ニューロコンピュータＡＮ１における組合せ最適化問題の解法と問題点

3W-9

西村浩二　林原香織　山下雅史　阿江忠
広島大学

1. はじめに

Hopfield ニューラルネットワーク[1]（以下ＨＮＮと呼ぶ）により、巡回セールスマン問題等のＮＰ困難な問題の近似解が得られたことで[2]、組合せ最適化問題へのＨＮＮの応用が盛んに行われている。しかし、問題を写像したエネルギ関数は一般に極値を持ち、しかもその極値が問題に対してどのような意味を持つのかについては論じられていないため、組合せ最適化問題への応用は試行錯誤的な要素を含んでいる。

本稿ではエネルギ関数の極値の特徴化という目的から、グラフの頂点をＨＮＮのニューロンと１対１に対応させることによりネットワークを簡単にした上で、ケーススタディとして最大独立点集合問題を取り上げる。そして、そのエネルギ関数の極小値が極大独立点集合に対応することを示す。

2. 最大独立点集合問題

あるグラフ G=(V,E) に対して、

$V_i \subset V$ such that

$u,v \in V_i$ *iff* $u,v \in V$ and $(u,v) \notin E$ for $u \neq v$

なる V の部分集合 V_i を独立点集合といい、V_i の中で要素数最大のものを最大独立点集合という。また極大独立点集合を次のように定義する。

[定義]　独立点集合 V_i において $u \in V - V_i$ なるすべての頂点 u に対して、$V_i \cup \{u\}$ が独立点集合となるような $(u,v) \in E$ なる頂点 $v \in V_i$ が存在しないとき、V_i を極大独立点集合という。□

最大独立点集合問題は、一般にはＮＰ困難な問題である。

3. ＨＮＮへの写像

ここではグラフの頂点をニューロンと１対１に対応させ、グラフの形状をニューロン間の結合により表現する。結合は問題の性質（隣接した頂点は選ばれない）により、一方が他方の興奮を抑制する抑制性結合とする。そして１を出力しているニューロン（１ニューロンと呼ぶ）が“独立点集合に含まれる頂点”、０を出力しているニューロン（０ニューロンと呼ぶ）が“独立点集合に含まれない頂点”を表すとする。すると最大独立点集合問題は、１ニューロンの数を最大にする問題と見ることができる。また最大独立点集合の数 I_{max} が既知であるとして、この問題に対するエネルギ関数を構成すると、次のようになる。

$$E = -\frac{A}{2}\sum_i\sum_j T_{ij}O_iO_j + \frac{B}{2}\left(\sum_i O_i - I_{max}\right)^2 + \frac{B}{2}\sum_i O_i(1-O_i) \qquad (1)$$

$$T_{ij}' = \begin{cases} -(I_{max}-1) & (O_i とO_j が隣接) \\ 0 & (その他) \end{cases}$$

$$E = -\frac{1}{2}\sum_i\sum_j T_{ij}O_iO_j - \sum_i I_iO_i \qquad (2)$$

$$T_{ij} = \begin{cases} 0 & (i=j) \\ -A(I_{max}-1)-B & (O_i とO_j が隣接) \\ -B & (その他) \end{cases}$$

$$I_i = +B(I_{max} - \frac{1}{2})$$

式(1)において第一項は１ニューロンが隣接しないとき、第二項は１ニューロンの数が I_{max} のとき、第三項はニューロンの出力が０か１のときそれぞれ最小となる。したがって、式(1)(2)は最大独立点集合となっているとき最小値０を持つ。このとき、このエネルギ関数により解くことのできる問題は最大独立点集合問題の部分問題であり、$A \geq B$ のとき極大独立点集合問題となることが証明できる。

[定理１]　$A \geq B$ の係数を持つ式(2)で表されるエネルギ関数を写像したＨＮＮの安定状態は極大独立点集合であり、その逆も成り立つ。

(証明)　文献 [4] 参照。

4. バイナリ化したＨＮＮ

今回実験に使用したものはＲＡＭ１５個（１５ニューロン）により構成されるＨＮＮであり、アルゴリズム駆動ニューロコンピュータＡＮ１[3]の１基本ブロックである。以下では、アナログ素子で実現されたＨＮＮを単にＨＮＮ、ＲＡＭにより実現されたＨＮＮをバイナリＨＮＮと呼ぶ。

4.1. 各データの設定

ニューロンとしてＲＡＭを用いたために、各ニューロンの結合重みとしきい値をそれぞれ各ＲＡＭのアドレスとデータのテーブルに変換する必要がある。ここでＲＡＭｉの出力 O_i は次式を計算することで得られる。

$$O_i = R(T_{i1}O_1 + T_{i2}O_2 + \cdots + T_{in}O_n + I_i) \qquad (3)$$

$$R(x) = \begin{cases} 0 & (x<0) \\ 1 & (x \geq 0) \end{cases}$$

各ＲＡＭの出力を、入力の組 $(O_1, O_2, \cdots, O_n)$ の $(0,0,\cdots,0)$ から $(1,1,\cdots,1)$ まですべての場合について式(4)を計算し、対応するアドレスに記憶する。したがって１つのＲＡＭを設定するのに、2^n の手間が必要となる。このテーブル設定はＣ言語の関数で行い、１５個のＲＡＭを設定するのに必要な時間は約１分である。

Problem solving of Combinatorial Optimization Problems by Neuro-Computer AN1

Kouji NISHIMURA, Kaori HAYASHIHARA, Masahumi YAMASHITA, Tadashi AE
Hiroshima University

4.2. 実験結果

バイナリHNNは一定時間で極大独立点集合を求め、アルゴリズムはほぼ $O(n)$ で求まっていることが確かめられた（図1）。より大きなHNNが構成可能となった場合、頂点数nを増加しても同様な結果が得られることが期待できる。また、トリガをかける関数は約 300μs、状態を読み出す関数は約 170μs と一定であり、関数の実行中に十分安定状態に遷移できるので、バイナリHNNで極大独立点集合を求めるのにかかる時間は、一定値約 470μs となる†。

5. 問題点と改良

バイナリHNNの遷移は、初期状態をn次元超立方体のある頂点とすると、状態を表す点はハミング距離1で現在よりエネルギの低い頂点へ遷移する（図2）。そして周りの頂点のエネルギが現在の頂点のエネルギより高くなったとき停止して、ニューラルネットワークは安定状態となる。したがって、その経路の途中にエネルギ関数の極小点に対応する頂点が存在するとその頂点で停止してしまい、最大独立点集合問題においては、極大独立点集合が求まった状態となる。初期状態からエネルギ極小点への経路をとるか、最小点への経路をとるかは非決定的であるため、いかにしてよい初期状態を与えるかが問題となるが、そのような初期状態を見つけることは最適解を見つけることと等価であると考えるのが自然である。

すると問題は、局所最適解からいかにして最適解へ遷移するかということになる。その方法として次の2つが考えられる。

(1)　外力（アルゴリズム）により制御する。

(2)　アナログ・コンピュテーションを再検討する。

前者の考えに基づくものがアルゴリズム駆動ニューロコンピュータＡＮ１[3]である。これは、局所最適解の持つ情報を基に次の初期状態をアルゴリズムにより決定するというものである。しかし、制御に利用できるアルゴリズムは局所最適解の情報のみから初期状態を決定しなければならず、このようなアルゴリズムを見つけ、その完全性を証明することは困難である。

一方、後者はデジタル化を諦めるのではなく、アナログの“良さ”を見直すというものであり、HNNがうまく問題を解くと言われる根拠やどのようにして問題を解いているかを明らかにした上で、改めてデジタル化について考えるということである[4]。

6. あとがき

本稿では最大独立点集合問題において、エネルギ関数が極小値を持つが、それが極大独立点集合に対応することを示した。そして実際にバイナリHNNに写像した場合、極大独立点集合が一定時間で求まることを確認した。最後にエネルギ関数の極小点に陥った場合、その極小点から抜け出すための改良方法について考察した。エネルギ関数の極小値の性質を把握することはアルゴリズムを援用する際に必要であり、それは問題を特定することで可能となる。

†) このうちバイナリHNN自体の動作は 20μs。

参考文献

[1] J.J.Hopfield, "Neurons with graded responce have collective computational properties like those of two-state neurons," Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 81, pp.3088-3092 (1984).

[2] J.J.Hopfield and D.W.Tank, " "Neural" Computation of Decisions in Optimization Problems," Biological Cybernetics, 52, pp.141-152 (1985).

[3] 阿江, 山下, 相原, 新田, “アルゴリズム駆動ニューロコンピュータＡＮ１,” 信学技報, ICD88-129, pp.81-88 (Dec.1988).

[4] 西村, 林原, 山下, 阿江, “ホップフィールド・ニューラルネットワークによる高速処理解法について,” 電子情報通信学会ニューロコンピューティング研究会 (Jul.1989).

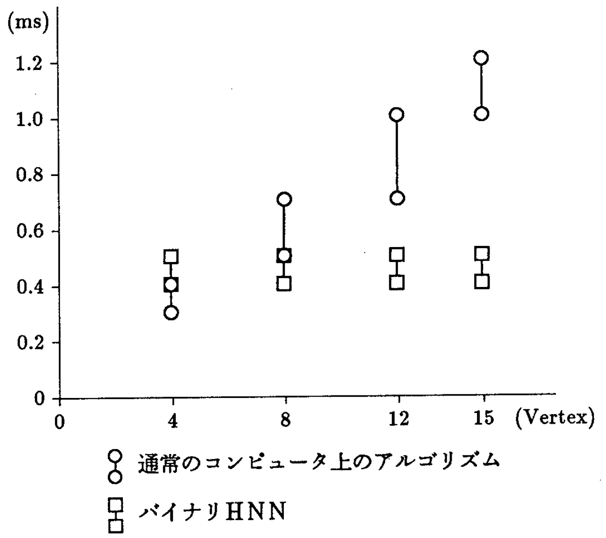

図1　極大独立点集合問題を解くために必要な時間

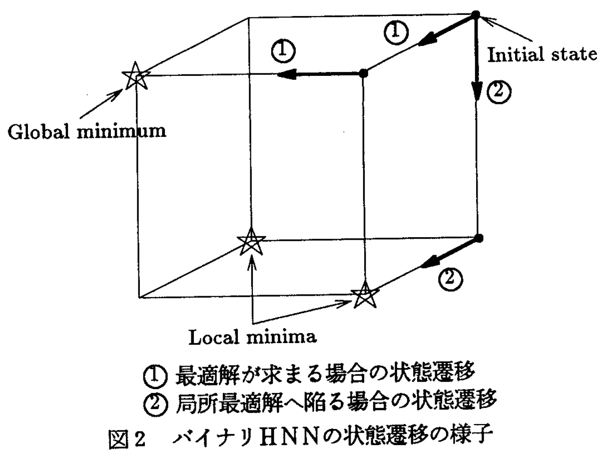

図2　バイナリHNNの状態遷移の様子