東海大学短期大学紀要第 44 号（2010）

Branching trees clique における部分重み付け関数の最節約拡張

宮川　幹平*

（受付　2010 年 9 月 11 日）
（受理　2010 年 10 月 21 日）

A study on most-parsimonious extensions of partial assignments on a branching trees clique

by
Kampei MIYAKAWA*

Abstract

Let G be a connected simple graph with a vertex set V, an edge set E. Let G_σ be a graph G with a partial assignment maps from a subset U of V into the real number R. For a given G_σ, an assignment λ from V into R such that λ(u)=σ(u) for each u in U, is called an extension of σ on G. For an extension λ of σ, we define the length $L_\lambda(e)$ of an edge e={u,v} on λ by |λ(u)－λ(v)|, the length $L_\lambda(G_\sigma)$ of G_σ on λ by $\Sigma_{e \text{ in } E}\ L_\lambda(e)$, respectively. Furthermore, $L^*(G_\sigma)$ is defined by the minimum value of $L_\mu(G_\sigma)$ for any extension μ of σ, and an extension λ of σ such that $L_\lambda(G_\sigma)=L^*(G_\sigma)$ is called an most-parsimonious extension (abbreviated to MPE) on G_σ. We call the problems on this minimization the MPE problems.

From a mathematical point of view, D. F. Robinson (1973) has introduced these problems, and shown a polynomial time algorithm on the number of vertices for obtaining a MPE. On the other hand, from a phylogenetic point of view, J. M. Farris (1970), D. L. Swofford and W. P. Maddison (1987) have dealt with the problems on completely bifurcating phylogenetic trees and shown a solution. M. Hanazawa et al. (1995) have mathematically formulated the problems for the case of which G is a tree, and presented clear algorithms for those. Note that we have a gap between the Robinson method and the Hanazawa et al. one. Therefore, M. Hanazawa and H. Narushima (1999), K. Miyakawa and H. Narushima (2008) have extended the MPR problems for the case of which G is a graph having only one cycle, called a unicycle graph, and shown a linear time algorithm for solving the problems. In this paper, we deal with the MPE problems for a graph which consists of a complete graph and some trees, called a branching trees clique, and show some propositions.

Keywords：Most-parsimonious extension(MPE) , Phylogeny, Graph theory

1.　はじめに

ある単純な連結グラフにおいて，その一部の頂点に実数値が割り当てられているとき，残りの頂点にどのような値を割り当てるべきかという問題を考える（図 1 参照）。ここでは，各辺における両端点への割当値の絶対値差（辺の長さと呼ぶ）に着目し，その総和（グラフの長さと呼ぶ）をどれだけ小さくできるかということを，残りの頂点への割当の評価基準として用いた。この問題は，グラフとその各頂点に対する部分重み付け関数 σ が与えられたとき，その定義域をグラフの頂点集合全体に拡張した関数（σ の拡張と呼ぶ）の中で，グラフの長さを最小化するものを求める最適化問題として捉えることができる（図 2 参照）。このグラフの長さを最小化する σ の拡張を最節約拡張（MPE），関連する問題群を最節約拡張問題（MPE 問題）と呼ぶこととする。

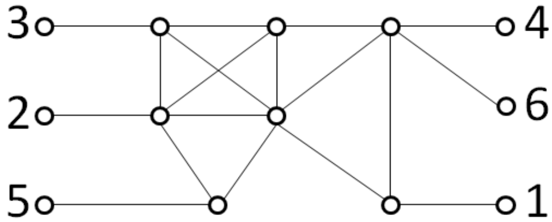
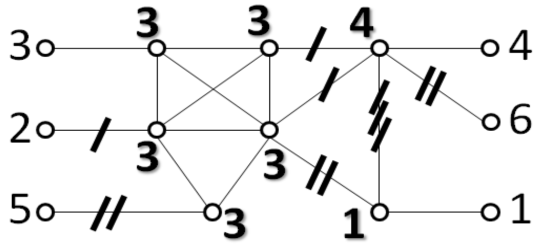


図 1　頂点に対する部分重み付け関数 σ
Fig. 1. A partial assignment σ to each vertex.

*東海大学福岡短期大学
ISSN 0386-8664



（長さ＝12）

図２　部分重み付け関数σの拡張

Fig. 2. An extension of a partial assignment σ.

この問題の起源はRobinson[1]であり，彼は単純な連結グラフに対する最節約拡張をひとつ求める多項式時間アルゴリズムを示した[*1]。一方，進化生物学において，既知の各種族が持つ形質状態(外見的特徴や遺伝子配列など)から，最節約原理のもとで最適な進化系統樹（以下，系統樹）の情報を推定・復元するという問題（進化系統樹最節約復元問題）が研究されている。ここで提示されている問題のひとつに，一部の形質状態と系統樹の樹形が与えられているときに，形質情報が未知の種族に対して最節約原理のもとで最適な形質情報（最節約復元: MPR）を求める問題がある（第 1MPR問題：以下では単にMPR問題と書く）。この問題は，まさしくRobinsonによって提示されたMPE問題の入力を木に制限したものと言えるが，MPR問題の研究はFarris[2]やSwofford－Maddison[3]を皮切りに，Robinsonによる研究とは独立に進められてきた。特に，花澤－成嶋－三中 [4]によって数理的に厳密な問題の定式化がなされた後は，その枠組みのもと，最節約復元を求める線形時間アルゴリズムや，最節約復元の特徴付け，最節約復元全体がなす集合の束論的特徴などが明らかにされてきた [5)~7)]。

このような状況を受け，Robinson の結果と MPR 問題の結果のギャップを埋める研究として，花沢－成嶋 [8,9] 及び宮川－成嶋 [10]により，既に多くの研究成果が得られている MPR 問題を発展させる方向で，閉路を唯一つ含むグラフ（ユニサイクルグラフ）についての MPE 問題が論じられ，MPE を求める線形時間アルゴリズムのほか，MPE の数理的特徴付けが進められつつある。

本論文においては，上記と同様のアプローチにより，唯一つの完全グラフといくつかの木からなるグラフ（Branching Trees Clique：BTC）についての MPE 問題を取り扱い，その研究の第一報として，BTC における MPE の特徴を示すための例や命題を示しながら，今後の研究の方向性について述べる。

2.　準備

〈2･1〉　記法

本節では，MPE 問題全般に関連する用語・記号・演算等について示す。基本的には，花澤－成嶋－三中 [4]及び成嶋－花澤 [5]に従い，本論文においての論理展開において曖昧さが生じないよう記法を改めたものである。

単純な連結グラフGに対して，Gの頂点集合をV(G)，辺集合をV(E)と表す[*2]。また，頂点$u \in V$に対する次数をdeg(u)と表す。ここで，Rを実数値の集合とし，Gの各頂点に対して実数値を対応させる重み付け関数$\lambda:V \rightarrow R$が与えられたとき，各辺$e=\{u,v\} \in E$の長さ$L_\lambda(e)$を$|\lambda(u)-\lambda(v)|$，Gの長さ$L_\lambda(G)$を$\Sigma_{e\in E}\, L_\lambda(e)$と定める。また，ある部分頂点集合$U \subseteq V$と重み付け関数$\sigma:U \rightarrow R$が与えられたとき，グラフGとその部分頂点集合に対する重み付け関数σをあわせてG_σと書く[*3]。ここで，重み付け関数$\lambda:V \rightarrow R$が，任意の$u \in U$において$\lambda(u) =\sigma(u)$を満たすのであれば，λをGにおけるσの拡張（もしくはG_σの拡張）と呼ぶ[*4]。さらに，σの拡張λにおけるGの長さ$L_\lambda(G_\sigma)$の最小値を$L^*(G_\sigma)$と書くこととする。ここで，$L_\lambda(G_\sigma)=L^*(G_\sigma)$を満たすようなσの拡張λを，Gにおけるσの最節約拡張（MPE: Most Parsimonious Extension）（もしくはG_σの最節約拡張）と呼ぶ。

次に，ある無根無向木Tについて，任意の頂点rを根として固定することで，有根木を自然に定義できる。これを$T^{(r)}$と書く。また，有根木$T^{(r)}$において，頂点uの子がvであるとき，$c_r(u)=v$もしくは$u=p_r(v)$と表現する。また簡単のため，正整数kに対して

$$c_r^k(u) \;=\; \overbrace{c_r(c_r(\ldots c_r}^{k}(u)\ldots)),$$

$c_r^0(u)=u$と定める[*5]。$p_r^k(v)$についても同様。ここで，ある頂点uと非負整数kについて，頂点集合$C_r^k(u)=\{v \mid c_r^k(u)=v\}$と定義する。さらに，ある頂点uについて，

$$\cup_{k\geqq 0}\, C_r^k(u)$$

なる頂点集合から誘導される$T^{(r)}$の部分木を$T_u^{(r)}$（もしくは単にT_u）と書く。また，$c_r(r)=s$なる頂点sについて，T_sに辺{r,s}を加えた木を$T_{s\text{-}r}$と書く。その他，有根木$T^{(r)}$において，根r以外で次数が 1 の頂点を$T^{(r)}$の葉を呼ぶ。

続いて，一連の研究において重要な役割を果たしている演算を示す。ある値$a,b\in R$について，R の部分集合$\{x \in R \mid a \leqq x \leqq b\}$を閉区間[a,b]で表す。次に，$I=\{ I_i \mid 1 \leqq i \leqq n \}$を R 上の多重閉区間族としたとき，各閉区間$I_i$の両端点$[a_i,b_i]$を以下のように昇順に並べたとする：

$$x_1 \leqq x_2 \leqq\ldots\leqq x_n \leqq x_{n+1} \leqq\ldots\leqq x_{2n}$$

このとき，x_nとx_{n+1}を閉区間族Iの中間 2 点と呼ぶ。また，この中間 2 点を端点とする閉区間$[x_n,x_{n+1}]$を，閉区間族Iの中間区間と呼び，med$\langle I_1, I_2, \ldots, I_n\rangle$もしくは med$\langle I_i \mid 1\leqq i\leqq n\rangle$と書く。次に，I 及び J を R 上の閉区間とするとき，これらの最短差 d を

$$d(I,J) = \min_{x\in I,y\in J} |x-y|$$

と定める。また，任意の値 x と閉区間 I に対して

$$d(x,J)= \min_{y\in J} |x-y|$$

と定める。さらに，任意の値 x と任意の閉区間族$I=\{I_1,I_2,\ldots,I_k\}$に対して，

$D(x,I_1,I_2,\ldots,I_k)=\sum_{I_i\in I}(d(x,I_i))$

と定め，x を R 上で変化させたとき，$D(x,I_1,I_2,\ldots,I_k)$の最小値を $D^{min}(I_1,I_2,\ldots,I_k)$と書くことにする。なお，それぞれ，$D(x, I_i|\ 1\leqq i\leqq k)$, $D^{min}(I_i|\ 1\leqq i\leqq k)$のように表記することもある。

〈2･2〉 MPE 問題

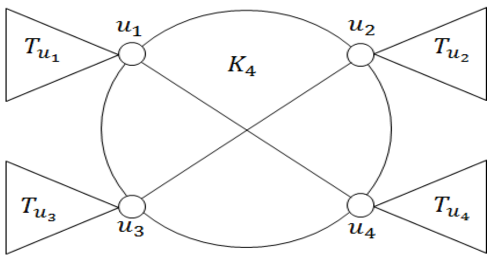
本節では問題の定義を行う。

<u>MPE 決定問題</u>
入力：G_σ（G:単純な連結グラフ，σ:U→R，U⊆V）
問題：$L_\lambda(G)$を最小化する関数 λ:V→R の決定
制約条件：λ は σ の拡張

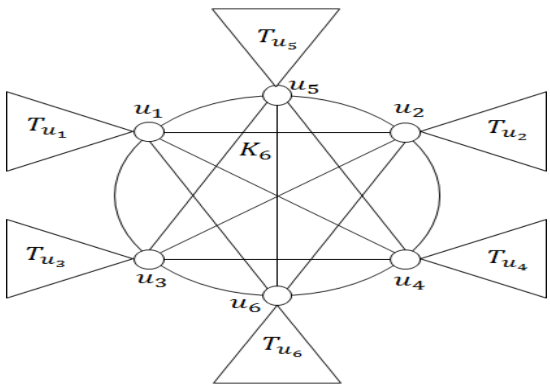
上に示した MPE 決定問題と関連する問題群を総称して MPE 問題と呼んでいる。本論文においては，与えられるグラフ G（頂点数 n）を以下のように限定した場合について考える：

ある整数 m（但し 1≦m≦n）が存在し，G の部分頂点集合$\{u_1,u_2,\cdots,u_m\}$について，以下 1.～2.が成り立つ：

1. $\{u_1,u_2,\cdots,u_m\}$から誘導される G の部分グラフ K が m 頂点からなる完全グラフ K_mをなす
2. G＼$\{\{u_i,u_j\}|1\leqq i,j\leqq m\}$において，$u_i$ と u_j（i≠j）を結ぶ道は存在せず，各 u_iを含む m 個の連結成分はそれぞれ木をなす（これを，u_iを根と考えて T_{u_i}と書く）。



(a) m=4 の例



(b) m=6 の例

図 3 完全グラフ K_mと木 $T_{u_1},T_{u_2},\cdots,T_{u_m}$からなるグラフ G_σ
Fig. 3. A Graph G_σ consists of a complete graph and some trees.

図 3 に上記グラフのイメージを示す。なお，m=1,2 のときはグラフG全体が木であり，この問題はMPR問題の拡張と考えることが出来る。また，m=3 のときはユニサイクルグラフとなる[*6]。即ち，m≧4 の場合についてのMPE問題が今回の新たな研究対象に加わったと言える。以降，このグラフをBranching Trees Clique（BTC）と呼ぶこととし，（K_m, T_{u_1}, T_{u_2},⋯, T_{u_m}）と書く。

なお，Robinson[1)]において示されている手法[*7]と同様の考えによって，BTCにおけるMPE問題においても，σの定義域である部分頂点集合Uについて，一般性を失うこと無くU={v∈V | deg(v)=1}と仮定できる。ゆえに，以下ではその仮定のもとで議論を進める。

〈2･3〉 既知の補題・命題・定理

本節では，これまでの MPE 問題に関する主な研究成果のうち，本論文での論理展開に必要なものを紹介する。より詳しくは一連の論文[4)~10)]を参照されたい。

まず，値 x と閉区間族との最短差の和 $D(x,I_1,I_2,\ldots,I_k)$の最小値について，その特徴付けを紹介する。

<u>補題 A</u>（花澤－成嶋－三中[4)]）

$I_i=[a_i,b_i]$（1≦i≦m）を R 上の閉区間族とする。また，各 Ii の端点を昇順に整列した数列を

$x_1 \leqq x_2 \leqq\ldots\leqq x_n \leqq x_{n+1} \leqq\ldots\leqq x_{2n}$

とする。このとき，以下が成立する：

・$D(x,I_1,I_2,\ldots,I_m)= D^{min}(I_1,I_2,\ldots,I_m)$であるための必要十分条件は $x\in\mathrm{med}\langle I_1, I_2, \ldots, I_m\rangle$ である

・$D^{min}(I_1,I_2,\ldots,I_m)=$

$$\frac{1}{2}\left(\sum_{i=m+1}^{2m}x_i-\sum_{i=1}^{m}x_i\right)-\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{m}(b_i-a_i)\right)$$

次に，木 T と部分重み付け関数 σ が与えられたとする。ここで，任意の頂点 r を根とする有根木 $T^{(r)}$の各頂点 u について，R 上の閉区間 $I_\sigma^{(r)}(u)$を以下のように再帰的に定める：

$$I_\sigma^{(r)}(u)=\begin{cases}[\sigma(u),\sigma(u)] & (u\text{が葉のとき}) \\ \mathrm{med}\left\langle I_\sigma^{(r)}(v)\,|\,c_r(u)=v\right\rangle & (\text{それ以外のとき})\end{cases}$$

この閉区間 $I_\sigma^{(r)}(u)$を，σ によって部分的に重み付けされた有根木 $T^{(r)}$における u の<u>特性区間</u>と呼ぶ。なお，混乱の恐れのないときは，$I_\sigma^{(r)}(u)$を単純に $I_\sigma(u)$や I(u)と書くこととする。

<u>定理 B</u>（花澤－成嶋－三中[4)]）

木 T と部分重み付き関数 σ が与えられたとする。また r を T の任意の頂点とする。このとき，T_σの任意の拡張 λ に対して，λ が T_σの MPE である必要十分条件は，有根木 $T^{(r)}$において，以下が成り立つことである：

・$\lambda(r)\in I_\sigma^{(r)}(r)$ （但し，deg(r)＞1 のとき）
・∀u∈V（deg(u)＞1, u≠r）について，

$\lambda(u) \in \mathrm{med} \langle\ [\lambda(p_r(u)), \lambda(p_r(u))],\ I_\sigma^{(r)}(v) | c_r(u)=v\ \rangle$

この定理はMPR問題（木に対するMPE問題）における基本定理と呼ぶべきものである。なお，単純連結グラフG_σにおいて，任意の頂点u（deg(u)＞1）に対して，

$\lambda(u) \in \mathrm{med} \langle [\lambda(v),\lambda(v)] \mid \{u,v\} \in E(G) \rangle$

が成り立つことは，明らかにλがG_σのMPEであるための必要条件であるが，定理Aは，木に関して，これが必要十分条件であることを示している。

続いて，グラフG_σの長さの最小値についての結果を示す。木Tと部分重み付け関数σが与えられたとする。ここで，任意の頂点rを根とする有根木$T^{(r)}$の各頂点uについて，関数$\ell^*(u)$を以下のように再帰的に定義する：

$$\ell^*(u) = \begin{cases} 0 & \text{（u が葉のとき）} \\ \displaystyle\sum_{v \in C_r(u)} \ell^*(v) + D^{\min}(I(v) \mid v \in C_r(u)) & \text{（u が根でも葉でもないとき）} \end{cases}$$

なお，deg(r)=1 であるとき，$\ell^*(r)$は未定義となることに注意されたい。

定理C（花澤－成嶋－三中[4]）

木Tと部分重み付き関数σが与えられたとする。sをdeg(s)=1なる頂点とし，tをsに隣接する頂点とする。ここで，有根木$T_{t\text{-}s}^{(s)}$の各頂点uについて$\ell^*(u)$を求めたとき，$L^*(T_\sigma)=\ell^*(t)+d(\sigma(s), I_\sigma^{(u)}(t))$ が成り立つ。

3. 問題の観測と主な結果

今回研究対象とするBTCにおけるMPEの特徴を示す上では，完全部分グラフK_mでの長さ$L_\lambda(K_m)$の最小化と各木T_{u_i}の長さ$L_\lambda(T_{u_i})$の最小化とのバランスをどのように考えるかポイントとなる。例えば，$\forall u_i,u_j \in K_m$についてλ(u_i)=λ(u_j)を満たすのであれば，$L_\lambda(K_m)=0$となるが，図4で示すようなMPEも存在しうる。

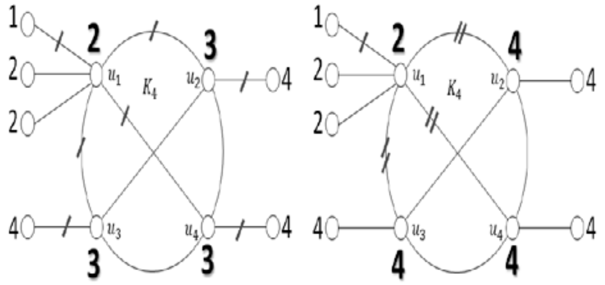


図4　BTC G_σにおけるMPEの例

Fig. 4. Examples of an MPE on a BTC G_σ

ここで，前節で挙げた既存の成果を用いて，MPEの特徴付けを行う際に有用な命題を示す。まず，BTC G=（$K_m,T_{u_1},T_{u_2},\cdots,T_{u_m}$）における各部分木$T_{u_i}$は，頂点vを$K_m$に属さない$u_i$の隣接点とすれば，互いに辺素な部分木$T_{v\text{-}u_i}$にさらに分解できる（以降，簡単のため，このvの条件を単に$v \in C(u_i)$と書く）。ここで，各部分木$T_{v\text{-}u_i}$についてu_iを根と考え，有根木の各頂点uについて特性区間$I_\sigma^{(u_i)}(u)$を定める（以降，簡単のため単に$I(u)$と書く）。次に，G_σの任意の拡張λ，及び，$T_{v\text{-}u_i}$の任意の頂点uに対して，

$$\sigma_{v-u_i}^{\lambda}(u) = \begin{cases} \sigma(u) & (u \in U) \\ \lambda(u) & (u = u_i) \end{cases}$$

と定めたとき，関数$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$は$T_{v\text{-}u_i}$の部分重み付け関数である。このとき，以下が成り立つ：

命題1

BTC G=（$K_m,T_{u_1},T_{u_2},\cdots,T_{u_m}$）と部分重み付け関数σについて，λが$G_\sigma$のMPEであるための必要十分条件は，以下の1)及び2)を満たすことである。

1) 任意のG_σの拡張μについて，

$$L_\lambda(K_m) + \sum_{i=1}^{m} \sum_{v \in C(u_i)} d(\lambda(u_i), I(v)) \leqq L_\mu(K_m) + \sum_{i=1}^{m} \sum_{v \in C(u_i)} d(\mu(u_i), I(v)) \quad \cdots ①$$

が成り立つ

2) 任意の頂点$u_i \in K_m$及びv（$\{u,v\} \in E, v \in G \setminus K_m$）について，λが$T_{v\text{-}u_i}$における$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$のMPEである。

【証明】十分性について，

$L_\lambda(G)$

$= L_\lambda(K_m) + \Sigma_{i=1\sim m} L_\lambda(T_{u_i})$

$= L_\lambda(K_m) + \Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v \in C(u_i)} L_\lambda(T_{v\text{-}u_i})$

条件2)，定理C，$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$の定義より

$= L_\lambda(K_m) + \Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v \in C(u_i)} (\ell^*(v) + d(\lambda(u_i), I(v)))$

μを任意のσの拡張とすると，条件1)，ℓ^*の定義より，

$\leqq L_\mu(K_m) + \Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v \in C(u_i)} (\ell^*(v) + d(\mu(u_i), I(v)))$

定理Cより

$\leqq L_\mu(G)$

次に，必要性について背理法を用いて示す。λをG_σのMPEとする。ここで，ある頂点$u_i \in K_m$について，λが$T_{v\text{-}u_i}$における$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$のMPEでない，即ち，ある$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$のMPE μ（μ≠λ）が存在し，

$L_\lambda(T_{v\text{-}u_i}) \ > \ L_\mu(T_{v\text{-}u_i})$

を満たすと仮定すると，G_σの拡張λ'を，$t \in T_v$においてはλ'(t)=μ(t)，それ以外のtについてはλ'(t)=λ(t)と定めたとき，明らかに$L_\lambda(G) > L_{\lambda'}(G)$となってλのMPE性に矛盾する。ゆえにλは$T_{v\text{-}u_i}$における$\sigma^\lambda_{v\text{-}u_i}$のMPEである。

また，①式を満たさないG_σの拡張μが存在すると仮定すると，

$L_\lambda(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\lambda(u_i), I(v))$
$\quad >\ L_\mu(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\mu(u_i), I(v))$

両辺に$\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\ell^*(v)$を加えると，λは$T_{v\text{-}ui}$における$\sigma^\lambda_{v\text{-}ui}$のMPEであることから

$L_\lambda(G) > L_\mu(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}(\ell^*(v)+d(\mu(u_i), I(v)))$

ここで，G_σの拡張μ'を，$t\in T_v$においては

$\mu'(t)\ \in \mathrm{med}\langle\ [\lambda(p_{ui}(t)),\lambda(p_{ui}(t))],\quad I_\sigma^{(ui)}(w)|c_{ui}(t)=w\ \rangle$

を満たすように，vからT_vの葉に向けて再帰的に定め，それ以外のtについてはμ'(t)=μ(t)と定めたとき，定理B及びCから

$L_\lambda(G) > L_{\mu'}(G)$

となってλのMPE性に矛盾する。

（証明終）

命題1により，$L_\lambda(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\lambda(u_i), I(v))$を最小化するλを特徴付けることがBTCにおけるMPEの特徴付けに直接的に繋がることがわかる。$L_\lambda(K_1)=0$であることは自明であるので，その第一歩として，$L_\lambda(K_m)$（m≧2）の計算と特徴に関する命題を以下に示す。

命題2

完全グラフK_m（m≧2）とその頂点集合$\{u_1,u_2,\ldots,u_m\}$への重み付け関数λについて，$\lambda(u_i)\leqq\lambda(u_{i+1})$（i=1,2,…,m－1）を満たすとする。ここで，i＜jについて$d_{i,j}=\lambda(u_j)-\lambda(u_i)$と書くとき，

$$L_\lambda(K_m)=\sum_{i=1}^{m-1} i\cdot(m-i)\cdot d_{i,i+1}$$

を満たす。

【証明】

m に関する数学的帰納法を用いる。m=2 のとき，$L_\lambda(K_m)=\lambda(u2)-\lambda(u1)=d_{1,2}$であるから成り立つ。k≧3なる正整数について，m＜k のとき成立することを仮定したとき，

$$\begin{aligned}L_\lambda(K_k)&=\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=i+1}^{k} d_{i,j}=\sum_{i=1}^{k-2}\sum_{j=i+1}^{k-1} d_{i,j}+\sum_{i=1}^{k-1} d_{i,k}\\&=\sum_{i=1}^{k-2} i\cdot(k-1-i)\cdot d_{i,i+1}+\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=i}^{k-1} d_{j,j+1}\\&=\sum_{i=1}^{k-2} i\cdot(k-1-i)\cdot d_{i,i+1}+\sum_{i=1}^{k-1} i\cdot d_{i,i+1}\\&=\sum_{i=1}^{k-1} i\cdot(k-i)\cdot d_{i,i+1}\end{aligned}$$

よって，帰納法の仮定により，上式は任意の正整数mについて成立する。

（証明終）

最後に，MPEを容易に特徴付けることができる特殊なケースに関する命題を示す。

命題3

グラフ G=（$K_m,T_{u1},T_{u2},\cdots,T_{um}$）と部分重み付き関数σが与えられたとする。ここで，

$$\bigcap_{1\leqq i\leqq m,\deg(u_i)\geqq m} \mathrm{I}(u_i)\neq\phi$$

という前提のもと，G_σの任意の拡張μについて，G_σの拡張λが

$L_\lambda(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\lambda(u_i), I(v))$
$\quad\leqq\ L_\mu(K_m)+\Sigma_{i=1\sim m}\ \Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\mu(u_i), I(v))$

を満たすための必要十分条件は，K_mの任意の頂点u_iに対し$\lambda(u_i)=x$を満たすような値

$$x\in\bigcap_{1\leqq i\leqq m,\deg(u_i)\geqq m} \mathrm{I}(u_i)$$

が存在することである。

【証明】

補題Aにより，$\deg(u_i)\geqq m$なる頂点u_iにおいて，$\Sigma_{v\in C(u_i)}\, d(\lambda(u_i), I(v))=D(x;I(v)|v\in C(u_i))$が最小値を取る必要十分条件は，$x\in\mathrm{med}\langle I(v)\mid v\in C(u_i)\rangle=I(u_i)$を満たすことである。また$L_\lambda(K_m)$のみを考えたとき，$L_\lambda(K_m)=0$となる必要十分条件は，任意の$u_i,u_j$について$\lambda(u_i)=\lambda(u_j)$を満たすことである。あとは前提条件より明らか。

（証明終）

3. 今後の研究方向

命題1と命題3により，

$$\bigcap_{1\leqq i\leqq m,\deg(u_i)\geqq m} \mathrm{I}(u_i)\neq\phi$$

を満たすBTC G_σについては，MPEを特徴付けられた。しかし，残念ながら，それ以外のケースについては，まだMPEを特徴付けられていない（図4を参照）。しかし，今回示したこれらの命題によって，ある程度証明の方向性を定めることが出来た。今後はまず，本論文で紹介した完全グラフK_mと木$T_{u1},T_{u2},\cdots,T_{um}$からなるBTC G_σに対するMPEを特徴付けるとともに，特にMPEの各辺での変化に関する特徴を明らかにしていきたい。さらには，BTCにおけるMPEの効率的な列挙アルゴリズムを示すことを目標と考えている。

引用文献

1) D. F. Robinson: "Extending a function on a graph", Discrete Mathematics, Vol.6, pp.89-99 (1973)
2) J. M. Farris: "Methods for computing Wagner Trees", Systematic Zoology, Vol.19, pp.83-92 (1970)
3) D. L. Swofford and W. P. Maddison, "Reconstructing ancestral character states under Wagner parsimony", Mathematical Biosciences, Vol.87, pp.199-229 (1987)
4) M. Hanazawa, H. Narushima and N. Minaka: "Generating most parsimonious reconstructions on a Tree: a generalization of the Farris-Swofford-Maddison method", Discrete Applied Mathematics, Vol.56, pp.245-265 (1995)

5) H. Narushima and M. Hanazawa: “A more efficient algorithm for MPR problems in phylogeny”, Discrete Applied Mathematics, Vol.80, pp.231-238 (1997)
6) 宮川幹平・成嶋弘:「系統樹最節約復元の部分木に関する最小性について」, 電子情報通信学会論文誌, Vol.J85-D-I No.2, pp.132-142 (2002)
7) K. Miyakawa and H. Narushima: “Lattice-theoretic properties of MPR-posets in phylogeny”, Discrete Applied Mathematics, Vol.134, pp.169-192 (2004)
8) 花澤正純・成嶋弘: 「非樹形グラフにおける部分付値の最軽拡張問題Ｉ」, 東海大学理学部紀要, 第 34 巻, pp.89-104 (1999)
9) M. Hanazawa and H. Narushima: “The lightest totalization of an endnode labeling of a non-tree graph II”, Proc. Sch. Sci. Tokai Univ. Vol.35, pp.7-9 (2000)
10) 宮川幹平・成嶋弘:「ユニサイクルグラフにおける部分重み付け関数の最節約拡張について」, 東海大学短期大学紀要, 第 42 号, pp.81-86 (2008)

脚注）

[*1] Robinson は，このような拡張を”best extension”と呼んでいた。どのような観点からの”best”なのかを明示するため，本論文では「最節約拡張」と表現している。

[*2] 誤読の恐れの無いときは，$u \in G$ や $u \in V$ とも書く。辺集合についても同様。

[*3] 誤読の恐れの無いときは，単に G とも書く。

[*4] 形式的には，σ の拡張 λ を関数 σ によって値が定められていない残りの頂点への重み付けと考えてもよい。

[*5] 例えば，$c_r(c_r(u))=c_r^2(u)$など。これは頂点 u の子の子（孫）を意味する。

[*6] 但し，長さ 4 以上のサイクルを持つユニサイクルグラフは本論文で扱うグラフ（BTC）に含まれない。

[*7] $\deg(t)>1$ なる頂点 t が U に含まれるのであれば，t を deg(t)個の新たな頂点 t_i（$1 \leqq i \leqq \deg(t)$）に置き換え，t と隣接していた各頂点 v_i（$1 \leqq i \leqq \deg(t)$）について，辺$\{t_i, v_i\}$を追加したグラフにおいて，$\sigma(t_i)=\sigma(t)$と定めて，その連結成分ごとに MPE を求めれば良い。逆に，$\deg(t)=1$ なる頂点 t が U に属さない場合は，t に隣接する頂点を v とすると，明らかに全ての MPE λ において $\lambda(u)=\lambda(v)$である．よって，頂点 u と頂点 v を同一視した新たなグラフにおいてこの問題を考えればよい。