代数ニューラルネットワークの Coq における形式化

千葉大学大学院　理学研究科　基盤理学専攻　井上健太

2016/11/20

概要

今日、機械学習の分野で, ニューラルネットワークと呼ばれるグラフを用いて学習を行う, ディープラーニングと呼ばれる手法が大きな注目を集めている. しかし, このニューラルネットワークにおいてその学習が行われるメカニズムや, 与えられた問題に対し, それを解くのに最適な構造が判明しておらず, また学習後のニューラルネットワークの正当性の判定もあいまいである等, ブラックボックスとして利用されているのが現状である. そこで本発表ではニューラルネットワークの構造を数学的な手法で解明することを目的とする. 具体的には, ニューラルネットワークを代数を用いて記述し, これのもつ性質を考察する. これを代数ニューラルネットワークと呼ぶことにする. 代数ニューラルネットワークの持つ性質を調べることでニューラルネットワークの構造の解明を行う. 代数を用いて記述をするのは, 現在ニューラルネットワークは実数値のみを使用するがほとんどであるが, 実数ではなく, ある条件を満たす集合として代数で記述した方がニューラルネットワーク固有の性質を調べるのに向いており, また, 実数以外の集合でもニューラルネットワークに応用できることが期待できるためである. 今回, 代数ニューラルネットワークの証明支援系 Coq を用いた形式化についての発表を行う. 証明支援系とは, プログラム検証や数学の定理証明に用いられるプログラムであり, 成り立ってほしい性質を命題の形で記述し, その証明を行うことができるものである. 証明支援系を用いるのは, 代数ニューラルネットワークの持つ性質の正当性を保証し, 代数ニューラルネットワークの持つ性質のライブラリを作成することによって, 他の機械学習の研究に利用, 応用できるようにするためである. 研究成果として, 代数ニューラルネットワークの定義や簡単な性質まとめたライブラリを作成したことが挙げられる. また, 実際にこのライブラリを用い, EXOR 問題を一般化した問題である符号問題の解を持つニューラルネットワーク, 持たないニューラルネットワークの存在性についての証明を行い, ニューラルネットワークのもつ性質について考察を行った. またこれを多次元化した問題を解き, ニューラルネットワークの多層化についての考察も行った. これによって, 実際に機械学習を行う問題が与えられた時, どのような構造のニューラルネットワークで学習させればいいのかという問題の答えに 1 歩近づくことができたと考えている.

1　お詫び

本論文の投稿にあたり, 現在, 他の学会にて同内容の論文投稿を考えており, 二重投稿を避けるため, 本論文では結論と実際に夏のプログラムシンポジウムで行われた質疑応答についてのみ記述する.

2　まとめ

本発表ではニューラルネットワークを代数を用いて記述した代数ニューラルネットワークを定義し, これを Coq 上での記述を行なった. また代数ニューラルネットワークを使った問題として符号問題を挙げ, これを解く代数ニューラルネットワークの存在性の証明を行なった.

3 質疑応答

ここでは夏のプログラムシンポジウムで実際にあった質問と, それに対する回答を記述する.

Q. この代数で記述するアプローチは逆数学ではないのか. また符号問題を解いた時の仮定で, 群の可換性は除去できないのか (伊知地様)

A. 前者の質問に関して, 逆数学におけるアプローチと同じように, できるだけ少ない仮定や代数構造で証明できないだろうかというアプローチをとっている. 本研究では, この代数構造のことを公理と呼んでいるが, 逆数学における”公理”とはどうやら論理体系におけるもののみに限定しており, どうやら代数構造に関しては, 例えば群における代数構造のことを”群の公理”ではなく, ”群の定義”という名前で述べられているらしいように感じる. 本研究は論理体系について調査を行うというより, 代数構造に関して, できるだけ小さい構造を見つけたいという立場を取っているので, おそらく逆数学と呼ばれる学問とは少し違うだろうと感じる. また, 可換性に関しては, 除去可能かどうかはまだわかっていない. 私の行なった証明では, 符号問題の定義式が対称式であることを利用し, 可換性を用いてその対称性を利用した証明になっているが, その対称性を利用せずに証明が行えるかどうか, または反例が存在するかどうかはまだわかっていない.

Q. 符号問題の公理系*[1]の意味と順番の意味はあるのか (久野様)

A. ある公理系から伸びている公理系は, 元の公理系に 1 つ別の代数構造を追加したものになっており, この矢印の方向は, 追加した代数構造が出力の集合に関するもの, 係数の集合に関するもの, その他の代数構造かどうかで変わっている. また, ある公理系から矢印を戻ってでたどり着けるものの公理系を含んでいるため, 矢印で戻ってたどり着ける公理系で成り立つ性質は元の公理系で成り立つことが言える.

Q. 符号問題の解の存在性は 3^n 次以外の場合は成り立つのか*[2](美馬様)

A. 任意の自然数 n に関しても, それより大きい次元の符号問題が解ければ, n 次符号問題を解くニューラルネットワークは存在すると言う定理を証明したので, 任意の自然数に対しても符号問題の解は存在する.

Q. 符号問題を解くニューラルネットワークの最小性は言えるのか

A. ここでは符号問題を解くニューラルネットワークの存在性しか証明しておらず, 一般にここで示したニューラルネットワークの構造が最小*[3]であるとは限らない. しかし多層化する議論において, 多層化したニューラルネットワークにはすでにニューロン数が線形オーダーの解が存在しているということは重要な点であり, 最小なものが存在するとすれば, 線形オーダーより小さくなるはずであるということがわかる.

*[1] 発表では符号問題を証明したときの代数構造に関してのグラフがあった.

*[2] 発表では任意の自然数 n に関する n 次符号問題の解の存在性については時間の都合上説明しなかった.

*[3] そもそもニューラルネットワークの最小性とは何かという議論が必要で, おそらく最小性よりも極小性を定義する方が自然だろうと考えている.