

# エッジ置換による部分自己相似グラフとそのマルチフラクタル解析

北海道大学 大学院理学院 数学専攻  
坂本信仁 (Masahiro SAKAMOTO) \*

## 概要

エッジを特定の構造に置き換えることで構成するエッジ置換グラフモデルは、再帰的な入れ子構造により自己相似的な構造を持つ。エッジを置換する構造を複数用いてグラフを構成することで、グラフ全体は部分自己相似構造をもつ。本稿では置換先の構造の違いを反映するようなエッジの重みを定義し、部分自己相似構造をもつグラフについての特徴量として重みづけられたエッジの一般化次元に注目した。

## 1 導入

### 1.1 グラフ

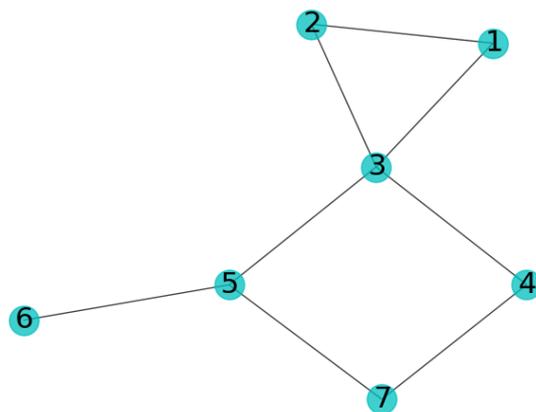


図1 グラフの例． ノード数7, エッジ数8の単純無向グラフ．

グラフ  $G$  とは, 離散集合  $V \subset \mathbb{N}$  と  $V$  の要素対を要素とする集合  $E \subset V \times V$  の集合対  $G = (V, E)$  で定義される．  $V$  の要素をノードや頂点, Vertex 等と呼び,  $E$  の要素をエッジや辺, Link 等と呼ぶ． 特定のグラフ  $G$  のノードの集合であることを明示する際には  $V(G)$  と書き, 同様にエッジの集合についても  $E(G)$  と書き表す． ノード  $u, v \in V$  の間にエッジがつながっているとき,  $(u, v) \in E$  (また

\* E-mail:m\_sakamoto\_451183@eis.hokudai.ac.jp

は  $e = (u, v)$  について,  $e \in E$  .) と書き, ノード  $u$  とノード  $v$  は「隣接している」という. また, グラフ全体のノード数を  $N$ , エッジ数を  $M$  で表す. つまり,  $|V| = N, |E| = M$  である. 図 1 を例に  $V, E$  を表すと, 以下のとおりである.

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\},$$
$$E = \{(1, 2), (2, 3), (1, 3), (3, 4), (3, 5), (4, 7), (5, 6), (5, 7)\}.$$

### 1.1.1 距離、直径

ノード  $i, j$  間の距離を  $d(i, j)$  で表し,  $i$  から  $j$  へ至る経路を構成する最小のエッジ列の長さで定義する. 図 1 において,  $d(1, 4) = 2, d(2, 7) = 3$  である.

グラフの直径をグラフ中の距離の最大値で定義する. 図 1 で表したグラフについて, 3 つのノード対  $(1, 6), (2, 6), (4, 6)$  の距離が  $d(1, 6) = d(2, 6) = d(4, 6) = 3$  でグラフ中で最大である. このように, 直径を実現するノード対は必ずしも 1 組とは限らない.

## 1.2 典型的な構造を持つグラフ

特徴的な構造を持つグラフを紹介する.  $n$ -サイクルグラフ, ツリーグラフ, 正則グラフを紹介する. また, 図 2 に具体例を載せる

- $n$ -サイクルグラフ

閉路の構造からなるグラフをサイクルやサイクルグラフとよび, とくにノード数  $n$  からなる長さ  $n$  の閉路を  $n$ -サイクルグラフや  $n$ -サイクルとよぶ.  $n$ -サイクルのエッジ数は  $n$  であり, 各ノードの次数はすべて等しく 2 である.

- ツリーグラフ

グラフ全体でサイクルの構造が存在しないものをツリーグラフとよぶ. ノード数  $n$  のツリーグラフは  $n - 1$  本のエッジをもつ.

- 正則グラフ

すべてのノードの次数が等しいグラフを正則グラフと呼び, 特に次数が  $k$  であるものを  $k$ -正則グラフと呼ぶ. また, グラフ中のどのノード対間にもエッジが存在している正則グラフを完全グラフとよぶ.

図 2 (a) はノード数, エッジ数ともに 4 の閉路である 4-サイクルグラフであり, ノードの次数は全て 2 である. 図 2 (b) はサイクルグラフからなる部分グラフが存在しないツリーグラフである. ノード数 10 に対してエッジ数 9 である. 図 2 (c) はノード数 5 からなるグラフであり, 任意のノードは自身を除く全てのノードとエッジがつながっている. このようなグラフを完全グラフと呼ぶ. 完全グラフの直径はそのノード数にかかわらず 1 である.

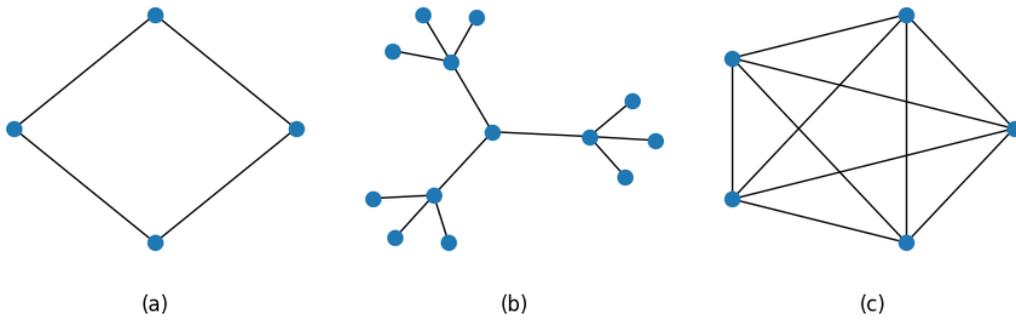


図2 典型的構造のグラフ . (a) 4-サイクル, (b) ツリーグラフ, (c) 完全グラフ (4-正則グラフ)

## 2 エッジ置換モデルグラフ

再帰的にエッジを特定の構造に置き換えることで構成するエッジ置換モデルについて紹介する。置換する特定のグラフ構造をジェネレータと呼び、エッジをジェネレータで置換する際に元のエッジのノードと重複するジェネレータのノードを置換基点と呼ぶ。

### 2.1 1つのジェネレータを用いたエッジ置換モデル

1つのジェネレータを用いて構成する例として、 $(2, 2)$ -flower グラフと呼ばれるグラフを図3で紹介する。これは、エッジを4-サイクルグラフで置換することで構成するグラフである。図3は初期状態を4-サイクルグラフとし、エッジ置換を2回繰り返したグラフである。1つのジェネレータからなるグラフについては、自己相似な構造を評価する指標としてフラクタル次元が研究されている [1]。

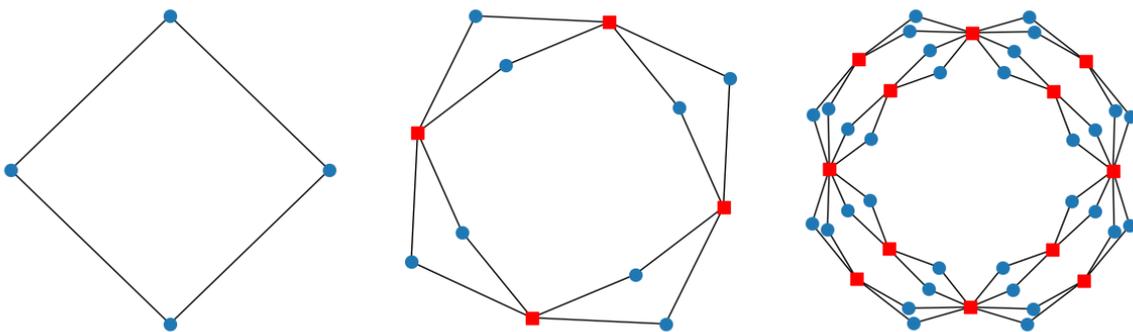


図3  $(2, 2)$ -flower グラフ . 左から順に初期状態の4-サイクルグラフ, 中央と右はそれぞれ左隣のグラフから1回エッジ置換を行ったグラフ . 新しく追加されたノードを青丸で示す .

## 2.2 複数のジェネレータを用いたエッジ置換モデル

$K$  個のジェネレータを  $S_1, \dots, S_K$  と表す．以降，ジェネレータ  $S_i$  を表す記号  $i$  の集合を  $\mathcal{L} = \{1, \dots, K\}$  で表す． $S_i$  の直径  $L_i$  について以下が成り立つようにジェネレータとそれを表す記号とを対応付ける．

$$L_i \leq L_j, (i, j \in \mathcal{L}, i < j).$$

$S_i$  のエッジ集合  $E(S_i)$  とノード集合  $V(S_i)$  について，その要素数を以下で表す．

$$\begin{aligned} m_i &= |E(S_i)|, \\ n_i &= |V(S_i)|. \end{aligned}$$

複数のジェネレータを用いてエッジ置換モデルを構築する場合，ジェネレータ中の各エッジがどのジェネレータに置換されるか定める必要がある．そこで，モデルのすべてのエッジ  $e$  に対して置換先のジェネレータのラベル  $\ell_{(e)} \in \mathcal{L}$  に基づいてエッジのラベル  $\ell_{(e)}$  を定める．エッジ  $e$  の置換先をそのラベル  $\ell_{(e)}$  と対応付けて  $S_{\ell_{(e)}}$  で定める．

エッジ置換モデルの初期状態  $G(1)$  を，ジェネレータ 1 つからなるグラフとする．以降では，特に断らない限り， $G(1)$  を  $S_1$  とする．

ジェネレータの構造と，各エッジの置換先の設定から定まる行列を定義する．

定義 1 (ジェネレータからなる部分グラフ数についての遷移行列)．ジェネレータ  $S_i$  のエッジ  $e \in E(S_i)$  で， $S_j$  に置換されるエッジの本数を用いて  $K \times K$  行列  $A = (a_{ij})$  の要素  $a_{ij}$  を

$$a_{ij} = \sum_{e \in E(S_i)} \delta_{j, \ell_{(e)}}$$

で定義する．

この行列を用いることでジェネレータ毎に置換先の個数をとらえることができ，グラフ中のジェネレータからなる部分グラフの数を計算することができる．自明な構造でグラフ全体が飽和することを避けるため，行列  $A$  が既約行列となるように置換先を設定する．

ジェネレータの構造をもとにグラフの大域的な特徴を解析するために，以降ではジェネレータの構造と置換基点について以下の制約を課す．

条件 1 . ジェネレータは連結．

条件 2 . 置換基点となるノード対は，ジェネレータ中の最遠ノード対の一つでその距離は 1 より大きい．

条件 2 について，図 4 で図解する

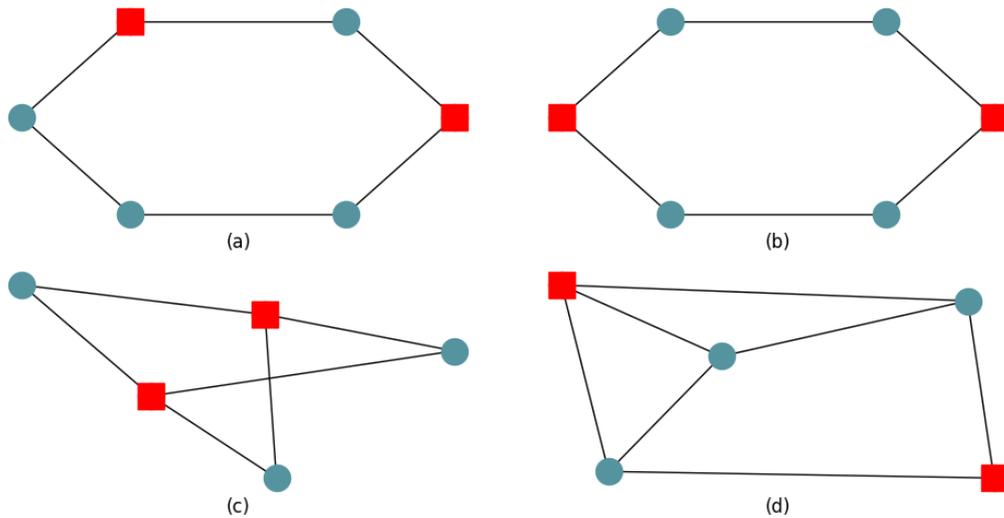


図 4 ジェネレータの条件．それぞれすべて赤い四角で表したノードをジェネレータの置換基点として考える．(a) は 6-サイクルグラフであり，2 個の置換基点の間の距離がサイクルグラフ全体の直径よりも小さいため不適切である．(b) は同じく 6-サイクルだが，置換基点間の距離がグラフ全体の直径と等しいためジェネレータについての条件 2 を満たす．(c), (d) はそれぞれ条件をすべて満たすジェネレータの例．

図 4 (a) は条件 2 を満たさないジェネレータと置換基点の例であり，置換基点の間の距離が 3 でなければならないが，この例は距離 2 であるため不適．図 4 (b) は (a) と同じ 6-サイクルグラフで条件 2 を満たす例．図 4 (c), (d) は条件をすべて満たすグラフ例である．

### 2.3 エッジ置換モデルの直径

一般に、与えられたグラフの直径を正確に推定することは困難である。効率的に 2 ノード間の最短距離探索をするアルゴリズムとしては Dijkstra 法等が知られており，直径の計算に用いるとノード数  $N$  に対して  $N^3$  に比例する程度の計算量であることが知られている．本稿ではグラフを構成するジェネレータの直径  $L_1, \dots, L_K$  を用いて推定する方法について，Z.Neroli による定理 [2] を紹介し，これを用いてモデルの直径を評価する．既に述べたジェネレータについての条件（図 4）から，ジェネレータ中の置換基点対の間には，少なくとも 1 つのパスが存在する．エッジ置換によるジェネレータからなる部分グラフの直径は，置換基点対間のパス上のエッジがジェネレータに置換されることで増大する．グラフ全体の直径は，ジェネレータからなる部分グラフの直径の増大と関係して増大する．この性質を用いてモデル全体の直径を推定する．

置換基点の間の距離がジェネレータの直径と等しいため，各ジェネレータの置換基点間のパスにどのような置換先が存在しているかということは，グラフの直径を考えるうえで重要である．ジェネレータの部分グラフにおいて直径を推定するうえで重要な構造を定義する．

定義 2 (置換基点対の間のパス). ジェネレータ  $S_i$  の置換基点の一方  $a_i$  から始まり  $b_i$  に至るパスで，その長さが置換基点同士間の距離と等しいものを  $P(a_i, b_i)$  と表す． $S_i$  の全ての  $P(a_i, b_i)$  からな

る集合を  $\mathcal{P}_i$  と表し,

$$\mathcal{P}_i = \{P(a_i, b_i) | P(a_i, b_i) \subset S_i\}$$

で定義する.

$\mathcal{P}_i$  を用いて,  $S_i$  のエッジを適当なジェネレータで置換した時の各  $P(a_i, b_i)$  の距離の増分を考える.

**定義 3.** 各  $P \in \mathcal{P}_i$  に対して,  $P$  を構成するエッジの置換先の数を並べたベクトル  $\mathbf{b}_i$  を以下で定義する.

$$\mathbf{b}_i = (b_{i1}, \dots, b_{iK}),$$

$$b_{ij} = \sum_{\substack{e \in P \\ \ell(e) \in \mathcal{L}}} \delta_{j\ell(e)}.$$

各ジェネレータについてのベクトル  $\mathbf{b}_i$  を並べた行列を用いて, グラフ全体の直径の推移を近似的に解析する.

**定義 4** (直径の増大に関する行列).  $\mathbf{b}_i$  を第  $i$  行成分とする行列を  $B$  とする. 各ジェネレータについて  $\mathcal{P}_i$  の要素  $P(a_i, b_i)$  を 1 つ固定する毎に  $\mathbf{b}_i$  が 1 つ定まる. とりうる全ての  $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_K$  の組み合わせからなる  $B$  の集合を  $\mathcal{B}$  で表す.

$$\mathcal{B} = \{B | B = {}^t(\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_K)\}.$$

以降で他の行列と混同する恐れがある場合は, 行列  $B \in \mathcal{B}$  を「直径の増大に関する行列」と呼ぶこととする. この行列を用いてエッジ置換前後の直径の増分を考える.

**定義 5** (行列集合の最小スペクトル半径).  $\mathcal{B}$  に含まれる行列  $B$  のスペクトル半径  $\rho(B)$  の最小値を  $r_{\min}(\mathcal{B})$  で表す.

$$r_{\min}(\mathcal{B}) := \min_B \{\rho(B) | B \in \mathcal{B}\}.$$

各ジェネレータ中の置換基点をつなぐパスのジェネレータへの置換による直径の増大は行列  $B$  を用いて考えることができ, 各ジェネレータの置換基点をつなぐパスの長さの増大に関してモデル全体の直径は増大する.  $\mathcal{B}$  のうちスペクトル半径が最小の行列  $B$  は, 1 回のエッジを置換した後のグラフで最短距離を与える置換先の組み合わせである. したがって, 十分置換を繰り返した後のグラフは,  $\mathcal{B}$  のうちスペクトル半径最小の行列  $B$  のスペクトル半径  $r_{\min}(\mathcal{B})$  の累乗でその直径が推移する. この性質からグラフ全体の直径の推移を近似的にとらえたのが次の Neroli による定理 [2] である.

**定理 6** (直径の近似式 (Neroli, '24[2])). エッジ置換モデルの直径  $L(t)$  は十分大きな置換ステップ  $t$  において以下で近似できる.

$$L(t) \simeq (r_{\min}(\mathcal{B}))^t.$$

証明は Neroli [2] Theorem 3.4 を参照のこと. 証明は大きく分けて以下のステップに基づく.

1. エッジ置換 1 ステップでの直径の増大が行列  $B \in \mathcal{B}$  を用いて表せることを示す.
2. 行列の積  $\prod_{i=1}^t$  の漸近挙動を評価し, 上限下限を求めることで直径の評価を行う.

### 3 主結果：エッジに対する重みの割り当てと一般化次元

本節では、複数のジェネレータからなるエッジ置換モデルに対して、置換先の履歴を反映するようなエッジの重みを定める。3.1 節ではエッジ置換におけるジェネレータの遷移や規格化条件等からエッジの重みを定義し、同じ重みをもつエッジの本数を表す重複度の計算を行う。次いで3.2 節では、前節で定義し計算したエッジの重みをもとにグラフの一般化次元を計算する。ここで計算される一般化次元は、グラフのエッジからなる集合に対して計算されるため、形式的にはエッジについて被覆を考える解析法であることに注意が必要である。

#### 3.1 重みの割り当て

エッジに対して重みづける方法は必ずしも一意に定まるものではない。本稿ではジェネレータの区別に注目して解析するために、エッジ置換後のジェネレータからなる部分グラフのエッジ集合は置換前のエッジと同じ重みを持ち、ジェネレータからなる部分グラフ内でエッジの重みを等分するように定める。具体的には以下の条件を満たすようにエッジの重みを考える。

条件 1. (規格化条件) 全てのエッジにわたって重みの総和をとると 1 となる。エッジ  $e$  の重み  $\mu(e)$  について、

$$\sum_{e \in E(G(t))} \mu(e) = 1$$

を満たす。

条件 2. (重みの継承) エッジの置換先の部分グラフに含まれる各エッジの重みの総和が置換元のエッジの重みと等しい。あるエッジ  $e$  でその記号が  $\ell_{(e)} \in \mathcal{L}$  であるものから置換された部分グラフ  $g_{\ell_{(e)}}$  と、そのエッジ  $e' \in E(g_{\ell_{(e)}})$  の重み  $\mu(e')$  について

$$\mu(e) = \sum_{e' \in E(g_{\ell_{(e)}})} \mu(e')$$

を満たす。

条件 3. (重みの等分) ジェネレータからなる部分グラフに含まれるエッジは全て同じ重みをもつ。あるジェネレータ構造からなる部分グラフ  $g$  のエッジ集合  $E(g)$  に含まれるエッジ  $e, e' \in E(g)$  について、

$$\mu(e) = \mu(e')$$

が成り立つ。

モデルの構成法から、エッジと置換先は記号で対応付けられる。つまり、 $G(t-1)$  のエッジ  $e$  をジェネレータ  $S_{\ell_{(e)}}$  で置換することは、エッジ  $e$  についての長さ  $t-1$  の記号列  $I_e$  の末尾に  $\ell_{(e)} \in \mathcal{L}$  を追加することと考えられる。長さ  $t-1$  の記号列  $I_e$  と関係づけられたエッジを  $S_j$  へと置換する場合、置換後のジェネレータ  $S_j$  からなる部分グラフ  $g_j$  に含まれるエッジ  $e' \in E(g_j)$  についての記号列  $I_{e'}$

は、末尾に  $j$  を追加した長さ  $t$  からなる記号列と対応づけられる。但し、グラフ全体で同じ記号と対応付けられるエッジは複数存在することに注意が必要である。以上から、 $G(t)$  のエッジ  $e$  について、その重み  $\mu(e)$  を以下で定義する。

定義 7 (エッジの重み). エッジ  $e$  の重み  $\mu(e)$  をエッジ置換先の遷移履歴を表す記号列  $I_e$  とジェネレータ  $S_i$  のエッジ数  $m_i$  を用いて、

$$\mu(e) = \prod_{i \in I_e} \left( \frac{1}{m_i} \right)^{n(I_e, i)}$$

と定義する。但し、 $n(I_e, i)$  は記号列  $I_e \in \mathcal{L}^t$  における記号  $i$  の出現回数を表し、以下で定める。

$$n(I_e, i) = \sum_{k \in I_e} \delta_{ik}.$$

同じ記号列  $I_e$  を持つエッジの本数  $\rho(\mu(e))$  は以下で計算される。

命題 8 (エッジの重みの重複度). 記号列  $I_e$  に対応するエッジの重み  $\mu(e)$  をもつエッジの本数は以下で計算される。

$$\rho(\mu(e)) = \prod_{k=1}^{t-1} a_{i_k i_{k+1}}.$$

但し、記号列  $I_e$  の  $k$  番目の記号を  $i_k$  と表す。

### 3.2 一般化次元

複数のジェネレータからなるエッジ置換モデルの一般化次元を部分グラフのエッジ集合に対して定義する。ここで、置換前のエッジ  $e$  の重み  $\mu(e)$  と、 $e$  を置換した後の部分グラフ  $g_e$  のエッジ集合の重み  $\mu(E(g_e))$  は等しいため、ジェネレータ構造からなる部分グラフを被覆の部分グラフと考える代わりに、置換後のジェネレータ構造に対応するエッジを被覆対象として考え、その重みを用いることでエッジ集合のモデルの一般化次元を計算する。

グラフのボックス次元を数値的に解析する先行研究の手法 [3, 4] にならい、ユークリッド距離の定まらないグラフに対して集合についての一般化次元における被覆の直径に相当する量を考えるために、被覆する部分グラフの直径をグラフ全体の直径で除して規格化した値を用いる。本稿ではエッジを被覆対象として考えているため、グラフ全体の直径  $L(t)$  を用いて被覆する部分グラフの直径を規格化した値は  $1/L(t)$  で計算する。モデルの一般化次元  $D(q)$  は次のように計算できる。

定義 9 (エッジ集合の一般化次元). エッジ置換モデルの一般化次元を以下で定義する。

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\log(Z_t(q))}{\log(1/L(t))} \quad (q \neq 1).$$

但し  $L(t)$  は 2.3 節で与えた  $G(t)$  の直径で、分割和  $Z_t(q)$  は以下で計算する。

$$Z_t(q) = \sum_{e \in E(G(t))} (\mu(e))^q.$$

$q = 1$  の一般化次元は

$$D_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mu(e) \log(\mu(e))}{\log(1/L(t))}$$

で表すことができる．一般化次元の計算に用いる分割和はエッジの重みの  $q$  乗の総和であり，エッジ  $e$  の重み  $\mu(e)$  と重複度  $\rho(\mu(e))$  は，定義 7 と命題 8 から，エッジ  $e$  についての記号列  $I_e = (i_1, \dots, i_t)$  を用いて以下のように表せる．

$$\mu(e) = \prod_{i \in I_e} \left( \frac{1}{m_i} \right)^{i_{\{I_e\}}},$$

$$\rho(\mu(e)) = \prod_{k=1}^{t-1} a_{i_k, i_{k+1}}.$$

これを計算するために，新しく  $K \times K$  行列  $W_q = (w_{ij}^{(q)})$  を定義する．ジェネレータからなる部分グラフの数についての遷移行列  $A$  の要素  $a_{ij}$  と，各ジェネレータ  $S_i$  のエッジ数  $m_i$  を用いて，エッジの重みを計算する行列  $W_q$  を

$$w_{ij}^{(q)} = \frac{a_{ij}}{m_i^q}.$$

でその要素を定める．ここで， $q$  は実数値パラメータとする．以降，この行列  $W_q$  を「エッジの重みについての行列」とよび，ジェネレータからなる部分グラフ数の遷移に関する行列や，直径の増大に関係する行列と区別する．行列  $W_q$  の  $t$  乗  $W_q^t$  の各要素を  $(w_{ij}^{(q),t})$  と表すことにすると， $(w_{ij}^{(q),t})$  は以下の条件に当てはまる全てのエッジの重みの重複を含めた総和を表す．

- 条件 1. エッジ置換を  $t - 1$  回行った後のグラフ  $G(t)$  である．
- 条件 2. グラフの初期状態は  $i$  番目のジェネレータ  $S_i$  ひとつからなるものである．
- 条件 3.  $t - 1$  回の置換の後，ジェネレータ  $S_j$  からなる部分グラフに含まれるエッジの重みである．

上記条件から， $(w_{ij}^{(q),t})$  はジェネレータ  $S_i$  を初期状態として  $t$  回置換を行った後の  $S_j$  の構造からなる部分グラフのエッジについての重みを表す．このことから，グラフ  $G(t)$  のエッジ集合  $E(G(t))$  に含まれるエッジの重みについての分割和  $Z_t(q)$  は以下の式から求められる．

$$Z_t(q) = X(1) W_q^t \mathbf{1}.$$

但し， $X(1)$  は初期状態のグラフ  $G(1)$  におけるジェネレータからなる部分グラフの数を並べた行ベクトルで， $\mathbf{1}$  は要素がすべて 1 からなる  $K$  次列ベクトルとする．以上から，ジェネレータに基づく重みつきグラフのエッジ集合についての一般化次元  $D_q$  は，

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\log(X(1)W_q^t \mathbf{1})}{\log(1/r_{\min}(\mathcal{B}))^t}.$$

により計算できる．

### 3.3 具体例

一般次元計算の具体例として、図5で表されるエッジとその置換先から構成されるエッジ置換モデルについて、一般化次元を計算した結果を図6に示す。

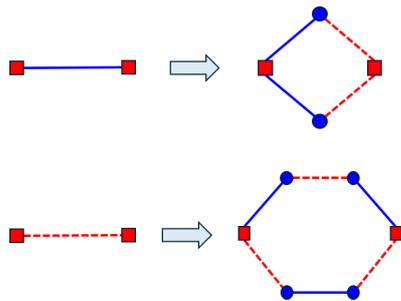


図5 4-サイクルグラフと6-サイクルグラフを用いてエッジとその置換先を定める。赤の四角で表したノードを置換基点とし、青の実線で表したエッジは4-サイクルに置換し、赤の破線で表したエッジは6-サイクルに置換する。初期状態を4-サイクルとする。

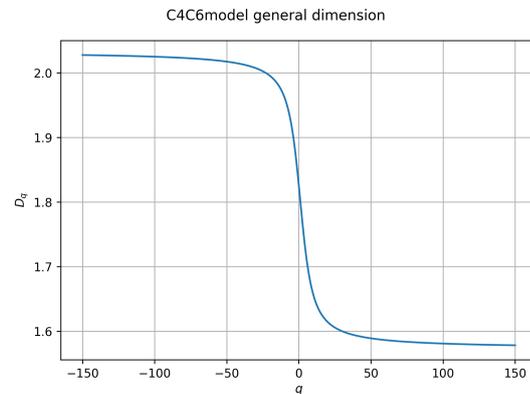


図6 左に示す置換規則で構成したエッジ置換モデルについての一般化次元。プロットする  $q$  の範囲は  $-150 \leq q \leq 150$  とした。

### 参考文献

- [1] Kousuke Yakubo and Yuka Fujiki. A general model of hierarchical fractal scale-free networks. *PLOS ONE*, Vol. 17, No. 3, pp. 1–22, Mar 2022.
- [2] Ziyu Neroli. Fractal dimensions for iterated graph systems. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 480, No. 2300, p. 20240406, 2024.
- [3] Chaoming Song, Lazaros K Gallos, Shlomo Havlin, and Hernán A Makse. How to calculate the fractal dimension of a complex network: the box covering algorithm. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2007, No. 03, p. P03006, Mar 2007.
- [4] Dan-Ling Wang, Zu-Guo Yu, and V Anh. Multifractal analysis of complex networks. *Chinese Physics B*, Vol. 21, No. 8, p. 080504, Aug 2012.