ホップフィールドネットの積分の高速化方式

6H－7

阿部重夫
日立製作所 日立研究所

1. はじめに

ホップフィールドネットにより組合せ問題の準最適解が高速に求められるという期待のもとに、多くの研究者が研究を進めているが、大規模問題では、ホップフィールドが提案したネットそのままでは、十分に良好な解が得られないため種々の改良が加えられている。

ホップフィールドネットの欠点としては次の点があげられる。

1)エネルギー関数中の重みを決定する方法がない。
2)大規模問題の解の質が悪い。
3)問題の定式化が効率の悪い場合がある。

1) に関してAiyer[1]は プロジェクション法を提案した。この方法では目的関数の最小化と制約条件を満たす解を含む空間への投影を交互に制約を満たす解が求まるまで行なう。文献2) において我々は係数行列の対角要素が０のときの大域的な収束特性を明らかにすると共に、制約条件を満たす解が安定となる重みの決定法を開発した。

2) に関してAiyer[1]は、係数行列の対角要素を０にすることが解の質を悪くする原因であることを指摘すると共に、解の質を改善するMGNC 法を提案した。この方法は、積分中に対角要素を 徐々に増加させることにより、絶対値最大の固有値に対する固有ベクトルの方向に解が動くようにしたもので、ホップフィールドの文献にある30都市の巡回セールスマン問題に適用して解の質が格段に改善されることを示した。

文献3)で、我々は従来のホップフィールドネットの枠内でMGNC法が適用できるように大域収束理論を対角要素が非零のときに拡張すると共に対角要素を徐々に減らすことにより解の質が大幅に向上することを示した。（文献3)では係数行列の符号の取り方が文献1)と逆になっているために増加の代わりに減少になっている。）

3)に関しては、もしn都市の巡回セールスマン問題をシミュレーティドアニーリング法で解くとn個の変数で都市の訪問順序を設定できるが、ホップフィールドネットではnの二乗のニューロンが必要である。しかしながら、これはホップフィールドネットを用いるかぎりは避けられないため、ホップフィールドネットの枠内で収束を高速化することを考える。

Acceleration of Convergence of the Hopfield Neural Network
Shigeo Abe
Hitachi Research Laboratory, Hitachi,Ltd.
7-1-1 Omika, Hitachi, 319-12 Japan

2. ホップフィールドネットの解の安定条件

最小化するエネルギー関数を次式のようにおく。

$$E = x^t T x + b^t x \tag{1}$$

但し$x = (x_1,\ldots, x_n)^t$: 要素が0,1の変数ベクトル、$T = \{T_{ij}\}$: n次対称行列、b: n次入力ベクトルである。区分線形関数を用い、x_iの範囲を[0, 1] 拡張したホップフィールドモデルは以下のようになる。

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial E}{\partial t} = -Tx - b\ ,\ 0 \le x_i \le 1,\ i = 1, \ldots, n \tag{2}$$

x_iに適当な初期値を設定して(2)式を積分すると(1)式のエネルギーが極小化され、n 次元超立方体における頂点、即ちx_iが１あるいは０の解が求まる。

ここで頂点を$c = (c_1,\ldots, c_n)$, $c_i = 1, 0$とすると、頂点cの安定性は(2)式に

$$x = c + x' \tag{3}$$

を代入することにより解析できる。即ち

$$\frac{dx'}{dt} = -Tc - b - Tx' \tag{4}$$

従ってもし頂点cが$i = 1,\ldots, n$に対して

$$c_i = 0のとき T_i c + b_i > 0$$
$$あるいは c_i = 1のとき T_i c + b_i < 0 \tag{5}$$

が成立するとき頂点近傍では解は頂点の方向に進むから頂点は安定である。ただし、T_iは行列Tのi番目の行ベクトルを示すとする。

3. 積分刻み幅の決定

収束を早めるため、時刻tの積分刻み幅をx(t)の要素が超立方体の表面に到達するように決める。ここでt = 0 とすると、$x_i(0) = 1$ で $(Tx(0) + b)_i \le 0$ のときあるいは$x_i(0) = 0$ で $(Tx(0) + b)_i \ge 0$のときは、i番目の要素は超立方体から離れて行く。ただし、添え字iはベクトルのi番目の要素を示す。従ってこのような要素は積分刻み幅の決定から除く。ここで集合I を$x_i(0) = 1$ で $(Tx(0) + b)_i \le 0$あるいは$x_i(0) = 0$ で $(Tx(0) + b)_i \ge 0$を満たす添え字

の集合とし、N = {1,..., n} とする 。このときi ∈ N - Iについて次の計算をする。

$$t_i = \begin{cases} \dfrac{1 - x_i(t)}{(Tx(0) + b)_i} & \text{for } (Tx(0) + b)_i > 0 \\ \dfrac{- x_i(t)}{(Tx(0) + b)_i} & \text{for } (Tx(0) + b)_i < 0 \end{cases} \quad \text{for } i \in N - I \qquad (6)$$

t_iは要素$x_i(0)$が超立方体の表面に到達する積分刻み幅となる。ここで１個の要素のみが表面に到達するようにするために以下のようにおく。

$$\Delta t = \min_{i \in N-I} t_i \qquad (7)$$

4. ループ脱出

4.1　ループの検出

積分刻み幅の決定法は、決定的であるため積分途中に無限ループに陥る可能性がある。ここでi(j)を時刻j で$t_{i(j)}$が(7)式で最小を与えるとする。i(j)の系列を選択系列とよぶことにする。ここで次のような選択系列は無限ループに陥る可能性がある。

.....4 6 3 2 4 6 3 2 4 6 3 2......

このようなループ検出のオーバーヘッドを避けるために同一の添え字の対が３回現われたときに無限ループが発生したと判定する。即ち

1) 第一のループ条件

$i(j) = i(k)$

$i(j + 1) = i(k + 1)$　　for $j + 1 < k$

$i(j) \neq i(m)$　　for $m = j + 2,\ldots, k - 1$　(8)

2) 第二のループ条件

$i(k) = i(l)$

$i(k + 1) = i(l + 1)$　　for $k + 1 < l$.

$i(k) \neq i(m)$　　for $m = k + 2, \ldots, l - 1$　(9)

が成立したとき無限ループが発生したと判定する。上記を実現するために各々のx_i (i = 1,..., n) に対して次の２つのアレイを用意する。

post(i):　i が選択された次のステップで選択された添え字を格納する。

loop(i):　２つの対の添え字が検出されたか否かを格納する。

この時ステップ j で以下の処理を行なう。

1) もしi(j) ≠ post(i(j-1))のとき、即ち、第一のループ条件が満たされないときは、i(j) = post(i(j-1))としloop(i) = 0とする。

2) もしi(j) = post(i(j-1)) でloop(i) = 0 のとき、即ち、第一のループ条件が満たされたとき、loop(i) = 1 とする。

3) もしi(j) = post(i(j-1)) でloop(i) = 1 のとき、即ち、第二のループ条件が満たされたとき、無限ループが検出されたとしてloop(i) = 0 とする。

極端な場合、同一の添え字が2回続けて検出されたときは、自己ループが検出されたと判定する。ループが検出されたときはループ解消ができるように積分刻み幅を修正する。

4.2　積分刻み幅の修正

1) 自己ループが検出されたとき

$$\Delta t \leftarrow \Delta t \times \mathrm{Rand} \qquad (10)$$

と修正する。ただしRand は[0, 1] に一様に分布する乱数である。積分刻み幅を小さくすることにより、次のステップで別の添え字が選択されるようになる。

2) (10) 式でうまく行かないとき、即ちi(j-2) = i(j-1) = i(j)のときおよび(8), (9)式で与えられるループが検出されたとき、次のように積分刻み幅を変更する。

$$\Delta t \leftarrow \Delta t(1 + \beta_1 \times \mathrm{Rand}) \qquad (11)$$

ただしβ_1は小さな正の値である。

3) ループがないときは

$$\Delta t \leftarrow \Delta t(1 + \beta_2 \times \mathrm{Rand}) \qquad (12)$$

ただしβ_2は小さな正の値である。(12)式は収束を非決定的にするもので、通常$\beta_1 > \beta_2$とする。

5. おわりに

収束を高速化するために、積分の各ステップで少なくとも１つの要素が超立方体の表面に到着するように積分刻み幅を決める方式を提案した。この方式を巡回セールスマン問題とLSI 配置問題に適用したところ、積分刻み幅が一定のときに比べて２倍以上高速化でき、解の質も改善されることが分かったが、これについては講演時に示す。

6. 参考文献

1) S.V.B Aiyer, "Solving Combinatorial Optimization Problems Using Neural Networks with Applications in Speech Recognition," Technical Report CUED/F-INFENG/TR 89, Department of Engineering, University of Cambridge, October 1991.

2) S. Abe, "Global Convergence and Suppression of Spurious States of the Hopfield Neural Networks," IEEE Trans. Circuits Syst.-I, Vol. CAS-40, No. 4, pp. 246-257, April 1993.

3) S. Abe and A. H. Gee "Global Convergence of the Hopfield Neural Network with Non-zero Diagonal Elements," IEEE Trans. Circuits Syst.-I(to appear).