

3D-6

エネルギー関数の動的な調節を用いたBoltzmann Machineによる
組み合わせ最適化問題の解法

本田敏文 横井利彰 松山実 山田新一

武蔵工業大学

1. はじめに

ニューラルネットワークの適用対象の1つに組み合わせ最適化問題が存在し、Hopfieldのネットワーク[1]やBoltzmann Machine[2]のような相互結合型のネットワークが一般に用いられている。

Boltzmann Machineは確率的に動作するため、焼きなましの手法等を用いることによりローカルミニマムを避けることが可能とされている。しかし、温度変化のスケジュールは経験的に選んでいるのが現状であり、このスケジューリングを誤ると精度の高い解が求められない、あるいは現実的な時間内での解決が不可能となる。

本研究ではネットワークのエネルギー関数により適切なものを選択すれば、シビアな温度調節を回避できると考え、ネットワークの状態に応じてエネルギー関数をダイナミックに変更する手法を提案する。これを組み合わせ問題の1つである巡回セールスマン問題(TSP)に適用し、デジタルシミュレーションによって比較、検討を行う。

2. TSP解法へのBoltzmann Machineの適用とエネルギー関数の設定

Boltzmann Machineは多数の単純なユニットが相互に結合したニューラルネットワーク構造を持つ。ネットワークの2つの状態 α, β が1度で遷移可能であり、ネットワークのエネルギーが $E(\alpha), E(\beta)$ のとき、遷移確率 $p_{\alpha\beta}$ は次式で表される。

$$p_{\alpha\beta} = \frac{1}{1 + \exp(-(E(\alpha) - E(\beta))/T)} \quad (1)$$

ここで T はネットワークの温度であり、通常ローカルミニマムに陥らないためにネットワークの温度を初期状態では高く設定しておき、徐々に温度を下げていく焼きなましが行われる。Gemanらはエネルギー最小の状態が得られることを保証する焼きなましのスケジュールを理論的に証明している[3]。しかし、このスケジュールにおける温度変化は非常にゆっくりしたもので、現実には実行が困難である。そこで通常、もっと早い温度変化スケジュールが用いられている。しかし、これは経験的に探し出されたものが用いられ、問題の種類等に対する一般性はない。

本研究では温度変化スケジュールに対して影響

を受けにくいエネルギー関数を次の方針で探し出し、この問題を解決しようと考えた。

- 1) ネットワークにおけるユニット数を少なくする。
- 2) ローカルミニマムとそれに隣接する状態のエネルギー差が小さい。

Gemanらのスケジュールは同じ時刻 t においてユニット数に比例した T が必要とされるため、1)により早い温度スケジュールが可能となる。また、ローカルミニマムを抜け易いようにするためには2)を満たすことが望ましい。

これに基づき、TSPにおける制約条件を次のように数式化した。それぞれのユニットの出力を V_{ij} とし、これが1である時、都市 i と j を結ぶ経路が選択されたことを表す。また、この経路長を d_{ij} とする。このとき満たさなければならない制約条件は次の式で示される。

$$\sum_j V_{ij} + \sum_j V_{ji} = 2 \quad (2)$$

ただし、これだけでは複数の分割された閉路を生成してしまう可能性があるため、都市をあらゆる2群 G, \bar{G} に分割してもこの両群を連絡する路が存在しなければならない。そのため次の式が成立する必要がある。

$$\sum_i \sum_j \alpha V_{ij} \geq 2 \quad (3)$$

しかし、(3)式をそのままエネルギー関数にとり入れた場合、隣接する状態のエネルギー差が非常に大きくなり、2)を満たさなくなる。これを防ぐため、(3)式を満たさなくなった時点で、動的にエネルギー関数を変化させる。これはラグランジュの未定係数法を用いて実現可能である。したがって、エネルギー関数は次式で表される。

$$E = \frac{A}{2} \sum_i (\sum_j V_{ij} + \sum_j V_{ji})^2 + D d_{ij} V_{ij} + \sum_G \lambda_G (\sum_i \sum_j \alpha V_{ij} - 2) \quad (4)$$

3. シミュレーション結果の比較、検討

(4)式に基づき、シミュレーションを行った。また、次式のエネルギー関数によるBoltzmann Machineの解との比較検討を行った。

(5)式で示される手法は文献[1]で述べられているエネルギー関数をそのままBoltzmann Machineに適用したものである。一方(6)式は、Boltzmann

Solution of Combinational Optimizing Problem using Boltzmann Machine with Dynamic Adjustment of Energy Function

Toshifumi Honda, Toshiaki Yokoi, Minoru Matsuyama, Shinichi Yamada

Musashi Institute of Technology

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{A}{2} \sum_x \sum_i \sum_{j \neq i} V_{xi} V_{xj} \\
 &+ \frac{B}{2} \sum_i \sum_x \sum_{z \neq y} V_{xi} V_{yi} \\
 &+ \frac{C}{2} (\sum_x \sum_i V_{xi} - n)^2 \\
 &+ \frac{D}{2} \sum_x \sum_{y \neq z} \sum_i d_{xy} V_{xi} (V_{yi+1} + V_{yi-1}) \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{A}{2} \sum_i (\sum_k V_{ik})^2 \\
 &+ \frac{A}{2} \sum_k (\sum_i V_{ik})^2 \\
 &+ \frac{D}{2} \sum_i \sum_j \sum_k d_{ij} V_{ik} (V_{jk+1} + V_{jk-1}) \quad (6)
 \end{aligned}$$

Machine では出力が離散的であることが保証されているため、(5)式の制約条件を少なくできることから導かれた式である[4].

都市配置を図1のように与えた。ステップ数が20000を超えた場合、解決不可能としてみなした。また、焼きなましのスケジュールは次のように設定した。

$$T(t) = \frac{T_0}{\log(t)} \quad (7)$$

パラメータと初期温度 T_0 の解に対する影響を解析するためにシミュレーション1, 2を行った。

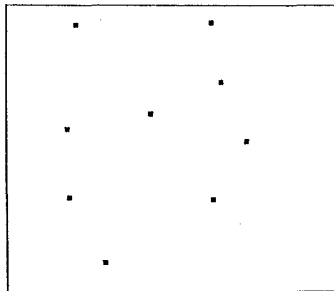


図1 都市配置図

シミュレーション1

エネルギー関数の目的関数に対応するパラメータを変化させた時の経路長の比較。

パラメータは以下のように設定した。

(4)式 $A=0.02, B=0.02$

(5)式 $A=0.02, B=0.02, C=0.025$

(6)式 $A=0.02$

$T_0=0.8$

制約条件を満たす収束が可能な最大の D を D_0 とし、 D を変化させたときに得られる経路長を調べた。(4)式では $D_0=0.023$ 、(5)式では $D_0=0.022$ であった。なお、(6)式では $D=0.0002$ にしてもステップ数20000以内では解が得られなかった。

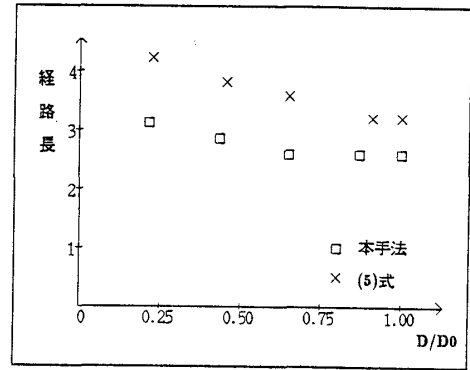


図2.パラメータを変化させた場合の経路長シミュレーション2

T_0 を変化させた時の経路長を調べた。パラメータは T_0, D 以外はシミュレーション1と等しくし、 D は D_0 とした。なお、(6)式によるものは $T_0=0.008, D=0.0002$ とした場合にも解が得られなかった。(5)式によるものは $T_0 > 0.8$ の場合、収束しなかった。

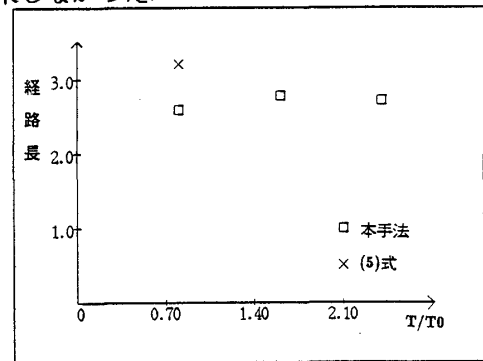


図3.初期温度を変化させた場合の経路長

シミュレーション1の結果、本手法ではパラメータの変動に対し安定に解が得られた。また、シミュレーション2から、 T_0 が高い場合、(5)式では、収束しなかったが、本手法では、安定して解が得られた。

4. むすび

Boltzmann Machineを用いた組み合わせ最適化問題の解法においてネットワークの状態を監視しながらエネルギー関数をダイナミックに変化させる手法を提案し、従来の手法との比較を行った。この結果、本手法では厳密な温度スケジュールを必要とせずに良好な解が得られることが検証できた。

参考文献

[1] Hopfield, J.J., and Tank, D.W. 1985. Biol. Cybernetics 52, 141-152
 [2] Hinton, G.E., and Sejnowski, T.J. 1983. 448-453
 [3] Geman, S., and Geman, D. 1984. IEEE Trans. PAMI-6, 721-741
 [4] 麻生英樹, ニューラルネット情報処理, 産業図書, 1988