

# グラフ上のメッセージ伝搬アルゴリズム に現れるグラフのゼータ関数につ いて

渡辺 有祐 (総合研究大学院大学複合科学研究科, 統計数理研究所)\*1  
福水 健次 (統計数理研究所)\*2

## 概 要

本講演では、ビリーフプロパゲーションという、アルゴリズムの固定点の一意性を考察する。これはグラフ上のある種の非線型方程式の解の一意性に他ならない。一次独立な閉路が二つ(以下)のグラフに対しては、広いクラスのモデルで、グラフのゼータ関数の性質を使うことによって解の一意性を示すことができることを解説する。

## 1. ビリーフプロパゲーションアルゴリズム

### 1.1. グラフ構造をもった確率分布

$G = (V, E)$  を頂点集合  $V$ 、辺集合  $E$  の有限無向グラフとする。各頂点  $i$  には  $x_i = \pm 1$  のバイナリ変数が乗っているとす。このとき、 $x = (x_i)_{i \in V}$  として

$$p(x) = \frac{1}{Z} \prod_{ij \in E} \psi_{ij}(x_i, x_j) \prod_{i \in V} \psi_i(x_i)$$

のように、正值の関数  $\psi_{ij}, \psi_i$  によって積の形で与えられる確率分布を考える。  $Z$  は規格化定数である。一般性を失うことなく  $\psi_i(x_i) = \exp(h_i x_i)$ ,  $\psi_{ij}(x_i, x_j) = \exp(J_{ij} x_i x_j)$  としてよい。これはイジングモデルなどとも呼ばれる。

周辺確率分布

$$p_{ij}(x_i, x_j) = \sum_{(x_k)_{k \neq i, j}} p(x), \quad p_i(x_i) = \sum_{(x_k)_{k \neq i}} p(x) \quad (1)$$

を求めることは応用上しばしば重要な問題である。例えばLDPCやTurboなどの誤り訂正符号の復号は、このような周辺確率分布の計算によって実現できる[1]。しかし、定義通りに計算しようとするとき  $O(2^{|V|})$  回の和を実行する必要があり、現実的には実行不可能である。これを少ない計算量で近似的に実行するアルゴリズムが、以下に説明するビリーフプロパゲーションアルゴリズムである。近年、多くの応用で実際に用いられている。

### 1.2. アルゴリズム

グラフ  $G$  の各無向辺から、有向辺のペアを作る。有向辺集合を  $\vec{E}$  と書くことにする。各有向辺  $(i \rightarrow j) \in \vec{E}$  に対して、 $x_j$  の関数  $m_{i \rightarrow j}(x_j)$  を割り当てる。ビリーフプロパゲーションアルゴリズムは以下のようにして実行される[2]。

1. まず  $t = 0$  で  $\{m_{i \rightarrow j}^0(x_j)\}_{(i \rightarrow j) \in \vec{E}}$  と適当に初期化する。

本研究は学術振興会特別研究員奨励費(20-993)と基盤研究C(19500249)の助成を受けたものである。  
キーワード: ビリーフプロパゲーション, グラフゼータ関数, ベーテ自由エネルギー

\*1 〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3 統計数理研究所

e-mail: watay@ism.ac.jp

\*2 e-mail: fukumizu@ism.ac.jp

## 2. 各時刻 $t$ で

$$m_{i \rightarrow j}^{t+1}(x_j) = \omega \sum_{x_i = \pm 1} \psi_{ji}(x_j, x_i) \psi_i(x_i) \prod_{k \in N(i) \setminus \{j\}} m_{k \rightarrow i}^t(x_i) \quad (2)$$

と、メッセージを更新していく。ただし、 $N(i)$  は頂点  $i$  の近傍の頂点を表し、 $\omega$  は  $\sum_{x_j} m_{i \rightarrow j}^{t+1}(x_j) = 1$  から決まる規格化定数である。（ $i \rightarrow j$ ,  $t$  ごとに異なっていてよい。）

## 3. この更新の繰り返しによって固定点 $\{m_{i \rightarrow j}^*(x_j)\}_{(i \rightarrow j) \in \vec{E}}$ に収束したとする。

$$b_i(x_i) := \omega \psi_i(x_i) \prod_{j \in N(i)} m_{j \rightarrow i}^*(x_i)$$

$$b_{ji}(x_j, x_i) := \omega \psi_{ji}(x_j, x_i) \psi_i(x_i) \psi_j(x_j) \prod_{k \in N(j) \setminus \{i\}} m_{k \rightarrow j}^*(x_j) \prod_{k' \in N(i) \setminus \{j\}} m_{k' \rightarrow i}^*(x_i)$$

をもって周辺確率分布  $p_i(x_i), p_{ji}(x_j, x_i)$  の近似とする。ただし、 $\omega$  はそれぞれ  $\sum_{x_i} b(x_i) = 1, \sum_{x_i, x_j} b_{ji}(x_j, x_i) = 1$  から決まる規格化定数である。

グラフがツリーの時は、このアルゴリズムは厳密な値を計算していること ( $b_i = p_i, b_{ji} = p_{ji}$ ) が容易にわかる。ツリーでない場合も、経験的にしばしば良い近似を与えることが知られている。

このアルゴリズムの固定点とは要するに、方程式系

$$m_{i \rightarrow j}(x_j) = \omega \sum_{x_i = \pm 1} \psi_{ji}(x_j, x_i) \psi_i(x_i) \prod_{k \in N(i) \setminus \{j\}} m_{k \rightarrow i}(x_i) \quad (i \rightarrow j) \in \vec{E}$$

の解の全体に他ならない。グラフがツリーであれば固定点は明らかに一つであり、グラフがただ一つの閉路を持つ場合も、Perron-Frobenius の定理より固定点の一意性が容易に導かれる。しかし一般のグラフでは、固定点方程式は非線型になり、解は複数ありえる。一般のグラフにおいて、所与の  $\psi_{ij}, \psi_i$  に対して、固定点がどのくらいあるのかという問題は応用上も興味を持たれる問題である。

### 1.3. 固定点の変分的特徴付け

固定点の全体は次のように特徴付けることができる。まず、集合  $L$  を以下で定義する。

$$L := \left\{ \{q_i, q_{ij}\} \left| \begin{aligned} &\sum_{x_j} q_{ij}(x_i, x_j) = q_i(x_i) \quad \forall (j \rightarrow i) \in \vec{E}, x_i = \pm 1 \\ &\sum_{x_i} q_i(x_i) = 1 \quad \forall i \in V, \quad q_{ij}(x_i, x_j), q_i(x_i) > 0 \end{aligned} \right. \right\}.$$

さらに、集合  $L$  上でベータ自由エネルギー関数  $F$  は以下で定義される。

$$\begin{aligned} F(q) := & - \sum_{ij \in E} \sum_{x_i x_j} q_{ij}(x_i, x_j) \log \psi_{ij}(x_i, x_j) - \sum_{i \in V} \sum_{x_i} q_i(x_i) \log \psi_i(x_i) \\ & + \sum_{ij \in E} \sum_{x_i x_j} q_{ij}(x_i, x_j) \log q_{ij}(x_i, x_j) + \sum_{i \in V} (1 - d_i) \sum_{x_i} q_i(x_i) \log q_i(x_i). \end{aligned} \quad (3)$$

定理 1 ([3]).  $F$  の勾配が 0 の点全体は、ビリーフプロパゲーションアルゴリズムの固定点全体と自然に同一視できる。

この定理により、固定点の全体について知りたければ  $F$  について調べればよいといえる。

## 2. グラフのゼータ関数とベータ自由エネルギー

ベータ自由エネルギー関数はグラフの（多変数）ゼータ関数と密接にかかわっている。  $P$  をグラフ  $G$  の素サイクル全体の集合とする。（素サイクルの定義等は [4] 参照。） 各有向辺に変数  $u_e$  が与えられている時、  $\mathbf{u} = (u_e)_{e \in \vec{E}}$  として、多変数のグラフゼータ関数は以下の式で与えられる [6].

$$\zeta_G(\mathbf{u}) := \prod_{\mathbf{p} \in P} (1 - g(\mathbf{p}))^{-1}.$$

ただしここで、  $\mathbf{p} = (e_1, \dots, e_k)$ ,  $g(\mathbf{p}) := u_{e_1} \cdots u_{e_k}$ .

定理 2 (グラフゼータ関数とベータ自由エネルギー関数を結び付ける公式 [5]).  $L$  上の各点  $q = \{q_i, q_{ij}\}$  において、

$$\zeta_G(\mathbf{u})^{-1} = \det(\nabla^2 F(q)) \prod_{ij \in E} \prod_{x_i, x_j = \pm 1} q_{ij}(x_i, x_j) \prod_{i \in V} \prod_{x_i = \pm 1} q_i(x_i)^{1-d_i} \quad (4)$$

が成立する。ただし、  $u_{i \rightarrow j} = u_{j \rightarrow i} = \text{Cov}_{q_{ij}}[x_j, x_i] \text{Var}_{q_j}[x_j]^{-1/2} \text{Var}_{q_i}[x_i]^{-1/2}$  として  $\mathbf{u}$  を定め、  $\nabla^2 F(q)$  は Hesse 行列を表す。

証明概略. まず、Ihara-Bass の公式を多変数化したものを証明する [5]. それを適用するとこの定理の式を得る.  $\square$

## 3. 固定点の一意性定理

ベータ自由エネルギー関数は、定義域  $L$  の境界付近で勾配ベクトルの大きさが発散し、次のような性質を持つ。

定理 3 ([5]). 任意の  $q \in (\nabla F)^{-1}(0)$  に対して  $\det \nabla^2 F(q) \neq 0$  と仮定する。

$$\sum_{q: \nabla F(q)=0} \text{sgn}(\det \nabla^2 F(q)) = 1,$$

ここで  $x > 0$  のとき  $\text{sgn}(x) = 1$ 、 $x < 0$  のとき  $\text{sgn}(x) = -1$  である。この和の各項 (+1 または -1) を  $q$  における  $F$  の指数という。

ベータ自由エネルギーの勾配がゼロの点  $(\nabla F)^{-1}(0)$  はビリーフプロパゲーションの固定点に他ならないことに注意しよう。もし何らかの方法で、前もって任意の固定点の指数が必ず 1 であることを保証できれば、ビリーフプロパゲーションの固定点はただ一つであることが証明できる。また、定理 2 より、ある固定点での指数はその点でのゼータ関数の符号に等しいことに注意する。固定点について前まえてわかる知識としては以下がある。

補題 1. 任意の固定点  $\{b_i, b_{ij}\}$  に対し、相関係数  $\text{Cov}_{b_{ij}}[x_i, x_j] \text{Var}_{b_i}[x_i]^{-1/2} \text{Var}_{b_j}[x_j]^{-1/2}$  の符号は  $J_{ij}$  の符号と等しい。

用語を準備する。モデル  $\{J_{ij}, h_i\}$  と  $\{J'_{ij}, h'_i\}$  は  $(s_i) \in \{\pm 1\}^V$  が存在して  $J'_{ij} = J_{ij} s_i s_j$ 、 $h'_i = h_i s_i$  を満たすとき同値であるという。同値なモデルはゲージの変換  $x_i \rightarrow x_i s_i$  で得られるので、ビリーフプロパゲーションの固定点の一意性は等しいことに注意する。

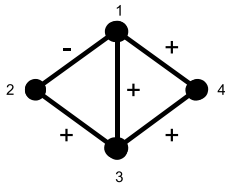


図 1: 例1のグラフ

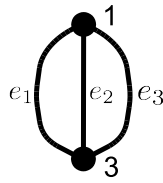


図 2: グラフ  $\hat{G}$

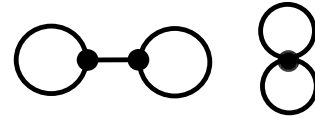


図 3: 他の二種類

定理 4 ([5]). グラフ  $G$  は連結で、一次独立なサイクルの個数が 2 であるとする. (つまり  $|E| - |V| + 1 = 2$ .) このとき、attractive なモデル ( $\forall ij \in E \quad J_{ij} \geq 0$ ) に同値でなければ、ビリーフプロパゲーションの固定点はただ一つ存在する.

証明を与える代わりに一つの例を示そう.

例 1.  $V := \{1, 2, 3, 4\}$ ,  $E := \{12, 13, 14, 23, 34\}$  なるグラフを考える. モデルは任意の  $\{h_i\}$  と  $\{-J_{12}, J_{13}, J_{14}, J_{23}, J_{34}\}$  ( $J_{ij} \geq 0$ ) で与えられるものとする. (図1参照.) 任意の  $0 \leq u_{13}, u_{23}, u_{14}, u_{34} < 1$  と  $-1 < u_{12} \leq 0$  に対して

$$\zeta_G^{-1}(\mathbf{u}) > 0$$

を示せば十分.  $G$  の素サイクルの集合は  $\hat{G}$  (図2) のそれと一対一に対応する. したがって、 $\zeta_G(\mathbf{u}) = \zeta_{\hat{G}}(\hat{\mathbf{u}})$  が成立する. ただしここで  $\hat{u}_{e_1} = u_{12}u_{23}$ ,  $\hat{u}_{e_2} = u_{13}$ ,  $\hat{u}_{e_3} = u_{34}$ . 一般に多変数のゼータ関数はある行列式の逆数となり [6]、今の場合、 $\zeta_{\hat{G}}^{-1}(\hat{\mathbf{u}}) = (1 - \hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_2} - \hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_3} - \hat{u}_{e_2}\hat{u}_{e_3} - 2\hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_2}\hat{u}_{e_3})(1 - \hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_2} - \hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_3} - \hat{u}_{e_2}\hat{u}_{e_3} + 2\hat{u}_{e_1}\hat{u}_{e_2}\hat{u}_{e_3})$  となっている.  $-1 < \hat{u}_{e_1} \leq 0$  と  $0 \leq \hat{u}_{e_2}, \hat{u}_{e_3} < 1$  より、これは正であることが確認できる.

ほかの場合は  $\hat{G}$  または図3のグラフに同様に帰着できる. モデルが attractive な場合は固定点は複数ありうる. 一次独立な閉路が三個以上の場合は、どのような時に一意性が言えるのかは今後の研究課題である.

## 参考文献

- [1] R.J. McEliece and D.J.C.J.F. Cheng. Turbo decoding as an instance of Pearl's "belief-propagation" algorithm. *IEEE J. Sel. Areas Commun.*, 16(2):140–52, 1998.
- [2] J. Pearl. *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*. Morgan Kaufmann Publishers, 1988.
- [3] J.S. Yedidia, W.T. Freeman, and Y. Weiss. Generalized belief propagation. *NIPS*, 13:689–95, 2001.
- [4] M. Kotani and T. Sunada. Zeta functions of finite graphs. *J. Math. Sci. Univ. Tokyo*, 7(1):7–25, 2000.
- [5] Y. Watanabe and K. Fukumizu. Graph Zeta Function in the Bethe Free Energy and Loopy Belief Propagation. *Adv. in Neural Information Processing Systems*, 2009.
- [6] H.M. Stark and A.A. Terras. Zeta functions of finite graphs and coverings. *Adv. in Math.*, 121(1):124–165, 1996.