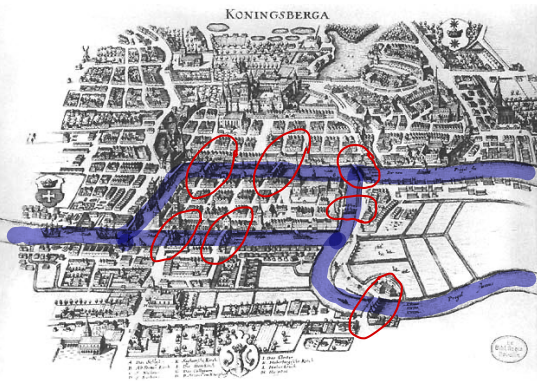


ベッチ数を指定した連結 2 部グラフの数え上げ

異分野・異業種研究交流会2022(日本数学会、日本応用数理学会、統計関連学会連合)
九州大学大学院数理学府D3 蓮井太朗 (hasui.taro.206@s.kyushu-u.ac.jp)

1. 研究背景：グラフ理論の始まり

・グラフ理論は1736年、ドイツで始まった。(ケーニヒスベルクの橋渡し問題)



この地図の7つの橋って、どの橋も2回以上渡らず、すべて1回渡って、元のところに帰還できるの？

※どこから出発してもよい

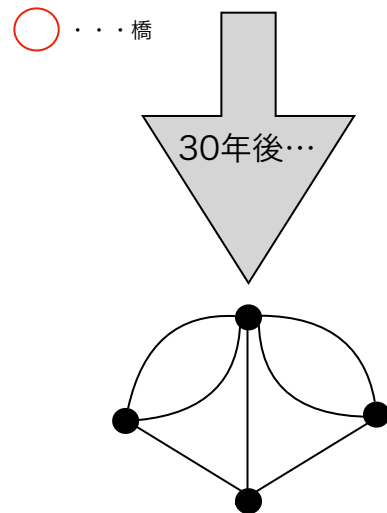


1706年の東プロイセンの皆様

地図を左図のように簡略化しました。
この図形(=グラフ)が一筆書きできれば帰還できます。



レオンハルト・オイラー (スイス：1707年-1783年)



- ・すべての頂点の**次数**(頂点から伸びる辺の本数)が偶数である。
- ・2つの頂点の**次数**が奇数で、その他のすべての頂点の**次数**は偶数である

このどちらかが成り立つときのみ一筆書きできる。

∴ 帰還できない！

今回の内容をさらに詳しく知りたい方は、

Taro Hasui, Tomoyuki Shirai, and Satoshi Yabuoku. Enumeration of connected bipartite graphs with given betti number. arXiv preprint arXiv:2208.03996, 2022.

をご参照ください。

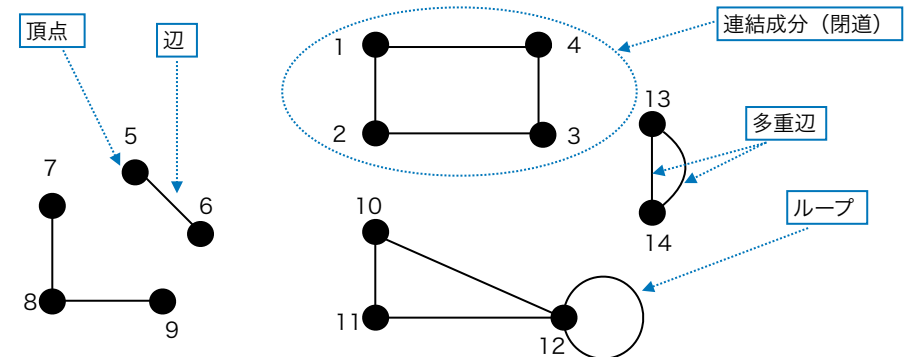
◆基本的な定義1◆

- ・有限集合 V に対して、 $E \subset V \times V$ から決まる構造 $G = (V, E)$ を**グラフ(graph)**と呼ぶ。(V :**頂点集合(vertex set)**、 E :**辺集合(edge set)**)
- ・つながった辺の列を**道(path)**、始点と終点と同じ道を**閉道(cycle)**、同じ頂点对を持つ複数本の辺を**多重辺(multiple edge)**と呼ぶ。
- ・ある辺の両端点が等しいとき、**ループ(loop)**と呼ぶ。
- ・ループも多重辺も持たないグラフを**単純グラフ(simple graph)**とよぶ。

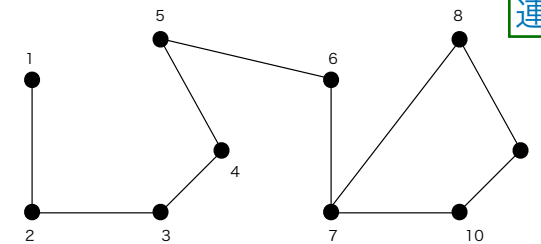
◆基本的な定義2 (! 特に重要!) ◆

- ・2頂点間に道が存在することを**連結(connect)**とよび、グラフ上の任意の2 頂点が連結なグラフを**連結グラフ(connected graph)**と呼ぶ。
- ・グラフ内の連結な成分を**連結成分(connected component)**と呼ぶ。
- ・任意の2頂点間に道があるグラフを**完全グラフ(complete graph)**と呼ぶ。

例：非連結で単純でないグラフ (非連結でも連結成分は5個)



例：連結で単純なグラフ (連結成分は1個)



※グラフが**非連結**でも**連結成分**は存在

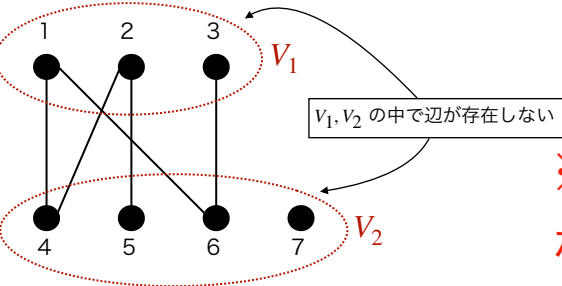
2.導入：先行研究の紹介

・単純グラフ $G(V,E)$ の頂点集合 V の部分集合 V_1, V_2 について、 $V = V_1 \cup V_2$ とし $V_1 \cap V_2 = \emptyset$

とする

・ V_1, V_2 内で辺が存在しないグラフを2部グラフとよび、 $BG(V_1, V_2, E)$ と書く。

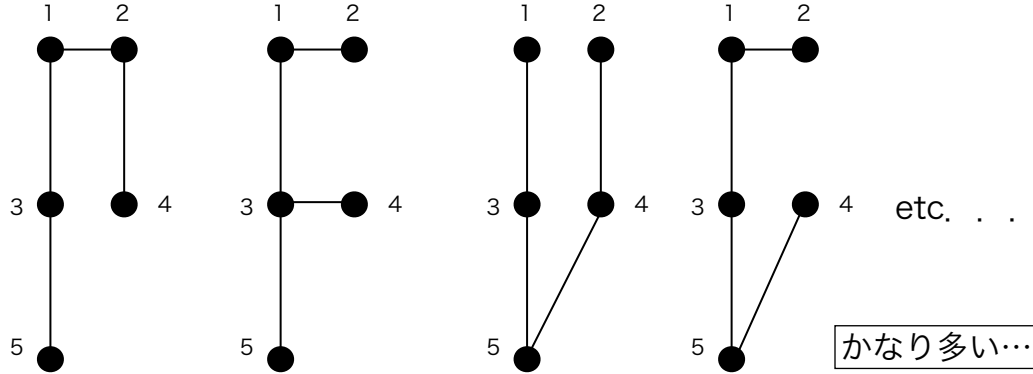
例：非連結で単純な2部グラフ（連結成分は2個）



※本稿の主役はこのような単純な2部グラフ

例：5個の頂点、4個の辺を持つグラフの全域木 (i.e. $k = 0$) は全部で何個？

$f(5,4) = ?$



◆基本的な定義3（ベッチ数による単純グラフの分類）◆

頂点集合 V 、辺集合 E の単純なグラフ $G(V,E)$ において、 k を整数とし、辺の個数 $|E| = |V| - 1 + k$ を考える。この k をベッチ数 (betti number) とよび、

- ・ $k = 0$ のとき、グラフ G を全域木 (spanning tree) とよぶ。
- ・ $k \geq 1$ のとき、グラフ G を k -サイクルグラフ (k -cycle graph) とよぶ。

◆基本的な定義4（ベッチ数による単純2部グラフの分類）◆

頂点集合 (V_1, V_2) 、辺集合 E の単純な2部グラフ $BG(V_1, V_2, E)$ において、 k を整数とし、辺の個数 $|E| = |V_1| + |V_2| - 1 + k$ を考える。この k をベッチ数とよび、

- ・ $k = 0$ のとき、2部グラフ BG を全域木とよぶ。
- ・ $k \geq 1$ のとき、2部グラフ BG を k -サイクルグラフとよぶ。

・定義3、定義4の整数 k はグラフのサイクルの個数をあらわす。

辺と頂点の数を指定した場合、連結グラフは全部で何個できるの？

※当然の疑問

- ・ n 個の頂点と q 本の辺を持つグラフを (n,q) -グラフと書く
- ・連結な (n,q) -グラフの数を $f(n,q)$ とする (ただし、 $k < -1$ のとき $f(n, n+k) = 0$)

◆Cayleyの定理 (Cayley.A. 1889) ◆

$f(n, n-1) = n^{n-2}$

- ・ $|V_1| = r, |V_2| = s, |E| = q$ となる2部グラフを (r,s,q) -グラフと書く
- ・連結な (r,s,q) -グラフの個数を $f(r,s,q)$ とする ($f(1,0,0) = f(0,1,0) = 1$ $f(0,0,-1) = 0$ と約束)
- ・ $q = r + s - 1$ のとき、 $f(r,s, r+s-1)$ は $|V_1| = r, |V_2| = s$ の2部グラフの全域木の個数を意味する

◆Scoinsの定理 (H.Scoins. 1962) ◆

$f(r,s, r+s-1) = r^{s-1} s^{r-1}$

単純グラフ、単純2部グラフの全域木の総数は計算できるんだ

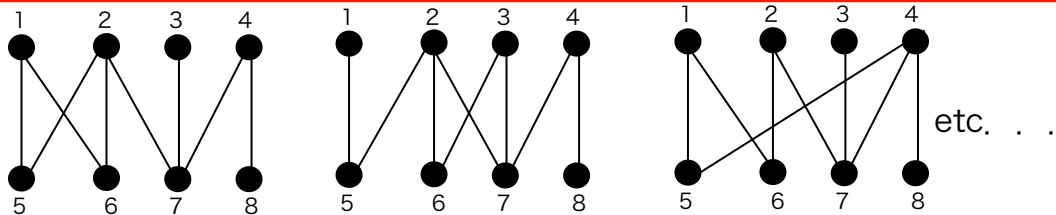
じゃあ全域木以外の総数は計算できる？
たとえばサイクルを1つないし2つ持つような単純な2部グラフはいくつあるの？

※これが主結果

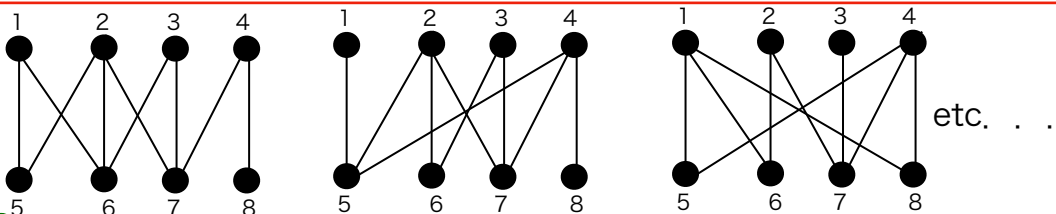
白井朋之氏 (九大 IMI) と藪奥哲史氏 (北九州高専) との共同研究による。

3.蓮井-白井-藪奥による主結果

問題1：連結でサイクルが1つある単純2部グラフは何個あるの？
 問題2：その漸近挙動は？



問題3：連結でサイクルが2つある単純2部グラフは何個あるの？
 問題4：その漸近挙動は？



◆ (r,s,q) -グラフ上の連結グラフの総数の漸化式◆

$$(q+1)f(r,s,q+1)=(rs-q)f(r,s,q)+Q(r,s,q)$$

ただし $Q(r,s,q)$ は以下、

$$Q(r,s,q)=\frac{1}{2}\sum_{r_1=0}^r\sum_{s_1=0}^s\sum_{t=0}^q\binom{r}{r_1}\binom{s}{s_1}\left\{(r-r_1)s_1+r_1(s-s_1)\right\}f(r_1,s_1,t)f(r-r_1,s-s_1,q-t)$$

- ・ $Q(r,s,q)$ は2つの連結成分を $q+1$ 本目の辺で結んで完成する $(r,s,q+1)$ -グラフの総数をあらわす。
- ・ $q=r+s-1+k$ の場合の連結グラフの総数 $f(r,s,r+s-1+k)$ において、以下のように指数型母関数を定義する。

$$F_k(x,y):=\sum_{r,s=0}^{\infty}\frac{f(r,s,r+s-1+k)}{r!s!}x^ry^s$$

◆漸化式の母関数表示◆

$D_x=x\partial_x$ とし $D_y=y\partial_y$ とする。 $k=-1,0,1,2,\dots$ に対し、

$$\begin{aligned} &(D_x+D_y+k)F_{k+1} \\ &= (D_xD_y-D_x-D_y+1-k)F_k+\sum_{l=0}^{k+1}D_xF_l\cdot D_yF_{k+1-l} \end{aligned} \tag{*}$$

例： $r=12,s=10,q=18$ の場合の漸化式のイメージ

$$Q(12,10,18)=\frac{1}{2}\sum_{r_1=0}^r\sum_{s_1=0}^s\sum_{t=0}^{18}\binom{12}{r_1}\binom{10}{s_1}\left\{(12-r_1)s_1+r_1(10-s_1)\right\}f(r_1,s_1,t)f(12-r_1,10-s_1,18-t)$$

- ・ $T(x,y):=F_0(x,y)=\sum_{r,s=0}^{\infty}\frac{f(r,s,r+s-1)}{r!s!}x^ry^s$ とすると、Scoinsの定理よりこの F_0 は既知
- ・ つまり $(*)$ を $k=1,2,\dots$ と k を小さな値から順に計算すると、任意の k についての母関数を得られる
- ・ $(*)$ において $k=-1$ とすると $(D_x+D_y-1)F_0=D_xF_0\cdot D_yF_0$ ($T_x:=D_xF_0$ $T_y:=D_yF_0$ とすると、 $T_x+T_y-T=T_xT_y$)
- ・ $k=1$ すなわち2部サイクルグラフの総数 $f(r,s,r+s)$ に関する母関数 F_1 について、以下が成り立つ ($W:=T_xT_y$ とする)

◆ $f(r,s,r+s)$ の母関数◆（問題1の答え）

$$F_1(x,y)=F_1(W)=-\frac{1}{2}\left(\log(1-W)+W\right)$$

- ・ $k=1$ では母関数に $\log$ が出現
- ・ $k=2,3,4$ では母関数に $\log$ が出現しない（後述）

・指数型母関数 $A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{x^n}{n!}$ について、記号 $\langle x^n \rangle A(x)$ で a_n を表す

・ $\langle x^n \rangle F_1(x, x) = \sum_{r+s=n} \binom{n}{r} f(r, s, r+s)$ が成立

・これは頂点数 n の完全2部グラフ上のサイクルグラフの個数を意味する

◆2部1-サイクルグラフの総数の漸近挙動◆（問題2の答え）

$r+s=n$ とする。 $n=4,5,\dots$ に対し、

$$\langle x^n \rangle F_1(x, x) = n^{n-1} \sum_{2 \leq k \leq n/2} \frac{n!}{(n-2k)! n^{2k}}$$

$n \rightarrow \infty$ のとき、

$$\langle x^n \rangle F_1(x, x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} n^{n-1/2}$$

・サイクルグラフの総数の漸近挙動は

$$f(n, n) \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} n^{n-1/2} \quad (n \rightarrow \infty)$$

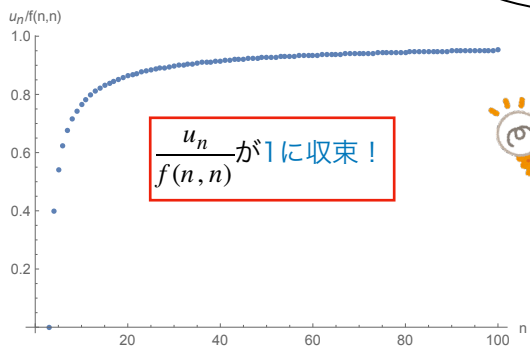
である (A.Rényi 1959.)

・つまりサイクルグラフの総数と2部サイクルグラフの総数の漸近挙動の主要項は一致する

・以下は $f(n, n)$ と $u_n := \langle x^n \rangle F_1(x, x)$ の具体的な値。有限の n では両者異なる。

n	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$f(n, n)$	1	15	222	3660	68295	1436568	33779340	880107840	25201854045
u_n	0	6	120	2280	46200	1026840	25102224	673706880	19745850960

・ u_n と $f(n, n)$ の比率のグラフは以下



つまり u_n と $f(n, n)$ は
漸近的に等しいんだ！

単純グラフと単純2部グラフ、
性質が違うのに不思議！



・ $k=2$ の場合、つまり2-サイクルグラフ（サイクルが2つある連結で単純な2部グラフ）の総数 $f(r, s, r+s+1)$ の母関数 F_2 は以下

・なお $Z := T_x + T_y$ とする

◆ $f(r, s, r+s+1)$ の母関数 ◆（問題3の答え）

$$F_2(x, y) = F_2(W) = \frac{W^2}{24(1-W)^3} \{(2+3W)Z + 2W(6-W)\}$$

・ $\langle x^n \rangle F_2(x, x)$ は頂点数 n の完全2部グラフ上の2-サイクルグラフの個数を意味する

◆2部2-サイクルグラフの総数の漸近挙動◆（問題4の答え）

$r+s=n$ とする。 $n \rightarrow \infty$ のとき、

$$\langle x^n \rangle F_2(x, x) \sim \frac{5}{48} n^{n+1}$$

・ちなみに…… F_3, F_4 は以下

◆ $f(r, s, r+s+2), f(r, s, r+s+3)$ の母関数 ◆

$$F_3(z, w) = \frac{w^3 (5 + 41w - 23w^2 + 8w^3 - w^4)}{24(1-w)^6} + \frac{w^3 (32 + 34w - 9w^2 + 3w^3)}{48(1-w)^6} z$$

$$+ \frac{w^2 (1 + 8w + 6w^2)}{48(1-w)^6} z^2$$

$$F_4(z, w) = \frac{w^3 (76w^7 - 809w^6 + 3746w^5 - 9889w^4 + 15356w^3 - 22820w^2 - 7680w - 80)}{2880(w-1)^9}$$

$$- \frac{w^3 (230w^6 - 1425w^5 + 5568w^4 - 6617w^3 + 30468w^2 + 35988w + 2088)}{5760(w-1)^9} z$$

$$- \frac{w^3 (61w^4 + 64w^3 + 1186w^2 + 1692w + 312)}{576(w-1)^9} z^2$$

$$- \frac{w^2 (254w^4 + 1919w^3 + 2624w^2 + 704w + 24)}{5760(w-1)^9} z^3$$

・ $k=1$ では母関数に $\log$ が出現（前述）

・ $k=2,3,4$ では $\log$ は出ず、母関数は有理関数（=多項式を分母分子に持つ分数関数）

つまり…

予想：

F_k ($k \geq 5$) も有理関数では？

4.発展：F_k の別表示

◆F_k の別表示◆

k ≥ 2 のとき、F_k は基本グラフを用いて T_x, T_y の有理関数の和に分解できる。

$$F_k(x, y) = \sum_{\mathcal{B} \in BG_k} J_{\mathcal{B}}(x, y)$$

ただし、

$$J_{\mathcal{B}}(x, y) = \frac{T_x^{r_{sp}+a_1+2a_2+b_2+c_2} T_y^{s_{sp}+2a_1+a_2+b_1+c_2}}{g_{\mathcal{B}} \left(1 - T_x T_y\right)^{a_1+a_2+b_1+b_2+c_1+c_2}}$$

である。BG_k は基本グラフ全体。g_B, r_{sp}, s_{sp}, a_i, b_j, c_k (i, j, k = 1, 2) は基本グラフ B に関する情報（後述）である。

・基本グラフとは……サイクルを2つ以上持つ (i.e. k ≥ 2) 連結な2部グラフから「葉（1本だけ辺が接続している頂点）および葉に隣接する辺を除去する」という操作を、葉がなくなるまで繰り返して得られるグラフ

例：サイクルを2つ持つ連結な2部グラフ G

さらに葉および葉に隣接する辺を除去

葉に隣接する辺

葉

葉および葉に隣接する辺を除去

G の基本グラフ B

α₁-cycle α₂-cycle β₁-path β₂-path

γ₁-path γ₂-path δ-path

葉がなくなったので完成！
γ₂-path 2つとδ-path 1つの組み合わせで成立

・基本グラフは必ず吹き出し内のパーツを組み合わせて成立する。○は辺が3本以上出る頂点 (=特殊頂点)

・それぞれのパーツの個数を a₁, a₂, b₁, b₂, c₁, c₂ とし、r_{sp} を V₁ に属する特殊頂点の数、s_{sp} を V₂ に属する特殊頂点の数、g_B を基本グラフ B のグラフ自己同型の数とする

5.応用：カッコーハッシング関連

カッコーハッシングとは……データ探索アルゴリズムのひとつ。

◆カッコーハッシングの仕組み◆

- ・新しいキー x はハッシュ関数 h₁ によって新しい格納位置 h₁(x) に挿入される
- ・h₁(x) が格納前に空なら操作は終了
- ・空でないなら h₁(x) = h₁(y) を満たすようなキー y が存在する
- ・y を別の格納位置 h₂(y) に格納する。このスロットが空ならそこで操作は終了
- ・空でないなら h₂(y) = h₂(z) を満たすようなキー z が存在する。この z を別の格納位置に格納する

以下全てのキーが格納されるまでこの動作を繰り返す

- ・全キー格納後、キー x は T₁[h₁(x)] か T₂[h₂(x)] のどちらかにある
- ・つまりキー x の探索時間は常に一定

・それぞれの図はキーを挿入した後の状態

・線は各キーが格納される2つの場所。矢印はキーの移動

・最後の赤囲いの図は f の位置にキー g を格納しようとし無限ループが発生

カッコーハッシングのイメージ*1

- ・目的のデータ（キー x）を定数時間で探すには無限ループが発生してはいけない

どんなときに無限ループが発生するんだろう？

A. キー挿入後の状態が「サイクルを持つ連結で単純な2部グラフ」の形なら無限ループが発生！

*1 Reinhard Kutzelnigg. Random bipartite graphs and their application to Cuckoo Hashing. PhD thesis, 2008.より引用