

3. グラフ理論

植野真臣
電気通信大学
大学院情報システム学研究所

1. 定義

今、 $V = \{V_1, V_2, \dots, V_N\}$ の各要素をグラフのノード (node) (または、節点・頂点 (Vertex)) とする。これらのノードはエッジ (edge) (または、枝・エッジ) と呼ばれるアークにより結ばれる。もし、二つのノード V_i と V_j の間にエッジが存在すれば E_{ij} と書くことにする。グラフのエッジ集合は、 $E = \{E_{ij} | V_i \text{ と } V_j \text{ の間にエッジが存在}\}$ として示される。すなわち、グラフ (Graph) は (V, E) によって定義される。

例11 図2.1は七つのノード $V = \{A, B, \dots, G\}$ 、六つのエッジ $E = \{E_{AB}, E_{AC}, E_{BD}, E_{CE}, E_{DF}, E_{DG}\}$ によって構成されたグラフの例である。

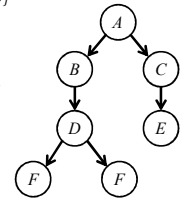


図2.1 グラフの例

2. グラフの定義

定義 20

グラフ $G = (V, E)$ は二つの集合 V と E によって定義され、 V はノードの有限集合 $V = \{V_1, V_2, \dots, V_N\}$ で、 E はエッジ集合である。さらに、グラフは個々のノードにおける二つの組をエッジで結合したすべての可能性のある集合の部分集合である。

定義 21

$G = (V, E)$ をグラフとする。 $E_{ij} \in E$ かつ $E_{ji} \notin E$ のとき、エッジ E_{ij} を **有向エッジ** (directed edge) と呼ぶ。 V_i と V_j の有向エッジは $V_i \rightarrow V_j$ と書く。

3. 定義

定義 22

$G = (V, E)$ をグラフとする。 $E_{ij} \in E$ かつ $E_{ji} \in E$ のとき、エッジ E_{ij} を **無向エッジ** (undirected edge) と呼ぶ。 V_i と V_j の無向エッジは $V_i - V_j$ または $V_j - V_i$ と書く。

定義 23

すべてのエッジが有向エッジのグラフを **有向グラフ** (directed graph) と呼び、すべてのエッジが無向エッジのグラフを **無向グラフ** (undirected graph) と呼ぶ。

4. 例

例12

図2.2は有向グラフと無向グラフの例を図 (a), (b) にそれぞれ示している。有向グラフ (a) では、グラフは以下で与えられ、

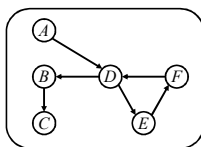
$$V = \{A, B, C, D, E, F\},$$

$$E = \{A \rightarrow D, B \rightarrow C, D \rightarrow B, F \rightarrow D, D \rightarrow E, E \rightarrow F\}.$$

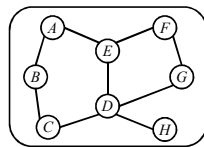
無向グラフ (b) では、グラフは以下で与えられる。

$$V = \{A, B, C, D, E, F, G, H\},$$

$$E = \{A-B, B-C, C-D, D-E, E-A, E-F, F-G, G-D, D-H\}.$$



(a)



(b)

5. 定義

定義 24

$G = (V, E)$ を所与として、 V_i の隣接ノード集合 (adjacency nodes set) は、 V_i から直接エッジが引かれたノード集合 $Adj(V_i) = \{V_j \in V | E_{ij} \in E\}$ を示す。

定義 25

V_i から V_j への **路** (path) は、 $V_{i_1} = V_i$ で始まり、 $V_{i_r} = V_j$ で終わるような以下を満たす順序化されたノード集合 $(V_{i_1}, \dots, V_{i_r})$ を示す。

$$V_{i_{k+1}} \in Adj(V_{i_k}), \quad (k = 1, \dots, r-1)$$

このとき路の長さ (length) は、エッジの数を示し、 $r-1$ である。

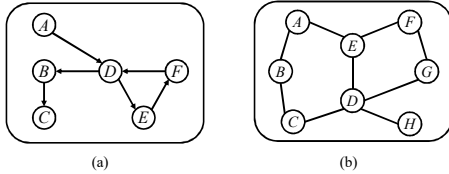
定義 26

始点と終点と同じノードとなる場合 (すなわち、 $V_{i_1} = V_{i_r}$)、(通) 路 (path) $(V_{i_1}, \dots, V_{i_r})$ は **閉路** (closed path) と呼ばれる。

6. 例

例13

図2.2の有向グラフ(a)の路 $D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow D$ は閉路である。
 図2.2の無向グラフ(b)の路 $A - B - C - D - E - A$ は閉路である。



7. 無向グラフ

定義27

すべてのノード間にエッジが張られた無向グラフを**完全グラフ** (complete graph)と呼ぶ。 N ノードの完全グラフを K_N と示す。

定義28

グラフ G の部分ノード集合 S が、すべてのノード間にエッジが張られている場合、 S を**完全集合** (complete set)と呼ぶ。

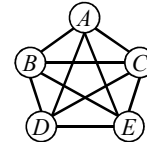


図2.3 完全グラフ K_5

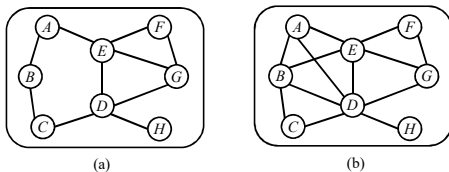
8. クリーク

定義29

完全集合 C が他のどの完全集合の部分集合にもなっていない場合、すなわち、最大の完全集合である場合、 C を**クリーク** (clique)と呼ぶ。

例15

図2.4は、二つの異なるグラフのクリークを示している。グラフ(a)は、クリーク $C_1 = \{A, B\}$, $C_2 = \{B, C\}$, $C_3 = \{C, D\}$, $C_4 = \{D, H\}$, $C_5 = \{A, E\}$, $C_6 = \{D, E, G\}$, $C_7 = \{F, E, G\}$ を含む。グラフ(b)は、クリーク $C_1 = \{A, B, D, E\}$, $C_2 = \{B, C, D\}$, $C_3 = \{D, H\}$, $C_4 = \{D, E, G\}$, $C_5 = \{E, F, G\}$ を含む。



9. 近傍

定義30

無向グラフにおける閉路 (closed path) を**ループ** (loop)と呼ぶ。

定義31

無向グラフにおいてノード V_i に隣接するノード集合を**近傍** (neighbours)と呼ぶ。

$$Nbr(V_i) = \{V_j \mid V_j \in Adj(V_i)\}$$

例16

図2.5におけるノード E の近傍は $\{A, D, F\}$ である。

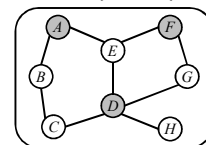


図2.5 ノード E の近傍は $\{A, D, F\}$

10. 境界

定義32

無向グラフにおいてある部分集合 S と隣接しているノード集合を S の**境界** (boundary)と呼び、 $Bnd(S)$ と書く。

$$Bnd(S) = \left(\bigcup_{V_i \in S} Nbr(V_i) \right) \setminus S$$

ここで $X \setminus S$ は X の S を除いたすべてのノード集合を示す。

例17

図2.6における $\{D, E\}$ の境界は $\{A, C, F, G, H\}$ である。

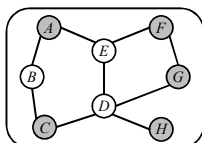


図2.6 ノード E の近傍は $\{A, C, F, G, H\}$

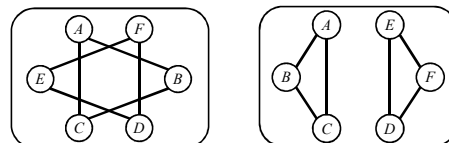
11. 無向グラフのタイプ

定義33

無向グラフのすべての二つのノード間で少なくとも一つの路が存在するとき、**連結グラフ** (connected graph)と呼ぶ。それ以外を**非連結グラフ** (disconnected graph)と呼ぶ。

例18

図2.7は、同じ構造をもつ非連結グラフの異なる二つの表現である。図(a)はエッジが交差しており、非連結には見えないが、図(b)のように交差を外し、分離すればより非連結性が強調される。



(a)

(b)

12. 木と複連結グラフ

定義34

無向グラフのすべての二つのノード間にたった一つの路しか存在しない連結グラフを、**木 (tree)** と呼ぶ。

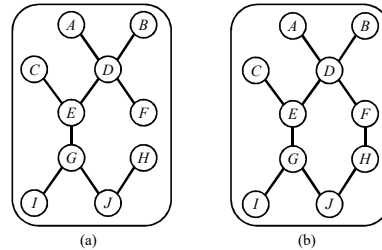
定義35

無向グラフで二つ以上の路がある頂点ペアが少なくとも一つ存在する、もしくは少なくとも一つのループを含む連結グラフを、**複連結グラフ (multiplyconnected graph)** と呼ぶ。

12. 木と複連結グラフ

例19

図2.8 (a) は木であり、図 (b) はノードDとJをつなぐ路が二つあるので複連結グラフを示している。



13. 無向グラフのまとめ

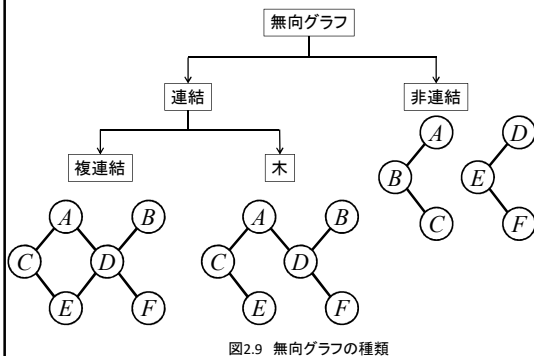


図2.9 無向グラフの種類

14. 有向グラフ

定義36

V_i から V_j への直接のエッジ $V_i \rightarrow V_j$ が存在するとき、 V_i を V_j の **親ノード (parent)** と呼び、 V_j を V_i の **子ノード (child)** と呼ぶ。ノード V_i の親ノード集合を Π_i と書く。図2.10 は、ノードEの親ノードと子ノードの例である。

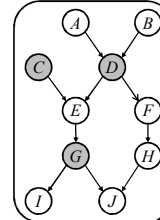


図2.10 ノードEの親ノードと子ノード

14. 有向グラフ

定義37

あるノードとその親ノードからなる集合をそのノードの **ファミリー (family)** と呼ぶ。図2.11 に、ノードD, E, Jのファミリーの例を示した。

定義38

V_j から V_i への路が存在すれば、 V_j を V_i の **先祖 (ancestor)** と呼ぶ。

定義39

ノード集合Sがノード V_i の先祖をすべて含んでいる場合、Sを **アンセスタル集合 (ancestral set)** と呼ぶ。

定義40

ノード V_i から路が存在する V_j を含まないすべてのノード集合を V_i の **子孫 (descendant)** と呼ぶ。図2.12 に、ノードEの先祖と子孫の例を示した。

15. 例

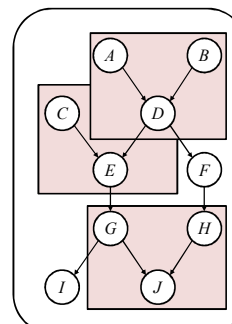


図2.11 ノードD, E, Jのファミリー

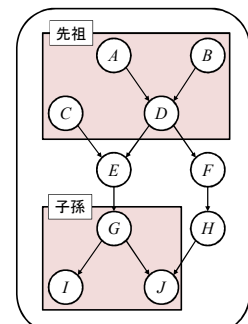


図2.12 ノードEの先祖と子孫

16. ナンバリング

定義41

$V = \{V_1, \dots, V_N\}$ を所与として, ナンバリング (numbering) α とは $\{1, \dots, N\}$ の各数字をノード集合の要素に全単射することである。すなわち,

$$\alpha: \{1, \dots, N\} \rightarrow \{V_1, \dots, V_N\}$$

$\alpha(i)$ はノード V_i に対応し, ナンバリングとはノードの順序化 $(\alpha(1), \dots, \alpha(N))$ であると解釈できる。

定義42

有向グラフでノードの番号がその子ノードよりも小さい番号が振り分けられるとき(先祖から順に番号を振り分けていくナンバリングのとき), **アンセストラルナンバリング** (ancestral numbering) と呼ぶ。

例20

同一の有向グラフでも異なるアンセストラルナンバリングが可能である。図2.13は同一の有向グラフにおける異なる二つのアンセストラルナンバリングの例を示している。

16. ナンバリング

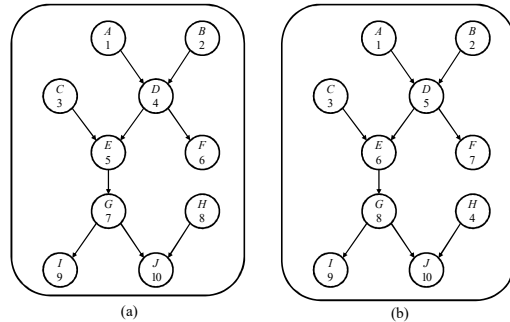


図2.13 同一の有向グラフにおける異なる二つのアンセストラルナンバリング

17. モラルグラフ

定義43

有向グラフにおける有向エッジを無向エッジに置き換えたグラフを**有向グラフに対応した無向グラフ** (undirected graph associated with a directed graph) と呼ぶ。

定義44

有向グラフにおいて共通の子ノードをもつすべての親ノードの対にエッジを張り, 方向性を取り除いて構築された「有向グラフに対応した無向グラフ」を**モラルグラフ** (moral graph) と呼ぶ。

例21

有向グラフ, 有向グラフに対応した無向グラフ, 対応したモラルグラフの例を, それぞれ図2.14(a), (b), (c) に示した。

17. モラルグラフ

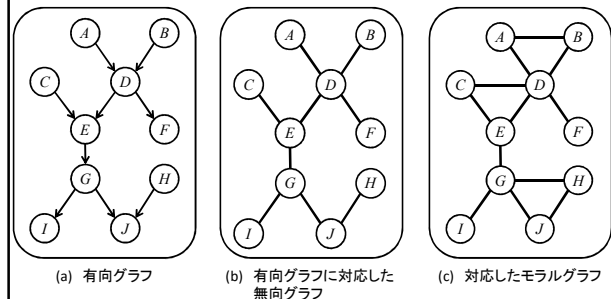


図2.14 モラルグラフの例

18. 循環

定義45

循環 (cycle) とは, 有向グラフにおける閉路のことをいう。

例22

図2.15に, 循環をもつ有向グラフとそれに対応したループをもつ無向グラフを示した。

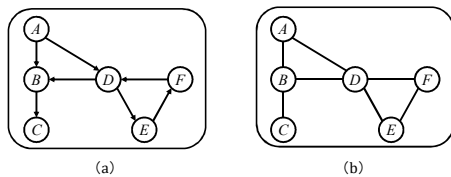


図2.15 ループと循環

19. 有向グラフのタイプ

定義46

有向グラフの対応する無向グラフが連結グラフであるとき, そのグラフを**連結有向グラフ** (connected directed graph) と呼ぶ。それ以外の場合, **非連結有向グラフ** (disconnected directed graph) と呼ぶ。

定義47

有向グラフの対応する無向グラフが木であるとき, そのグラフも**有向木** (directed tree) と呼ばれる。それ以外の場合, **複連結有向グラフ** (multiply connected directed graph) と呼ぶ。

定義48

少なくとも一つ以上の循環をもつ有向グラフを**循環グラフ** (cyclic graph) と呼ぶ。それ以外のグラフを**非循環グラフ** (directed acyclic graph) と呼び, 略して DAG と呼ばれる。

定義49

多くとも一つだけの親ノードしかもたない木を**単結合木** (simple tree) と呼び, それ以外の木を**複結合木** (polytree) と呼ぶ。

19. 有向グラフのタイプ

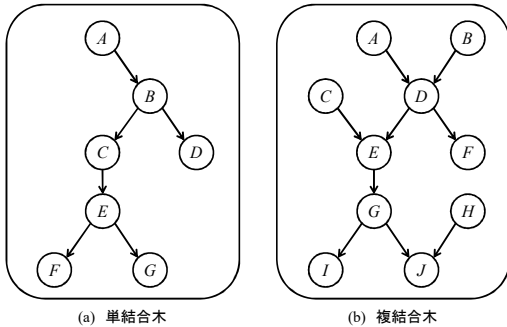


図2.16 単結合木と複結合木の例

19. 有向グラフのタイプ

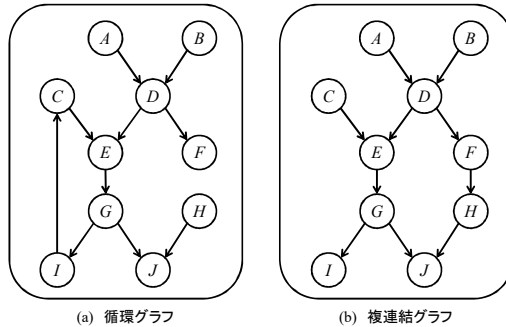


図2.17 循環グラフと複連結グラフの例

20. 弦

定義50

ループの**弦(chord)**とは、ループ中の2ノードに張られたエッジを示し、そのループを分断し二つのループに分解するようなものをいう。

例24

図2.19では、エッジE-GはループE-F-G-D-Eの弦である。

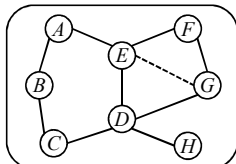


図2.19 弦を持つループの例

21. 三角グラフ

定義51

4以上の長さをもつすべてのループが少なくとも一つの弦をもつとき、**三角グラフ(triangulated graph)**もしくは**コーダルグラフ(chordal graph)**と呼ぶ。

21. 三角グラフ

イメージ

部分グラフ EFG

についてFがない場合もE-Gはエッジがあり関係は変わらない。

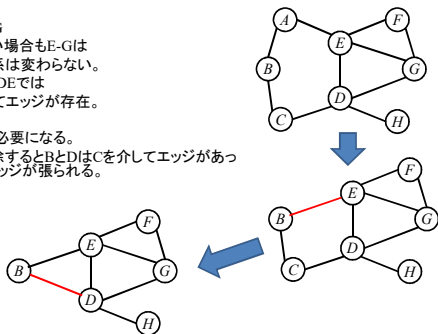
部分グラフABCDEでは

BとEはAを介してエッジが存在。

Aを削除すると

BとEにエッジが必要になる。

BCEDのCを削除するとBとDはCを介してエッジがあったので、BDにエッジが張られる。



21. 三角グラフ

イメージ

部分グラフ EFG

についてFがない場合もE-Gはエッジがあり関係は変わらない。

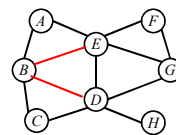
部分グラフABCDEでは

BとEはAを介してエッジが存在。

Aを削除すると

BとEにエッジが必要になる。

BCEDのCを削除するとBとDはCを介してエッジがあったので、BDにエッジが張られる。



22. 三角化

例25

図2.20 (a), (b)に, それぞれ三角グラフと非三角グラフの例を示す. 三角グラフでない場合, グラフはフィルイン(fill-in)もしくは三角化(triangulation)と呼ばれる手法によって三角グラフを構成できる.

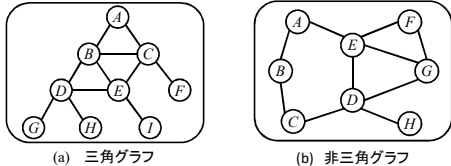
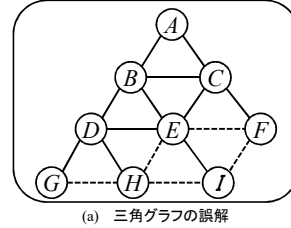


図2.20 三角グラフと非三角グラフ

22. 三角化

ただし, 三角グラフとはグラフを三角形に分配することではない. つまり, 図2.21のように三角形をつくるためにエッジを追加する必要はない.



(a) 三角グラフの誤解

22. 三角化

ループに対する弦は複数考えられるため, 当然, 一つのグラフを三角化する方法は複数考えられる. 図2.22 (a), (b) は同一グラフを二つの方法で三角化した例である.

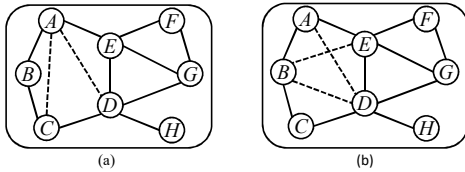


図2.22 同一グラフからの二つの異なる三角化

• 先のグラフからノードを消去する順序によって得られる三角グラフが異なる！！

ノードの消去順の 順序を考える！！

23. 完全ナンバリング

定義52

ナンバリング α が, 対象グラフの部分集合ノードについて

$$Bnd(\alpha(i)) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$$

が $i = 2, \dots, N$ について完全であるとき, **完全ナンバリング** (complete numbering) と呼ぶ.

定理13

無向グラフが三角グラフであるときのみに, 完全ナンバリングが可能となる.

24. MCSナンバリング

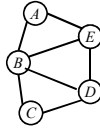
アルゴリズム1 (MCSナンバリング)

- Input: 無向グラフ $G=(V, E)$ と最初のノード V_1
- Output: V におけるナンバリング α

1. main
- Initial Step:
 2. $\alpha(1) \leftarrow V_1$
 3. $Numbered \leftarrow \{V_1\}$
- Iteration Step:
 4. for $i = 2$ to N
 5. $V_k \leftarrow$ choose a node V_k in $V \setminus Numbered$ with maximum $|Nbr(V_k) \cap Numbered|$
 6. $\alpha(i) \leftarrow V_k$
 7. add V_k to $Numbered$
 8. end for
 9. return $Numbered$
 10. end procedure

例

$\alpha(1)=C$
 $|Nbr(V_k) \cap Numbered|$
 $\rightarrow B \text{か} D \quad \alpha(2)=B$
 $\alpha(3)=D$
 $\alpha(4)=E$
 $\alpha(5)=A$



完全ナンバリング {C, B, D, E, A}

24. MCSナンバリング

定理14

三角グラフからのMCSアルゴリズムを用いて生成されるすべてのナンバリングは完全ナンバリングである。

すなわち、MCSアルゴリズムによって完全ナンバリングが得られないとき、そのグラフは三角グラフでない。MCSアルゴリズムは、与えられたグラフが三角グラフかどうかをチェックすることができるように簡単に改良することができる。すなわち、グラフが三角グラフでないときには、アルゴリズムはフィルインと呼ばれる三角グラフを構成するために足りないエッジを継ぎ足すという手続きを行う。それが以下のMCS Fill-in アルゴリズムである。

25. MCS Fill-in アルゴリズム

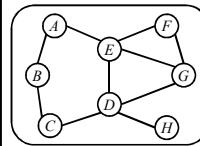
アルゴリズム2(MCS Fill-inアルゴリズム)

- Input: 無向グラフ $G=(V, E)$ と最初のノード V_s
- Output: $G'=(V, E \cup E')$ が三角グラフになるような E'

- main
- $E' \leftarrow \phi$
- $\alpha(1) \leftarrow V_s, Numbered \leftarrow \{V_s\}$
- Iteration Step:
 - $V_k \leftarrow$ choose a node V_k in $V \setminus Numbered$ with maximum $|Nbr(V_k) \cap Numbered|$
 $\alpha(i) \leftarrow V_k$, add V_k to $Numbered$
 - if $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない then $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合になるよう E' に最小数のエッジを加え3. に戻る
 - if $i < N$ then $i = i + 1$, 4. に戻る
 - return E'
 - end procedure

演習

左図の非三角グラフをMCS fill-inによって三角化してみよう

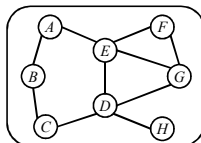


アルゴリズム2(MCS Fill-inアルゴリズム)

- Input: 無向グラフ $G=(V, E)$ と最初のノード V_s
 - Output: $G'=(V, E \cup E')$ が三角グラフになるような E'
- main
 - $E' \leftarrow \phi$
 - $\alpha(1) \leftarrow V_s, Numbered \leftarrow \{V_s\}$
 - Iteration Step:
 - $V_k \leftarrow$ choose a node V_k in $V \setminus Numbered$ with maximum $|Nbr(V_k) \cap Numbered|$
 $\alpha(i) \leftarrow V_k$, add V_k to $Numbered$
 - if $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない then $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合になるよう E' に最小数のエッジを加え3. に戻る
 - if $i < N$ then $i = i + 1$, 4. に戻る
 - return E'
 - end procedure

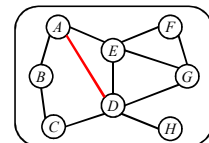
回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow B \text{か} D \quad \alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow A \text{か} D \quad \alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow E \text{か} D \quad \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow E \text{か} H \quad \alpha(5)=E$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない



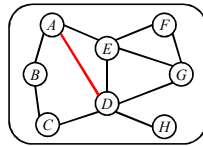
回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow B \text{か} D \quad \alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow A \text{か} D \quad \alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow E \text{か} D \quad \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow E \text{か} H \quad \alpha(5)=E$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない
 ADにフィルインエッジを引く。
 アルゴリズム Line3に戻る



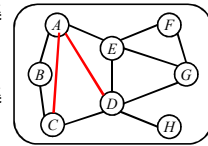
回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow B$ か D $\alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow A$ か D $\alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない



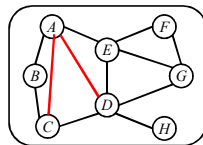
回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow B$ か D $\alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow A$ か D $\alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない
 AC にフィルインエッジを引く。
 アルゴリズム Line3に戻る



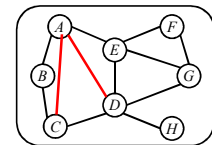
回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow B$ か D $\alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow A$ か D $\alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合でない
 AC にフィルインエッジを引く。
 アルゴリズム Line3に戻る



回答

$\alpha(1)=C$
 $\rightarrow A$ か B か D $\alpha(2)=B$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(3)=A$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(4)=D$
 $Nbr(V_k) \cap \{\alpha(1), \dots, \alpha(i-1)\}$ が完全集合
 $\rightarrow \alpha(5)=E \rightarrow \alpha(6)=G \rightarrow \alpha(7)=F \rightarrow \alpha(8)=H$



MCS Fill-inアルゴリズムの問題

残念なことに、MCS fill-in アルゴリズムはベイジアンネットワークの計算量にとって最適な三角化を保証しない。三角化の最適化については4章で述べる。

26. 交差法則

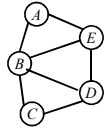
定義53
 交差法則 $C_1 \cap (C_1 \cup C_2 \cup \dots \cup C_{i-2} \cup C_{i-1})$ が $\{C_1, \dots, C_{i-1}\}$ の少なくとも一つのクリークに含まれているとき、無向グラフのクリークの順序 (C_1, \dots, C_m) は交差法則 (running intersection property) を満たすという。

この性質は、与えられたクリークとそれまでのクリーク集合の重複ノードが、少なくともそれまでのクリーク集合の一つに含まれるようにグラフのクリークを順序化できる、ということを示している。このとき、交差法則を満たすクリークの順序をクリークチェーン (chain of cliques) と呼び、以下の性質をもつ。

定理15
 無向グラフは、それが三角グラフである場合にのみ、対応するクリークチェーンをもつ。

例

- $C_1 = ABE, C_2 = BDE, C_3 = BCD$
- $C_3 \cap (C_1 \cup C_2) = BD$
- BD は C_2 に含まれている。



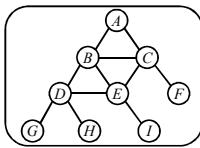
27. クリークチェーンの生成

アルゴリズム3(クリークチェーンの生成)

- Input: 三角グラフ $G=(V, E)$
 - Output: グラフ G のクリークチェーン (C_1, \dots, C_m)
1. main
 2. 初期化: ある初期ノードを選択し, アルゴリズム1を用いてノード V_1, \dots, V_N の完全ナンバリングを得る。
 3. グラフのクリークを計算する。
 4. そのノードの完全ナンバリングにおける最大値を各クリークに付与する。
 5. 振り分けられた番号に従って, クリーク (C_1, \dots, C_m) に並べ替える。
 6. return (C_1, \dots, C_m)

演習

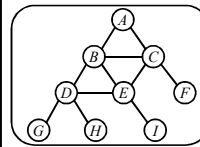
左グラフよりクリークチェーンを生成せよ



- アルゴリズム3(クリークチェーンの生成)
- Input: 三角グラフ $G=(V, E)$
 - Output: グラフ G のクリークチェーン (C_1, \dots, C_m)
1. main
 2. 初期化: ある初期ノードを選択し, アルゴリズム1を用いてノード V_1, \dots, V_N の完全ナンバリングを得る。
 3. グラフのクリークを計算する。
 4. そのノードの完全ナンバリングにおける最大値を各クリークに付与する。
 5. 振り分けられた番号に従って, クリーク (C_1, \dots, C_m) に並べ替える。
 6. return (C_1, \dots, C_m)

演習

左グラフよりクリークチェーンを生成せよ

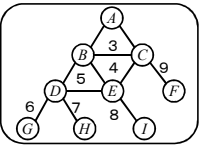


- 完全順序
- $\alpha(1)=A$
 - B or C $\alpha(2)=B$
 - $\alpha(3)=C$
 - $\alpha(4)=E$
 - $\alpha(5)=D$
 - F or G or H or I
 - $\alpha(6)=G$
 - $\alpha(7)=H$
 - $\alpha(8)=I$
 - $\alpha(9)=F$

- アルゴリズム1(MCSナンバリング)
- Input: 無向グラフ $G=(V, E)$ と最初のノード V_i
 - Output: V_i におけるナンバリング α
1. main
- Initial Step:
2. $\alpha(1) \leftarrow V_i$
 3. $Numbered \leftarrow \{V_i\}$
- Iteration Step:
4. for $i = 2$ to N
 5. $V_k \leftarrow$ choose a node V_k in $V \setminus Numbered$ with maximum $|Nbr(V_k) \cap Numbered|$
 6. $\alpha(i) \leftarrow V_k$
 7. add V_k to $Numbered$
 8. end for
 9. return $Numbered$
 10. end procedure

演習

左グラフよりクリークチェーンを生成せよ

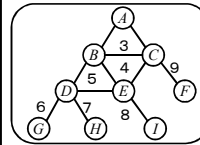


- 完全順序
- $\alpha(1)=A$
 - B or C $\alpha(2)=B$
 - $\alpha(3)=C$
 - $\alpha(4)=E$
 - $\alpha(5)=D$
 - F or G or H or I
 - $\alpha(6)=G$
 - $\alpha(7)=H$
 - $\alpha(8)=I$
 - $\alpha(9)=F$

- アルゴリズム3(クリークチェーンの生成)
- Input: 三角グラフ $G=(V, E)$
 - Output: グラフ G のクリークチェーン (C_1, \dots, C_m)
1. main
 2. 初期化: ある初期ノードを選択し, アルゴリズム1を用いてノード V_1, \dots, V_N の完全ナンバリングを得る。
 3. グラフのクリークを計算する。
 4. そのノードの完全ナンバリングにおける最大値を各クリークに付与する。
 5. 振り分けられた番号に従って, クリーク (C_1, \dots, C_m) に並べ替える。
 6. return (C_1, \dots, C_m)

演習

左グラフよりクリークチェーンを生成せよ

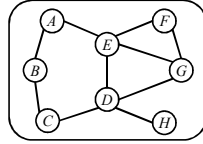


- $C_1 = ABC$
- $C_2 = BCE$
- $C_3 = BDE$
- $C_4 = DG$
- $C_5 = DH$
- $C_6 = EI$
- $C_7 = CF$

- アルゴリズム3(クリークチェーンの生成)
- Input: 三角グラフ $G=(V, E)$
 - Output: グラフ G のクリークチェーン (C_1, \dots, C_m)
1. main
 2. 初期化: ある初期ノードを選択し, アルゴリズム1を用いてノード V_1, \dots, V_N の完全ナンバリングを得る。
 3. グラフのクリークを計算する。
 4. そのノードの完全ナンバリングにおける最大値を各クリークに付与する。
 5. 振り分けられた番号に従って, クリーク (C_1, \dots, C_m) に並べ替える。
 6. return (C_1, \dots, C_m)

演習

- グラフを三角化し、
- クリーク順序を得よ。



28. ジョイントツリー

定義54

グラフにおけるあるノード集合を**クラスター**(cluster)と呼ぶ。

定義55

グラフ $G = (V, E)$ と $V = C_1 \cup C_2 \cup \dots \cup C_{m-1} \cup C_m$ となるような V のクラスター集合 $C = (C_1, \dots, C_m)$ を所与として、クラスター間の共通ノードが存在するときのみエッジが存在する、すなわち、 $(C_i, C_j) \in E'$ ならば $C_i \cap C_j \neq \emptyset$ のとき、グラフ $G = (C, E')$ を**クラスターグラフ**(cluster graph)と呼ぶ。

28. ジョイントツリー

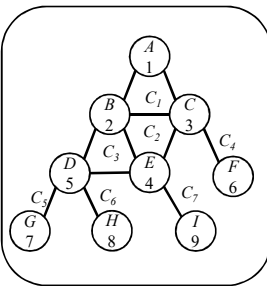


図2.24 三角グラフからの完全ナンバリング

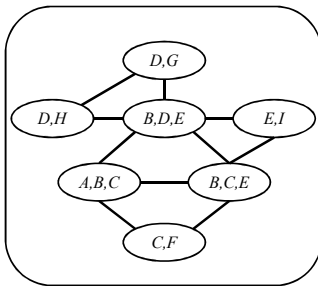


図2.25 図2.24に対応したクラスターグラフ

29. ジョイングラフ

定義56

クラスターがクリークによって構成されるクラスターグラフを**クリークグラフ**(clique graph)と呼ぶ。

定義57

共通のノードをもつ二つのクリーク間すべてにエッジが引かれているクリークグラフを**ジョイングラフ**(join graph), または**ジャンクショングラフ**(junction graph)と呼ぶ。

与えられたグラフに対し、ジョイングラフは一意に決まる。また、ジョイングラフの中で共通のノードをもつクリーク同士は完全グラフを構成する。したがって、ジョイングラフはそれがたとえ小さなグラフであっても密にエッジが張られたグラフとなることが多い。

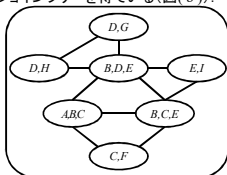
30. ジョイントツリー

定義58

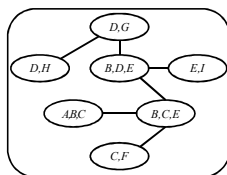
クリークグラフが木で、二つのクラスターに属するすべての共通ノードがそれらの間に存在する路のすべてのクラスターにも属しているとき、**ジョイントツリー**(join tree)または**ジャンクショントツリー**(junction tree)と呼ぶ。

例29

図2.26では、ジョイングラフから四つのエッジを削除して(図(a))ジョイントツリーを得ている(図(b))。



(a)



(b)

図2.26 ジョイングラフとジョイントツリー

定理

- ジョイングラフは 三角グラフであるとき、対応するジョイントツリーを持つ。

30. ジョイントツリー

例30

図2.27は、非三角グラフであるために(図(a)), 対応したジョイントグラフがジョイントツリーをもたない(図(b))ことを示している。例えば、 $C_1 - C_4$ を(図(b))のクラスターグラフから削除すればグラフはツリーとなるが、これはノードAが C_1 と C_4 に含まれるのに C_2, C_3 は含まれないので、ジョイントツリーではなくなる。

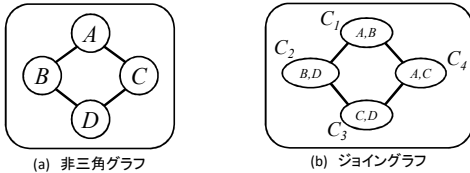


図2.27 ジョイントグラフとジョイントツリー

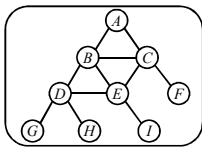
31. ジョイントツリーの生成

アルゴリズム4(ジョイントツリーの生成)

- Input: 三角グラフ $G = (V, E)$
 - Output: G に対応したジョイントツリー $G' = (C, E')$
1. main
 2. 初期化: アルゴリズム3を用いてグラフ G のクリークチェーン C_1, \dots, C_m を生成する。
 3. 各クリーク $C_i \in C (i = m, \dots, 1)$ について、 $\{C_1, \dots, C_{i-1}\}$ から最大数の共通ノードを持つクリーク C_k を選択し、エッジ $C_i - C_k$ を E' (初期状態では空)に追加する。最大数の共通ノードを持つクリークが複数ある場合、そのうちの一つを任意に選択してよい。
 4. return $G' = (C, E')$
 5. end procedure

演習

左グラフよりジョイントツリーを生成せよ

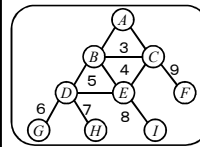


アルゴリズム4(ジョイントツリーの生成)

- Input: 三角グラフ $G = (V, E)$
 - Output: G に対応したジョイントツリー $G' = (C, E')$
1. main
 2. 初期化: アルゴリズム3を用いてグラフ G のクリークチェーン C_1, \dots, C_m を生成する。
 3. 各クリーク $C_i \in C (i = m, \dots, 1)$ について、 $\{C_1, \dots, C_{i-1}\}$ から最大数の共通ノードを持つクリーク C_k を選択し、エッジ $C_i - C_k$ を E' (初期状態では空)に追加する。最大数の共通ノードを持つクリークが複数ある場合、そのうちの一つを任意に選択してよい。
 4. return $G' = (C, E')$
 5. end procedure

演習

左グラフよりジョイントツリーを生成せよ



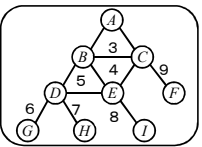
- $C_1 = ABC$
- $C_2 = BCE$
- $C_3 = BDE$
- $C_4 = DG$
- $C_5 = DH$
- $C_6 = EI$
- $C_7 = CF$

アルゴリズム4(ジョイントツリーの生成)

- Input: 三角グラフ $G = (V, E)$
 - Output: G に対応したジョイントツリー $G' = (C, E')$
1. main
 2. 初期化: アルゴリズム3を用いてグラフ G のクリークチェーン C_1, \dots, C_m を生成する。
 3. 各クリーク $C_i \in C (i = m, \dots, 1)$ について、 $\{C_1, \dots, C_{i-1}\}$ から最大数の共通ノードを持つクリーク C_k を選択し、エッジ $C_i - C_k$ を E' (初期状態では空)に追加する。最大数の共通ノードを持つクリークが複数ある場合、そのうちの一つを任意に選択してよい。
 4. return $G' = (C, E')$
 5. end procedure

演習

左グラフよりジョイントツリーを生成せよ

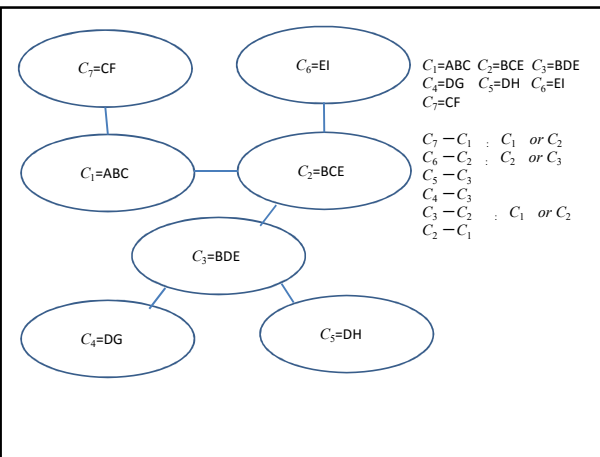


- $C_1 = ABC$ $C_2 = BCE$ $C_3 = BDE$
- $C_4 = DG$ $C_5 = DH$ $C_6 = EI$
- $C_7 = CF$

- $C_7 - C_1 : C_1 \text{ or } C_2$
- $C_6 - C_2 : C_2 \text{ or } C_3$
- $C_5 - C_3$
- $C_4 - C_3$
- $C_3 - C_2 : C_1 \text{ or } C_2$
- $C_2 - C_1$

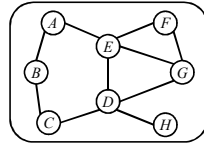
アルゴリズム4(ジョイントツリーの生成)

- Input: 三角グラフ $G = (V, E)$
 - Output: G に対応したジョイントツリー $G' = (C, E')$
1. main
 2. 初期化: アルゴリズム3を用いてグラフ G のクリークチェーン C_1, \dots, C_m を生成する。
 3. 各クリーク $C_i \in C (i = m, \dots, 1)$ について、 $\{C_1, \dots, C_{i-1}\}$ から最大数の共通ノードを持つクリーク C_k を選択し、エッジ $C_i - C_k$ を E' (初期状態では空)に追加する。最大数の共通ノードを持つクリークが複数ある場合、そのうちの一つを任意に選択してよい。
 4. return $G' = (C, E')$
 5. end procedure



演習

- グラフを三角化し、ジョイントツリーを得よ。



これまでのところ、無向グラフのクラスターツリー構築問題を取り扱ってきた。しかし、ベイジアンネットワークに適用するために、クラスターツリー概念は、有向グラフに対応した無向グラフを用いることにより適用することができる。このとき、有向グラフにおけるノードのファミリーがエビデンス更新で重要な役割を担う。いくつかの確率モデルは、ノードのファミリーのローカルな機能を通して規定される。以上のように、グラフのすべてのファミリーが少なくとも一つのクラスターに含まれるようなクラスターに注目することができる。このため、以下の定義を行う。

32. ファミリーツリー

定義59 (ファミリーツリー)

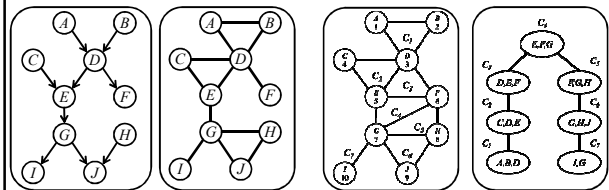
有向グラフ D のファミリーツリー (family tree) は、すべてのノードのファミリーが少なくとも一つのクラスターに含まれる D に対応した無向グラフ G のジョイントツリーのことである。

33. ファミリーツリーの生成

例32 (ファミリーツリーの生成)

(a)の有向グラフを考える。アルゴリズム5に適用してみよう。

1. (a)に対応したモラルグラフ(b)を生成する。
2. アルゴリズム2に適用して得られた三角グラフ(c)を得る。
3. 最後に、アルゴリズム4を適用して対応するファミリーツリー(d)を生成する。



(a) 有向グラフ (b) モラル化されたグラフ (c) 完全ナンバリングとクリーク順序 (d) 対応するジョイントツリー

