

FY2023/2023年度 Computational Learning Theory Team Kohei Hatano 計算論的学習理論チーム 畑埜 晃平



Center for
Advanced Intelligence Project

チーム体制

- 畑埜 晃平 (チームリーダー, 九大)
- Sherief Hashima (PD)
- 学生パートタイマー 3名

研究協力者

- 末廣 大貴 (客員, 横市大)
- 瀧本 英二 (九大)
- Yaxiong Liu (客員, 北大)

研究概要

動機：大規模データの多くは離散的である一方、
離散的構造や冗長性を利用した最適化手法は乏しい
例：材料科学における化合物、DNA配列、圧縮データ...

目標：離散的・構造的な性質を利用した最適化・予測問題に対するアルゴリズム

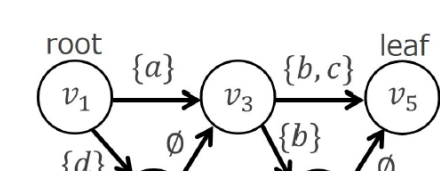
- ボトルネック**：簡潔データ構造・データ圧縮研究と最適化研究の融合
- 現状**：前者は検索や列挙に特化、後者は前者を十分活用できていない

本アプローチ：離散/オフライン/オンライン/バンディット最適化に基づく
体系的な方法論

成果例：圧縮データ上での機械学習・最適化 [TCS 20][COCOON 23]

- キーアイデア**：圧縮によるデータの構造化 + オンライン最適化・拡張定式化
- 省スペース性**：データを圧縮したまま学習 (例：a9aデータ：約70%圧縮)
- 位置づけ**：従来圧縮型手法で解けなかった最適化問題の解決

展望：離散データ上の簡潔表現に基づく最適化理論の確立



研究トピック

- 決定ダイアグラムに基づく最適化問題の拡張定式化
- 多様なオンライン意思決定問題に対する理論と基盤技術(ongoing)
- ブースティング手法のニューラルネット検証への応用
- バンディット手法の通信工学への応用

決定ダイアグラムに基づく拡張定式化

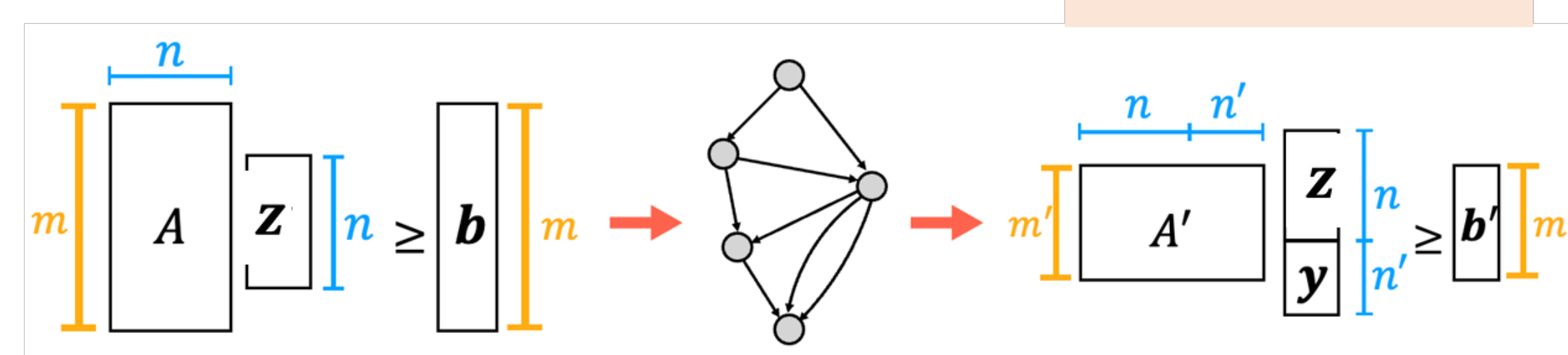
Overview of our results

Original optimization problem
(MIP/LP/QP/SDP etc.)

$$\min_{z \in \mathbb{Z}^n} f(z) \\ \text{s.t. } Az \geq b \\ A \in \{0,1\}^{m \times n}, b \in \{0,1\}^m$$

equivalent extended formulation

$$\min_{z \in \mathbb{Z}^n} f(z) \\ \text{s.t. } A' \begin{bmatrix} z \\ y \end{bmatrix} \geq b$$



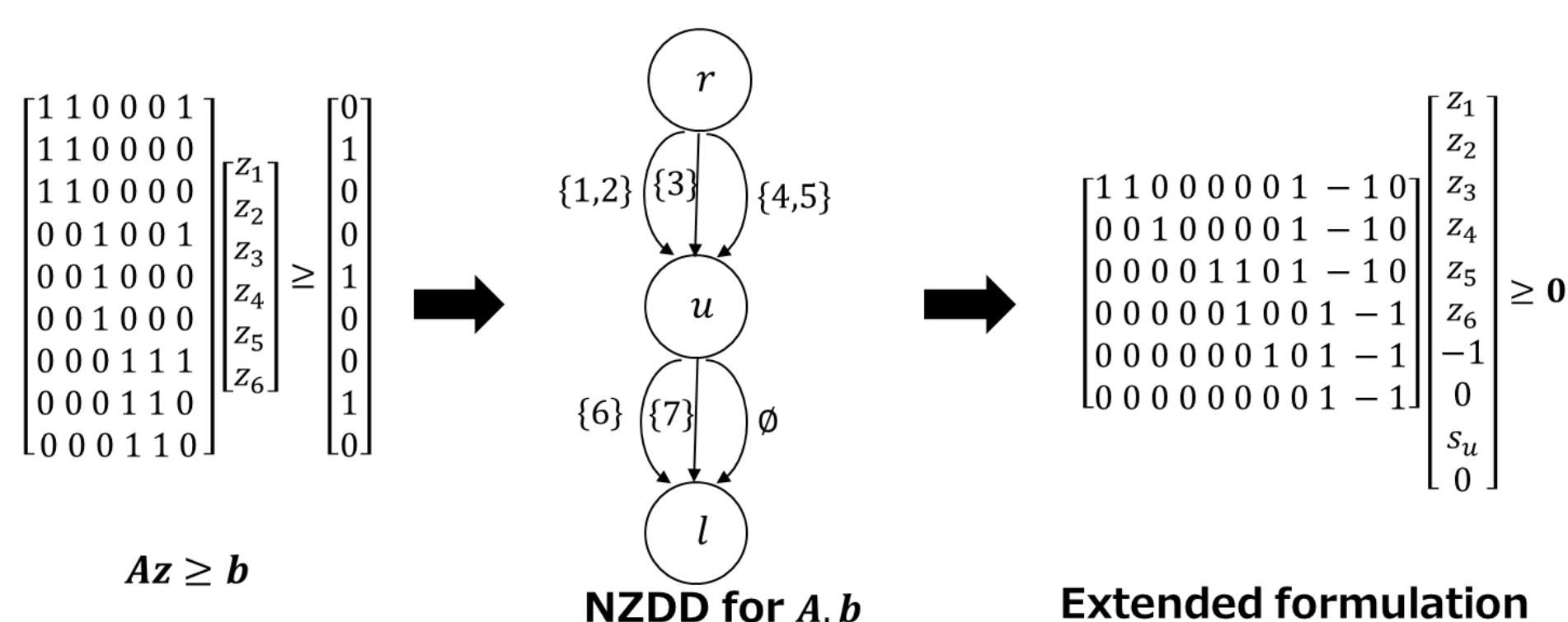
m is often huge
due to big data

"succinct" representation
of constraint matrix

- m' depends only on the size of the succinct representation (not on data!)
- If the constraints are "compressed" well, we get a concise problem

決定ダイアグラムに基づく拡張定式化(2)

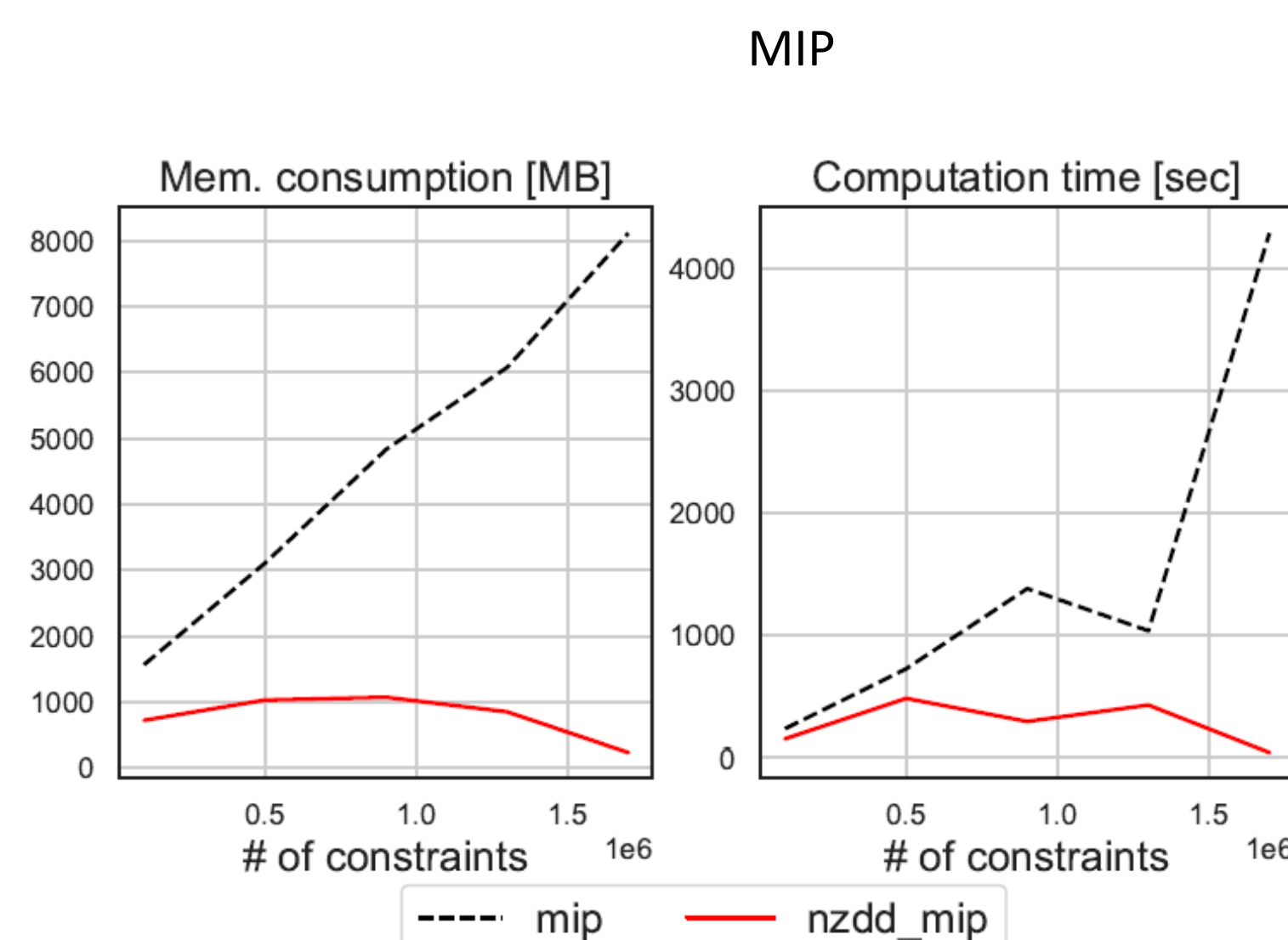
Example



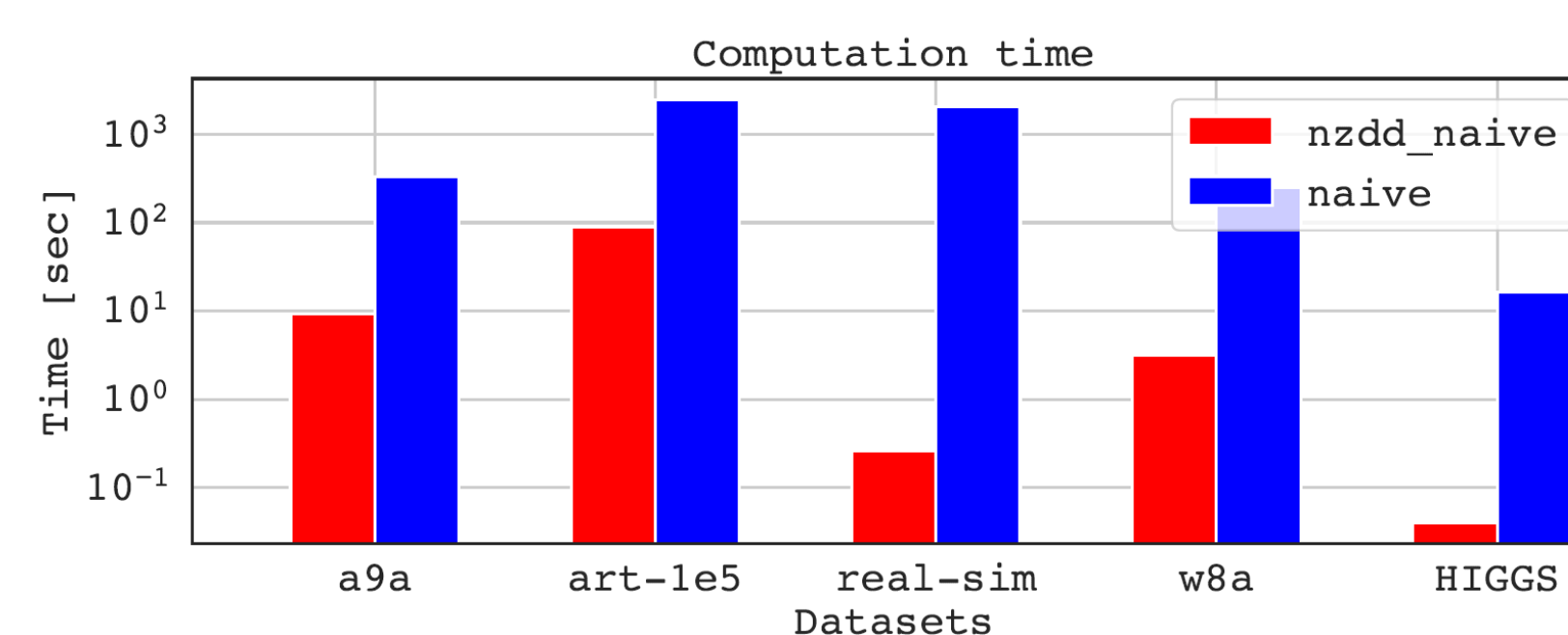
6 vars 9 consts

7 vars 6 consts

決定ダイアグラムに基づく拡張定式化(2)



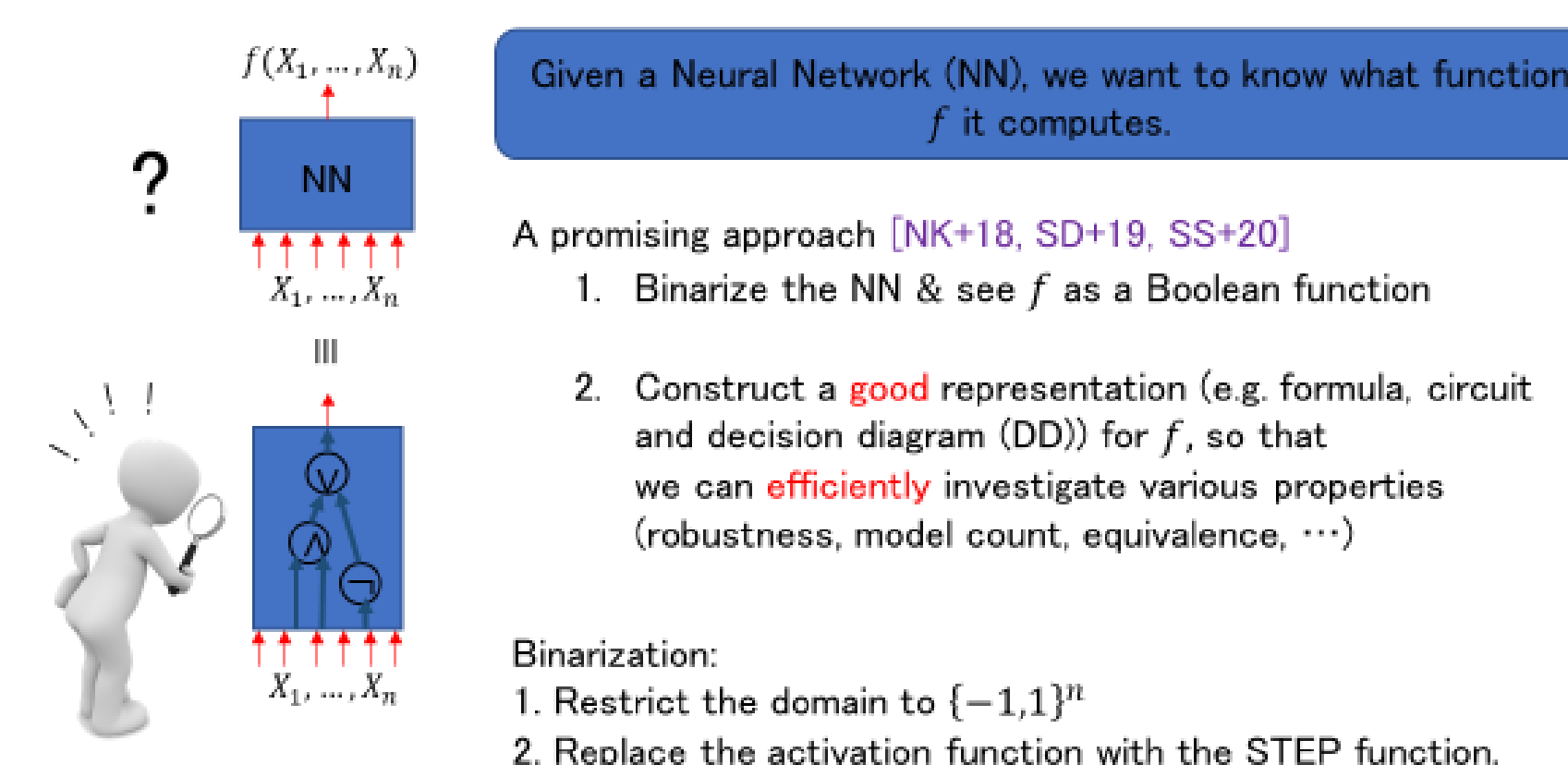
1-norm regularized soft margin opt. (real data)



ブースティング手法へのNN検証への応用

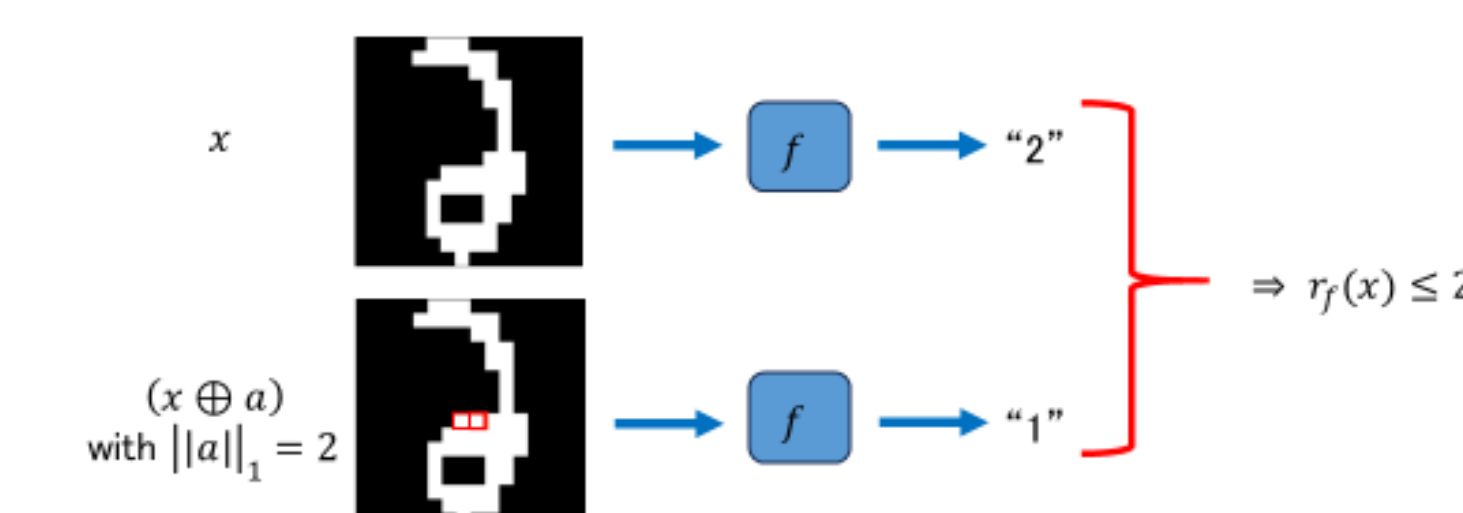
Motivation from XAI

Example: Robustness



Robustness of Boolean function f on given input $x \in \{-1,1\}^n$ is the smallest number of bits flipped in x that makes f output a different value from $f(x)$, i.e.,
$$r_f(x) = \min_{a \in \{0,1\}^n} \|a\|_1 |f(x) \neq f(x \oplus a)|$$

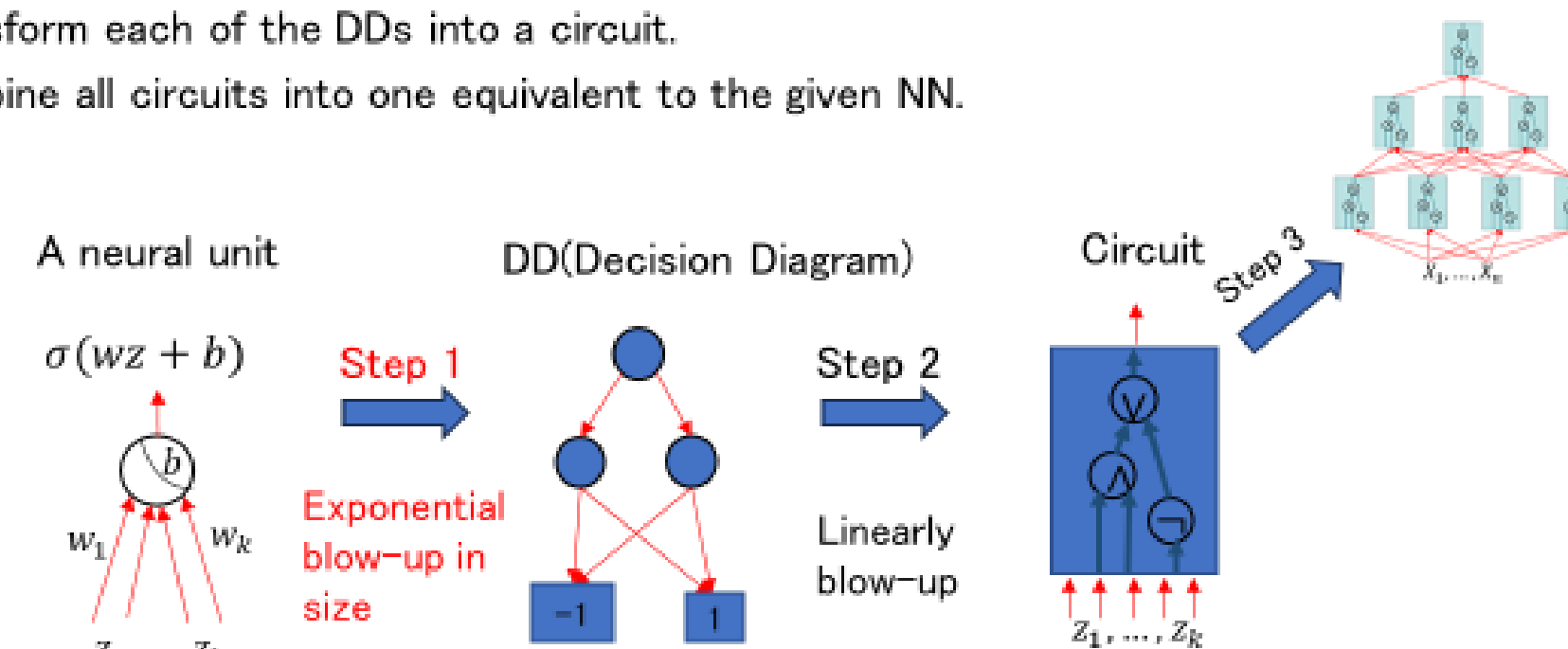
where $x \oplus a = (x_1 \oplus a_1, \dots, x_n \oplus a_n)$ with $x_i \oplus 0 = x_i$ and $x_i \oplus 1 = -x_i$.



ブースティング手法へのNN検証への応用 (2)

Transform NN to Boolean circuit

- Construct for each neural unit (linear threshold function (LTF)) an equivalent DD.
- Transform each of the DDs into a circuit.
- Combine all circuits into one equivalent to the given NN.



Time/Size for Step 1

	Size	Construction Time
[SS+20]-1 ([CH+03], for real weights)	$O\left(\binom{k}{2}\right)$	$O\left(k^2\right)$
[SS+20]-2 (folklore, for int weights)	$O(kW)$	$O(kW)$
Ours	$O\left(\frac{k^2}{\rho^2} \ln \frac{1}{\rho}\right)$	$O\left(2^k \text{poly}\left(\frac{1}{\rho}\right)\right)$

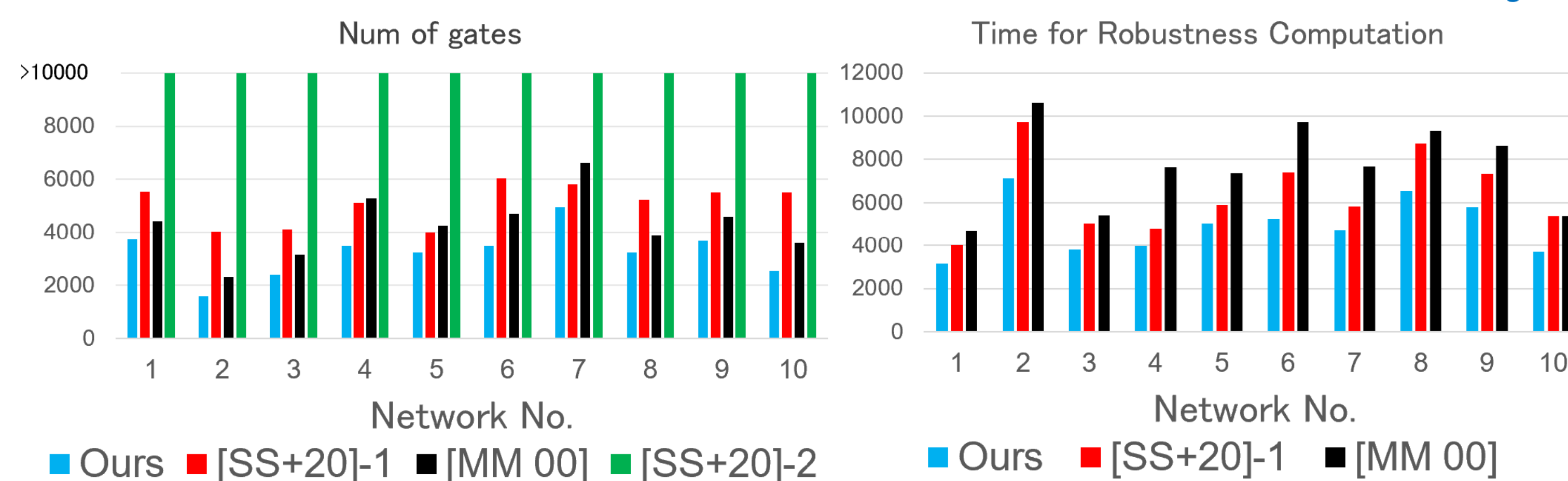
ρ : 1-norm regularized margin of the LTF

Our contribution: New boosting alg.
& its application to concise DD construction

ブースティング手法へのNNへの応用 (3)

The circuit constructed by our method is the smallest, and we compute robustness most efficiently. [SS+20]-2 took too much time so it's not shown at right.

#Networks are trained with different initial weights



[SS+20]-1's circuits are generated from the NN with real weights,
[SS+20]-2's circuits are generated from the NN with integer weights.

発表成果 (抜粋)

- Yuta Kurokawa, Ryotaro Mitsuboshi, Haruki Hamasaki, Kohei Hatano, Eiji Takimoto, Holakou Rahmanian, "Extended Formulation via Decision Diagrams," COCOON2023, 2023.
- Yiping Tang, Kohei Hatano, Eiji Takimoto, "Boosting-Based Construction of BDDs for Linear Threshold Functions and Its Application to Verification of Neural Networks," DS 2023, 2023.