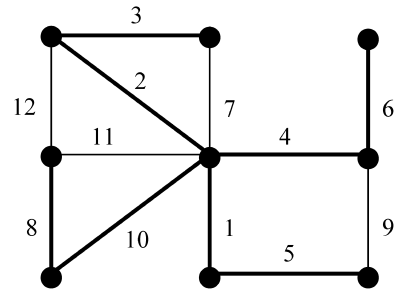


図5 重み付きグラフ G と G の最小全域木 T (太線は T の辺を示す)

これは、 T が全域木 (閉路をもたない全域部分グラフ) であることに矛盾する。したがって、 T' は G^* の全域木 (閉路をもたない連結な全域部分グラフ) であることがわかる。 T' の頂点数は l であるので、定理 2 より、 T' の辺数は $l-1$ である。 T' の構成方法より、 T の辺数と T' の辺数の和は G の辺数に等しいので、

$$(n-1) + (l-1) = m$$

これを变形すれば与式が得られる。 □

4. 最小全域木問題と最小シュタイナー木問題

n 頂点にいくつかの辺を加えて連結グラフを構成するためには、定理 1 (iii) と定理 2 より、少なくとも $n-1$ 本の辺が必要である。実際に、 $n-1$ 本の辺を閉路を含まないよう付け加えていけば、1 本の辺を加えるごとに連結成分数が 1 減るので、所望の連結グラフが得られる。構成方法より、得られた連結グラフは木であることもわかる。辺の本数をコストと考えれば、有限個の頂点をコストを抑えて連結グラフにするためには、木構造が適している。こういった問題は、道路網やネットワーク網を構築する際などに有用だが、実際の問題として考える際には、ある 2 点を辺で結ぶコストと別の 2 点を結ぶコストが異なる場合がある。そのため、図 5 のように、辺に正の実数の重みを付けた重み付きグラフ (weighted graph) を定義することで、辺を付け加えるコストが異なる問題にも対応できるようにする。

連結な重み付きグラフ上で辺の重みの総和が最小となる全域木を見つける問題を最小全域木問題 (minimum spanning tree problem: MST) と呼ぶ。

重みのない連結グラフに全域木が存在することは上述した (これは、すべての辺の重みが等しい重み付き連結グラフの場合の MST と同値である)。一方、連結な重み付きグラフの場合、クラスカル法 (Kruskal's

algorithm) [7] を用いて最小全域木を見つけることができる。これは、重みの小さい辺から順にチェックし、“その辺を加えても閉路ができない場合に限り加える (ただし、同じ重みの辺同士はどちらを先に選んでもよい)” という選び方を全域部分グラフが得られるまで続けるアルゴリズムである。

定理 5 (Kruskal [7]). 連結な重み付きグラフ G からクラスカル法によって得られる全域部分グラフ T は、 G の最小全域木である。

証明. クラスカル法の辺の選び方より、 T は G の全域木である。よって、 G の全域木の中で T の重みの総和が最小であることを背理法を用いて示す。矛盾を導くため、 T よりも重みの総和が小さい最小全域木が存在したと仮定し、最小全域木の中で T と共通する辺の数が最も多いものを T' とする。 T はクラスカル法で得られた全域木なので、各辺について選ばれた順番に e_1, e_2, \dots のようにラベルを付けることができる。 T の辺の中で T' に含まれない辺のうち、1 番最初に選ばれるものを e_k とする。定理 1 (iv) より、 T' に e_k を追加したグラフは閉路 $C_{T'}$ を含む。また、 T は木であるので、 $C_{T'}$ は T に含まれていない辺 e' を含む。 T' に e_k を加え、 e' を取り除いた全域木を T'' とすると、 T' は最小全域木なので、 T'' の重みの総和は T' の重みの総和以上である。したがって、 e_k の重みは e' の重み以上である。

一方、クラスカル法で e_k を選ぶ直前までに選ばれたすべての辺で構成される T の部分グラフを F とすると、 e_k の選び方より、 F は T' の部分グラフである。また、 F に e' を加えたグラフは T' の部分グラフであるので、閉路を含まない。よって、 e' の重みが e_k の重みよりも真に小さいとすると、 e' は e_k よりも前にチェックされた辺だが、 T に含まれていないため、クラスカル法の辺の選び方に反する。したがって、 e' と e_k の重みは同じであることがわかるので、 T' と T'' の重みの総和は等しい。

ところが、 T' よりも T'' のほうが T と共通する辺の本数が多いため、 T' の選び方に矛盾する。よって、 T は G の最小全域木である。□

ほかにも、最小全域木問題を効率よく解く方法として、プリム法 (Prim's Algorithm) [8] が知られている。

連結な重み付きグラフとその頂点集合の部分集合 S に対して、 S をすべて含む辺の重みの総和が最小となる木を見つける問題を最小シュタイナー木問題 (min-

imum Steiner tree problem) と呼ぶ。上述した MST は、最小シュタイナー木問題の特殊な場合である。また、 S の頂点数が 2 の場合の最小シュタイナー木問題は、指定された 2 点を結ぶ重み最小の道を見つける最短路問題 (shortest path problem) と同値である。この問題は、ダイクストラ法 (Dijkstra's Algorithm) [9] を用いて効率よく解けることが知られており、カーナビゲーション・システムなどで応用されている (最短路問題やダイクストラ法についての詳細は、本特集で小田先生が執筆された「経路問題と離散数学」を参照してほしい)。一方、 S の頂点数が 3 以上の場合は NP 困難 (NP-hard) というクラスに属する問題であることが知られており、効率よく解くためのアルゴリズムは存在しない可能性が高いとされている。

5. マッチング問題

端点を共有しない辺の集合をマッチング (matching) と呼ぶ。これはすべての頂点の次数が高々 1 の森とみなすことができる。グラフ G について、 G のすべての頂点を含むマッチングを G の完全マッチング (perfect matching) と呼ぶ。与えられたグラフが完全マッチングをもつための必要十分条件は、Tutte によって示されている。

定理 6 (Tutte [10]). グラフ G が完全マッチングをもつための必要十分条件は、 G の頂点集合の任意の真部分集合 S について、

$$o(G - S) \leq |S|$$

を満たすことである。ただし、 $o(G - S)$ は G から S を取り除いたグラフにおける頂点数が奇数の連結成分数、 $|S|$ は S に含まれる頂点の数を表す。

グラフ G が完全マッチング M をもつ場合、 G の頂点集合の任意の真部分集合 S について、 G から S を取り除いたグラフにおける頂点数が奇数の連結成分それぞれから、 M の辺が S に向かって少なくとも 1 本伸びている。つまり、 M の辺のうち少なくとも $o(G - S)$ 本が S の頂点に接続しなければならないので、 $o(G - S) \leq |S|$ を満たすことは、完全マッチングをもつための必要条件である。定理 6 では、この必要条件さえ満たせば完全マッチングの存在性を保証できることを示している。

マッチングは、二つの部集合間の対応関係について議論する際に用いられることがある。たとえば、4 人の学生 A, B, C, D がそれぞれ解析、代数、幾何、統

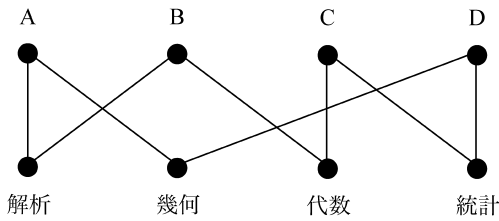


図6 TAの希望リストに対応するグラフ

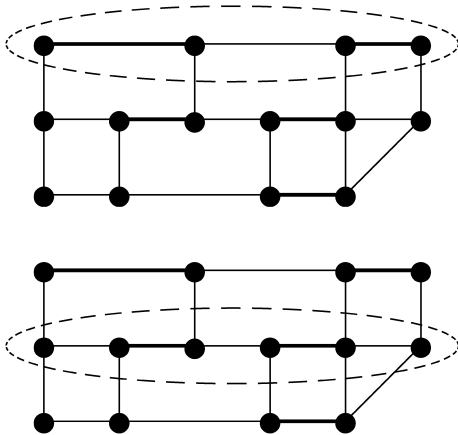


図7 グラフ G とマッチング M における交互道 (上) と増大道路 (下) (太線は M の辺を示す)

計の1科目のTAを選ぶ際に、以下のような希望リストがあったとする。

- A : 解析か幾何, B : 解析か代数,
- C : 代数か統計, D : 幾何か統計.

この希望リストを満たすようなTAの振り分けがあるかという問題は、図6のようなグラフが完全マッチングをもつかという問題と同値である。

図6のグラフは完全マッチングをもつことが簡単に示せる。一方、完全マッチングをもたないグラフは、定理6を用いて、非存在性を保証することができる(たとえば、頂点数が奇数のグラフ G は、 S が空集合のとき $o(G - S) > |S|$ となるなど)。

完全マッチングの存在は必ずしも保証できないが、辺集合が空でない場合、任意のグラフは必ずマッチングをもつ。その中で、辺数が最大のものを最大マッチング(maximum matching)と呼ぶ。グラフ G と G のマッチング M について、 G の部分グラフ P が道であり、 M に含まれる辺と含まれない辺が P 上に交互に現れるとき、 P を交互道(alternating path)と呼ぶ(図7(上)参照)。交互道は G と M によって定義されるため、 M -交互道と呼ぶこともある。特に、 P の始点と終点が M の辺に属していないとき、 P は増大道路

(augmenting path)と呼ばれる(図7(下)参照)。交互道と同様に、増大道路も G と M によって定義されるため、 M -増大道路と呼ぶこともある。

増大道路 P 上で M に含まれる辺の集合を E_1 , M に含まれない辺の集合を E_2 とすると、 $M' = \{M \setminus E_1\} \cup E_2$ も G のマッチングである。すなわち、 M' は M の辺を P 上で入れ替えることによって得られたマッチングである。増大道路の定義より、 P の最初の辺と最後の辺はともに E_2 の辺であるため、 M' の辺数は M の辺数よりも1つ大きいことがわかる。したがって、グラフ G のマッチング M について、 M -増大道路が存在するとき、 M は最大マッチングでないことがわかる。一方、逆も成り立つことが次の定理で保証されている。

定理7 (Berge [11]), グラフ G のマッチング M が最大マッチングであるための必要十分条件は、 G が M -増大道路を含まないことである。

証明. M が最大マッチングであれば G は M -増大道路を含まないことは、対偶を考えれば明らか。したがって、 G が M -増大道路を含まないとき、 M が最大マッチングであることを背理法を用いて証明する。矛盾を導くため、 M よりも辺数の多い G のマッチング M' が存在したと仮定する。 M と M' の対称差(symmetric difference), すなわち、 M と M' の和集合から M と M' の共通部分を除いたグラフ $M \triangle M'$ を考えると、マッチングの定義より、 $M \triangle M'$ の連結成分は閉路または道であり、これらの辺は M の辺と M' の辺が交互にあらわれることがわかる。よって、 $M \triangle M'$ の連結成分の道は M -交互道であり、かつ M' -交互道である。 M' の辺数は M の辺数よりも多いので、 $M \triangle M'$ の連結成分の道に必ず M -増大道路が含まれるため矛盾。したがって、 M は G の最大マッチングである。□

6. おわりに

木や森は構造が単純であるため、多くの性質が解明されており、さまざまな場面で活用されている。本稿で紹介した内容はそのような研究のほんの一端であり、前提知識をあまり必要とせず理解できるものを選んで紹介している。木構造に関連する研究は、現在も世界中の研究者たちが進めており、新たな成果をあげている。そういった研究に興味をもっている読者は、ぜひ最先端の研究に触れ、見識を広めてほしい。

参考文献

- [1] R. Diestel, *Graph Theory (Graduate Texts in Mathematics)*, **173**, 4th edition, Springer, 2010.
- [2] R. Halin, “ S -functions for graphs,” *Journal of Geometry*, **8**, pp. 171–186, 1976.
- [3] N. Robertson and P. Seymour, “Graph minors III: Planar tree-width,” *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, **36**, pp. 49–64, 1984.
- [4] S. Arnborg and A. Proskurowski, “Linear time algorithms for NP-hard problems restricted to partial k -trees,” *Discrete Applied Mathematics*, **23**, pp. 11–24, 1989.
- [5] 宮崎修一, 『グラフ理論入門—基本とアルゴリズム—』, 森北出版, 2015.
- [6] M. Aigner and G. Ziegler, *Proofs from the Book*, 4th edition, Springer, 2010.
- [7] J. B. Kruskal, “On the shortest spanning subtree of a graph and the traveling salesman problem,” In *Proceedings of the American Mathematical Society*, **7**, pp. 48–50, 1956.
- [8] R. C. Prim, “Shortest connection networks and some generalisations,” *Bell System Technical Journal*, **36**, pp. 1389–1401, 1957.
- [9] E. W. Dijkstra, “A note on two problems in connexion with graphs,” *Numerische Mathematik*, **1**, pp. 269–271, 1959.
- [10] W. T. Tutte, “The factorization of linear graphs,” *The Journal of the London Mathematical Society*, **22**, pp. 107–111, 1947.
- [11] C. Berge, “Two theorems in graph theory,” In *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **43**, pp. 842–844, 1957.