

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 2 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K22842

研究課題名(和文) 数学の自動化を推進するための機械学習を用いた定理自動証明手法

研究課題名(英文) Automated Theorem Proving with Machine Learning for Automating Mathematics

研究代表者

末永 幸平 (Suenaga, Kohei)

京都大学・情報学研究科・准教授

研究者番号：70633692

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究においては、数学における証明タスクを計算機によって一部自動化することを最終的な目標とし、整数上の制約付き線形ホーン節(CHC)と呼ばれる形式で記述された制約のための自動証明手法の研究を行った。特にCHCを解く上で重要な述語発見を高速化するために強化学習を用いた。そのためにCEGISを強化学習の問題として再定式化し、CHC制約をソルバが解くまでの時間の負値を報酬とした上で、強化学習によってソルバが用いるヒューリスティクスを学習した。その結果、人手によって注意深くチューニングされたソルバを、解けた制約数の点でも実行時間の点でも上回るヒューリスティクスが得られうことを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近代の自然科学や産業の発展は、数学を用いて抽象力と信頼性の高い理論を構築し、その理論を様々な分野に適用することにより支えられているといっても過言ではない。また、証明支援はプロパーな数学にとってのみ重要なわけではなく、自動プログラム検証手法においてもコアな技術となっている。本研究の成果は記号処理に基づく自動証明手法と統計的機械学習に基づくヒューリスティクス探索が2つの潮流を合流させるためのスイートスポットであることを示すものである。この成果をベースとして、より複雑かつ非自明な自動証明手法につなげることで、数学に対しても形式検証に対してもインパクトを与える手法が得られるものと期待される。

研究成果の概要(英文)：We aimed at partially automating proof tasks in mathematics. As the first step towards this goal, we studied automatic proof methods for constraints expressed as constrained linear Horn clauses (CHC) on integers. In particular, we used reinforcement learning to speed up predicate discovery, which is an essential step in solving CHCs. For this purpose, we reformulated CEGIS as an MDP and learned the heuristics used by a solver by reinforcement learning. We used the negative value of the time spent by the solver to solve the CHC constraint as the reward. The results showed that the heuristics outperformed carefully tuned human solvers in terms of both the number of constraints solved and execution time.

研究分野：プログラム検証

キーワード：強化学習 自動証明 制約付きホーン節

1. 研究開始当初の背景

現代のほぼすべての自然科学の核には数学が用いられている。近代の自然科学や産業の発展は、数学を用いて抽象力と信頼性の高い理論を構築し、その理論を様々な分野に適用することにより支えられているといっても過言ではない。数学においては、命題に対する厳密な証明を行うことで信頼性の高い理論を展開するが、正しい証明の記述は一般に容易ではなく、数学的理論の構築において最も時間を要するタスクの一つとなっている。したがって、計算機による証明記述の支援によって、計算機科学が数学の発展に寄与することができると期待される。

また、証明支援はプロパーな数学にとってのみ重要なわけではない。本研究課題の参加者が専門とする自動プログラム検証手法の研究においては、自動定理証明が有用な要素技術となっている。より具体的には、「プログラムが想定通りに動作する」という性質を、ある命題を証明する問題に帰着し、その問題を SMT ソルバと呼ばれる自動証明器を用いて生成することが多い。これらのソルバは研究開始当初においては記号操作によって証明生成を行うものがほとんどであった。

他方、近年様々なタスクにおける統計的機械学習の有用性が確立されつつあり、代表者らはこれらの技術の自動証明に対する適用可能性に興味を持った。このアイデアの feasibility study を行うために、代表者の末永と分担者の関山は深層学習を用いた命題論理のための自動証明器を教師付き学習を用いて実装し、その性能を検証した [1]。この研究においては、テスト用に用意した命題論理式の 93% 程度について正しい証明が生成されることを確認した。この成果はプログラミング言語に関する国際会議に査読を経て採択されている。この結果は、少なくともシンプルな論理体系においては統計的機械学習が自動証明タスクに適用可能であることを示しており、この方向性を追求することでより表現力の高い論理体系に対する自動証明器の実現の可能性を信じるに至った。ただし、論文 [1] の結果においては教師データが少ない推論規則を使用する証明が必要な命題についての成績が上がりにくいという問題があり、より複雑な論理体系への拡張においては、未知戦略の探索によって希少な推論規則にも対応することができるような強化学習手法がより適しているのではないかと考えるに至った。

2. 研究の目的

本研究においては、数学における証明タスクを計算機によって一部自動化することを最終的な目標とした。研究開始時点ではペアノ算術に対する自動証明手法の研究を行うことを目的としていたが、その後研究を進める過程で、純粋なペアノ算術よりもより命題が記述しやすく、かつプログラム検証においても有用な論理体系を対象とすることが適切であると判断したため、整数上の制約付き線形ホーン節 (CHC) と呼ばれる形式で記述された制約のための自動証明手法の研究を行った。CHC は、例えば以下のように記述される制約である。

$$\begin{aligned} \exists F. \forall x, y, z. \quad & x = 0 \wedge y = z \wedge z \geq 0 \implies F(x, y, z) \quad \wedge \\ & y > 0 \wedge F(x, y, z) \implies F(x + 1, y - 1, z) \quad \wedge \\ & y \leq 0 \wedge F(x, y, z) \implies x = z. \end{aligned}$$

ここで F は述語を表す変数を、 x, y, z は整数を表す変数である。この制約が正しいことを示すためには、 $F(x, y, z)$ として $y \geq 0 \wedge x + y - z = 0$ を取ることができることを発見する必要があり、逆にこの述語が F として適切であることを発見できれば、証明の残りのプロセスはほぼ自明に既存の記号操作を用いる手法によって高速に行うことができる。したがって、この述語発見をいかに高速に行うかが CHC 制約を高速に解くために重要である。本研究においては、この述語発見の高速化に強化学習を用いた。

CHC 制約はプログラム検証において非常に重要な役割を持っている。例えば、この制約は以下のプログラムが任意の $a \geq 0$ について終了時点で $x = z$ を満たすための十分条件になっている。

```
(x, y, z) := (0, a, a);
while y > 0 do (x, y, z) := (x + 1, y - 1, z) done
```

このように、プログラムが意図通りに動作することの検証を CHC 制約に還元することは一般的な戦略であり、本研究はその意味においても重要な意義を有する。

3. 研究の方法

Counterexample-guided inductive synthesis (CEGIS) と呼ばれる CHC 制約によく用いられる手法に基づくソルバの性能を強化学習によって改善するという方向で研究を行った。CHC 制約が与えられると、CEGIS に基づく CHC ソルバは上記の例の F に相当する述語変数として用いるべき述語を推測し、その推測を SMT ソルバ等によって検証する。推測が外れていた場合は、SMT ソルバから返される反例を用いて推測を更新し、正しい推測が得られるまでこれを繰り返す。

多くの CEGIS ソルバは、述語の集合を何らかの形で保持し、その集合から反例に矛盾しない述語を推測のステップにおいて返す。このときに、反例に矛盾しないような推測が存在しない場合は、何らかのヒューリスティクスによって述語集合を拡張し、さらに述語の探索を行う。このヒューリスティクスは、CEGIS ソルバの性能に大きな影響があるにも関わらず、多くの場合手作業でアドホックにチューニングされることが多かった。

本研究においては、CEGIS を強化学習の問題として再定式化した。この定式化において CEGIS ソルバは述語の推測が不可能になった時点でエージェントにどのように述語集合を拡張するかを問い合わせる。エージェントはポリシーに従って、どのように述語集合を拡張すべきかを指示するアクションを発行する。このアクションにしたがって述語集合が拡張され、CEGIS ループが継続される。

学習の過程においては、学習データとして提供される制約の集合を解くためにかかった時間に応じて報酬が算定される。報酬を最大化するようにポリシーを学習することで、述語集合を拡張するための良いヒューリスティクスが得られると期待される。この方針に基づき、CEGIS ソルバの一つである PCSat [3, 4] のヒューリスティクスのチューニングを行い、その効果を検証した。

4. 研究成果

本研究によって得られた CEGIS アルゴリズムのマルコフ決定過程としての定式化は論文 [2] に記載した。本報告では強化学習によって得られたヒューリスティクスによる CEGIS アルゴリズムの改善について簡潔に記載する。詳細は論文 [2] を参照されたい。

本研究では CHC ソルバのコンペティションである SyGuS-Comp 2019 のベンチマークを用いてポリシーの学習と効果の検証を行った。学習においては first-visit on-policy Monte Carlo (MC) と Advantage Actor-Critic (A2C) の 2 つの手法を用いた。学習は 200 epochs 行い、訓練データにおいて最良の性能を得たポリシーをテストデータで評価した。評価にあたっては、既存のソルバのうち (1) 開発者によってヒューリスティクスをチューニングした PCSat, (2) 記号操作に基づく手法によって実装されている既存ソルバ (CVC4 [5], LoopInvGen [6], HoICE [7], Eldarica [8], FreqHorn [9] and Spacer [11]), (3) 深層学習によって実装されているソルバである Code2Inv [10] との比較を行った。LoopInvGen と CVC4 はそれぞれ SyGuS-Comp 2018 と 2019 でのトップの成績を収めたソルバである。実験に用いた環境は 2.8GHz Intel(R) Xeon(R) CPU with 64 GB RAM and a Tesla V100 GPU with 16GM RAM である。

表 1 に実験結果を示す。Methods の列は用いたソルバを表す。PCSat/ から始まるソルバは、以下のそれぞれ異なるポリシーをアクション選択時に用いる PCSat を表す。PCSat/random はランダムにアクションを選ぶポリシー、PCSat/expert は手作業でチューニングされたポリシー、PCSat/MC は MC で学習されたポリシー、PCSat/A2C は A2C で学習されたポリシーである。各行の数値はベンチマーク中の問題に対して制約が充足可能であったことを表す応答の数 (sat), 充足不能であったことを表す応答の数 (unsat), タイムアウトした問題数 (timeout), 全問題を解くのににかかった時間 (time (s)) をそれぞれ表す。実験結果からは強化学習によって得られたポリシー (PCSat/A2C と PCSat/MC の双方) は random と expert に比べてタイムアウト回数と実行時間のそれぞれについて性能の改善が見られることが見て取れる。

表 1 実験結果.

Methods	sat	unsat	timeout	time(s)
FreqHorn	70	0	101	6863
LoopInvGen	87	5	79	5086
CVC4	102	9	60	3873
PCSat/random	116	9	46	3383
Eldarica	122	9	40	3714
PCSat/expert	135	9	27	2130
HoICE	141	8	22	1707
PCSat/A2C	145	9	17	1947
PCSat/MC	146	9	16	1550
Spacer	156	9	6	380

参考文献

- [1] Taro Sekiyama and Kohei Suenaga: Automated proof synthesis for the minimal propositional logic with deep neural networks. *APLAS 2018*, pp. 309–328.
- [2] Takeshi Tsukada, Hiroshi Unno, Taro Sekiyama, Kohei Suenaga: Enhancing loop-invariant synthesis via reinforcement learning. *CoRR abs/2107.09766 (2021)*
- [3] Yuki Satake, Hiroshi Unno, Hinata Yanagi: Probabilistic inference for predicate constraint satisfaction. *AAAI 2020*: 1644-1651
- [4] Hiroshi Unno, Tachio Terauchi, Eric Koskinen: Constraint-Based Relational Verification. *CAV (1) 2021*: 742-766
- [5] Andrew Reynolds, Haniel Barbosa, Andres Nötzli, Clarke Barrett, Cesare Tinelli: *cvc4sy*: Smart and Fast Term Enumeration for Syntax-Guided Synthesis. *CAV 2019*, pp.74–83.
- [6] Saswat Padhi, Todd D. Millstein, Aditya V. Nori, Rahul Sharma: Overfitting in Synthesis: Theory and Practice. *CAV 2019*, pp.315–334.
- [7] Adrien Champion, Tomoya Chiba, Naoki Kobayashi, Ryosuke Sato: ICE-Based Refinement Type Discovery for Higher-Order Functional Programs. *TACAS 2018*, pp.365–384.
- [8] Hossein Hojjat, Rümmer, Philipp: The Eldarica Horn Solver. *FMCAD 2018*, pp.1–7.
- [9] Grigory Fedyukovich, Samuel J. Kaufman, Rastislav Bodík: Sampling invariants from frequency distributions. *FMCAD 2017*, pp.100–107.
- [10] Xujie Si, Aaditya Naik, Hanjun Dai, Mayur Naik, Le Song: Code2Inv: A Deep Learning Framework for Program Verification. *CAV 2020*, pp.151–164.
- [11] Anvesh Komuravelli, Arie Gurfinkel, Sagar Chaki: SMT-Based Model Checking for Recursive Programs. *CAV 2014*, pp.17–34.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hatakeyama Yuhki, Sakuma Hiroki, Konishi Yoshinori, Suenaga Kohei	4. 巻 12624
2. 論文標題 Visualizing Color-Wise Saliency of Black-Box Image Classification Models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACCV 2020	6. 最初と最後の頁 189 ~ 205
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-030-69535-4_12	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takamasa Okudono, Masaki Waga, Taro Sekiyama, and Ichiro Hasuo	4. 巻 -
2. 論文標題 Weighted Automata Extraction from Recurrent Neural Networks via Regression on State Spaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of AAAI '20	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Takamasa Okudono
2. 発表標題 Weighted Automata Extraction from Recurrent Neural Networks via Regression on State Spaces
3. 学会等名 AAAI '20（国際学会）
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

プレプリント

Takeshi Tsukada, Hiroshi Unno, Taro Sekiyama, Kohei Suenaga:
Enhancing Loop-Invariant Synthesis via Reinforcement Learning. CoRR abs/2107.09766 (2021)

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	塚田 武志 (Tsukada Takeshi) (50758951)	千葉大学・大学院理学研究院・准教授 (12501)	
研究分担者	関山 太郎 (Sekiyama Taro) (80828476)	国立情報学研究所・アーキテクチャ科学研究系・助教 (62615)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
オーストラリア	Australian National University		