

鈴木讓「ベイジアンネットワーク入門」(培風館)
2. グラフィカルモデル
2.2 無向グラフ

鈴木讓

大阪大学

2010年5月13日

あらまし

- 1 分離性
- 2 Chordal 性と同値な条件
- 3 重み最大極大木アルゴリズム

U: 有限集合

$E \subseteq \mathcal{E} := \{\{X, Y\} \mid X, Y \in \mathbf{U}, X \neq Y\}$

無向グラフ $G = (\mathbf{U}, E)$

U : G の頂点集合 (要素: 頂点)

E : G の辺集合 (要素: 辺)

2 頂点 $X, Y (\in \mathbf{U})$ が隣接

$\{X, Y\} \in E$

$\{U_i\}_{i=0}^k$ が $U_0, U_k (\in \mathbf{U})$ を結ぶ (長さ $k = 0, 1, 2, \dots$ の) 経路

$U_1, \dots, U_{k-1} \in \mathbf{U}$ が存在して、 $\{U_{i-1}, U_i\} \in E, i = 1, \dots, k$

分離性

$Z(\subseteq U)$ が経路 $\{U_i\}_{i=0}^k$ を分離

- ① $k \geq 2$
- ② $U_i \in Z$ なる $1 \leq i \leq k-1$ が存在

$Z(\subseteq U)$ が $X, Y (\in U)$ を分離

Z が X, Y を結ぶ任意の経路 (一般に複数) を分離

- X, Y を結ぶ経路が存在しない $\implies Z$ は X, Y を分離
- $X = Y$ ($k = 0$) または $\{X, Y\} \in E$ ($k = 1$) $\implies Z$ は X, Y を分離しない

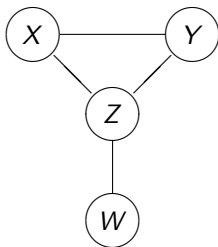
$Z(\subseteq U)$ が $X, Y(\subseteq U)$ を分離 $\langle X|Z|Y \rangle_G$

各 $X \in X, Y \in Y$ について, Z が X, Y を分離

分離性 (続)

真: $\langle \{X\} | \{Z\} | \{W\} \rangle_G, \langle \{Y\} | \{Z\} | \{W\} \rangle_G$

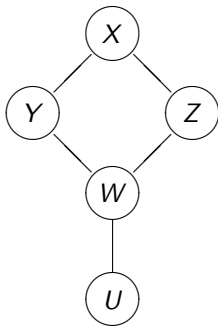
偽: $\langle \{Y\} | \{X\} | \{W\} \rangle_G, \langle \{X\} | \{Y\} | \{Z\} \rangle_G$



分離性 (続)

真: $\langle \{X\} | \{Y, Z\} | \{W\} \rangle_G$, $\langle \{X\} | \{Y, Z\} | \{U\} \rangle_G$, $\langle \{Y\} | \{X, W\} | \{Z\} \rangle_G$

偽: $\langle \{X\} | \{Y\} | \{W\} \rangle_G$, $\langle \{X\} | \{Z\} | \{U\} \rangle_G$, $\langle \{Y\} | \{X\} | \{Z\} \rangle_G$



分離性の性質

命題 2.1

$\mathbf{X} \cap \mathbf{Y} \neq \{\}$ のとき $\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G$ は偽である。

証明: $\mathbf{X} \cap \mathbf{Y}$ の要素は \mathbf{Z} で分離されないので、 \mathbf{X}, \mathbf{Y} は \mathbf{Z} で分離されない。

命題 2.2

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \iff \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} - \mathbf{X} - \mathbf{Y} | \mathbf{Y} \rangle_G \quad (13)$$

証明: $\mathbf{X} \cap \mathbf{Z}$ の要素は, どのような $X \in \mathbf{X}, Y \in \mathbf{Y}$ も分離しない。 $\mathbf{Y} \cap \mathbf{Z}$ の要素も同様。

分離性の性質 (続)

命題 2.3

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \iff \langle \mathbf{Y} | \mathbf{Z} | \mathbf{X} \rangle_G \quad (14)$$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \cup \mathbf{W} \rangle_G \iff \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \wedge \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{W} \rangle_G \quad (15)$$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{W} | \mathbf{Y} \rangle_G \wedge \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{Y} | \mathbf{W} \rangle_G \implies \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \cup \mathbf{W} \rangle_G \quad (16)$$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \implies \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{W} | \mathbf{Y} \rangle_G \quad (17)$$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \implies \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \{U\} \rangle_G \vee \langle \{U\} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G, U \notin \mathbf{Z} \quad (18)$$

証明: テキスト参照 (47-48 ページ)

(15)(17) より、

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \cup \mathbf{W} \rangle_G \implies \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{W} | \mathbf{Y} \rangle_G \wedge \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{Y} | \mathbf{W} \rangle_G \quad (19)$$

(17)(18) より、 $U \notin \mathbf{Z}$ について

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \implies \langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{Y} | \{U\} \rangle_G \vee \langle \{U\} | \mathbf{Z} \cup \mathbf{X} | \mathbf{Y} \rangle_G \quad (20)$$

巡回経路

G が連結

任意の異なる 2 頂点に経路が存在

G が完全

任意の異なる 2 頂点が隣接

$U = \{ \} \implies G = (U, E)$ は完全

経路 $\{U_i\}_{i=0}^k$ が (長さ $k = 3, 4, \dots$ の) 巡回経路

$$U_0 = U_k, U_j \neq U_i, j = 0, \dots, i-1; i = 1, \dots, k-1$$

G が森

G に巡回経路が存在しない

G が木

G が連結かつ森

Chordal

極小巡回経路

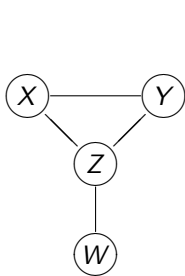
それ以上長さを短くすることができない巡回経路

G が chordal

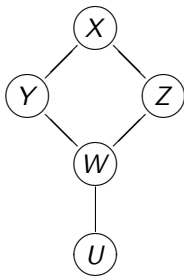
長さ 4 以上の極小巡回経路が存在しない

Chordal (続)

- G が完全 $\implies G$ が chordal である。



Chordal



Chordal ではない

Chordal (続)

命題 2.4

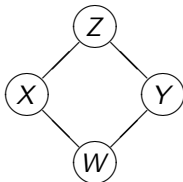
異なる $X, Y, Z, W \in U$ について、以下がいえれば G は chordal

$$\begin{aligned} & \langle \{X\} | \{Z, W\} | \{Y\} \rangle_G \wedge \langle \{Z\} | \{X, Y\} | \{W\} \rangle_G \\ & \implies \langle \{X\} | \{Z\} | \{Y\} \rangle_G \vee \langle \{X\} | \{W\} | \{Y\} \rangle_G \end{aligned} \quad (21)$$

証明： $\{X, Y\} \notin E$ かつ $\{Z, W\} \notin E$ であれば、

- $\langle \{X\} | \{Z, W\} | \{Y\} \rangle_G$, $\langle \{Z\} | \{X, Y\} | \{W\} \rangle_G$ は真
- $\langle \{X\} | \{Z\} | \{Y\} \rangle_G$, $\langle \{X\} | \{W\} | \{Y\} \rangle_G$ は偽

(長さ 5 以上の巡回経路でも同様に成立)



分解可能

$$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$$

$$\mathbf{U}' \subseteq \mathbf{U}$$

G から $\mathbf{U} - \mathbf{U}'$ の頂点を取り除いた部分グラフ $G' = (\mathbf{U}', \mathbf{E}')$

$$\mathbf{E}' := \{\{X, Y\} \in \mathbf{E} \mid X, Y \in \mathbf{U}'\}$$

(単に、無向グラフ \mathbf{U}' とよぶことがある)

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が分解可能

完全であるか、 $\mathbf{U} = \mathbf{X} \cup \mathbf{Z} \cup \mathbf{Y}$ が以下の 5 条件を満足

- ① $\mathbf{Y} \cap \mathbf{X}, \mathbf{Z} \cap \mathbf{X}, \mathbf{X} \cap \mathbf{Y} = \{\}$
- ② $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \neq \{\}$
- ③ 無向グラフ \mathbf{Z} が完全
- ④ $\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G$
- ⑤ 無向グラフ $\mathbf{X} \cup \mathbf{Z}, \mathbf{Y} \cup \mathbf{Z}$ がともに分解可能

分解可能 (続)

左は、分解可能である。実際、 $\mathbf{X} = \{X, Y\}$, $\mathbf{Z} = \{Z\}$, $\mathbf{Y} = \{W\}$

① $\mathbf{Y} \cap \mathbf{Z}, \mathbf{Z} \cap \mathbf{X}, \mathbf{X} \cap \mathbf{Y} = \{\}$

② $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \neq \{\}$

③ \mathbf{Z} は完全

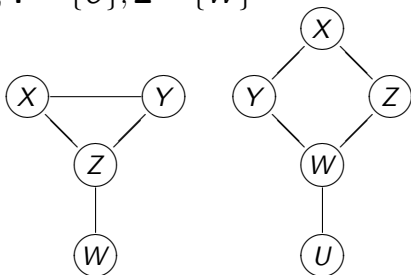
④ $\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G$

⑤ $\mathbf{X} \cup \mathbf{Z} = \{X, Y, Z\}$, $\mathbf{Y} \cup \mathbf{Z} = \{Z, W\}$ は完全なので分解可能

右は、分解可能でない。

$\mathbf{Y} \cap \mathbf{Z}, \mathbf{Z} \cap \mathbf{X}, \mathbf{X} \cap \mathbf{Y} = \{\}$, $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \neq \{\}$, $\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G$, \mathbf{Z} が完全

$\Rightarrow \mathbf{X} = \{X, Y, Z\}$, $\mathbf{Y} = \{U\}$, $\mathbf{Z} = \{W\}$



分解可能

分解可能ではない

再帰的に単純

無向グラフ $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ のクリーク

\mathbf{U} の完全な部分グラフ $\mathbf{C} (\subseteq \mathbf{U})$

クリーク $\mathbf{C} (\subseteq \mathbf{U})$ が極大クリーク

任意の $\mathbf{C}' \supsetneq \mathbf{C}$ が完全ではない

$U (\in \mathbf{U})$ が単純

U と隣接する頂点たちが極大クリークを構成

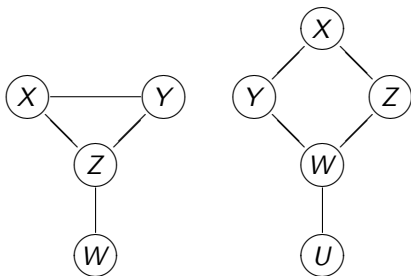
無向グラフ $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が再帰的に単純

$U_i, i = 1, \dots, n := |\mathbf{U}|$ が部分グラフ $\mathbf{U}_i := \{U_i, \dots, U_n\}$ で単純となる \mathbf{U} の列 $\{U_i\}_{i=1}^n$ が存在

再帰的に単純 (続)

左は、再帰的に単純。たとえば、 $U_1 = X, U_2 = Y, U_3 = Z, U_4 = W$

右は、再帰的に単純ではない。 $U_1 = U$ を選択して、 U_2 が見出せない



再帰的に単純 再帰的に単純ではない

接合木

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$: 無向グラフ

クリーク木 $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$

極大クリークすべてを含むクリークの集合 \mathbf{U}_T を頂点集合とする木
(辺集合を \mathbf{E}_T であらわす)

クリーク木における Running Intersection Property (RIP)

任意の異なる 2 頂点 $\mathbf{C}, \mathbf{C}' \in \mathbf{U}_T$ を結ぶ経路にある各頂点が $\mathbf{C} \cap \mathbf{C}'$ を含む

RIP を満足するクリーク木を、無向グラフ G の接合木とよぶ

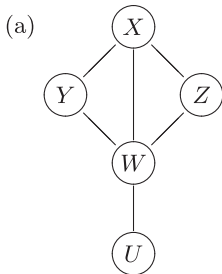
接合木 (続)

$C_1 = \{X, Y, W\}$, $C_2 = \{X, Z, W\}$, $C_3 = \{W, U\}$

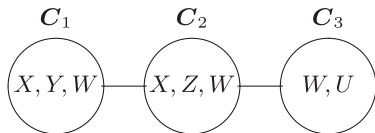
(b), (c) の各頂点は (a) のクリーク木

$C_1 \cap C_3 = \{W\} \subseteq C_2$, $C_2 \cap C_3 = \{W\} \subseteq C_1$ より、RIP が満足。

$C_1 \cap C_2 = \{X, W\} \not\subseteq C_3$ となるので, C_3 を C_1, C_2 の間におけない。

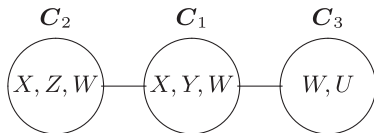


(b)



$$\{X, Y, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Z, W\}$$

(c)



$$\{X, Z, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Y, W\}$$

接合木 (続)

左は、極大クリーク $C_1 = \{X, Y, Z\}$, $C_2 = \{Z, W\}$ をクリークとする接合木 $T = (\{C_1, C_2\}, \{\{C_1, C_2\}\})$ が存在

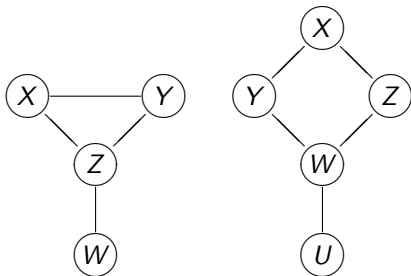
右は、接合木 T が存在すれば

$C_1 = \{X, Y\}$, $C_2 = \{X, Z\}$, $C_3 = \{Z, W\}$, $C_4 = \{W, Y\}$, $C_5 = \{W, U\}$

X を含むクリーク C_1, C_2 は隣接、 Y を含むクリーク C_1, C_4 が連結

Z を含むクリーク C_2, C_3 が連結、 W を含むクリーク C_3, C_4, C_5 が連結

巡回経路 $C_1-C_2-C_3-C_4-C_1$ より、 T が木であることと矛盾



接合木が存在

接合木が存在しない

接合木 (続)

クリーク木 $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$ が RIP を満足

\iff 各 $U \in \mathbf{U}$ を含む $\mathbf{C} \in \mathbf{U}_T$ が連結された部分木を構成

定理 2.2

無向グラフ G について、次の 4 つの条件は同値

- ① G が chordal
- ② G が分解可能
- ③ G が再帰的に単純
- ④ G の接合木が存在

証明: テキスト参照 (78-81 ページ)

重み最大極大木アルゴリズム

アルゴリズム 2.1: 重み最大極大木アルゴリズム

入力: \mathbf{U} , $w(\mathbf{e})$, $\mathbf{e} \in \mathcal{E} := \{\{X, Y\} \mid X, Y \in \mathbf{U}, X \neq Y\}$,

出力: $\sum_{\mathbf{e} \in \mathbf{E}} w(\mathbf{e})$ を最大とする \mathbf{U} を頂点とする木 $T = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$.

- ① $\mathbf{E} \leftarrow \{\}$
- ② $w(\mathbf{e})$ が最大の $\mathbf{e} \in \mathcal{E}$ について, $\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} - \{\mathbf{e}\}$
- ③ $T' = (\mathbf{U}, \mathbf{E} \cup \{\mathbf{e}\})$ が巡回経路をもたないとき, $\mathbf{E} \leftarrow \mathbf{E} \cup \{\mathbf{e}\}$
- ④ $\mathcal{E} = \{\}$ であれば, 終了。そうでなければ, 2へ。

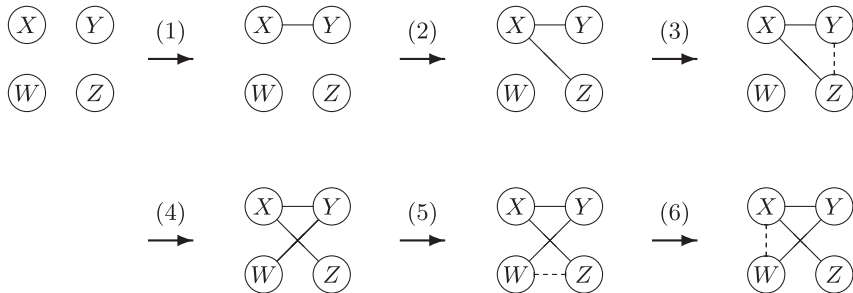
Kruscal のアルゴリズム

- $w(\cdot)$ を最大: 重み最大
- $w(\cdot)$ を最小: コスト最小

重み最大極大木アルゴリズム (続)

- (例) (1) $\{X, Y\}$ を E に加える。 (2) $\{X, Z\}$ を E に加える。
 (3) 巡回経路が生成されるので, $\{Y, Z\}$ を E に入れない。
 (4) $\{Y, W\}$ を E に加える。
 (5)(6) 巡回経路が生成されるので, $\{Z, W\}, \{X, W\}$ は E に入れない。

$w(\cdot, \cdot)$	X	Y	Z	W
X				
Y	6			
Z	5	4		
W	1	3	2	



定理 2.3

定理 2.3

アルゴリズム 2.2 は, $\sum_{e \in E} w(e)$ を最大にする U の木 $T = (U, E)$ を出力。

証明: テキスト参照 (53 ページ)

接合木の生成

アルゴリズム 2.2: chordal な無向グラフから接合木を生成

入力: chordal な $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$,

出力: $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$

- ① $\mathbf{U}_T \leftarrow \{\mathbf{C}_i \mid i = 1, \dots, m\}$ ($\mathbf{C}_i, i = 1, \dots, m$: 極大クリーク)
- ② $\mathcal{E} \leftarrow \{\{\mathbf{C}_j, \mathbf{C}_k\} \mid j \neq k\}$
- ③ $\mathbf{E}_T \leftarrow \{\}$
- ④ $|\mathbf{C}_j \cap \mathbf{C}_k|$ が最大の $\{\mathbf{C}_j, \mathbf{C}_k\} \in \mathcal{E}$ について, $\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} - \{\{\mathbf{C}_j, \mathbf{C}_k\}\}$
- ⑤ $T' = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T \cup \{\{\mathbf{C}_j, \mathbf{C}_k\}\})$ が巡回経路をもたないとき, $T \leftarrow T'$
- ⑥ $\mathcal{E} = \{\}$ であれば, 終了。そうでなければ, 4 へ。

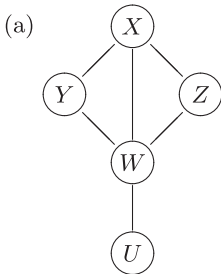
アルゴリズム 2.2 は、アルゴリズム 2.1 を適用

- 各辺の重みの総和を最大
- $\{\mathbf{C}, \mathbf{C}'\}$ に含まれる頂点の個数 $|\mathbf{C} \cap \mathbf{C}'|$ の総和を最大

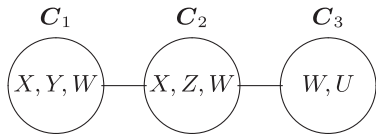
接合木の生成

(例) $C_1 = \{X, Y, W\}$, $C_2 = \{X, Z, W\}$, $C_3 = \{W, U\}$

- 1 $|C_1 \cap C_2| = |\{X, W\}| = 2$ であるので, 最初にこの辺を結ぶ。
- 2 $|C_1 \cap C_3| = |C_2 \cap C_3| = |\{W\}| = 1$ であるので, $\{C_1, C_3\}$ または $\{C_2, C_3\}$ を辺として結ぶ。

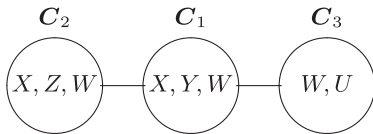


(b)



$$\{X, Y, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Z, W\}$$

(c)



$$\{X, Z, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Y, W\}$$

接合木の生成 (続)

定理 2.3

アルゴリズム 25 によって生成された $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$ は接合木である。

証明: $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$ の各辺の重みの総和は, \mathbf{U}_T が与えられると,

$$\begin{aligned} \sum_{\{\mathbf{C}, \mathbf{C}'\} \in \mathbf{E}_T} |\mathbf{C} \cap \mathbf{C}'| &= \sum_{\{\mathbf{C}, \mathbf{C}'\} \in \mathbf{E}_T} \sum_{U \in \mathbf{U}} 1[U \in \mathbf{C} \cap \mathbf{C}'] \\ &\leq \sum_{U \in \mathbf{U}} \left\{ \sum_{\mathbf{C} \in \mathbf{U}_T} 1[U \in \mathbf{C}] - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

$$1[U \in \mathbf{C} \cap \mathbf{C}'] = \begin{cases} 1, & U \in \mathbf{C} \cap \mathbf{C}' \\ 0, & U \notin \mathbf{C} \cap \mathbf{C}' \end{cases}, \quad 1[U \in \mathbf{C}] = \begin{cases} 1, & U \in \mathbf{C} \\ 0, & U \notin \mathbf{C} \end{cases}$$

G は chordal であり, 定理 2.2 より, 接合木が存在し,

$$\sum_{\{\mathbf{C}, \mathbf{C}'\} \in \mathbf{E}_T} 1[U \in \mathbf{C} \cap \mathbf{C}'] = \sum_{\mathbf{C} \in \mathbf{U}_T} 1[U \in \mathbf{C}] - 1$$

(RIP) を満足する $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$ が存在する。

したがって, (22) の等号が成立する木 $T = (\mathbf{U}_T, \mathbf{E}_T)$ が得られる。

G が chordal でない場合

E に適当な要素を加えて chordal にした後, アルゴリズム 2.2 を適用

(各クリークに含まれる U の要素の数を少なくなるように三角化する)

(E_T の要素を、両端の頂点の共通集合で表現)

$\max_{C \in E_T} |C|$ を最小にする $T = (U_T, E_T)$ を見いだす

\mathcal{NP} 困難

- \mathcal{P} 問題
- \mathcal{NP} 完全問題
- \mathcal{NP} 困難問題

4 章で詳しく検討