

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 15 日現在

機関番号：17102

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2012～2016

課題番号：24106010

研究課題名(和文) 学習理論からの計算限界解明へのアプローチ

研究課題名(英文) Approach from learning theory toward understanding the limitations of computation

研究代表者

瀧本 英二(Takimoto, Eiji)

九州大学・システム情報科学研究所・教授

研究者番号：50236395

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 24,000,000円

研究成果の概要(和文)：学習問題の複雑さ解析を通して、計算に対する新しい解釈、理解をもたらす多くの成果を得た。オンライン予測の解析では、通常最適化問題の複雑さとの等価性に関する重要な未解決問題を部分的に解決した。仮説表現の複雑さ解析では、閉路のあるニューラルネットを一般化した離散力学系と呼ばれるモデル上のいくつかの決定問題が、NP中間層に属することを示唆する結果を得た。文法学習の解析では、部分文字列/部分グラフとその周囲の構造との関係に注目する分布学習という考え方をを用いて、形式文法/形式グラフ文法の学習可能性を大きく進展させる結果を得た。

研究成果の概要(英文)：We made considerable achievements in bringing new insights into "computation", through the analysis of the complexity of learning problems. In the analysis of online prediction, we partially solved an important open problem, stating the equivalence between the complexity of online prediction and that of optimization. In the analysis of the complexity of hypothesis representation, we proposed a few decision problems defined on the discrete dynamical system, which is a generalization of recurrent neural networks. Our analysis suggests that the decision problems belong to an intermediate layer of the class of NP. In the analysis of learning grammars, we employ a breakthrough technique called the distributional learning and obtained many positive results in learning formal (graph) grammars. The distributional learning is a resume of designing learning algorithms by focusing on the relation of substrings/subgraphs and the structures surrounding them.

研究分野：計算学習理論, 計算理論, アルゴリズム

キーワード：計算学習理論 オンライン予測 計算理論 分布学習

1. 研究開始当初の背景

(1) 計算論の立場から学習の過程を理論的に研究することを目指し 1980 年代に誕生した計算学習理論は、いまや計算生物学や金融市場の予測などの周辺領域の分野と融合した真の境界領域の分野に成長した。その背景には、学習過程と学習の成功基準を厳密に定式化した種々の学習モデルの存在がある。例えば、学習理論の重要なブレイクスルーであるブースティングやサポートベクトルマシンは、PAC 学習モデルと呼ばれる統計的学習モデルのもとで理論的な性能保証が与えられている。一方、これらの学習モデルは、計算問題としての学習の困難性を議論することも可能にした。実際、これまでに、多くの概念のクラスの学習問題の NP 困難性が示されている。また最近では、あるクラスが多項式時間学習可能であることを仮定して計算量の下界を導くという新しい解析技法も登場し、学習アルゴリズムが証明の道具としても使われ始めている。これらの結果は、学習モデルが、学習の過程を理論的に議論するための基盤を与えるだけでなく、計算困難さ・計算限界を一般的に議論するための強力な枠組みにもなり得ることを意味している。

(2) 学習は、次の 2 つの側面で通常の計算の逆問題と考えることができる。

① 事例 x と関数 f が与えられたとき、 $f(x)$ の値を求めることが通常の計算問題であるのに対し、統計的学習や帰納的推論など多くの学習モデルでは、事例 x とその値 $f(x)$ から関数 f を推定する問題を扱う。

② 関数 f が与えられたとき、 $f(x)$ を最小にする解 x を求めることが通常の最適化問題であるのに対し、オンライン予測や強化学習モデルでは、解 x を推定した後で関数 f が与えられるというタイプの最適化問題を扱う。

このように逆問題の立場からみると、あらゆる計算の問題を学習の問題と捉えることができる。ただし、学習の材料となるデータは、敵対的あるいは確率的な振る舞いをする環境との対話によって与えられる点、および、そのデータには正解（最適解）を導出するために必要な量の情報が含まれていないという点で、通常の計算問題とは全く異なるアプローチが必要となる。したがって、学習理論により得られた知見は、計算に対するより深い理解をもたらすことが期待できる。

2. 研究の目的

(1) 学習の複雑さの概念と NP 困難性に代表される計算複雑さの概念を結びつける解析手法を開発する。具体的には、まず、学習アルゴリズムが用いる仮説表現の複雑さに着目する。論理回路などのブール関数の表現の複雑さの解析は、それ自体が $P \neq NP$ 問題に対する有望なアプローチであることに加え、学習の効率性、仮説表現の複雑さに強く依存するため、仮説表現の複雑さの解析は、学習の

複雑さと計算複雑さを結び付ける重要な鍵を握る。また、学習の効率に関わる様々な複雑さの尺度に焦点をあてる。例えば、学習の精度を保証するための指標であるサンプル数や質問計算量、オンライン予測の評価基準であるリグレットなどの概念と従来の計算複雑さとの関連を明らかにする。

(2) 対話計算・情報欠損下計算の広いクラスに対するアルゴリズムの設計と解析手法を開発する。特に、意思決定と、その決定に対する環境からのフィードバックが交互に繰り返されるオンライン計算の枠組みは、アルゴリズム理論と学習理論の双方の分野でそれぞれほぼ独立に発展してきたが、それらの違いを比較研究することで、より強力で見通しの良いアルゴリズムの設計と解析手法の体系化を図る。

(3) これらの研究を通して他の研究班に問題提起を行い、領域内の各研究課題の深化を図る。これは、領域全体が掲げる「多面的アプローチの統合」という理念を鑑みたとき、本研究課題の最も重要な使命といえる。もともと境界領域研究の性質を持つ学習理論は、最適化、情報理論、統計、言語理論、グラフ理論、ゲーム理論など、あらゆる分野の手法を貪欲に吸収することによって成長を続けている。逆に、ブースティングやフーリエ解析技術など、学習理論発祥で他の分野に転用された技術も少なくない。本研究では様々な研究グループと連携することでこの動きを一層加速し、計算限界や計算の理解に対する新しい解析技術の創出につなげる。

3. 研究の方法

本研究で掲げた目標を達成するために、以下の研究テーマを軸に研究を行う。

(1) 仮説表現の複雑さの解析

論理回路やしきい値回路など、計算量クラス $P/Poly$ の部分クラスを仮説表現として用いる学習方式の研究が盛んに行われている。本研究では、これらの仮説表現の複雑さを通して計算限界を解析する。また、正例からの帰納学習はデータマイニングの基盤技術の一つとして重要であるが、近年では特に、化学化合物などの構造を持った概念のデータマイニングに対して、形式言語やグラフ言語の帰納学習が成果を上げている。本研究では、文法やグラフクラスの複雑さの観点から、計算限界を解析する。

(2) 学習の複雑さ指標の解析

様々な学習モデルのもとで提案されている、学習の精度や効率を表す複雑さの指標に対する特徴づけや下界の導出手法の開発を行い、計算論へのフィードバックを図る。特に、オンライン予測モデルは、実行後に判明する最適解との性能の差（リグレット）をアルゴ

リズムの指標としているが、リグレットの有効な特徴づけや下界導出手法が知られていないため、これを明らかにすることは大きなブレークスルーにつながる。

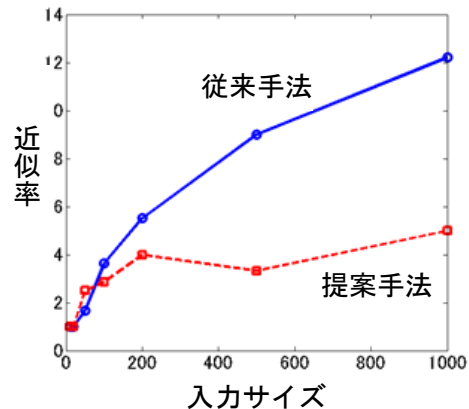
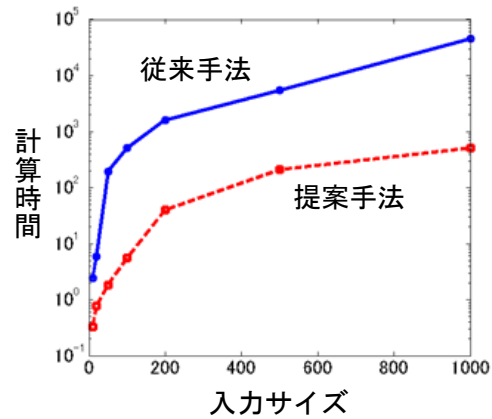
(3) アルゴリズムの設計・解析手法の体系化
各学習モデルで独自に展開されてきたアルゴリズムの設計と解析手法を、最適化や組み合わせ論等の観点から見直し、理論の体系化を図る。例えば、オンライン予測のある問題のクラスに対しては、アルゴリズムの設計スキームが確立しているが、それは、連続緩和と丸め (randomized rounding) という離散最適化の分野における典型的な手法と解釈できる。また、線形分類器の-margin最大化学習など多くの学習問題は、凸最適化問題として定式化できる。さらに、グラフ言語の帰納学習に基づくデータマイニングは、グラフの同型性判定などの組み合わせ問題が本質的である。このような体系化を行うことにより、より広いクラスに対するアルゴリズムの設計と解析手法の開発につなげ、普遍的な対話計算モデルの確立を目指す。

4. 研究成果

代表的な成果を以下に示す。

(1) 離散構造のオンライン予測

オンライン予測とは、意思決定と、その意思決定に対する環境からのフィードバックが交互に繰り返される過程をモデル化したものである。近年、決定空間として組合せ論的に定義された離散構造のクラスを考える場合についての研究が盛んに行われており、組合せ最適化に関する計算限界解明の観点からも重要な問題として注目されている。本研究では、集合被覆問題や MAXSAT など、順方向の最適化問題が連続緩和に基づく多項式時間近似アルゴリズムを持つとき、その逆問題としてのオンライン予測問題に対して、高性能、高効率な多項式時間アルゴリズムを与えることに成功した (雑誌論文⑨)。この結果には、計算に対する新しい理解という点で、次の2つの大きな意義がある。1つめは、性能解析において重要な役割を果たすメタラウンディングと呼ばれる概念が、緩和による近似問題の双対問題であることを初めて見出したことである。2つめは、その双対構造とブースティングによる-margin最大化問題に現れる双対構造の類似性から、ブースティングの手法を用いてメタラウンディングを実現する多項式時間アルゴリズムを与えたことである。下の図は、メタラウンディングとして、楕円体法に基づく従来手法を用いた場合と提案手法を用いた場合のアルゴリズムの計算時間と予測性能 (近似率が小さいほど良い) を示したものである。どちらも従来手法を凌駕しており、実用的な意味でも本成果の意義は大きい。



この成果は、最適化理論からのアプローチを掲げる B01 班と定期的で開催しているワークショップでの人的交流の結果である。特に、この結果の元となった結果 (雑誌論文⑫) は来嶋 (B01) が共著者として名を連ねており、効率の良いラウンディングに関する多くの教示をいただいたことが、この成果につながっている。また、オンライン組合せ最適化問題に関する一連の研究結果 (雑誌論文④, ⑤, ⑪) が評価され、これらの研究で中心的な役割を果たしてきた瀧本と畑埜は、計6件の招待講演を行っている (学会発表①, ②など)。さらに、昨年度、オンライン予測の基礎理論に関する専門書を執筆した (図書①)。

(2) 離散力学系の複雑さ解析

ホップフィールド型ニューラルネットやセルオートマトンなど、いくつかの基本素子からなる回路は、記憶を持つ概念や規則を表すための仮説表現として用いられる。本研究では、これを一般化した離散力学系と呼ばれる計算モデルに対して、いくつかの決定問題を導入し、その複雑さ解析を行った。離散力学系は、各ノードが0か1の状態を取る有向グラフとしてモデル化され、各時刻 t における各ノードの状態は、時刻 $t-1$ における近傍の状態から一意に定まるものである。このようにして、全ノードの状態 (様相と呼ぶ) が各時刻で一斉に更新される。本研究で提案した決定問題の1つである合流問題は、2つの様相が入力として与えられたとき、それぞれの

様相を開始様相として遷移を行った2つの様相系列が、いずれ同一の様相に合流するか否かを問うものである。本研究では、ある局所関数のクラスのもとでは、合流問題が計算量クラス UP に属すること、および、回路最小化オラクルを用いて乱択多項式時間計算可能であることを示した(雑誌論文①)。この結果は、合流問題が NP 完全問題ではなく、NP 中間層に位置することを強く示唆している。これまで、NP 中間層に位置すると予想される問題は、素因数分解やグラフ同型性判定問題以外はほとんど知られておらず、計算論に対する貢献は大きい。

(3) 分布学習方式の展開

分布学習方式は、文脈自由文法に代表される文法族を学習するブレークスルーとして近年注目を集めている。吉仲はこの分野の第一人者で、昨年度 Springer から発行された文法族の学習に関する教科書において、分布学習の章の執筆を担当している(図書③)。分布学習とは、文字列を部分文字列(部分構造)と前後の部分文字列(文脈)に分解し、文脈と部分構造の2項関係に注目することで文法を推定しようという、学習アルゴリズムの設計指針を与えるものである。本研究では、様々な文脈自由文法の部分族が、分布学習方式を用いて、正例から効率的に統計学習可能であることを示すことに成功した(雑誌論文③)。これまで、文脈自由文法族の学習可能性については否定的な結果がほとんどであり、この結果は、文法族の学習可能性を飛躍的に増大するものである。さらに、分布学習方式を世界で初めて形式グラフ文法の学習に適用し、形式グラフ文法が正例から効率よく学習可能となるための十分条件を与えた(雑誌論文②)。これにより、従来では考えられなかったような極めて広いグラフクラスを生成する文法も学習可能であることが明らかになり、今後の展開が期待される。

(4) DFA の最小矛盾問題の複雑さ解析

決定性有限オートマトン(DFA)は、最も基本的な計算モデルの1つであるが、様々な学習モデルのもとで、多項式時間で学習する問題が NP 困難であることが知られている。その根拠となるのが、DFA の最小無矛盾問題の NP 困難性である。最小無矛盾問題とは、正例と呼ばれる文字列集合と負例と呼ばれる文字列集合が入力として与えられたとき、すべての正例を受理し、すべての負例を受理しない最小状態数の DFA を求める問題である。このような学習困難な問題に対する典型的なアプローチは、文法に何らかの制約を加えた部分族の学習可能性を探求することである。これに対し、本研究では、入力される事例集合を制限することにより、DFA の学習困難性が緩和されるかどうかを検討した。その結果、入力として与えられるすべての事例が、ある1つの文字列の接頭辞であると仮定しても、

DFA の最小無矛盾問題は依然として NP 困難であり、さらに定数近似も不可能であることを示した(学会発表③)。入力データを制限するこのアプローチは、近年注目を集めている“Beyond the worst case”や“Learning from easy data”と呼ばれるパラダイムに通じるものであり、P と NP の境界を見極めるための新しい材料を提示したといえることができる。

(5) 線形決定木のサイズの指数下界の導出
線形決定木とは、線形しきい値関数を内部ノードの分類規則として持つ決定木であり、表現能力の高い仮説表現として知られている。一方、各線形しきい値関数の重みの大きさに制限をおくと、線形決定木の計算能力が低下することが知られており、その低下の大きさを解析する研究が盛んに行われている。本研究では、GF(2)上の内積と呼ばれる論理関数を計算する線形決定木のサイズについて、各線形しきい値関数の重みの L1 ノルムが制限されているという条件のもとで、指数下界を導出することに成功した(雑誌論文⑦)。これは、同じ条件のもとでの既存の下界を改善するものであり、現在の世界記録となっている。

(6) 非有界決定空間上のリグレット解析
有界な決定空間上の凸関数に対するオンライン予測問題は、アルゴリズムの設計と解析手法が確立している。一方、非有界な決定空間上の問題に対しては、どのような場合に非自明なリグレット上界を持つか、ほとんど分かっていない。本研究では、非有界な決定空間を持つ問題として、 n チーム間の勝敗に関する確率モデルである Bradley-Terry モデルのオンライン密度推定問題に注目し、そのリグレット解析を試みた。その結果、決定空間の直径を抑える効果がある仮想的な試行を導入することと、目的関数の凸性を精密に解析することにより、非自明なリグレット上界を導出することに成功した(雑誌論文⑥)。この手法は、オンライン予測の適用範囲を著しく広げる可能性を秘めており、今後の展開が期待される。

(7) 回路のパターン数計算の複雑さ解析
論理回路は最も基本的な仮説表現であり、その計算能力の解明は P≠NP 問題の解決につながる。内沢らは、論理回路の複雑さの指標としてパターン数という指標を提案しており、線形しきい値回路のパターン数が、その回路と等価な線形決定木のサイズの上界を与えることを示している。したがって、与えられた回路のパターン数を求めることは有用である。本研究では、このパターン数計算の複雑さについて、2 入力で単一の素子からなる論理回路が入力として与えられたとき、多項式時間で数え上げが可能な場合と、NP 完全となる場合のどちらかになるという二分定理

を与えた(雑誌論文⑩). またこれにより, パターン数計算問題は, ほとんどの回路クラスで#P 完全となることが明らかになった. この結果は, 仮説表現の複雑さ指標と計算複雑さとの関連を示すものであり, 計算論に新しい知見をもたらしたものといえる.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 116 件)

- ① Mitsunori Ogiwara, Kei Uchizawa: Computational Complexity Studies of Synchronous Boolean Finite Dynamical Systems on Directed Graphs, Information and Computation, to appear.
- ② Takayoshi Shoudai, Satoshi Matsumoto, Yusuke Suzuki: Distributional Learning of Regular Formal Graph System of Bounded Degree, Proc. 26th International Conference on Inductive Logic Programming (ILP 2016), Revised Selected Paper, LNAI, to appear, 2017, 査読有
- ③ Chihiro Shibata, Ryo Yoshinaka: Probabilistic Learnability of Context-Free Grammars with Basic Distributional Properties from Positive Examples. Theoretical Computer Science, Vol. 620, 46-72, 2016, 査読有.
DOI: 10.1016/j.tcs.2015.10.037
- ④ Nir Ailon, Kohei Hatano, Eiji Takimoto: Bandit Online Optimization Over the Permutahedron, Theoretical Computer Science, Vol. 650, 92-108, 2016, 査読有.
DOI: 10.1016/j.tcs.2016.07.033
- ⑤ Takahiro Fujita, Kohei Hatano, Shuji Kijima (B01 班), Eiji Takimoto: Online Linear Optimization for Job Scheduling under Precedence Constraints, Proc. 26th International Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT 2015), LNAI 9355, 332-346, 2015, 査読有.
DOI: 10.1007/978-3-319-24486-0_22
- ⑥ Issei Matsumoto, Kohei Hatano, Eiji Takimoto: Online Density Estimation of Bradley-Terry Models, Proc. 28th Conference on Learning Theory (COLT 2015), JMLR W&CP, Vol. 40, 1343-1359, 2015, 査読有.
<http://proceedings.mlr.press/v40/>

Matsumoto15.html

- ⑦ Kei Uchizawa, Eiji Takimoto: Lower Bounds for Linear Decision Trees with Bounded Weights, Proc. 41st International Conference on Current Trends in Theory and Practice of Computer Science (SOFSEM 2015), LNCS 8939, 412-422, 2015, 査読有.
DOI: 10.1007/978-3-662-46078-8_34
 - ⑧ Eiji Takimoto, Kohei Hatano: Efficient Algorithms for Combinatorial Online Prediction, Proc. 24th International Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT 2013), LNAI 8139, 22-32, 2013, 査読有.
DOI: 10.1007/978-3-642-40935-6_3
 - ⑨ Takahiro Fujita, Kohei Hatano, Eiji Takimoto: Combinatorial Online Prediction via Metarounding, Proc. 24th International Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT 2013), LNAI 8139, 68-82, 2013, 査読有.
DOI: 10.1007/978-3-642-40935-6_6
 - ⑩ Kei Uchizawa, Zhenghong Wang, Hiroki Morizumi, Xiao Zhou: Complexity of Counting Output Patterns of Logic Circuits, Proc. 19th Computing: the Australasian Theory Symposium (CATS 2013), CRIPT 141, 37-42, 2013, 査読有.
 - ⑪ Daiki Suehiro, Kohei Hatano, Shuji Kijima (B01 班), Kiyohito Nagano, Eiji Takimoto: Online Prediction under Submodular Constraints, Proc. 23rd International Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT 2012), LNAI 7568, 260-274, 2012, 査読有.
DOI: 10.1007/978-3-642-34106-9_22
 - ⑫ Shota Yasutake, Kohei Hatano, Shuji Kijima (B01 班), Eiji Takimoto, Masayuki Takeda: Proc. 4th Asian Conference on Machine Learning (ACML 2012), JMLR W&CP, Vol. 25, 539-553, 2012, 査読有.
<http://proceedings.mlr.press/v25/yasutake12.html>
- [学会発表] (計 102 件)
- ① Kohei Hatano: Combinatorial Online Prediction via Metarounding, TCE Guest Lecture, 招待講演, 2013 年 12 月 16 日, Heifa (Israel)
 - ② Eiji Takimoto: Efficient Algorithms

for Combinatorial Online Prediction, The 24th International Conference on Algorithmic Learning Theory (ALT 2013), 招待講演, 2013年10月8日, Singapore (Singapore)

- ③ Kaori Ueno, Shinichi Shimozone, Kazuyuki Narisawa, Ayumi Shinohara: On the Hardness of Approximating the Minimum Consistent DFA from Prefix Samples, IICALP 2013 Satellite Workshop on Learning Theory and Complexity, 2013年7月7日, Riga (Latvia).

[図書] (計5件)

- ① 畑埜晃平, 瀧本英二: 講談社サイエンスイフィク, オンライン予測 (機械学習プロフェッショナルシリーズ), 2016, 176.
- ② Remi Eyraud, Jeffrey Heinz, Ryo Yoshinaka: Springer, Topics in Grammatical Inference (Chapter 2: Efficiency in the Identification in the Limit Learning Paradigm), 2016, 247 (25-46).
- ③ Alexander Clark, Ryo Yoshinaka: Springer, Topics in Grammatical Inference (Chapter 6: Distributional Learning of Context-Free and Multiple Context-Free Grammars), 2016, 247 (143-172).
- ④ 瀧本英二: 日本評論社, 学習の複雑さと計算の複雑さ (数学セミナー2013年12月号, 特集「 $P \neq NP$ 予想最前線」), 2013, 36 (28-33).

[その他]

- (1) アウトリーチ活動状況
- ① 2013年7月7日に, Workshop on Learning Theory and Complexity を, 国際会議 IICALP の併設ワークショップとして開催し, 本研究の成果発表を行った. (実行委員の1人を瀧本が勤めた.)
- ② 2014年9月16日に, ELC Workshop on Learning Theory and Complexity を, 国際会議 ICGI の併設ワークショップとして開催し, 本研究の成果発表を行った. (実行委員長: 瀧本, 吉仲)
- ③ 2014年8月1日に, 京都大学数理解析研究所「組合せ最適化セミナー」で, 若手研究者および学生向けに, オンライン予測に関する集中講義を行った (瀧本).
- ④ 領域のニュースレター ELCNOW Vol.3 (2016年9月26日発行) で, 瀧本の研究が紹介された. このニュースレターは,

全国のスーパーサイエンスハイスクール等に配布された.

(2) ホームページ

<http://www.i.kyushu-u.ac.jp/~eiiji>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

瀧本 英二 (TAKIMOTO, Eiji)
九州大学・システム情報科学研究院・教授
研究者番号: 50236395

(2) 研究分担者

篠原 歩 (SHINOHARA, Ayumi)
東北大学・情報科学研究科・教授
研究者番号: 00226151

正代 隆義 (SHOUDAI, Takayoshi)
九州国際大学・国際関係学部・教授
研究者番号: 50226304

畑埜 晃平 (HATANO, Kohei)
九州大学・附属図書館・准教授
研究者番号: 60404026

内沢 啓 (UCHIZAWA, Kei)
山形大学・理工学研究科・准教授
研究者番号: 90510248

吉仲 亮 (YOSHINAKA, Ryo)
東北大学・情報科学研究科・准教授
研究者番号: 80466424

(3) 研究協力者

津田 宏治 (TSUDA, Koji)
CUTURI Marco