2011年7月14日　統計数理研究所　オープンハウス

確率伝搬法の数理

渡辺 有祐　新機軸創発センター　特任研究員

【確率伝搬法とは】

グラフィカルモデル：“グラフ構造”をもった確率分布(の族)

グラフの頂点が確率変数(=確率的に変動する量)を表し，辺が確率変数間の依存関係を表す．数式で書くと，

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{Z}\prod_{ij\in E}\psi_{ij}(x_i,x_j)\prod_{i\in V}\psi_i(x_i), \quad G=(V,E)\text{: グラフ}. \qquad (1)$$

(Vは頂点の集合，Eは辺の集合，x_iは頂点に乗った変数，ψは確率的な依存関係を表す正の関数，Zは規格化定数．)

応用例: 誤り訂正符号，音声認識，画像処理，人工知能，統計物理 などなど

しばしば応用上，周辺確率分布(1，2変数の確率分布)や規格化定数Zが計算したい:

$$p_{ij}(x_i,x_j) := \sum_{\boldsymbol{x}\setminus\{x_i,x_j\}} p(\boldsymbol{x}), \quad p_i(x_i) := \sum_{\boldsymbol{x}\setminus\{x_i\}} p(\boldsymbol{x}), \quad Z := \sum_{\boldsymbol{x}} p(\boldsymbol{x}).$$

しかし,この定義通り計算しようとすると**沢山の計算**が必要になってしまう．(どんなに早い計算機を使っても追いつかない!!) なので，確率伝搬法を利用して計算する．

確率伝搬法：グラフィカルモデルの周辺確率分布，規格化定数を ”高速に”（近似）計算する方法の一つ．

確率伝搬法は，局所的に“メッセージ”μをやり取りすることによって計算を進める．数式で書くと，

$$\mu^{new}_{j\to i}(x_i) \propto \sum_{x_j}\psi_{ij}(x_i,x_j)\psi_j(x_j)\prod_{k\in N_j\setminus i}\mu_{k\to j}(x_j),$$

メッセージの更新をこの式によって繰り返す．(N_iは頂点iの近傍の頂点たち．) 更新が収束したら，そこでのメッセージを使って，周辺確率分布，規格化定数を計算する．(詳細略)

研究課題: グラフがツリー(閉路がない)の時は厳密計算になる．確率伝搬法の性質は，**閉路**の存在によって，難しくなる．閉路の存在はどのようにして影響してくるのだろうか．

【確率伝搬法は数理的に奥深い】

1．ベーテ近似との関係 (Yedidia et al, 2000)

確率伝搬法は，物理学で昔からよく知られているベーテ近似と関係が深い．正確には，確率伝搬法の解はベーテ自由エネルギー関数Fの変分問題として定式化できることが知られている．

$$F(b) := -\sum_{ij\in E}\sum_{x_ix_j} b_{ij}(x_i,x_j)\log\psi_{ij}(x_i,x_j) - \sum_{i\in V}\sum_{x_i} b_i(x_i)\log\psi_i(x_i) + \sum_{ij\in E}\sum_{x_ix_j} b_{ij}(x_i,x_j)\log b_{ij}(x_i,x_j) + \sum_{i\in V}(1-d_i)\sum_{x_i} b_i(x_i)\log b_i(x_i)$$

2．グラフのゼータ関数との関係 (Watanabe and Fukumizu, 2009)

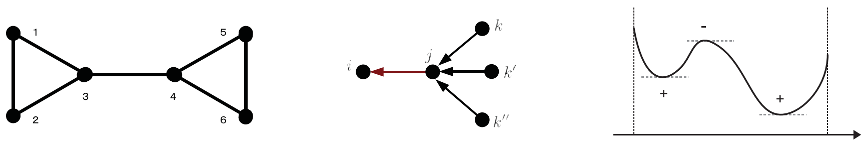
グラフのゼータ関数ζ_Gとは，グラフの特性量の一つ．グラフのある種の閉路の効果をカウントしている．(特にグラフがツリーの時は閉路が存在しないので，$\zeta_G(\boldsymbol{u}) = 1$.) 確率伝搬法での閉路の影響はグラフのゼータ関数を通じて表現される．

グラフのゼータ関数とベーテ自由エネルギー，そして確率伝搬法を結び付ける公式:

$$\zeta_G(\boldsymbol{u})^{-1} = \det(\nabla^2 F)\prod_{ij\in E}\prod_{x_i,x_j=\pm1} b_{ij}(x_i,x_j)\prod_{i\in V}\prod_{x_i=\pm1} b_i(x_i)^{1-d_i}$$

3．情報幾何との関係 (Ikeda et al, 2004)

確率伝搬法は情報幾何の方法を用いて解釈することができる．そのような視点から，確率伝搬法の近似誤差の解析等ができる．



【最近の話題】

最近得られた結果について解説する．以下では，$x_i \in \{\pm1\}$ (バイナリ，2値)とする．(このとき，$\psi_{ij}(x_i,x_j) = \exp(J_{ij}x_ix_j)$ として一般性を失わない．$J_{ij} \geq 0$だと，隣り合う変数の値がそろいやすくなる．)

【1. 解の一意性】

確率伝搬法の解(=更新式の固定点)は複数ありうる．(グラフがツリーの時は常に解はただ一つなのだが，閉路があると解が沢山あることも．) **解の一意性が保証される**という好ましい性質をもつグラフのクラスを考えよう．ここでは，J_{ij}の符号の情報の下で，解の一意性問題を考える．

定理(おおざっぱな説明): Figure 1 のような符号付きグラフを“部分構造”として持たないことが，確率伝搬法の解が常に一意的であることの必要十分条件．

【2. 不等式予想】

Attractiveモデル($J_{ij} \geq 0$)の場合，規格化定数Zとその確率伝搬法による近似Z_Bの間に

$$Z \geq Z_B \qquad (2)$$

が成立することが経験的に知られている．もしこれが証明されると,Z_BをZの(高精度かつ高速計算可能な)下限として安心して用いることができる．この予想は以下の独立集合(= independent set) に関する組み合わせ的な問題に帰着できることがわかった．(詳細は省略)

予想: 任意の二部グラフGとそのM-被覆グラフ$\tilde{G}$に対し,

$$\pi(p(\tilde{G})) \preceq p(G)^M \qquad (3)$$

が成立する．ただしここで，pは多変数の独立集合族多項式，πは被覆グラフからの自然な射影，$\preceq$は多項式の各係数を比較して不等式が成立することを意味する．

この予想の解決にチャレンジしてみませんか!?

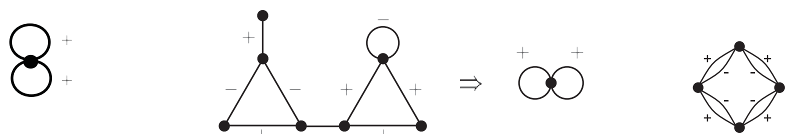


Figure 1:

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構
統計数理研究所
The Institute of Statistical Mathematics