

ボルツマンマシンによる n-クイーン問題の解法

5F-8

梶浦 正浩 秋山 泰 安西 祐一郎

慶応義塾大学 理工学部

0. はじめに

古典的なパズルであるn-クイーン問題を相互結合型ニューラルネットワークのエネルギー最適化に置き換えて解いた例を紹介する。本発表においては、ニューロンモデルとしてボルツマンマシン^[1]を用いた。

1. n-クイーン問題

n-クイーン問題は、図1のようにn×nのチェス盤上にn個のクイーンを互いに効き筋にこないように配置するという問題である。

再帰やバックトラック探索の例題にしばしば紹介されている。

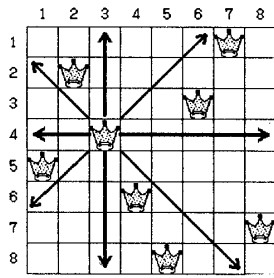


図1 8-クイーン問題の解の一例

2. ボルツマンマシンと最適化

ボルツマンマシンは、相互結合型ニューラルネットワークの一種で、ニューロンiの出力値 O_i は離散的(0または1)で、1が出力される確率pは入力加重和 ΔE_i によって(1)式のように変化する。

$$p(O_i=1) = \frac{1}{1 + \exp(-\Delta E_i/T)} \quad (1)$$

(1)式を図示すると図2のようになり、温度Tが高いほどニューロンの発火はランダムになり、低いほど決定的になる。

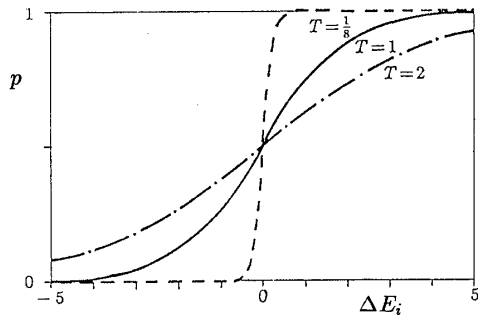


図2 入力加重和と発火確率の関係

発火状態aに対するネットワークのエネルギーE(a)を

$$E(a) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n W_{ij} O_i O_j - \sum_{i=1}^n \theta_i O_i \quad (2)$$

(W_{ij} : 結合荷重, θ_i : バイアス)

と定義すると、ネットワークの発火状態はホップフィールドネットワーク^[2]同様、エネルギーを最小化するように遷移していく。但し、確率的動作のため局所的極小からの脱出が可能となり、大域的な最小値へ向かう可能性が大きくなっている。この際に、はじめは温度を高くしておおまかな探索を行い、次第に温度を下げて詳細な探索を行う手法が有効となる。このような手法を「焼きなまし(Simulated Annealing^[3])」と呼ぶ。

ホップフィールドネットワークで解かれていた巡回セールスマン問題などの最適化問題を、ボルツマンマシンのこのような性質を用いて効率よく解くことができる。最適化問題をボルツマンマシンで解くためには、問題のコスト関数を(2)式に示される2次形式の関数で表わし、係数比較により問題に対応するネットワークの結合荷重及びバイアスを求めればよい。

3. n-クイーン問題のエネルギー関数

n-クイーン問題における制約条件は以下の通りである。

- a) 各行にはクイーンが必ず1つだけが存在する
- b) 各列にはクイーンが必ず1つだけが存在する
- c) 右上がり方向には高々一つのクイーンが存在する
- d) 右下がり方向には高々一つのクイーンが存在する

そこで、盤上の各位置についてそれぞれ1つのニューロンを割当て、その発火によって対応する位置にクイーンが存在することを表現するものとする。このとき、上記4つの制約を満足すると最小になるようなエネルギー関数を構成すると次のようになる。

$$\begin{aligned} E = & \frac{A}{2} \sum_{Y=1}^n \left(\sum_{X=1}^n O_{X,Y} - 1 \right)^2 && \text{制約 a)} \\ & + \frac{B}{2} \sum_{X=1}^n \left(\sum_{Y=1}^n O_{X,Y} - 1 \right)^2 && \text{制約 b)} \\ & + \frac{C}{2} \sum_{d=2}^{2n} \sum_{X+Y=d} \sum_{x \neq X} O_{X,Y} O_{x,y} && \text{制約 c)} \\ & + \frac{D}{2} \sum_{d=-n+1}^{n-1} \sum_{X-Y=d} \sum_{x \neq X} O_{X,Y} O_{x,y} && \text{制約 d)} \end{aligned} \quad (3)$$

これより、結合荷重 W_{XYxy} およびバイアス θ_{XY} は、

$$\begin{aligned} W_{XYxy} = & -A \delta_{Y,y} (1 - \delta_{X,x}) \\ & -B \delta_{X,x} (1 - \delta_{Y,y}) \\ & -C \delta_{X+Y,x+y} (1 - \delta_{X,x}) \\ & -D \delta_{X-Y,x-y} (1 - \delta_{X,x}) \\ \theta_{XY} = & \frac{A}{2} + \frac{B}{2} \end{aligned} \quad (4)$$

となる。ここで、A, B, C, Dは適当な正定数である。

4. 実験結果

①パラメータ選択

実験ではエネルギー関数のパラメータを以下のように設定した。

$$A = B = C = D = 10$$

また、温度Tの焼きなましのスケジュールは

$$T(t) = \frac{T_0}{1+t/\tau} \quad (5)$$

初期温度 $T_0 = 5$

減衰の時定数 $\tau = 2$

ただし、時間の単位(ステップ)は全てのニューロンが発火状態を平均して1回更新されるだけの時間とする。(ランダム更新を採用)

②ステップ数と収束率

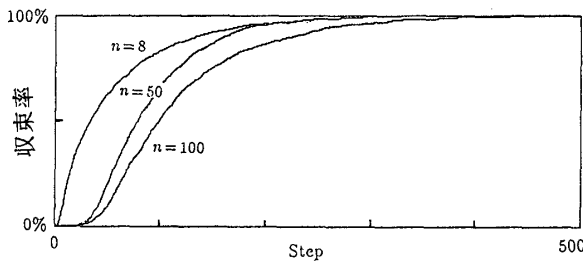


図3 ステップ数と収束率の関係

どの問題規模nに対しても、適当な時間をかけると収束率は100%へ近づいていく。これは、nに関係なく問題の制約条件の形が常に一定で、各ニューロンへの抑制もほとんど均一・対称であることによるものである。

③問題規模nと平均収束ステップ数

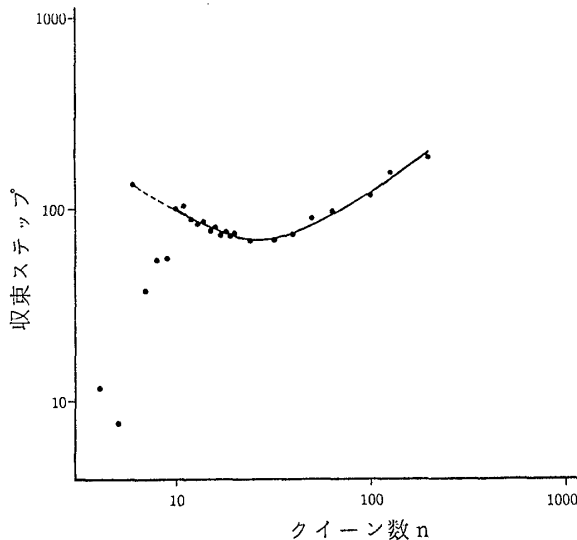


図4 クイーン数と平均収束ステップの関係

全体の傾向として、規模が増大するにつれて収束ステップも増大する。ただし、n=10近辺でピークがあり、その後n=25あたりまでは一時的に減少している。これは解の個数が問題規模に対して急速に増大するため、相対的にエネルギー関数の大域的最小への到着が容易になっているためと思われる。

5. 逐次探索との比較

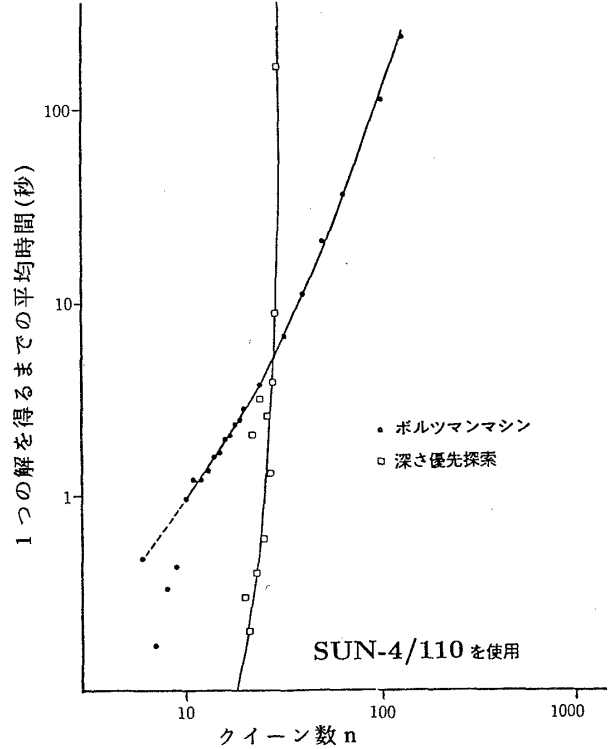


図5 ボルツマンマシンと深さ優先探索の比較

問題規模が小さい場合逐次探索の方が圧倒的に速いが、アルゴリズムの効率に依存はするが、問題規模が大きい場合は、ボルツマンマシンの方が1つの解が求まるまでの時間が短くなる。

逐次探索は問題規模により指数関数的に計算量が增大する。ボルツマンマシンにおける1ステップの計算量は、調節ユニット(Regulatory unit^[4])の手法を採用することによりO(n²)に抑えられている。重要なのは収束ステップ数であるが、これも今回の実験の範囲ではO(n)以下での増加である。

なお、逐次探索プログラムは深さ優先探索で、ごく一般的な枝刈りのみを採用している。

6. おわりに

現在のところ我々は1000クイーンまでを解いている。最適化問題では全ての解を必要とせず、1つの解だけでよい場合が多い。問題の規模が大きい場合、今回のような緩和探索手法を用いた方が効果的であろう。

参考文献

- [1] G. Hinton, T. Sejnowski, and D. Ackley: "Boltzmann Machines: Constraint satisfaction networks that learn", Tech. Rep. CMU-CS-84-119, Carnegie-Mellon Univ., 1984
- [2] J. J. Hopfield: "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities", Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 79, pp. 2554-2558, 1982
- [3] S. Kirkpatrick *et al.*: "Optimization by simulated annealing", Science, vol. 220, no. 4598, pp.671-680, 1983
- [4] D. Touretzky and G. Hinton: "A Distributed Connectionist Production System", Tech. Rep. CMU-CS-86-172, Carnegie-Mellon Univ.,1986
- [5] G. Tagliarini and E. Page: "Solving Constraint Satisfaction Problems with Neural Networks", Proc. of 1st ICNN, vol. 3, pp.741-747, 1987