

非零対角要素を持つホップフィールドニューラルネット を用いた LSI モジュール配置法

阿部 重夫[†] 伊 達 博[†] 大淵 康成^{††}

我々はこれまで組合せ最適化問題を解くホップフィールドネットにおいて、係数行列の対角要素を非零のときの極小点の条件および極小点に収束する領域を明らかにしている。本論文では、この理論を LSI のモジュール配置をホップフィールドネットで解く場合に適用し、制約を満たす解を安定化して制約を満たさない解を不安定とするエネルギー関数中の重みの関係式を導出する。この関係式を用いて重みを決め、積分中に係数行列の対角要素を徐々に減少させることにより、従来対角要素を 0 とした求めた解より解の質が大幅に改善され、シミュレーティッドアニーリング法と遜色ない解が得られることを示す。

LSI Module Placement Using the Hopfield Neural Network with Non-zero Diagonal Elements

SHIGEO ABE,[†] HIROSHI DATE[†] and YASUNARI OBUCHI^{††}

In our previous work, we have clarified the condition that a vertex of a hypercube becomes a local minimum of the Hopfield neural network with non-zero diagonal elements, and a region to converge to that minimum. In this paper we apply our theory to the LSI module placement problem, and derive a relationship that feasible solutions become stable and infeasible solutions become unstable. The computer simulation shows that, by gradually decreasing the diagonal elements within range that satisfies the relationship, the quality of solution is improved drastically compared to that of the zero diagonal elements and is comparable to that of the simulated annealing method.

1. はじめに

組合せ最適化問題を解くホップフィールドニューラルネット¹⁾の開発以来、特に大規模問題の質に対して、肯定的および否定的な議論がなされている^{2),3)}。我々は文献 4)~6) において対角要素を 0 としたホップフィールドネット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を安定とし、満たさない解を不安定とするようにエネルギー関数中の重みを決める方法を開発した。これにより、制約を満たす解が求められるようになったが、ネットの規模が大きくなると解の質が劣化するという問題があった。この重みの決定方式を LSI モジュール配置問題⁷⁾に適用した結果でも、制約条件を満たす解は求めたが、規模が大きいときは、シミュレーティッドアニーリング法よりも解の質が劣化するという問題があった。

これに対して Aiyer は学位論文^{8),9)}において、組合せ解を求めるためにホップフィールドネットの対角要素を 0 とすることが、解の質を劣化する原因となっていることを指摘すると共に、解の質を格段に改善する projection 法を提案した。この方法では、すべて制約条件を満たす頂点のみを頂点として含む部分空間を valid space と定義して解が valid space 内で動くように制約した。さらに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 MGNC (Matrix Graduated Non-Convexity) 法を開発し、文献 1) の 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。

しかしながらこの方法では、valid space が定義できないときは適用できないため、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した¹⁰⁾。

本論文では、この理論を LSI のモジュール配置問題をホップフィールドネットで解く場合に適用し、制

[†] (株)日立製作所日立研究所
Hitachi Research Laboratory, Hitachi Ltd.

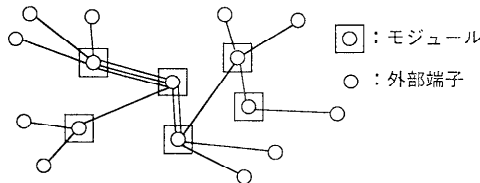
^{††} (株)日立製作所中央研究所
Central Research Laboratory, Hitachi, Ltd.

約を満たす解を安定化して制約を満たさない解を不安定とするエネルギー関数中の重みの関係を導出する。さらに計算機シミュレーションにより評価を行い、対角要素を 0 として求めた解および、確率的最適化手法であるシミュレーティッドアニーリング法で求めた解との比較を行う。

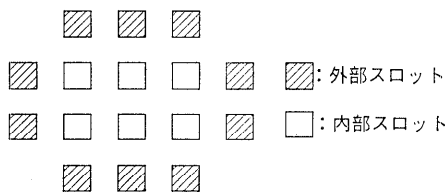
2. LSI モジュール配置問題

2.1 定式化

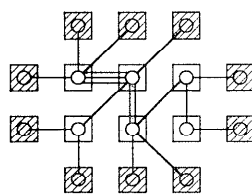
ゲートアレーの自動配置配線設計における LSI モジュール配置問題^{?)}とは、モジュールと呼ばれる論理演算素子の集合をスロットと呼ばれる配置位置にモジュール間の総配線長が最小となるように 1 対 1 で配置するものである。すなわち、図 1 (a) に示すように各モジュール間は配線により結合されており、一部のモジュールは各部端子に接続している。スロットは図 1 (b) に示すように外部スロットと内部スロットとに分かれ、図 1 (c) に示すように外部スロットに、外部端子を配置した条件下で、内部スロットにマンハッタン距離で計算した総配線長が最小となるようにモジュール



(a) モジュールの例
(a) Example of modules



(b) スロット配置の例
(b) Slot allocation



(c) 配置結果
(c) Placement result

図 1 LSI モジュール配置問題^{?)}

Fig. 1 LSI module placement problem^{?)}.

ルを配置するものである。このとき各モジュールの大きさは考慮しないで、どのスロットにも配置できるとする。

ここで N 個のモジュール (スロット) があるとして、モジュール i ($i=1, \dots, N$) に N 個の変数 x_{ik} ($k=1, \dots, N$) を割り当て、 x_{ik} が 1 のときモジュール i をスロット k に配置し 0 のときは配置しないと考える。このとき、モジュールをスロットに 1 対 1 で割り当てるという制約は、 x_{ik} をある i について k を 1 から N まで加算、あるいはある k について i を 1 から N まで加算したとき 1 となることに対応する。従って巡回セールスマン問題と同様にして LSI モジュール配置問題のエネルギー関数 E を次のように定式化できる。

$$E = \frac{A}{2} \left\{ \sum_i (\sum_k x_{ik} - 1)^2 + \sum_k (\sum_i x_{ik} - 1)^2 \right\} + \frac{B}{2} \sum_j \sum_l \sum_{i \neq j, k \neq l} d_{kl} c_{ij} x_{ik} x_{jl} + B \sum_m \sum_i \sum_k d_{km} c_{im} x_{ik} e_m + \frac{C}{2} \sum_i \sum_k x_{ik}^2 \quad (1)$$

ただし、

d_{kl} : スロット k とスロット l とのマンハッタン距離

c_{ij} : モジュール i とモジュール j の間の結線数

c_{im} : モジュール i と外部端子 m の間の結線数

$e_m=1$: 外部端子 ($m=1, \dots, o$)

A, B, C : 重み定数

ここでスロットが x 方向に I_x 個、 y 方向に I_y 個あるとする。従って $N=I_x I_y$ である。このとき図 2 に示すように座標 $(1, 1), (2, 1), \dots$ にあるスロットを順次スロット 1, 2, \dots と定義すると、スロット k, l とそれに対応する座標 $(k_x, k_y), (l_x, l_y)$ には次の関係が成り立つ。

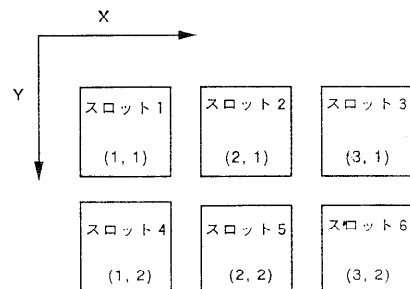


図 2 スロットの座標

Fig. 2 Coordinates of slots.

$$\begin{aligned} k &= k_x + I_x(k_y - 1) \\ l &= l_x + I_x(l_y - 1) \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、 $1 \leq k_x, l_x \leq I_x, 1 \leq k_y, l_y \leq I_y$ である。このときスロット k とスロット l とのマンハッタン距離 d_{kl} は、次式で与えられる。

$$d_{kl} = |k_x - l_x| + |k_y - l_y| \quad (3)$$

(1)式において第1項は制約条件に対する項で、第2項はモジュール間の配線のマンハッタン距離を計算する項で第3項は 0 個の外部端子とモジュール間の配線のマンハッタン距離を計算する項である。第4項は積分中に対角要素の値を減少させるための項である。第2項に $1/2$ が付いて、第3項に付かないのは、第2項では同一モジュール間の距離を2回数えているためである。また文献7)との定式化の違いは、文献中の(19)式における $0, 1$ に収束させるための項を用いていないこと(対角要素を0にすることに対応)、および対角要素を積分中に変更できるようにしたことである。なお外部端子の外部スロットへの割当を上式では明示的に表現しているが、内容的には文献7)との違いはない。

LSI配置問題では巡回セールスマン問題より距離の計算が複雑になっており、また外部端子を固定しているため、求まった解をサイクリックにずらしても巡回セールスマン問題のように、同じ解とならない。

2.2 重みの決定

付録に非対角要素が非零のホップフィールドネットの大域的な収束理論の要約を示す。これによれば n 次元空間の頂点が大域的に安定となるための条件は、(A13)、(A14)式が成立すればよい。そこで(1)式を x_{ik} で偏微分すると次式ようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x_{ik}} &= A \{ (\sum_j x_{ij} - 1) + (\sum_j x_{jk} - 1) \} \\ &+ B \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} + B \sum_m d_{km} c_{im} e_m \\ &+ C x_{ik} \end{aligned} \quad (4)$$

制約条件を満足する解では(4)式の第1項は0となる。ここで $B=1$ とすれば(A13)式より次式が成立すれば制約条件を満足する解は安定となる。

$$\begin{aligned} \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} + \sum_m d_{km} c_{im} e_m + C < 0 \\ \text{for } x_{ik} = 1 \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} + \sum_m d_{km} c_{im} e_m > 0 \\ \text{for } x_{ik} = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

(6)式は必ず成立するので、もし C が0ならば(5)式より制約条件を満足する解はすべて不安定となる。

(5)式の第1項の最大値を評価することを考える。制約条件を満たす解においては、 x_{jl} の行あるいは列のうち1つだけが1となり、そのほかは0となる。そこで c_{ij} の列の最大値で評価すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \max_{i,k} \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} \\ \leq \max_{i,k} (\max_{j \neq i} c_{ij} \sum_{l \neq k} d_{kl}) \\ \leq \max_i (\max_{j \neq i} c_{ij}) \max_k (\sum_{l \neq k} d_{kl}) \\ \leq (\sum_{k \neq 1} d_{kl}) \max_i (\max_{j \neq i} c_{ij}) \\ = \frac{(I_x + I_y - 2)N}{2} \max_i (\max_{j \neq i} c_{ij}) \end{aligned} \quad (7)$$

上式の4番目の式では、あるスロットと残りのスロット間の距離の和は、注目スロットが4隅のどれかであるときが一番大きいことを利用している。

次に(5)式の第1項の最大値を d_{kl} の列の最大値で評価すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \max_{i,k} \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} \\ \leq \max_{i,k} (\sum_{j \neq i} c_{ij} \max_{l \neq k} d_{kl}) \\ \leq (I_x + I_y - 2) \max_i \sum_{j \neq i} c_{ij} \end{aligned} \quad (8)$$

(5)式の最大値を d_{max} とすると(7)、(8)式より d_{max} は次式で抑えられる。

$$\begin{aligned} \max_{i,k} \{ \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} + \sum_m d_{km} c_{im} e_m \} \\ \leq \max_i \{ (I_x + I_y - 2) \left(\min \left(\frac{N}{2} \max_j c_{ij}, \sum_{j \neq i} c_{ij} \right) \right) \right. \\ \left. + \max_k (\sum_m d_{km} c_{im} e_m) \right\} \\ = D_{max} \end{aligned} \quad (9)$$

従って、(5)、(9)式より次式が成立すれば、すべての制約条件を満足する解は安定となる。

$$C < -D_{max} \quad (10)$$

次に(5)式の第1項の最小値を評価すると

$$\begin{aligned} \sum_{j \neq i, l \neq k} d_{kl} c_{ij} x_{jl} \\ \geq \sum_{j \neq i} c_{ij} \min_{l \neq k} d_{kl} \\ = \sum_{j \neq i} c_{ij} \end{aligned} \quad (11)$$

従って

$$D_{min} = \max_{i,k} (\sum_{j \neq i} c_{ij} + \sum_m d_{km} c_{im} e_m) \quad (12)$$

とすると最適解が安定となるためには

$$C < -D_{min} \quad (13)$$

を満たす必要がある。

次に制約を満足さない解を不安定にすることを考える。

1) x_{ik} に対応する行列の i 行の和, および k 列の和が 1 か 0 で, 少なくとも 0 のものが 1 つ以上はある.

この条件は, 制約条件を満たす解においていくつかの 1 の状態のニューロンを 0 とすることに対応する. i 行の和と k 列の和とが共に 0 のとき (4) 式の第 1 項が $-2A$ となるため, 次式を満足すると制約条件を満たさない解が不安定となる.

$$A > \frac{D_{max}}{2} \tag{14}$$

2) x_{ik} に対応する行列の行和, 列和で 2 以上のものがある. $x_{ik}=1$ で k 列の列和が 2 以上であるとすると

$$A + C > 0 \tag{15}$$

が成立すると (4) 式の値は正となる. 従って, (A13) 式よりこの解は不安定となる.

以上より (10) から (15) 式が成立すると安定な頂点はすべて制約条件を満たすことになる. ただし, (1) 式の x_{ik} の 2 次項の係数は $2A+C$ で (14), (15) 式より正となるため付録より頂点でない平衡点が安定となる可能性がある.

3. 数値計算

この章では図 1 の例題および文献 7) で用いた LSI 配置の実データを用いて, 重み (10), (14), (15) の妥当性を検証すると共に, 非零対角および対角要素を減少させることにより, 解の質がどのように変わるかを調べる. 文献 5), 6) と同様に (4) 式に Euler 法を適用して解を求め, 積分の刻みの初期値は文献 5) の方法で決めた. ここで頂点が安定となるように重みを決めたときは, 付録に示すように頂点 C に対する領域 D_c にはいると収束が単調になるために, 収束を早めるためにある一定時間以降で変化の最大値がある値以下になったとき, 最大値がその値になるように積分刻みを大きくした. 初期値としては文献 5) と同様に次式で与えた.

$$x_{ik} = 0.5 + \alpha \text{Rand} \tag{16}$$

ただし α は正の小さな値で Rand は $[-0.5, 0.5]$ の範囲の一樣乱数である.

実データで対角要素を減少させる場合はある時点以降次式により C を最終値まで変化させた.

$$C \leftarrow C - \Delta C \tag{17}$$

ただし ΔC は正の修正量である. 積分は制約を

満たす解が求まったか, すべての x_{ik} の今回と前回の修正値の差が指定された値より小さくなったときに終了した. なお制約を満たす解が求まったか否かは, x_{ik} が 0.5 より大きいとき 1 にし, 小さいときは 0 にして判定した. また求まった解が制約を満たさないが, 一箇所のニューロンの状態を 0 から 1 に変更すると制約を満たす解となる場合はそのように変更した.

3.1 例題データ

図 1 の例を用いて評価した. モジュール数, スロット数は 6 で, モジュール間の配線本数は図 1 (a) のようにして, 図 1 (a) の外部端子を図 1 (c) の外部スロットに固定して, 内部モジュールの配置を求めた. このとき D_{max} , D_{min} は各々 22, 7 となった. また図 1 (c) のとき総配線長が最短となり 23 であった.

$B=1$ とすると, (10), (14), (15) 式は次のようになる.

$$C < -22 \tag{18}$$

$$A > 11 \tag{19}$$

$$A + C > 0 \tag{20}$$

上式の妥当性を検証するために A, C の値を変えて $\alpha=0.49$ すなわち, 初期値が入力空間に一様分布するとして解を求めた. 表 1 にその結果を示すが, No. 1 から 11 までは C は固定で, No. 12 のときは C の初期値を 22 として繰り返しが 30 の時点から $\Delta C=5$ として C を減少していった. 表において No. 1 から 4 までは (18)-(20) 式を満たしており, No. 5 は (20) 式を満たしていない. すなわち, 行, 列に 2 つ以上のニューロンが発火する解が安定となり得る. No. 5 の制

表 1 例題における求まる解の特性 (1000 回試行, $\alpha=0.49$)
Table 1 Convergence characteristics for example data (1000 trials, $\alpha=0.49$).

No.	A	C	制約を満たす解の数	最小値への収束回数	平均配線長	平均収束回数
1	52	-22	1000	104	29.2	67
2	42	-22	1000	101	29.2	58
3	32	-22	1000	99	29.3	49
4	23	-22	965	96	29.1	61
5	20	-22	864	96	28.7	63
6	11	0	1000	1000	23.0	110
7	11	-2	1000	999	23.0	60
8	11	-4	1000	916	23.1	54
9	11	-6	1000	746	23.5	51
10	11	-8	974(2)	593	24.0	55
11	11	-10	934(9)	442	24.8	73
12*	52	-22	1000	1000	23.0	76

(): 制約を満たすように変更した数

*: No. 12 以外は C は固定

約を満たさない解はすべて行、列で2つのニューロンが発火しており、理論と一致した。また、No. 4の制約を満たさない解のすべては2つのニューロンが発火していた。(18)-(20)式を満たしていても、制約条件を満たさない解が生じたのは、対角要素が正のときは頂点でない安定平衡点が超立方体の表面にあるためである。

No. 6 から 11 までは(19)式を満足する最小の A を設定して、(20)式を満たす範囲で C を変えたものである。これは、解の質をよくするためには重みの値を小さくしたほうがよいこと、また制約条件を満たすすべての解を安定化する必要はないことによる^{9),10)}。No. 6 では、制約条件を満たすすべての解が不安定となるため、収束が悪くなるがすべて最適解が求まった。また、No. 7 でも、ほぼ 100% 最適解が求まっているが、 C の絶対値が大きくなるにつれ、最適解が求まる回数が減っている。これより、 A は(14)式を満たす範囲でできるだけ小さく、また C は(15)式を満たす範囲で絶対値が小さい方がよいと言える。これは巡回セールスマン問題のときと同じである¹⁰⁾。

No. 12 は No. 1 の条件で対角要素を減少したものであるが、100% 最適解を求めることができ、対角要素を減少させることが解の質を改善するのに効果のあることが分かった。

なお $\alpha=0.001$ として表1と同じ条件で解を求めたときは100% 最適解が求まった。これは、問題の規模が小さいためである。また、巡回セールスマン問題と異なり $\alpha=0$ 、すなわち超立方体の中点に初期値を設定しても解の縮退は起こらない。

3.2 実データ

表2に示す4組の実データの配置モジュール数はすべて、 $5 \times 9 = 45$ 個であり、実データ 1, 2 ではモジュール間の配線が比較的均一に全体にわたっているが、実データ 3, 4 ではモジュール間の配線が局所的で、配線に片寄があるという特徴を持っている。

$B=1$ のときの実データに対する D_{max} , D_{min} の値

表2 パラメータの設定値 ($B=1$)
Table 2 Parameter setting ($B=1$).

データの種 類	D_{max}	D_{min}	ケース1		ケース2	
			A	C	A	C
実データ1	6492	556	8000	-6500	5000	-3500
実データ2	4611	511	6500	-5000	3500	-2000
実データ3	2784	248	4000	-2800	2000	-800
実データ4	2842	341	4000	-2900	2000	-900

は表2のようになった。これに基づいてケース1としては(14)-(16)式のすべてを満たす範囲でなるべく小さい値とし、ケース2としては A は(14)式を満たす範囲でなるべく小さくし、 C は収束が悪くならないよう D_{min} より大きくなるように、 A , C を決めた。

表3にシミュレーティッドアニーリング (SA) 法、最小カット法および対角要素を0としたニューラルネットの結果⁷⁾を示す。表4に非零対角で対角要素を減少させないときとさせたときの結果を示す。なおこのときは、初期値は超立方体の中心すなわち $\alpha=0$ とし、また積分中对角要素を減少させたときの初期値は3000とし、実データ 2, 3 のケース1について $\Delta C=50$ とした以外は $\Delta C=10$ とした。

対角要素を非零で固定することにより、ケース1では実データ3を除いて、対角要素が零のニューラルネットおよび最小カット法よりも総配線長が短くなった。更に対角を積分中に減少させることにより総配線長が減少している。対角を非零とすることにより最小カット法より総配線長が短くなり、また対角を積分中に減少させることにより、SA法より多少総配線長が長いと同程度の配線長となっている。ケース1と2を較べると実データ 3, 4 ではケース2の方が総配線長が減少しており、特に実データ3ではSA法より総配線長が短くなっている。しかしながら、実データ 1, 2 ではケース2の方が悪くなっており、重み C の絶対値を(10)式に違反して小さくすることは必ずしも解の

表3 従来法で求めた実データの総配線長⁷⁾
Table 3 Total wiring length of real data by conventional methods⁷⁾.

データの種 類	SA 法	最小カット法	ニューラルネット (対角零)
実データ1	17875	19864	21576
実データ2	17659	19751	19273
実データ3	7000	7375	8456
実データ4	8014	9059	9046

表4 ニューラルネットで求めた実データの総配線長
Table 4 Total wiring length of real data by neural networks.

データの種 類	ケース1		ケース2	
	対角非零	対角減少	対角非零	対角減少
実データ1	19795	18146	20008	18424
実データ2	18729	17891	19128	18671
実データ3	8694	7158	7797	6969
実データ4	8687	8210	8522	8182

表 5 対角変化量 ΔC に対する実データ 2 の
総配線長の変化

Table 5 Total wiring length of real data 2 against
change of diagonal element ΔC .

ΔC	総配線長
10	18772
20	18532
30	18428
40	17860
50	17891

質の改善につながっていない。

表 5 に実データ 2 で ΔC を変えたときの総配線長の変化を示すが、 $\Delta C=10$ のとき対角要素を変更しないときよりも配線長が長くなっており、 ΔC の選択が解の質に大きく影響していることが分かる。

4. 考 察

巡回セールスマン問題で確かめられたことは LSI 配置問題でも確かめられた。すなわち対角要素を 0 にすると頂点への収束は保証されるが、解の質が大規模問題では悪くなる。これに対して、対角要素を非零のままにして、対角要素を徐々に減少させるようにすると、解の質が大幅に改善された。なお対角要素を徐々に減少させて解の質を改善して行く方法は、平均場アニーリング¹²⁾⁻¹⁴⁾と同様な方法である。

巡回セールスマン問題と LSI 配置問題の大きな違いは、巡回セールスマン問題では初期値がすべて同一の値にすると縮退が生じ制約を満たす解が求まらないが、LSI 配置問題では(4)式の定数項(入力ベクトル)が同じにならないためこのようなことは生じない。また巡回セールスマン問題と比べてモジュール間の接続に偏りが大きいため、極端に悪い解は余り求まらない傾向であり、制約条件を満たす解をすべて安定とするように重みを決めても、良好な解を求めることができた。

5. おわりに

我々がこれまで開発した非零の対角要素を持つホップフィールドネットの収束理論を LSI のモジュール配置問題に適用し、制約を満たす解を安定して制約を満たさない解を不安定とするエネルギー関数中の重みの関係式を導出した。次いでこの関係式を用いて LSI 配置の実データを用いて計算機シミュレーションを行った結果、従来対角要素を 0 として求めた解より解の質が大幅に改善され、またシミュレーティッド

アニーリング法と解の質が遜色ないことが確かめられた。

参 考 文 献

- 1) Hopfield, J. J. and Tank, D. W.: Neural Computation of Decisions in Optimization Problems, *Biolog. Cybern.*, Vol. 52, pp. 141-152 (1985).
- 2) Wilson, V. and Pawley, G. S.: On the Stability of the TSP Problem Algorithm of Hopfield and Tank, *Biolog. Cybern.*, Vol. 58, pp. 63-70 (1988).
- 3) Peterson, G. and Söderberg, B.: A New Method for Mapping Optimization Problems onto Neural Networks, *International Journal of Neural Systems*, Vol. 1, No. 1, pp. 3-22 (Jan. 1990).
- 4) Abe, S.: Theories on the Hopfield Neural Networks, *Proc. IJCNN-89*, Vol. 1, pp. 557-564 (June 1989).
- 5) 阿部重夫: ホップフィールドニューラルネットの重みの決定法とその評価, *情報処理学会論文誌*, Vol. 34, No. 1, pp. 21-28 (1993).
- 6) Abe, S.: 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 (1993).
- 7) 伊達 博, 林 照峯: ニューラルネットによる LSI モジュール配置手法, *信学論 A*, Vol. J73-A, No. 10, pp. 1641-1647 (1990).
- 8) Aiyer, S.V.B.: Solving Combinatorial Optimization Problems Using Neural Networks with Applications in Speech Recognition, Technical Report CUED/FINFENG/TR 89, Department of Engineering, University of Cambridge (Oct. 1991).
- 9) Gee, A. H., Aiyer, S. V. B. and Prager, R. W.: An Analytical Framework for Optimizing Neural Networks, *Neural Networks*, Vol. 6, No. 1, pp. 79-97 (1993).
- 10) Abe, S. and Gee, A. H.: Global Convergence of the Hopfield Neural Network with Non-zero Diagonal Elements, *IEEE Trans. Circuits Syst.-II*, Vol. 41, No. 12 (1994).
- 11) Li, J.-H., Michel, A. N. and Porod, W.: Analysis and Synthesis of a Class of Neural Networks: Linear Systems Operating on a Closed Hypercube, *IEEE Trans. Circuits Syst.*, Vol. CAS-36, pp. 1405-1422 (1989).
- 12) Van den Bout, D. E. and Miller, T. K. III, Graph Partitioning Using Annealed Neural Networks, *IEEE Trans. Neural Networks*, Vol. 1, No. 2, pp. 192-203 (1990).
- 13) Eberhardt, S. P., Daud, T., Kerns, D. A.,

Brown, T. X. and Thakoor, A. P.: Competitive Neural Architecture for Hardware Solution to the Assignment Problem, *Neural Networks*, Vol. 4, pp. 431-442 (1991).

- 14) Gee, A. H.: Problem Solving with Optimization Networks, PhD thesis, also published as Technical Report CUED/F-INFENG/TR 150, Department of Engineering, University of Cambridge (July 1993).

付録 非零の対角要素を持つホップフィールド ネットの極小解

A.1 ホップフィールドネットの定義

最小化するエネルギー関数を次式のようにおく。

$$E = \mathbf{x}' T \mathbf{x} + \mathbf{b}' \mathbf{x} \quad (\text{A1})$$

ただし $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$: 要素が 0, 1 の変数ベクトル, $T = \{T_{ij}\}$: n 次対称行列, \mathbf{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¹¹⁾。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{x}} = -T\mathbf{x} - \mathbf{b}, \quad 0 \leq x_i \leq 1, i=1, \dots, n \quad (\text{A2})$$

ここで $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_n)'$ を (A2) 式の平衡点とする。すなわち, $\{1, \dots, n\}$ から選んだ k 個の整数を含む集合を S_k としたとき次式が成り立つとする。

$$T_i \mathbf{s} + \mathbf{b}_i = 0, \quad 0 < s_i < 1, i \in S_k \\ s_i = 0, 1, \quad i \notin S_k \quad (\text{A3})$$

もし $k=0$ ($S_k = \phi$) のときは, \mathbf{s} は頂点で, $k=n$ のときは $T\mathbf{x} + \mathbf{b} = 0$ の解である。 \mathbf{s} の安定性は (A2) 式に $\mathbf{x} = \mathbf{s} + \mathbf{x}'$ を代入することにより解析できる。すなわち

$$\frac{d\mathbf{x}'}{dt} = -T\mathbf{s} - \mathbf{b} - T\mathbf{x}' \quad (\text{A4})$$

従って (A3) 式より (A4) 式は次のようになる。

$$\frac{dx'_i}{dt} = -T_i \mathbf{x}' \quad i \in S_k \quad (\text{A5})$$

$$\frac{dx'_i}{dt} = -T_i \mathbf{s} - \mathbf{b}_i - T_i \mathbf{x}' \quad i \notin S_k \quad (\text{A6})$$

ただし T_i は T の i 番目の行ベクトルである。これより次の定理が成り立つのは明らかである。

定理 1 (A3) 式で与えられる平衡点は $i \notin S_k$ に対して

$$T_i \mathbf{s} + \mathbf{b}_i > 0 \text{ for } s_i = 0 \text{ or } T_i \mathbf{s} + \mathbf{b}_i < 0 \text{ for } s_i = 1 \quad (\text{A7})$$

が成立して $k \times k$ 次行列 $\{T_{ij}\}$ の固有値が非負のとき

安定である。ただし i, j は S_k に含まれるとする。

文献 5), 6) で $T_{ii} = 0$ のときの平衡点の安定性を議論したので以下では T_{ii} は非負であるとする。

A.2 頂点の安定性

ここで超立方体と超立方体の内部を次のように定義する。

$$H = \{\mathbf{x} | 0 \leq x_i \leq 1 \text{ for } i=1, \dots, n\} \quad (\text{A8})$$

$$H^- = \{\mathbf{x} | 0 < x_i < 1 \text{ for } i=1, \dots, n\}, \quad (\text{A9})$$

さらに頂点 $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n)'$ に対して n 個の隣接した頂点 $\mathbf{c}(i) = (c_1, \dots, c_{i-1}, 1-c_i, c_{i+1}, \dots, c_n)'$ を定義する。

次に超立方体内部 H^- の \mathbf{x} の動きを調べるため超平面 $T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i = 0$ により H^- が次のように分割されるとする。

$$D^+(i) = \{\mathbf{x} | 0 < x_j < 1, j=1, \dots, n, T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i > 0\}$$

$$D^-(i) = \{\mathbf{x} | 0 < x_j < 1, j=1, \dots, n, T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i < 0\}$$

$$D^0(i) = \{\mathbf{x} | 0 < x_j < 1, j=1, \dots, n, T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i = 0\} \quad (\text{A10})$$

$\mathbf{x} \in D^+(i)$ に対し \mathbf{x} が $D^+(i)$ にいる限りは x_i は常に単調減少し, $\mathbf{x} \in D^-(i)$ に対し \mathbf{x} が $D^-(i)$ にいる限りは x_i は常に単調増加する。また $\mathbf{x} \in D^0(i)$ で $\mathbf{x}' = (x_1, \dots, x_i + \varepsilon, x_{i+1}, \dots, x_n)'$, $\varepsilon > 0$ で $T_{ii} > 0$ のときは $T_i \mathbf{x}' + \mathbf{b}_i > 0$ が成立する。すなわち, $\mathbf{x}' \in D^+(i)$ となる。従ってもし T_{ii} が正ならば \mathbf{x}' は超平面 $T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i = 0$ の方向に動く。同様にもし T_{ii} が負ならば \mathbf{x}' は超平面 $T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i = 0$ から離れる。従って T_{ii} が 0 と 0 でないときには大きな違いがある。(T_{ii} が 0 のときは $T_i \mathbf{x} + \mathbf{b}_i = 0$ は x_i 軸に平行であった。) またこのために T_{ii} が 0 でないとき 2 つの隣接した頂点とそれを結ぶ辺は同じ値のエネルギーを持ちえない。従ってすべての頂点上の平衡点は孤立点である。

まず最初はすべての i について $\mathbf{c} \notin D^0(i)$ が成立するか, ある i について $\mathbf{c} \in D^0(i)$ となっても, $D^0(i)$ と H^- が交わらないとする。そこで頂点 \mathbf{c} に対して領域 D_c を次のように定義する。

$$D_c = \bigcap_{\substack{i=1, \dots, n \\ \mathbf{c} \notin D^0(i)}} D(i) \quad (\text{A11})$$

ただし

$$Z(i) = \begin{cases} D^+(i) & \text{for } T_i \mathbf{c} + \mathbf{b}_i > 0 \\ D^-(i) & \text{for } T_i \mathbf{c} + \mathbf{b}_i < 0 \end{cases} \quad (\text{A12})$$

$\mathbf{x} \in D_c$ のとき容易に \mathbf{x} は D_c にとどまる限り単調に動くことが分かる。もし頂点 \mathbf{c} が $i=1, \dots, n$ に対して

$$T_i \mathbf{c} + \mathbf{b}_i > 0 \text{ for } c_i = 0 \text{ or } T_i \mathbf{c} + \mathbf{b}_i < 0 \text{ for } c_i = 1 \quad (\text{A13})$$

あるいは $T_i \mathbf{c} + b_i = 0$ で $D^0(i) \cap H^- = \phi$ のときに

$$\begin{aligned} T_i \mathbf{c}(i) + b_i > 0 \text{ for } c_i = 0 \text{ or} \\ T_i \mathbf{c}(i) + b_i < 0 \text{ for } c_i = 1 \end{aligned} \quad (\text{A14})$$

が成立するとき $\mathbf{x} \in D_c$ で \mathbf{c} の近傍の \mathbf{x} は \mathbf{c} に向かうから頂点 \mathbf{c} は安定である。ここで $T_i \mathbf{c} + b_i = 0$ で $D^0(i) \cap H^- = \phi$ のとき $T_i \mathbf{x} + b_i$ の符号は \mathbf{c} と $\mathbf{c}(i)$ を結ぶ辺上で \mathbf{c} を除いて同じである。

頂点 \mathbf{c} に対して収束領域 D'_c を次のように定義する。

$$\begin{aligned} D'_c = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in D_c, \\ \text{and } (x_1, \dots, x_{i-1}, x'_i, x_{i+1}, \dots, x_n)^t \in D_c, \\ x'_i = \gamma c_i + (1-\gamma)x_i, 0 \leq \gamma < 1 \text{ for } i=1, \dots, n \} \end{aligned} \quad (\text{A15})$$

$(x_1, \dots, x_{i-1}, x'_i, x_{i+1}, \dots, x_n)^t \in D_c$ の条件は \mathbf{x} と $(x_1, \dots, x_{i-1}, c_i, x_{i+1}, \dots, x_n)^t$ とを結ぶ線分で後者の点を除いたものは x_i 軸に平行で超平面 $T_i \mathbf{x} + b_i = 0$ ($i=1, \dots, n$) と交差しないことを意味する。また容易に D'_c が空でない連結領域であることが分かるから、 \mathbf{x} が D'_c にあれば修正された \mathbf{x} は $H^- - D'_c$ には逆戻りしない。

以上の議論から文献 6) の定理 1 に似た次の定理が成り立つことが分かる。

定理 2 頂点 \mathbf{c} が (A13) あるいは (A14) 式を満たすとき任意の $\mathbf{x} \in D'_c$ は単調に \mathbf{c} に収束する。

A.3 頂点以外の点の安定性

$T\mathbf{s} + \mathbf{b} = 0$ を満足する \mathbf{s} について次の定理が成立する。

定理 4 ある i について T_{ii} が負とすると、 \mathbf{s} は不安定である。

定理 5 T_{ii} をすべて負とし、 \mathbf{s} が $0 \leq s_i \leq 1$ ($i=1, \dots, n$) で少なくともある i で狭義の不等号が成立し、頂点 \mathbf{c} が安定となるとすると、 \mathbf{s} は不安定点である。

残りの平衡点は H の表面上の点である。次の系は明らかである。

系 1 (A3) で与えられる点 \mathbf{s} に対して、(A7) がある $i \notin S_s$ で成立しないか、 i 軸 ($i \in S_s$) で張られる空間に不安定な頂点が存在するか、ある $i \in S_s$ に対して T_{ii} が負であるならば、 \mathbf{s} は不安定である。

上記の議論および文献 6) より T_{ii} が 0 と非零との違いは次のとおりである。

対角要素が 0: 隣接する頂点が同時に安定になりうる。このときはそれらの頂点を結ぶ辺も安定になる。

頂点でない平衡点が安定となるのはこのときだけである。

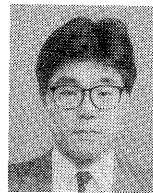
対角要素が非零: 2つの隣接した頂点を結ぶ辺は安定にならないが、隣接した頂点は安定となりうる。対角要素が正のとき頂点でない平衡点が安定となりうる。

(平成 6 年 2 月 7 日受付)
(平成 6 年 11 月 17 日採録)



阿部 重夫 (正会員)

昭和 47 年京都大学大学院修士課程 (電気工学専攻) 修了。同年 (株) 日立製作所日立研究所に入社。以来日立研究所にて電力系統の解析、ミニコン用ベクトルプロセッサ、Prolog マシンの研究開発、ニューラルネット、ファジィシステムの研究に従事。昭和 53 年から一年間米国 Texas 大学客員研究員。現在日立製作所主管研究員。茨城大学非常勤講師。昭和 59 年電気学会論文賞受賞。電気学会、電子情報通信学会、計測自動制御学会、IEEE、INNS 各会員。工学博士。



伊達 博

昭和 36 年生。昭和 62 年九州大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了。工学博士。同年、(株) 日立製作所入社。現在、(株) 日立製作所日立研究所所属。平成 2 年より平成 5 年まで (財) 新世代コンピュータ技術開発機構へ出向。電子回路の設計自動化、特に、並列処理を利用した LSI CAD の研究開発に従事。電子情報通信学会、人工知能学会、IEEE 各会員。



大淵 康成

昭和 41 年 2 月生。平成 2 年東京大学大学院修士課程修了 (物理学専攻)。平成 4 年同博士課程中退。同年 (株) 日立製作所中央研究所に入社。以来、ニューラルネットワークによる最適化、手話認識システムにおける情報統合の研究に従事。現在中央研究所知能システム部研究員。電子情報通信学会、INNS 会員。