

大規模な巡回セールスマン問題に対する ホップフィールドニューラルネットの性能比較

田中敏雄[†] 松田 聖^{††}
古谷立美^{†††} 樋口哲也[†]

ホップフィールドネットを用いて巡回セールスマン問題 (TSP) を解く場合、都市の訪問順序に基づく定式化と都市隣接性に基づく定式化の2つの方法が提案されている。本論文では、この2つの定式化について10~140都市と小規模から大規模なTSPに対して、得られる解の質と計算時間の双方について、理論的基準に基づいて重みの係数の設定を行い公平な性能比較を行う。その結果、解の質に関しては都市隣接性に基づく定式化の優位性が判明した。また、都市隣接性に基づく定式化の計算時間の優位性は130都市までであり、これ以上の都市数では、都市の訪問順序に基づく定式化の方が計算時間が短くなることが判明した。

Performance Comparisons of Two Hopfield Neural Networks for Large-scale Travelling Salesman Problems

TOSHIO TANAKA,[†] SATOSHI MATSUDA,^{††} TATSUMI FURUYA^{†††}
and TETSUYA HIGUCHI[†]

To solve the Travelling Salesman Problem (TSP) using the Hopfield networks, there are two major approaches. One is based on city position in the tour, and the other on city adjacency in the tour. We make, by simulations, performance comparisons of these two approaches for many TSP instances with 10 to 140 cities. To make these comparisons fair, we select weights on the basis of the theoretical network tuning criterion. It is shown that, the quality of the solutions obtained by the network based on city adjacency is better than by the one based on city position. We also show that, for TSPs with less than 130 cities, the network based on city adjacency takes shorter computation time than the one based on city position, however, for TSPs with more than 130 cities, the contrary is observed.

1. はじめに

ホップフィールドらは対称な相互結合を持つニューラルネットがエネルギー関数を極小化するダイナミックスを持つことを示し、この性質を利用して巡回セールスマン問題 (TSP) が高速に解けることを示した¹⁾。

ホップフィールドネットを用いてTSPを解く場合、大別して、2つの定式化が提案されている。1つは、ホップフィールドらが提案した都市の訪問順序に基づく定式化¹⁾であり、もう1つは巡路中の都市隣接性に基づく定式化²⁾である。

都市隣接性に基づく定式化は、エネルギー関数中にすべての都市を訪問するという制約が含まれていないために複数の巡路 (部分巡路) に収束する欠点があるものの、都市の訪問順序に基づく定式化と比較すると、エネルギー関数の性質が良いために最適解へ収束する割合が高く、さらにニューロン数が半分以下で済むことから計算時間も少ないというシミュレーション結果が報告されている^{2),3)}。しかし、これらのシミュレーションは20都市程度の小さな都市数でしか行われておらず、また、定式化中の重みの係数の値は試行錯誤的に決められているために^{2)~5)}、制約条件を満足する解が得られない等の問題があった^{2),3)}。

一方、Wilsonら⁶⁾やKamgar-Parsiら⁷⁾は、ホップフィールドらが提案した都市の訪問順序に基づく方法は、定式化中の重みの係数の調整が微妙であり、特に問題の規模が大きくなると、制約条件を満たす巡回路を得ることさえ困難になる等の問題点を指摘した。

[†] 電子技術総合研究所

Electrotechnical Laboratory

^{††} 東京電力株式会社システム研究所

Computer and Communication Research Center, Tokyo

Electric Power Company

^{†††} 東邦大学理学部情報科学科

Faculty of Science, Toho University

したがっていずれの定式化においても、制約条件を満足する解や良い解を得るための重みの係数値の設定が難しく、双方の定式化を同一条件で公平に性能比較を行うことが困難であった。

しかし、その後、組合せ最適化問題を解くホップフィールドネットのダイナミクスに関する理論的解析が進み、松田⁸⁾は都市の訪問順序に基づく定式化を例にとり、制約条件を満たす解の漸近安定条件と制約条件を満たさない非解の不安定条件を理論的に導いた。この条件を満たすように重みの係数値を設定すれば、制約条件を満足する解が得られるばかりか、質の良い解が得られることがシミュレーションでも確認されている^{8),9)}。このことは、都市配置が与えられれば、制約条件を満足し、しかも良い解が得られる重みの係数値が自動的に設定でき、公平な性能比較が行えることを意味している。

本論文では、この2つの定式化について10~140都市と小規模から大規模なTSPに対して、得られる解の質と計算時間の双方について、理論的基準に基づいて重みの係数の設定を行い公平な性能比較を行う。都市の訪問順序の定式化としては、著者らによる方法⁹⁾を用い、都市隣接性に基づく定式化は、村島³⁾の方法を採用する。

まず、都市の訪問順序に基づく定式化の場合と同様に、都市隣接性に基づく定式化に対しても同様の解の安定条件と非解の不安定条件を導き、この条件に従ってシミュレーションを行うことによって、両定式化の公平な性能比較を試みる。

その結果、解の質に関しては、都市数に関係なく、都市隣接性の優位性が判明する。また計算時間に関しては、130都市までの問題では、都市隣接性に基づく定式化の方が計算時間が短い。これ以上の規模の問題では、都市の訪問順序に基づく定式化の方が計算時間が短くなる。すなわち、都市隣接性に基づく定式化の計算時間の優位性は130都市までであることが判明する。

以下2章では、ホップフィールドネットについて説明する。3章では、都市隣接性に基づくTSPの解法について述べる。4章では、すでに我々が提案している都市の訪問順序に基づくTSPの解法について簡単に説明する。5章では、都市隣接性に基づくTSPの定式化と都市の訪問順序に基づくTSPの定式化の性能比較について述べる。6章では、5章で得られた結果を検討する。7章では、得られた知見と残された課題について述べる。

2. ホップフィールド ネット

ホップフィールドネットは、相互結合型のネットワークで、ニューロン間の結合は対称結合になっている。ニューロンの総数を N とすると、ネットワークのダイナミクスは、次のように表される¹⁾。

$$\frac{dU_i}{dt} = \sum_j^N W_{ij} V_j + I_i \quad (1)$$

$$V_i = f(U_i) = \frac{1}{1 + \exp(-U_i/U_0)} \quad (2)$$

ここで、 W_{ij} はニューロン j からニューロン i への結合荷重 ($W_{ii} \neq 0$)、 U_i 、 V_i および I_i は、それぞれニューロン i の内部値、出力値、および入力バイアス値である。 U_0 は式 (2) で定義されるシグモイド関数のこう配を決定するパラメータである。

ホップフィールドネットは、次式で与えられるエネルギー関数を極小化する性質がある¹⁾。

$$E(v) = -\frac{1}{2} \sum_i^N \sum_j^N W_{ij} V_i V_j - \sum_i^N I_i V_i \quad (3)$$

すなわち、ホップフィールドネットでは、 $dE(v)/dt \leq 0$ が成り立ち、時間とともにエネルギーの極小値に収束する。この性質を利用すると、TSPを解くことができる。

3. 都市隣接性に基づく TSP の解法

TSP は、1人のセールスマンが N 個の都市を1度ずつ訪問し、出発した都市に戻るような経路のうちで、最短の経路を求める問題である。

以下で述べる都市隣接性に基づくTSPの定式化では、部分巡路が生じることから制約条件を満足する解が必ずしもTSPの解となるとは限らない。そこで以下では、単一巡路を形成する解を解とし、部分巡路を形成する解を疑似解とし、制約条件を満足しない解を非解とする。

以下3.1節では、都市隣接性に基づくTSPの定式化について述べる。3.2節では、その定式化に基づき解あるいは疑似解の安定条件と非解の不安定条件を導く。3.3節では、部分巡路から単一巡路に収束させるための修復法について述べる。3.4節では、実験条件について述べる。

3.1 都市隣接性に基づく TSP の定式化

本節では、都市隣接性に基づくTSPのニューラルネットワーク表現について説明する。図1に、都市隣接性に

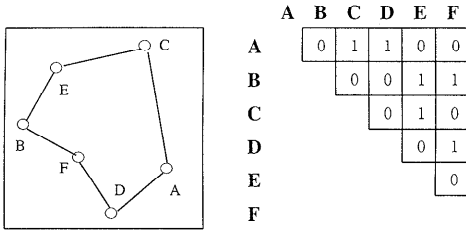


図1 都市隣接性に基づく TSP の表現

Fig.1 Representation of TSP based on city adjacency.

基づく TSP の表現を示す。

i 行 j 列のニューロン $V_{ij} = 1$ は都市 i と都市 j が隣接していることを示し, $V_{ij} = 0$ は都市 i と都市 j が隣接していないことを示している. $V_{ij} = V_{ji}$ であるのでニューロン数の半分は必要がない. また対角項は意味をなさないので必要がない. したがって, ニューロン数は $N(N-1)/2$ だけあればよい. ただし, N は都市数である. このことは, 都市隣接性に基づく方法でのニューロン数は, 都市の訪問順序に基づく方法でのニューロン数 N^2 の半分以下でよいことを示している.

都市隣接性に基づく方法では, 各都市が他の 2 都市と隣接しているという制約条件を使うため, エネルギー関数は次式のようになる.

$$\begin{aligned}
 E(v) = & \frac{A}{2} \sum_{x=1}^N \left(2 - \sum_{y=x+1}^N V_{xy} - \sum_{y=1}^{x-1} V_{yx} \right)^2 \\
 & + \frac{B}{2} \sum_{x=1}^{N-1} \sum_{y=x+1}^N V_{xy} \frac{d_{xy}}{r} \\
 & + \frac{C}{2} \sum_{x=1}^{N-1} \sum_{y=x+1}^N V_{xy} (1 - V_{xy}) \quad (4)
 \end{aligned}$$

第1項は, どの都市も 2 個の都市と隣接しているという制約を表し, 第2項は短い距離を指向させるためのコスト項である. 第3項は自己結合削除項と呼ばれ, $C = 2A$ に設定することにより $W_{ii} = 0$ になる. d_{xy} は都市 x, y 間の距離を表す. $A, B > 0, C \geq 0$ は, 各条件の重みの係数である. r は全都市間の距離の平均値である. 第1項が0となり, 制約条件を満足すれば解あるいは疑似解が得られる. 第1項が0でなければ非解になる.

式(4)のTSPのエネルギー関数から結合荷重とバイアスを求め, ホップフィールドネットを構成すると, k 行 l 列のニューロンの内部値は次式で表される.

$$\begin{aligned}
 U_{kl} = & -A \left(\sum_{y=k+1}^N V_{ky} + \sum_{y=1}^{k-1} V_{yk} + \sum_{x=l+1}^N V_{lx} \right. \\
 & \left. + \sum_{x=1}^{l-1} V_{xl} \right) + CV_{kl} + I_{kl} \quad (5) \\
 I_{kl} = & 4A - \frac{B}{2} \frac{d_{kl}}{r} - \frac{C}{2}
 \end{aligned}$$

したがって, 適当な初期状態を設定してネットワークを動作させると TSP を解くことができる. しかし, これまで提案されている都市隣接性に基づく定式化の重みの係数 A, B, C の値は, いずれも試行錯誤的に決められていた^{2)~5)}. そのために制約条件を満足する解が得られない問題があった^{2),3)}. 次節では, この問題を解決するための重みの係数の設定方法について述べる.

3.2 解あるいは疑似解の安定条件と非解の不安定条件

本節では, 式(4)のTSPのエネルギー関数の定式化に基づき解あるいは疑似解の漸近安定条件と非解の不安定条件を示す(証明は付録参照).

定理 1 式(4)において, 解および疑似解 V は, $xy \in \beta(V)$ なるすべての x, y に対して次が成り立てば漸近安定である.

$$C > B \max_{xy \in \beta(V)} \left(\frac{d_{xy}}{r} \right) \quad (6)$$

ただし $\beta(V)$ は, 解あるいは疑似解 V の巡回経路を構成する隣接 2 都市の並びすべてからなる集合を表す.

定理 2 式(4)において, 次が成り立てば, 非解はすべて不安定である. すなわち, 漸近安定な頂点はすべて解あるいは疑似解である.

$$A > \frac{1}{2} (Bd_M + C) \quad (7)$$

ただし, $d_M = \max_{x,y} (d_{xy}/r)$ とする.

したがって, 式(6), (7)をそれぞれ満たすようにエネルギー関数中の重みの係数を設定してニューラルネットワークを動作させると, ニューロンの出力が超立方体の頂点に収束すれば, 必ず解あるいは疑似解が得られることになる.

しかし, 式(4)のエネルギー関数には, すべての都市を訪問するという制約が入っていない. そのために都市配置によりいくつかの部分巡路に分かれる疑似解に収束する場合がある. その場合には, 部分巡路を解消し, 解(単一巡路)に収束させる必要がある. 次節では, 部分巡路の修復法について述べる.

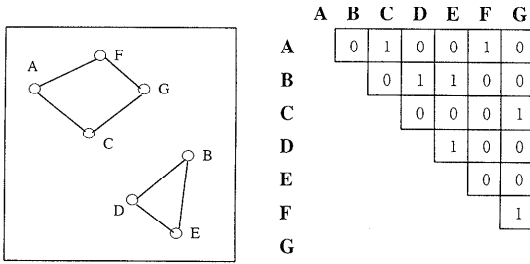


図2 部分巡路の例

Fig. 2 Representation of TSP with closed subtours.

3.3 部分巡路の修復法

図2に、部分巡路の例を示す。複数の部分巡路ができた場合、どこかの都市間の結合を切り、別の都市間を結合させ単一巡路に収束させる必要がある。ここでは、村島ら³⁾が採用している方法を用いることにする。この方法は、入力バイアス I_{xy} を変化させることにより、各部分巡路間の距離を疑似的に近づけ、単一巡路に導く方法である。

複数の部分巡路に分かれている場合は、入力バイアスの修正量 ΔI_{xy} を次式に基づき計算し、 I_{xy} に加える。

$$\Delta I_{xy} = \begin{cases} 0.5\alpha(d_{\max} - \frac{d_{xy}}{r}), & \text{if } C_x \neq C_y \\ -\alpha\frac{d_{xy}}{r}, & \text{if } C_x = C_y = 1 \\ 0, & \text{if } C_x = C_y = 0 \end{cases} \quad (8)$$

ここで d_{\max} は d_{xy}/r の中の最大値を指し、 C_x は基準の都市と同じ部分巡路に属するとき1となる。 $C_x \neq C_y$ のとき、基準の部分巡路とその他の部分巡路に属する都市間の距離を縮め、 $C_x = C_y = 1$ のとき、基準の部分巡路内の都市間の距離を広げ、 $C_x = C_y = 0$ のときには、基準の部分巡路に属さない都市間は同じ部分巡路に属するかどうか不明なので、入力バイアスの変更を保留することを意味する。この過程を部分巡路の数だけ繰り返し、そのつど修正量を求め、それらを加算したものが総修正量となる。結果として総修正量は、都市 x と都市 y が同一部分巡路であれば $-\alpha d_{xy}/r$ 、そうでなければ $\alpha(d_{\max} - d_{xy}/r)$ になる。

入力バイアスを修正した後、ネットワークを再び走らせ、収束したら結合状態をチェックする。単一巡路に収束すればよし、複数の部分巡路に収束すれば再度入力バイアスを修正して修復を試みる。このような方法で単一巡路に収束するまで修復を繰り返す。

3.4 実験条件

本シミュレーションでは、 k 行 l 列のニューロンの内部値 U_{kl} および出力値 V_{kl} は、以下のように更新

される(同期更新)。

$$U_{kl}(t + \Delta t) = U_{kl}(t) + \Delta U_{kl}(t) \quad (9)$$

$$V_{kl} = \frac{1}{1 + \exp(-U_{kl}(t)/U_0)} \quad (10)$$

いずれのシミュレーションにおいても、 $\Delta t = 0.1$ 、 $U_0 = 0.5 \sim 0.6$ 、 $B = 1.0$ とし、 C と A の値は式(6)、(7)をそれぞれ満足するように決定した。

各ニューロンの初期値は、次のように設定した¹⁰⁾。

$$V_{kl} = \frac{1}{N} + \beta \cdot RAND \quad (11)$$

ただし、 N は都市数、 β はパラメータで以下のシミュレーションでは $\beta = 10^{-7}$ に設定した。 $RAND$ は $[-0.5, 0.5]$ の一様乱数である。

次にネットワークの終了条件について述べる。ニューロンの出力 V_{kl} が $V_{kl} > 0.5$ を満足したら、そのニューロンの出力は1、そうでないならば0であると見なし、ネットワークは、制約条件を満足したら停止する。もし、ネットワークのステップ数が10,000より大きくなったならば、解あるいは疑似解が得られないとして計算を打ち切っている。ステップは、全ニューロンの状態を更新するための処理である。同期更新であるから、1ステップですべてのニューロンの状態が更新される。

4. 都市の訪問順序に基づく TSP の解法

本章では、我々がすでに提案している都市の訪問順序に基づく TSP の解法について簡単に説明する。詳細は文献9)を参照されたい。なお、都市の訪問順序に基づく定式化には、通常絶対距離による定式化と全都市間の平均距離との相対値(相対距離)を用いる定式化がある。我々は相対距離による定式化が絶対距離による定式化よりも良い解が得られることを理論的¹¹⁾、実験的⁹⁾に確認している。したがって以下では、相対距離による TSP の定式化について述べる。

4.1 相対距離による TSP の定式化

全都市間の平均距離を r とすると、2都市 xy 間の相対距離 d'_{xy} は、次のように表される。

$$d'_{xy} = d_{xy} - r \quad (12)$$

相対距離による TSP のエネルギー関数は、次のようになる。

$$E(v) = \frac{A}{2} \sum_x \left(\sum_i V_{xi} - 1 \right)^2 + \frac{B}{2} \sum_i \left(\sum_x V_{xi} - 1 \right)^2$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{C}{2} \sum_x \sum_i^N V_{xi}(1 - V_{xi}) \\
 & + \frac{D}{2} \sum_x \sum_{y \neq x} \sum_i^N d'_{xy} \frac{V_{xi}(V_{y,i+1} + V_{y,i-1})}{2}
 \end{aligned} \tag{13}$$

ただし、 $V_{xi} = 1$ は都市 x を i 番目に訪問することを示し、 $V_{xi} = 0$ は都市 x を i 番目に訪問しないことを示している。第1項は、各都市が1度だけ訪問されるという行方向の制約を表し、第2項は同時には1つの都市しか訪問できないという列方向の制約を表している。第3項は、自己結合削除項である。第4項は、短い距離を指向させるためのコスト項である。 $A, B, D > 0, C \geq 0$ は、各条件の重みの係数である。式(13)の最初の2項が0ならば解、そうでなければ非解になる。

式(13)の第1および第2項の制約条件が同等に働くようにするために $A = B$ とすると、 x 行 i 列のニューロンの内部値は次式で表される。

$$\begin{aligned}
 U_{xi} = & -A \left(\sum_j^N V_{xj} + \sum_y^N V_{yi} \right) + CV_{xi} \\
 & - D \sum_{y \neq x}^N d'_{xy} \frac{(V_{y,i+1} + V_{y,i-1})}{2} \\
 & + \left(2A - \frac{C}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{14}$$

式(13)の解の安定条件と非解の不安定条件は、以下のようになる¹¹⁾。

定理3 式(13)において、超立方体の解 V に対する頂点は次が成り立てば漸近安定である。

$$C > D \max_{xy, yz \in \beta(V)} (\max(d'_{xy} + d'_{yz}, -d'_{xz} + r)) \tag{15}$$

ただし $\beta(V)$ は、解 V の巡回経路を構成する隣接2都市の並びすべてからなる集合を表す。

定理4 式(13)において、次が成り立てば、超立方体の非解に対するすべての頂点は不安定である。すなわち、漸近安定な頂点はすべて解である。

$$A > \max \left(\frac{C}{2} + 2Dr, \frac{C}{4} + \frac{D}{2} d'_M \right) \tag{16}$$

ただし、 $d'_M = \max_{x,y} (d'_{xy})$ とする。

また我々は、解の質を改善するために自己結合削除項の係数 C の制御方法を提案している⁹⁾。この方法は、計算の初期では C の値を十分小さな値に設定し、計算の進行とともに大きくし、最終的には式(15)の解の安定条件を満たすように制御する。

具体的には、 C の制御は次式に基づいて行っている。

$$C = \Delta C \cdot \text{step} + C_{\text{initial}} \tag{17}$$

$$\Delta C = \frac{C_{\text{min}} - C_{\text{initial}}}{C_t} \tag{18}$$

ここで、ステップは、全ニューロンの状態を更新するための処理である。 C_{min} は、式(15)を満足する最小の C の値である。 C_{initial} は、 C の初期値であり、十分小さな値 ($C_{\text{initial}} = 0.001$) に設定している。 C_t は、 ΔC の刻み幅を決めるパラメータであり、 $C_t = 30,000 \sim 50,000$ に設定している⁹⁾。

4.2 実験条件

本シミュレーションでは、3.4節で述べた実験条件とできる限り同一条件となるように以下のように設定した。

$\Delta t = 0.1, D = 1.0, U_0$ の値は、ニューロンの出力が振動しない小さな値に設定した。 A の値は式(16)を満足するように決定した。各ニューロンの初期値は、式(11)と同一に設定した。また、ネットワークの終了条件も3.4節で述べた終了条件と同一とした。ただし、計算の打ち切りステップは、 C_t の値と同一の値に設定している。

5. 性能比較

本章では、3章で述べた都市隣接性に基づくTSPの定式化と4章で述べた都市の訪問順序に基づくTSPの定式化との性能比較を行う。

図3に、都市隣接性と都市の訪問順序に基づくTSPの定式化の都市数に対するエラーの比較を示す。エラーは、初期状態を変えて100回行ったときの平均値を示している。エラーは、次式で与えられる。

$$\text{エラー} = \frac{\text{経路長} - \text{最小経路長}}{\text{最小経路長}} \times 100 \tag{19}$$

図3のエラーは、10都市については10種類の都市

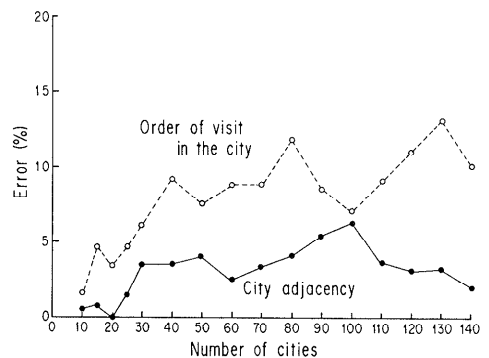


図3 エラーの比較
Fig.3 Comparison of error.

表1 100都市(kroA100)の例

Table 1 Simulation results of 100-city TSP (kroA100).

	エラー (%)		
	最小値	平均値	最大値
都市隣接性	7.35	7.35	7.35
都市訪問順	4.53	6.97	8.86

配置, 15~30 都市については5種類の都市配置, 40~140 都市については3種類の都市配置での平均値を示している. なお, 都市隣接性の定式化では, 3.3 節で述べた方法で部分巡路を修復することにより, 初期状態, 都市配置, 都市数によらず解が得られている. また都市の訪問順序の定式化でも初期状態, 都市配置, 都市数によらず解が得られている. すなわち, 図3のエラーは, 都市隣接性, 都市の訪問順序の定式化ともすべて解が得られたときの平均値を示している.

図3より, 都市の訪問順序による定式化のエラーは, 都市数とともに増加するが, 都市隣接性による定式化のエラーは, 都市数にほとんど依存しないことが分かる. また, 都市隣接性の定式化のエラーは, 問題の規模に依らず, 都市の訪問順序による定式化よりも小さいことが分かる. すなわち, 解の質に関しては, 都市隣接性の定式化の優位性が判明する.

表1に, 100都市(kroA100)の例の性能比較を示す. なお kroA100¹²⁾は, ベンチマークとして多くの研究者が採用している都市配置である. 表1で特徴的なのは, 都市隣接性でのエラーが最小値, 平均値, 最大値ともすべて同一の値が得られていることである. これは表1の例に限ったことではなく, 実験に使用した10~140都市すべてに対して都市隣接性でのエラーは, 最小値, 平均値, 最大値とも同一の値が得られている. すなわち, 都市隣接性による定式化では, エラーの値は初期状態に依存しないことを示している.

図4に, 都市数に対する計算時間の比較を示す. なお, 計算時間は1個の解を得るまでの平均値を示している. 使用計算機は, 日本電算機 JS20/M61 を用いている.

従来都市隣接性による定式化では, 都市の訪問順序による定式化と比較すると, ニューロン数が半分以下で済むことから1個の解を得るまでの計算時間が少ないと報告されていた^{2),3)}. しかし図4より, 都市隣接性による定式化の計算時間の優位性は130都市までであり, これ以上の都市数では, 都市の訪問順序による定式化の方が計算時間が短くなることが分かる. また都市隣接性による定式化では, 都市の訪問順序による定式化と比較すると, 都市数に対する計算時間の増加の割合が大きいことが分かる.

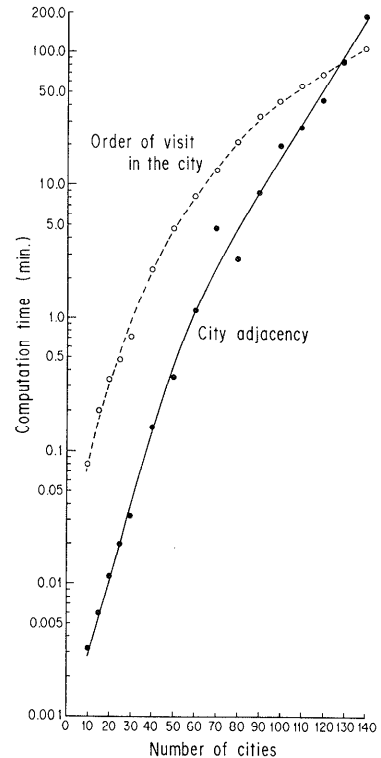


図4 計算時間の比較

Fig. 4 Comparison of computation time.

6. 検 討

本章では, 5章で得られた結果を検討する. 以下6.1節では, 計算時間について検討する. 6.2節では, エラーについて, 6.3節では初期値の影響について検討する.

6.1 計算時間

本節では, 都市隣接性によるTSPの定式化は, 都市の訪問順序によるTSPの定式化と比較すると, 都市数に対する計算時間の増加の割合が大きい理由について検討する.

図5は, 図3で使用した都市配置について, 都市数に対する部分巡路数の平均を調べたものである.

図5より, 都市数が増加すると部分巡路数も増加することが分かる. また図6は, 都市数に対する1個の解を得るまでの部分巡路の修復回数の平均を調べたものである.

図6より, 都市数が増加すると修復回数も増加することが分かる. たとえば表1に示した100都市の例では, 部分巡路数が16→16→9→4→2→1と減少し解が得られた. 結局, この例では, 解を得るまでに5回修復したことになる.

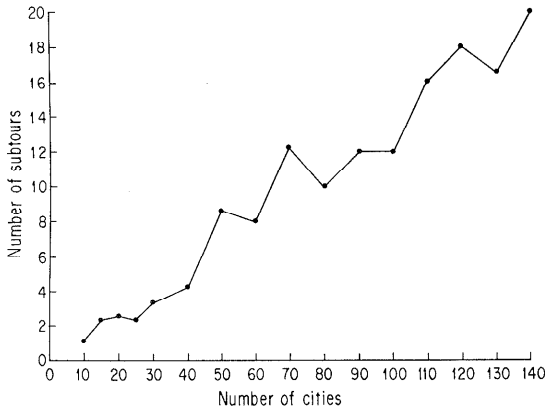


図5 都市数に対する部分巡路数の関係

Fig. 5 Relationship between number of cities and subtours.

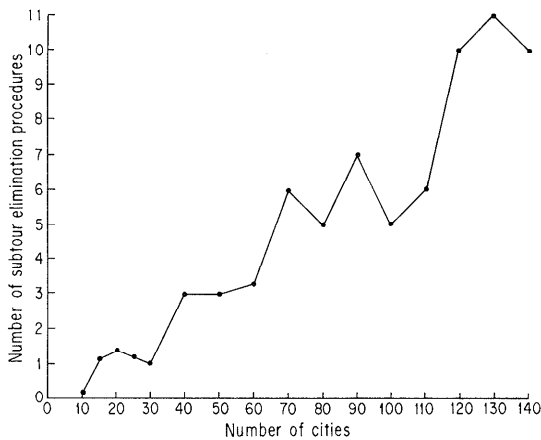


図6 都市数に対する修復回数との関係

Fig. 6 Relationship between number of cities and subtour elimination procedures.

このように都市隣接性による定式化では、都市数の増加とともに部分巡路数が多くなり、それとともに解を得るまでの修復回数も多くなることが分かる。そのために都市隣接性による定式化では、都市の訪問順序による定式化と比較すると、都市数に対する計算時間の増加の割合が大きくなり、図4に示すように130都市以上では都市の訪問順序による定式化の方が計算時間が短くなったものと考えられる。

6.2 エラー

図3より、都市隣接性による定式化のエラーは都市数にほとんど依存しない結果が得られている。この理由は次のように考えられる。

都市隣接性による定式化では、近い都市どうしを結び付けて巡路を作る傾向がある。その結果、複数の部分巡路が生じることになるわけであるが、このことは

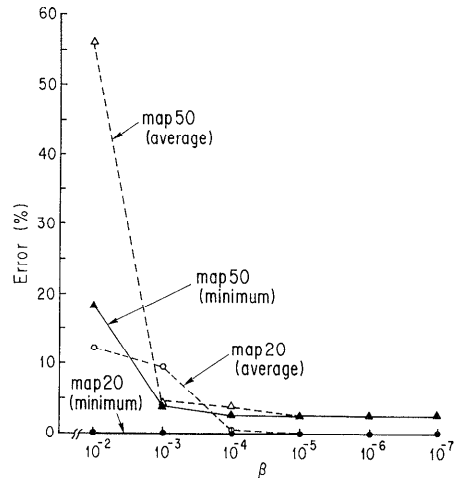


図7 betaの値に対するエラーの変化

Fig. 7 Relationship between parameter beta and error.

見方を変えると、問題を小規模の複数の部分問題に分割して解いていると考えることができる。図5に示すように部分巡路数は、都市数とともに増加することが分かる。このことは都市数が増加しても各部分問題の規模はあまり増加しないことを意味している。したがって、都市隣接性による定式化のエラーは、都市数にほとんど依存しない結果が得られたものと考えられる。もちろん、このことは都市配置に依存し、複数の部分巡路を修復した結果が良い解になる場合に限り成り立ち、そのために都市の訪問順序による定式化よりも良い解が得られたものと考えられる。

6.3 初期値の影響

本節では、都市隣接性による TSP の定式化では、エラーの値が初期状態に依存しない理由について検討する。

図7は、式(11)の初期値のパラメータ beta の値に対するエラーの変化を調べたものである。図7中の map20 と map50 は、それぞれ20都市と50都市の例である。破線は初期状態を変えて100回行ったときの平均値であり、実線は最小値を示している。

図7より、betaの値が小さくなるほど、いずれの都市配置でもエラーが小さくなることが分かる。このような傾向は他の都市配置でも同様な傾向を示す。map20, map50ともbetaの値が10⁻⁵よりも小さくなると、最小値と平均値が同一の値になり、エラーは初期値に依存しないことが分かる。このことは、次のように考えられる。

式(5)において、k行l列のニューロンの内部値 U_{kl} は、入力値(第1項と第2項の和)と入力バイア

ス(第3項)の和で定義される。 β の値が小さくなると、 U_{kl} の入力値と U_{pq} (p 行 q 列のニューロンの内部値)の入力値の差が小さくなり、ニューロンの内部値 U_{kl} と U_{pq} の差は、入力バイアス、すなわち距離の違いが支配的になる。このために β の値が小さくなると、各ニューロンの動作は都市配置のみによって決定されることになり、初期値の影響を受けなくなるものと考えられる。このことは、 $\beta=0$ 、すなわち全ニューロンを同一初期状態に設定すると、map20, map50とも $\beta=10^{-5}$ に設定したときと同一の解が得られることから確認できる。

なお、都市の訪問順序による定式化では、 $\beta=0$ とすると、式(14)から明らかのように N^2 個のニューロンの内で N 個のニューロンの内部値がすべて同一の値になる。そのために N 個のニューロンが同じように動作し、収束しない(制約条件を満たさない)。

良い解を得るためには、都市の訪問順序によるTSPの定式化では、初期状態を変えて何回か試行する必要があるが、都市隣接性によるTSPの定式化では、全ニューロンを同一初期状態に設定し、一回試行すればよいことになる。このことは、都市隣接性によるTSPの定式化の大きな利点であると考えられる。

7. むすび

本論文では、都市隣接性に基づく定式化と都市の訪問順序に基づく定式化について10~140都市と小規模から大規模なTSPに対して、得られる解の質と計算時間の双方について、理論的基準に基づいて重みの係数の設定を行い公平な性能比較を行った。その結果、以下のような知見が得られた。

(1) 都市の訪問順序に基づく定式化のエラーは、都市数とともに増加するが、都市隣接性に基づく定式化のエラーは、都市数に依存しないことが分かった。また都市隣接性に基づく定式化のエラーは、問題の規模に依らず、都市の訪問順序による定式化よりも小さいことが分かった。すなわち、解の質に関しては、都市隣接性の定式化の優位性が判明した。

(2) 式(11)に示すように各ニューロンの初期値を設定すると、都市隣接性による定式化では、エラーの値は初期状態に依存しないことが判明した。

(3) 都市隣接性による定式化の計算時間の優位性は130都市までであり、これ以上の都市数では、都市の訪問順序による定式化の方が計算時間が短くなることが判明した。

都市隣接性による定式化では、都市数の増加とともに部分巡路数が多くなり、それにとまって解を得る

までの修復回数が多くなるのが計算時間が増大する原因である。したがって、計算時間を短縮させるためには、3.3節で述べた部分巡路の修復法を検討することが今後の課題である。

謝辞 本研究の機会を与えて下さった電子技術総合研究所の太田情報アーキテクチャ部長、討論に参加していただいた旧計算機構研究室諸氏に感謝します。

参考文献

- 1) Hopfield, J.J. and Tank, D.W.: Neural computation of decisions in optimization problems, *Biol. Cybern.*, Vol.52, pp.141-152 (1985).
- 2) Joppe, A., Cardon, H.R.A. and Bioch, J.C.: A neural network for solving the travelling salesman problem on the basis of city adjacency in the tour, *International Neural Network Conference*, pp.254-257 (1990).
- 3) 村島定行, 萬膳義久: 巡路中の都市隣接性に基づいた巡回セールスマン問題のニューラルネットワークへの埋込み, 信学論(D-II), Vol.J74-D-II, No.8, pp.1080-1089 (1991).
- 4) Xu, X. and Tsai, W.T.: Effective neural algorithms for the traveling salesman problem, *Neural Networks*, Vol.4, pp.193-205 (1991).
- 5) 佐藤一路, 中山武司, 二宮 洋, 浅井秀樹: 都市隣接性に基づく巡回セールスマン問題のニューラルネットワーク解法とその階層化, 信学技報, Vol.NLP94-117, pp.105-112 (1995).
- 6) Wilson, G.V. and Pawley, G.S.: On the stability of the travelling salesman problem algorithm of Hopfield and Tank, *Biol. Cybern.*, Vol.58, pp.63-70 (1988).
- 7) Kamgar-Parsi, B. and Kamgar-Parsi, B.: On the problem solving with Hopfield neural networks, *Biol. Cybern.*, Vol.62, pp.415-423 (1990).
- 8) 松田 聖: 対称結合神経回路網における解の安定性, 信学論(D-II), Vol.J77-D-II, No.7, pp.1366-1374 (1994).
- 9) 田中敏雄, 樋口哲也, 古谷立美: ホップフィールド型ニューラルネットワークにおける自己結合係数の制御による解の改善, 信学論(D-II), Vol.J79-D-II, No.3, pp.413-420 (1996).
- 10) Abe, S. and Gee, A.H.: Global convergence of the Hopfield neural network with nonzero diagonal elements, *IEEE Trans. Circuits Syst.-II*, Vol.42, No.1, pp.39-45 (1995).
- 11) 松田 聖: 対称結合神経回路網で組合せ最適化問題を解く際の定式化の優劣に関する集合論的評価, 信学論(D-II), Vol.J78-D-II, No.10, pp.1531-1542 (1995).
- 12) Reinelt, G.: TSPLIB (ftp elib.zib-berlin.de

入手できる).

- 13) 上坂吉則: 2 値変数の実数値関数から導かれるエネルギーを持つニューロン回路網の安定性について, 信学技報, Vol.PRU88-6, pp.7-14 (1988).

付 録

A.1 解の安定条件と不安定条件

上坂¹³⁾が示したように, 超立方体の頂点 $V = (V_i)$ はすべての i に対して次が成り立てば漸近安定である.

$$\frac{\partial E}{\partial v_i}(V) \begin{cases} > 0 & (V_i = 0) \\ < 0 & (V_i = 1) \end{cases}$$

また, 次が成り立たなければ不安定である.

$$\frac{\partial E}{\partial v_i}(V) \begin{cases} \geq & (V_i = 0) \\ \leq & (V_i = 1) \end{cases}$$

以下では, 定理 1 と 2 を証明する.

A.1.1 定理 1 の証明

解あるいは疑似解 $V = (V_{ij}) \in \{0, 1\}^N$ におけるエネルギー曲面の傾きは,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_{ab}}(V) = & -A \left(2 - \sum_{y=a+1}^N V_{ay} - \sum_{y=1}^{a-1} V_{ya} \right) \\ & - A \left(2 - \sum_{y=b+1}^N V_{by} - \sum_{y=1}^{b-1} V_{yb} \right) \\ & + \frac{B}{2} \frac{d_{ab}}{r} + C \left(\frac{1}{2} - V_{ab} \right) \end{aligned}$$

となる. 最初の 2 項は 0 であるから,

$$\frac{\partial E}{\partial v_{ab}}(V) = \begin{cases} \frac{1}{2}(B \frac{d_{ab}}{r} + C) & (V_{ab} = 0 \text{ のとき}) \\ \frac{1}{2}(B \frac{d_{ab}}{r} - C) & (V_{ab} = 1 \text{ のとき}) \end{cases}$$

となる. ここで, $V_{ab} = 0$ の場合はつねに, $\partial E / \partial v_{ab} > 0$ が成り立つ. 一方, $V_{ab} = 1$ の場合は,

$$C > B \max_{xy \in \beta(V)} \left(\frac{d_{xy}}{r} \right)$$

ならば, $\partial E / \partial v_{ab} < 0$ が成り立ち, V は漸近安定である.

A.1.2 定理 2 の証明

式 (4) の第 1 項の構成要素に注目し, これを $g(x)$ とおく.

$$g(x) = 2 - \sum_{y=x+1}^N V_{xy} - \sum_{y=1}^{x-1} V_{yx}$$

非解 $V = (V_{ij}) \in \{0, 1\}^N$ では, 少なくとも以下のいずれか 1 つを満たす都市 a が存在する.

$$(1) \quad g(a) \leq -1$$

$$(2) \quad g(a) \geq 1$$

以下に, 場合分けして考える.

(A) まず, (1) を満たす a が 1 つも存在せず, すべての x に対して $g(x) \geq 0$ と仮定する. 非解という仮定より, (2) を満たす a が存在するから, $g(a) \geq 1$ である. すると, $V_{ab} = 0$ あるいは $V_{ba} = 0$ なる都市 a, b が存在する. 仮に, $V_{ab} = 0$ が成り立つとする ($V_{ba} = 0$ の場合もまったく同様に証明できる) と, 次が成り立つ.

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_{ab}}(V) = & -Ag(a) - Ag(b) + \frac{B}{2} \frac{d_{ab}}{r} \\ & + C \left(\frac{1}{2} - V_{ab} \right) \\ \leq & -A + 0 + \frac{B}{2} \frac{d_{ab}}{r} + \frac{C}{2} \\ \leq & -A + \frac{B}{2} d_M + \frac{C}{2} \end{aligned}$$

となる. ここで,

$$A > \frac{1}{2}(Bd_M + C)$$

が成り立つとすると, $\partial E / \partial v_{ab}(V) < 0$ となり, 非解 V は不安定である.

(B) 次に, (1) を満たす a が存在するとする. ここで, $V_{ab} = 1$ あるいは $V_{ba} = 1$ なる都市 a, b が存在する. 仮に, $V_{ab} = 1$ が成り立つとする ($V_{ba} = 1$ の場合もまったく同様に証明できる). ここで V_{ab} は $g(a)$ ばかりでなく, $g(b)$ にも含まれるので, $g(b) \leq 1$ である. 2 つの場合に分けて示す.

(B1) $g(b) \leq 0$ が成り立つと仮定すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_{ab}}(V) = & -Ag(a) - Ag(b) + \frac{B}{2} \frac{d_{ab}}{r} \\ & + C \left(\frac{1}{2} - V_{ab} \right) \\ \geq & A + 0 + \frac{B}{2} \frac{d_{ab}}{r} - \frac{C}{2} \\ > & A - \frac{C}{2} \quad (\because \frac{d_{ab}}{r} > 0) \end{aligned}$$

となるので,

$$A > \frac{C}{2}$$

ならば, $\partial E / \partial v_{ab}(V) > 0$ となり, 非解 V は不安定である.

(B2) $V_{ab} = 1$ なるすべての都市 b に対して $g(b) \leq 0$ が成り立たない, すなわち, $g(b) = 1$ が成り立つとする. a に対して (1) が成り立つので, $V_{ac} = 1$ あるいは $V_{ca} = 1$ なる $c \neq b$ も存在する. 仮に, $V_{ac} = 1$ が成り立つとする ($V_{ca} = 1$ の場合も同様に証明でき

る)と, $g(b) = g(c) = 1$ である. 一方, V_{bc} は $g(b)$ と $g(c)$ の双方に含まれるので $g(b) = g(c) = 1$ であることにより, $V_{bc} = 0$ でなければならない. そこで,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_{bc}}(V) &= -Ag(b) - Ag(c) + \frac{B}{2} \frac{d_{bc}}{r} \\ &\quad + C \left(\frac{1}{2} - V_{bc} \right) \\ &\leq -A - A + \frac{B}{2} \frac{d_{bc}}{r} + \frac{C}{2} \\ &\leq -2A + \frac{B}{2} d_M + \frac{C}{2} \end{aligned}$$

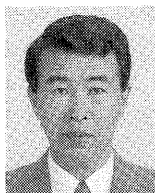
となる. ここで,

$$A > \frac{1}{4}(Bd_M + C)$$

が成り立つならば, $\partial E / \partial v_{bc}(V) < 0$ となり, 非解 V は不安定である. 以上の条件をまとめて, 定理を得る.

(平成 9 年 4 月 11 日受付)

(平成 9 年 9 月 10 日採録)



田中 敏雄 (正会員)

昭和 23 年生. 昭和 46 年日本大学理工学部電気科 2 部卒業. 昭和 42 年電気試験所 (現, 電子技術総合研究所) 入所. 現在, 情報アーキテクチャ部主任研究官. 光磁気記録, 垂直磁気記録, ニューラルネットの研究に従事. 電子情報通信学会会員.



松田 聖 (正会員)

昭和 24 年生. 昭和 46 年早稲田大学理工学部電気通信学科卒業. 昭和 51 年同大学院博士課程修了. 工学博士. 同年富士通 (株) 入社. OS, オンラインシステムおよび人工知能の研究開発に従事. 昭和 62 年より東京電力 (株). 現在, 同社システム研究所. 中央大学大学院非常勤講師. 研究分野は人工知能, 神経回路網理論等を中心に, コンピュータサイエンス全般に興味を持つ. 電子情報通信学会, ソフトウェア科学会, 人工知能学会, ACM, IEEE, NY 科学アカデミー各会員. 米国数学会評論員.



古谷 立美 (正会員)

昭和 22 年生. 昭和 48 年成蹊大学大学院工学研究科修士課程修了. 同年電子技術総合研究所入所. 平成 6 年東邦大学理学部教授. 工学博士. ニューラルネットや適応システムに興味を持つ. 第 25 回市村学術賞受賞. 日本神経回路学会, IEEE 各会員.



樋口 哲也 (正会員)

昭和 30 年生. 昭和 57 年慶應義塾大学大学院工学研究科博士課程修了. 昭和 58 年電子技術総合研究所入所. 工学博士. 現在, 情報アーキテクチャ部主任研究官. 超並列連想システムアーキテクチャ, 遺伝的アルゴリズムの研究に従事. 第 25 回市村学術賞受賞. 電子情報通信学会会員.