

博士論文（要約）

最適化問題に対する近似アルゴリズムの  
典型性能に関する統計力学的解析

高 邊 賢 史



# 目次

第 1 章	はじめに	1
1.1	情報科学：最適化問題と近似アルゴリズム	1
1.2	数学：グラフ理論，その測度論との融合	3
1.3	近似アルゴリズムの典型性能評価と threshold phenomena	4
1.4	物理学：ランダム系の統計力学	5
1.5	相転移現象としての最適化問題の典型的性質の解析	7
1.6	本論文の目的	8
第 2 章	最適化問題に対する確率伝搬法とその統計力学的解析	11
2.1	最適化問題，グラフ，ファクターグラフ	11
2.2	確率伝搬法	17
2.3	実装の方法	21
2.4	入力のランダム化：ランダムグラフ	24
2.5	RS キャビティ方程式を用いた統計力学的解析	27
2.6	本章のまとめ	34
第 3 章	最小頂点被覆問題に対する近似手法の典型性能比較	36
3.1	最小頂点被覆問題と近似アルゴリズム	36
3.2	任意のグラフ上での近似性能の比較	39
3.3	近似アルゴリズムの典型性能解析と比較	40
3.4	大小関係の実証	47
3.5	本章のまとめ	51
第 4 章	最小頂点被覆問題に対する線形計画緩和法の挙動のレアイベントサンプリング	54
4.1	単体法について	54
4.2	レアイベントサンプリング	56
4.3	ソルバーの依存性	59
4.4	単体法のステップ数に関する関数	60
4.5	入力の難度と反復回数	61
4.6	本章のまとめ	64

## 2 目次

第 5 章	最大カバー問題に対する近似手法の典型性能比較	65
5.1	最大カバー問題	65
5.2	BP 方程式の導出	66
5.3	Biregular ランダムグラフ上の最大カバー問題の RS 解析	68
5.4	化学ポテンシャル入りモデルとの関係	70
5.5	スピングラス帯磁率による RS/RSB 転移点の導出	71
5.6	貪欲法のレート方程式による解析	72
5.7	線形計画緩和の解析	73
5.8	数値計算による検証	74
5.9	本章のまとめ	77
第 6 章	集団検査法に対するブーリアン圧縮センシングの典型性能解析	79
6.1	集団検査法	79
6.2	ブーリアン圧縮センシング	81
6.3	ブーリアン圧縮センシングに対する確率伝搬法	83
6.4	確率伝搬法の典型性能解析	84
6.5	典型性能の漸近解析	87
6.6	観測行列の変更による効率化	90
6.7	本章のまとめ	91
第 7 章	本論文のまとめと今後の展望	94
付録 A	RS キャパティ方程式の導出	98
付録 B	ベーテ自由エネルギーの導出	101
付録 C	条件付き RS キャパティ方程式の導出	105
謝辞		108

# 第 1 章

## はじめに

本研究の目的は組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムの典型性能を統計力学の手法を用いて評価することにある。本章では論点を明確にするため、最適化問題と近似アルゴリズム、その典型性能評価とランダム系の統計力学の関わりについて概観する。

### 1.1 情報科学：最適化問題と近似アルゴリズム

いくつかの制約のある状況下で利益を最大化する（または、コストを最小化する）最適化問題は実社会で広範に現れる問題群である。学問上の興味としても、ユークリッドの“原論”に関連する命題（第 2 巻命題 5）が記述されている\*<sup>1</sup>ように、古くから最適化問題への興味を持たれていた。しかし、Hancock によって連続変数に関する最適化に関する教科書 [1] が出版されたのが 1917 年であるように、最適化問題の数理が数学の一分野として整備されたのは 20 世紀に入ってからである。

同様に、変数が離散的な組合せ最適化問題 (combinatorial optimization problem) の研究も 20 世紀以降に加速度的に進んできた。Schrijver の解説 [2] によれば、最古の組合せ最適化問題は 1781 年の Monge による割当問題の一種 [3] であったとされる。 $N$  変数の割当問題は以下のように定式化される。

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_{i=1}^N C_{i,\pi(i)}, \\ \text{subject to} \quad & \pi \text{ is a permutation of } \{1, \dots, N\}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

ただし、 $C = (C_{ij}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$  は  $i$  から  $j$  への輸送コストを表す行列である。彼は地球上の物質輸送への興味からこの問題を定式化し、幾何的な解法を提案した。提案された手法は完全に正確ではなく、それが訂正されたのは 1928 年のことであった [4]。

（最適化）問題はそれを解く手続き-アルゴリズム-と表裏一体の関係にある。アルゴリズムの定義 [5] にあるように、アルゴリズムはその手順が実行可能な形で有限長の文章で記述され

\*<sup>1</sup> この命題は代数的には方程式  $x(b-x) = c^2$  の解を与えていることになっており、その帰結として「与えられた線分を分割し、分割された 2 つの線分で囲まれた長方形の面積が最大になるようにするためには、線分の中点で分割しなければならない」という最適化問題の解が得られる。

## 2 第1章 はじめに

ていること、及びすべての入力に関して有限のステップ数で終了することを期待することが多い。例えば、上述した割当問題に対する初めてのアルゴリズムは1946年のEasterfield [6]によるものである。このアルゴリズムにより全探索に要する  $N!$  から  $O(2^N N^2)$  程度にステップ数を減少させることが可能になった。また、1951年にはDantzigにより最も基本的な連続最適化問題である線形計画問題による定式化がなされ、単体法を用いた解法が提案された [7]\*<sup>2</sup>。線形計画法や単体法に関する詳細はそれぞれ3, 4章を参照されたい。当時の電子計算機(SEACと呼ばれる第1世代のコンピュータ)の能力では  $N = 10$  の問題を解くために20分を要したという [8]。そのような電子計算機の能力の低さもあいまって、アルゴリズムにおける計算量(入力全体での最悪ステップ数)の問題が重要視されるようになっていった。特に解法のスケラビリティの観点からは計算量が変数の個数の指数関数的かべき的かという差異が非常に重要である。割当問題については1955年に多項式時間アルゴリズムであるハンガリー法が開発された [9]。ハンガリー法の計算量は  $O(N^4)$  であり [10]、多項式時間であることで既存手法で電子計算機に解かせると1時間を要する問題が、ハンガリー法では手計算でも30分で解けたというほど効率的な解法であった [11]。

一方で、今日知られている最適化問題の多くは多項式時間で最適解を探索するアルゴリズムが未だ発見されていない。最適化問題と充足可能性問題(satisfiability problem; SAT問題)のような制約を満たす解の存在を判定する決定問題には様々な種類が存在するが、計算量の観点でそれらの間に成立する関係を研究する計算複雑性理論が勃興したのは1970年代のことである。Cook [12] と Levin [13] によりNP完全と呼ばれる問題のクラスが導入され、基本的な決定問題の多くが互いに多項式時間で帰着でき、NP完全であることがKarpによって示された [14]。これらの研究は、NP完全な問題のうちいずれかの問題が多項式時間で解けるならば、他の問題も同時に多項式時間で解くことが可能である、というP対NP問題の根幹となっている。しかしながら、NP完全問題に対する多項式時間アルゴリズムの発見は現在もなお目処の立たない課題であり、これが  $P \neq NP$  予想と呼ばれている所以である。詳細は省略するが、最適化問題是对応する決定問題よりも同等以上に困難であり、対応する決定問題がNP完全であるような最適化問題はNP困難と呼ばれるクラスに属する。 $P \neq NP$  予想が確信されるにつれて、NP困難な最適化問題に対しては厳密な多項式時間アルゴリズムの探索よりも、多項式時間近似アルゴリズムの開発と解析に興味もたれるようになっていった。

最適化問題に対する近似アルゴリズムは制約を満たすような(必ずしも最適でない)解を発見するアルゴリズムである。近似アルゴリズム自体は計算複雑性理論以前から研究されてきたものの [15, 16]、近似アルゴリズムの定義がなされたのは  $P \neq NP$  予想が認識された後の1975年である [17]。Johnsonによる同論文は近似アルゴリズムの定義だけでなく、その性能評価法を提示した点において重要である。最適化問題  $P$  に対する近似アルゴリズム  $A$  を考える。問題  $P$  の入力(インスタンス; 各問題のこと)  $u$  の最適値  $u_P^*$ 、及び近似アルゴリズム  $A$  に

---

\*<sup>2</sup> Dantzigの線形計画問題に関する研究の一部は戦時中に米国空軍で行われ、研究成果は47年まで秘匿された。Easterfieldの割当問題の研究は第二次大戦後の復員問題の解決のためであった。割当問題以外にもロジスティクスに関する輸送問題等、最適化問題の研究の進展と軍事応用が密接な関係にあることは指摘しておくべきであろう。

よる近似値  $A(u)_P$  に対して，最適化問題  $P$  に対する近似アルゴリズム  $A$  の（最悪）近似率 (approximation ratio) は，

$$R(P, A) = \max_u r_P(A, u), \quad r_P(A, u) \equiv \begin{cases} \frac{u_P^*}{A(u)_P} & \text{if } P \text{ is a maximization problem,} \\ \frac{A(u)_P}{u_P^*} & \text{o.w.} \end{cases} \quad (1.2)$$

によって定義される．つまり，近似率はすべての入力に対する近似精度の最悪評価を行っていることになる．直感的に明らかなように，最悪性能評価のメリットは近似アルゴリズムの近似性能が常にどの程度保証されているかの絶対的基準を提示することにある．この意味で近似率は近似保証と呼ばれることもある．近似率を中心とした近似アルゴリズムの最悪性能評価は情報科学を中心として今日に至るまで熱心に研究されている [18].

## 1.2 数学：グラフ理論，その測度論との融合

最適化問題，特に組合せ最適化問題の入力にはグラフが与えられる場合が多い．そのため，最適化問題とグラフ理論は不可分の関係にある．グラフ理論の端緒は 1736 年のオイラーによるケーニヒスブルグの橋の問題に関する論文 [19] である．与えられたグラフがいわゆる一筆書き可能であるとき，そのグラフはオイラー路をもつという．オイラーの定理は，グラフがオイラー路をもつかを（多項式時間で）判断することを可能にする．オイラー路に対して，グラフ中にすべての頂点を通るような経路をハミルトン路と呼ぶ（グラフの用語の定義は 2 章を参照）．興味深いことに，与えられたグラフがハミルトニアン路をもつかを判定する決定問題は NP 完全であることが先述した Karp により証明されている [14].

このように，特殊な経路をもつかといったグラフの性質や同型変換に対するグラフ不変量には，それ自体を計算することが計算問題として NP 完全または NP 困難であるものが多数存在している．特殊なグラフにおいてこれらの性質や量を研究することがグラフ理論の根幹を成している．König による割当問題の特殊例である 2 部グラフ上の最大マッチング問題の研究はその 1 例である [20]. König の定理が辺彩色問題や本論文で取り上げる最小頂点被覆問題と関係するように，グラフ理論の研究は計算複雑性理論とは別の観点で（最適化）問題間の関係性を明らかにしてきた．

グラフ理論と測度論の融合は，後に情報科学，物理学，生物学，社会科学等の広範な領域へのグラフ理論の展開の契機となった点で大きなブレイクスルーであった．Spencer [21] によれば，グラフ理論に確率的手法を導入した最古の研究は 1947 年の Erdős によるラムゼー数の研究 [22] である．確率的手法はグラフの集合に対して事象が成立する確率を求めるという点で，集合内の任意のグラフで事象が成立するかを調べる従来のグラフ理論的研究とは一線を画している．Erdős による確率的なグラフ集合の導入は，1959 年に彼と Rényi によるランダムグラフの提案 [23] へ結実する．ランダムグラフ  $G(n, p)$  は辺を各頂点の組に独立に確率  $p$  で辺を設置して得られる  $n$  頂点のグラフの集合を表す．ランダムグラフと確率的手法との差異は，辺

## 4 第1章 はじめに

の設置確率  $p$  をパラメタとしている点にある。これにより、例えば連結度（最大の連結成分（2.1 節）の頂点数）が  $p$  の値に応じて  $o(n)$  から  $\Theta(n)$  へ転じる相転移現象の存在が証明された。この結果自体が後にパーコレーション理論の一部として組み込まれることになる [24]。

このように、グラフ理論は長い歴史を有するものの、その測度論との融合によるランダムグラフの数理は 60 年弱の比較的新しい学問分野である。ランダムグラフ研究の現在に至る歴史的概略は 2.4 節で触れることとする。一方、はじめに述べたように、グラフと（組合せ）最適化問題は不可分の関係にあるとあってよい。その意味では、確率的手法やランダムグラフの概念が最適化問題やその近似アルゴリズムの解析に取り入れられることは論理的に自然な帰結であるように思われる。次節では最適化問題のランダム化に焦点を当て、その歴史的経緯を概説する。

### 1.3 近似アルゴリズムの典型性能評価と threshold phenomena

1.1 節では近似アルゴリズムの重要性と近似率に代表される最悪性能評価の意義について述べた。一方で、最悪性能評価を通じて、最悪近似率を達成する入力がかたがた病的な（通常現れないような）例となることも明らかになっている。このため、近似アルゴリズムの代表的なテキスト [18] の序文でも言及されているように、ランダムに入力を与えた最適化問題に対して多項式時間近似アルゴリズムが平均的にどの程度の近似性能を発揮するか、という問いは実用上自然である。

このような近似アルゴリズムに対する典型（平均）性能評価は 1976 年の Karp [25] や 1979 年の Angluin と Valiant による研究 [26] に端を発する。これらの研究は先述した NP 困難なグラフ不変量のランダムグラフにおける性質を調べるために、従来のグラフ理論的な検証ではなくある種の貪欲法の解析を取り入れた点に特色がある。

ここでは、近似アルゴリズムの典型性能評価の初期の重要な結果として、1981 年の Karp と Sipser による最大マッチング問題における “e-phenomena” の発見を概説する [27]。グラフにおいて辺で接続された 2 頂点の組をマッチングと定義すると、その最大数を求める問題は最大マッチング問題と呼ばれる組合せ最適化問題となる。最大マッチング問題自体は多項式時間で厳密に最適解を得ることが可能である [28] が、彼らはより高速な近似アルゴリズムが多くの例でほぼ最適な近似解を返すことを数値実験により発見した。現在、leaf removal アルゴリズムと呼ばれるこの近似アルゴリズムは、グラフの一部分で局所最適なマッチングを構築しその周辺部分を除去する手順をそれ以上の構築が不可能になるまで繰り返す（詳細な手順は 3.1 節で記述する）。そのため、手順の反復が終了した段階でグラフが完全に除去されていれば、この近似アルゴリズムによって最大マッチング問題の最適解が得られていることになる。彼らは、グラフ除去の手順をマルコフジャンプ過程として解析し、以下の定理を示した。

**定理 1.1.** Theorem 3 in [27]

ランダムグラフ  $G(n, \lambda/(n-1))$  を入力とする最大マッチング問題において、上述した近似アルゴリズムの反復が終了したときに残存しているグラフの頂点数を  $R(n, \lambda)$  とする。このとき



以下が成立する：

任意の  $\lambda > 0$  に対して、任意の  $\epsilon > 0$  に対し以下を満たすような定数  $r(\lambda) \geq 0$  が存在する。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Pr \left[ \left| \frac{R(n, \lambda)}{n} - r(\lambda) \right| > \epsilon \right] = 0. \quad (1.3)$$

さらに、 $\lambda \leq e = 2.71 \dots$  のとき、そしてそのときに限り、 $r(\lambda) = 0$  である。

$r(\lambda) = 0$  は、この近似アルゴリズムが最適値と  $o(N)$  程度の差しかもたない近似値となる近似解を確率 1 で発見可能である状況を表している。彼らはグラフの平均次数に相当するパラメータ  $\lambda$  に関してネイピア数の前後で近似アルゴリズムの典型的な近似性能が変化することを指摘し、これを“e-phenomena”と名付けた。

この他にも、同時期に代表的な NP 完全問題である  $K$ -SAT 問題 ( $K \geq 3$ ) においてもランダムな入力の生成法が提案されている [29]。SAT 問題は、連言標準形 (conjunctive normal formula)  $f = \bigwedge_{i \in I} \bigvee_{j \in J_i} l_{ij}$  の充足可能性を判定する問題である。ここで、 $\bigwedge, \bigvee$  はそれぞれ論理積、論理和を表し、 $l_{i,j}$  はリテラル（ここではブール変数  $x$  またはその否定  $\bar{x}$ ）を表す。ここでは各節  $\bigvee_{j \in J_i} l_{ij}$  中にブール変数が  $K$  個現れるような連言標準形の充足可能性問題を  $K$ -SAT 問題と呼ぶことにする\*3。変数の個数を  $N$ 、節数を  $M$  とすると、比  $\alpha = M/N$  が 1 変数あたりの制約の個数を表すパラメータとなる。提案された生成法は、上述のランダムグラフの自然な拡張になっており、パラメータ  $\alpha$  が上記の  $\lambda$  に相当している。SAT 問題に対する近似アルゴリズムに対しても、その典型的な近似性能が急激に変化するようなパラメータ  $\alpha$  の閾値が解析された。また、SAT 問題ではランダムな連言標準形が充足可能である割合もパラメータ  $\alpha$  の変化により急激に変化することが、小規模な問題に対する厳密なアルゴリズムによる数値計算で示唆された [30]。Karp と Sipser による e-phenomena を含め典型性能や制約充足問題の SAT/UNSAT（充足可能/不可能）に関する閾値が現れる現象は、情報科学において threshold phenomena と呼ばれるようになった。統計力学の観点では threshold phenomena は相転移現象に他ならないが、後述するように相転移現象としての統計力学的な解析が実現するまでには Karp の研究から 20 年弱が経過することになる。

## 1.4 物理学：ランダム系の統計力学

これまで述べてきた情報科学における最適化やアルゴリズム、数学におけるランダムグラフと関連が深い物理学の領域としてランダム系の統計力学が挙げられる。ランダム系の統計力学で扱われる代表的なモデルとして、以下の分配関数で定義される Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型 [31] (1975 年) がある。

$$Z(\beta; \mathbf{J}) = \sum_{\sigma \in \{\pm 1\}^N} \exp(-\beta \mathcal{H}(\sigma)), \quad \mathcal{H}(\sigma) = \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (1.4)$$

\*3 計算複雑性理論では節中の変数が  $K$  個以下の SAT 問題を  $K$ -SAT 問題と呼ぶことも多いが、ここではちょうど  $K$  個の場合に制限して定義する。

ここで、 $\mathbf{J} = \{J_{ij}\}$  は以下の確率分布に独立同分布で従うランダム変数である。

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J}} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right), \quad J_0 = \frac{\tilde{J}_0}{N}, \quad J = \frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}. \quad (1.5)$$

これは、希釈磁性体の帯磁率のカusp形状を説明するために提案された格子上の Edwards-Anderson 模型 [32] の全結合平均場模型に相当する。SK 模型の特色は、強磁性全結合模型と異なり、場所に応じてスピン間の結合強度やその符号が異なっている点である。このように模型のハミルトニアンの中に何らかのランダムネスが含まれる模型はスピングラス模型と総称される。初期の重要な理論的発展としては、解析手法であるレプリカ法におけるレプリカ対称性とその破れの導入 [31, 33]、ギブス測度の純粋状態 (pure states) への分裂 [34]、それに伴う超計量性 (ultrametricity) の発生 [35] といった物理的描像の深化が挙げられる。これらランダム系の統計力学 (特にスピングラス理論) の基礎は 80 年代中盤までに確立された。その数学的な検証は測度論の発展と共に 90 年代後半から現れはじめ [36]、SK 模型を含む代表的なスピングラス模型における物理的な解析結果や描像の正当性が現在でも検証されている [37]。

スピングラス理論の発展と並行して、数値実験のためのマルコフ連鎖モンテカルロ法における新手法の開発も盛んに行われてきた。80 年代初頭の大きな成果として、モンテカルロ法の実行中に温度を徐冷することで準安定状態へのトラップを避けるシミュレーテッドアニーリング (simulated annealing, SA; 焼きなまし法) が挙げられる [38]。同時に、同論文がランダム系の統計力学と組合せ最適化問題の接点となった。同論文では SA の適用例として組合せ最適化問題の代表例である巡回セールスマン問題を取り上げているが、そこには組合せ最適化問題が離散自由度のスピンをもつスピングラス模型で記述できるという洞察が働いていた。この洞察はスピングラス模型が物性物理学における希釈磁性体のモデル系としてだけでなく、ランダムネスを含む他のシステムに対応するという示唆を与えた。

スピングラス理論の他分野への応用のさきがけは、先述した組合せ最適化問題の統計力学的解析 [39] と記憶モデルの一種である Hopfield 模型 [40] の統計力学的解析 [41] が挙げられる。前者において Fu と Anderson は、与えられたグラフ中の頂点を 2 組に分割し、両者の間の辺の本数を最小化するグラフ分割問題と呼ばれる NP 困難問題を考察している。次章で述べるいくつかの例と同様に、グラフ分割問題に対応するスピングラス模型は、2 頂点間の辺の有無を表す結合強度  $\{J_{ij}\}$  をランダムネスとして含んでいる。したがって、グラフ分割問題のランダムネスを考慮することは 1.2 節で述べたランダムグラフ上の同問題を解析していることに他ならない。SK 模型のランダムグラフへの拡張である Viana-Bray 模型 [42] とあわせて、1985 年頃までにはグラフという数学的構造がスピングラス模型における新たなランダムネスとして認識されるに至った。

前述してきたランダムグラフにおけるパーコレーションや e-phenomena のように、ランダムグラフの性質は  $N$  を頂点数として平均次数 (1 頂点に接続する辺の本数の平均値) が  $O(N^0)$  の疎結合領域で興味深い振る舞いを起こすことが多い。一方で、前述した研究は技術的な問題から平均次数が  $\Theta(N)$  のより密なランダムグラフを対象としていた。このため、疎結合スピングラス系に対する解析手法の開発とその他分野への応用が以後のランダム系の統計力

学における大きなテーマとなった。スピングラス理論の創生から 80 年代中盤までの他分野への応用までのレビューは [43] を参照されたい。最終的に疎結合スピングラス模型に対する平均場近似として Monasson によるレプリカ法 [44] と次節で解説するキャビティ法の 2 種類が開発され、現在もともに使用されている。

## 1.5 相転移現象としての最適化問題の典型的性質の解析

統計力学におけるスピングラス理論の整備と適用範囲の拡大と並行して、情報科学の文脈では 1.3 節で述べた近似アルゴリズムの典型性能評価とそれに伴う threshold phenomena の解析が進んでいた。両者がはじめて具体的に結びついたのは、1994 年の Kirkpatrick と Selman による研究である [45]。彼らは 1.3 節の終わりで述べた  $K$ -SAT 問題の SAT/UNSAT 転移を数値的に検証するため、転移点近傍における有限サイズスケーリングを行った。その結果、彼らは  $K = 3$  における SAT/UNSAT 転移点が  $\alpha_c = 4.17(5)$  であると評価している。この結果はランダム系の統計力学の研究者の注意を引き、転移点の解析的な見積もりが始められた [46]。特にレプリカ法を用いた初期の解析 [47] では、レプリカ対称性と呼ばれる仮定のもと、多重重なり変数を含む複雑なレプリカ法の計算を経て  $\alpha_c \simeq 5.18$  という値を導いている。理論的な見積もりと数値計算結果の乖離は系のレプリカ対称性の破れを示唆したものの、従来方法ではそれ以上の計算を行うことが困難であった。前節の終わりに述べた Monasson による疎結合スピングラス模型に対するレプリカ法 [44] の開発はこの困難を克服することを目的としていた。現在では、レプリカ対称性の破れを仮定したキャビティ法を用いた解析から、SAT/UNSAT 転移点は  $\alpha_c \simeq 4.267$  であると理論的に見積もられている [48]。

$K$ -SAT 問題における SAT/UNSAT 転移に続いて解析対象となったのは、レプリカ対称性と典型的な計算複雑性の関係性である [49]。同論文で Monasson らは変数の個数が 2 と 3 の節を  $1-p$  と  $p$  の確率で混合した  $(2+p)$ -SAT 問題 [50] を考察した。3-SAT 問題が NP 完全問題に属する一方で 2-SAT 問題は多項式時間で解くことが可能なクラス P に属することから、彼らは  $p$  をパラメタとして両者を接続し、典型的な問題の性質がどちらに等しいかという相転移現象が存在するかを検証した。最悪計算量の意味では任意の  $p > 0$  で  $(2+p)$ -SAT 問題は NP 完全であるが、彼らはそれとは別に平均計算量に関する相転移現象の存在を期待したのである。2-SAT 問題の SAT/UNSAT 転移は厳密に解析がなされており [51]、しかもレプリカ対称性を仮定した統計力学的解析も同じ転移点を見積もることができる [47]。一方、前述したように、3-SAT 問題の SAT/UNSAT 転移点はレプリカ対称性のもとの見積もりは明らかに数値結果と一致しない。そこで、彼らはレプリカ対称性を仮定した SAT/UNSAT 転移点を求め、厳密なアルゴリズムによる数値計算をスケーリングして見積もった SAT/UNSAT 転移点と比較した。その結果、 $p < p_0 \simeq 0.41$  では 2-SAT 問題と同様にレプリカ対称性のもとの転移点が数値結果と一致することを確認した。また、すべての制約を満たすブール変数の割合が  $p < p_0$  では 2-SAT 問題のように連続的に変化する一方で、 $p > p_0$  では 3-SAT 問題のように不連続に変化することを数値的に確認した。このように転移点の前後における問題の典型的な性質も  $p_0$  を閾値として変化している。さらに、充足率が 0.5 となる典型的に最も困難

なパラメタ  $\alpha_{0.5}(p)$  において、厳密なアルゴリズムの計算量の中央値が  $p_0$  を閾値として変数の個数の多項式から指数関数へ変化していることも数値的に確認している。以上から、彼らは  $(2+p)$ -SAT 問題では最悪計算量とは別の閾値  $p_0$  において、SAT/UNSAT 転移点におけるレプリカ対称性とその破れ、及び厳密なアルゴリズムの典型的な計算量の多項式オーダーから指数関数オーダーへの変化、という2種類の相転移現象が生じることを示した。これらの事実は、レプリカ対称性とその破れが NP 完全な決定問題の典型的な計算量と関連付けられることを強く示唆している。

このようなレプリカ対称性と問題の典型計算量との関連性についての研究はその後様々な問題において検証された。重要な例としては、NP 完全な制約充足問題である 3-XORSAT 問題 (排他的論理和を含む充足可能性問題) [52] と 3 章でも扱う NP 困難な組合せ最適化問題である最小頂点被覆問題 [53] が代表的である。特に、前者は 2-core と呼ばれるランダムグラフの構造とレプリカ対称性の破れとの関連性を明確に提示することに成功しており、スピングラス理論で確立されてきた解空間の分裂等の物理的描像を情報科学へ適用する契機となった。最適化問題や決定問題における豊かな物理的描像は Zdeborová らの集中的な研究 [54] によって 2000 年代後半までに発見、整理されており、今後の数学的な検証が期待される。

問題自体の典型的な性質や統計力学的な解析と並行して、それに対する (近似) アルゴリズムの典型性能の平均場解析も行われるようになった。はじめに、次章で概説するように問題に対する近似アルゴリズムの提案とその典型性能解析を同時に行うことが可能なキャビティ法が整備された。これにより、統計力学及び情報科学の文脈で様々な問題に対するキャビティ法の適用がなされている。その他の重要な成功例としては、SAT 問題に対する厳密なアルゴリズムである Davis-Putnam-Loveland-Logemann アルゴリズムの解析 [55] と 1.3 節で述べた leaf removal アルゴリズムの解析である [52, 56]。前者は上述した  $(2+p)$ -SAT 問題における典型計算量の相転移の検証に、後者は 3-XORSAT 問題や最小頂点被覆問題における近似アルゴリズムの典型性能の解明に貢献を果たした。これらの解析はアルゴリズムの各ステップをランダムグラフにおける平均場近似によって追跡する方法によって実現している。このため、各ステップの操作がグラフ上で再現できるような比較的単純なアルゴリズム以外では解析できないという欠点が存在する。近年ではそれを踏まえ、最適化問題の制約を置換する緩和法と呼ばれる近似手法において、緩和した問題に対応するスピングラスモデルを解析することで緩和法の典型性能を明らかにする試みがなされている。これには筆者らによる線形計画緩和の解析 [57] や Javanmard らによる半正定値計画緩和の解析 [58] が該当する。これらは、従来のスピングラス理論による最適化問題の典型的な性質の解析から、最適化問題に対する近似手法という方法論に対するスピングラス理論の展開という点で特徴的といえる。

## 1.6 本論文の目的

本論文は組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムの典型性能の統計力学的な評価を目的としている。前節までの概説からわかるように、この目標は情報科学、数学、物理学の中でも比較的新しい諸分野-最適化、アルゴリズム、グラフ理論、測度論、そしてスピングラス理論-

の複合領域をターゲットとしている。

これまで著者は前節で示したような既存研究と異なる以下のような観点で研究を進めてきた。

第一に、従来のアルゴリズムの解析から前進し、近似アルゴリズム間の典型性能を可能な限り解析的に比較するという観点である。その意味では本論文は最適化問題の物理的描像の解明を目指す立場よりも、近似アルゴリズムの threshold phenomena を研究してきた情報科学側の立場に近い。これにより近似アルゴリズムの比較の尺度としての典型性能評価法の確立を目指す。その達成のため、本論文では必要に応じて数学的な議論によりアルゴリズムの典型性能評価を行っている (3, 5 章)。

第二に、従来統計力学の文脈で解析されてきた“典型的な”設定を解析が可能な限り拡張することを目指した。最適化問題の物理的描像の解明を目指す立場では、典型的な問題設定は他の設定での定性的な成立を予想する上で重要な解析対象である。一方、上述したような近似アルゴリズム間の典型性能比較を目指す立場では、ランダムグラフ集合のような設定の変更が定性的な変化を生じさせようするため、系統的な典型性解析を行う必要がある (3 章)。また、解析の都合上、対象とする最適化問題も単純な目的関数や制約をもつ問題が選択されることが多い。これも統計力学的解析のベンチマークとして重要ではあるものの、典型性能比較の観点からはそのような問題だけでは不十分である。そのため、本論文では比較的複雑な組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムの統計力学的典型性能評価を行っている (5, 6 章)。

第三に、最適化問題における物理的描像と最適化問題の数理構造を近似アルゴリズムを介して関連付けるという観点である。先述したように、先行研究では専ら全探索的な厳密なアルゴリズムの数理構造とレプリカ対称性の関連性に着目してきた。Leaf removal アルゴリズムのような発見的方法は典型性能が解析可能であるものの、解析結果が特にレプリカ対称性の破れた相における問題の数理構造を反映しているかという点には疑問が残る。本論文では線形計画緩和が組合せ最適化問題の構造を直接的に反映していることに着目し、その挙動とレプリカ対称性の相関を検証する (4 章)。

最後に、レプリカ対称仮定のもとでの統計力学的解析を平均場解析としてだけでなく確率伝搬法の典型性能評価とみなす (3 章)。このため、本論文ではレプリカ対称性の破れを仮定した解析を重視しない反面、必要に応じて従来のキャピティ法の枠組みを適切に拡張し、確率伝搬法に基づく近似アルゴリズムの提案やその典型性能評価に重点を置く。このような統計力学的アプローチが非凸な (NP 困難な) 組合せ最適化問題に対して有効であることを提示する (5, 6 章)。

以上の観点から、本論文では単なる組合せ最適化問題の統計力学的解析を超えて、組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムに主眼を置いた統計力学的解析を多面的に展開する。

本論文は以下のような構成をとる。2 章では、以降の解析で中心的な位置を占めるキャピティ法に関する概説を行う。3 章では、統計力学的によく解析されてきた最小頂点被覆問題に対する 3 種類の近似アルゴリズムの典型性能を評価する。従来の結果を包摂する形で任意の次数分布で定義されるランダムグラフ上の同問題を考察し、近似アルゴリズムの典型性能の閾値

の大小関係が 3 種類に限定されることを解析的に示し、数値的に検証する。続く 4 章では、上述したように近似手法を介して最小頂点被覆問題の物理的描像と数理構造を関連付ける。このため、近似手法の挙動によって問題の入力をサンプリングするという変則的な手法を採用し、両者の間に相関が存在することを数値的に検証する。5 章では、複雑な組合せ最適化問題である最大カバー問題における 3 種類の近似アルゴリズムの典型性能を評価する。問題の性質から、解析は限られたランダム化でのみ行われるものの、得られる結果は 3 章の結果と定性的に異なるものである。6 章では、統計力学的アプローチの統計的推論問題への応用として集団検査法と呼ばれる古典的な問題を考察する。適切にキャビティ法の枠組みを拡張することで、有限サイズの問題においても良い精度で性能を予測可能な近似アルゴリズムを提案する。最後に本論文のまとめと今後の展望について述べ、7 章とする。

## 第 2 章

# 最適化問題に対する確率伝搬法とその統計力学的解析

本章では本論文における統計力学的解析の基本となるキャビティ法に関してレビューする。ここでは、特に組合せ最適化問題に対して確率伝搬法とその派生手法を用いて多項式時間近似アルゴリズムを構築する方法、及びレプリカ対称キャビティ法によりその典型性能、つまりランダム化された最適化問題に対する平均近似精度、を解析する方法に関して解説する。解説にあたっては、用語の定義を Mézard と Montanari によるテキスト [59] と対応させている。本章の特徴は、確率伝搬法の適用対象を特に最適化問題としている点、そしてより広いクラスの問題に対応するためハイパーグラフ上で定義される最適化問題の扱いに関しても詳述している点にある。

後述するように、キャビティ法は統計力学におけるベータ・パイエルス近似 [60] と捉えることができる。クラスター変分法 [61] への一般化を経て、スピングラス模型に対するベータ・パイエルス近似適用の試みは 1970 年代後半になされている [62, 63]。一方、情報科学では、確率伝搬法は 1988 年に木構造をもつベイジアンネットワークに対する厳密な計算法として登場した [64, 65]。初期の情報科学の文脈におけるキャビティ法に関しては Frey によるテキスト [66] が詳しい。確率伝搬法とベータ・パイエルス近似の関連性については 1998 年に Kabashima と Saad によって明らかにされた [67]。その後、統計力学における平均場近似と情報科学における確率伝搬法の関連性の一般論は Yedidia らによってより広い範囲で明らかにされた [68, 69]。一方、近似手法としての確率伝搬法の解析の基礎は疎結合スピングラス模型のレプリカ対称解の解析として 1980 年代後半から発展してきた [70, 71]。確率伝搬法の統計力学的理解と解析方法の確立が、前章で述べたような 2000 年代以降の制約充足問題や最適化問題の統計力学、いわゆる情報統計力学の深化へとつながっているのである。

### 2.1 最適化問題，グラフ，ファクターグラフ

組合せ最適化問題の多くは、変数間の関係がグラフと呼ばれる図形で表現される。以下では無向グラフに限定して話を進めるが、有向グラフの場合にも同様の議論が可能である。グラフ

$G$  は頂点とそれらを接続する辺をもち、それぞれの集合を  $V, E$  として、 $G = (V, E)$  のように定義される。一般に各辺が接続する頂点の個数に制限はないものの、特に辺が3個以上の頂点を接続するようなグラフをハイパーグラフと呼んで区別することがある。図 2.1 はグラフの例で、 $V = \{1, 2, 3, 4\}$ ,  $E = \{(1, 2), (2, 3), (3, 1), (3, 4)\}$  で定義される。一方で、図 2.2 は  $V = \{1, 2, 3, 4\}$ ,  $E = \{(1, 2, 3), (1, 2, 4)\}$  で定義されたハイパーグラフの例であり、網掛けの部分全体が1本の辺であることを表す。また、頂点  $i \in V$  に接続する辺の本数を頂点  $i$  の次数 (degree) と呼ぶ。図 2.1 において、頂点 1 の次数は 2、頂点 3 の次数は 3 である。相異なる 2 頂点  $i, j \in V$  に対して、頂点  $i$  から辺をたどることで頂点  $j$  へ到達可能なとき、2 頂点  $i, j$  の間に経路 (path) が存在するという。経路が存在する頂点の極大部分集合と、対応する辺の部分集合からなる部分グラフを連結成分と呼ぶ。

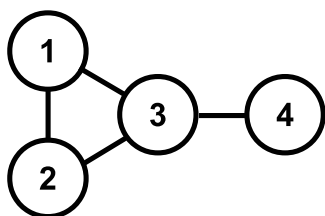


図 2.1: グラフの例.

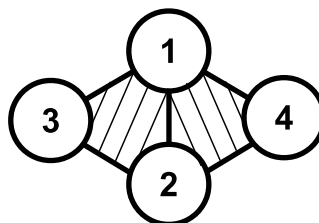


図 2.2: ハイパーグラフの例.

次に組合せ最適化問題を例示する。

### 1. 最小頂点被覆問題 (Minimum vertex cover problem)

NP 完全性が初めて示された Karp の 21 題 [14] に含まれ、情報科学において基本的な組合せ最適化問題の 1 つである。この問題は、グラフ  $G = (V, E)$  上において「各辺の接続する頂点のうち少なくとも一方を被覆する」ように頂点を被覆し被覆数を最小化する組合せ最適化問題である。各頂点  $i \in V$  にバイナリ変数  $x_i \in \{0, 1\}$  を対応させ、頂点  $i$  が被覆されたとき  $x_i = 1$  と定めると、この問題は、

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_{i=1}^N x_i, \\ \text{subject to} \quad & x_i + x_j \geq 1 \quad \forall (i, j) \in E, \\ & x_i \in \{0, 1\} \quad \forall i \in V. \end{aligned} \tag{2.1}$$

と表される。上記の最適化問題のように、線形目的関数、線形制約のみからなる組合せ最適化問題は整数計画問題と呼ばれ、様々な実問題に現れる問題群である。第 3 章と第 4 章では最小頂点被覆問題に対する近似アルゴリズムの典型性能に関して考察する。

### 2. $K$ -彩色問題 ( $K$ -coloring problem)

この問題はグラフ  $G = (V, E)$  の各頂点を  $K$  色から選択した 1 色で塗り、隣接した頂点どうしを相異なる色で塗ることができるかを判定する決定問題である。この問題は制約を満たす変数の配列が存在するか否かを判定する制約充足問題の一種である。しかし、



隣接した頂点どうしが同じ色なら損をするように目的関数を設定すると, 次のように定式化できる.

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_{(i,j) \in E} \delta(q_i, q_j), \\ \text{subject to} \quad & q_i \in \{1, \dots, K\} \quad \forall i \in V. \end{aligned} \quad (2.2)$$

ただし,  $\delta(x, y)$  はクロネッカーのデルタである. この問題の最適値が 0 ならば, グラフ  $G$  は  $K$  彩色可能であるといえる.

### 3. スピングラス模型の基底状態探索

統計力学におけるスピン模型の基底状態探索も組合せ最適化問題の一種と考えられる. グラフ  $G = (V, E)$  上で辺  $(i, j) \in E$  の相互作用が  $J_{ij} \neq 0$  であるようなイジング模型の基底状態の探索は, 以下の組合せ最適化問題を解くことに対応する.

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & - \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \\ \text{subject to} \quad & \sigma_i \in \{\pm 1\} \quad \forall i \in V. \end{aligned} \quad (2.3)$$

$J_{ij}$  が  $(i, j)$  によらない定数  $J > 0$  であれば, この最適化問題はグラフ  $G$  上の強磁性イジング模型の基底状態探索となる. 一方で,  $J_{ij}$  が独立同動分布で確率分布  $P(J)$  に従う確率変数であるとすれば, この問題はスピングラス模型の基底状態探索に対応している.

### 4. 最大カバー問題 (Maximum coverage problem)

最後に特殊なグラフ上で定義される組合せ最適化問題として, 最大カバー問題を例示する. 2部グラフ  $G = (V_1, V_2, E)$  を, 辺が  $V_1$  に属する頂点と  $V_2$  に属する頂点の間のみを接続するグラフであると定義する. 2部グラフ上の最大カバー問題は,  $V_1$  内の  $K$  個の頂点をカバーして, カバーした頂点到隣接する  $V_2$  内の頂点の個数を最大化する問題として定義される. 実例を挙げると, 図 2.3 の左は 2部グラフを表しており, このグラフ上の  $K = 2$  最大カバー問題の最適解は 4 ( $V_1$  側の頂点 1 と 3 をカバーする) となる.

$V_1$  側の頂点  $i$  を選択するか否かで  $x_i$ ,  $V_2$  側の頂点  $a$  が選択した頂点到隣接するか否かで  $y_a$  というバイナリ変数を導入すると, この問題は以下のように定式化される.

$$\begin{aligned} \text{Max.} \quad & \sum_{a=1}^M y_a, \\ \text{subject to} \quad & y_a \leq \sum_{i: (i,a) \in E} x_i \quad \forall a \in V_2, \\ & \sum_{i=1}^N x_i \leq K \\ & x_i \in \{0, 1\} \quad \forall i \in V_1, \quad y_a \in \{0, 1\} \quad \forall a \in V_2 \end{aligned} \quad (2.4)$$

この定式化から, 最大カバー問題も整数計画問題の一種であることがわかる. 第 4 章では最大カバー問題に対する近似アルゴリズムの典型性能に関して考察を行う.

以上からわかるように, 組合せ最適化問題には様々な種類があり, その中には変数が 3 状態以上を取りうる問題や, 目的関数や制約内に 3 体以上の相互作用を含む問題が含まれる. 複雑

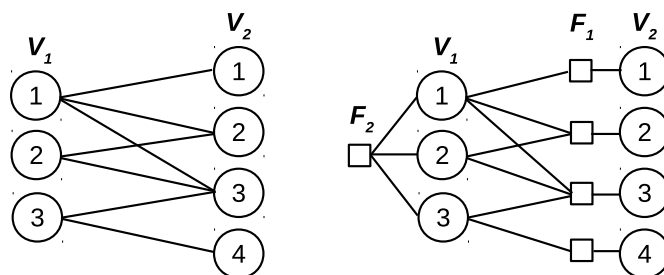


図 2.3: 最大カバー問題の例. (左) 2 部グラフ. (右) 対応するファクターグラフ表現.

な相互作用をもつ問題に対してキャビティ法を適用するには、与えられたグラフと問題をファクターグラフ [72] に変換することが重要である. ファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  は 2 種類の頂点集合  $V, F$  からなる 2 部グラフであり,  $i \in V$  を変数ノード (variable node),  $a \in F$  を関数ノード (functional node) と呼んで区別することが特徴的である. ファクターグラフへの変換は以下のような手続きによって実行可能である.

1.  $G_f$  における変数ノード集合  $V$  はもとの  $G$  における  $V$  そのものである.
2. 目的関数の各項と各制約に関して、それが含む変数の個数に応じて、1 体か 2 体以上に分類する.
3.  $G_f$  における関数ノード  $F$  を 2 体以上の目的関数項及び制約に 1 対 1 対応するように構成する\*<sup>1</sup>.
4. 各関数ノードと、それに対応する目的関数項/制約に現れる変数に応じた変数ノードを辺で接続する.

ここからわかるように、変数ノードは問題の変数と 1 対 1 対応し、関数ノードは 2 体以上の目的関数項と制約に 1 対 1 対応すると考えることができる.

ここでは図 2.4 左のようなグラフ上の最小頂点被覆問題のファクターグラフへの変換を例示する. まず、ファクターグラフの変数ノード (図中丸) はグラフの頂点集合と等しい. 一方で、ファクターグラフの関数ノード (図中四角) としては、(1) 目的関数項  $+x_i$  に対応するもの、(2) 辺の制約条件  $x_i + x_j \geq 1$  に対応するもの、(3) 定義域  $x_i \in \{0, 1\}$  に対応するもの、の 3 種類が考えられる. しかし、1 体の項や制約を除くので、図 2.4 右には (2) に対応する関数ノードのみが示されており、これが対応するファクターグラフとなっている. また、注意すべき点として、このファクターグラフ表現が左側のグラフ上の  $K$ -彩色問題やスピングラス模型のファクターグラフ表現と等価である点があげられる. 一方で、各関数ノードの表す目的関数や制約は問題に依存する. つまり、 $K$ -彩色問題ならば目的関数  $\delta(q_i, q_j)$ , 強磁性イジングならば目的関数  $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$  が関数ノードに付随する.

最適化問題によっては与えられたグラフよりも複雑なファクターグラフ表現が得られること

\*<sup>1</sup> 本論文ではファクターグラフが煩雑になることを防ぐため、1 体の目的関数項及び制約に関しては対応する関数ノードを省略する.

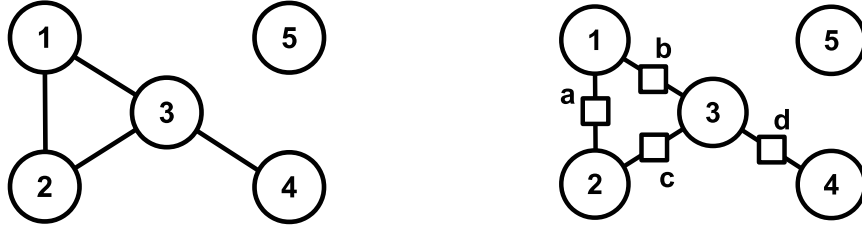


図 2.4: 左のグラフが与えられた場合の最小頂点被覆問題に対応するファクターグラフ (右).

がある. 図 2.3 左のグラフ上の最大カバー問題に対応するファクターグラフは同図右のように表される. ここで,  $F_1$  の関数ノードは制約  $y_a \leq \sum_{i:(i,a) \in E'} x_i$  を表し,  $F_2$  の関数ノードは制約  $\sum_{i=1}^N x_i \leq K$  を表している. このようなファクターグラフに対するキャビティ法の適用時には注意が必要となる.

次に, 得られたファクターグラフ表現に対応する分配関数を定義する. 最小化問題に対応するファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  において, 関数ノード  $i \in V$  上の変数を  $x_i \in \omega$ , 付随する目的関数を  $+a_i x_i$  とする. ただし,  $\omega$  は変数の取り得る値の集合とする. さらに, 各関数ノード  $a \in F$  における目的関数を  $f_a$ , 制約を  $\chi_a$  と表す (これらは  $a$  に隣接する変数の関数である). この組合せ最適化問題における最適解を次のようなボルツマン分布を用いて推定することを考える.

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp \left( -\beta \sum_{i \in V} a_i x_i - \beta \sum_{a \in F} f_a \right) \prod_{a \in F} \mathbb{1}_{\chi_a}. \quad (2.5)$$

ただし,  $\mathbb{1}_{\chi_a}$  は  $\chi_a$  が存在しない, または真ならば 1 を, 偽ならば 0 を返す関数 (指示関数) とした. 指示関数を用いることで確率分布  $P(\mathbf{x})$  の台は全ての制約を満たす変数 (実行可能解) に限定される. パラメタ  $\beta \in \mathbb{R}$  は逆温度と呼ばれ,  $\beta \rightarrow \infty$  の極限 (零温度極限) で確率分布  $P(\mathbf{x})$  は考えている組合せ最適化問題の最適解上の一様分布に収束する. このように, 任意の逆温度における推定結果が実行可能解であることが保証されており, 特に零温度極限で最適解の一様分布が得られる点が式 (2.5) で定義された確率分布の特徴である. 規格化定数  $Z$  は分配関数と呼ばれ,

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \omega^{|V|}} \exp \left( -\beta \sum_{i \in V} a_i x_i - \beta \sum_{a \in F} f_a \right) \prod_{a \in F} \mathbb{1}_{\chi_a}, \quad (2.6)$$

で与えられる. この分配関数は, 変数ノードに関する積の部分と関数ノードに関する積の部分に分離することが可能である.

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \omega^{|V|}} \prod_{i \in V} \phi_i(x_i) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}). \quad (2.7)$$

ここで,  $\partial a = \{i \in V \mid (i, a) \in E'\}$  は関数ノード  $a$  に隣接する変数ノードの集合を表す. これがグラフ上の組合せ最適化問題の分配関数の一般形である. このとき, 先述した確率分布は

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \prod_{i \in V} \phi_i(x_i) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}), \quad (2.8)$$

とかける．統計的機械学習の文脈では，ファクターグラフはボルツマン分布に対するグラフィカルモデルと呼ばれることがある．グラフィカルモデルに対する確率伝搬法の解説としては Bishop によるテキスト [73] の8章などがあげられる．

先ほど例示した4つの組合せ最適化問題の分配関数を書き下すと以下ようになる．

#### 1. 最小頂点被覆問題

$x_i = 1$  が頂点  $i$  の被覆を表すとして，

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \{0,1\}^{|V|}} \exp\left(-\beta \sum_{i \in V} x_i\right) \prod_{a \in F} H\left(\sum_{i \in \partial a} x_i - 1\right). \quad (2.9)$$

ただし， $H(x) = 1$  ( $x \geq 0$ )， $0$  ( $x < 0$ ) である．式 (2.7) の表現では， $\phi_i(x_i) = e^{-\beta x_i}$ ， $\psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = H(\sum_{i \in \partial a} x_i - 1)$  となっている．

#### 2. $K$ -彩色問題

$q_i = q$  が頂点  $i$  を色  $q$  で塗ることを表すとして，

$$Z = \sum_{\mathbf{q} \in \{1, \dots, K\}^{|V|}} \exp\left(-\beta \sum_{a \in F; i, j \in \partial a} \delta(q_i, q_j)\right). \quad (2.10)$$

これは反強磁性ポッツ模型に他ならない．式 (2.7) の表現では， $\phi_i(x_i) = 1$ ， $\psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = \exp(-\beta \sum_{a \in F; i, j \in \partial a} \delta(q_i, q_j))$  となっている．

#### 3. スピングラス模型の基底状態探索

$$Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in \{\pm 1\}^{|V|}} \exp\left(\beta \sum_{a \in F; i, j \in \partial a} J_{ij} \sigma_i \sigma_j\right). \quad (2.11)$$

逆温度を入れたため，スピングラス模型そのものが得られる．式 (2.7) の表現では， $\phi_i(x_i) = 1$ ， $\psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = \exp(\beta \sum_{a \in F; i, j \in \partial a} J_{ij} \sigma_i \sigma_j)$  となっている．

#### 4. 最大カバー問題

分配関数は，

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \{0,1\}^{|V_1|}} \sum_{\mathbf{y} \in \{0,1\}^{|V_2|}} \exp\left(\beta \sum_{a=1}^M y_a\right) H\left(K - \sum_{i \in \partial_{2s}} x_i\right) \prod_{t=c(a) \in F_1} H\left(\sum_{i \in \partial_{1t}} x_i - y_a\right). \quad (2.12)$$

先述のとおり，関数ノードによって  $\psi_a$  の形が異なっている．

最適化問題ではバイナリ変数のみをもつ最適化問題を 0-1 組合せ最適化問題と呼ぶことがあり，巡回セールスマン問題をはじめ様々な種類の問題が含まれる．それらの分配関数の表示例は [74] を参照されたい．

## 2.2 確率伝搬法

本節では、グラフ上の最適化問題に対して近似的かつ確率的に最適解を探索する確率伝搬法 (Belief propagation; BP) を説明する。はじめに一般論を述べた後、最小頂点被覆問題に対する適用例を示す。

### 2.2.1 一般論

設定として、ファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  上で最適化問題に対応する分配関数が、式 (2.7)、つまり

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \omega^{|V|}} \prod_{i \in V} \phi_i(x_i) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}), \quad (2.13)$$

で与えられているとする。先ほどと同様に、関数ノード  $a$  に隣接する変数ノードの集合  $\partial a = \{i \in V \mid (i, a) \in E'\}$  と変数ノード  $i$  に隣接する関数ノードの集合  $\partial i = \{a \in F \mid (i, a) \in E'\}$  を定義する。

はじめに頂点  $i \in V$  上の変数  $x_i$  が値  $x$  をとる確率 (1 体スピン確率)  $P_i(x)$  を求めることを考える。周辺化の公式  $P(A) = \sum_B P(A \mid B)P(B)$  より、

$$\begin{aligned} P_i(x_i) &= Z^{-1} \phi_i(x_i) \sum_{\{x_j\}_{j \in V \setminus i}} \prod_{j \in V \setminus i} \phi_j(x_j) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \\ &\equiv Z^{-1} \phi_i(x_i) P_{\partial i}(x_i), \end{aligned} \quad (2.14)$$

となる。  $P_{\partial i}(x)$  は、頂点  $i$  に隣接するすべての関数ノードにおいて  $x_i = x$  となる確率を意味する。この確率を正確に計算することは、変数の個数  $|V_1|$  の指数関数個の和をとる必要なため現実的でない。そこで、ベータ・パイエルス近似として、頂点  $i$  に隣接する各関数ノードにおいて  $x_i = x$  となる事象が互いに独立であると仮定すると、

$$\begin{aligned} P_i(x_i) &= Z^{-1} \phi_i(x_i) P_{\partial i}(x_i) \\ &\simeq Z_i^{-1} \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i), \end{aligned} \quad (2.15)$$

と表される。ここで、  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)$  は関数ノード  $a$  で  $x_i = x$  となる確率を表し、  $Z_i$  はその規格化定数である。

ベータ・パイエルス近似のイメージを図 2.5 を用いて説明する。木でないファクターグラフ内にはサイクル (ループ) が存在する。このとき、図 2.5 の左に点線で示したように、変数ノード  $i$  に隣接する各関数ノードは、頂点  $i$  を介さないサイクルを通じて互いに相関をもつことがある。上で行った仮定は、このサイクルによる相関を無視し、各関数ノードにおける  $x_i = x$  の実現が独立である (同図右) とみなすことに相当する。この近似により、  $P_{\partial i}(x)$  を求めるために必要な指数関数個の和を取る操作が、各関数ノードで多項式個の和を取る操作に置換される。

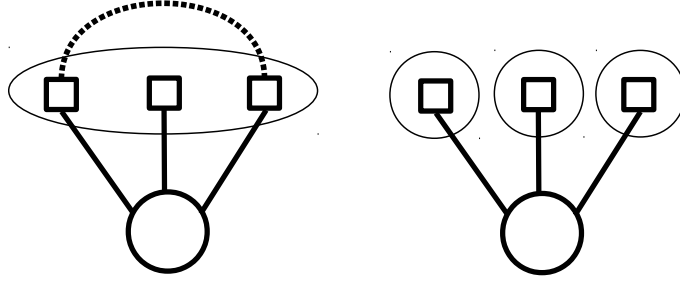


図 2.5: 1 体スピン確率に対するベータ・パイエルズ近似のイメージ。左は近似前で、楕円は  $P_{\partial i}(x)$  を表す。右は近似後で、関数ノードを囲む丸はそれぞれ  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)$  を表す。この近似はノード間の相関（左点線）を無視することに対応する。

次に、上で導入した確率  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)$  を計算する。周辺化の公式より、規格化定数を  $\tilde{Z}_{a \rightarrow i}$  として、

$$\begin{aligned} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) &= \tilde{Z}_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} \psi_a(x_i, \mathbf{x}_{\partial a \setminus i}) P_{\setminus a}(\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}), \\ P_{\setminus a}(\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}) &\equiv \tilde{Z}_{\setminus a}^{-1} \sum_{\{x_k\}; k \in \tilde{V}^{(i)} \setminus \partial a} \prod_{k \in \tilde{V}^{(i)} \setminus \partial a} \phi(x_k) \prod_{b \in \tilde{F}^{(i)} \setminus a} \psi(x_{\partial b}). \end{aligned} \quad (2.16)$$

ただし、 $\tilde{V}^{(i)}$ ,  $\tilde{F}^{(i)}$  は、それぞれファクターグラフ  $G_f \setminus i$  の頂点  $\partial a \setminus i$  を含む連結成分の変数ノード、関数ノードの部分集合を表す。このため、 $P_{\setminus a}(\mathbf{x}_{\partial a \setminus i})$  は、ファクターグラフ  $G_f \setminus a$  において、( $G_f$  において)  $a$  に隣接していた  $i$  以外の変数ノードの値の組が  $\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}$  となる確率を表す。グラフ  $G_f \setminus a$  はキャビティグラフと呼ばれ、キャビティグラフ上での確率の伝搬を考えるとこの手法がキャビティ法と呼ばれる所以である。 $P_i(x_i)$  と同様に、この確率を近似的に求めることにすれば、

$$\hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \simeq Z_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} \psi_a(x_i, \mathbf{x}_{\partial a \setminus i}) \prod_{j \in \partial a \setminus i} P_{j \rightarrow a}(x_j). \quad (2.17)$$

$Z_{a \rightarrow i}$  は近似後の規格化定数であり、 $P_{j \rightarrow a}(x)$  は  $G_f \setminus a$  において  $x_j = x$  となる確率を表す。

最後に、導入した確率  $P_{i \rightarrow a}(x)$  を近似的に計算する。これは 1 体スピン確率の近似式 (2.15) から、関数ノード  $a$  の部分を除いたものに相当する。

$$P_{i \rightarrow a}(x_i) \simeq Z_{i \rightarrow a}^{-1} \phi_i(x_i) \prod_{b \in \partial i \setminus a} \hat{P}_{b \rightarrow i}(x_i). \quad (2.18)$$

以上のように、ベータ・パイエルズ近似を繰り返すと、BP 方程式と呼ばれる  $\{P_{i \rightarrow a}(x)\}$  と  $\{\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)\}$  で閉じた方程式系 (2.17), (2.18) が得られる (図 2.6)。 $\{P_{i \rightarrow a}(x)\}$  や  $\{\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)\}$  は隣接する変数ノードから関数ノードへ、またはその逆に流れていく確率なので、信念やメッセージと呼ばれる。このため、適当な初期値から開始して BP 方程式を反復的に解く手法は確率伝搬法（信念伝搬法）やメッセージ・パッシングと呼ばれている。さらに、BP 方程式はメッセージの和と積の形で表されるため、それを逐次代入的に解く手法は和積アルゴリズム (sum-product algorithm) とも呼ばれる。

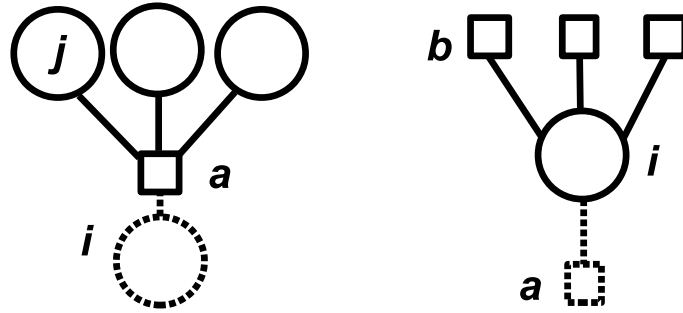


図 2.6: ベーテ・パイエルス近似のイメージ. 左は  $P_{i \rightarrow a}(x)$ , 右は  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x)$  の近似に相当する. いずれも, 最上段のノード間の相関を無視する近似となる.

最適解を推定するためには零温度極限  $\beta \rightarrow \infty$  をとる必要があるため, 各メッセージを適当にリスケールする必要があるが生じる. バイナリ変数であれば,  $P_i(x) \propto \exp(-\beta h_i x)$  (局所場),  $P_{i \rightarrow a}(x) \propto \exp(-\beta h_{i \rightarrow a} x)$ ,  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x) \propto \exp(-\beta \hat{h}_{a \rightarrow i} x)$  のようなりスケールが行われる\*2. このようにして導入された  $\{h_{i \rightarrow a}, \hat{h}_{a \rightarrow i}\}$  をキャビティ場と呼び, これらは通常実数値をとる. あとで例示するように, キャビティ場を導入すれば式 (2.17), (2.18) の規格化定数を消去し, キャビティ場だけの反復式 (キャビティ方程式) を得ることができる. キャビティ方程式において零温度極限をとると, スピン和の部分が最小値関数になる. このエネルギー的 (energetic) キャビティ方程式を逐次代入的に解く手法は min-sum アルゴリズムと呼ばれている.

一般論の最後として, この近似の有効範囲について議論する. 最適化問題に対応するファクターグラフにサイクルがないとき, つまりファクターグラフが木の場合, 信念伝搬法は収束が保証され各 1 体スピン確率を正しく計算できることが示されている. 一方で, 一般的にサイクルをもつファクターグラフでは収束が保証されず, また 1 体スピンの確率を正しく計算できる保証も存在しない. これはベーテ・パイエルス近似がスピン間の相関を無視することに起因している. しかし, 後述する統計力学的解析によれば, ファクターグラフにサイクルが多少存在する場合でも, 信念伝搬法により最適解に近い近似解が得られることが明らかになっている. そこで, 任意のファクターグラフに対し確率伝搬法を用いることをルーピー・ビリーフプロパゲーション (loopy BP) と呼んで区別することがある [75]. これは確率伝搬法を最適化問題に対する近似アルゴリズムとみなしていることに相当し, 本論文でもこの立場に基づいて典型近似性能解析や他の近似手法との典型性能比較を行っている.

## 2.2.2 具体例：最小頂点被覆問題

ここでは, 確率伝搬法の具体例として, 前節で例に挙げた最小頂点被覆問題に関するキャビティ方程式を求める. グラフ  $G = (V, E)$  上の最小頂点被覆問題をファクターグラフ

\*2 より一般に  $x \in \omega$  ならば,  $|\omega| - 1$  種類のキャビティ場を定義する必要がある.

$G_f = (V, F, E')$  により表現すると, 分配関数は次で与えられる.

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \{0,1\}^{|V|}} \exp\left(-\beta \sum_{i \in V} x_i\right) \prod_{a \in F} H\left(\sum_{i \in \partial a} x_i - 1\right). \quad (2.19)$$

注意すべき点として, この問題では相互作用が各辺での制約のみであるため, ファクターグラフにおける関数ノード  $a$  がもとのグラフの辺  $(i, j) \in E$  と 1 対 1 対応している. そのため, 関数ノード  $a$  に隣接する変数ノードの個数は常に 2 個となる (図 2.4 右参照).

まず 1 体スピン確率を近似する. 式 (2.15) と  $\phi_i(x_i) = e^{-\beta x_i}$  より,

$$P_i(x_i) \simeq Z_i^{-1} e^{-\beta x_i} \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i). \quad (2.20)$$

この確率を近似的に計算すると, 式 (2.17) と  $\psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = H(\sum_{i \in \partial a} x_i - 1)$  より,

$$\hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \simeq Z_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{x_j; j \in \partial a \setminus i} H(x_i + x_j - 1) P_{j \rightarrow a}(x_j). \quad (2.21)$$

$\partial a \setminus i$  は元を 1 個しかもたないため, ここではそれを  $j$  とした. 最後に, 式 (2.18) よりこの確率を近似計算すると,

$$P_{i \rightarrow a}(x_i) \simeq Z_{i \rightarrow a}^{-1} e^{-\beta x_i} \prod_{b \in \partial i \setminus a} \hat{P}_{b \rightarrow i}(x_i). \quad (2.22)$$

これらが最小頂点被覆問題の BP 方程式である.

零温度極限をとるために, 局所場とキャビティ場を  $P_i(x) \propto \exp(-\beta h_i x)$ ,  $P_{i \rightarrow a}(x) \propto \exp(-\beta h_{i \rightarrow a} x)$ ,  $\hat{P}_{a \rightarrow i}(x) \propto \exp(-\beta \hat{h}_{a \rightarrow i} x)$  で導入する. BP 方程式における規格化定数を消去するため,  $x = 0, 1$  それぞれの場合の BP 方程式を書き下すと,

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\beta \hat{h}_{a \rightarrow i}}}{1 + e^{-\beta \hat{h}_{a \rightarrow i}}} &= Z_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{x_j; j \in \partial a \setminus i} H(1 + x_j - 1) \frac{e^{-\beta h_{j \rightarrow a} x_j}}{1 + e^{-\beta h_{j \rightarrow a}}} \quad (x_i = 1) \\ &= Z_{a \rightarrow i}^{-1}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + e^{-\beta \hat{h}_{a \rightarrow i}}} &= Z_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{x_j; j \in \partial a \setminus i} H(x_j - 1) \frac{e^{-\beta h_{j \rightarrow a} x_j}}{1 + e^{-\beta h_{j \rightarrow a}}} \quad (x_i = 0) \\ &= Z_{a \rightarrow i}^{-1} \frac{e^{-\beta h_{j \rightarrow a}}}{1 + e^{-\beta h_{j \rightarrow a}}}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\frac{e^{-\beta h_{i \rightarrow a}}}{1 + e^{-\beta h_{i \rightarrow a}}} = Z_{i \rightarrow a}^{-1} e^{-\beta} \prod_{b \in \partial i \setminus a} \frac{e^{-\beta \hat{h}_{b \rightarrow i}}}{1 + e^{-\beta \hat{h}_{b \rightarrow i}}}, \quad (x_i = 1) \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{1 + e^{-\beta h_{i \rightarrow a}}} = Z_{i \rightarrow a}^{-1} \prod_{b \in \partial i \setminus a} \frac{1}{1 + e^{-\beta \hat{h}_{b \rightarrow i}}}. \quad (x_i = 0) \quad (2.26)$$

変形には  $H(x) = 1$  ( $x \geq 0$ ),  $0$  ( $x < 0$ ) を用いている. これらからキャビティ方程式が得られる.

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = -\frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{\beta h_{j \rightarrow a}}), \quad (j \in \partial a \setminus i) \quad (2.27)$$



$$h_{i \rightarrow a} = 1 + \sum_{b \in \partial i \setminus a} \hat{h}_{b \rightarrow i}. \quad (2.28)$$

$\{\hat{h}\}$  を縮約することも可能で、その場合はもとのグラフ  $G = (V, E)$  上におけるキャビティ方程式

$$h_{i \rightarrow j} = 1 - \frac{1}{\beta} \sum_{k \in \partial i \setminus j} \ln(1 + e^{\beta h_{k \rightarrow i}}). \quad (2.29)$$

を得る。ただし、 $\partial i = \{j \in V \mid (i, j) \in E\}$  とした。また局所場の式は、ファクターグラフ表現において、

$$h_i = 1 + \sum_{a \in \partial i} \hat{h}_{a \rightarrow i} \quad (2.30)$$

で与えられる。

最後に零温度極限をとる。最小値関数を用いれば、

$$\begin{aligned} \hat{h}_{a \rightarrow i} &= -\frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{\beta h_{j \rightarrow a}}) \\ &\rightarrow \min\{-h_{j \rightarrow a}, 0\} \quad (\beta \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (2.31)$$

となるため、式 (2.27), (2.28) は

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \min\{-h_{j \rightarrow a}, 0\}, \quad (j \in \partial a \setminus i) \quad (2.32)$$

$$h_{i \rightarrow a} = 1 + \sum_{b \in \partial i \setminus a} \hat{h}_{b \rightarrow i}. \quad (2.33)$$

と変形できる。このように、有限温度のキャビティ方程式は零温度極限において最小値関数と和からなる min-sum 方程式となる。局所場の計算式は式 (2.30) を用いる。

零温度極限では変数の状態は局所場の符号のみに依存する。現在の設定では局所場について  $h_i < 0$  ならば必ず  $x_i = 1$ ,  $h_i > 0$  ならば  $x_i = 0$  となり、与えられたグラフ上のすべての最適解で頂点  $i$  がその値をとることを示している。このような頂点はバックボーン (backbone) と呼ばれる。図 2.4 左に戻れば、このグラフ上の最小頂点被覆問題の最適値は 2 で最適解は 2 通り存在するが、いずれの解においても  $x_3 = 1, x_4 = x_5 = 0$  となるので頂点 3,4,5 はバックボーンとなっている。一方、頂点 1,2 はいずれかの変数の値を 1 にすればよいため、 $(x_1, x_2) = (1, 0), (0, 1)$  の組合せが存在する。このような非バックボーンにおける局所場はちょうど 0 となる。つまり、零温度極限においては頂点の取りうる状態は  $x = 0, 1$  のバックボーン状態か、非バックボーン状態かの 3 種類しか存在しない。これらの確率を定義し、状態間の遷移ルールを決めて確率を求める方法はウォーニングプロパゲーション (warning propagation) として知られている [76]。

## 2.3 実装の方法

本節では確率伝搬法の実装を記述する。実際の組合せ最適化問題への応用を考慮して、本論文では従来の確率伝搬法と、それを利用したデシメーションアルゴリズムの双方に関して述べる。

### 2.3.1 確率伝搬法の実装

簡単のため、ここではバイナリ変数に対してキャビティ場を導入しキャビティ方程式が得られているとする。ファクターグラフ表現  $G_f = (V, F, E')$  において、キャビティ方程式の一般形を

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \hat{f}_{a \rightarrow i}(\{h_{i \rightarrow a}\}), \quad (2.34)$$

$$h_{i \rightarrow a} = f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}). \quad (2.35)$$

と表すことにする。この式は前節の例における式 (2.27), (2.28) に対応している。また、局所場の計算式を

$$h_i = \tilde{f}_i(\{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}) \quad (2.36)$$

と定める。これは前節の例における式 (2.30) である。

このとき、確率伝搬法は疑似コード 1 のように記述される。 $\delta > 0$  は収束判定を行うための実数、 $T_{\max}$  は反復回数の上限を表す。はじめに、各辺  $(i, a) \in E'$  に対応する実数  $\{h_{i \rightarrow a}\}, \{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}$  を  $[0, 1)$  の実乱数等を用いて適当に初期化する。各反復  $T$  では、メッセージの総数と同じ  $2|E'|$  回のメッセージ更新を行う。各反復中にメッセージの更新幅の合計  $\Delta$  を計算し、これが定数  $\delta$  を下回れば収束したとみなす。収束した場合、各変数の局所場を計算し、キャビティ場と合わせて出力する。一方、反復回数が上限  $T_{\max}$  となった場合、収束に失敗したとみなす。

各反復中のメッセージの更新方法は一例であり、メッセージの同時更新等他の更新方法も考えられる。ファクターグラフの性質によっては、メッセージの更新を重みつきで行うと収束が速くなることも知られている [77] が、確率伝搬法のダイナミクスに関しては未解明の部分が多く残されている。例えば、ファクターグラフの形状によってはメッセージが周期解にトラップされる現象が見られる。周期解を防止するためにはダンピングが有効な場合がある。疑似コード 1 の  $h_{i \rightarrow a} \leftarrow f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}\})$  を、

$$h_{i \rightarrow a} \leftarrow \lambda_T h_{i \rightarrow a} + (1 - \lambda_T) f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}\}) \quad (2.37)$$

と変更することがその一例である。

確率伝搬法によって得られる情報は、与えられたグラフ上の最適化問題における各変数の期待値や近似値の見積もりである。一方で、確率伝搬法にはすべての制約を満たすような近似解を得ることが困難であるという欠点も存在する。以下では、確率伝搬法を基に近似解を構成する手法を説明する。

### 2.3.2 BP-guided decimation

あるオラクルに基づくデシメーションとは、一部の変数の値を徐々に固定し、最終的にすべての制約を満たす近似値を得る方法を指す。BP-guided decimation は確率伝搬法をオラクルに用いたデシメーションであり、疑似コード 2 のように表される。

---

**Algorithm 1** 確率伝搬法 (min-sum アルゴリズム等含む) の擬似コード
 

---

**Require:** factor graph  $G_f = (V, F, E')$ , cavity eqs.  $\{f, \hat{f}, \tilde{f}\}$ ,  $\delta, T_{\max}$

initialize  $\{h_{i \rightarrow a}\}, \{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}$

$N \leftarrow |V|, M \leftarrow |F|$

**for**  $T = 1$  to  $T_{\max}$  **do**

$\Delta \leftarrow 0$

**for**  $k = 1$  to  $|E'|$  **do**

randomly choose  $i \in \mathbb{N}$  from  $[1, N]$  and  $a \in \mathbb{N}$  from  $\partial i$

$h_{i \rightarrow a}^{\text{old}} \leftarrow h_{i \rightarrow a}$

$h_{i \rightarrow a} \leftarrow f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}\})$

$\Delta \leftarrow \Delta + |h_{i \rightarrow a}^{\text{old}} - h_{i \rightarrow a}|$

**end for**

**for**  $k = 1$  to  $|E'|$  **do**

randomly choose  $a \in \mathbb{N}$  from  $[1, M]$  and  $i \in \mathbb{N}$  from  $\partial a$

$\hat{h}_{a \rightarrow i}^{\text{old}} \leftarrow \hat{h}_{a \rightarrow i}$

$\hat{h}_{a \rightarrow i} \leftarrow \hat{f}_{a \rightarrow i}(\{h\})$

$\Delta \leftarrow \Delta + |\hat{h}_{a \rightarrow i}^{\text{old}} - \hat{h}_{a \rightarrow i}|$

**end for**

**if**  $\Delta < \delta$  **then**

break

**end if**

**end for**

**if**  $T = T_{\max}$  **then**

**return** “Not Converged”

**else**

**for**  $i = 1$  to  $N$  **do**

$h_i \leftarrow \tilde{f}_i(\{\hat{h}\})$

**end for**

**return** cavity fields  $\{h_{i \rightarrow a}, \hat{h}_{a \rightarrow i}\}$  and local fields  $\{h_i\}$

**end if**

---

このアルゴリズムでは、メッセージの収束に関わらずステップ  $T_{\max}$  で更新を打ち切り、その時点で 1 体スピン確率  $P_i(0)$  または  $P_i(1)$  が最も大きな変数の状態を固定する。状態を固定した部分のメッセージは更新を止め、それ以外の部分のメッセージを再度更新することで、固定した変数の値に応じて残りの制約を満たすようにメッセージを変化させ、最終的にすべての制約を満たす変数の組が得られることがデシメーションのメリットである。一方で、 $T_{\max}$  が小さければ、近似解に初期メッセージ依存性が生じる点に注意を要する。

	厳密解法	BP(a)	BP(b)	BPD
近似値	226 (最適)	229	226	227
制約	○	?	?	○

表 2.1: ある最小頂点被覆問題 ( $|V| = 400$ ) に対する信念伝搬法 ( $\beta = 8.0$ ) の近似値.

確率伝搬法とデシメーションの近似性能を具体例で検証する. 表 2.1 は, あるグラフ上の最小頂点被覆問題の最適値と近似値を示している. 厳密解法による値 226 はこの問題の厳密な最適値 (最小値) である. BP は確率伝搬法 ( $T_{\max} = 1000$ ) で, (a) は 1 体スピン確率から確率的に各変数の値を決定した場合, (b) は局所場  $h_i$  が負または 0 ならば  $x_i = 1$ , 正ならば  $x_i = 0$  と定めた場合の近似値となっている. これらは比較的最適値に近い値をとるものの, 問題の制約をすべて満たしているかの保証がないという欠点を有している. 一方, この節で紹介した BP-guided decimation ( $T_{\max} = 100$ ) は, 問題の制約を満たす近似解を必ず見つけることができ, その値も最適値にほぼ等しくなっている.

この例は 1 つの入力 (グラフ) に対する性能比較であるため, 他の入力では確率伝搬法の近似性能が悪化する場合も考えられる. 近似性能を測る素朴な方法として, 問題の入力をランダムに作成しそれらに対する最適解や近似解の平均をとって比較する典型性能評価が考えられる. このようなランダム平均をとるといふ考え方が後述する確率伝搬法の統計力学的解析のモチベーションになっている.

## 2.4 入力のランダム化: ランダムグラフ

本節からはランダムな最適化問題に対する統計力学的解析について概説する. ランダム化された最適化問題とは, その入力 (グラフや相互作用の強さなど) をある確率分布に従うランダム変数とみなした最適化問題の集合を指す. 以下に最適化問題のランダム化の例をあげる.

### 1. 最小頂点被覆問題

この問題の入力はグラフ  $G = (V, E)$  であるため, 問題のランダム化はグラフをランダムに生成することに対応する. このとき, ランダムに生成されるグラフを総称してランダムグラフと呼ぶ.

### 2. スピングラスモデルの基底状態探索

この問題の入力はグラフ  $G = (V, E)$  と, 各辺の相互作用  $\{J_{ij}\}$  の組であるため, 問題のランダム化はグラフ  $G$  と相互作用  $\{J_{ij}\}$  のいずれか (または両方) をランダムに生成することに対応する. 例として, 相互作用を定数  $J > 0$  とすればランダムグラフ上の強磁性イジングモデルに対応し, ランダムグラフ上で  $J_{ij}$  が確率分布  $P(J)$  に従うとすれば Viana-Bray 模型 [42] の基底状態探索に対応する.

**Algorithm 2** BP-guided decimation の擬似コード

---

**Require:** factor graph  $G_f = (V, F, E')$ , cavity eqs.  $\{f, \hat{f}, \tilde{f}\}$ ,  $T_{\max}$

initialize  $\{h_{i \rightarrow a}\}, \{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}$

**while**  $V \neq \emptyset$  **do**

**for**  $T = 1$  to  $T_{\max}$  **do**

**for**  $k = 1$  to  $|E'|$  **do**

            randomly choose  $i \in V$  and  $a \in \partial i$

$h_{i \rightarrow a} \leftarrow f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}\})$

**end for**

**for**  $k = 1$  to  $|E'|$  **do**

            randomly choose  $a \in F$  and  $i \in \partial a$

$\hat{h}_{a \rightarrow i} \leftarrow \hat{f}_{a \rightarrow i}(\{h\})$

**end for**

**end for**

**for**  $i \in V$  **do**

$h_i \leftarrow \tilde{f}_i(\{\hat{h}\})$

**end for**

    find  $i \in V$  with the largest  $|h_i|$

**if**  $h_i < 0$  **then**

        fix  $x_i = 1$

**else**

        fix  $x_i = 0$

**end if**

    fix cavity fields  $h_{i \rightarrow a}, \hat{h}_{a \rightarrow i}$  ( $a \in \partial i$ )

$V \leftarrow V \setminus i$ , update factor graph  $G_f$

**end while**

**return**  $\{x_i\}$

---

前章で述べたように、スピングラス理論の特徴はランダムな相互作用が入った系全体の平均（ランダム平均；クエンチ平均）をとって議論を進める点にある。ランダム平均をとることにより、個々のサンプルに固有の性質に囚われずサンプルの集団を少数のパラメタで特徴づけられるメリットが存在する。これにより、ランダムな問題の集団とその典型的な性質（最適値や確率伝搬法の収束性等）の関係を明確にすることができる。一方で、従来の情報科学やグラフ理論による解析では、特定の種類のグラフに対して数学的な命題を証明することが一般的である。統計力学によるランダム系の解析とこれらの厳密な解析は相補的な関係にあり、その関係は今後一層強化されていくと期待される。本論文では必要に応じて厳密な解析を行うことで統計力学的な議論を補完している。

さて、以下ではグラフ上で定義された最適化問題のランダム化のためにランダムグラフを定義する。ランダムグラフは Erdős と Rényi の研究 [23] に端を発する。研究の初期では特にグラフ理論の観点からランダムグラフの典型的な特徴（次数分布、パーコレーション等の連結性）に関する確率論的な議論が盛んになされた。数学的なランダムグラフの研究に関してはレビュー [78] を参照されたい。物理学の文脈ではランダムグラフは Viana-Bray 模型のようなスピングラス模型、ランダムウォークや SIR 過程といったネットワーク上のダイナミクスへ展開されている [79]。90 年代の終わりにはいわゆる 6 次の隔たりを理論的に示したスモールワールドネットワーク [80] や次数分布がべき性をもつスケールフリーネットワークが発見され [81]、ランダムグラフを用いた研究は生物学 [82]、社会学 [83] 等へ応用が広がっている。

本章では基本的なランダムグラフを 2 種類定義する。  $G = (V, E)$ ,  $|V| = N$ ,  $|E| = M$  とし、各頂点が次数  $k$  となる確率を  $p_k$  ( $k \geq 0$ ) と表し次数分布と呼ぶ。このとき、平均次数  $c$  は各頂点の次数の期待値を指し、  $c = \sum_k k p_k$  と表される。

### 1. Erdős-Rényi ランダムグラフ (Erdős-Rényi random graph)

前章で述べたように、このランダムグラフは  $N$  個の頂点の相異なる 2 頂点の組（計  $N(N-1)/2$  個）それぞれに確率  $p$  で辺を設置するグラフとして定義される。このとき、辺の総本数の期待値は  $pN(N-1)/2$  であるため、  $M = cN/2$  より平均次数は  $c = p(N-1)$  となる。二項分布にスターリングの公式を用いると、  $N \rightarrow \infty$  において次数分布は平均  $c$  のポアソン分布

$$p_k = e^{-c} \frac{c^k}{k!} \quad (2.38)$$

となることが証明できる。

### 2. レギュラーランダムグラフ (regular random graph)

グラフ理論において、すべての頂点の次数が等しいグラフをレギュラーグラフ（正則グラフ）と呼ぶ。レギュラーランダムグラフは頂点数  $N$ 、次数  $K$  のレギュラーグラフすべてが等確率で出現するランダムグラフとして定義される。次数分布は  $p_k = \delta(k, K)$  となる。注意点として、  $K \geq 2$  のレギュラーランダムグラフはサイクルを含む。平均場模型であるベータ格子（中心となる頂点から  $K$  本の辺を伸ばして端点に頂点を設置し、設置された頂点から  $K-1$  本の辺を伸ばして新たな頂点を設置する操作を繰り返してできるグラフ）は木であるため、レギュラーランダムグラフとベータ格子は等価ではないが、解析では近似的にベータ格子とみなすことが多い。

これらの基本的なランダムグラフは平均次数以上では次数分布が指数関数的に減衰する点特徴的である。一方で、次数分布が  $p_k \sim k^{-\gamma}$  と表されるランダムグラフを考えることも可能であり、そのようなグラフはスケールフリーネットワークと呼ばれることがある。スケールフリーネットワークが研究された当初は動的な、つまりグラフに頂点と辺を付け足していく、方法でグラフが生成されていた。しかし、次章でも触れるように、動的な生成法によるグラフは頂点間に次数相関等を有するため、統計力学的な解析が困難な場合がある。そこで、本論文では次数相関がなく、静的に生成されるランダムグラフを総称したコンフィギュレーションモデ

ル (コンフィグモデル) [84] に焦点を当てる. コンフィグモデルには任意の次数分布に対するグラフの生成法が確立されており, 上述した2種類の典型的なランダムグラフの他に, スケールフリー性をもつランダムグラフといった従来統計力学的にはそれほど解析されていなかったランダムグラフが生成可能である. 特に次章では, コンフィグモデルに含まれる任意のランダムグラフ上の最小頂点被覆問題を考察する.

一方, 次数分布以外にランダムグラフを特徴づける量として, 次数相関やクラスター性等の頂点間の接続の疎密を表す各種相関が存在する. これらの相関は実社会のネットワークにおいて広く観測され, 組合せ最適化問題においても問題の典型的な性質を変化させることが知られている [85]. しかし, 本論文では解析の複雑さとランダムグラフを特徴付けるパラメタの増加を避けるため, これらの相関を含まないコンフィグモデルを考察している.

## 2.5 RS キャビティ方程式を用いた統計力学的解析

本節では, 最適化問題に対する統計力学的解析の一般論と実例を概説する. スピングラス理論における平均場近似にはいくつかのレベルが存在するが, ここでは最も基本的なレプリカ対称性 (replica symmetry; RS) と呼ばれる仮定のもとでの平均場近似を扱う.

### 2.5.1 レプリカ対称性と RS キャビティ方程式

簡単のため, グラフ上で定義されたバイナリ変数の最適化問題を考える. そのファクターグラフ表現  $G_f = (V, F, E')$  において, 各関数ノード  $a$  における相互作用が  $\{h_{j \rightarrow a}\}_{j \in \partial a \setminus i}$  の置換に依存せず, グラフ  $G$  以外のランダムネスを含まないと仮定する. 分配関数の一般形を

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \omega^{|V|}} \prod_{i \in V} \phi_i(x_i) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \quad (2.39)$$

とし, BP 方程式にキャビティ場を  $P_{i \rightarrow a}(x) \propto \exp(-\beta h_{i \rightarrow a} x)$  の形で導入すると, この問題のキャビティ方程式は

$$h_{i \rightarrow a} = f(\{\hat{h}_{b \rightarrow i}\}_{b \in \partial i \setminus a}), \quad (2.40)$$

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \hat{f}(\{h_{j \rightarrow a}\}_{j \in \partial a \setminus i}), \quad (2.41)$$

と表される. この方程式に固定点が存在することを仮定する. また, 局所場  $h_i$  に関する方程式は

$$h_i = \tilde{f}(\{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}_{a \in \partial i}) \quad (2.42)$$

と表される.

ファクターグラフ  $G_f$  が与えられると, 選んだ辺に対応するキャビティ場  $h, \hat{h}$  は確率変数であり, キャビティ場の分布  $P(h | G_f)$  や  $P(\hat{h} | G_f)$  が定義できる. 一方, ランダムグラフの定義から, ランダムグラフの集合  $\mathcal{G}$  からファクターグラフ  $G_f$  が選ばれる確率  $P(G_f)$  が定義できる. そこで, ランダムグラフ集合におけるキャビティ分布  $P(h)$  を,  $G_f \in \mathcal{G}$  をグラフの分布  $P(G_f)$  でサンプリングし, ランダムに選択したメッセージが  $h_{i \rightarrow a} = h$  となる確率, と

定義する. メッセージ  $\hat{h}$  のランダムグラフアンサンブルにおける分布  $\hat{P}(\hat{h})$  も同様に定義される. キャビティ方程式からキャビティ場分布に関する方程式を得るために, 各キャビティ場は  $P(h)$  または  $\hat{P}(\hat{h})$  に独立同分布で従うことを要請する. この最も素朴な要請がキャビティ法におけるレプリカ対称仮定 (RS ansatz) であり, これを仮定した解析をレプリカ対称キャビティ法と呼ぶ.

ランダムなファクターグラフにおいて変数ノードの次数分布を  $p_k$ , 関数ノードの次数分布を  $q_k$  とし, 次数相関が存在しないと仮定すれば,  $N \rightarrow \infty$  の極限でキャビティ分布間の自己無撞着方程式は次のように記述される.

$$P(h) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k p_k}{c} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \delta\left(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})\right), \quad (2.43)$$

$$\hat{P}(\hat{h}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k q_k}{\alpha} \int \prod_{l=1}^{k-1} dh^{(l)} P(h^{(l)}) \delta\left(\hat{h} - \hat{f}(\{h^{(l)}\})\right). \quad (2.44)$$

ただし,  $c, \alpha$  はそれぞれ変数ノード, 関数ノードの平均次数. これらの方程式は RS キャビティ方程式と呼ばれる. 導出の詳細は付録 A を参照されたい.

同様の考え方から, ランダムファクターグラフにおける局所場分布  $P_1(h)$  は

$$P_1(h) = \sum_{k=1}^{\infty} p_k \int \prod_{l=1}^k d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \delta\left(h - \tilde{f}(\{\hat{h}^{(l)}\})\right) \quad (2.45)$$

で求められる.

## 2.5.2 ポピュレーションダイナミクスによる数値的方法

RS キャビティ方程式 (2.43), (2.44) は実関数方程式であるため, 特殊な状況を除けば解析的に解くことは困難である. そこで RS キャビティ方程式を数値的に解くポピュレーションダイナミクス [86] について説明する. ポピュレーションダイナミクスは疑似コード 3 のように表される.

ポピュレーションダイナミクスでは連続的な分布を  $N_{\text{pop}}$  個のキャビティ場の頻度分布で近似する (図 2.7). 各サンプルは実数値  $h_u$  をもち, はじめは適当に初期化されている. キャビティ方程式中のデルタ関数に従ってキャビティ場の値を更新し, サンプル (キャビティ場) の頻度分布をキャビティ分布に収束させる. サンプル数無限大の極限においては, ポピュレーションダイナミクスによって RS キャビティ方程式が正確に解けることが保証される [86].

ポピュレーションダイナミクスを用いて計算できる代表的な物理量には以下があげられる. これらの物理量はポピュレーションダイナミクスの実行中に複数回測定することで, 数値的な精度を向上させることができる.

### 1. 変数期待値 (磁化密度)

ランダムグラフ上の問題における変数の平均値は局所場分布  $P_1(h)$  から計算できる. 分布  $P_1$  はキャビティ分布  $\hat{P}(\hat{h})$  から式 (2.45) を用いて計算を行えばよい.



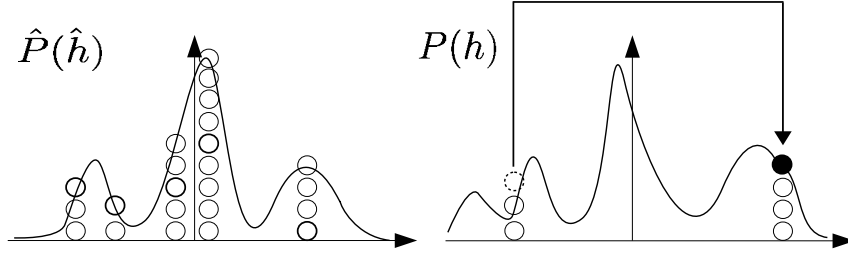


図 2.7: ポピュレーションダイナミクスで  $P(h)$  を更新するイメージ。(左) 分布をサンプル (丸) の頻度分布とみなす。更新の計算に用いるサンプル (太線) をランダムに選ぶと、分布  $\hat{P}(\hat{h})$  に応じて  $\hat{h}$  をサンプリングしたことに相当する。(右)  $P(h)$  において更新されるサンプル (点線) はその値が変化する (黒丸)。それに応じて分布  $P(h)$  も更新される。

---

**Algorithm 3** ポピュレーションダイナミクスの疑似コード

---

**Require:** RS cavity eqs., population size  $N_{\text{pop}}$ ,  $T_{\text{max}}$

initialize  $\{h_u\}, \{\hat{h}_u\}$  ( $u = 1, \dots, N_{\text{pop}}$ )

**for**  $T = 1$  to  $T_{\text{max}}$  **do**

**for**  $u = 1$  to  $N_{\text{pop}}$  **do**

    randomly choose  $k$  from  $kp_k/c$

    randomly choose  $k - 1$  integers  $u(1), \dots, u(k - 1)$  from  $[1, N_{\text{pop}}]$

$h_u \leftarrow f(\hat{h}_{u(1)}, \dots, \hat{h}_{u(k-1)})$

**end for**

**for**  $u = 1$  to  $N_{\text{pop}}$  **do**

    randomly choose  $k$  from  $kq_k/\alpha$

    randomly choose  $k - 1$  integers  $u(1), \dots, u(k - 1)$  from  $[1, N_{\text{pop}}]$

$\hat{h}_u \leftarrow \hat{f}(h_{u(1)}, \dots, h_{u(k-1)})$

**end for**

**end for**

**return**  $\{h_u\}, \{\hat{h}_u\}$

---

## 2. (ベータ) 自由エネルギー

熱力学関数である自由エネルギーも近似的に求めることが可能である。サイクルのないランダムファクターグラフにおいて、自由エネルギー密度のランダム平均  $\bar{f}$  は、RS 仮定の下で以下のように表現される。

$$-\beta \bar{f} = f_v + \frac{c}{\alpha} f_f - c f_e, \quad (2.46)$$

$$f_v = \sum_k p_k \int \prod_{l=1}^k d\hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \ln \left[ \sum_x \phi(x) \prod_{l=1}^k p(\hat{h}^{(l)}, x) \right], \quad (2.47)$$

$$f_f = \sum_k q_k \int \prod_{l=1}^k dP(h^{(l)}) \ln \left[ \sum_{x_1, \dots, x_k} \psi(\{x_l\}) \prod_{l=1}^k p(h^{(l)}, x_l) \right], \quad (2.48)$$

$$f_e = \int dP(h) d\hat{P}(\hat{h}) \ln \left[ \sum_x p(h, x) p(\hat{h}, x) \right]. \quad (2.49)$$

ただし,  $p(h, x) = e^{-\beta h x} / (1 + e^{-\beta h})$  とした. この式をサイクルがある場合に近似的に用いると自由エネルギーの近似値が得られ, その値はベータ自由エネルギー (Bethe free energy) と呼ばれることがある. 同様に内部エネルギー密度やエントロピー密度のランダム平均も求めること可能である. 一方で, これらの計算にはキャビティ分布の多重積分が必要なため, その精度には注意が必要である. 導出の詳細は付録 B を参照のこと.

次数分布や平均次数の値によっては得られたエントロピーが負の値となることがある. これは RS 仮定で得られた近似結果が非物理的になっているためであり, いわゆるレプリカ対称性の破れ (replica symmetry breaking; RSB) を示唆している. ただし, エントロピーが負の値になることはレプリカ対称性の破れのための十分条件であり, 実際にはより強い条件を考えることが多い.

### 2.5.3 解析的方法

ポピュレーションダイナミクスは任意の設定に対して用いることができる汎用的な手法である. ここでは RS キャビティ方程式が解析的に解ける特殊な例を 2 つあげる.

まず, ランダムなファクターグラフがレギュラー, つまり変数ノードの次数と関数ノードの次数がそれぞれ一定である場合, 任意の温度で RS キャビティ方程式を解くことができる. 次数分布は  $p_k = \delta(k, c)$ ,  $q_k = \delta(k, \alpha)$  となるため, 分布  $P(h)$ ,  $\hat{P}(\hat{h})$  がデルタ型であると仮定すれば, RS キャビティ方程式の右辺が容易に計算可能となる. 実際,  $P(h) = \delta(h - h^R)$ ,  $\hat{P}(\hat{h}) = \delta(\hat{h} - \hat{h}^R)$  とおけば, これらは連立方程式

$$h^R = f(\{\hat{h}^R\}) \quad (c - 1 \text{ 個}), \quad (2.50)$$

$$\hat{h}^R = \hat{f}(\{h^R\}) \quad (\alpha - 1 \text{ 個}) \quad (2.51)$$

の解となる. ポピュレーションダイナミクスの結果もキャビティ分布がデルタ型となる仮説を支持するため, レギュラーランダムグラフ上のモデルを解析する例は多い. 本論文でも, 最大カバー問題ではレギュラーランダムグラフに限定して解析を行っている (第 5 章).

次に, 零温度極限をとった RS キャビティ方程式も多くの場合解析的に解くことができる.  $\beta \gg 1$  でのポピュレーションダイナミクスを行うと, 初期値を実数としても収束した分布の台が離散的となる現象がみられることがある. そのような場合, min-sum 方程式 (零温度極限をとったキャビティ方程式) において, キャビティ場の初期値を  $a$  刻みの離散値にとれば, 更新してもその刻み幅が変化しない適当な有理数  $a$  を見つけることができる. 本論文ではキャビティ分布が離散的になる仮定を離散局所場仮定 (discrete field ansatz) と呼ぶことにする. こ

の仮定を設定することで、系の零温度極限の解析が実行可能になることがある。本論文では、第3章や第6章においてこの仮定を使用している。

### 2.5.4 最小頂点被覆問題の統計力学的解析

RS キャビティ法とその解析の例として、先述した最小頂点被覆問題を取り上げる。初出の統計力学的解析 [53] はもう1つのスピングラス理論における平均場解析手法であるレプリカ法を用いてなされた。その後RS キャビティ法による解析がなされ [87]、レプリカ法の結果と一致することが確認された\*<sup>3</sup>。最小頂点被覆問題におけるこれらの詳細に関してはテキスト [90] に詳しい。

ここでは平均次数  $c$  の Erdős-Rényi ランダムグラフ上の最小頂点被覆問題を考える。この問題の有限温度のキャビティ方程式はファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  を与えると

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = -\frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{\beta h_{j \rightarrow a}}), \quad (j \in \partial a \setminus i) \quad (2.52)$$

$$h_{i \rightarrow a} = 1 + \sum_{b \in \partial i \setminus a} \hat{h}_{b \rightarrow i} \quad (2.53)$$

と与えられる。

最小頂点被覆問題のファクターグラフ表現においては、変数ノードの次数は  $G$  での次数と等しく、関数ノードの次数は常に2である (図 2.4 右)。Erdős-Rényi ランダムグラフの次数分布は平均  $c$  のポアソン分布であるため、対応するランダムファクターグラフの変数ノードの次数分布は

$$p_k = e^{-c} \frac{c^k}{k!}, \quad q_k = \delta(k, 2) \quad (2.54)$$

となる。したがって、式 (2.43), (2.44) より、RS キャビティ方程式は以下のようにかける。

$$P(h) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k p_k}{c} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \delta\left(h - 1 - \sum_{l=1}^{k-1} \hat{h}^{(l)}\right), \quad (2.55)$$

$$\hat{P}(\hat{h}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k q_k}{\alpha} \int \prod_{l=1}^{k-1} dh^{(l)} P(h^{(l)}) \delta\left(\hat{h} + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k-1} \ln(1 + e^{\beta h^{(l)}})\right). \quad (2.56)$$

さらに、次数分布  $q_k = \delta(k, 2)$  より、式 (2.56) は次のようにかける。

$$\hat{P}(\hat{h}) = \int dh P(h) \delta\left(\hat{h} + \frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{\beta h})\right). \quad (2.57)$$

\*<sup>3</sup> レプリカ法は自由エネルギーのランダム平均  $\beta \overline{F} = \overline{\ln Z}$  ( $Z$ : 分配関数) を  $\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} (\overline{Z^n} - 1)/n$  (レプリカトリック) と変形し、系を同じランダムネスを含む  $n$  個のレプリカとみなして計算する方法である。レプリカ対称仮定は系の秩序変数のレプリカインデックスの置換に対する対称性として設定される。ここから明らかのように、これまで述べてきたキャビティ法とレプリカ法は計算及び近似の内容が異なるため、両者の結果が一致することは非自明である。より詳細なレプリカ法とキャビティ法の比較に関しては中島氏 [88] の、両者の関係性に関しては森氏 [89] の優れた博士論文に説明を譲りたい。

キャビティ方程式を変形して式 (2.29) を得たのと同様に  $\hat{h}$  を消去すると,  $P(h)$  の自己無撞着方程式が得られる.

$$P(h) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k p_k}{c} \int \prod_{l=1}^{k-1} dh^{(l)} P(h^{(l)}) \delta \left( h - 1 + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k-1} \ln(1 + e^{\beta h^{(l)}}) \right). \quad (2.58)$$

局所場分布  $P_1(h)$  は

$$P_1(h) = \sum_{k=1}^{\infty} p_k \int \prod_{l=1}^k d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \delta \left( h - 1 - \sum_{l=1}^k \hat{h}^{(l)} \right) \quad (2.59)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} p_k \int \prod_{l=1}^k dh^{(l)} P(h^{(l)}) \delta \left( h - 1 + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \ln(1 + e^{\beta h^{(l)}}) \right) \quad (2.60)$$

となる.

はじめに得られた RS キャビティ方程式をポピュレーションダイナミクスにより数値的に解析する.  $c = 2.0, 5.0$ ,  $\beta = 3, 10, 20$  におけるキャビティ分布  $P(h)$  の様子を図示したのが図 2.8 である.  $c = 2.0$  の場合,  $\beta$  の値が大きくなるほど分布が整数値付近に近づいていく様子がわかる. 一方,  $c = 5.0$  では低温においてもキャビティ分布の台が連続的になっている. この現象は離散局所場仮定の破れを示唆している.

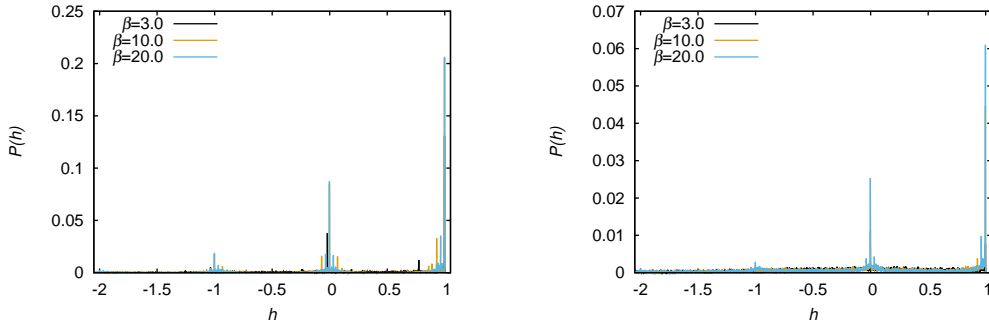


図 2.8: ポピュレーションダイナミクスによる  $c = 2.0$  (左),  $c = 5.0$  (右) におけるキャビティ分布  $P(h)$ .  $N_{\text{pop}} = 10000$ ,  $T_{\text{max}} = 10000$ .

次に, ポピュレーションダイナミクスの結果を踏まえ解析的に RS キャビティ方程式を解く. さきほどの結果から, 平均次数が比較的小さい場合は  $\beta \rightarrow \infty$  でキャビティ場が 1 以下の整数値を取ることが予想される. これは  $\beta \rightarrow \infty$  をとった min-sum 方程式

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \min\{-h_{j \rightarrow a}, 0\} \quad (j \in \partial a \setminus i), \quad (2.61)$$

$$h_{i \rightarrow a} = 1 + \sum_{b \in \partial i \setminus a} \hat{h}_{b \rightarrow i} \quad (2.62)$$

からも確認できる. そこで, これを整数局所場仮定として計算を進める. 式 (2.58) の零温度

極限をとった

$$P(h) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{kp_k}{c} \int \prod_{l=1}^{k-1} dh^{(l)} P(h^{(l)}) \delta \left( h - 1 - \sum_{l=1}^{k-1} \min\{-h^{(l)}, 0\} \right) \quad (2.63)$$

において,  $r_1 \equiv P(h=1)$  の値に関して方程式を立てる. キャビティ場が  $h=1$  となるのは, ランダム変数  $k \sim kp_k/c$  に対する  $k-1$  個の場すべてが  $h^{(l)} \leq 0$  となる場合であるから,

$$\begin{aligned} r_1 &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{kp_k}{c} (1-r_1)^{k-1} \\ &= e^{-cr_1} \end{aligned} \quad (2.64)$$

となる. ランベルトの W 関数  $W(x)$  ( $x > 0$ ) を  $W(x)e^{W(x)} = x$  の解として定義し, 式 (2.64) を変形すると,

$$r_1 = \frac{W(c)}{c}. \quad (2.65)$$

同様の計算から局所場分布は,

$$\begin{aligned} P_1(1) &= \sum_{k=1}^{\infty} p_k (1-r_1)^k \\ &= \frac{W(c)}{c}, \end{aligned} \quad (2.66)$$

$$\begin{aligned} P_1(0) &= \sum_{k=1}^{\infty} p_k k r_1 (1-r_1)^{k-1} \\ &= \frac{W(c)^2}{c} \end{aligned} \quad (2.67)$$

と求められる. 零温度極限では,  $P_1(1)$  は必ず  $x=0$  となる変数ノード ( $x=0$  のバックボーン) の割合を表し,  $P_1(0)$  は  $x=0, 1$  のいずれの値も取りうる変数ノードの割合を表す. 2.2.2 節の最後で触れたように, 最小頂点被覆問題の場合非バックボーン 2 つが接続していれば, どちらかを  $x=1$  とすれば局所最適解が得られる. この事実から, 非バックボーンで  $x=1$  となる確率は  $1/2$  とすればよいことがわかる. 以上から, 平均次数  $c$  の ER ランダムグラフ上の最小頂点被覆問題の 1 変数当たりの最適値 (被覆率) が

$$x_c(c) = 1 - \frac{2W(c) + W(c)^2}{2c} \quad (2.68)$$

と得られる. また,  $r_1$  を用いることでベータ自由エネルギー等の表式も得ることができる. 最小頂点被覆問題においては, エントロピーを求めると零温度極限にも関わらず正となる. 残留エントロピーの存在は非バックボーンどうしの変数選択の組合せの数が頂点数の指数関数個程度であることを示唆している.

最後に RS 仮定の成立条件を調べる. キャビティ分布に対する摂動として, ここでは整数局所場の割合  $r_1$  に微小量  $\delta$  を加える. この摂動安定性は式 (2.64) の固定点における線形安定性

に対応する。式 (2.64) に従う更新で摂動項は

$$\begin{aligned} |\delta^{\text{new}}| &= \left| \frac{\partial e^{-cx}}{\partial x} \Big|_{x=r_1} \delta \right| \\ &= W(c)|\delta| \end{aligned} \quad (2.69)$$

となる。更新を繰り返した際に  $|\delta|$  が大きくなる条件は  $W(c) \geq 1$  であり、これは  $c \geq e \simeq 2.71$  と等価となる。この条件はレプリカ対称性が破れるための必要条件であり十分条件ではないことに注意すべきであるが、Erdős-Rényi ランダムグラフ上の最小頂点被覆問題の場合は他の摂動安定性を調べても同じ条件が得られることから、RS/RSB 転移が起こる平均次数は  $c = e$  であると考えられている。RS/RSB 転移前後の解析結果、ポピュレーションダイナミクスとレプリカ交換モンテカルロ法による平均最適値の比較は表 2.2 のようになる。RS 相内  $c < e$  では 3 者ともに誤差の範囲内で一致するものの、それを超えて RSB 相になると 3 者は異なる値をとる。解析解とポピュレーションダイナミクスの見積もりの乖離は整数局所場仮定の破綻を、両者がモンテカルロ法の結果を下回ることはレプリカ対称仮定自体の破綻を示唆している。

$c$	2.0	2.5	3.0	4.0	6.0
RS	0.3919	0.4327	0.4663	0.5187	0.5902
PD	0.3920(1)	0.4326(2)	0.4663(2)	0.5194(2)	0.5926(2)
EMC	0.3917(3)	0.4325(3)	0.4666(2)	0.5198(3)	0.5949(2)

表 2.2: Erdős-Rényi ランダムグラフ上の最小頂点被覆問題の 1 変数当たりの平均最適解の平均次数依存性。RS は零温度極限の解析解、PD は  $\beta = 20$  でのポピュレーションダイナミクス、EMC は  $|V| = 16\text{-}512$  でのレプリカ交換モンテカルロ法での見積もりを  $|V| \rightarrow \infty$  に外挿したもの。

## 2.6 本章のまとめ

本章のレビューでは特に確率伝搬法とその典型性能解析に相当するレプリカ対称キャビティ法について詳細に述べた。一方で、1 段階のレプリカ対称性の破れ (one-step replica symmetry breaking; 1RSB) を仮定した確率伝搬法であるサーベイプロパゲーションやその解析である 1RSB キャビティ法については触れていない。これは本論文が近似アルゴリズムとしての確率伝搬法の典型性能とレプリカ対称性の関連性に主眼をおいているためである。

また、本レビューでは確率伝搬法の最近の進展、例えば期待値伝搬法 [91] や近似的メッセージパッシング [92] について記述していない。これらの手法の開発は確率伝搬法をより一層汎用的なものにしている。

確率伝搬法の拡張や応用と並行して、統計力学的解析やその結果の数学的な厳密化も進んでいる。通常、レプリカ対称キャビティ方程式は熱力学極限をとった形で定式化されている。

このとき、 $N$  変数のランダムグラフ上の確率測度であるキャビティ分布に関する和の極限が、式 (2.43), (2.44) のように、熱力学極限における確率測度としてのキャビティ分布に関する積として表せるかは非自明である。この問題に関しては、局所弱収束 [93] を用いた反復分布方程式 [94] の測度論的な解析として近年整備されてきており、いくつかの問題設定に関しては確率伝搬法の典型性能に関する厳密な証明が与えられている [95]。

## 第3章

# 最小頂点被覆問題に対する近似手法の典型性能比較

本章では、最小頂点被覆問題に対する確率伝搬法、線形計画緩和、leaf removal アルゴリズム、という3つの近似アルゴリズムの典型性能を解析的に比較する。本研究の特色は各アルゴリズムの特性を踏まえ、任意のランダムグラフ集合に対して系統的な解析を行う点にある。いずれのアルゴリズムの典型性能に関する相転移現象を示すが、レプリカ対称性を仮定した解析では、典型性能の転移点の大小関係が3種類のケースに分類されることが明らかになる。本章の主要な結果は論文 [96] として出版されている\*<sup>1</sup>。

### 3.1 最小頂点被覆問題と近似アルゴリズム

2.1 節で述べたように、最小頂点被覆問題は基本的な NP 困難な組合せ最適化問題の1つであり、無向グラフ  $G = (V, E)$  に対する整数計画問題

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_{i=1}^N x_i, \\ \text{subject to} \quad & x_i + x_j \geq 1 \quad \forall (i, j) \in E, \\ & x_i \in \{0, 1\} \quad \forall i \in V. \end{aligned} \tag{3.1}$$

として与えられる。ここでは、目的関数値を頂点数  $|V| = N$  で規格化し最適値を被覆率  $x_c^{\text{IP}}(G)$  で表すことにする。解析の主な対象は頂点数  $|V| = N$  のランダムグラフの集合  $\mathcal{G}$  に関する平均  $\overline{(\dots)}$  を取った被覆率の熱力学極限での値

$$x_c^{\text{IP}}(\mathcal{G}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \overline{x_c^{\text{IP}}(G; N)} \tag{3.2}$$

であり、これを平均被覆率と呼ぶことにする。本章では特に  $\mathcal{G}$  が次数分布  $p_k$  のみによって特徴付けられるものを考える。文脈上同一の  $p_k$  を想定し、平均被覆率を平均次数  $c = \sum_k k p_k$  の関数とみなして  $x_c^{\text{IP}}(c)$  と表すことがある。

\*<sup>1</sup> 本章の各図は同論文からの転載である；©IOP Publishing. Reproduced with permission. All rights reserved.



さて、本章で典型性能を比較する最小頂点被覆問題の近似アルゴリズムは以下の3種類である。

### 1. 確率伝搬法

最小頂点被覆問題に対する確率伝搬法に関しては既に 2.2.2 節で説明を行った。BP 方程式 (2.29) を再掲すると、

$$h_{i \rightarrow j} = 1 - \frac{1}{\beta} \sum_{k \in \partial i \setminus j} \ln(1 + e^{\beta h_{k \rightarrow i}}). \quad (3.3)$$

ここでは確率伝搬法をルーピビリーフプロパゲーションとして近似アルゴリズムとみなす。前章で述べたように、RS 相内ではルーピビリーフプロパゲーションの近似値はもとの最適化問題の RS キャピティ法による統計力学的解析で得られるレプリカ対称解と同一視できる。そのため、以下では確率伝搬法による近似値も単に  $x_c^{\text{IP}}(c)$  と表すことにする。

### 2. Leaf removal (LR) アルゴリズム

このアルゴリズムは最大マッチング問題に対する線形時間近似手法として Karp と Sipser により提案された [27]。1 章で述べたように、同論文でこのアルゴリズムの典型性能に関する相転移の存在が証明されている。結果自体はほぼ同様なものの、最小頂点被覆問題に対する典型近似精度の相転移は 2001 年に統計力学の文脈で Bauer と Golinelli によって研究された [56]。その後、このアルゴリズムは XOR-SAT 問題 [52] (同論文ではピーリングと呼ばれている)、最小ヒッティングセット問題 [97]、最大集合被覆問題 [98]、最小支配集合問題 [99] 等へ拡張され、解析されている。

グラフ理論における葉 (leaf) は次数が 1 の頂点を指す。最小頂点被覆問題の場合、葉  $v$  とそれに隣接する頂点  $w$  間の辺  $(v, w)$  に関する制約を満たすためには、 $w$  を被覆することが局所最適であることが示される。頂点  $w$  が被覆されると  $w$  に接続するすべての辺で制約が満たされるため、最適解を得るには  $v, w$  を除いたグラフ上で新たに解を探索すれば十分である。このように、LR アルゴリズムでは、葉と葉に隣接する頂点を除いて新たなグラフを作成する手順を 1 ステップとする。新たなグラフに葉が存在しない場合アルゴリズムは停止する。残されたグラフ  $G_r$  に連結成分  $G_c$  が存在する場合、制約を満たすために連結成分中の頂点をすべて被覆する。この連結成分全体を LR コアと呼ぶ。

### 3. 線形計画緩和 (線形緩和 ; linear programming relaxation)

数理最適化における緩和 (relaxation) とは、最適化問題を変形し別種の最適化問題を導く操作を指す。

線形計画緩和は整数計画問題に対する緩和の一種である。線形計画緩和では、整数計画問題の離散変数を連続変数に置換することで、目的関数と制約が線形関数のみを含む連続最適化問題である線形計画問題とし、それを解くことで近似値を得る。最小頂点被

覆問題に対する線形計画緩和問題は以下の通りである.

$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_{i=1}^N x_i, \\ \text{subject to} \quad & x_i + x_j \geq 1 \quad \forall (i, j) \in E, \\ & x_i \in [0, 1] \quad \forall i \in V. \end{aligned} \tag{3.4}$$

線形計画問題は変数の個数の多項式時間で最適値を厳密に求めることができるクラス P の問題である [100]. また, 目的関数を最大 (最小) 化する整数計画問題に対し, その緩和問題の最適解は整数計画問題の最適解の上限 (下限) である. ゆえに, 線形緩和は整数計画問題に対する汎用的多項式時間近似手法の 1 つであり, 経路探索 [101] やスケジューリング問題 [102] 等, 応用的な問題への適用例も数多く存在する. また, 整数計画問題の最適値とその線形緩和による近似値の比の最大値は整数性ギャップと呼ばれ, 近似アルゴリズムの (最悪) 近似率と密接に関わる量である.

線形計画緩和は整数計画問題の近似手法やその最悪性能評価 [18] だけでなく, 整数計画問題の構造を調べるためにも重要である. なぜならば, 線形緩和問題の制約は高次元空間中で凸多面体として表され, その整数性がもとの最適化問題の多項式時間可解性や近似可能性と関連するためである. 線形計画問題において, 制約がなす凸多面体は実行可能多面体と呼ばれ, その端点 (多面体に含まれる任意の 2 点の凸結合として表されない多面体上の点) は端点解と呼ばれる. 目的関数の線形性より, 最適解の存在する任意の線形計画問題において, 最適解となる端点解が必ず存在する. したがって, 問題の構造を調べるという観点からは端点解の性質を調べれば十分なのである.

本章で取り上げている最小頂点被覆問題は線形計画緩和を通じて興味深い構造が発見された組合せ最適化問題の好例である. 結論から述べると, 本問題には半整数性 (half-integrality) と持続性 (persistency) と呼ばれる特別な性質が知られている [?]. 前者の半整数性は, 線形緩和問題の端点解が必ず  $0, 1/2, 1$  の半整数で構成されるという性質である. 後述するように, この性質は統計力学的解析において重要な役割を果たしている. 端点解の解析を行うためには, 連続スピン模型でなく 3 状態スピン模型で十分であることを半整数性が示唆するためである. 後者の持続性は, 近似解としての線形緩和解  $\mathbf{x}^{\text{LP}}$  中で整数値となっている添字の集合を  $I$  としたとき, 最小頂点被覆問題の最適解  $\mathbf{x}^*$  で  $x_i^* = x_i^{\text{LP}}$  ( $\forall i \in I$ ) となるものが存在するという性質である. つまり, 最適解を得るという観点では, 線形緩和で整数値となった変数はその値を固定して考えれば十分ということになる.

最小頂点被覆問題に対するこれらの近似アルゴリズムの解析はすべて Erdős-Rényi ランダムグラフにおいて行われてきた. 最終的に, Erdős-Rényi ランダムグラフ上の最小頂点被覆問題ではすべての近似アルゴリズムの典型性能に関する転移点が平均次数  $c = e$  であることが確認された [57]. しかし, その結果から直ちにこれらのアルゴリズムの典型近似性能が同等であると結論づけるのは早計であり, 最悪近似性能と同様に典型近似性能にも差が生じることはむしろ自然であるように思われる. そこで, 本研究ではそれぞれの近似アルゴリズムの解析を任

意の次数分布へ拡張することで、典型近似性能の差異を系統的に調べることを目的とする。熱力学極限におけるこれらの近似アルゴリズムの近似値のランダムグラフ平均を前節と同様に定義し、それぞれ  $x_c^{\text{IP}}(c)$ ,  $x_c^{\text{LR}}(c)$ ,  $x_c^{\text{LP}}(c)$  と表すこととする。これらの値が同じ状況下での平均被覆率と等しい場合、それぞれの近似アルゴリズムは典型的に良い性能を示すと考える。

## 3.2 任意のグラフ上での近似性能の比較

本節では任意のグラフ上の最小頂点被覆問題に対する LR アルゴリズムと線形緩和の近似性能を厳密に比較する。この結果自体は本章の趣旨とは異なるものの、典型性能の差異を考察するにあたって有益な知見となる。

### 定理 3.1.

$G = (V, E)$  を LR アルゴリズムによって完全に除去されるグラフであるとする。このとき、 $G$  上の最小頂点被覆問題に対する線形計画緩和による近似値は LR アルゴリズムで得られる近似値と等しい。

線形計画問題は最も基本的な凸計画問題であるため、その数理面は深く研究されてきた [103]。ここでは線形計画問題の重要な性質である強双対性を用いている。線形計画問題にはフェンシエル・ルジャンドル変換を施して得られる双対問題が存在し、主問題（もとの問題）と双対問題の最適値が等しいという強双対性が凸関数のフェンシエル双対定理より導かれる。以下の定理の証明では、この強双対性に着目し、主問題と双対問題に対応する整数計画問題に対する LR アルゴリズムの性質を検証している。

証明.  $G_f = (V, F, E')$  をグラフ  $G$  のファクターグラフ表現であるとする。このとき、最小頂点被覆問題の線形緩和問題 (3.3) の標準形は

$$\text{Min. } x_c = N^{-1} \mathbf{c}^T \mathbf{z}, \text{ s.t. } A\mathbf{z} = \mathbf{b}, \mathbf{z} \geq \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

ただし、 $\mathbf{z} = (\{x_i\}, \{z_a\})^T \in \mathbb{R}^{N+M}$ ,  $\mathbf{c} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{Z}^N$ ,  $A = [A_{\text{inc}}, -I] \in \mathbb{Z}^{M \times (N+M)}$ , 及び  $\mathbf{b} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{Z}^M$  とした。  $\{z_a\}$  はスラックス変数であり、 $I$  は  $M$  次の単位行列である。また、 $A_{\text{inc}} \in \mathbb{Z}^{M \times N}$  はグラフ  $G$  の接続行列である。ベクトルに対する（不）等号は全成分に対する不等号である。線形計画問題 (3.5) を主問題としたとき、その双対問題は以下で与えられる。

$$\text{Max. } y_c = N^{-1} \mathbf{b}^T \mathbf{y}, \text{ s.t. } A^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}. \quad (3.6)$$

ここで、 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M$  である。この最適化問題は以下と等価である。

$$\text{Max. } y_c = N^{-1} \sum_a y_a, \text{ s.t. } \sum_{a \in \partial i} y_a \leq 1, y_a \geq 0. \quad (3.7)$$

これらの主問題、双対問題はそれぞれ  $\mathbf{z} = (1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$ ,  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  が実行可能解であるから、実行可能な問題である。さらに、これらの問題の目的関数はそれぞれ下限と上限をもつ

ため、最適値  $x_c^{\text{LP}} = \min x_c$  と  $y_c^{\text{LP}} = \max y_c$  が存在する。このとき、強双対定理は任意のグラフ上で  $x_c^{\text{LP}} = y_c^{\text{LP}}$  であることを保証する。

次に、主問題、双対問題に対応する整数計画問題を考える。線形計画問題 (3.5) と (3.6) において、変数の定義域をバイナリ制約に置換した整数計画問題の最適値をそれぞれ  $x_c^{\text{IP}}$  と  $y_c^{\text{IP}}$  とする。このとき、自明な大小関係として  $y_c^{\text{IP}} \leq y_c^{\text{LP}} = x_c^{\text{LP}} \leq x_c^{\text{IP}}$  が成立する。LR アルゴリズムが同一グラフ上で最適値  $x_c^{\text{IP}}$  と  $y_c^{\text{IP}}$  を同時に発見し、かつ  $x_c^{\text{IP}} = y_c^{\text{IP}}$  が成立すると仮定すれば、上記の不等式においてすべての等号が成立する。したがって、LR アルゴリズムで得られる  $x_c^{\text{IP}}$  は線形緩和で得られる  $x_c^{\text{LP}}$  と等しいことが示される。

最後に、上記で述べたように、LR アルゴリズムが同一グラフ上で最適値  $x_c^{\text{IP}} = y_c^{\text{IP}}$  となる  $x_c^{\text{IP}}$  と  $y_c^{\text{IP}}$  を同時に発見することを示す。LR アルゴリズムは各ステップにおいて葉とその隣接頂点に相当する頂点集合  $L_a = \{\partial a \mid a \in F, \deg(i) = 1(\exists i \in \partial a), \deg(j) \geq 1(\forall j \in \partial a \setminus i)\}$  を除去する。その反復中、最小頂点被覆問題に対する LR アルゴリズムは  $L_a$  中で次数が最大の変数ノードを被覆する。一方で、その双対問題を解くためには、LR アルゴリズムにおいて被覆する頂点を  $L_a$  における変数ノード  $a$  に変更すればよい。実際に LR アルゴリズムが  $L_a$  を除去するとき、同時に  $L_a$  に隣接するすべての関数ノードが除去される。この手順は、最小頂点被覆問題とその双対問題に対する LR アルゴリズムの局所最適性を示している。LR アルゴリズムが各ステップで被覆する頂点数は、主問題、双対問題ともに1つずつであるから、それによって得られる最適値  $x_c^{\text{IP}}$  と  $y_c^{\text{IP}}$  は常に等しい。以上から証明は完了した。□

一方で、この命題の逆に関しては反例が存在する。葉をもたない2部グラフ上の最小頂点被覆問題を考えると、これに対して LR アルゴリズムは1頂点も除去できずに停止する。一方で、Hoffman-Kruskal の定理 [104] を用いると、2部グラフ上の線形緩和問題の端点解がすべて整数解であることを示すことができる。したがって、このグラフ上の最小頂点被覆問題に対する線形緩和問題は最適解と一致する。この事実は、近似値が最適値と等しいか否かという基準においては、線形緩和の方が LR アルゴリズムよりも性能の良い（最適解を発見するグラフが多い）近似手法であるといえる。

### 3.3 近似アルゴリズムの典型性能解析と比較

本節では任意の次数分布をもつランダムグラフに対する近似アルゴリズムの典型性能解析を行う。いずれの解析も平均場的に木上の問題の典型性能を解析する点で実質的に同等であるが、本論文の解析は通常解析が困難な線形計画緩和に関して統計力学的解析を援用する点が特徴的である。これらの解析から、近似アルゴリズムの典型性能に相転移現象が生じることがわかり、その転移点の大小関係が3つの場合に分けられることがわかる。以下では、ランダムグラフが次数分布で定義されるコンフィグモデルとして生成されることを仮定する。

### 3.3.1 LR アルゴリズム

はじめに、LR アルゴリズムの典型性能を解析する。3.1 節で述べたように、先行研究の多くは主に Erdős-Rényi ランダムグラフにおける LR アルゴリズムの典型性能を解析している。解析には根つき木 (rooted tree) 上の平均場解析とレート方程式による解析の 2 種類が知られているが、本節では前者を用いている。任意の次数分布をもつランダムグラフ上の LR アルゴリズムの典型性能は、Lucibello らによって、ハイパーグラフ上で定義される最大集合被覆問題を対象に解析されている [98]。この問題の特殊例に適切な変換を施すと最小頂点被覆問題となるため、次に示す定理の (ii) で彼らの成果を用いている。ただし、本章の目的を鑑み、ここではその前提条件が満たされない場合を (i) として補完している。

#### 定理 3.2.

ランダムグラフが次数分布  $p_k$  で定義されるコンフィグモデルであると仮定する。このとき、LR アルゴリズムの典型性能は以下のように場合分けされる。

- (i) LR アルゴリズムがただちに停止する場合、つまり  $p_1 = 0$  のとき、 $x_c^{\text{LR}}(c) = 1 - p_0$  となる。
- (ii) そうでない場合、関数  $g(x)$  を次数分布  $p_k$  を用いて、

$$g(x) = \sum_k \frac{kp_k}{c} x^{k-1} \quad (3.8)$$

と定義し、 $X, Y$  を方程式  $X = g(1 - Y), Y = g(1 - X)$  ( $0 \leq Y \leq X \leq 1$ ) の解とすれば、LR アルゴリズムによって得られる最小頂点被覆問題の近似値のランダムグラフ平均は、

$$x_c^{\text{LR}}(c) = 1 - \frac{c}{2}(X^2 + 2XY - 2Y^2) + \sum_k p_k \{(1 - Y)^k - 2(1 - X)^k\}. \quad (3.9)$$

と表される。特に、解  $X, Y$  が等しくなるとき、そしてそのときに限り、LR アルゴリズムは高い確率で  $\Theta(N)$  の LR コアを生成せず、したがって典型的に良い近似精度で動作する。

**証明.** (i)  $p_1 = 0$  の場合、ランダムグラフには葉が存在しない。このとき、LR コアはグラフの連結成分と一致し、その頂点の割合は  $1 - p_0$  である。アルゴリズムの停止後の手順から、LR アルゴリズムは LR コア内のすべての頂点を被覆するため、近似値は  $1 - p_0$  となる。

(ii) 以下では証明の概略を述べる。計算方法の詳細に関しては著者の修士論文 [105] にて述べられている。次数分布  $p_k$  をもつランダムな根つき木を考え、これに対する LR アルゴリズムの典型挙動を解析する。根つき木とは、根と呼ばれる特別な頂点から子や孫に相当する頂点が階層的に接続している木を指す。また、根つき木上の LR アルゴリズムには根が葉であっても根を除去しないという条件を課す。つまり、根が除去される状況では、根に隣接した頂点のいずれかが葉でなければならない。

LR アルゴリズムが木上を完全に除去することから、最終的に根は除去されるか次数が 0 となり孤立するかのいずれかの状態になる。そこで、 $n$  ステップ終了時に根が孤立する確率を

$\phi_n$  ( $n \geq 0$ ), 根が除去される確率を  $\psi_n$  ( $n \geq 1$ ) とおき, これらの確率のステップ依存性を解析する.  $N \rightarrow \infty$  の極限でこれらは以下の関係式を満たす.

$$\begin{aligned}\phi_n &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{kp_k}{c} \left[ \left( \sum_{m=1}^n \psi_m \right)^{k-1} - \left( \sum_{m=1}^{n-1} \psi_m \right)^{k-1} \right], \\ \psi_n &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{kp_k}{c} \left[ \left( 1 - \sum_{m=1}^{n-2} \phi_m \right)^{k-1} - \left( 1 - \sum_{m=1}^{n-1} \phi_m \right)^{k-1} \right].\end{aligned}\quad (3.10)$$

ステップに関する累積確率  $\Phi_n = \sum_{m=0}^n \phi_m$ ,  $\Psi_n = \sum_{m=1}^n \psi_m$  を導入すれば, 上記の関係式は,

$$\begin{aligned}\Phi_n &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{kp_k}{c} \Psi_n^{k-1}, \\ \Psi_n &= 1 - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{kp_k}{c} (1 - \Phi_{n-1})^{k-1}\end{aligned}\quad (3.11)$$

と変形できる.  $\{\Phi_n\}, \{\Psi_n\}$  は単調増加列で  $0 \leq \Phi_n \leq 1, 0 \leq \Psi_n \leq 1$  を満たすため,  $n \rightarrow \infty$  における極限值  $\Phi, \Psi$  が存在する. したがって, 式 (3.11) において  $n \rightarrow \infty$  をとり, 新たに  $X = \Phi, Y = 1 - \Psi$  とおけば, 式 (3.8) で定義された関数  $g$  を用いた方程式  $X = g(1 - Y), Y = g(1 - X)$  ( $0 \leq Y \leq X \leq 1$ ) が得られる.

次に, (ii) の後半部を示す. 根つき木での解析をもとに, 実際のランダムグラフ上で  $n$  ステップ終了時まで孤立している頂点の割合  $i_n$  と除去された頂点の割合  $r_n$  を計算する. はじめに,  $i_n$  を求める.  $n$  ステップ目に葉として選択され, 隣接頂点の除去の結果に孤立する頂点の割合を  $l_n$  とすると,

$$l_n = \sum_k p_k (\Psi_n^k - \Psi_{n-1}^k) - \sum_k kp_k \psi_n \Psi_n^{k-1}.\quad (3.12)$$

また, 実際の LR アルゴリズムによるグラフ除去では, 頂点を除去した際に着目した葉以外の葉も同時に孤立する. それらの割合を  $b_n$  とおくと,

$$\begin{aligned}b_n &= \sum_{k=1}^{\infty} p_k \sum_{m=1}^k \binom{k}{m} (m-1) \phi_{n-1}^m (1 - \Phi_{n-1})^{k-m} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} kp_k \sum_{m=1}^k \binom{k-1}{m-1} \phi_{n-1}^m (1 - \Phi_{n-1})^{k-m} - \sum_{k=1}^{\infty} p_k \sum_{m=1}^{\infty} \binom{k}{m} \phi_{n-1}^m (1 - \Phi_{n-1})^{k-m} \\ &= \phi_{n-1} \sum_{k=1}^{\infty} kp_k (1 - \Phi_{n-2})^k - \sum_{k=0}^{\infty} p_k \left[ (1 - \Phi_{n-2})^{k-1} - (1 - \Phi_{n-1})^{k-1} \right] \\ &= c\phi_{n-1} (1 - \Psi_{n-1}) - \sum_{k=0}^{\infty} p_k \left[ (1 - \Phi_{n-2})^{k-1} - (1 - \Phi_{n-1})^{k-1} \right].\end{aligned}\quad (3.13)$$

ここで, 2行目への変形には  $m \binom{k}{m} = k \binom{k-1}{m-1}$  を, 3行目への変形には  $1 - \Phi_{n-2} = 1 - \Phi_{n-1} + \phi_{n-1}$  等を用いた. また, 最終行への変形には関係式 (3.11) を用いている. したがって,  $n$  ス

ステップ目にはじめて孤立する頂点の割合は,

$$\begin{aligned}\Delta i_n &= l_n + b_n \\ &= \sum_k p_k (\Psi_n^k - \Psi_{n-1}^k) + c(\phi_{n-1} - \Phi_n \Psi_n + \Phi_{n-1} \Psi_{n-1}) \\ &\quad - \sum_k p_k \left[ (1 - \Phi_{n-2})^{k-1} - (1 - \Phi_{n-1})^{k-1} \right]\end{aligned}\quad (3.14)$$

となる.  $i_0 = p_0 = \phi_0$  より,

$$i_n = 2 - 2 \sum_k p_k (1 - \Phi_{n-1})^k - c\Phi_{n-1}^2. \quad (3.15)$$

$r_n$  に関しては除去される根の割合の計算をもとに導出される. そのままでは除去される頂点に重複が生じるため, 適宜場合分けを行う必要がある. 最終的に  $n$  ステップ目に除去される頂点の割合  $\Delta r_n$  の表式は,

$$\Delta r_n = 2 \sum_k p_k \left[ (1 - \Phi_{n-2})^k - (1 - \Phi_{n-1})^k \right] - 2c\phi_{n-1}\Phi_{n-1} - c\phi_{n-1}^2. \quad (3.16)$$

$r_0 = 0$  より,

$$r_n = 2 - 2 \sum_k p_k (1 - \Phi_{n-1})^k - c\Phi_{n-1}^2. \quad (3.17)$$

ただし,  $\sum_{m=0}^n \phi_m \Phi_m = (\Phi_n + \sum_{m=0}^n \phi_m^2)/2$  を用いた.

以上から,  $n$  ステップ終了時に除去されず, かつ孤立していない頂点の割合  $c_n$  は,

$$\begin{aligned}c_n &= 1 - i_n - r_n \\ &= \sum_k p_k \left[ (1 - \Phi_{n-1})^k - \Psi_n^k \right] + c\Phi_{n-1}^2 - c\Phi_{n-1} + c\Phi_n \Psi_n.\end{aligned}\quad (3.18)$$

ゆえに, 熱力学極限における LR コアの割合は  $r_c(c) = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n$  で定義され,

$$r_c(c) = \sum_k p_k \left[ (1 - Y)^k - (1 - X)^k \right] - c(X - Y)Y \quad (3.19)$$

と表されることがわかる. また, LR アルゴリズムによって被覆される頂点の割合は

$$\begin{aligned}x_c^{\text{LR}}(c) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left( c_n + \frac{1}{2} r_n \right) \\ &= 1 - \frac{c}{2} (X^2 + 2XY - 2Y^2) + \sum_k p_k \{ (1 - Y)^k - 2(1 - X)^k \}\end{aligned}\quad (3.20)$$

となる. □

$p_1 > 0$ , つまり LR アルゴリズムが動作する状況であれば, LR コアの割合は式 (3.19) によって記述される. 方程式の解が  $X = Y$  となる時,  $r_c(c) = 0$  であり, このときグラフは高い確率でほぼ完全に除去される. 一方, そのような解が不安定な場合, LR コアの大きさは  $\Theta(N)$  となり, LR アルゴリズムの典型近似性能は悪化する. LR アルゴリズムの典型近似性能の平均次数に関する閾値  $c^{\text{LR}}$  は,  $X = Y$  なる解の線形安定性が失われる平均次数と一致し, 条件  $|g'(1 - X(c^{\text{LR}}))| = 1$  から求められる.

### 3.3.2 確率伝搬法と線形計画緩和；LP-IP 模型

最小頂点被覆問題に対する確率伝搬法と線形計画緩和の典型性能は LP-IP 模型 [57] に対して RS キャビティ法を用いることで解析する。

最小頂点被覆問題における LP-IP 模型は以下のハミルトニアンで定義される。

$$\mathcal{H}_r(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N x_i + \mu^{r-1} \sum_i \delta\left(x_i, \frac{1}{2}\right). \quad (3.21)$$

分配関数は上記のハミルトニアンと頂点被覆問題の制約からなる。

$$\Xi = \sum_{\mathbf{x}} \exp(-\mu \mathcal{H}_r(\mathbf{x})) \prod_{(i,j) \in E} H(x_i + x_j - 1). \quad (3.22)$$

ハミルトニアンの第2項は半整数に対する罰金項を表しており、 $r \in \mathbb{R}$  は罰金項を制御するパラメタである。パラメタ  $r$  の値に応じて、以下で述べるように3種類の零温度極限が得られる。まず、 $r > 1$  として  $\mu \rightarrow \infty$  の極限をとると、半整数に対して無限大の重みが生じるため、基底状態は半整数を含まないことがわかる。この極限はバイナリ変数の模型、つまりもとの最小頂点被覆問題の最適解に対応する極限であるため、IP 極限と呼ばれている。次に、 $0 < r < 1$  として  $\mu \rightarrow \infty$  の極限をとる場合を考える。この場合、基底状態は問題の目的関数に相当する第1項を最小にし、かつ半整数の個数が最小であるような配列となる。これは線形計画緩和において半整数の個数が最小であるような端点解が基底状態で現れることを意味する。したがって、この極限は LP 極限と呼ばれる。最後に  $r < 0$  として  $\mu \rightarrow \infty$  の極限をとる場合が考えられる。このとき第2項の重みは  $\mu \rightarrow \infty$  で無視できるため、基底状態は半整数の個数に無関係に線形緩和の近似値を取るすべての配列が該当する。ただし、簡単な例からわかるようにこの極限の基底状態は線形緩和問題の端点解とは限らず、半整数を含む自明な縮退をもつ。LP-IP 模型における第2項の意義はこのような自明な縮退を除き、線形緩和問題の端点解の性質を解析可能にすることにある。

はじめに、LP-IP 模型の BP 方程式を書き下す。本論文では LP-IP 模型のハイパーグラフへの拡張を考慮しないため、式 (3.3) のように一部のメッセージを縮約した形で表記する。ハイパーグラフ上の LP-IP 模型の BP 方程式と解析に関しては著者の論文 [106] を参照されたい。また、BP 方程式の表記を簡略化するため、 $\sigma_i = 1 - x_i$  によってバイナリ変数  $\sigma$  を導入する。このとき分配関数は

$$\Xi = \sum_{\sigma} \exp\left(\mu \sum_i \sigma_i - \mu^r \sum_i \delta\left(\sigma_i, \frac{1}{2}\right)\right) \prod_{(i,j) \in E} H(1 - \sigma_i - \sigma_j) \quad (3.23)$$

となる。

1 体スピン確率は

$$P_i(\sigma) \simeq \frac{1}{Z_i} \exp(\mu\sigma - \mu^r \delta_{\sigma, 1/2}) \prod_{j \in \partial i} P_{j \rightarrow i}(\sigma_j) \quad (3.24)$$



と表される． $P_{i \rightarrow j}(\sigma)$  はキャビティグラフ  $G \setminus j$  において  $\sigma_i = \sigma$  となる確率で，これは以下の確率伝搬方程式を満たす．

$$P_{i \rightarrow j}(\sigma_i) \simeq \frac{1}{Z_{i \rightarrow j}} \exp(\mu \sigma_i - \mu^r \delta_{\sigma_i, 1/2}) \prod_{k \in \partial i \setminus j} \sum_{\sigma_k} P_{k \rightarrow i}(\sigma_k) H(1 - \sigma_i - \sigma_k). \quad (3.25)$$

$\mu \rightarrow \infty$  の極限をとるため，キャビティ場  $\nu_{i \rightarrow j}$  と  $\xi_{i \rightarrow j}$  を

$$P_{i \rightarrow j}(1) \equiv \frac{e^{\mu \xi_{i \rightarrow j}}}{1 + e^{\mu \xi_{i \rightarrow j}} + e^{\mu \nu_{i \rightarrow j}}}, \quad P_{i \rightarrow j}\left(\frac{1}{2}\right) \equiv \frac{e^{\mu \nu_{i \rightarrow j}}}{1 + e^{\mu \xi_{i \rightarrow j}} + e^{\mu \nu_{i \rightarrow j}}} \quad (3.26)$$

によって導入する．最終的に BP 方程式は以下のように表される．

$$\begin{aligned} \xi_{i \rightarrow j} &= 1 - \frac{1}{\mu} \sum_{k \in \partial i \setminus j} \ln [1 + e^{\mu \xi_{k \rightarrow i}} + e^{\mu \nu_{k \rightarrow i}}], \\ \nu_{i \rightarrow j} &= \frac{1}{2} - \mu^{r-1} + \frac{1}{\mu} \sum_{k \in \partial i \setminus j} \ln \left[ \frac{1 + e^{\mu \nu_{k \rightarrow i}}}{1 + e^{\mu \xi_{k \rightarrow i}} + e^{\mu \nu_{k \rightarrow i}}} \right]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

いま，ランダムグラフの次数分布を  $p_k$  と定めているので，2種類のキャビティ場の同時頻度分布  $P(\xi, \nu)$  はレプリカ対称性を仮定すると，以下の RS キャビティ方程式を満たす．

$$\begin{aligned} P(\xi, \nu) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k p_k}{c} \int \prod_{i=1}^{k-1} dP(\xi^{(i)}, \nu^{(i)}) \\ &\quad \times \delta \left( \xi - 1 + \frac{1}{\mu} \sum_i \ln [1 + e^{\mu \xi^{(i)}} + e^{\mu \nu^{(i)}}] \right) \\ &\quad \times \delta \left( \nu - \frac{1}{2} + \mu^{r-1} - \frac{1}{\mu} \sum_i \ln \left[ \frac{1 + e^{\mu \nu^{(i)}}}{1 + e^{\mu \xi^{(i)}} + e^{\mu \nu^{(i)}}} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

この RS キャビティ方程式を IP 極限と LP 極限の場合に分けて解析する．

まず， $r > 1$  として  $\mu \rightarrow \infty$  をとる IP 極限の場合を考える．この極限ではキャビティ場  $\nu$  が負の無限大に発散する．これは基底状態が半整数を含まないことを意味する． $X$  をこの極限で  $\xi > 0$  となる確率とすれば，式 (3.28) より， $X$  に関する自己無撞着方程式

$$X = \sum_k \frac{k p_k}{c} (1 - X)^{k-1} = g(1 - X) \quad (3.29)$$

を得る．関数  $g(x)$  は定理 3.2 で定義されたものと同じである．この解を用いると RS 仮定の下での平均被覆率は

$$x_c^{\text{IP}}(c) = 1 - \frac{1}{2} \sum_k p_k \{2(1 - X)^k + kX(1 - X)^{k-1}\} \quad (3.30)$$

と表される．この値は確率伝搬法によって得られる近似値と等しい．また， $p_k$  を平均  $c$  のポアソン分布とすると，第 2.5.4 節で述べた最小頂点被覆問題の RS 解の結果 (2.65), (2.68) が得られる．レプリカ対称性の破れは式 (3.29) の線形安定性を条件とすれば，RS/RSB 転移点となる平均次数  $c^{\text{IP}}$  に対して  $|g'(1 - X(c^{\text{IP}}))| = 1$  となる．

次に,  $0 < r < 1$  として  $\mu \rightarrow \infty$  をとる LP 極限の場合を考える. ポピュレーションダイナミクスを実行するとわかるように, RS キャビティ方程式 (3.28) の解はある三角格子の周りに台をもつ分布となる. そこで, その形状に応じた離散局所場仮定を設け, 特に  $(\xi, \nu) = (1, 1/2)$ ,  $(1/2, 1/2)$  における重みをそれぞれ  $r_1, r_2$  とおく. さらに,  $\xi \leq 0$  かつ  $\nu = 1/2$  を満たす重みの合計を  $r_3$  とおき,  $X = r_1 + r_2 + r_3, Y = r_1 (\leq X)$  と定義すれば,  $X, Y$  に関する自己無撞着方程式

$$X = \sum_k \frac{kp_k}{c} (1 - Y)^{k-1}, \quad Y = \sum_k \frac{kp_k}{c} (1 - X)^{k-1} \quad (3.31)$$

が得られる. 罰金項を考慮すると, 1 体スピン確率が以下のように得られる.

$$\begin{aligned} \Pr(\sigma_i = 1) &= \sum_k p_k \{(1 - X)^k + k(X - Y)(1 - X)^{k-1}\}, \\ \Pr\left(\sigma_i = \frac{1}{2}\right) &= \sum_k p_k \{(1 - Y)^k - (1 - X)^k - k(X - Y)(1 - X)^{k-1}\}, \\ \Pr\left(\sigma_i = 1 \text{ w.p. } \frac{1}{2} \text{ and } 0 \text{ w.p. } \frac{1}{2}\right) &= \sum_k kp_k Y (1 - X)^{k-1}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

ここから, 線形計画緩和による近似値の期待値は

$$x_c^{\text{LP}}(c) = 1 - \frac{1}{2} \sum_k p_k \{(1 - Y)^k + (1 - X)^k + kX(1 - X)^{k-1}\} \quad (3.33)$$

であり, さらに半整数の割合が

$$p_h(c) = \sum_k p_k \{(1 - Y)^k - (1 - X)^k - k(X - Y)(1 - X)^{k-1}\} \quad (3.34)$$

と表されることがわかる.

最小頂点被覆問題の最適解とその線形緩和解の差異は半整数の有無にある. そのため,  $p_h(c) = 0$  であれば  $x_c^{\text{LP}}(c) = x_c^{\text{IP}}(c)$  となり, 線形緩和の典型近似性能は良いことがわかる.  $p_h(c) = 0$  は, 式 (3.31) において,  $X = Y$  なる解が安定であれば実現する.  $X = Y$  なる解が不安定な場合は  $p_h(c) > 0$  となり, 結果として  $x_c^{\text{LP}}(c) < x_c^{\text{IP}}(c)$  となる. 特筆すべきこととして, 一般に  $x_c^{\text{LP}}(c) \neq x_c^{\text{IP}}(c)$  であるが, 線形緩和における式 (3.31) と, LR アルゴリズムにおける  $X, Y$  の満たす方程式は一致する. つまり,  $p_1 > 0$  かつ,  $X = Y$  なる解が安定ならば,  $x_c^{\text{IP}}(c) = x_c^{\text{LP}}(c) = x_c^{\text{LR}}(c)$  が成立する. これは 3 種類の近似アルゴリズムの典型近似性能が同等に良いことを表す. 線形緩和の典型近似精度に関する転移点  $c^{\text{LP}}$  に関する条件も線形安定性から  $|g'(1 - X(c^{\text{LP}}))| = 1$  となる. したがって,  $p_1 > 0$  ならば,  $c^{\text{IP}} = c^{\text{LP}} = c^{\text{LR}}$  となり, Erdős-Rényi ランダムグラフでの結果と同様に 3 種類の近似アルゴリズムの典型近似性能に関する閾値が一致する. また, このとき常に  $r_c(c) = p_h(c)$  となり, LR コアと半整数の割合は等しい. この事実は多くの場合 LR コアが近似手法に共通する近似的困難さを表していることを示唆する.

LP 極限では,  $(X, Y) = (1, 0)$  が常に線形安定な解になっている. このとき, 基底状態ではすべての変数が  $1/2$  となっており, 近似値の期待値は  $x_c^{\text{LP}}(c) = 1/2$  と計算される.  $1/2$  は

最小頂点被覆問題に対する線形計画緩和による近似値の上限である。通常、 $X = Y$  なる解は基底状態を表すため、その解から得られる近似値は  $1/2$  以下である。しかし、 $X = Y$  なる解で計算される  $x_c^{\text{LP}}(c)$  が  $1/2$  を上回る状況では、基底状態を記述する解は  $(X, Y) = (1, 0)$  となる。 $X = Y$  のとき、 $x_c^{\text{LP}}(c) = x_c^{\text{IP}}(c)$  であるため、その条件は  $x_c^{\text{IP}}(c^{\text{IP}}) > 1/2$  かつ、 $|g'(1 - X(c^{\text{IP}}))| \leq 1$  と表される。

### 3.3.3 閾値の大小関係に関するシナリオ

以上の解析結果から、近似アルゴリズムの典型近似性能に関する閾値  $c^{\text{IP}}, c^{\text{LP}}, c^{\text{LR}}$  の大小関係を考察する。定理 3.1 の結果から、任意のランダムグラフにおいて線形緩和は LR アルゴリズムよりも典型近似精度が良いことがわかる。つまり、閾値として  $c^{\text{LR}} \leq c^{\text{LP}}$  が成り立つ。等号は  $p_1 > 0$  のとき成立する。一方、線形緩和による近似値の上限が  $1/2$  であることから、不等式  $c^{\text{LP}} \leq c^{\text{IP}}$  が成立する。 $x_c^{\text{IP}}(c^{\text{IP}}) > 1/2$  のとき不等号が厳密になる。

これらの大小関係から、閾値の間に成立しうる関係式として以下の 4 通りをあげることができる；(i)  $c^{\text{LR}} = c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}}$ , (ii)  $c^{\text{LR}} < c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}}$ , (iii)  $c^{\text{LR}} < c^{\text{LP}} < c^{\text{IP}}$ , (iv)  $c^{\text{LR}} = c^{\text{LP}} < c^{\text{IP}}$ 。しかし、このうち (iv) は次の理由により成立しない。仮に (iv) が成立すると仮定すると、 $p_1 > 0$  と  $x_c^{\text{LP}}(c^{\text{LP}}) = 1/2$  が同時に成立する。平均次数について  $c^{\text{LP}} < c < c^{\text{IP}}$  という状況では、方程式 (3.31) には  $(X, Y) = (1, 0), (x, x)$  ( $0 < x < 1$ ) という 2 組の線形安定な解が存在する。前者の解を採用すれば、式 (3.19) からわかるように LR アルゴリズムの生成する LR コアの割合は 1 となり、これは  $p_1 > 0$  のとき LR アルゴリズムが必ず  $\Theta(N)$  程度の頂点を除去することと矛盾する。一方で後者の解を採用すると、LR アルゴリズムの典型性能は良いことがわかるが、 $c > c^{\text{LP}}$  であるにも関わらず  $x_c^{\text{IP}}(c) > 1/2$  となり、線形緩和の近似値の上限に矛盾している。

以上の議論から、最小頂点被覆問題における近似アルゴリズムの典型性能に関する閾値の大小関係がランダムグラフに応じて、(i)  $c^{\text{LR}} = c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}}$ , (ii)  $c^{\text{LR}} < c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}}$ , (iii)  $c^{\text{LR}} < c^{\text{LP}} < c^{\text{IP}}$  のいずれかとなることが明らかとなった。(i) のケースは既に Erdős-Rényi ランダムグラフで報告されており、 $p_1 > 0$  であるランダムグラフでは常に成立するものの、それ以外のケースに相当するランダムグラフが存在するかは非自明である。次節では (ii) や (iii) の大小関係となるランダムグラフを例示する。

## 3.4 大小関係の実証

本節ではいくつかの具体例での解析を下に、前節で示した (ii) や (iii) の大小関係が存在することを示す。これは最悪近似精度の意味だけでなく、典型近似精度の意味でも近似アルゴリズム間に性能差が現れることの例示になっている。

### 3.4.1 レギュラーランダムグラフとその派生

LR アルゴリズムが動作しない最も単純なグラフは次数  $K (\geq 2)$  のレギュラーグラフである。レギュラーランダムグラフ上の最小頂点被覆問題の統計力学的解析から、レプリカ対称解が安定であるのは  $K = 1, 2$  の場合に限られることが知られている [107]。したがって、 $K = 2$  のレギュラーランダムグラフは LR アルゴリズムの典型性能だけが悪く、それ以外の典型性能は良いという例になっている。平均次数の閾値の意味では、 $c^{\text{LR}} = 1 < c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}} = 2$  となっているため、レギュラーランダムグラフは前節 (ii) に分類される。

レギュラーランダムグラフは次数分布に分散がないという点で特殊なランダムグラフである。次数分布の分散が非零となる単純な例として、次数分布が二峰的 (bimodal) なランダムグラフが考えられる。ここでは、自然数  $K$  と  $0 \leq p < 1$  なる実数  $p$  に対して次数分布を  $p_k = (1-p)\delta(k-K) + p\delta(k-K-1)$  と定める。 $p = 0$  では  $K$ -レギュラーランダムグラフとなるため、このランダムグラフは平均次数を実数へ拡張する意味でレギュラーランダムグラフの自然な拡張になっている。この場合においても、 $K = 1$  では任意の  $p$  でレプリカ対称解は安定であり、LR アルゴリズムは良い典型性能を示す。一方で、 $K = 2$  では、方程式 (3.29) は、

$$X = \frac{2(1-p)}{2+p}(1-X) + \frac{3p}{2+p}(1-X)^2 \quad (3.35)$$

となる。 $p \ll 1$  では、この方程式の解は、

$$X = \frac{1}{2} - \frac{3}{16}p + O(p^2) \quad (3.36)$$

と展開され、その線形安定性は、

$$|g'(1-X)| = 1 + \frac{9}{16}p^2 + O(p^3) > 1 \quad (3.37)$$

と求められる。つまり、 $K = 2, p > 0$  で系のレプリカ対称性は破れている。

したがって、ここで考えた二峰的な次数分布をもつランダムグラフにおいても  $c^{\text{LR}} = 2 - \epsilon < c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}} = 2$  ( $\forall \epsilon > 0$ ) が成立し、3.3.3 節の大小関係 (ii) となることがわかる。

レギュラーランダムグラフやその自然な拡張である二峰的な次数分布をもつランダムグラフでは、典型性能の閾値の大小関係が前節 (ii) のケースとなることが確認できた。一方で、LR アルゴリズムのみ典型性能が悪化する状況は  $K = 2$  のレギュラーランダムグラフに限定されており、典型性能の悪化がグラフの正則性（次数分布が一定であること）から生じているかは不明である。

### 3.4.2 Barabasi–Albert 型のスケールフリーランダムグラフ

グラフが非正則な場合の典型性能の閾値の大小関係を調べるため、ここでは次の次数分布で与えられるコンフィグモデルを考える。

$$p_k = \begin{cases} \frac{2(1-p)}{m+2} & (k=m), \\ \frac{2m(m+1)}{k(k+1)(k+2)}(1-p) + \frac{2(m+1)(m+2)}{k(k+1)(k+2)}p & (k>m). \end{cases} \quad (3.38)$$

ただし、 $0 \leq p < 1$  であり、自然数  $m$  は最小次数を表す。この次数分布はスケールフリーネットワークのモデルとして有名な Barabasi–Albert (BA) モデル [81] の次数分布 [108] において、最小次数が  $m$  と  $m-1$  であるものを混合している。2つの分布を混合する理由は離散的な平均次数を連続化するためである。上記の次数分布では平均次数が  $c = 2(m+p)$  となり実数値をとる。

BA モデルは少数頂点の完全グラフに頂点を加えていくことで生成される動的なネットワークモデルである。上記の次数分布を実現するような動的な生成法を定義することは可能であるが、RS 相と見込まれるパラメタ領域であっても確率伝搬法による結果と RS キャビティ法の見積もりが一致しないという現象がおこる。この原因は定かでないが、動的な生成法に起因するグラフ内相関が原因であると考えられる。実際、静的な生成法であるコンフィグモデルでは、以下に示すように RS キャビティ法の見積もりは確率伝搬法の数値結果と一致している。

それでは、BA 型のスケールフリーランダムグラフ上の最小頂点被覆問題に対する近似アルゴリズムの典型性能について考察しよう。最小次数  $m$  が 2 以上であれば LR アルゴリズムは動作しないため、 $c^{\text{LR}} = 4 - \epsilon$  ( $\forall \epsilon > 0$ ) となる。確率伝搬法と線形緩和の典型性能については前節の解析をもとに見積もることが可能である。図 3.1 は平均被覆率  $x_c$  の平均次数依存性  $c$  を示したものである。線形安定性解析より、 $c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}} \simeq 5.239$  となることがわかる。平均次数がこれらの閾値よりも小さい場合、線形緩和と確率伝搬法は高い確率で良い近似性能を発揮する。実線と点線はそれぞれ RS キャビティ法で得られた IP 極限と LP 極限の理論的な見積もりであるが、この相ではこれら 2 つは一致する。平均次数が閾値を超えると、2本の線は離れ、 $x_c^{\text{LP}}(c)$  は上限である  $1/2$  へ漸近する。図 3.1 には線形緩和の数値結果も示している。線形緩和の実行にはフリーの線形計画問題ソルバーである lp\_solve5.5 を用いた [109]。数値結果は、線形緩和の典型性能が LP 極限の見積もりとよく一致することを示唆する。これらの結果は、BA 型の次数分布をもつスケールフリーネットワークが、3種類の近似アルゴリズムの中で LR アルゴリズムのみの典型性能が悪化するような相をもつランダムグラフの例となっていることを示している。また、図 3.2 には、線形緩和による近似解において半整数数となっている変数の割合  $p_h$  の平均次数  $c$  依存性を示した。こちらでは系の有限サイズ効果が大きく見えているが、 $N \rightarrow \infty$  に対応する LP 極限の解析解へ漸近していく様子がみてとれる。このことは、線形緩和はグラフ全体が LR コアであるようなグラフにおいても部分的な整数解を発見できることを示唆している。

このように、最低次数を設定したスケールフリーネットワークにおいても、典型近似性能の閾値の大小関係が 3.3.3 節の (ii) となる場合があることを確認した。この事実は、典型性能の閾値の大小関係 (ii) が前小節で述べたグラフの正則性によらないことを示している。

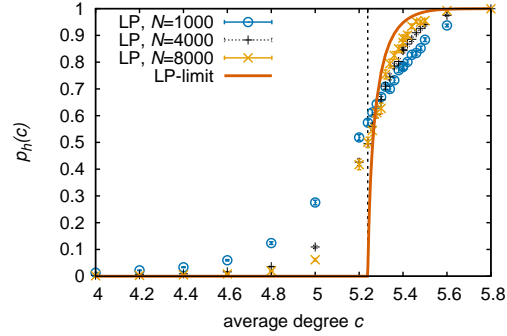
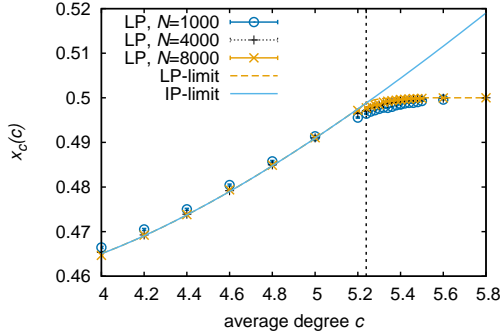


図 3.1: BA 型スケールフリーネットワーク上の最小頂点被覆問題における平均被覆率  $x_c(c)$  の平均次数  $c$  依存性. 垂直線は  $c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}} \simeq 5.239$  を表す.

図 3.2: BA 型スケールフリーネットワーク上の最小頂点被覆問題に対する線形緩和解  $p_h(c)$  の平均次数  $c$  依存性. 垂直線は  $c^{\text{LP}} = c^{\text{IP}} \simeq 5.239$  を表す.

### 3.4.3 実数値のべきをもつスケールフリーネットワーク

ここでは、前小節で解析した次数分布をより一般化し、分布の裾のべき減衰における指数が連続的に変化可能な次数分布をもつランダムグラフを考える。

$$p_k = \begin{cases} C_0 m^{-\gamma} & (k = m), \\ (1-p)C_0 k^{-\gamma} + pC_1 k^{-\gamma} & (k > m) \end{cases} \quad (3.39)$$

なる次数分布を考える。引き続き  $0 \leq p < 1$  であり、自然数  $m$  は最小次数を表している。 $\gamma > 2$  は次数分布の裾のべき減衰における指数を表している。 $C_a^{-1}$  ( $a = 0, 1$ ) は規格化定数であり、一般化ゼータ関数  $\zeta(\gamma, m+a) \equiv \sum_{k=m+a}^{\infty} k^{-\gamma}$  に等しい。この次数分布の平均次数は、

$$c(m, p, \gamma) = \frac{\zeta(\gamma-1, m)}{\zeta(\gamma, m)}(1-p) + \frac{\zeta(\gamma-1, m+1)}{\zeta(\gamma, m+1)}p \quad (3.40)$$

と与えられる。

指数  $\gamma$  を固定した場合、RS/RSB 転移点はパラメタの組  $(m^{\text{IP}}(\gamma), p^{\text{IP}}(\gamma))$  で与えられる。ゆえに、RS/RSB 転移をおこす平均次数を  $c^{\text{IP}}(\gamma) = c(m^{\text{IP}}(\gamma), p^{\text{IP}}(\gamma), \gamma)$  によって定義する。図 3.3 に転移点  $c^{\text{IP}}(\gamma)$  とそのときの最低次数  $m^{\text{IP}}(\gamma)$  を示す。 $\gamma \rightarrow 2$  の極限で、任意の  $m$  で平均次数が発散し、 $c^{\text{IP}}(\gamma)$  と  $m^{\text{IP}}(\gamma)$  も正の無限大へ発散する。一方で、 $\gamma \rightarrow \infty$  の極限では転移点  $c^{\text{IP}}(\gamma)$  は 2 となる。これはランダムグラフが 2-レギュラーランダムグラフへ収束するためである。図 3.4 では転移点  $c^{\text{IP}}(\gamma)$  における平均被覆率  $x_c^{\text{IP}}$  の  $\gamma$  依存性を示した。図か

らわかるように、 $x_c^{\text{IP}}(c^{\text{IP}}) > 1/2$  の条件を満たす指数  $\gamma$  の存在が確認できる。線形緩和による近似値の上限の議論から、線形緩和は  $x_c^{\text{LP}}(c^{\text{LP}}) = 1/2$  となる  $c^{\text{LP}} < c^{\text{IP}}$  で典型性能が悪化する。この事実は、特定の  $\gamma$  において確率伝搬法の典型性能が良いにも関わらず LR アルゴリズムと線形緩和の典型性能が悪化するという 3.3.3 節のケース (iii) の存在を示唆している。一方、それ以外の  $\gamma$  においても転移点における最低次数が 2 であるため、前小節でみられた 3.3.3 節のケース (ii) と同じ状況になっている。

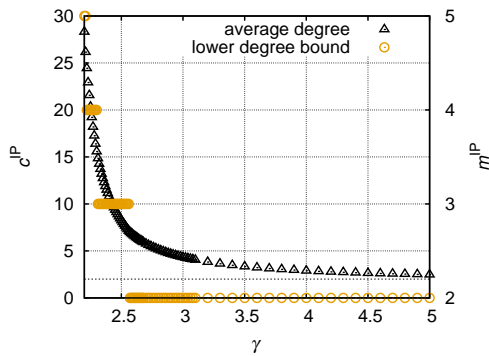


図 3.3: RS/RSB 転移点  $c^{\text{IP}}$  (三角) とそのときの最低次数  $m^{\text{IP}}$  (丸) の指数  $\gamma$  依存性。破線は  $\gamma \rightarrow \infty$  の極限值である  $c^{\text{IP}} = 2$  を示す。

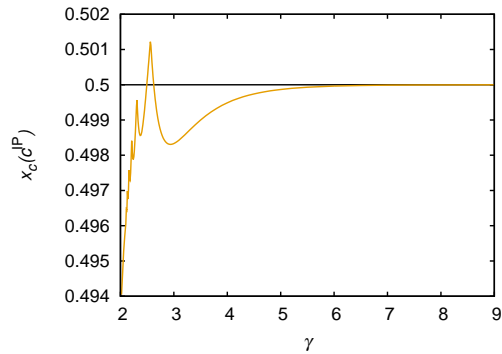


図 3.4: RS/RSB 転移点における平均被覆率  $x_c^{\text{IP}}(c^{\text{IP}})$  の指数  $\gamma$  依存性。実線は線形緩和による近似値の上限  $x_c = 1/2$  を示す。

ここでは大小関係 (iii) の例として  $\gamma = 2.56$  における近似アルゴリズムの典型性能を調べる。 $\gamma = 2.56$  における  $x_c(c)$  の理論的見積りの様子を図 3.5 に示した。 $c = 7.1$  付近で  $x_c^{\text{IP}}$  が滑らかでないのは最低次数が増加したためである。IP 極限の RS 解の線形安定性は  $c^{\text{IP}} \simeq 7.133$  で破れるが、 $x_c^{\text{LP}}$  と  $x_c^{\text{IP}}$  は  $c^{\text{LP}} \simeq 7.07$  にて一致しなくなる。 $c^{\text{LP}} < c < c^{\text{IP}}$  の領域では、方程式 (3.31) には  $(X, Y) = (1, 0)$  と  $(x, x)$  ( $0 < x < 1$ ) という 2 種類の線形安定な解が存在する。3.3.2 節で述べたように前者の解は線形緩和の近似値の上限  $1/2$  を導く。したがって、 $x_c^{\text{LP}}(c)$  は  $c > c^{\text{LP}}$  において  $1/2$  となり、この状況は 3.3.3 節の大小関係 (iii) となっている。以上から、3.3.3 節の考察で示された 3 種類の典型性能の閾値の大小関係がすべて存在することが明らかとなった。

### 3.5 本章のまとめ

本章では任意の次数分布で定義されるランダムグラフ上の最小頂点被覆問題に対する 3 種類の近似アルゴリズム、確率伝搬法、leaf removal アルゴリズム、線形計画緩和、の典型近似性能の解析を行った。Leaf removal アルゴリズムに関しては確率的な解析を、確率伝搬法と線形計画法に関しては LP-IP 模型に対するレプリカ対称キャビティ法による解析を行い、平均次数の変化にしたがってそれぞれの典型性能が悪化する相転移現象がおこることを示した。さ

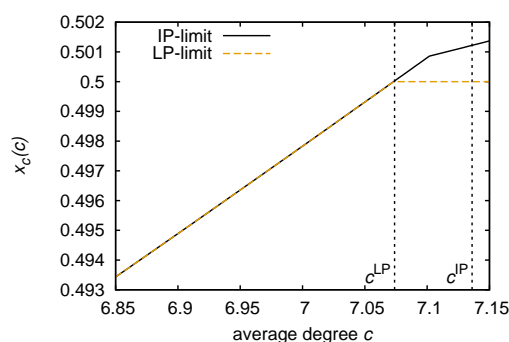


図 3.5:  $\gamma = 2.56$  における平均被覆率  $x_c(c)$  の平均次数  $c$  依存性. 実線と破線はそれぞれ IP, LP 両極限における見積もりを示す. 垂直線は左から  $c^{\text{LP}}$ ,  $c^{\text{IP}}$  を表す.

らに, 線形計画法のもつ強双対性から任意のグラフにおける leaf removal アルゴリズムと線形計画緩和の近似性能に差異が存在することを証明し, それを利用して 3 種類の転移点の大小関係に 3 つのケースが存在しうることを解析的に示した. また, レギュラーランダムグラフとその派生, 最低次数と実数値平均次数をもつスケールフリーランダムグラフを設定し, それぞれのランダムグラフにおける転移点を解析的, 数値的に計算することで, これらのケースが実際に存在することを確認した.

3 種類の転移点の大小関係についてまとめると次のようになる. まず, ランダムグラフに高確率で葉が存在する  $p_1 > 0$  の場合, 3 種類の近似アルゴリズムの典型性能の転移点は一致する. これは Erdős-Rényi ランダムにおける先行研究の結果に合致する結果である. 次数分布において  $p_1 = 0$  となる場合, leaf removal アルゴリズムはすべての頂点を被覆するため典型近似精度が悪化する. この場合においても最小頂点被覆問題にレプリカ対称相が存在し, 線形計画緩和と確率伝搬法は典型性能が良い平均次数の領域が存在する. したがって,  $p_1 = 0$  となるランダムグラフでは leaf removal アルゴリズムのみの典型性能が悪化する相が生じる. これは 2-レギュラーランダムグラフでみられる現象であるが, 次数分布をべき的にすると相が平均次数に関して有限の幅をもつようになる. さらに, レプリカ対称相において平均被覆率が  $1/2$  を超えると線形計画緩和と確率伝搬法の典型性能差が生じる. この状況では平均次数の小さい順に, leaf removal アルゴリズム, 線形計画緩和, 確率伝搬法の典型性能が悪化する.

確率伝搬法の解析では動的なレプリカ対称性の破れを考慮していない点に注意が必要である. 1 段階レプリカ対称性の破れを仮定した場合, 系に指数関数個の準安定状態が生じる動的 1 段階レプリカ対称 (d1RSB) 相が出現する場合がある. 最小頂点被覆問題では d1RSB 相の存在は報告されていないものの, 3-SAT や 3-XORSAT 等の最適化問題では d1RSB 相の存在が知られている. それらの問題の解析から, 確率伝搬法の収束性は d1RSB 相内で失われ, 典型近似性能は悪化することが知られている [59]. 一方で, キャビティ法による解析としては 1RSB キャビティ法におけるレプリカ対称解以外の安定解の出現が d1RSB 相に対応している. ゆえに, 今回レプリカ対称性の破れの検証に用いた線形安定性では d1RSB 相の有無を



確認することができない。最小頂点被覆問題においても d1RSB 相の存在を検証するための 1RSB キャビティ方程式は提示されている [110] もの、これはキャビティ場分布関数についての方程式であり、一般の次数分布では解析的に解くことが不可能である。そのため本章では RS 仮定の範囲で確率伝搬法の典型性能を調べたが、仮に d1RSB 相が存在すれば上述した転移点の大小関係が変化する可能性がある。また、1RSB キャビティ法における確率伝搬法としてサーベイプロパゲーションが知られている [48]。この近似アルゴリズムは d1RSB 相内でも典型近似性能が良好であるため、今回の結果を 1RSB 仮定の範囲に拡張することは典型近似性能を解析可能な近似アルゴリズムを増やすという観点からも有意義であると思われる。

第4章から第6章(本文54~93ページ)については現在学術論文を準備中  
であるため非公表とする。

## 第 7 章

# 本論文のまとめと今後の展望

本論文では組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムに着目し，その典型性能を主に統計力学的手法を用いて解析した。

まず，1 章で歴史的経緯の概説と本論文の目的を述べ，続く 2 章で本論文における主要な解析方法であるキャビティ法の各種手法について整理した。

3 章では，任意の次数分布で定義されるランダムグラフ上の最小頂点被覆問題に対する 3 種類の近似アルゴリズムの典型性能比較を行った。近似アルゴリズムの最悪性能評価が最適化問題とアルゴリズムの組で定義されるように，その典型性能評価は最適化問題とアルゴリズム，そしてランダム化の方法によって定義される。そこで，本章では網羅的な典型性能評価を目指し，任意の次数分布で定義されるランダムグラフという一般的な状況を設定した。結果として，従来統計力学解析で用いられてきたような単純なランダムグラフでの結果とは定性的に異なる結果を示すランダムグラフの存在が明らかになったことで，系統的な典型性能評価の重要性が明確になったといえる。

4 章では，線形計画緩和における単体法が組合せ最適化問題の数理構造を反映することに着目し，単体法を介して組合せ最適化問題の物理的描像と数理的構造を関連付けることを目指した。得られた結果は両者の相関の存在を強く示唆しており，これにより汎用的な近似手法である線形計画緩和を利用することで両者の関係性をより深く検証可能であることが明らかになった。3-XORSAT 問題のような一部の問題で両者の関連は既に理論的に明らかにされている一方で，最小頂点被覆問題をはじめとする多くの問題は理論的な解析が困難である。それらの問題における物理的描像と数理的構造の検証には本章で示したような数値的アプローチが重要である。

続く 5 章では最大カバー問題における 3 種類の近似アルゴリズムの典型性能評価を行った。この問題は 2 部グラフとカバー個数を入力とする点で従来統計力学的に研究されてきた組合せ最適化問題よりも複雑である。情報科学では最大カバー問題は貪欲法や線形計画緩和等の近似アルゴリズムが理論的な最悪近似性能の限界を達成することで知られている。本章では結果として最悪性能が等しい近似アルゴリズムでもその典型性能は異なるということが示される。この事実は自然であるものの，最悪性能と典型性能の両者が近似アルゴリズムの性能評価基準として重要であることを改めて示唆している。

6章では、統計力学的アプローチの統計的推論問題への応用として、集団検査法におけるブーリアン圧縮センシングを取り上げた。確率伝搬法に基づく近似アルゴリズムを提案し、集団検査法の非線形性からキャビティ場の条件付分布に関して閉じるようにキャビティ法を拡張した。その結果、提案手法は既存手法よりも効率の良い推定を可能とし、その典型的な性能が解析的に予測可能であることを示した。さらに、RS キャビティ方程式の漸近解析を行うことで、パラメタに関する特殊な極限を実現し、従来のアルゴリズムとの典型性能を比較した。

以上のように、本論文中の各研究は、様々な組合せ最適化問題及び統計的推論問題において近似アルゴリズムの典型性能評価法を確立し、近似アルゴリズムの典型性能に関して多面的な数理の深化に寄与したといえる。

次に、各章の研究結果をもとに今後の展望を述べる。

#### 1. RSB 相内, RS 相内相転移を含めた近似アルゴリズムの典型性能評価

本論文では、キャビティ法としての確率伝搬法を組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムとみなし、その典型性能を解析する観点から RS 相内を中心に解析を行ってきた。3章や5章の結果をみる限り、典型性能の悪化する閾値の観点で、確率伝搬法は貪欲法や線形計画緩和以上の性能をもつことが伺える。決定論的な近似アルゴリズムで確率伝搬法の典型性能を超えるものは存在するのであろうか。一方、確率伝搬法の典型性能を超える確率的近似アルゴリズムとしては、1段階レプリカ対称性の破れを仮定した近似アルゴリズムであるサーベイプロパゲーションが知られている。本論文の趣旨としてその典型性能を解析するために RSB 相内の解析を行う意義は存在するものの、本論文ではそれを行っていない。3章で指摘したように、これは RSB 相内におけるキャビティ法の解析にポピュレーションダイナミクスを要するため、解析結果の拡張性に乏しいことが主な原因となっている。しかし、サーベイプロパゲーションが近似アルゴリズムの典型性能評価の対象として興味深いものであることは確かである。絶対零度極限における 1RSB キャビティ方程式に対する汎用的な理論的解法を整備し、RSB 相内におけるサーベイプロパゲーション等の近似アルゴリズムの典型性能を評価することは今後の課題である。

これとは反対に、通常の圧縮センシングにおける  $\ell_1$  ノルム最小化問題のような凸な統計的推論問題には、RS/RSB 相転移を示さず、確率伝搬法による推論の可否に対応する相が RS 仮定の範囲内で記述できる問題も存在する。このため、本論文の結果から示唆される、RS/RSB 相転移が確率伝搬法を含む近似アルゴリズムの典型性能の上限であるという考え方は正確でないことに注意すべきである。確率伝搬法の典型性能が RS 相内の相転移として記述される最適化問題において、他の近似アルゴリズムの典型性能悪化の閾値との関係や、統計力学的描像と最適解の性質の関係を調べることは、典型性能評価の統計力学的解析の新たな方向性として重要である。

#### 2. アルゴリズムを介した問題の数理構造とレプリカ対称性の関係性の解明

上述したように、組合せ最適化問題の数理構造と物理的描像の関連性はすべての問題で明らかにされているわけではない。特に、レプリカ対称性が突然無限段階に破れる

RS/fRSB (full-step RSB) 転移は物理的描像が複雑であるが故に、それを導く数理構造の解明は未解決な問題となっている。その解決には、4章で目指したような、アルゴリズムの挙動による問題の数理構造と物理的描像の関連性の数値的検証が重要になると考えられる。

### 3. ラグランジュ緩和問題に対する統計力学的解析

最適化問題の制約の一部をラグランジュ未定乗数を導入することで目的関数に組み込むラグランジュ緩和は汎用的な緩和法の一つである。5章の最大カバー問題や6章のまとめで指摘したノイズのある状況でのブーリアン圧縮センシングがこの形式をとるように、ラグランジュ緩和は最適化問題や統計的推論問題で広く現れる。未定乗数が $\lambda$ であるようなラグランジュ緩和した組合せ最適化問題のBP方程式は一般に次のように表される。

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \hat{f}_{a \rightarrow i}(\{h_{i \rightarrow a}\}), \quad (7.1)$$

$$h_{i \rightarrow a} = f_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}) + \lambda g_{i \rightarrow a}(\{\hat{h}_{a \rightarrow i}\}). \quad (7.2)$$

具体例として式(5.34), (5.35)を参照されたい。このBP方程式をRSキャビティ法によって解析するにあたっていくつかの困難な点が生じる。まず、最適な未定乗数の値が不明であり、さらに5章で明らかになったように最適な未定乗数には温度依存性が生じうる。また、未定乗数が実数であるため、零温度極限における局所場離散化仮定が成立しない可能性がある。このようにラグランジュ緩和問題に対するキャビティ法による解析方法を確立する必要がある。統計的推論問題では、最適な未定乗数の決定はハイパーパラメタ推定に相当するため、これらの問題点の解決は実用的にも重要である。

### 4. 統計力学的アプローチの数理基盤の整備

最後の課題として、より一般的に統計力学的なアプローチの数理基盤の整備を挙げる。ここで述べる方向性は、確率伝搬法の数理構造の解析と最適化の数理によるレプリカ対称性の特徴づけである。第一に、確率伝搬法は組合せ最適化問題に対する優れた汎用的近似アルゴリズムである。しかし、実際に確率伝搬法を実行すると安定な周期解が得られるなど、しばしば動的に異常な振る舞いを観測することができる。一方、理論的にも3章で示したように、半整数を有する線形計画緩和のRSキャビティ解析による閉じた方程式(3.31)の解は、もとの整数計画問題における方程式(3.29)を離散時間力学系とみなした場合の2周期解に相当している。このように、確率伝搬法の動的な性質と他のアルゴリズムの典型性能に関連性が伺えることは興味深い。確率伝搬法を大自由度力学系として捉え、その動的、静的な性質を解析することは、レプリカ対称性とその破れに対する数理的理解だけでなく、他のアルゴリズムとの関連等より広い分野への知見となることが期待される。第二の方向性は最適化の数理によるレプリカ対称性の特徴づけである。これは従来の最適化問題における物理的描像の解明とは逆方向の課題である。様々な先行研究から、最適化問題における物理的描像の存在は確たるものとなっている。一方で物理描像の解明が数学的、物理的な手段でのみ行われている点を鑑みると、別の切り口として情報科学的な最適化の数理を持ち出すことは筆者には自然に思わ

れる．具体的には（組合せ）最適化問題の凸性とベータ自由エネルギーの凸性の関連性の検証，さらに最適化問題の凸性の適切な拡張によるレプリカ対称性の特徴づけがテーマとなるであろう．

本論文で得られた近似アルゴリズムの統計力学的な典型性能評価に関する知見が，今後の組合せ最適化問題と近似アルゴリズムの数理解の深化，ひいては情報科学，数学，物理学のより一層の融合に貢献することを祈念しつつ本論文の結びとしたい．

## 付録 A

# RS キャビティ方程式の導出

ここではキャビティ方程式からレプリカ対称仮定を設定し、RS キャビティ方程式の一般形を得る手順を解説する。

簡単のため、最適化問題のファクターグラフ表現  $G_f = (V, F, E')$  において、各関数ノード  $a$  における相互作用が  $\{h_{j \rightarrow a}\}_{j \in \partial a \setminus i}$  の置換に依存せず、グラフ  $G$  以外のランダムネスを含まないとする。また、系のスピン自由度が 2 であるとする。これらの設定は他の場合に自然に拡張することができる。キャビティ方程式の一般形を

$$h_{i \rightarrow a} = f(\{\hat{h}_{b \rightarrow i}\}_{b \in \partial i \setminus a}), \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{h}_{a \rightarrow i} = \hat{f}(\{h_{j \rightarrow a}\}_{j \in \partial a \setminus i}) \quad (\text{A.2})$$

と表し、この方程式の固定点の存在を仮定する。

いま頂点数  $|V| = N \rightarrow \infty$  のランダムグラフの集合として、(i) 変数ノードの次数分布が  $p_k$ 、関数ノードの次数分布が  $q_k$ 、(ii) 次数相関がない、ものを考え  $\mathcal{G}$  とする。さらに、極限操作を考えるため、(iii)  $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{G}_N = \mathcal{G}$  となり、次数分布がそれぞれ  $p_N(k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} p_k$ 、 $q_N(k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} q_k$  かつ次数相関のないような頂点数  $N$  のグラフ集合  $\mathcal{G}_N$  の列  $\{\mathcal{G}_N\}$  を仮定する。この性質を満たす列として、次数分布が  $p_N(k) = p_k$ 、 $q_N(k) = q_k$  で定まる頂点数  $N$  のコンフィグモデルがあげられる。

ファクターグラフ  $G_f$  と辺  $(i, a) \in E'$  を決めると、確率伝搬法のメッセージは分布  $P(h_{i \rightarrow a} | G_f)$  に従う。キャビティ分布  $P(h)$  は次のように定義される。

$$\begin{aligned} P(h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} P_N(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) P(h | G) \\ &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{1}{|E'|} \sum_{(ia) \in E'} \int dh_{i \rightarrow a} \delta(h - h_{i \rightarrow a}) P(h_{i \rightarrow a} | G). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

同様に  $P(\hat{h})$  も、

$$\begin{aligned} \hat{P}(\hat{h}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \hat{P}_N(\hat{h}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \hat{P}(\hat{h} | G) \\ &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{1}{|E'|} \sum_{(ia) \in E'} \int d\hat{h}_{a \rightarrow i} \delta(\hat{h} - \hat{h}_{a \rightarrow i}) \hat{P}(\hat{h}_{a \rightarrow i} | G) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

と定義される。キャビティ法におけるレプリカ対称性は、各キャビティ場は  $P(h)$  または  $\hat{P}(\hat{h})$  に独立同分布で従うことを要請する。

$P(h_{ia} | G)$  はグラフ  $G$  上の分布であるため、キャビティ方程式 (A.1) を用いると  $\hat{P}(\hat{h}_{b \rightarrow i} | G)$  によって書き下すことができる。

$$P(h_{i \rightarrow a} | G) \simeq \int \prod_{b \in \partial i \setminus a} d\hat{h}_{b \rightarrow i} \hat{P}(\hat{h}_{b \rightarrow i} | G) \delta(h_{i \rightarrow a} - f(\{\hat{h}_{b \rightarrow i}\})) \quad (\text{A.5})$$

さらなる仮定として、有限の  $N (\gg 1)$  においても  $\hat{P}(\hat{h}_{i \rightarrow a} | G) = \hat{P}(\hat{h} | G)$  の成立を仮定する。この仮定は (i) スパースな (平均次数が  $O(1)$  の) グラフ集合についてはグラフの局所的木構造から\*1, (ii) デンスな (平均次数が  $O(N)$  の) グラフ集合については大数の法則から成立が期待される。このとき、

$$\begin{aligned} P(h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{1}{|E'|} \sum_{(ia) \in E'} \int dh_{i \rightarrow a} \delta(h - h_{i \rightarrow a}) \\ &\quad \times \int \prod_{b \in \partial i \setminus a} d\hat{h}_{b \rightarrow i} \hat{P}(\hat{h}_{b \rightarrow i} | G) \delta(h_{i \rightarrow a} - f(\{\hat{h}_{b \rightarrow i}\})) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{1}{|E'|} \sum_{(ia) \in E'} \int \prod_{b \in \partial i \setminus a} d\hat{h}_{b \rightarrow i} \hat{P}(\hat{h}_{b \rightarrow i} | G) \delta(h - f(\{\hat{h}_{b \rightarrow i}\})) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{1}{|E'|} \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \int \prod_{l=1}^{|\partial i|-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)} | G) \delta(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \sum_k \frac{kP(k | G)}{\sum_k kP(k | G)} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)} | G) \delta(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \sum_{G \in \mathcal{G}_N} P(G) \frac{kP(k | G)}{\sum_k kP(k | G)} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)} | G) \delta(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \tilde{p}_N(k) \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}_N(\hat{h}^{(l)}) \delta(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{kp_k}{c} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} \hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \delta(h - f(\{\hat{h}^{(l)}\})). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ここで、 $\tilde{p}_N(k)$  はグラフ集合  $\mathcal{G}_N$  における変数ノードの edge-perspective degree distribution, つまりランダムに選んだ辺に接続する関数ノードの次数分布である。グラフ集合列に関する仮定から  $N \rightarrow \infty$  で  $\tilde{p}_N(k) \rightarrow kp_k/c$  ( $c = \sum_k kp_k$ ) となる。

$\hat{P}(\hat{h})$  も同様に変形することができ、最終的に

$$\hat{P}(\hat{h}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{kq_k}{\alpha} \int \prod_{l=1}^{k-1} d\hat{h}^{(l)} P(\hat{h}^{(l)}) \delta(\hat{h} - \hat{f}(\{\hat{h}^{(l)}\})) \quad (\text{A.7})$$

\*1 木上の BP 方程式は厳密であり、またメッセージは高々木の半径程度の反復でただ 1 つの固定点に収束する [59]. そこでグラフ集合列  $\{\mathcal{G}_N\}$  として ( $G$  と同じ次数分布の) ランダムな木の集合を用意すれば、局所木構造からこれは良いグラフ集合列であり、木構造と収束性からここで述べた仮定の成立も示される。



100 付録 A RS キャビティ方程式の導出

が得られる。ただし、 $\alpha = \sum_k kq_k$ 。以上で得られた式 (A.6), (A.7) が RS キャビティ方程式である。

## 付録 B

# ベータ自由エネルギーの導出

まず、サイクルのないファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  上の最適化問題のベータ自由エネルギーの導出を行う。全変数の配列を  $\mathbf{x}$  とし、その実現確率が

$$P(\mathbf{x}) = Z^{-1} \prod_{i \in V} \phi_i(x_i) \prod_{a \in F} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \quad (\text{B.1})$$

で表されているとする。このとき BP 方程式は

$$\hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) = Z_{a \rightarrow i}^{-1} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} \psi_a(x_i, \mathbf{x}_{\partial a \setminus i}) \prod_{j \in \partial a \setminus i} P_{j \rightarrow a}(x_j), \quad (\text{B.2})$$

$$P_{i \rightarrow a}(x_i) = Z_{i \rightarrow a}^{-1} \phi_i(x_i) \prod_{b \in \partial i \setminus a} \hat{P}_{b \rightarrow i}(x_i) \quad (\text{B.3})$$

となる。また、1 体スピン分布と関数ノード  $a$  に接続する変数ノード上の変数  $\mathbf{x}_{\partial a}$  の分布は

$$P_i(x_i) = Z_i^{-1} \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i), \quad (\text{B.4})$$

$$P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = Z_a^{-1} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \prod_{i \in \partial a} P_{i \rightarrow a}(x_i) \quad (\text{B.5})$$

と表される。

系の内部エネルギーは、逆温度を  $\beta$  として、

$$U = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{x}} P(\mathbf{x}) \left\{ \sum_{i \in V} \ln \phi_i(x_i) + \sum_{a \in F} \ln \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \right\} \quad (\text{B.6})$$

となる。

エントロピーの計算に関して、はじめに以下の定理を示す。

**定理 B.1.** サイクルのないファクターグラフ  $G_f = (V, F, E')$  上の最適化問題において、 $\mathbf{x}$  の実現確率 (B.1) は  $P_i(x_i)$  及び、 $P(\mathbf{x}_{\partial a})$  を用ると、

$$P(\mathbf{x}) = \prod_{i \in V} P_i(x_i)^{1-d_i} \prod_{a \in F} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \quad (\text{B.7})$$

で表される。ここで  $d_i$  は変数ノード  $i$  の次数である。

証明. 関数ノードの個数を  $|F| = M$  として,  $M$  に関する帰納法で示す.

$M = 1$  の場合, 変数ノード  $i \in \partial a$  では  $d_i = 1$ , それ以外は  $d_i = 0$  となる. 変数ノードを  $\partial a$  の部分とそれ以外に分ければ,  $P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = \prod_{i \in \partial a} P_i(x_i)$  より式 (B.7) は成立する.

$M = m$  の場合に式 (B.7) の成立を仮定し,  $M = m + 1$  での成立を示す. 新たに加わった関数ノード  $a \in F$  に着目すると, 変数ノード  $i \in \partial a$  の状況に応じて次の 2 通りが考えられる. (i) すべての変数ノード  $i \in \partial a$  の次数が 1 の場合. このとき  $P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = \prod_{i \in \partial a} P_i(x_i)$  より,  $M = 1$  の場合と同様に式 (B.7) は成立する. (ii) 変数ノード  $i \in \partial a$  の次数が 2 以上の場合. サイクルがないという条件から, このような  $i$  は  $\partial a$  の中にただ 1 つ存在する.  $\tilde{\mathbf{x}} = \{x_j\}$  ( $j \in V \setminus (\partial a \setminus i)$ ) と定める (図 B.1) と, ベイズの公式から,

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}) &= P(\tilde{\mathbf{x}})P(\mathbf{x} | \tilde{\mathbf{x}}) \\ &= P(\tilde{\mathbf{x}})P(\mathbf{x}_{\partial a \setminus i} | x_i) \\ &= \frac{P(\tilde{\mathbf{x}})P_a(\mathbf{x}_{\partial a})}{P_i(x_i)}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

ただし,

$$P(\tilde{\mathbf{x}}) = \phi_i(x_i) \left( \sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \right) \prod_{b \in F \setminus a} \psi_b(\mathbf{x}_{\partial b}) \prod_{j \in V \setminus \partial a} \phi_j(x_j). \quad (\text{B.9})$$

この系に対応するファクターグラフ  $G'_f = (V \setminus (\partial a \setminus i), F \setminus a, E'')$  は関数ノードの個数が  $m$  で  $G_f$  と比較して  $d_i$  が 1 小さくなっている. ファクターグラフ  $G'_f$  で仮定を用いると,

$$P(\tilde{\mathbf{x}}) = P_i(x_i)^{1-(d_i-1)} \prod_{j \in V \setminus \partial a} P_j(x_j)^{1-d_j} \prod_{b \in F \setminus a} P_b(\mathbf{x}_{\partial b}) \quad (\text{B.10})$$

となるため, これと式 (B.8) から式 (B.7) の成立が示される.  $\square$

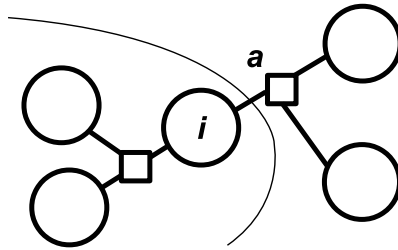


図 B.1: 帰納法のイメージ図. 細線で囲まれた部分が  $V \setminus (\partial a \setminus i)$  に対応する.

よって, 系のエントロピーは

$$S = - \sum_{a \in F} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \ln P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) - \sum_{i \in V} \sum_{x_i} (1 - d_i) P_i(x_i) \ln P_i(x_i) \quad (\text{B.11})$$

と表される. したがって, 系の自由エネルギーは式 (B.6), (B.11) より,

$$-\beta F = - \sum_{a \in F} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \ln \frac{P_a(\mathbf{x}_{\partial a})}{\psi_a(\mathbf{x}_{\partial a})} - \sum_{i \in V} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln \frac{P_i(x_i)}{\phi_i(x_i)} + \sum_{i \in V} \sum_{x_i} d_i P_i(x_i) \ln P_i(x_i) \quad (\text{B.12})$$

となる．この式を確率伝搬法によって計算するためには，すべての  $P_i$  と  $P_a$  を計算する必要がありやや煩雑なため，BP 方程式 (B.2)，(B.3) を利用して  $\{P_{i \rightarrow a}\}$  や  $\{\hat{P}_{a \rightarrow i}\}$  を含むように変形する．はじめに式 (B.4)，(B.5) を用いて  $Z_i, Z_a$  を出現させる．

$$\begin{aligned}
-\beta F &= - \sum_{a \in F} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \ln \left[ Z_a^{-1} \prod_{i \in \partial a} P_{i \rightarrow a}(x_i) \right] - \sum_{i \in V} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln \left[ Z_i^{-1} \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \\
&\quad + \sum_{i \in V} \sum_{x_i} d_i P_i(x_i) \ln \left[ Z_i^{-1} \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \\
&= \sum_{i \in V} \ln Z_i + \sum_{a \in F} \ln Z_a \\
&\quad - \sum_{a \in F} \sum_{\mathbf{x}_{\partial a}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \sum_{i \in \partial a} \ln P_{i \rightarrow a}(x_i) - \sum_{i \in V} d_i \ln Z_i - \sum_{i \in V} \sum_{x_i} P_i(x_i) \sum_{a \in \partial i} \ln \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \\
&\quad + \sum_{i \in V} \sum_{x_i} d_i P_i(x_i) \ln \left[ \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right]. \tag{B.13}
\end{aligned}$$

最終結果の3項目以降を  $A$  とおくと，

$$\begin{aligned}
A &= - \sum_{a \in F} \sum_{i \in \partial a} \sum_{x_i} \left( \sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \right) \ln P_{i \rightarrow a}(x_i) - \sum_{i \in V} d_i \ln Z_i \\
&\quad - \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) + \sum_{i \in V} \sum_{x_i} d_i P_i(x_i) \ln \left[ \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \\
&= - \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln P_{i \rightarrow a}(x_i) - \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \left\{ \ln Z_{i \rightarrow a} + \ln \left[ \sum_{x_i} P_{i \rightarrow a}(x_i) \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \right\} \\
&\quad - \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) + \sum_{i \in V} \sum_{a \in \partial i} \sum_{x_i} P_i(x_i) \ln \left[ Z_{i \rightarrow a} P_{i \rightarrow a}(x_i) \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \\
&= - \sum_{(ia) \in E'} \ln \left[ \sum_{x_i} P_{i \rightarrow a}(x_i) \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \right] \\
&\equiv - \sum_{(ia) \in E'} \ln Z_{ia}. \tag{B.14}
\end{aligned}$$

全体として和に関する恒等式  $\sum_i d_i = \sum_i \sum_{a \in \partial i} = \sum_a \sum_{i \in \partial a} = \sum_{(ia) \in E'}$  を利用した．1行目の第1項の変形では  $\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}$  に関する和と  $x_i$  に関する和を分離している．次行の第1項の変形は恒等式  $\sum_{\mathbf{x}_{\partial a \setminus i}} P_a(\mathbf{x}_{\partial a}) = P_i(x_i)$  を用いており，第2, 4項では積を  $i$  と  $j \in \partial a \setminus i$  に分け，後者に BP 方程式 (B.3) を利用している．すると最終的に第2項の中括弧内2項目以外はキャンセルされ，これを  $-\sum_{(ia) \in E'} \ln Z_{ia}$  と定義している． $Z_{ia}$  は BP 方程式の解  $\{P_{i \rightarrow a}\}$ ， $\{\hat{P}_{a \rightarrow i}\}$  から直接計算できるため，変形後の式は変形前よりも簡便であるといえる．

以上から，サイクルのないファクターグラフ上の自由エネルギーの表式は

$$-\beta F = \sum_{i \in V} \ln Z_i + \sum_{a \in F} \ln Z_a - \sum_{(ia) \in E'} \ln Z_{ia}, \tag{B.15}$$

$$Z_i = \sum_{x_i} \phi_i(x_i) \prod_{a \in \partial i} \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i), \quad (\text{B.16})$$

$$Z_a = \sum_{\mathbf{x}_{\partial a}} \psi_a(\mathbf{x}_{\partial a}) \prod_{i \in \partial a} P_{i \rightarrow a}(x_i), \quad (\text{B.17})$$

$$Z_{ia} = \sum_{x_i} P_{i \rightarrow a}(x_i) \hat{P}_{a \rightarrow i}(x_i) \quad (\text{B.18})$$

となる。サイクルのあるファクターグラフでも、この式から近似的に自由エネルギーを求めることが可能であり、そのようにして求めた自由エネルギーをベーテ自由エネルギーと呼ぶ。

ベーテ自由エネルギー密度のランダム平均  $\bar{f}$  の表式は以下のようにして得られる。キャビティ場を導入し、RS 仮定の下でキャビティ分布  $P(h)$ ,  $\hat{P}(\hat{h})$  が得られたとすれば、

$$-\beta \bar{f} = f_v + \frac{c}{\alpha} f_f - c f_e, \quad (\text{B.19})$$

$$f_v = \sum_k p_k \int \prod_{l=1}^k d\hat{P}(\hat{h}^{(l)}) \ln \left[ \sum_x \phi(x) \prod_{l=1}^k p(\hat{h}^{(l)}, x) \right], \quad (\text{B.20})$$

$$f_f = \sum_k q_k \int \prod_{l=1}^k dP(h^{(l)}) \ln \left[ \sum_{x_1, \dots, x_k} \psi(\{x_l\}) \prod_{l=1}^k p(h^{(l)}, x_l) \right], \quad (\text{B.21})$$

$$f_e = \int dP(h) d\hat{P}(\hat{h}) \ln \left[ \sum_x p(h, x) p(\hat{h}, x) \right]. \quad (\text{B.22})$$

ただし、 $p(h, x) = e^{-\beta h x} / (1 + e^{-\beta h})$  はキャビティ場の定義式であり、変数ノード、関数ノードの平均次数をそれぞれ  $c, \alpha$  とした。

付録C (本文105～107ページ)については現在学術論文を準備中である  
ため非公表とする。

## 謝辞

はじめに、教養学部基礎科学科（現統合自然科学科）での卒業研究からご指導頂きました指導教官の福島孝治准教授に深く感謝いたします。日々の研究に関する議論の中で様々にご助言を頂いただけでなく、研究者や教育者としての姿勢を学ばせていただきました。また、研究以外の話題についてもお話を頂く機会に恵まれ、学問観を含め様々な面で薫陶を受けてきました。福島研究室で学んだことを今後の人生の糧として、研究者人生を歩んでいく所存です。

本論文の4章は Alexander K. Hartmann 教授との共同研究です。Hartmann 教授にはドイツ Oldenburg 大学での滞在を快く許可頂き、本研究の端緒となるレイイベントサンプリングのランダムグラフへの応用についてご教授いただきました。帰国後も結果に関して様々にコメントを頂き大変感謝しております。

また、5章は前原貴憲助教との共同研究となっています。前原助教には最大カバー問題の面白さについてご教授いただき、共同研究開始後には切れ味の鋭いコメントを頂いております。セミナーでの会話から共同研究をさせて頂くという、研究者としてステップアップするまたとない機会を頂き大変感謝しております。

岡田真人教授、樺島祥介教授、河原林健一教授、佐々真一教授、田中和之教授、田中利幸教授、西森秀稔教授、根本幸児准教授、三村和史准教授、渡辺治教授、和田山正教授をはじめとする先生方には研究会やセミナー等でご指導頂きまして感謝申し上げます。特に、樺島教授には修士2年次に物性若手夏の学校に講師としてお越しいただいてから、お会いする度に研究に関するアドバイスを頂いてきました。また、その研究姿勢や哲学には大いに勉強させて頂いております。また、佐々教授には佐々研究室にて1週間滞在する機会を頂き、研究に対する多大な刺激を頂きましたこととお礼申し上げます。和田山正教授と三村和史准教授には6章の集団検査法に関する情報交換の機会を設けて下さりましたことに感謝いたします。根本幸児准教授と渡辺治教授にはそれぞれセミナーにお呼びして頂き、物理学と情報科学の観点から様々なコメントを頂きました。改めて厚くお礼申し上げる次第です。

昨年急逝された井上純一准教授には修士2年次に線形緩和の統計力学的解析に関する研究を紹介させて頂きました。その際、技術面や以降の進展等様々にご助言を頂き、なによりそのお人柄に心を惹かれたことを記憶しております。この場を借りて、改めてお礼を申し上げますとともに、先生のような研究者となれるよう固く心に誓う所存です。

Werner Krauth 教授と張海軍教授には、それぞれフランス、中国滞在時に温かく迎え入れて頂きましたことを大変感謝しております。それぞれの国での研究スタイルや研究環境、文化

など、短い期間ではありましたが日本では得られない経験を積むことができました。

大関真之准教授，上田仁彦博士，小淵智之助教，川本達郎博士，坂田綾香助教，高口太郎博士，中島千尋助教，中島哲也博士，長谷川雄央准教授，森立平助教をはじめとする諸先輩方には，今日に至るまで様々な場面でご相談にのって頂き感謝申し上げます。福島研究室の方々，中西義典助教，観山正道博士，酒井佑士氏，小松尚登氏，高橋惇氏，西川宜彦氏，水野雄太氏，安倍雅史氏，松麿勝利氏，OBの高橋昂氏，山口和也氏には日頃の議論や雑談を始め大変お世話になりました。特に，卒業研究の頃から切磋琢磨してきた酒井氏には改めて感謝申し上げます。また，池田晴國氏，唐木田亮氏，白石直人氏，徳田悟氏，豊田達也氏，正木祐輔氏，松原嘉哉氏といった他研究室の院生の方々には，頻度の差こそあれお会いする度に刺激を頂きました。厚くお礼申し上げます。

資金的な援助を頂きました，日本学術振興会と東京大学博士課程教育リーディング大学院プログラム「多文化共生・統合人間学 (IHS) プログラム」に感謝致します。IHS プログラムでの多様な活動を通して，文理融合の困難さと多文化共生への問題点を発見することができました。活動で得た経験を今後の人生に生かしていきたいと考えております。また，IHS プログラム生の方々，特に小泉佑介氏と千葉安佐子氏には自主企画や様々な議論の機会を頂きました。あわせて感謝申し上げます。

最後に，両親にはどのような時でも温かく見守り，励まして頂きました。本論文も両親の後押しがあつてのものです。本当にありがとうございました。



## 参考文献

- [1] H. Hancock, *Theory of maxima and minima*, Boston: Ginn and company (1917).
- [2] A. Schrijver, “On the History of Combinatorial Optimization,” *Handbooks in Operations Research and Management Science: Discrete Optimization*, Vol. 12, pp. 1–57 (2005).
- [3] G. Monge, “Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais,” *Histoire de l’Académie Royale des Sciences*, pp. 666–704 (1781).
- [4] P. Appell, *Le problème géométrique des déblais et remblais*: Gauthier-Villars (1928).
- [5] F. L. Bauer and H. Wössner, *Algorithmic Language and Program Development*, Berlin: Springer (1982).
- [6] T. E. Easterfield, “A combinatorial algorithm,” *The Journal of the London Mathematical Society*, Vol. 21, pp. 219–226 (1946).
- [7] G. B. Dantzig, “Applications of the Simplex Method to a Transportation Problem,” in *Activity Analysis of Production and Allocation*, pp. 359–373 (1951).
- [8] D. F. Votaw Jr, “Methods of solving some personnel-classification problems,” *Psychometrika*, Vol. 17, pp. 255–266 (1952).
- [9] H. W. Kuhn, “The Hungarian method for the assignment problem,” *Naval research logistics quarterly*, Vol. 2, pp. 83–97 (1955).
- [10] J. Munkres, “Algorithms for the Assignment and Transportation Problems,” *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 5, No. 1, pp. 32–38 (1957).
- [11] D. R. Fulkerson and L. R. Ford, “Solving the Transportation Problem,” *Management Science*, Vol. 3, No. 1, pp. 24–32 (1956).
- [12] S. A. Cook, “The complexity of theorem-proving procedures,” in *Proceedings of the third annual ACM symposium on Theory of computing - STOC ’71*, pp. 151–158, New York, New York, USA: ACM Press (1971).
- [13] L. Levin, “Universal sorting problems,” *Problems of Information Transmission*, Vol. 9, pp. 265–266 (1973).
- [14] R. M. Karp, “Reducibility among Combinatorial Problems,” in *Complexity of Computer Computations*, Boston, MA: Springer US, pp. 85–103 (1972).

- [15] V. G. Vizing, “On an estimate of the chromatic class of a p-graph,” *Diskret. Anal.*, Vol. 3, pp. 25–30 (1964).
- [16] R. L. Graham, “Bounds on Multiprocessing Timing Anomalies,” *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 17, No. 2, pp. 416–429 (1969).
- [17] D. S. Johnson, “Approximation algorithms for combinatorial problems,” *Journal of Computer and System Sciences*, Vol. 9, No. 3, pp. 256–278 (1974).
- [18] V. V. Vazirani, *Approximation Algorithms*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg (2003).
- [19] L. Euler, “Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis,” *Comentarii academiae scientiarum Petropolitanae*, Vol. 8, pp. 128–140 (1736).
- [20] D. König, “Graphok és alkalmazásuk a determinánsok és a halmazok elméletére,” *Mathematikai és Természettudományi Értesítő*, Vol. 34, pp. 104–119 (1916).
- [21] J. Spencer, “Probabilistic Methods in Combinatorics,” in *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, Vol. 10, Basel: Birkhäuser Basel, pp. 1375–1383 (1995).
- [22] P. Erdős, “Some remarks on the theory of graphs,” *Bulletin of the American Mathematical Society*, Vol. 53, No. 4, pp. 292–295 (1947).
- [23] P. Erdős and A. Rényi, “On random graphs, I,” *Publicationes Mathematicae (Debrecen)*, Vol. 6, pp. 290 – 297 (1959).
- [24] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*: CRC Press (1994).
- [25] R. M. Karp, “Probabilistic analysis of some combinatorial search problems,” *Algorithms and Complexity: New Directions and Recent Results*, Vol. 1, pp. 1–19 (1976).
- [26] D. Angluin and L. G. Valiant, “Fast probabilistic algorithms for hamiltonian circuits and matchings,” *Journal of Computer and System Sciences*, Vol. 18, No. 2, pp. 155–193 (1979).
- [27] R. M. Karp and M. Sipser, “Maximum matching in sparse random graphs,” in *22nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (sfcs 1981)*, pp. 364–375: IEEE (1981).
- [28] J. Edmonds, “Paths, trees, and flowers,” *Canadian Journal of Mathematics*, Vol. 17, pp. 449–467 (1965).
- [29] J. Franco and M. Paull, “Probabilistic analysis of the Davis Putnam procedure for solving the satisfiability problem,” *Discrete Applied Mathematics*, Vol. 5, No. 1, pp. 77–87 (1983).
- [30] D. Mitchell, B. Selman, and H. Levesque, “Hard and easy distributions of SAT problems,” in *AAAI’92 Proceedings of the tenth national conference on Artificial intelligence*, pp. 459–465, San Jose, California: AAAI Press (1992).
- [31] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, “Solvable model of a spin-glass,” *Physical Re-*

- view Letters*, Vol. 35, No. 26, pp. 1792–1796 (1975).
- [32] S. F. Edwards and P. W. Anderson, “Theory of spin glasses,” *Journal of Physics F: Metal Physics*, Vol. 5, No. 5, pp. 965–974 (1975).
- [33] G. Parisi, “Infinite number of order parameters for spin-glasses,” *Physical Review Letters*, Vol. 43, No. 23, pp. 1754–1756 (1979).
- [34] G. Parisi, “Order Parameter for Spin-Glasses,” *Physical Review Letters*, Vol. 50, No. 24, pp. 1946–1948 (1983).
- [35] M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse, and M. Virasoro, “Nature of the Spin-Glass Phase,” *Physical Review Letters*, Vol. 52, No. 13, pp. 1156–1159 (1984).
- [36] M. Talagrand, *Spin glasses: a challenge for mathematicians*: Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2003).
- [37] D. Panchenko, “The Sherrington-Kirkpatrick Model: An Overview,” *Journal of Statistical Physics*, Vol. 149, No. 2, pp. 362–383 (2012).
- [38] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, “Optimization by simulated annealing,” *Science (New York, N.Y.)*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671–80 (1983).
- [39] Y. Fu and P. W. Anderson, “Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimisation,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 19, No. 9, pp. 1605–1620 (1986).
- [40] J. J. Hopfield, “Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 79, No. 8, pp. 2554–2558 (1982).
- [41] D. J. Amit, H. Gutfreund, and H. Sompolinsky, “Storing infinite numbers of patterns in a spin-glass model of neural networks,” *Physical Review Letters*, Vol. 55, No. 14, pp. 1530–1533 (1985).
- [42] L. C. S. Viana and A. J. Bray, “Phase diagrams for dilute spin glasses,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Vol. 18, No. 15, pp. 3037–3051 (1985).
- [43] M. Mézard, G. Parisi, and M. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*: World Scientific Publishing Co., Inc., Pergamon Press (1987).
- [44] R. Monasson, “Optimization problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin glasses,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 31, No. 2, pp. 513–529 (1998).
- [45] S. Kirkpatrick and B. Selman, “Critical Behavior in the Satisfiability of Random Boolean Expressions,” *Science*, Vol. 264, No. 5163, pp. 1297–1301 (1994).
- [46] S. Kirkpatrick, G. Géza, T. Naftali, and L. Troyansky, “The Statistical Mechanics of k-Satisfaction,” in *Advances in Neural Information Processing Systems 6*, pp. 439–446: Morgan-Kaufmann (1994).
- [47] R. Monasson and R. Zecchina, “Entropy of the K-Satisfiability Problem,” *Physical Review Letters*, Vol. 76, No. 21, pp. 3881–3885 (1996).

- [48] M. Mézard and R. Zecchina, “Random K-satisfiability problem: From an analytic solution to an efficient algorithm,” *Physical Review E*, Vol. 66, No. 5, pp. 1–27 (2002).
- [49] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, and L. Troyansky, “Determining computational complexity from characteristic ‘phase transitions’,” *Nature*, Vol. 400, No. 6740, pp. 133–137 (1999).
- [50] R. Monasson and R. Zecchina, “Tricritical points in random combinatorics: the (2+p)-SAT case,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 31, No. 46, pp. 9209–9217 (1998).
- [51] V. Chvatal and B. Reed, “Mick gets some (the odds are on his side) (satisfiability),” in *Proceedings, 33rd Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pp. 620–627: IEEE (1992).
- [52] M. Mézard, F. Ricci-Tersenghi, and R. Zecchina, “Two Solutions to Diluted p-Spin Models and XORSAT Problems,” *Journal of Statistical Physics*, Vol. 111, No. 3/4, pp. 505–533 (2003).
- [53] M. Weigt and A. K. Hartmann, “Number of guards needed by a museum: a phase transition in vertex covering of random graphs,” *Physical review letters*, Vol. 84, No. 26 Pt 1, pp. 6118–21 (2000).
- [54] L. Zdeborová, “Statistical physics of hard optimization problems,” *Acta Physica Slovaca. Reviews and Tutorials*, Vol. 59, No. 3, pp. 169–303 (2009).
- [55] S. Cocco and R. Monasson, “Statistical physics analysis of the computational complexity of solving random satisfiability problems using backtrack algorithms,” *The European Physical Journal B*, Vol. 22, No. 4, pp. 505–531 (2001).
- [56] M. Bauer and O. Golinelli, “Core percolation in random graphs: a critical phenomena analysis,” *The European Physical Journal B*, Vol. 24, No. 3, pp. 339–352 (2001).
- [57] S. Takabe and K. Hukushima, “Typical Behavior of the Linear Programming Method for Combinatorial Optimization Problems: A Statistical-Mechanical Perspective,” *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 83, No. 4, p. 043801 (2014).
- [58] A. Javanmard, A. Montanari, and F. Ricci-Tersenghi, “Phase transitions in semidefinite relaxations,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 113, No. 16, pp. E2218–23 (2016).
- [59] M. Mézard and A. Montanari, *Information, Physics, and Computation*: Oxford University Press (2009).
- [60] H. A. Bethe, “Statistical Theory of Superlattices,” *Proceedings of the Royal Society of London A*, Vol. 150, No. 871, pp. 552–575 (1935).
- [61] R. Kikuchi, “A Theory of Cooperative Phenomena,” *Physical Review*, Vol. 81, No. 6, pp. 988–1003 (1951).

- [62] G. Toulouse, “Theory of the frustration effect in spin glasses: I,” *Communications on Physics*, Vol. 2, p. 115 (1977).
- [63] S. Katsura, S. Inawashiro, and S. Fujiki, “Spin glasses for the infinitely long ranged bond Ising model and for the short ranged binary bond Ising model without use of the replica method,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Vol. 99, No. 1-2, pp. 193–216 (1979).
- [64] J. Pearl, *Probabilistic reasoning in intelligent systems: networks of plausible inference*, Vol. 88, San Francisco, CA: Morgan Kaufmann Publishers, pp.434–437 (1991).
- [65] S. L. Lauritzen and D. J. Spiegelhalter, “Local Computations with Probabilities on Graphical Structures and their to Expert Systems,” *Journal of the Royal Statistical Society. B*, Vol. 50, No. 2, pp. 157–224 (1988).
- [66] B. J. Frey, *Graphical Models for Machine Learning and Digital Communication*, Cambridge, MA, USA: MIT Press (1998).
- [67] Y. Kabashima and D. Saad, “Belief propagation vs. TAP for decoding corrupted messages,” *Europhysics Letters (EPL)*, Vol. 44, No. 5, pp. 668–674 (1998).
- [68] J. S. Yedidia, W. T. Freeman, and Y. Weiss, “Generalized Belief Propagation,” *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 13, No. June, pp. 689–695 (2000).
- [69] J. Yedidia, W. Freeman, and Y. Weiss, “Constructing Free-Energy Approximations and Generalized Belief Propagation Algorithms,” *IEEE Transactions on Information Theory*, Vol. 51, No. 7, pp. 2282–2312 (2005).
- [70] I. Kanter and H. Sompolinsky, “Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number,” *Physical Review Letters*, Vol. 58, No. 2, pp. 164–167 (1987).
- [71] M. Mézard and G. Parisi, “Mean-Field Theory of Randomly Frustrated Systems with Finite Connectivity,” *Europhysics Letters (EPL)*, Vol. 3, No. 10, pp. 1067–1074 (1987).
- [72] F. R. Kschischang, B. J. Frey, and H. A. Loeliger, “Factor graphs and the sum-product algorithm,” *IEEE Transactions on Information Theory*, Vol. 47, No. 2, pp. 498–519 (2001).
- [73] C. Bishop, M. Jordan, J. Kleinberg, and B. Scho, *Pattern Recognition and Machine Learning*: Springer-Verlag New York (2006).
- [74] A. Lucas, “Ising formulations of many NP problems,” *Frontiers in Physics*, Vol. 2, pp. 1–15 (2014).
- [75] B. Frey and D. MacKay, “A Revolution: Belief Propagation in Graphs With Cycles,” *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 10, p. 479 (1998).
- [76] M. Weigt and H. Zhou, “Message passing for vertex covers,” *Physical Review E*, Vol. 74, No. 4, p. 046110 (2006).
- [77] J. Ohkubo, M. Yasuda, and K. Tanaka, “Statistical-mechanical iterative algorithms

- on complex networks,” *Physical Review E*, Vol. 72, No. 4, pp. 1–8 (2005).
- [78] M. Karoński, “A review of random graphs,” *Journal of Graph Theory*, Vol. 6, No. 4, pp. 349–389 (1982).
- [79] R. Albert and A. L. Barabasi, “Statistical mechanics of complex networks,” *Reviews of Modern Physics*, Vol. 74, No. 1, pp. 47–97 (2002).
- [80] D. J. Watts and S. H. Strogatz, “Collective dynamics of ‘small-world’ networks,” *Nature*, Vol. 393, No. 6684, pp. 440–442 (1998).
- [81] A. Barabási, “Emergence of Scaling in Random Networks,” *Science*, Vol. 286, No. 5439, pp. 509–512 (1999).
- [82] A. L. Barabási and Z. N. Oltvai, “Network biology: Understanding the cell’s functional organization,” *Nature Reviews Genetics*, Vol. 5, No. 2, p. 101 (2004).
- [83] S. P. Borgatti, A. Mehra, D. J. Brass, and G. Labianca, “Network Analysis in the Social Sciences,” *Science*, Vol. 323, No. 5916, pp. 892–895 (2009).
- [84] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, and D. J. Watts, “Random graphs with arbitrary degree distributions and their applications,” *Physical Review E*, Vol. 64, No. 2, p. 026118 (2001).
- [85] V. Alexei, M. Weigt, A. Vázquez, and M. Weigt, “Computational complexity arising from degree correlations in networks,” *Physical Review E*, Vol. 67, No. 2, p. 027101 (2003).
- [86] M. Mézard and G. Parisi, “The Bethe lattice spin glass revisited,” *The European Physical Journal B*, Vol. 20, No. 2, pp. 217–233 (2001).
- [87] H. Zhou, “Vertex cover problem studied by cavity method: Analytics and population dynamics,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter*, Vol. 32, No. 2, pp. 265–270 (2003).
- [88] 中島哲也, 「レプリカ対称性の破れと自由エネルギー地形の関係に関する理論的研究」, 博士論文, 東京大学 (2012).
- [89] R. Mori, “New Understanding of the Bethe Approximation and the Replica Method,” Ph.D. dissertation, Kyoto University (2013).
- [90] A. K. Hartmann and M. Weigt, *Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems*, Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2005).
- [91] T. P. Minka, “Expectation Propagation for Approximate Bayesian Inference,” *Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI)*, Vol. 17, No. 2, pp. 362–369 (2001).
- [92] D. L. Donoho, A. Maleki, and A. Montanari, “Message-passing algorithms for compressed sensing,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 106, No. 45, pp. 18914–18919 (2009).
- [93] D. Aldous and J. M. Steele, “The objective method: probabilistic combinatorial optimization and local weak convergence,” *Probability on discrete structures (Encyclopaedia of Mathematical Sciences, v 110)*, Vol. 110, pp. 1–72 (2004).

- [94] D. J. Aldous and A. Bandyopadhyay, “A survey of max-type recursive distributional equations,” *The Annals of Applied Probability*, Vol. 15, No. 2, pp. 1047–1110 (2005).
- [95] D. Gamarnik, T. Nowicki, and G. Swirszcz, “Maximum weight independent sets and matchings in sparse random graphs. Exact results using the local weak convergence method,” *Random Structures and Algorithms*, Vol. 28, No. 1, pp. 76–106 (2006).
- [96] S. Takabe and K. Hukushima, “Typical performance of approximation algorithms for NP-hard problems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2016, No. 11, p. 113401 (2016).
- [97] S. Takabe and K. Hukushima, “Minimum vertex cover problems on random hypergraphs: Replica symmetric solution and a leaf removal algorithm,” *Physical Review E*, Vol. 89, No. 6, p. 062139 (2014).
- [98] C. Lucibello and F. Ricci-Tersenghi, “The Statistical Mechanics of Random Set Packing and a Generalization of the Karp-Sipser Algorithm,” *International Journal of Statistical Mechanics*, Vol. 2014, pp. 1–13 (2014).
- [99] Y. Habibulla, J.-H. Zhao, and H.-J. Zhou, “The Directed Dominating Set Problem: Generalized Leaf Removal and Belief Propagation,” in *International Workshop on Frontiers in Algorithmics.*, pp. 78–88: Springer International Publishing. (2015).
- [100] L. Khachiyan, “Polynomial algorithms in linear programming,” *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol. 20, No. 1, pp. 53–72 (1980).
- [101] P. Toth and D. Vigo, “Models, relaxations and exact approaches for the capacitated vehicle routing problem,” *Discrete Applied Mathematics*, Vol. 123, No. 1-3, pp. 487–512 (2002).
- [102] K. L. Hoffman and M. Padberg, “Solving Airline Crew Scheduling Problems by Branch-and-Cut,” *Management Science*, Vol. 39, No. 6, pp. 657–682 (1993).
- [103] R. T. Rockafellar, *Convex Analysis*: Princeton University Press (1972).
- [104] A. J. Hoffman and J. B. Kruskal, “Integral boundary points of convex polyhedra,” in H. K. Tucker and A.J. eds. *Linear Inequalities and Related Systems*: Princeton University Press, pp. 223–246 (1956).
- [105] 高邊賢史, 「近似アルゴリズムの典型性能とランダム系の統計力学の関連性に関する研究」, 修士論文, 東京大学 (2014).
- [106] S. Takabe and K. Hukushima, “Statistical mechanical analysis of linear programming relaxation for combinatorial optimization problems,” *Physical Review E*, Vol. 93, No. 5, p. 053308 (2016).
- [107] J. Barbier, F. Krzakala, L. Zdeborová, and P. Zhang, “The hard-core model on random graphs revisited,” *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 473, No. 1, p. 012021 (2013).
- [108] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, and A. N. Samukhin, “Structure of growing networks with preferential linking,” *Physical Review Letters*, Vol. 85, No. 21, pp.

- 4633–4636 (2000).
- [109] M. Berkelaar, K. Eikland, and P. Notebaert, “Ip\_solve: Open source (Mixed-Integer) Linear Programming system,” (2004).
- [110] P. Zhang, Y. Zeng, and H. Zhou, “Stability analysis on the finite-temperature replica-symmetric and first-step replica-symmetry-broken cavity solutions of the random vertex cover problem,” *Physical Review E*, Vol. 80, No. 2, p. 021122 (2009).
- [111] B. Korte and J. Vygen, *Combinatorial Optimization*, Vol. 21 of Algorithms and Combinatorics 21, Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag (2002).
- [112] N. Karmarkar, “A new polynomial-time algorithm for linear programming,” in *Proceedings of the sixteenth annual ACM symposium on Theory of computing - STOC '84*, pp. 302–311, New York, New York, USA: ACM Press (1984).
- [113] G. B. Dantzig, *The basic George B. Dantzig*: Stanford University Press, pp.19 (2010).
- [114] J. Dongarra and F. Sullivan, “Guest Editors Introduction to the top 10 algorithms,” *Computing in Science & Engineering*, Vol. 2, No. 1, pp. 22–23 (2000).
- [115] V. Klee and G. J. Minty, “How good is the simplex algorithm?,” *Inequalities III: Proceedings of the 3rd Symposium*, pp. 159–175 (1972).
- [116] R. G. Bland, “New Finite Pivoting Rules for the Simplex Method,” *Mathematics of Operations Research*, Vol. 2, No. 2, pp. 103–107 (1977).
- [117] J. J. Forrest and D. Goldfarb, “Steepest-edge simplex algorithms for linear programming,” *Mathematical Programming*, Vol. 57, No. 1-3, pp. 341–374 (1992).
- [118] A. K. Hartmann, “Sampling rare events: Statistics of local sequence alignments,” *Physical Review E*, Vol. 65, No. 5, pp. 1–4 (2002).
- [119] A. K. Hartmann, “Large-deviation properties of largest component for random graphs,” *European Physical Journal B*, Vol. 84, No. 4, pp. 627–634 (2011).
- [120] F. Wang and D. P. Landau, “Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states,” *Physical Review Letters*, Vol. 86, No. 10, pp. 2050–2053 (2001).
- [121] Y. Iba and K. Hukushima, “Testing Error Correcting Codes by Multicanonical Sampling of Rare Events,” *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 77, No. 10, p. 103801 (2008).
- [122] N. Saito, Y. Iba, and K. Hukushima, “Multicanonical sampling of rare events in random matrices,” *Physical Review E*, Vol. 82, No. 3, p. 031142 (2010).
- [123] H. Touchette, “The large deviation approach to statistical mechanics,” *Physics Reports*, Vol. 478, No. 1-3, pp. 1–69 (2009).
- [124] T. Dewenter and A. K. Hartmann, “Phase transition for cutting-plane approach to vertex-cover problem,” *Physical Review E*, Vol. 86, No. 4, p. 041128 (2012).
- [125] T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of Information Theory*, Hoboken, NJ,



- USA: John Wiley & Sons, Inc. (2005).
- [126] G. L. Nemhauser, L. A. Wolsey, and M. L. Fisher, “An analysis of approximations for maximizing submodular set functions-I,” *Mathematical Programming*, Vol. 14, No. 1, pp. 265–294 (1978).
- [127] U. Feige, “A threshold of  $\ln n$  for approximating set cover,” *Journal of the ACM*, Vol. 45, No. 4, pp. 634–652 (1998).
- [128] M. P. Johnson and A. Bar-Noy, “Pan and scan: Configuring cameras for coverage,” *Proceedings - IEEE INFOCOM*, pp. 1071–1079 (2011).
- [129] H. Takamura and M. Okumura, “Text summarization model based on maximum coverage problem and its variant,” in *Proc. Conf. of the European Chapter of the Association for Computational Linguistics (EACL)*, pp. 781–789 (2009).
- [130] O. Rivoire, G. Biroli, O. C. Martin, and M. Mézard, “Glass models on Bethe lattices,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter*, Vol. 37, No. 1, pp. 55–78 (2003).
- [131] M. Mézard and M. Tarzia, “Statistical mechanics of the hitting set problem,” *Physical Review E*, Vol. 76, No. 4, p. 041124 (2007).
- [132] M. Weigt, “Dynamics of heuristic optimization algorithms on random graphs,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter*, Vol. 28, No. 3, pp. 369–381 (2002).
- [133] K. Kawasaki, “Diffusion constants near the critical point for time-dependent ising models. I,” *Physical Review*, Vol. 145, No. 1, pp. 224–230 (1966).
- [134] R. Dorfman, “The Detection of Defective Members of Large Populations,” *The Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 14, No. 4, pp. 436–440 (1943).
- [135] D.-Z. Du and F. K. Hwang, *Combinatorial group testing and its applications*, Vol. 12: World Scientific (2000).
- [136] A. Schliep, D. C. Torney, and S. Rahmann, “Group testing with DNA chips: Generating designs and decoding experiments,” *Proceedings of the 2003 IEEE Bioinformatics Conference, CSB 2003*, pp. 84–91 (2003).
- [137] A. Sharma and C. R. Murthy, “Group testing-based spectrum hole search for cognitive radios,” *IEEE Transactions on Vehicular Technology*, Vol. 63, No. 8, pp. 3794–3805 (2014).
- [138] G. Atia, S. Aeron, E. Ermis, and V. Saligrama, “On throughput maximization and interference avoidance in cognitive radios,” *Consumer Communications and Networking Conference, 2008. CCNC 2008. 5th IEEE*, pp. 963–967 (2008).
- [139] C. L. Chan, P. H. Che, S. Jaggi, and V. Saligrama, “Non-adaptive probabilistic group testing with noisy measurements: Near-optimal bounds with efficient algorithms,” in *2011 49th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing (Allerton)*, pp. 1832–1839: IEEE (2011).

- [140] B. Malyutov, “Maximal rates of screening designs,” *Probability and its applications*, Vol. 24, pp. 655–657 (1979).
- [141] D. Malioutov and M. Malyutov, “Boolean compressed sensing: LP relaxation for group testing,” *ICASSP, IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing - Proceedings*, pp. 3305–3308 (2012).
- [142] R. Mammone and G. Eichmann, “Superresolving image restoration using linear programming,” *Applied Optics*, Vol. 21, No. 3, p. 496 (1982).
- [143] R. Tibshirani, “Regression Shrinkage and Selection via the Lasso,” *Journal of the Royal Statistical Society. Series B: Statistical Methodology*, Vol. 58, No. 1, pp. 267–288 (1996).
- [144] S. S. Chen, D. L. Donoho, and M. A. Saunders, “Atomic Decomposition by Basis Pursuit,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 20, No. 1, pp. 33–61 (1998).
- [145] Y. Igarashi, K. Nagata, T. Kuwatani, T. Omori, Y. Nakanishi-Ohno, and M. Okada, “Three levels of data-driven science,” *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 699, p. 012001 (2016).
- [146] D. Sejdinovic and O. Johnson, “Note on noisy group testing: Asymptotic bounds and belief propagation reconstruction,” in *2010 48th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing (Allerton)*, pp. 998–1003: IEEE (2010).
- [147] G. Atia and V. Saligrama, “Noisy group testing: An information theoretic perspective,” in *2009 47th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing (Allerton)*, pp. 355–362: IEEE (2009).
- [148] Y. Kabashima, T. Wadayama, and T. Tanaka, “A typical reconstruction limit for compressed sensing based on Lp-norm minimization,” *J. Stat. Mech.*, Vol. 2009, No. 09, p. L09003 (2009).
- [149] E. J. Candès, J. K. Romberg, and T. Tao, “Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, Vol. 59, No. 8, pp. 1207–1223 (2006).
- [150] T. Wadayama, “An analysis on non-adaptive group testing based on sparse pooling graphs,” *IEEE International Symposium on Information Theory - Proceedings*, pp. 2681–2685 (2013).