直交計画を用いたブール関数の学習に関する一考察

浮田 善文^{†a)} 敏泰≒ 松嶋

A Note on Learning Boolean Functions by Using Orthogonal Design Yoshifumi UKITA^{†a)}, Toshiyasu MATSUSHIMA^{††}, and Shigeichi HIRASAWA^{††}

あらまし 本論文では,質問する入力集合があらかじめ固定されている一括型所属性質問によりブール関数を 学習する問題を扱う.まず,実験計画法と質問からのブール関数の学習との関係を明らかにし,ブールドメイン 上の実数値関数に対するサンプリング定理が直交計画の特別な場合として与えられることを示す、次に、今まで の計算論的学習理論では扱われていない概念クラス(どの変数同士の値の組合せが関数値に影響を与える可能性 があるかといった細かい情報も制約に加えたクラス)を提案する.このクラスに真のブール関数が含まれる場合, 質問する入力集合を直交計画とすることで真のブール関数を必ず出力できることを示す、更に、多次元高速フー リエ変換アルゴリズムを用いることで,質問後にブール関数を決定する際の計算量を削減できることを示す.

キーワード 所属性質問からの学習,ブール関数,実験計画法,直交計画,高速フーリエ変換

1. まえがき

質問からのブール関数の学習問題は計算論的学習理 論の立場から多くの研究が行われている[5]~[7].こ こでは,ブール変数の個数n,サイズを表すパラメー タsにより規定されたブール関数のクラス(概念クラ ス)に対し,どの種類の質問を用いた場合にパラメー タn,s の多項式時間で学習可能かどうかが明らかに されている. 例えば, 単調 DNF と呼ばれる概念クラ スに対し,所属性質問と等価性質問を用いて真のブー ル関数に含まれる項を一つずつ見つけることで, n, sと質問回数の多項式時間で学習するアルゴリズムが示 されている[5],[6].

ところで、クラスが与えられたもとで、質問を行い 真のブール関数を見つける問題と類似の問題は、信号 処理や実験計画法の分野でも研究されている.

信号が周波数 t 以上の高次の周波数成分をもたない 帯域制限信号クラスに含まれる場合,ナイキストのサ ンプリング定理 [19] により, 周期が 1/(2t) より小さ

い標本点集合から、もとの信号を完全に復元すること ができる、このため、信号は周波数成分の直交基底を 用いて表現されている.近年では,直交基底により表 現された実数値関数やブール関数の学習について研究 が行われている[1]~[4]. 瀧本ら[1] は, ブールドメイ ン上の実数値関数に対してもサンプリング定理と同様 な定理が成り立つことを示し,計算論的な立場から学 習可能性について論じている.

一方,統計学の実験計画法でも,関数は直交基底によ り表現されており,高次の成分をもたない関数クラス を対象に古くから多くの研究が行われている[11],[12]. ただし,実験計画法では,どの変数同士の値の組合せ が関数値に影響を与える可能性があり、どの変数同士 の値の組合せがそうでないかが,実験前にわかる場合 が多く,この情報も制約に加えたクラス(注1)を扱う.実 際に実験を行うことを考えた場合、関数値に影響する 可能性のある変数(変数同士)の効果を調べることが 可能で実験回数が最小となる実験計画を求めることが 要求される.このため,同じ実験回数の実験計画の中 で最適(各係数の不偏推定量の分散の最大値が最小) な実験計画である直交計画に関する研究が多く行わ れている.しかし,変数の個数などの多項式時間で学

[†]横浜商科大学商学部経営情報学科,横浜市

Yokohama College of Commerce, 4-11-1 Higashi-terao, Tsurumi-ku, Yokohama-shi, 230–8577 Japan

^{††} 早稲田大学理工学部経営システム工学科,東京都

School of Science and Engineering, Waseda University, 3--4--

¹ Ohkubo, Shinjuku-ku, Tokyo, 169-8555 Japan

a) E-mail: ukita@shodai.ac.jp

⁽注1):制約する条件に関する情報は細かいものが必要だが,実験計画 法や統計解析ではこのような制約をおくことが通常であり,実用上多く の対象や場面に応用されている重要なクラスとなっている.

習可能かといった計算論的な立場からの研究は見られ ない.

このように,3分野(質問学習,信号処理,実験計画法)の問題は,クラスに制約をおくことで,ドメインのある部分集合に対してのみ,質問やサンプリングや実験を行うだけで,真の関数の同定が可能になるという点では共通である.しかし,計算論的学習理論では多項式時間学習可能なクラスの制約を明らかにすることが主な目的であり,実験計画法で扱われている実用的で有用なクラス(細かい情報も制約に加えたクラス)を効率的に学習するという考えはこれまで見られなかった.また,これら3分野間の関係さえも明らかにされていなかった.

本論文では,質問する入力集合があらかじめ固定されている一括型所属性質問によりブール関数を学習する問題を扱う.まず,実験計画法と質問からのブール関数の学習との関係を明らかにし,ブールドメイン上の実数値関数に対するサンプリング定理が直交計画の特別な場合として与えられることを示す.次に,今までの計算論的学習理論では扱われていない概念クラス(どの変数同士の値の組合せが関数値に影響を与える可能性があるかといった細かい情報も制約に加えたクラス)を提案する.このクラスに真のブール関数が含まれる場合,質問する入力集合を直交計画とすることで真のブール関数を必ず出力できることを示す.

ここで質問回数を考えた場合,実験計画法での実験回数 $^{(\pm 2)}$ に比べ,より大きい質問回数を用いる場合が考えられる.このとき,質問結果からブール関数を決定するときの計算量が問題となる.そこで,多次元高速フーリエ変換(Fast Fourier Transform:FFT)アルゴリズムであるベクトルラディックス FFT [19] を用いることで,質問後にブール関数を決定する際の計算量を削減できることを示す.

以下で、本論文の流れを説明しておく、まず 2. で準備として、必要な記号の定義と直交基底による関数の表現を与えておく、3. では、実験計画法について、モデルと直交計画を中心に説明する、4. では、本論文と関連が深いブールドメイン上の実数値関数を実数体上の直交基底により表現した場合のサンプリング定理 [1] が実験計画法の結果から得られる定理の特殊な場合であることを明らかにする、また、ベクトルラディックス FFT を用いることで、質問後に関数を決定する際の計算量を削減できることを示す、そして、5. で、質問からの学習モデルを定義し、直交計画を質問すると

きの性質を述べる.真のブール関数が概念クラスに含まれる場合,直交計画を質問することで,真のブール関数を必ず出力できることを示す.6.では,真のブール関数が概念クラスに含まれない場合について触れ,7.でまとめを行う.

2. 準 備

2.1 記号の定義

はじめに,必要な用語を与えておく.長さ n のベクトルを $\underline{a}=(a_1,a_2,\cdots,a_n),\underline{b}=(b_1,b_2,\cdots,b_n)$ と表し, $\underline{a},\underline{b}\in\{0,1\}^n$ とする.ここで,ベクトル間の加法 + を,

$$\underline{a} + \underline{b} = (a_1 \oplus b_1, a_2 \oplus b_2, \cdots, a_n \oplus b_n), \tag{1}$$

とする. ただし, \oplus は排他的論理和である. ベクトル間の内積・を,

$$\underline{a} \cdot \underline{b}^T = a_1 b_1 \oplus a_2 b_2 \oplus \cdots \oplus a_n b_n, \tag{2}$$

とする.ただし,記号Tは転置を表す.

ベクトル \underline{a} のハミング重み $w(\underline{a})$ を , $w(\underline{a}) = \sum_{i=1}^n a_i$ とする . また , すべての要素が 0 であるベクトルを 0 とする $^{(\pm 3)}$.

[定義1] 1次独立

 $u_i \in \{0,1\}, (1 \leq i \leq l)$ とする . $u_1\underline{c_1} + u_2\underline{c_2} + \cdots + u_l\underline{c_l} = 0$ が成立するのは , $u_1 = u_2 = \cdots = u_l = 0$ のみであるとき , $\{\underline{c_1},\underline{c_2},\cdots,\underline{c_l}\}$ は 1 次独立という .

[定義 2] 行列 G

 $k \times n$ 行列 G を次式で定義する.

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{k1} & g_{k2} & \cdots & g_{kn} \end{bmatrix},$$
(3)

ただし, $g_{ij} \in \{0,1\}, (1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq n)$ である.G の第 i 行を $\underline{g_{i\cdot}} = [g_{i1} \ g_{i2} \ \cdots \ g_{in}]$,G の第 j 列を $\underline{g_{\cdot j}} = [g_{1j} \ g_{2j} \ \cdots \ g_{kj}]^T$ と表記する.行列 G の行ベクトルは 1 次独立,すなわち, $\{\underline{g_{1\cdot}},\underline{g_{2\cdot}},\cdots,\underline{g_{k\cdot}}\}$ は 1 次独立とする.

(注3): すなわち, $\underline{0} = (0, 0, \cdots, 0)$ である.

⁽注2): 実験計画法ではランダムな順序で実験を行う必要があり,実験回数が多いとランダム化が困難になる [14].

[定義 3] $X, X_{\underline{s}}^{\perp}$

行列 G を用い,集合 X,集合 $X_{\underline{s}}^{\perp}, (\underline{s} \in \{0,1\}^k)$ を次式で定義する.

$$X = \{\underline{x}|\underline{x} = \underline{r} \cdot G, \ \underline{r} \in \{0,1\}^k\}. \tag{4}$$

$$X_s^{\perp} = \{\underline{a}|G \cdot \underline{a}^T = \underline{s}^T, \underline{a} \in \{0, 1\}^n\}. \tag{5}$$

このとき, $|X|=2^k, |X_{\underline{s}}^\perp|=2^{n-k}$ である. \Box [\bigcirc \bigcirc \bigcirc] 3×4 行列 \bigcirc が次式で与えられる場合を考える.

$$G = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{6}$$

このとき , 集合 X , 集合 $X_{\underline{s}}^{\perp}$, $(\underline{s} \in \{0,1\}^3)$ は次式で与えられる .

$$X = \{0000, 1000, 0101, 1101, 0011, \\ 1011, 0110, 1110\}.$$
 (7)

$$\begin{split} X_{000}^{\perp} &= \{0000,0111\}, X_{100}^{\perp} &= \{0010,0101\}, \\ X_{010}^{\perp} &= \{0011,0100\}, X_{110}^{\perp} &= \{0001,0110\}, \\ X_{001}^{\perp} &= \{1000,1111\}, X_{101}^{\perp} &= \{1010,1101\}, \\ X_{011}^{\perp} &= \{1011,1100\}, X_{111}^{\perp} &= \{1001,1110\}. \end{split}$$

2.2 直交基底による関数の表現

 $\underline{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\{0,1\}^n$ とする.任意のベクトル $\underline{a}=(a_1,a_2,\cdots,a_n)\in\{0,1\}^n$ に対して以下に定義される関数 $\mathcal{X}_{\underline{a}}{:}\{0,1\}^n \to \{-1,+1\}$ を,基底関数と呼ぶ.

$$\mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}) = (-1)^{\underline{a} \cdot \underline{x}^T}.$$
 (8)

このとき , 基底関数のクラス $\{\mathcal{X}_{\underline{a}}|\underline{a}\in\{0,1\}^n\}$ は正規直交系をなす . すなわち ,

$$\frac{1}{2^n} \sum_{\underline{x} \in \{0,1\}^n} \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{b}}(\underline{x}) = \begin{cases} 1; & \underline{a} = \underline{b}, \\ 0; & \underline{a} \neq \underline{b}, \end{cases}$$
(9)

が成立する.このことから,任意の実数値関数 $f:\{0,1\}^n\to\mathcal{R}$ は次式により,基底関数の線形結合として一意に表すことができる.

$$f(\underline{x}) = \sum_{a \in \{0,1\}^n} f_{\underline{a}} \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{10}$$

すべての関数値 $f(\underline{x}), (\underline{x} \in \{0,1\}^n)$ が与えられる場合,次式により係数 f_a を計算することができる.

$$f_{\underline{a}} = \frac{1}{2^n} \sum_{\underline{x} \in \{0,1\}^n} f(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{11}$$

式(11)は多次元高速フーリエ変換(Fast Fourier Transform:FFT) アルゴリズムであるベクトルラディックス FFT を用いて計算することができる.ベクトルラディックス FFT を用いると, $n2^n$ 回の加算で,すべての $\underline{a} \in \{0,1\}^n$ に対する f_a を求めることができる [19, p.127].

一方 , 一部の関数値 $f(\underline{x}), (\underline{x} \in X)$ のみ与えられる場合に関する補題を以下に載せる .

[補題1] 任意の $\underline{a}\in X^{\perp}_{\underline{s}}$ に対し,次式が成立する $^{(ext{t4})}$.

$$\sum_{c \in X_{-}^{\perp}} f_{\underline{c}} = \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{x} \in X} f(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{12}$$

(証明) $f(\underline{x})=\sum_{\underline{c}\in\{0,1\}^n}f_{\underline{c}}\mathcal{X}_{\underline{c}}(\underline{x})$ より,次式が成立する.

式 (12) の右辺

$$= \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{x} \in X} \sum_{\underline{c} \in \{0,1\}^n} f_{\underline{c}} \mathcal{X}_{\underline{c}}(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x})$$

$$= \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{c} \in \{0,1\}^n} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^k} f_{\underline{c}} \mathcal{X}_{\underline{c}}(\underline{r}G) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{r}G). \tag{13}$$

ここで, $\mathcal{X}_{\underline{c}}(\underline{r}G) = (-1)^{\underline{r}G\underline{c}^T} = \mathcal{X}_{\underline{c}G^T}(\underline{r}),$ $\mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{r}G) = (-1)^{\underline{r}G\underline{a}^T} = (-1)^{\underline{r}\cdot\underline{s}^T} = \mathcal{X}_{\underline{s}}(\underline{r})$ を用いると,式 (12) の右辺は更に以下のように変形できる.

式 (12) の右辺

$$= \sum_{\underline{c} \in \{0,1\}^n} f_{\underline{c}} \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^k} \mathcal{X}_{\underline{c}G^T}(\underline{r}) \mathcal{X}_{\underline{s}}(\underline{r}). \tag{14}$$

ここで , $\underline{c}\in X_{\underline{s}}^\perp$ であれば $\underline{c}G^T=\underline{s}$ が成立するので , 式 (9) を用いると次式が得られる .

$$\frac{1}{2^k} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^k} \mathcal{X}_{\underline{c}G^T}(\underline{r}) \mathcal{X}_{\underline{s}}(\underline{r}) = \begin{cases} 1; & \underline{c} \in X_{\underline{s}}^{\perp}, \\ 0; & \underline{c} \notin X_{\underline{s}}^{\perp}. \end{cases}$$

$$(15)$$

式 (14) と式 (15) より,式 (12) が証明される. \Box [補題 2] $\underline{a} \in X_{\underline{s}}^{\perp}$ とする.このとき, $\forall \underline{b}, (\underline{b} \in X_{\underline{s}}^{\perp}, \underline{b} \neq \underline{a})$ に対し, $f_{\underline{b}} = 0$ が成立するならば,次式により $f_{\underline{a}}$ を求めることができる.

(注4): ここで, f_a , f_b , $(a, b \in X^\perp_s)$ を区別して求めることはできない.実験計画法では,このことを交絡と呼んでいる [12].

$$f_{\underline{a}} = \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{x} \in X} f(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{16}$$

(証明)補題1より明らか.

3. 実験計画法

はじめに,実験計画法のモデルを載せる.

3.1 実験計画法のモデル

3.1.1 実験形式

真の構造式を $f^*(\underline{x})$ とする.実験を行うとは,入力 $\underline{x} \in \{0,1\}^n$ に対し,出力 $f^*(\underline{x}) \in \mathcal{R}$ を得ることである.実験する \underline{x} の集合を実験計画 X と呼ぶ.

なお,実験計画 X は実験前に決定され,X を一括して実験する一括型実験である.すなわち,他の \underline{x} の実験結果により,実験計画 X が変わることはない.また,実験回数 K は $K=|X|=2^k$ (k は自然数)とする

3.1.2 構造式クラス

構造式クラスを定義するのに必要な仮定を与えて おく.

[仮定 1] 集合 $A, (A\subseteq\{0,1\}^n)$ は , $\underline{a}\in A$ ならば , 任意の $\underline{b}, (\underline{b}\in\{0,1\}^n, \underline{b}\sqsubseteq\underline{a})$ に対して $\underline{b}\in A$ が成立 する.ただし , $\underline{b}\sqsubseteq\underline{a}$ は , すべての $i, (1\leq i\leq n)$ に おいて $b_i\leq a_i$ であることを表す.

[例2] 集合 A の例

 $A = \{0000, 1000, 0100, 0010, 0001, 1100, 1010, 1001\}.$

A を用い,構造式クラス \mathcal{F}_A を以下で定義する.ただし,本論文ではブール関数と対応 $^{(\pm 5)}$ させて考えるので, $x_i \in \{0,1\}, (1 \leq i \leq n)$ としておく $^{(\pm 6)}$.

[定義 4] 構造式クラス \mathcal{F}_A

通常の実験計画法では,仮定 1 を満たす,ある A を用いて次式で表現可能な構造式の集合を \mathcal{F}_A とする $(^{27})$.

$$f(\underline{x}) = \sum_{a \in A} f_{\underline{a}} \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}) + e_{\underline{x}}.$$
 (17)

ただし,構造式の定義域と値域は $\underline{x} \in \{0,1\}^n, f(\underline{x}) \in \mathcal{R}$ である.また, $e_{\underline{x}}$ は偶然誤差であり,期待値 0,分散 σ^2 ,独立性を満たす確率変数である [12, p.69].また一般に, $3 \leq w(\underline{a})$ となる \underline{a} は A に含まれないと前提がおかれている [11, p.156].

定義 4 は,構造式クラスが集合 A に依存することを示している.このことから,実験計画は A に依存して決めなければならないことがわかる.

3.1.3 アルゴリズムの入出力

仮定 1 を満たす集合 A と e_x に関する情報が入力されたもとで,アルゴリズムは,実験計画 X を決定し一括実験を行い,得られた実験結果 $\{(\underline{x},f^*(\underline{x}))|\underline{x}\in X\}$ から,係数 f_a , $(\underline{a}\in A)$ を求める.係数が求まれば構造式 $f\in\mathcal{F}_A$ が決まるので,この構造式を出力する.

3.1.4 実験計画の評価基準

実験計画の良さを測る評価基準として,実験後に得られる各係数の不偏推定量の分散の最大値が挙げられる.

後述するように,同じ実験回数のすべての実験計画の中でこの評価基準を最小にする実験計画は直交計画である.このため,統計の実験計画法では直交計画を中心に研究が行われており,これまでに多くの研究成果が得られている[11]~[14].次節で直交計画を定義する.

3.2 直交計画

[定義 5] 直交計画 X_A

 $v(\underline{a},\underline{b})=\{i|a_i\neq 0,1\leq i\leq n\}\triangle\{i|b_i\neq 0,1\leq i\leq n\}$ とする.ただし, $A\triangle B$ は,集合 A,B の対称差を表す.

 $orall \underline{a},\underline{b}\in A$ に対して, $\{\underline{g\cdot j}|j\in v(\underline{a},\underline{b})\}$ が 1 次独立であり,かつ,行ベクトルが 1 次独立となる行列を G_A とする.なお, G_A の行数は集合 A に依存するため, k_A で表す.

このとき,直交計画 X_A は, $k_A \times n$ 行列 G_A を用い,次式で与えられる.

$$X_A = \{ \underline{x} | \underline{x} = \underline{r} G_A, \ \underline{r} \in \{0, 1\}^{k_A} \}.$$
 (18)

$$\exists \exists \exists x \in X_A = 1$$
 $\exists x \in X_A = 1$ $\exists x \in X_A = 1$

直交計画の例を例3に載せる.

[例3] 直交計画

 $n=4,\ A=\{0000,1000,0100,0010,0001,1100,1010,1001\}$ の場合を考える.このとき,定義5の条件を満たす G_A として,

(注5): ブール関数の学習問題と実験計画法の用語の関係を説明しておく、学習問題における質問する入力集合 X,関数値 $f(\underline{x})$,インデックスi,ブール変数 x_i ,係数 $f_{\underline{\alpha}}$ はそれぞれ,実験計画法における実験計画 X,特性値 $f(\underline{x})$,因子i の水準 x_i ,効果 $f_{\underline{\alpha}}$ に対応する。なお,効果 $f_{\underline{\alpha}}$ は、 $w(\underline{\alpha})=0$ のとき中心効果, $w(\underline{\alpha})=1 \land a_i=1$ のとき因子i の主効果, $w(\underline{\alpha})=2 \land a_i=1 \land a_j=1$ のとき因子i と因子i のi 因子交互作用とそれぞれ呼ばれる。また,i 因子以上の交互作用についてもi 因子と同様に定義される。

(注 $_6$): 実験計画法においては,これはすべての因子の水準数が $_2$ の場合に相当するが,一般に各因子の水準数は任意である.

(注7): 仮定 1 は ,因子間に低次の交互作用が存在しない場合 ,それらの因子を含む高次の交互作用は存在しないことを意味している [11, p.206] .

$$G_A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{19}$$

が挙げられる.このとき,直交計画 $X_A=\{0000,1000,0101,1101,0011,1011,0110,1110\}$ となる.

次に直交計画の最適性に関する定理を載せる. [定理 1] 直交計画の最適性[12]

定義 4 で与えられる構造式クラスに対し,実験回数 2^{kA} のすべての実験計画の中で,各係数の不偏推定量 の分散の最大値を最小にする実験計画は直交計画 X_A である.このとき,係数 f_a の不偏推定量 \hat{f}_a は次式で与えられる.

$$\hat{f}_{\underline{a}} = \frac{1}{2^{k_A}} \sum_{x \in X_A} f^*(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{20}$$

3.3 G_A の構成方法

 G_A を決定することは,列(列番号)の集合 $\{1,2,\cdots,n\}$ から k_A 次元列ベクトルの集合 $\{0,1\}^{k_A}$ への写像 $\xi:\{1,2,\cdots,n\}\to\{0,1\}^{k_A}$ を決めることと等価である.この写像 ξ を割付けと呼ぶ.

割付けを決定するアルゴリズムは , 以下の原則をもとに実行される $[13]^{(\pm 8)}$.

(1) 一列ずつ割付けを行う。

(2) $\underline{\xi(l_1)},\underline{\xi(l_2)},\cdots,\underline{\xi(l_m)}$ が既に決定しているとき, $v(\underline{a},\underline{b})=\{l_1,l_2,\cdots,l_m,i\}$ となる $\underline{a},\underline{b}\in A$ が存在すれば, $u_1\underline{\xi(l_1)}+u_2\underline{\xi(l_2)}+\cdots+u_m\underline{\xi(l_m)},(\forall u_1,u_2,\cdots,u_m\in\{0,1\})$ を列i に割り付けることはできない $(\underline{k},\underline{b})$

原則 (2) は,定義 5 の $\{\underline{g_{\cdot j}}|j\in v(\underline{a},\underline{b})\}$ が 1 次独立という条件に対応している.

ただし,この原則を用いても, G_A を決定するには多くの計算量を必要とする $^{(\pm 10)}$.このため,上記の原則をもとに G_A の近似解 G_A^{ap} を探索するアルゴリズムの一例を図 1 に載せる.

図 1 のアルゴリズムについて,以下で説明を行う. $1\sim3$ 行目では割付けを行う列の順序を求めている. これは, $w(\underline{a})$ が大きい \underline{a} の $\{i|a_i\neq 0\}$ に含まれる列から先に決めた方が解が見つかる可能性が高いためである.

次に $4\sim15$ 行目の for 文において i=s であるときを考える. $\underline{\xi(t_1)},\underline{\xi(t_2)},\cdots,\underline{\xi(t_{s-1})}$ は既に決定されており,このもとで $\underline{\xi(t_s)}$ を決めることになる.ここで,

```
入力 A,出力 G^{ap}_{\Lambda}
|A| \leq 2^k を満たす最小の k を k_A とする .
初期設定:
配列 S[\underline{z}], (\underline{z} \in \{0,1\}^{k_A} \setminus \{\underline{0}\}) を用意する.
A_0 := \{ \underline{0} \}.
 1:for i := 1 to n do
 2{:}\quad W(i):= {\max}_{\underline{c} \in \{\underline{a} \mid a_i=1,\underline{a} \in A\}} \ w(\underline{c});
 3:W(i) が大きいi から順に,t_1,t_2,\cdots,t_n とする.
 4:for i := 1 to n do
      A_i := \{\underline{a} | a_{t_i} = 1, a_{t_{i+1}} = \dots = a_{t_n} = 0, \underline{a} \in A\};
        for \underline{z} \in \{0,1\}^{k_A} \setminus \{\underline{0}\}\ do
 6:
 7:
              S[\underline{z}] := 0;
        for all \underline{a} \in A_i, \underline{b} \in \cup_{0 \le j \le i} A_j do
               v(\underline{a},\underline{b})ackslash\{t_i\} に含まれる要素を l_1,l_2,\cdots,l_m
 9:
10:
               とする.
11:
               for all (u_1, u_2, \dots, u_m) \in \{0, 1\}^m do
12:
                   \underline{z} := u_1 \xi(l_1) + u_2 \xi(l_2) + \dots + u_m \xi(l_m);
13:
                   S[\underline{z}] := 1;
14:
         if S[\underline{z}] = 0 となる \underline{z} が存在する.
15:
              then \xi(t_i) := \underline{z};
16:
         else k_A := k_A + 1 として,初期設定へ.
17:行列 [\xi(1) \ \xi(2) \ \cdots \ \xi(n)] を出力し,終了する.
```

図 1 G_A^{ap} を出力するアルゴリズム Fig. 1 Algorithm to output G_A^{ap}

原則 (2) の条件を満たすように割付けを行う必要があるため, $t_s \in v(\underline{a},\underline{b})$ かつ $v(\underline{a},\underline{b}) \subseteq \{t_1,t_2,\cdots,t_s\}$ となる $\underline{a},\underline{b}$ を見つける必要がある.8 行目で,このような $v(\underline{a},\underline{b})$ を列挙している.そして, $11 \sim 12$ 行目で原則 (2) より t_s を割り付けることができない k_A ビット 2 進数の列ベクトルを探している. t_s を割り付けることができない列ベクトル \underline{z} に対して,12 行目で $S[\underline{z}]=1$ としている.これより, $13 \sim 14$ 行目で t_s を割り付ける \underline{z} は原則 (2) の条件を満たしていることがわかる.

15 行目について説明する. $|A| \le 2^k$ を満たす最小の k を k_A としても,定義 5 の条件を満たす行列がいつも構成できるとは限らない.このような場合,実験計画法 [14, p.119] と同様に行列の行数を 15 行目で増やしている.最後に,16 行目で行列を出力し,終了している.

(注10): 実験計画の分野では,効率の良い探索の研究はあまり見られず,上記の原則をもとに人間が関与した探索で G_A を求めることが多い.これは,統計学の実務家の場合,実験のしやすい順序や誤差項の独立性などを考慮して決めるため,探索条件が複雑になるためと思われる.

⁽注8): 文献 [13] では有限射影幾何を用いた割付けを行っている. 詳細 は参考文献を参照されたい.

⁽注9): ここでの + は式 (1) で定義したベクトルの要素間の排他的論理和である .

なお,図 1 のアルゴリズムで出力される行列 G_A^{ap} は,行ベクトルが 1 次独立とならない可能性がある.この場合, G_A^{ap} を用い式 (18) から構成される実験計画の大きさは $2^{rank(G_A^{ap})}$ となる.ここで, $rank(G_A^{ap})$ は G_A^{ap} の階数である.

4. 質問する入力集合に直交計画を用いた ブールドメイン上の実数値関数の学習

まず,瀧本らにより得られたブールドメイン上の関数に対するサンプリング定理を載せる.

[命題 1] サンプリング定理 [1]

真の実数値関数 $f^*(\underline{x})$ が次式で与えられる場合を考える.

$$f^*(\underline{x}) = \sum_{a \in A'} f_{\underline{a}}^* \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{21}$$

ただし, $A'=\{\underline{a}|w(\underline{a})\leq t,\underline{a}\in\{0,1\}^n\}$ である.ここで,双対符号 $^{(\pm 11)}$ の最小距離が 2t+1 以上となる線形符号 Y を用いると,係数 $f_{\underline{a}}^*$ は次式で計算される.

$$f_{\underline{a}}^* = \frac{1}{2^k} \sum_{\underline{x} \in Y} f^*(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{22}$$

一方,直交計画に関する以下の定理が得られる. [定理2] 真の実数値関数 $f^*(\underline{x})$ が次式で与えられる 場合を考える.

$$f^*(\underline{x}) = \sum_{a \in A} f_{\underline{a}}^* \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{23}$$

このとき , 係数 $f_{\underline{a}}^*$ は次式で計算される .

$$f_{\underline{a}}^* = \frac{1}{2^{k_A}} \sum_{x \in X_A} f^*(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{24}$$

(証明) $\underline{a} \in X_{\underline{s}}^{\perp}, (\underline{a} \in A)$ とする.定義 5 より, $\forall \underline{c} \in A, (\underline{a} \neq \underline{c})$ に対し, $\{\underline{g}_{\underline{\cdot}\underline{j}} | j \in v(\underline{a},\underline{c})\}$ が 1 次独立である.これより,

$$G_A(\underline{a} + \underline{c})^T \neq \underline{0}, \tag{25}$$

すなわち,

$$G_A \underline{a}^T \neq G_A \underline{c}^T, \tag{26}$$

が成立する.

式 (5) と式 (26) により , $\underline{c} \notin X_{\underline{s}}^{\perp}$ が成立する . これより , $\forall \underline{b}, (\underline{b} \in X_{\underline{s}}^{\perp}, \underline{b} \neq \underline{a})$ に対し , $f_{\underline{b}} = 0$ が成立する .

以上と補題 2 より, 定理 2 が証明される.

式 (23) で表現可能な実数値関数の集合を $\mathcal{F}_A^\mathcal{R}$ としておく .

次に , 定理 2 と命題 1 の関係に関する系 1 を与えるために必要な補題を与えておく .

[補題 3] [12, p.156, 定理 1]

G の任意の 2t 列が 1 次独立で 1 次従属な 2t+1 列が存在するための必要十分条件は , G を検査行列としてもつ線形符号の最小距離が 2t+1 に等しいことである .

(証明) $G=[\underline{g\cdot_1}\ \underline{g\cdot_2}\ \cdots\ \underline{g\cdot_n}]$ と書き,G を検査行列としてもつ線形符号を Y とする. $\underline{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ に対して, $G\underline{x}^T=\underline{0}$ は,

$$g_{\cdot 1}x_1 + g_{\cdot 2}x_2 + \dots + g_{\cdot n}x_n = \underline{0},$$
 (27)

と書くことができるので, $\underline{x} \in Y$ と式(27)は同値である.したがって,Y の中にハミング重み $w(\underline{x}) = 2t+1$ なる \underline{x} が存在することと, $\underline{g_{\cdot 1}, g_{\cdot 2}, \cdots, g_{\cdot n}}$ のうち 1 次従属な 2t+1 列が存在することは同値である.また, $Y\setminus \{\underline{0}\}$ の中にハミング重み $w(\underline{x}) = 2t$ なる \underline{x} が存在しないことと, $\underline{g_{\cdot 1}, g_{\cdot 2}, \cdots, g_{\cdot n}}$ の任意の 2t 列が 1 次独立であることは同値である.

以上の結果と,線形符号 Y の最小距離と $w(\underline{x}), (\underline{x} \in Y \setminus \{\underline{0}\})$ の最小値が等しいことより,補題 3 は証明される.

このとき,以下の系が成立する.

[系 1] 定理 2 は命題 1 を特殊な場合として含む. (証明) $A = \{\underline{c}|\underline{c} \in \{0,1\}^n, w(\underline{c}) \leq t\}$ である場合について,定理 2 を考える.このとき,定義 5 より, G_A の任意の 2t 列が 1 次独立でなければならない.更に,補題 3 より, G_A を検査行列としてもつ線形符号(X_A の双対符号)の最小距離が 2t+1 以上でなければならないことがわかる.これより,定理 2 は命題 1 を特殊な場合として含むことがわかる.

$$Y = \{ \underline{x} | \underline{x} = \underline{r} G_{A'}, \ \underline{r} \in \{0, 1\}^8 \}, \tag{28}$$

(注11): 線形符号 Y の生成行列を G とする.このとき,G を検査行列としてもつ線形符号を Y の双対符号と呼ぶ [20] .

(注12): Y の双対符号は最小距離が 5 となる 2 重誤り訂正 BCH 符号である .

ただし, $G_{A'}$ は次式で与えられる.

一方,定理2を用いると, X_A は次式で与えられる.

$$X_A = \{ \underline{x} | \underline{x} = \underline{r} G_A, \ \underline{r} \in \{0, 1\}^5 \},$$
 (30)

ただし, G_A は次式で与えられる.

以上より, $|X_A|=2^5, |Y|=2^8$ であり, $|X_A|<|Y|$ が成立する.これより,命題 1 よりも定理 2 を用いた方がよい場合が存在することがわかる.

また, G_A と $G_{A'}$ を比べてみると, $G_{A'}$ は任意の 4 列が 1 次独立であるのに対し, G_A は一部の 4 列が 1 次独立であることがわかる.

次に , 式 (24) の計算について考える . $\underline{x} = \underline{r}G_A$ より , \underline{x} は \underline{r} の関数なので , 特に $\underline{x_r}$ と表記する . また , $\underline{s_a} = G_A \underline{a}^T$ とおく . このとき , 式 (24) は以下のように展開できる .

$$f_{\underline{a}}^{*} = \frac{1}{2^{k_{A}}} \sum_{\underline{x_{r}} \in \mathcal{X}_{A}} f^{*}(\underline{x_{r}}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x_{r}})$$

$$= \frac{1}{2^{k_{A}}} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^{k_{A}}} f^{*}(\underline{x_{r}})(-1)^{\underline{x_{r}} \cdot \underline{a}^{T}}$$

$$= \frac{1}{2^{k_{A}}} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^{k_{A}}} f^{*}(\underline{x_{r}})(-1)^{\underline{r} \cdot \underline{s_{a}}^{T}}$$

$$= \frac{1}{2^{k_{A}}} \sum_{\underline{r} \in \{0,1\}^{k_{A}}} f^{*}(\underline{x_{r}}) \mathcal{X}_{\underline{s_{a}}}(\underline{r}). \tag{32}$$

このとき,式 (32) を式 (11) と比べてみると,同じ計算であることがわかる.質問する入力の個数を $K_A=|X_A|=2^{k_A}$ としておく.このとき,式 (32) の計算にベクトルラディックス FFT を用いると, $K_A\log_2K_A$ 回の加算で,すべての $\underline{a}\in A$ に対する f_a^* を求めることができる.

- 5. 質問する入力集合に直交計画を用いた ブール関数の学習
- 5.1 質問からの学習モデル
- 5.1.1 質問形式

本論文では所属性質問からの学習問題を対象とする ので,所属性質問を定義しておく.

真のブール関数を $f^*(\underline{x})$ とする.所属性質問をするとは,オラクルへの入力 $\underline{x} \in \{0,1\}^n$ に対し,出力 $f^*(\underline{x}) \in \{-1,+1\}$ を得ることである.以後,所属性質問を略して質問と呼ぶ.

質問の形式は,質問する入力 \underline{x} の集合 X を一括して質問する一括型質問である.すなわち,他の \underline{x} の質問結果により,X が変わることはない.このため,X を一括質問入力集合と呼ぶこととする.また,質問する入力の個数 K は $K=|X|=2^k$ (k は自然数)とする

5.1.2 概念クラス(注13)

概念クラスを以下で与える.

[定義 6] 概念クラス $\mathcal{F}_{A}^{(\pm 14)}$

仮定1を満たす,あるAを用い次式で表現可能なプール関数の集合を \mathcal{F}_A とする.

$$f(\underline{x}) = \sum_{a \in A} f_{\underline{a}} \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{33}$$

ただし,真のブール関数 f^* は, $f^* \in \mathcal{F}_A$ とする.

5.1.3 アルゴリズムの入出力

本論文で対象とする質問からの学習では,入力として,仮定 1 を満たす集合 A が与えられる.そして,一括質問入力集合 X を決定し,一括して質問する.得られた質問結果 $\{(\underline{x},f^*(\underline{x}))|\underline{x}\in X\}$ から,概念クラス \mathcal{F}_A に含まれるブール関数の中から一つ選択し,出力する $^{(\pm 15)}$.

本論文では一括質問入力集合に直交計画 X_A を用い

(注13):本論文ではブール関数の学習を扱うため,対象クラスをブール関数のクラスに限定するが,5.の結果は実数値関数のクラスに対しても成立する.

(注14):人間が用いる規則の集合を考える場合,一般には単純な概念がよく用いられるといわれている.例えば,情報検索において一般のユーザは複雑な論理式を理解できないことが指摘されている [18].このとき,概念の複雑さを測の基準にも様々なものが考えられる.例えば,オッカムアルゴリズム [15] では概念のサイズにより複雑さを測り,Quinlan [16] は記述長で複雑さを測っている. \mathcal{F}_A は関連変数の個数が小さいブール関数ほど単純なブール関数であるととらえたときによく用いられるブール関数の集合となっている.

(注15): 本論文では,仮説の表現形については考えない.

入力 直交計画 X_A , 出力 ブール関数 $f(\underline{x})$

- 1: X_A を一括して質問し,質問結果 $\{(\underline{x}, f^*(\underline{x})) | \underline{x} \in X_A\}$ を得る.
- 2: 式 (34) を計算することで係数 $f_a^*, (\underline{a} \in A)$ を求める .
- 3: $f(\underline{x}) = \sum_{a \in A} f_{\underline{a}}^* \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x})$.
- 4: ブール関数 $f(\underline{x})$ を出力し,終了する.

図 2 提案アルゴリズム Fig. 2 Proposed algorithm.

る.そこで次節で,ブール関数の学習に直交計画を用いるときの性質を与えておく.

5.2 直交計画 X_A を質問することでブール関数 を学習するときの性質

[定理 3] $f^*(\underline{x}) \in \mathcal{F}_A$ であれば , 係数 f_a^* は次式により計算される .

$$f_{\underline{a}}^* = \frac{1}{2^{k_A}} \sum_{\underline{x} \in X_A} f^*(\underline{x}) \mathcal{X}_{\underline{a}}(\underline{x}). \tag{34}$$

(証明)定義 6 で与えられる概念クラス \mathcal{F}_A は $\mathcal{F}_A^{\mathcal{R}}$ の 部分クラスである.このため,定理 2 より,式 (34) が成立する.

5.3 提案アルゴリズム

直交計画 X_A が与えられたもとで,ブール関数を出力する提案アルゴリズムを図 2 に載せる.

提案アルゴリズムの出力に関する定理を以下に載せる.

[定理 4] $f^*(\underline{x}) \in \mathcal{F}_A$ である場合,提案アルゴリズムの出力するブール関数 $f(\underline{x})$ は $f^*(\underline{x})$ である. (証明) 定理 3 より明らか.

5.4 アルゴリズムの計算量

1 行目の計算量は, $|X_A|=K_A$ より, $O(K_A)$ である.2 行目であるが,式(34)の計算も式(32)と同様にベクトルラディックス FFT を用いることができる.これより, $K_A\log_2K_A$ 回の加算で,すべての $\underline{a}\in A$ に対する f_a^* を求めることができる.これより,2 行目の計算量は $O(K_A\log_2K_A)$ であることがわかる.また,3 行目の計算量は $O(K_A)$ である.以上より,提案アルゴリズムに必要な計算量は, $O(K_A\log_2K_A)$ となる.

6. 真のブール関数が概念クラスに含まれな い場合

前章までは,真のブール関数が概念クラスに含まれ

る仮定のもとで話を進めてきたが,常にこの仮定を置くことができるとは限らない.そこで,真のブール関数が概念クラスに含まれなかった場合に図 2 の提案アルゴリズムを適用するとどうなるかを説明する.このとき,一括質問入力集合に関して真のブール関数と同じ出力をするブール関数が概念クラスに含まれれば提案アルゴリズムはこのブール関数を出力し,含まれなければ 4 行目で出力される関数 $f(\underline{x})$ はブール関数とならない.ブール関数が出力されない場合,概念クラス以外から質問結果に無矛盾なブール関数を探索することが考えられるが,このとき,どのブール関数を選ぶかの基準が必要となる.

ところで近年,概念の事前確率が与えられる決定理論による学習モデルについて盛んに研究が行われている $[7] \sim [10]$.この学習モデルで質問からのブール関数の学習を考えた場合,無矛盾なブール関数の中で事前確率が最大なブール関数を選択することが最適な決定となる.

決定理論による学習モデルに提案アルゴリズムを適用し,出力がブール関数とならない場合,無矛盾で事前確率が最大のブール関数の探索には式(12)を用いることで効率良く探索できる.この詳細については別稿で発表予定である.

7. む す び

本論文ではまず,実験計画法と質問からのブール関数の学習との関係を明らかにし,ブールドメイン上の実数値関数に対するサンプリング定理が直交計画の特別な場合として与えられることを示した.次に,今までの計算論的学習理論では扱われていない概念クラスを提案し,このクラスに真のブール関数が含まれる場合,質問する入力集合を直交計画とすることで真のブール関数を必ず出力できることを示した.更に,多次元高速フーリエ変換アルゴリズムを用いることで,質問後にブール関数を決定する際の計算量を削減できることを示した.

本論文では明らかにできなかったが, k_A と集合 A の関係を明らかにすることは重要である.また, G_A の構成については近似解を探索するアルゴリズムの一例を載せることにとどめたが, G_A を見つける問題は重要であり,今後の課題である.

謝辞 本研究を進めるにあたり,有益な御討論や御 指摘を頂いた早稲田大学の中澤真氏並びに松嶋・平澤 両研究室各位に深く感謝致します.また,直交計画の 構成法に関する貴重な御助言を頂いた群馬大学の関庸一教授,非常に有益な御示唆と御指摘を頂いた査読者の方々に深く感謝致します.本研究の一部は,文部科学省科学研究費基盤研究(C)(2)(課題番号 12650400),横浜商科大学学術研究会研究助成金,早稲田大学特定課題研究助成費(2001A-570)の援助による.

文 献

- [1] 瀧本英二, 丸岡 章, "ブールドメイン上の関数に対する サンプリングの定理"信学技報, COMP97-56, 1997.
- [2] 天野一幸,瀧本英二,"ブール関数のフーリエ変換とその 応用"信学誌,vol.82, no.12, pp.1270-1272, 1999.
- [3] E. Kushilevitz and Y. Mansour, "Learning decision trees using the Fourier spectrum," SIAM J. Comput., vol.22, no.6, pp.1331–1348, 1993.
- [4] N. Lineal, Y. Mansour, and N. Nisan, "Constant depth circuits, Fourier transform and learnability," J. ACM., vol.40, no.3, pp.607-620, 1993.
- [5] L.G. Valiant, "A theory of the learnable," Commun. ACM, vol.27, pp.1134-1142, 1984.
- [6] D. Angluin, "Queries and concept learning," Machine Learning, vol.2, no.4, pp.319–342, 1988.
- [7] D. Haussler, "Decision theoretic generalizations of the PAC learning model," 1st International Workshop, ALT'90, pp.21-41, 1990.
- [8] G. Paass and J. Kindermann, "Bayesian query construction for neural network models," Advances in Neural Information Processing Systems 7, pp.443–450, MIT Press, 1995.
- [9] 松嶋敏泰, "帰納・演繹推論と予測―決定理論による学習 モデル", 1998 年情報論的学習理論ワークショップ予稿集, pp.1-8, 1998.
- [10] 浮田善文,松嶋敏泰,平澤茂一,"質問からの学習問題の決定理論による定式化に関する一考察"情処学論,vol.39, no.11, pp.2937-2948, Nov. 1998.
- [11] 奥野忠一,芳賀敏郎,実験計画法,培風館,東京,1969.
- [12] 高橋磐郎,組合せ理論とその応用,岩波全書 316,東京, 1979
- [13] R. Fuji-Hara, "On automatical construction for orthogonal designs of experiments," Rep. Stat. Appl. Res., JUSE, vol.25, no.1, pp.13-25, 1978.
- [14] 永田 靖,入門実験計画法,日科技連,東京,2000.
- [15] A. Blumer, A. Ehrenfeucht, D. Haussler, and M.K. Warmuth, "Learnability and the Vapnik-Chervonenkis dimension," J. Assoc. Comput. Mach., vol.36, no.4, pp.929–965, 1989.
- [16] J.R. Quinlan and R.L. Rivest, "Inferring decision tree using the minimum description length principle," Inf. Comput, vol.80, no.1, pp.227-248, 1989.
- [17] 松嶋敏泰,平澤茂一,"MDL の帰納推論への応用"人工 知能誌,vol.7, no.4, pp.615-621, 1992.
- [18] 徳永健伸,情報検索と言語処理,東京大学出版会,東京, 1999.
- [19] 佐川雅彦,貴家仁志,高速フーリエ変換とその応用,昭晃

堂,1992.

[20] 平澤茂一,西島利尚,符号理論入門,培風館,東京,1999.(平成13年11月26日受付,14年6月10日再受付, 12月12日最終原稿受付)



浮田 善文 (正員)

平6早大・理工・工業経営卒.平8同大大学院修士課程了.同年,同大大学院理工学研究科博士後期課程入学.平10同大同学部経営システム工学科助手.平13横浜商科大学講師,現在に至る.機械学習,特に質問からの学習に関する研究に従事.情

報処理学会等各会員.



松嶋 敏泰 (正員)

昭 53 早大・理工・工業経営卒 . 昭 55 同 大大学院修士課程了 . 同年,日本電気(株) 入社 . 昭 61 早大・理工学研究科・博士後 期課程入学 . 平元横浜商科大学講師 . 平 3 同大助教授 . 平 4 早大・理工学部・工業経 営学科(現在経営システム工学科)助教授,

平 9 同大教授,現在に至る.知識情報処理及び情報理論とその応用に関する研究に従事.工博.平13 ハワイ大学客員研究員. IEEE,情報理論とその応用学会,人工知能学会,情報処理学会,OR 学会,日本経営工学会等各会員.



平澤 茂一 (正員:フェロー)

昭 36 早大・理工・数学卒 . 昭 38 同電 気通信卒 . 同年三菱電機 (株) 入社 . 昭 56 早大・理工・工業経営学科 (現在経営シス テム工学科)教授,現在に至る . 情報理論 とその応用及びデータ伝送方式の研究,並 びに計算機応用システムの開発などに従事.

工博 . 昭 54, 平 14 UCLA 計算機科学科客員研究員 . 昭 60 ハンガリー科学アカデミー,昭 61 伊トリエステ大学客員研究員 . 平 5 本会小林記念特別賞,業績賞受賞. IEEE Fellow,情報理論とその応用学会,人工知能学会,情報処理学会,OR 学会,日本経営工学会等各会員.