並列計算機によるシミュレーションと地図の塗り分け問題

萩田真理子
お茶の水女子大学理学部

概 要

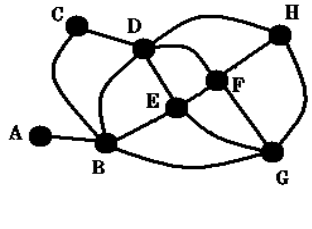
地図は何色で塗り分けることができるでしょうか？　実は,「4 色あればどんな地図でも, 隣り合う領域が異なる色となるように塗り分けることができる」と知られています. この問題はグラフの彩色問題として書き表すことができます.　この講演では, 地図の塗りわけのためのグラフの彩色問題の解説と, 実際に地図を少ない色数で塗り分けるためのアルゴリズムを紹介します.　このような地図の塗り分け問題は, たくさんの計算機でシミュレーションをするときに必要になることがあります. 例えば, 核分裂の様子を調べるのに, 空間を小さな区域に分割して, それぞれの領域に一台の計算機を割り振ってシミュレーションを行うとします. このとき, 近くの空間を割り振られた計算機に対しては, できるだけ違うタイプの乱数発生器を使いたいということが起きます. 乱数発生器のタイプが限られているときに, 近い空間ではできるだけ違うタイプの乱数発生器を使うにはどう割り振ればいいでしょうか？この問題はグラフの分散彩色問題として書き表すことができ, 実は地図の塗りわけ問題と関係しています. このような配置を実現するためのアルゴリズムも紹介したいと思います.

1　グラフの定義

グラフとは, 集合 $V = V(G)$ と集合 $E = E(G)$ のペアからなる $G = (V, E)$ で, $E \subset \{(a, b) | a, b \in V\}$ を満たすもののことです.

$V(G)$ をグラフ G の点集合, $E(G)$ をグラフ G の辺集合と呼び, それぞれの元を点, 辺と呼びます.

グラフは右図のように, V の元を点で,
E の元を点どうしを結ぶ曲線で表します.



グラフ G の点 $u, v \in V$ について, 辺 $e = (u, v)$ が存在するとき,

・点 u, v は隣接する

・u, v は辺 e に接続する

・辺 e は端点 u, v を結ぶ

といいます.

ある点から出る辺の本数をその点の次数と呼び, $d(v)$ で点 $v \in V(G)$ の次数を表します.

$x \in V(G)$ について, x に隣接する点の集合を x の近傍と呼び,
$N(x) = \{y \in V(G) | xy \in E(G)\}$ で表します. $|N(x)| = d(x)$ となります.

グラフの次数は, 握手補題として知られている次の性質を満たします.

補題 1. *任意のグラフ G について, 次数が奇数の点の数は偶数個です.*

Proof. グラフ G の次数をすべて足すと, 各辺はその両端点で一回ずつ数えられるので,

$$\sum_{v \in V(G)} d(v) = 2|E(G)|$$

となります. 右辺は偶数なので, 左辺で足された奇数は偶数個とわかります. □

以下, グラフ理論の基本的な用語です.

・H が G の部分グラフ $\Leftrightarrow$ H が $E(H) \subseteq E(G), V(H) \subseteq V(G)$ を満たすグラフ

・H が G の全域部分グラフ $\Leftrightarrow$ H が $V(H) = V(G)$ を満たす G の部分グラフ

・$S \subset V(G)$ によって誘導された G の誘導部分グラフ: S を点集合, $\{(x, y) \in E(G) | x, y \in S\}$ を辺集合とする G の部分グラフ. $S \subset V(G)$ によって誘導された G の誘導部分グラフを $< S >$ で表します.

・$G \setminus A$: 点集合 $V(G) \setminus A$, 辺集合 $\{(x, y) \in E(G) | x, y \in V(G) \setminus A\}$ のグラフ.

・グラフ G の道：G の点の列 $(v_1, v_2, \ldots, v_k)$ で $(v_i, v_{i+1}) \in E(G)$ $(i = 1, 2, \ldots, k-1)$ を満たすもの. この道を v_1 から v_k への道とも呼びます.

・道 P の長さ：道 P に使われた辺の本数

・閉路 C：$v_1 = v_k$ の道 $(v_1, v_2, \ldots, v_k)$

・u, v 間の距離 $d(u, v)$: グラフ G の点 $u, v \in V$ について, u から v への道の長さの最小値.

・グラフ G が連結：G のどの 2 点 u, v 間にも, u から v への道がある.

・グラフ G が k-連結：$|V(G)| > k$ で, $|X| < k$ なる ${}^\forall X \subset V(G)$ について $G \setminus X$ が連結.

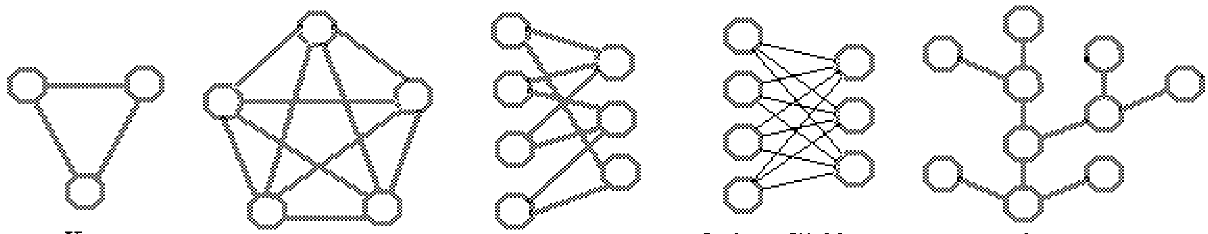
・グラフの成分：グラフ G の点 $x \in V$ について, x から有限の距離を持つ点全体で誘導されるグラフ G の誘導部分グラフを, x を含む G の連結成分, または単に G の成分という. グラフ G の異なる成分の個数を G の成分数といい, $\omega(G)$ で表す. ただし, $P = (u)$ も長さ 0 の道とみなし, $d(u, u) := 0$, また u から v への道が存在しないとき, $d(u, v) := \infty$.

・完全グラフ K_n ：相異なる 2 点がすべて隣接している位数 n のグラフ. $|E(K_n)| = n(n-1)/2$.

・完全 2 部グラフ $K_{m,n}$ ：点集合が $V(K_{m,n}) = A \cup B$, $|A| = m, |B| = n$ で 辺集合が $E(K_{m,n}) = \{(x, y) | x \in A, y \in B\}$ のグラフ.

・2 部グラフ：完全 2 部グラフの部分グラフ. つまり, 点集合が $V(G) = A \cup B$ で辺集合が $E(G) \subset \{(x, y) | x \in A, y \in B\}$ のグラフ.

・木：閉路を含まない連結なグラフ. n 点上の連結なグラフが, 木 $\Leftrightarrow$ $n-1$ 本の辺を持つ.



K_3　K_5　二部グラフ　完全二部グラフ　木

2　地図の塗り分け問題

与えられたすべての地図を隣り合う（線分を共有する）領域は違う色になるように塗り分けることができるためには, 何色の絵の具が必要でしょうか？

この問題は, 領域を点, 線分を共有する 2 領域間を辺で結んだグラフを考えると, 地図を塗り分ける問題は, 地図から作られたグラフの点を, 辺で結ばれた 2 点が異なる色になるよう塗り分けることと等しくなります.

2.1　グラフの点彩色

$G = (V(G), E(G))$：頂点集合 $V(G)$, 辺集合 $E(G)$ の有限単純無向グラフについて,

$$c : V(G) \to \{1, 2, \ldots, k\}$$

で $xy \in E(G)$ ならば $c(x) \neq c(y)$ をみたす c があるとき, G は k-彩色可能といい, この c を G の k-彩色と呼びます.

$$\chi(G) := \min\{k | G \text{ は } k-\text{彩色可能}\}$$

を G の彩色数 (chromatic number) と呼びます.

2.2　グラフ彩色の性質

基本的なグラフ彩色の性質として, 以下が成り立ちます.

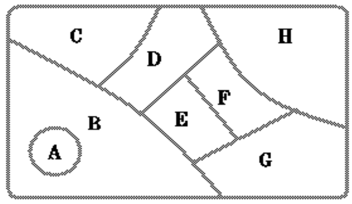
（1）$\chi(G) \leq |V(G)|$

（2）$H:G$ の部分グラフ $\Rightarrow \chi(G) \geq \chi(H)$
（3）$\chi(K_p) = p$
（4）G が K_n を部分グラフとして含む $\Rightarrow \chi(G) \geq n$

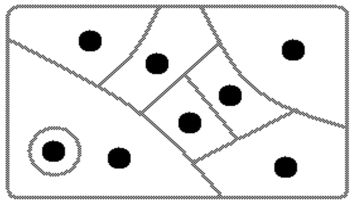
2.3　地図からグラフをつくる

地図上の領域・2 領域間の隣接関係を，グラフの点・辺として捉えると，地図の塗り分け問題をグラフの点彩色問題として考えることができます.

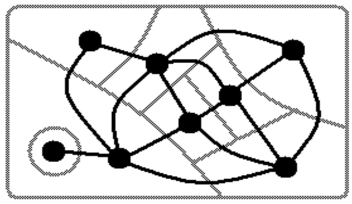
まず，地図をグラフに変換する方法を，右の地図を使って見てみましょう.



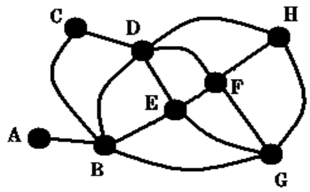
1. 各領域にひとつずつ点を描きます



2. 地図上で隣り合っている 2 領域について，対応する 2 点を結ぶ辺を描きます



3. 完成



・このようにしてつくられたグラフに対して, 点彩色を行う
ことと,
・もとの地図を，隣り合う領域が異なる色になるように塗り分ける
ことは同じ意味をもちます.

つまり，ある地図 M からつくられたグラフを 5 色で点彩色することができたなら，地図 M も 5 色で塗り分けられることになります.

2.4 地図から作られたグラフの性質

地図からグラフを作るとき，各辺を自分の領域と相手の領域だけを通る曲線として上手に描くとどの 2 辺も端点以外で交わらないように描くことができます.

・どの 2 辺も端点以外は交わらない曲線として平面上に描かれたグラフを平面グラフ,

・平面グラフとして描くことのできるグラフを平面的グラフ,

と呼びます. 地図から作られたグラフは平面的グラフです.

平面グラフについて, 何本かの辺によって囲まれた部分とすべての辺の外側にある部分を領域, または面と呼びます.

平面グラフ G について, その領域の集合を $L(G)$ であらわすことにします.

平面的グラフの性質として, 以下が知られています.

定理 2 (オイラーの定理)**.** *位数 3 以上の連結な平面グラフ G について,*

$$|V(G)| - |E(G)| + |L(G)| = 2.$$

Proof. 点の数を固定して, 辺の本数についての帰納法で証明しましょう. $|V(G)| = n$ とすると, G は連結なので $|E(G)| \geq n-1$ ですが, $|E(G)| = n-1$ のとき G は木で閉路を含みませんので, 面は一つだけで,

$$|V(G)| - |E(G)| + |L(G)| = n - (n-1) + 1 = 2$$

を満たします.

$|E(G)| \geq n$ とし, それより辺が少ないグラフでは定理が成り立つと仮定しましょう. このグラフは木ではないので閉路を含みます. 閉路の中の一辺 e を除いたグラフ G' は連結で辺の数が減っていますから, 帰納法の仮定より,

$$|V(G')| - |E(G')| + |L(G')| = 2$$

を満たします. 今, e は G の閉路の一辺でしたので, G' ではその両側にあった面が一つの面になっていて, $|L(G')| = |L(G)| - 1$ です. $|V(G')| = |V(G)|$, $|E(G')| = |E(G)| - 1$ より,

$$|V(G)| - |E(G)| + |L(G)| = 2$$

で, G でも条件を満たします. □

系 3. *位数 3 以上の連結な平面的グラフ G について,*

$$|E(G)| \leq 3|V(G)| - 6.$$

Proof. 面 L とその境界にある辺 e とのペア (L, e) の数を数えてみましょう. 内部の面は 3 本以上の辺で囲まれていて, 外部領域も 3 本以上の辺に接しているので,

$$\#\{(L, e) | e \text{ は } L \text{ の境界}\} \geq 3|L(G)|$$

を満たします. 一方, 1 辺の周りにある面は高々2 つなので,

$$\#\{(L,e) | e \text{ は } L \text{ の境界 }\} \leq 2|E(G)|$$

とわかります. オイラーの定理から $|L(G)|$ を消去すれば,

$$2|E(G)| \geq 3|L(G)| = 6 - 3|V(G)| + 3|E(G)|, \ |E(G)| \leq 3|V(G)| - 6$$

となります. □

系 4. 平面的グラフには次数 5 以下の点が存在する.

Proof. すべての点の次数が 6 以上とすると, 辺の本数は

$$|E(G)| = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(G) \geq 3|V(G)|$$

となり, 上の系に矛盾します. □

また, K_5 と $K_{3,3}$ は平面的グラフではありません.

これらの性質を使うと, すべての地図が 6 色で塗り分けられることを意味する次の定理が示せます.

定理 5 (6 色定理)**.** *G が平面的グラフならば, $\chi(G) \leq 6$.*

Proof. 点の数についての帰納法で示しましょう. 6 点以下ならすべて違う色で塗れば塗り分けられます. G を $|V(G)| = n \geq 7$ の平面的グラフとし, $n-1$ 点以下のグラフについては定理が成り立っていると仮定しましょう. 系 3 より, G には次数 5 以下の点 v が存在します. $G \setminus \{v\}$ は帰納法の仮定から 6 色で塗れるので塗ってみましょう. G に戻ると v の次数は 5 以下なので v の周りには高々5 色しか使われていません. v に, まだ周りで使われていない色をつければ G も 6 色で塗れます. □

すべての地図が 5 色で塗り分けられることを意味する次の定理も, 簡単に証明することができますので今回の講演でご紹介します.

定理 6 (5 色定理)**.** *G が平面的グラフならば, $\chi(G) \leq 5$.*

実は, すべての地図は 4 色で塗り分けることができます.

定理 7 (4 色定理)**.** *G が平面的グラフならば, $\chi(G) \leq 4$.*

4 色定理には簡単な証明が知られていませんが, どのように考えられているか, 方針だけ簡単にご紹介する予定です.

2.5 グラフ彩色アルゴリズム

与えられたグラフを比較的少ない色数で彩色するアルゴリズムとして, 次数の大きな点から順に, 使える一番小さな番号で彩色していくウェルシュ・パウエルのアルゴリズムがよく使われています.

アルゴリズム 1 (ウェルシュ・パウエルのアルゴリズム).
入力：グラフ G.

(0) $V(G) = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$ が $d(v_1) \geq d(v_2) \geq ... \geq d(v_n)$ を満たすように並べ替える.

(1) $i = 1$ とする.

(2) $c = 1$ とする.

(3) v_i の隣接点で色 c を持つものが存在しなければ, v_i に色 c を与えて *(5)* へ進む.

(4) $c = c + 1$ として *(3)* に戻る.

(5) $i < P$ ならば, $i = i + 1$ として *(2)* に戻る. $i = P$ ならば終了.

出力：G の点彩色.

3 シミュレーションのためのグラフの分散彩色

並列計算機でシミュレーションをするときに, 各計算機で擬似乱数を発生させて用いることがあります.

> 例： 核分裂の様子を調べるとき, 空間を小さな区域に分割して, それぞれの領域での確率現象を, 各計算機で生成した擬似乱数を用いて計算します.

しかし, 近くの現象を扱う計算機が, 全く同じ擬似乱数列を生成していたら, それによる偏りがおきてしまいます. 相関が大きい場所では, なるべく違う関数で生成された擬似乱数を用いなくてはいけません. 何種類かの関数しかないときに, どのように割り振れば良いでしょうか？

この問題は, 領域を点として面を共有して隣り合う領域を辺で結んだグラフについて, 近くの点がなるべく違う色になるように塗り分けるにはどうしたら良いか, という問題に言い換えることができます.

3.1　グラフの分散彩色

グラフ G の彩色 c について,

$$cd(c) := \min\{d(x,y)|c(x) = c(y), x \neq y\}$$

を彩色距離と呼ぶことにします.

また, グラフ G と与えられた色数 r について,

$$cd(G,r) := \max\{cd(c)|c \text{ は } G \text{ の } r- \text{ 彩色 }\}$$

を G の色数 r での 彩色距離 としましょう.

また, グラフ G の r 色での彩色が, 距離 d 以下のどの 2 点も異なる色となっているとき, この彩色を G の 距離 d の (r-) 分散彩色と呼びます.

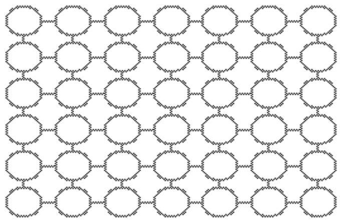
問題 1. 与えられたグラフ G と色数 r について $cd(G,r)$ の大きな彩色を見つけるアルゴリズムが作りましょう.

ここで, グラフ彩色アルゴリズムとして最初に紹介したウェルシュ・パウエルのアルゴリズムについて考えてみましょう.

このアルゴリズムでは, それぞれの点を着色するときに, まだ周りに使われていない一番番号の小さな点で塗っています. 隣に 1 で塗られた点がなければ必ず 1 で塗りますので, たいてい色 1 で塗られた距離 3 以下の 2 点が現れてしまいます. 比較的少ない色数で点彩色するアルゴリズムですが, バランスよく色を与えるアルゴリズムにはなっていないのです.

4　格子グラフの分散彩色

n 次元空間の格子点, つまり座標がすべて整数の点全体を点集合として, その空間内での距離が 1 の 2 点間を辺で結んだグラフを n 次元格子グラフといいます. 右は 2 次元格子グラフです.



最初の空間内の核分裂の様子を調べる問題は, 空間を小さな立方体に分割してそれぞれの領域を点として, 面を共有して隣り合う領域を辺で結んだグラフ G について, $cd(G,r)$ の大きな r-彩色を見つけるという問題に言い換えることができますが, このグラフ G は 3 次元の格子グラフになっています.

問題 2. 格子グラフ G が $cd(G,r) \geq d$ となるためには何色必要でしょうか？

4.1 格子グラフの最適な分散彩色

まず 2 次元の格子グラフについて考えてみましょう.
たとえば $d = 2m$ では,

$$D_{2m} := \left\{(a,b)\middle|a,b \in Z, |a| + |b| \leq m\right\}$$

を考えると, この中のどの 2 点も距離は $2m$ 以下で,

$$|D_{2m}| = 2m + 1 + 2((2m-1) + (2m-3) + \cdots + 1) = 2m^2 + 2m + 1$$

なので, 少なくとも $2m^2 + 2m + 1$ 色は必要です.
このように各点から距離 d 以下の点を異なる色とするために必要な色数で, 実際にそのグラフを塗り分けることができたとき, 完全な分散彩色と呼ぶことにします.

定理 8. *G : 2 次元格子グラフのとき, 完全な分散彩色が存在します.*

Proof. 上記より, $d = 2m$ では少なくとも $2m^2 + 2m + 1$ 色は必要ですが, 格子点 (x, y) を, 色 $(2m+1)x + y \mod 2m^2 + 2m + 1$ で塗れば分散彩色になってます.
$d = 2m + 1$ でも,

$$D_{2m+1} := \left\{(a,b) \in Z^2\middle| \ |b| \leq |a| \ (0 \leq a \leq m), |b| \leq 2m + 1 - |a| \ (m + 1 \leq a \leq 2m + 1)\right\}$$

を考えると, この中のどの 2 点も距離は $2m + 1$ 以下で,

$$|D_{2m+1}| = 2((2m+1) + (2m-1) + (2m-3) + \cdots + 1) = 2m^2 + 4m + 2$$

なので, 少なくとも $2m^2 + 4m + 2$ 色は必要ですが, 格子点 (x, y) を, 色 $(2m+1)x + y \mod 2m^2 + 4m + 2$ で塗れば分散彩色になっています. これらは完全な分散彩色です. □

問題 3. *$n \geq 3$ についても, G : n 次元格子グラフのとき, 完全な分散彩色は存在するでしょうか?*

実は, 2 次元のように無駄の全くない分散彩色は存在しないことがわかっています.

4.2 格子グラフの分散彩色アルゴリズム

まず 2 次元の格子グラフについて考えてみましょう. グラフ G を $X \times Y$ 個の点をもつ 2 次元格子グラフ, すなわち平面 $\mathcal{R}^2$ 上の格子点

$$V(G) = \{v_{(x,y)}|1 \leq x \leq X, 1 \leq y \leq Y\}$$

を点集合とし，長さ1の2点を辺集合

$$E(G) = \{v_{(x,y)}v_{(x+1,y)} | 1 \le x \le X-1, 1 \le y \le Y\} \cup \{v_{(x,y)}v_{(x,y+1)} | 1 \le x \le X, 1 \le y \le Y-1\}$$

としたグラフとします.

次のアルゴリズムは, お茶の水女子大学の研究生有間久美子さんによる与えられた色数で2次元格子グラフを分散彩色するためのアルゴリズムです.

アルゴリズム 2.
入力：グラフ G, 色数 K.

(0) 全ての点 v に色 $K+1$ を与える．$i=0$ とする.

(1) 全ての点 v に対し，v と同じ色を与えられている点までの最小距離 $d(v)$ を与える.

(2) $x=1, y=1$ とおく.

(3) $d(v_{(x,y)})$ を最も大きくするような色 $k(1 \le k \le K)$ を，点 v に与える.

(4) $x < X$ のとき，$x = x+1$ とする．$x = X$ のとき，$x=1, y=y+1$ とする.

(5) $x \le X, y \le Y$ ならば，*(3)* に戻る.

(6) $i = i+1$ とする.

出力：グラフの r-分散彩色.

前定理での塗り方は点 (x,y,z) を $ax+by+cz \bmod n$ で塗るという線形な塗り方では色数の最高次係数がもっとも小さいものと証明できていますが, 3次元での同様のアルゴリズムで彩色すると, より少ない色数での分散彩色が見つかることがあります.

今回の講演では, 彩色アルゴリズムがどのように動くか, 実際に色が塗られていく様子を紹介する予定です.