連結グラフのランダム生成のための構成比直接計算法

3 L－5

矢農正紀　　二村良彦
早稲田大学大学院 理工学研究科　早稲田大学 理工学部 情報学科

1 はじめに

部分グラフ数のグラフ数に対する割合を構成比と呼ぶ。各種グラフアルゴリズムの評価を精密に行うためには、頂点数nと辺数mを指定して複数のランダムな連結グラフを生成する必要があるが、一様に生成を行うためには構成比の値が必要である。本稿では、ラベル付き連結グラフに対する構成比を、計算機オーバーフローを回避して求める構成比直接計算法に関して述べる。

2 ラベル付き連結グラフの総数

連結グラフのランダム生成は、所望の性質を有する全ての連結グラフを数え上げ、それをランダマイズすることで可能となる。その数え上げにおいて基本となるのが、以下で述べるラベル付き連結グラフの総数を表す再帰方程式である。

頂点数nかつ辺数mの単純無向グラフで、各頂点に対し$v_1, v_2, \ldots, v_n$とラベルが付いた連結グラフの総数を$G(n,m)$とする。$G(1,0) = 1$であり、$m < n-1$または$m > \binom{n}{2}$の場合は$G(n,m) = 0$である。

$m = n-1$の場合は、連結グラフは木となるので、$G(n, n-1) = n^{n-2}$が成り立つ。

一般の$G(n,m)$については、Wormald[5] によって、以下の再帰方程式が求められている。

$$mG(n,m) = \left[\binom{n}{2} - (m-1)\right] G(n, m-1) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=0}^{m-1} F(n,m,i,j) \qquad (1)$$

$$F(n,m,i,j) = \binom{n}{i} i(n-i) G(i,j)G(n-i, m-j-1) \qquad (2)$$

A Method for Overflow Free Calculation of a Composite Ratio Used for Generating Random Connected Graphs
Masanori Yanoh and Yoshihiko Futamura
Graduate School of Science and Engineering, Waseda University
Department of Computer and Information Science, Waseda University

式(1)の左辺は、1本の辺に印を付けた連結グラフの総数である。右辺の第1項は、印を付けた辺を削除してもなお連結しているグラフの総数を表す。そして、第2項の二重和は、印を付けた辺が2つの連結グラフの橋であるグラフの総数を表す[4]。

3 構成比の定義

本節では、連結グラフの生成を行う上で必要である構成比を定義する。ラベル付きの(n,m)-連結グラフの構成比$P(n,m,i,j)$を、式(1)(2)から以下の式で定義する。ここで、$n > 2,\ n \le m \le \binom{n}{2}$とする。

$$P(n,m,0,0) = \frac{\left[\binom{n}{2} - (m-1)\right] G(n,m-1)}{mG(n,m)}$$

$$P(n,m,i,j) = \frac{F(n,m,i,j)}{2mG(n,m)}$$

$P(n,m,i,j)$は、(n,m)-連結グラフを構成する2つの部分グラフの一方が(i,j)-連結グラフである確率を意味する。これらの値を用いて再帰的に連結グラフを生成することで、連結グラフを一様ランダムに生成することが可能である [3]。

4 構成比直接計算法

前節で定義した構成比$P(n,m,i,j)$の分母及び分子は組合せ的に大きな数となり、計算機オーバーフローを起こし得るので、各々を別個に計算してから除算をする方法は現実的でないことに注意されたい。従って、分母と分子を計算せずに構成比を直接的に求める構成比直接計算法が実用上必要である。

構成比の直接計算を行うために、$n \le m \le \binom{n}{2}$について$R(n,m) = G(n,m)/G(n,m-1)$を定義する。

そして、式(1)を用いて、$n > 2$について$R(n,m)$を表すと以下の結果を得る。

$$R(n,m) = \frac{\binom{n}{2} - (m-1)}{m} + \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=f(n,m,i)}^{g(n,m,i)} K(n,m,i,j)$$

$$K(n,m,i,j) = \frac{1}{2m}\binom{n}{i}i(n-i)\frac{G(i,j)G(n-i,m-j-1)}{G(n,m-1)}$$

ここで、$f(n,m,i)=\max(i-1,m-1-\binom{n-i}{2})$ であり $g(n,m,i)=\min(\binom{i}{2},m-n+i)$ である。

以下の各式に従って値の小さなnとmから順に計算することで、$G(n,m)$の値を求めずに直接$R(n,m)$と$K(n,m,i,j)$を求めることができる。その実行時間は$O(m^2n^2)$であり、式(1)(2)により$G(n,m)$を計算する場合と同じ時間である [1] [2]。

1. $m=n$の場合

   (a) $j=i-1$の場合

$$K(n,n,i,i-1)=A(n,i)\frac{R(n-i,n-i)}{2}$$

   (b) $j=i$の場合

$$K(n,n,i,i)=A(n,i)\frac{R(i,i)}{2}$$

   ただし、$A(n,i)$は以下の式で定義される。

$$A(n,i) = \left[\prod_{r=1}^{i-1}\frac{i}{r+1}\left(1-\frac{r}{n}\right)\right]\left(1-\frac{i}{n}\right)^{n-i-1} \quad (3)$$

2. $m>n,\ n/2<i<n,\ m-j=n-i$の場合

$$K(n,m,i,j)=K(n,m,n-i,n-i-1)$$

3. $m>n,\ j=f(n,m,i)$の場合

   (a) $f(n,m,i)=m-1-\binom{n-i}{2}$の場合

$$K(n,m,i,j) = \frac{m-1}{m(m-j-1)R(n,m-1)} \cdot K(n,m-1,i,j)$$

   (b) $f(n,m,i)=i-1$の場合

$$K(n,m,i,i-1) = \frac{(m-1)R(n-i,m-i)}{mR(n,m-1)} \cdot K(n,m-1,i,i-1)$$

4. $m>n,\ f(n,m,i)<j\le g(n,m,i)$の場合

$$K(n,m,i,j) = \frac{R(i,j)}{R(n-i,m-j)}K(n,m,i,j-1)$$

$R(n,m)$と$K(n,m,i,j)$の値を用いることで、以下の式に従って構成比$P(n,m,i,j)$を計算できる。

$$P(n,m,0,0)=\frac{\binom{n}{2}-(m-1)}{mR(n,m)}$$

$$P(n,m,i,j)=\frac{K(n,m,i,j)}{R(n,m)}$$

5 $A(n,i)$の近似計算

構成比直接計算法で値が必要である、式(3)の$A(n,i)$は、以下のStirlingの公式で近似を行うことにより、その値を定数時間で求めることができる。

$$n! \approx (n+1)^n e^{-(n+1)}\sqrt{2\pi(n+1)}Sf(n+1) \quad (4)$$

$$Sf(n)=1+\frac{1}{12n}+\frac{1}{188n^2}-\frac{139}{51840n^3}-\frac{571}{2488320n^4}$$

式(4)を式(3)に対して用いることで、以下の結果を得る。将来$R(n,m)$を定数時間で計算可能な近似式が見つかった場合、$A(n,i)$も定数時間で計算する必要があるため、以下の近似式が必要である。

$$A(n,i)=\frac{nSf(n)}{i(n-i)Sf(i)Sf(n-i)}\sqrt{\frac{n}{2\pi i(n-i)}}$$

6 おわりに

構成比直接計算法の開発により、連結グラフのランダム生成に必要である構成比を、計算機オーバーフローを回避して生成することが可能となった。

今後の課題は、構成比を用いたランダム生成システムの実用化と、構成比の値を近似を用いて高速に計算する方法の開発である。

参考文献

[1] 二村，高野，矢農：連結グラフの生成方法およびそのプログラム，特許平9-259958，1997.

[2] 二村，矢農：実際的プログラム変換の例，日本ソフトウェア科学会第14回大会論文集，E8-2，1997.

[3] 矢農，二村：連結グラフのランダム生成，日本ソフトウェア科学会第14回大会論文集，B12-3，1997.

[4] E.M.Palmer, *Graphical Evolution - An Introduction to the Theory of Random Graphs*, Wiley, New York(1985).

[5] N.C.Wormald, *Some Problems in the Enumeration of Labelled Graphs*, Ph.D. thesis, University of Newcastle(1978).