1L−8

Traveling Local Minimums

小中 裕喜
三菱電機株式会社 中央研究所

1 はじめに

対称に重みづけされた相互結合型ニューラルネットワーク（以下、Hopfield ネットワークと呼ぶ）ではエネルギー関数が定義され、そのエネルギーが単調減少するように状態変化規則を定めることが可能である。このとき、ネットワークの状態変化をすすめることによってエネルギーが極小となる状態に収束することが簡単に示され、この性質を利用して Hopfield ネットワークを連想記憶や組合せ最適化問題などに応用しようとする試みが数多く提案されてきた。

しかし、例えば組合せ最適化問題ではエネルギー最小の状態が解となるようにネットワークを設定するが、どの極小値に収束するかはネットワークの初期状態に依存するため、必ずしも最適解に到達するとはいえない。

本稿では、エネルギー極小となる状態を局所的に探索するアルゴリズムを示し、その応用について述べる。

2 Hopfield ネットワーク

Hopfield ネットワークは各ノードがすべて相互に結合されたものである [1]。ノード数を N、i 番目のノードの閾値を I_i、i 番目から j 番目のノードへのリンクの重みを T_{ij} とするとき、i 番目のノードの出力を V_i は

$$V_i = g(U_i) \qquad (1)$$

$$U_i = \sum_{j=1}^{N} T_{ij} V_j + I_i \qquad (2)$$

で表される。ただし、$T_{ii} = 0\ (1 \le i \le N)$ とする。

g は特性関数と呼ばれ、ステップ関数や

$$g(x) = \frac{1}{1+\exp(-x/\mu_0)} \quad (\mu_0 \text{は定数}) \qquad (3)$$

といったシグモイド状の関数が用いられる。

ここで、$T_{ij} = T_{ji}$ かつ各ノードが非同期に状態を変える場合、

$$E = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} T_{ij} V_i V_j - \sum_{i=1}^{N} I_i V_i \qquad (4)$$

によって定義されるエネルギー E は、状態の変化にともなって自発的に減少し、ネットワークのエネルギーが極小となるような状態へ収束する。しかし、式 (4) で表されるエネルギー関数は一般に多くの極小点を持つため、初期状態の設定をランダムに行なった場合、ネットワークの状態変化とともにエネルギーが減少していく過程で最小点以外の極小点に陥る確率が高い。

ネットワークで表現された最適化問題では、一般に最適解は最小エネルギーに対応する状態で表現されるので、最小点以外の極小点に収束しても最適解は得られない。

最小点以外の極小点への収束を回避する問題に対して、これまでにいくつかの試みが提案されてきた。その例としては、

i) 初期状態の設定を工夫する。
ii) エネルギー関数の設定において、最小点の近傍の極小点を減少させる、もしくは極小点を疎らにもつようにする。
iii) ネットワークの計算に確率的な扱いを採り入れる

などがあげられる。

i) については、例えば状態空間の中心付近を初期状態にすればよいという提案があるが、反例もある。また、複数の初期状態から極小点を求めて、それらの内の最小のものを求める方法もあるが、異なる極小点を効率よく求めるわけではない。ii) については、問題を冗長に表現するなどといった試みがなされているが、多分にヒューリスティックである。iii) には、Hinton らによるボルツマンマシンなどがある。ボルツマンマシンでは計算時間の改善のためシミュレーティドアニーリングなどの方法が併用される。シミュレーティドアニーリングにおいては、温度変化を非常に緩やかにするとかなり良好な極小点（あるいは最小点）へ到達可能だが、これは計算時間の増大をもたらす。温度変化を早めると、最小点への到達確率が減少したり、孤立した深い最小点への到達が困難になったりするなど、新たな問題を生ずる。また低温では動作が決定的であるため、新たな極小点を探索するためには状態をランダムに設定し直すか、あるいは温度を再上昇させるなどの方法をとらざるを得なかった。

3 TLM(Traveling Local Minimums) 法

エネルギー極小の状態を局所的に探索するアルゴリズム TLM (Traveling Local Minimums) 法について説明する（図1）。これは、直接最小点を見い出すのではなく、ある極小点の近傍でより小さなエネルギーを持つ点があるかどうかを探索しようというアプローチである。

まず、適当にネットワークの各リンクの重みと初期状態 α を設定する。各ノードの閾値は、出力が1で不変な特別のノードからその他のノードに接続されるリンクの重みで表しても一般性を失わないので、以下、説明の簡単化のため、閾値はそのように表されているものとする。

適当な計算を用いて状態を変化させるとネットワークはある極小点 β に到達する。

そこで各リンクの重みの符号を反転する。ここで式 4から明らかにエネルギー関数 E の符号は反転する。このときのエネルギー関数を E' として区別することにする。E では極小点 β にあったネットワークの状態は、E' では極大点 β' となっている

Traveling Local Minimums
Hiroki Konaka
Mitsubishi Electric Corp.

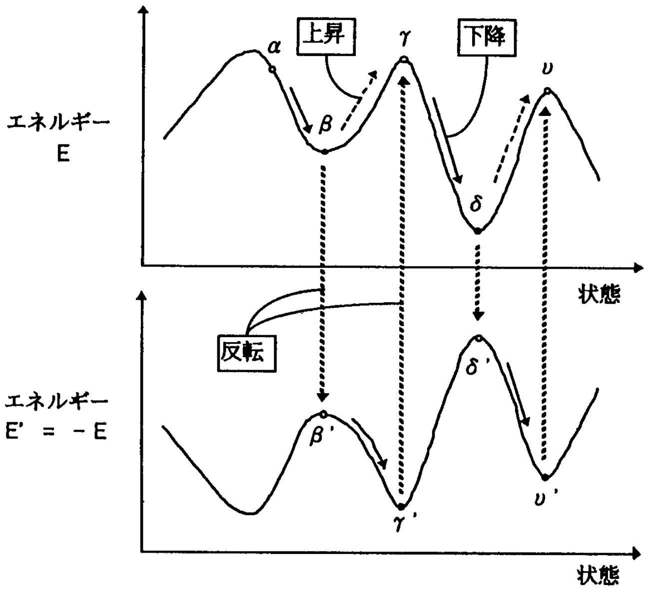

図 1: TLM の原理

点に注意する。

そして、状態変化を進めるとネットワークは E' における極小点 γ'、すなわち E における極大点 γ に対応する状態に到達する。極小点 β から極大点 γ に至るこの一連の動作を上昇と呼ぶことにする。

そこで再び各リンクの重みの符号を反転し、状態変化を進めるとネットワークは E における極小点 δ へ到達する。極大点 γ から極小点 δ に至るこの一連の動作を下降と呼ぶことにする。

ここで重要なのは、この時に到達した極小点 δ はもとの極小点 β と同一か、あるいは高々1つの極大点 γ を隔てたものであり、しかも同一の極小点に落ち込む可能性は一般にノード数が多くなるほど小さくなる点である。

$E \Longrightarrow E'$ あるいは $E' \Longrightarrow E$ という変換をネットワークの反転と呼ぶことにする。また、上昇と下降の動作を総称して移動と呼ぶことにする。連続した移動では、上昇と下降は交互に行なわれる。

上記の動作では移動方向は不確定であるのに対し、極小点/極大点においてネットワークを反転させた後、その状態に変化（ゆらぎ）を与えることによって、移動の初期方向を定めることも考えられる。例えば1つのノードを選択し出力を反転させるのは容易な方法である。ノードの選択方法としては、

i) ランダムに選択する

ii) 直前の移動とは異なる方向になるように選ぶ

iii) 最急降下（上昇）となるノードを選択する

などが考えられる。また一般に、各ノードが非同期に動作する場合、どのノードの計算が早いかによって、移動の方向は異なる。これを自発的ゆらぎと呼ぶことにする。

これらのゆらぎを用いた場合、探索領域がもとの極小点から離れていく可能性もあり、また重複した探索を行なう可能性もある。そこで幅優先の探索を行なうことを考える。すなわち、ある極小点からのゆらぎの方向のすべての選択肢について（例えばi)の方法ならば n 通り存在する）、1回の上昇を行なう。すると、それらはすべて近傍の極大点に到達する。次に、到達したすべての極大点について（重複は省く）、それぞれのすべてのゆらぎの方向について同様に1回の下降を行なう。このとき当然出発点の極小点に到達するものもあるが、それは省略し、他の初めて到達したすべての極小点について重複なく同様の操作を行なっていく。以上の操作を反復していく。このアルゴリズムでは、何回目の移動かによって計算量は最初指数的に増えていくが、やがて飽和し、最後には到達可能なすべての極を探索し尽くして終る。しかし、計算量の面から考えると移動の回数を限定して行なう方が現実的である。

4 実行例

3つのノードを持つネットワークにおいて TLM を応用した様子を図2に示す。リンクの重みはすべて -6 であり、閾値はそれぞれ 5,4,3 に設定している。その極小値・極大値は図に示した通りである。また、図中の実線は下降を、破線は上昇を示している。番号は移動の順序である。ここでは、特性関数としてロジスティック関数を用い、ゆらぎは特に与えていない。

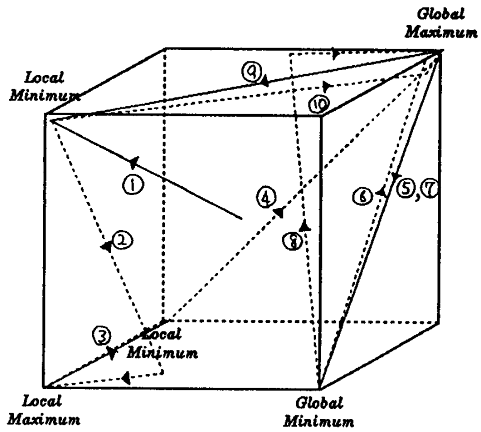

図 2: TLM の実行例

5 今後の課題

Hopfield ネットワークにおいて、エネルギーが極小となる状態を局所的に探索するアルゴリズム TLM を示し、実際に極小点を渡り歩くような動作をすることを示した。

TLM は、確率的な神経計算によって得られた極小点を出発点として行なう時も有効である。上で述べたように、シミュレーティドアニーリングにおいて計算時間の短縮のために温度変化を高速にすると、あまり小さくない値を持つ極小点に陥る可能性が高くなるが、そこで TLM を用いれば近傍の極小点を探索することが可能であり、さらに小さな値を持つ極小点を発見することが考えられる。

ゆらぎを与える方向をどのようにすれば効率のよい探索が可能になるか、という点についてもより詳細な検討が必要である。

参考文献

[1] Hopfield, J.J. and Tank, D.W.: *"Neural" Computation of Decisions in Optimization Problems*, Biological Cybernetics, Vol.52, pp.147-152 （1985）.