様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　 ５ 月 ３１ 日現在

機関番号：１１５０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2016～2018
課題番号：１６Ｋ００００６
研究課題名（和文）機械学習に貢献するしきい値回路の設計とその限界

研究課題名（英文）Limitation of Threshold Circuits designed for Machine Learning

研究代表者
内沢　啓（Uchizawa, Kei）

山形大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：９０５１０２４８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，段数の大きなニューラルネットワークを用いた機械学習の性能がなぜ高いのかを理論的に説明することを目指した．その結果，ニューラルネットワークの一種であるしきい値回路を用いて，ある人工的な情報処理タスクの処理を行う場合，段数を大きくすることによって，ニューラルネットワークの性能が上がることを示唆する結果を得た．特に，その人工的なタスクに対して非常に良い性能を示すしきい値回路の具体的な構造も明らかにした．

研究成果の学術的意義や社会的意義
ニューラルネットワークによって実現できる情報処理の性質を理解することは，脳型の計算機，あるいはニューラルネットワークを用いた機械学習の基礎研究として重要である．特に本研究の結果は，ニューラルネットワークを用いて情報処理を行う場合，どのようなタスクに対してニューラルネットワークの性能が発揮されるのか，あるいは性能が発揮できる場合どのような設計が有効であるのかを明らかにすることにつながる．

研究成果の概要（英文）：In this research, we theoretically investigate a question why neural networks of large depth obtained by a machine learning method show significant performance for various tasks. We consider a particular type of neural networks, called threshold circuits, and then provide mathematical proofs which suggest that large depth contributes to the performance of threshold circuits that carry out (somewhat artificial) information processing. As part of the proofs, we also show detailed constructions (that is, placement of neural computational elements and their connections) of threshold circuits that are guaranteed to be achieve good performance for the information processing.

研究分野：計算理論

キーワード：ニューラルネットワーク　しきい値回路　段数　マージン　機械学習

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９、ＣＫ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

論理回路とは，単純な演算を行う論理素子を組み合わせることによって，論理関数を計算する情報処理モデルである．その中でも特に，脳の神経細胞の古典的な理論モデルである線形しきい値関数を計算する論理素子をしきい値素子と呼び，さらにそのしきい値素子を基本構成要素とする論理回路をしきい値回路と呼ぶ．しきい値回路は生体情報処理を表現する理論的な計算モデルとして古くから研究がなされているだけでなく，AND 素子，OR 素子，NOT 素子からなる通常の論理回路の計算能力を包含する強力な論理回路としても捉えられ，理論計算機科学の分野において，その計算応力に関する研究が行われている．中でも回路の並列計算時間を表す指標である段数の多寡が，しきい値回路の計算能力にどのような影響を及ぼすのか，という問いは，研究開始時から今もなお計算理論分野の重要な未解決問題として認識されている．

一方で線形しきい値関数は，機械学習の分野でも古くから研究がなされている．汎用性と性能の高さから幅広い分野で利用がなされているサポートベクターマシン（SVM）は，入力となる複数のラベル付きサンプルを，特徴写像によってより高い次元の空間上にマッピングし，そのマッピング後の空間で最もマージンの大きな線形しきい値関数を出力する学習アルゴリズムである（図１参照）．ここでマージンとは，特徴写像によってマッピングされた後の次元の高い空間上の任意のサンプルと超平面との最小距離を表す．マージンは，学習結果の評価基準である汎化誤差と正の相関関係を持つことが知られている．すなわち，大きなマージンを持つ線形しきい値関数は，未知の入力に対して高い推定性能を持つことが知られている．

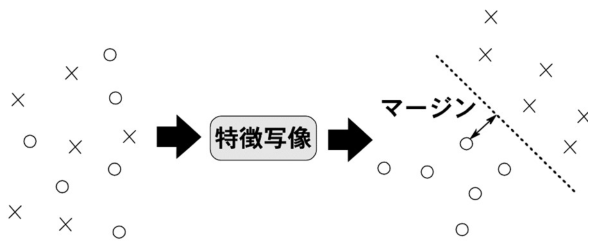

図１：特徴写像によるマッピングとマージン

しきい値回路もまた，機械学習と深いつながりがある．特に，音声認識や画像認識において，近年その卓越した性能により注目を集める深層学習は，しきい値回路を含む多種の神経回路網の理論モデルを利用して，入力サンプルに応じた特徴写像を構成するアルゴリズムである．深層学習では特に，段数の大きな理論モデルが特徴写像として採用される．言い換えれば深層学習は，大きな段数の神経回路網を用いて特徴写像を適応的に構成していると考えることができる．表現能力の高い段数の大きな回路構造を特徴写像として利用できていることが，深層学習の能力の高さの有力な要因の一つと考えられているが，なぜ深層学習によって非常に高い学習性能を獲得できるのかという疑問は依然として未解明である．

２．研究の目的

上記の背景に基づき，本研究は脳の神経回路網の理論モデルであるしきい値回路を，機械学習を実現するアルゴリズムの評価指標であるマージンを用いて捉え直すことにより，しきい値回路が実現する計算に，新たな知見を与えることを目的とする．具体的には，しきい値素子が線形しきい値関数を計算する素子であるという事実を踏まえ，しきい値回路の出力素子をサポートベクターマシンの出力する線形しきい値関数と考え，出力素子を除いた回路の残りの素子群をしきい値回路によって構成された特徴写像と捉える（図２）．その上で，そのしきい値回路によって構成された特徴写像をマージンによって評価する．前述のように，マージンは汎化誤差と正の相関関係を持つため，特徴写像の評価指標とみなすことができる．

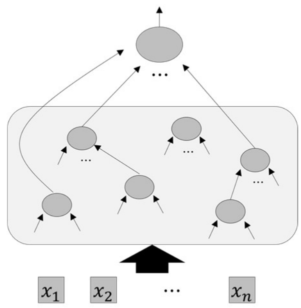

図２：しきい値回路．網掛け部がしきい値回路による特徴写像に相当する

上記の枠組みを用いて機械学習という新しい視点でしきい値回路を研究することにより，既存の研究の枠組みでは得られないしきい値回路固有の性質を明らかにすることを目指す．また，本研究が着目するマージンと，しきい値回路の伝統的な評価指標である段数の多寡の間に正の相関関係があることを理論的に示すことができれば，近年注目を集めている深層学習の卓越した学習能力が段数の大きさに起因するのか，という疑問に対して，部分的な回答が得られることも期待できる．

３．研究の方法

本研究は，特徴写像として働くしきい値回路をこのマージンを用いて評価することにより，機械学習の視点からしきい値回路を評価するが，厳密には以下に記す機械学習の枠組みの下で定義される正規化マージンを評価指標の基礎として研究を展開する．学習によって獲得したい論理関数の候補集合である目標クラスTを既知の情報として与えられ，さらに実際に計算したい未

知の関数$f \in T$が定められているとする．このとき機械学習は，n次元上のラベル付きサンプル$(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots, (x_m, f(x_m))$から，その未知の関数fを獲得する問題として定義できる．ここで$p: \{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}^t$を，$x_1, x_2, \ldots, x_m$をt次元空間にマッピングする特徴写像とすると，この特徴写像によって変換されたサンプルは$(p(x_1), f(x_1)), (p(x_2), f(x_2)), \ldots, (p(x_m), f(x_m))$となる．この定式化の下で，$f$ に対する特徴写像 p のマージン $M(f,p)$ は，次のように定義できる．

$$M(f,p) = \max_{(w,\theta)\in H} \min_{x} |w \cdot p(x) - \theta|.$$

ただし，H は t 次元上にマッピングされたサンプルを線形分離する，正規化された超平面の集合である．

本研究では，特定の関数 f に対する特徴写像の性能を測るのではなく，目標クラスが Tであるときに，特徴写像 p がどのような性能を示すかを評価したいため，上記のマージンの定義に基いて，Tに対する特徴写像 $\boldsymbol{p}$ の評価指標として，次に定義する正規化マージンNmargin(T,p)を用いる．

$$\mathrm{Nmargin}(T,p) = \min_{f\in T} M(f,p)\,/K$$

ただし，K は$f \in T$に依らず定まる，特徴写像 p の正規化項である．

正規化マージンの言葉を用いて本研究の枠組みをより正確に述べれば，特徴写像p を（例えば）段数の小さいしきい値回路によって計算できるものに制限した場合に，どれほどの正規化マージンを獲得できるか，と説明できる．

４．研究成果

本研究で提案した正規化マージンを評価する枠組みに基づいて，（１）入力に含まれる１の個数を判別する学習タスク，および（２）米国郵政公社(USPS)の提供する手書き文字のデータセットを認識する学習タスクの２つ学習タスクを対象に，以下に示す計算機実験を行った（主な発表論文等，学会発表[2]）．

nを 2 以上 6 以下の整数とする．このとき，$1 \leq d \leq 10$なる各整数dについて，段数d，素子数$s = 2520$のしきい値回路C_dを，各素子の重みをランダムに決定することにより生成する．C_dの各層はs/d個の素子を持ち，各素子の重みは−1 以上 1 以下の実数，しきい値は 0 とした．また，入力$x_1, x_2, \ldots, x_n$は 1 層目に属する素子にのみ接続され，その他の層のは，自分の直下にある素子を入力とる．この条件の下で回路C_dをランダムに 100 回生成し，正規化マージンの平均を求めた．

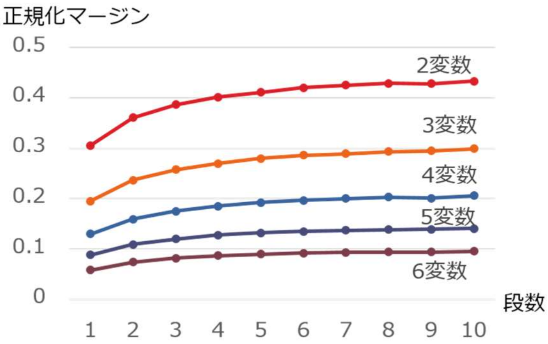

図３：学習タスク（１）に対する正規化マージン．素子数は 2520.

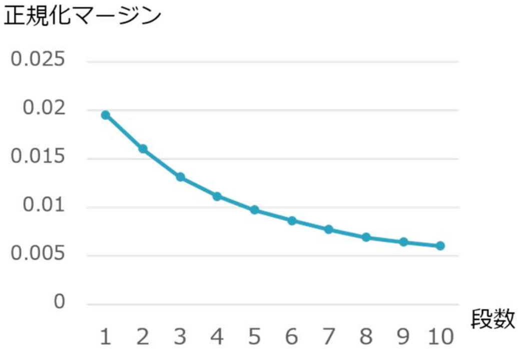

図４：学習タスク（２）に対する正規化マージン．素子数は 2520.

図３は学習タスク（１）対する実験結果である．どのnにおいても，段数が増えるほど正規化マージンの値は高くなっており，回路の段数が正規化マージンに深く影響していることを示唆している．また，層毎の素子の出力が，どれほど特徴写像として分類に貢献しているか合わせて調査したが，どの層に属する素子においても，その貢献の大きさに特徴的な差は確認出来ず，どの層もほぼ等しく分類に利用されていた．一方で，学習タスク（２）に対する実験結果は図４のようになった．こちらは（１）とは異なり，段数を増やすと正規化マージンは減少する結果となった．

この実験結果に加えて，学習タスク（１）に対しては，段数を大きくすることによって，正規化マージンが大きくできるような，具体的なしきい値回路の設計を与えるという理論的成果も得た（主な発表論文等，学会発表[2]）．

上記の実験結果，および理論的結果は，学習タスク（１）を実現するしきい値回路の段数とマージンの間に正の相関関係があることを示唆している．

そこで学習タスク（１）に対する段数と正規化マージンの間の相関関係を理論的に証明することを試みた．その導出にあたり，この学習タスクに含まれているパリティ関数と呼ばれる論理関

数が，この正の相関関係に大きな影響を及ぼしており，パリティ関数に対して実現できるマージンの多寡に焦点を当てることで，正の相関関係に関する理論的な成果を得られるのではないかという着想を得た．しきい値回路のエネルギー計算量と呼ばれる指標はマージンと深いつながりがあり，そのエネルギー計算量が限定されている状況下で素子数が非常に多く必要になることを証明できれば，しきい値回路が実現できるマージンの限界を示すことができる．この事実に着目し，パリティ関数を計算するしきい値回路のエネルギー計算量と段数の関係について，理論的な研究を展開した．

その結果，エネルギー計算量が極端に小さい場合，パリティ関数を計算するしきい値回路の素子数が指数的に必要になることを示した（主な発表論文等，雑誌論文[2]）．また，パリティ関数と類する性質を持つ別の複数の論理関数についても，同様の命題が成立することを示した．この結果の導出にあたっては，エネルギー計算量の小さいしきい値回路の表現能力に関する新しい数学的な構造を導入している．この結果を土台として，さらにエネルギー計算量が定数の場合についても，パリティ関数を計算する定数段数のしきい値回路の素子数が指数的となることを示した．この成果は冬の LA シンポジウム（京都大学数理解析研究所 RIMS 共同研究（公開型）「アルゴリズムと計算理論の新潮流」）にて報告がなされ，LA/EATCS 発表論文賞を受賞している（主な発表論文等，学会発表[1]）．

上記の成果を利用すると，パリティ関数を計算するしきい値回路に対するマージンについて，既存の結果から自明に得られる上界よりもわずかに良い，新しい上界を与えることでき，学習タスク（１）に対して大きなマージンを確保するためには，段数を大きくすることが有用であることが理論的に示された．

上記の成果に加えて，しきい値回路よりも一般的な計算モデルである，閉路を持ち，かつ非対称な構造を持つニューラルネットワークの計算能力についても期間内に研究を行った．特に，入力としてニューラルネットワークの構造，およびそのネットワークが保持しうる計算過程の様相が与えられたとき，その様相から過去に向かって t ステップに遡ることが可能であるかを問う決定問題の計算複雑さを解析した．その結果，この決定問題の計算複雑さが，ニューラルネットワークを構成する素子の能力と，遡るステップ数を表すパラメー タ t の大きさの組合せによって，様々な計算量クラスの完全問題として捉えることができることを示した（主な発表論文等，雑誌論文[3]）．さらに，その様相から t ステップ遡って得られる様相 が，ある特殊な条件を満たしているかどうかを問うものとして新たに定式化された決定問題についてもさらに検討し，その計算複雑さが，元の問題と比べ難化する傾向があることを示した．さらにニューラルネットワークの現在の状況から，過去の状況を計算機を用いて推論できるかという問題の計算困難性，計算容易性を明らかにした（主な発表論文等，雑誌論文[1]）．

これらの成果は，非対称なネットワーク構造を持つニューラルネットワークの計算能力が，ネットワークを構成する素子の能力と，ネットワークが計算に要する時間によって影響を受けることを示唆しており，閉路を持つニューラルネットワークを特徴写像として用いた際に実現できる正規化マージンの研究につながることが期待できる．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文（計 5 件）

[1] Akinori Kawachi, Mitsunori Ogihara, Kei Uchizawa. Generalized predecessor existence problems for Boolean finite dynamical systems on directed graphs. Theoretical Computer. Science, Vol. 762, 25-40, 2018.（査読有り）

[2] Hiroki Maniwa, Takayuki Oki, Akira Suzuki, Kei Uchizawa, Xiao Zhou. Computational Power of Threshold Circuits of Energy at most Two. IEICE Transactions 101-A(9): 1431-1439, 2018. （査読有り）

[3] Mitsunori Ogihara, Kei Uchizawa. Computational complexity studies of synchronous Boolean finite dynamical systems on directed graphs. Information and Computation, Vol. 256, pp. 225-236, 2017. （査読有り）

[4] Akinori Kawachi, Mitsunori Ogihara , Kei Uchizawa. Generalized Predecessor Existence Problems for Boolean Finite Dynamical Systems. Proc. of the 42nd International Symposium on Mathematical Foundations of Computer Science (MFCS 2017), 8:1—13, 2017. （査読有り）

[5] Akira Suzuki, Masashi Kiyomi, Yota Otachi, Kei Uchizawa, Takeaki Uno. Hitori Numbers. Journal of Information Processing, Vol. 25, pp. 695-707, 2017. （査読有り）

〔学会発表〕（計 3 件）

［1］内澤　啓，パリティ関数を計算するエネルギー計算量と段数，冬の LA シンポジウム（京都大学数理解析研究所 RIMS 共同研究（公開型）「アルゴリズムと計算理論の新潮流」），2019 年 2 月 4 日～2019 年 2 月 6 日．

［2］坂口　慶介，内澤　啓，瀧本　英二．正規化マージンを用いたしきい値回路の性能評価．電子情報通信学会総合大会，COMP-ELC 学生シンポジウム，2017 年 03 月 23 日，名城大学．

［3］間庭 宏貴，大木 貴之，鈴木 顕，内澤 啓，周 暁．一般化対称関数を計算するエネルギー効率の良いしきい値回路に関する研究．冬の LA シンポジウム（京都大学数理解析研究所

RIMS 共同研究（公開型）「理論計算機科学の最先端」), 2017 年 2 月 1 日～2017 年 2 月 3 日, 京都大学.

６．研究組織

(1)研究分担者
なし

(2)研究協力者
なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。