

組合せ最適化問題と QBoost を融合させた汎用機械学習モデルの開発 —アニーリングで論理式を学習させるモデルを開発—

1. 背景

近年、機械学習や深層学習といった AI の開発及び研究が盛んだ。年々 AI は膨大化、複雑化しながら表現力を向上させ続けている。実社会への応用が進んでいく中、説明可能性の低さという課題が浮き彫りになっている。説明可能性とは、どのようにして AI が予測値を算出したのか、仮に AI が間違っていたとして、なぜ間違えたのかといった「AI の判断根拠を人間がどれだけ理解できるか」の指標になっている。こうして社会にも AI が活躍するようになっていく中、説明可能性の低さという課題が浮き彫りになる。

アニーリングを用いた有名な機械学習モデルとして、QBoost が挙げられる。QBoost とは、H. Neven らが開発したアニーリング技術で解くことのできる二値分類用のアンサンブル機械学習モデルの一つである。また、QBoost 自体は弱学習器を多数集めることで精度を高める手法をとっているため、説明可能性が高くない。

2. 目的

本プロジェクトの目的は、アニーリングを利用した QBoost を応用し、より説明可能性の高い機械学習モデルを開発し、作成したライブラリをオープンソースで公開し、様々な人に使ってもらうことである。

3. ソフトウェア開発内容

(1) ALEX

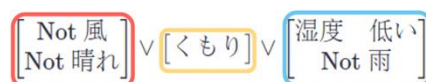


図 1 ALEX の学習結果の例

ALEX(Annealing Logic expression learning Explainable model)とは、OR と AND の2つの論理演算を用いてデータを表現する機械学習モデルである。学習をすると論理式で表現されたモデルが得られる。その例を図1で示す。

ALEX では、積和標準形の論理式モデルを採用している。積和標準形とは、論理積が足し合わされた形を指していて、括弧のついた複雑な入れ子構造にならないことが特徴である。積和標準形で表された論理式の例を以下で示す。論理積は \wedge 、論理和は \vee という演算子で表現する。

$$A \vee (B \wedge C) \vee (A \wedge D)$$

積和標準形を用いると、図1のようにそれぞれの独立した項にのみ注目することで、

簡単にモデルを解釈できるという強みがある。

ALEX モデルは、予測値の正解値の誤差を小さくする関数と、得られた論理式表現がよりシンプルになるような関数の和を最小化している。前者は、機械学習における誤差関数の役割を果たしている。後者は、アニーリングにおけるペナルティ、機械学習における正則化に対応している。一般の論理式において、複雑さを定量的に定義することは難しいが、本モデルの論理式は積和標準形を想定しているため、論理式の項の数を複雑さとしても問題なく正則化を行うことが可能になった。

ALEX モデルの定式化には株式会社フィクスターズ提供の「Amplify SDK」を、アニーリング計算には同社提供の「Amplify AE」を利用した。

(2) カルノー図を用いた論理式の簡略化のアニーリング実装

論理式とは、否定 (NOT) と論理積 (AND)、論理和 (OR) の 3 つの論理演算で構成される式のことである。論理式の表現は一意でなく、同値な表現がたくさんあるため、冗長になることが多い。そこで、最もシンプルな論理式を見つけるための手法としてカルノー図が有効である。

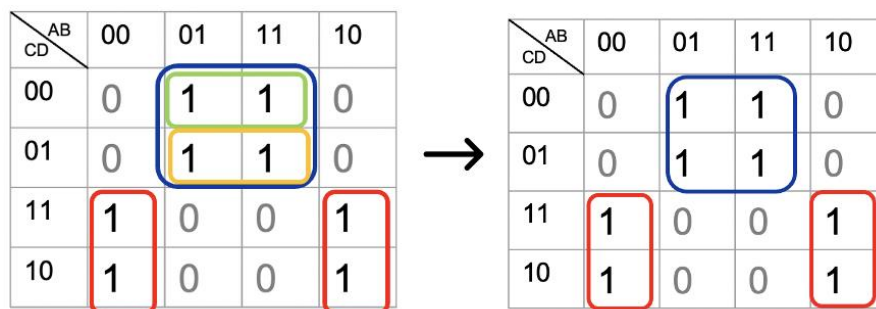


図 2 カルノー図を用いた論理式の簡略化のイメージ

カルノー図を使うと、任意の論理式を、最も項（論理積の項）の数を少なくするような積和標準形の論理式に変換することができる。図 2 で示すように、カルノー図の形式に合わせて論理式の入出力の関係を記入し、矩形で表の部分をつまむ。このとき、つまむ矩形は 2 のべき乗 \times 2 のべき乗の大きさかつ、左右上下の四隅は繋がっているという条件に従う。つまむ矩形は変数同士の論理積と対応するため、最小の矩形でつまむことができれば、最も簡素な論理式表現ができる仕組みである。

カルノー図は、論理変数の数が増えれば増えるほど、図の範囲が指数的に広がってしまうため、手作業での簡略化には限界がある。そこで、カルノー図を用いた論理式の簡略化を QUBO に落とし込んだ。

カルノー図を用いた論理式の簡略化は、最小集合被覆問題と呼ばれる最適化問題と類似している。最小集合被覆問題は、いくつかの枠が用意され、全体を被覆することができる最小の枠の数を求める問題を対象としている。また、NP 困難の問題なので、解を求めるのが非常に難しい。この最小集合被覆問題は QUBO でも表現することが

可能なので、アルゴリズムを開発せずとも定式化さえできれば、効率的に良い解が得られることが期待できる。

(3) 公開情報

本プロジェクトで開発したALEXのライブラリはGitHubにて公開している。また、開発したALEXライブラリを利用し、ALEXを体験してもうWebアプリケーションの開発を行った。このアプリケーションの様子は図3で与える。ユーザーがデータ

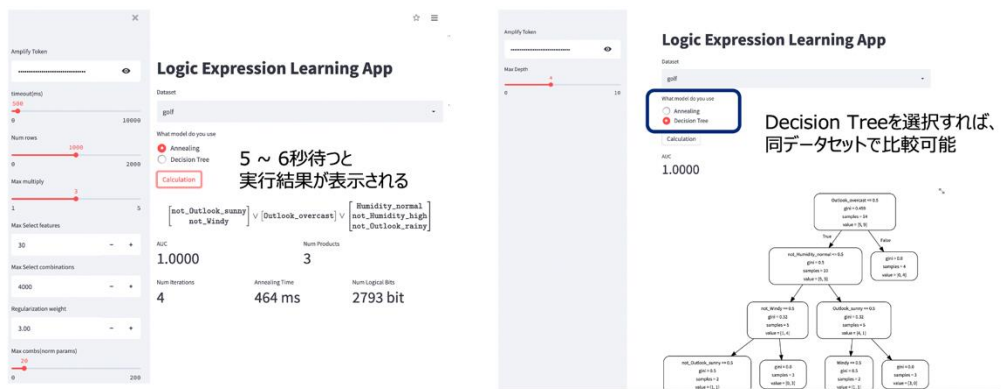


図3 ALEXを動かせるアプリケーションの様子

セット及び、学習に使うパラメータを選択すると、ALEXモデルが構築され、アニーリングによって計算が行われる。計算が終わると、学習結果である論理式表現と、計算結果のパラメータが表示される。本アプリケーションでは、アニーリングによる計算に「Amplify AE」を採用しているため、はじめにAmplifyのトークンの入力を必要とする。また、同条件で決定木モデルと比較することも可能になっている。論理式の正則化に関するパラメータを調整することで、論理式表現の複雑性を変えることができる。

4. 新規性・優位性

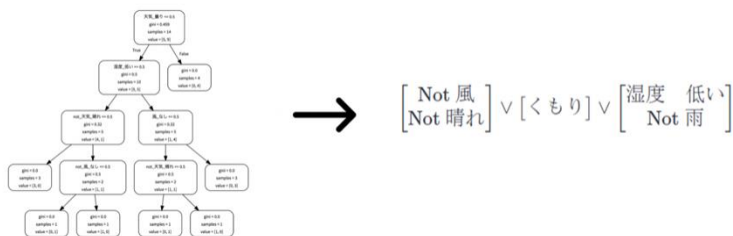


図4 決定木と論理式のモデル構造比較

本プロジェクトで開発したALEXは、説明可能性の高い機械学習モデルとして知ら

れている決定木モデルと比較してよりシンプルな表現が可能になった。図 4 では、同じデータセットを学習し、全く同じ表現をした ALEX (右) が決定木 (左) よりもシンプルなモデル構造をしている例を示している。決定木は冗長で入れ子になった論理式表現とも解釈できるため、どんな決定木のモデルも ALEX で表現することが可能である。

また、論理式を学習させるという構想は従来からあったものの、実用化に至った機械学習モデルは非常に少なく、本プロジェクトで開発した ALEX は社会的に十分な価値があるといえる。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

ALEX は、説明責任が求められる分野への幅広い応用先があると考えている。例えば、医療の現場では、医師は患者への診断に対する説明が必ず求められる。診断の補助として機械学習を使う場合、ALEX を採用することによって、予測の判断根拠を容易に解釈することができ、患者との対話もスムーズになると想定される。

また、疾患が起きる仕組みに、遺伝子の複雑な相互作用が影響していると考えられている医学的な臨床の分野でも応用ができると考えている。相互作用を直接学習できる ALEX は、このような遺伝子を使うような医療の研究の補助にもなり得ると考えている。

NP 困難で解くのが非常に難しかった問題の 1 つをアニーリングによって効率的に良い解が得られることができたため、既に最適化問題やアルゴリズムに興味ある人をアニーリングの分野に引き込むことができると考えている。

6. 氏名 (所属)

越智 優真 (木更津工業高等専門学校 情報工学科)

(参考) 関連 URL

ALEX の GitHub レポジトリ

<https://github.com/Chizuchizu/logic-expression-learning>

ALEX を使ったアプリケーションのリンク

<https://share.streamlit.io/chizuchizu/logicexpressionstreamlit/main/src/app.py>

ALEX を使ったアプリケーションのデモ動画

https://www.youtube.com/watch?v=_Q7uA0v-JNY