組合せ最適化問題の準最適解の生成方法

6R－4

日立　野中 久典　小林 康弘

１．はじめに

Hopfieldネットやボルツマンマシンに代表される相互結合型のニューラルネットワークを用いて、組合せ最適化問題を解く試みが行われている。本研究ではＴＳＰ（巡回セールスマン問題）を例題として、Hopfieldネットの求解プロセスの収束条件を明らかにし、その条件を用いて、得られる解の質を制御できることを示す。

２．ＴＳＰの定式化

今、ｉ行ｊ列にあるニューロンの状態をU_{ij}と表す。$U_{ij}=1$でｉ番目の都市がｊ番目に訪問されることを、$U_{ij}=0$でそれ以外の場合を示す。

まず、ニューラルネットの持つ、系としてのエネルギーＥは次の式で定義される。

$$E=-\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j}\sum_{i'}\sum_{j'}W_{iji'j'}\cdot U_{ij}\cdot U_{i'j'}+\sum_{i}\sum_{j}S_{ij}\cdot U_{ij} \qquad (1)$$

ここで、$W_{iji'j'}$はニューロン間の結合係数、S_{ij}は状態変化のしきい値である。

巡回路長Ｅ１、および「全ての都市を一回ずつ訪れる」という制約条件が満足された場合に最小値０をとる制約関数Ｅ２は各々、

$$E1=\sum_{i}\sum_{j}\sum_{i'}\sum_{j'}d_{ii'}\cdot U_{ij}\cdot(U_{i'j+1}+U_{i'j-1}) \qquad (2)$$

$$E2=\sum_{i}\left(\sum_{j}U_{ij}-1\right)^2+\sum_{j}\left(\sum_{i}U_{ij}-1\right)^2 \qquad (3)$$

と表すことができる。ここで$d_{ii'}$は都市ｉと都市ｉ'間の距離である。次に、最適化の目的関数Ｅを次のように定義する。

$$E'=E1+\lambda\cdot E2 \qquad (4)$$

ＥとＥ'とを係数比較することによって、$W_{iji'j'}$およびS_{ij}の式を求めることができる。この$W_{iji'j'}$とS_{ij}を用いるHopfieldネットを動作させることにより、ＥすなわちＥ'を最小化するようなU_{ij}の組合せを求め、都市の訪問順序を決定することができる。

３．Hopfieldネットの収束条件

Hopfieldネットの収束状態では、全てのｉ，ｊについて次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned}&\text{if}\quad U_{ij}=0\quad \text{then}\quad I_{ij}\leqq 0\\&\text{if}\quad U_{ij}=1\quad \text{then}\quad I_{ij}\geqq 0\\&I_{ij}=\sum_{i'}\sum_{j'}W_{iji'j'}\cdot U_{i'j'}-S_{ij}\end{aligned} \qquad (5)$$

$$\therefore\ (2U_{ij}-1)\cdot I_{ij}\geqq 0 \qquad (6)$$

先に求めた$W_{iji'j}$とS_{ij}の式を(６)式に代入して式変形することにより、結局、実行可能解が収束状態となるための必要十分条件として、

$$\lambda\geqq[\text{巡回路上で連続した3都市間の距離の最大値}] \qquad (7)$$

を導くことができる。すなわち、この条件を満たさない実行可能解はHopfieldネットの収束状態にはなり得ない。この性質は、Hopfieldネットの持つエネルギー構造が、図１に模式的に示すように、λの大きさによって変化する

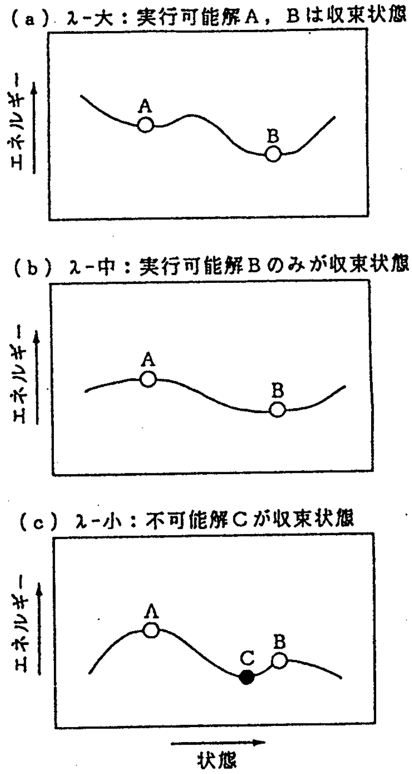

図１　λによる系のエネルギーの変化

A method to generate sub-optimal solutions of combinatorial optimization problems
Hisanori NONAKA, Yasuhiro KOBAYASHI
Hitach, Ltd.

ことに起因する。これを利用して、λの値に基づいて、得られる解の質を制御することが可能である。例えば、図１(ｂ)のようにλの値を設定することにより、実行可能解Ａ，Ｂのうち、よりエネルギーの低い（質の良い）解であるＢを選択的に求めることができる。

４．　モデル問題への適用

λによって解の質が制御できることを、準最適解を持つ最小のＴＳＰである４都市ＴＳＰについて確かめた。図２に示すＴＳＰにおいては、(７)式に従うと、$2 \leqq \lambda \leqq 1+\sqrt{2}$なるλを用いることによって、最適解のみを収束状態とすることが可能なはずである。ここでは、確率的に動作するHopfieldネットであるBoltzmann Machineを長時間観察したときに、ネットワークのどの状態がどのような確率で出現するかをλ＝1.5，2.2，3.5の場合について調べた。

(1) λ＝1.5：特定の状態に留まらず、多数の実行可能解でない状態が少数回づつ出現する。

(2) λ＝2.2：最適解のみが出現し、準最適解はほとんど現れない。ネットワークの温度Ｔに対する出現確率の変化を図３に示す。

(3) λ＝3.5：最適解と準最適解の両方が出現する。

以上の結果より、(７)式の収束条件から予想されたように、λ＝2.2の場合に最適解のみを選択的に求められることを確認した。

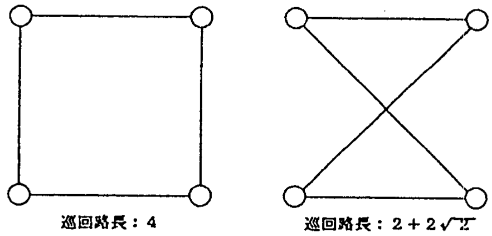

図２　４都市ＴＳＰの最適解と準最適解

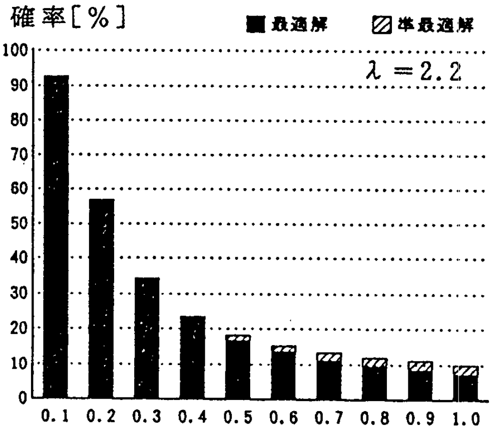

図３　最適解を得る確率の変化

さらに、λを利用して解の質を制御するボルツマンマシンを４×４の格子状に配置した16都市ＴＳＰに適用した。この数値実験においては、約16個のニューロンがＯＮ状態となるように温度Ｔを設定して固定し、乱数を用いて作成した10個の初期状態からネットワークを動作させ、これらのうち最初に求まった実行可能解を出力解とした。結果を図４に示す。この問題では(７)式より$0.4 \leqq \lambda < 0.2+0.2\sqrt{2}$ (≒0.483)で最適解のみが実行可能解となると予想できる。λ＝0.90では、質の悪い解が短時間で求まる。λ＝0.70では、解の質が向上し、λ＝0.45で最適解が得られた。ＣＰＵ時間はλが小さくなるに従って長くなるが、λ=0.70，0.90では、初期状態を変えても最適解は求められなかった。

以上より、λを利用する解の質の制御が、実際的な規模の問題に対しても適用可能であり、特に一定水準以上の準最適解が求められる場合に有効であることを確認した。

[1] 小林他：組合せ最適化問題の準最適解の改良方法、本大会予行集

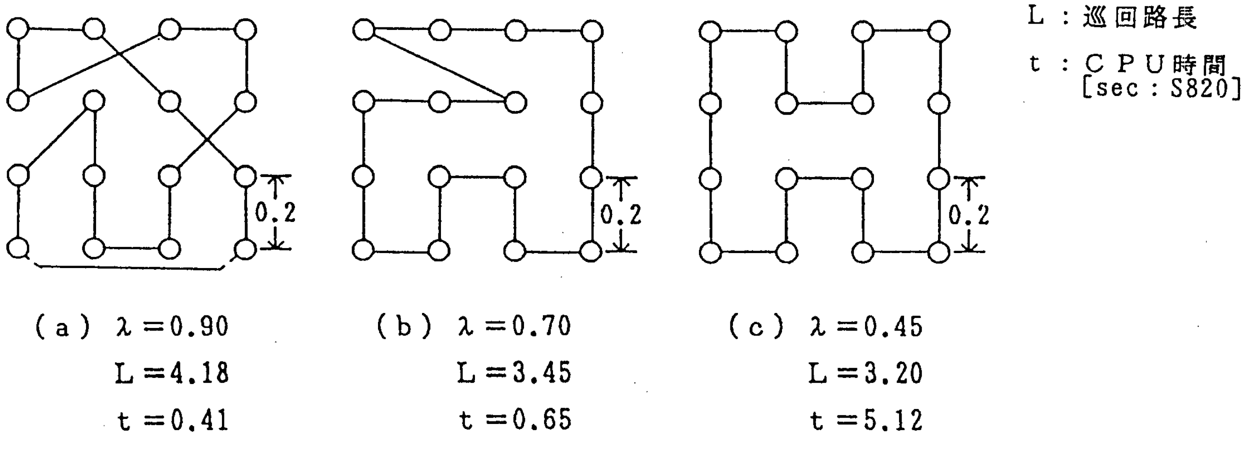

図４　λに基づく解の質の変化