2D-7

不等号制約を持つHopfield型ニューラルネットの収束理論

阿部　重夫　　川上　潤三
(株) 日立製作所　日立研究所

1．はじめに

我々はこれまでHopfield型ニューラルネット[1]の収束特性を理論的に明らかにした。[2-4] 本論文では不等号制約がある場合のニューラルネット[5]の収束特性を明らかにするとともにエネルギー中の重みの決定法について述べる。

2．不等号制約条件の定式化

不等号制約を

$$d \geqq \Sigma V_i X_i \qquad (d > 0) \qquad (1)$$

$$\Sigma V_i X_i \geqq d \qquad (d > 0) \qquad (2)$$

で表わされるとして、(1),(2)に対して変数Yを導入して等号化する。即ち

$$dY - \Sigma V_i X_i = 0, \qquad 1 \geqq Y \geqq 0 \qquad (3)$$

$$dY - \Sigma V_i X_i = 0, \qquad Y \geqq 1 \qquad (4)$$

不等号制約を含む組合せ最適化問題を

$$E' = 1/2 X^t T' X + b^t X \rightarrow \text{最小化} \qquad (5)$$

制約 $d_i Y_i - \Sigma V_{ij} X_j = 0$, $1 \geqq Y_i \geqq 0$あるいは$Y_i \geqq 1$

$$i = 1, \cdots, k \qquad (6)$$

とする。但し、X, bはn次元ベクトル、T'はn×n次対称行列とする。ここで(6)式の自乗を1/2したものを(5)式に加えると、Eは次のようになる。

$$E = 1/2 (X, Y)^t \begin{pmatrix} T & V \\ V^t & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} + b^t X \qquad (7)$$

但し、$T = T' + W$

$$W = \begin{pmatrix} \Sigma V_{i1}{}^2, & \Sigma V_{i1} V_{i2} \cdots \\ & \ddots \quad \Sigma V_{in}{}^2 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} d_1{}^2 & 0 \\ 0 & \ddots \; dk^2 \end{pmatrix} \qquad V = -\begin{pmatrix} d_1 V_{11} \cdots dk V k_1 \\ \vdots \qquad \vdots \\ d_1 V_1 n \cdots dk V kn \end{pmatrix}$$

(7)式に対するHopfieldモデルは、

$$X_i = 1/2(1 + \tanh U_i) \qquad (8)$$

$$Y_i = \begin{cases} 1/2(1 + \tanh V_i) & 1 \geqq Y_i \geqq 1 \\ 1 + \exp(V_i) & Y_i \geqq 1 \end{cases} \qquad (9)$$

とすると次のようになる。

$$\begin{pmatrix} du/dt \\ dv/dt \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} T & V \\ V^t & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (10)$$

3．固有値による解析

(8)-(10)式においてu, vを消去すると

$$\begin{pmatrix} dX/dt \\ dY/dt \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 2(1-X_1)X_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & 2(1-X_n)X_n & \\ & & & f(Y_1) \\ 0 & & & \ddots \; f(Y_k) \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} T & V \\ V^t & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \quad \cdots\cdots \quad (11)$$

但し、$f(Y_i) = 2(1-Y_i)Y_i$　　for　　$1 \geqq Y_i \geqq 0$

$(Y_i - 1)$　　for　　$Y_i \geqq 1$

(11)式を積分してもとまる解は、(11)式の特異点であり、それは、

(i)　$X_i = 1, 0$,　$Y_j = 1, 0$ or $Y_j = 1$

(ii)　$\begin{pmatrix} T & V \\ V^t & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} = 0$の根

(iii)　(i),(ii)の組合せ

である。ここで(ii)の特異点を調べる。

$$TX + VY + b = 0 \qquad (12)$$

$$V^t X + DY = 0 \qquad (13)$$

より、(13)式を解いて

$$Y = -D^{-1} V^t X \qquad (14)$$

を(12)式に代入すると、

$$(T - VD^{-1}V^t)X + b = T'X + b = 0 \qquad (15)$$

これより次の定理が成立することが分かる。

> 定理1　(ii)式の特異点(X, Y)において、Yが$1 \geqq Y_i \geqq 0$あるいは$Y_i \geqq 1$の条件を満足する限りXは不等号制約のない系の特異点と一致する。

ここで、特異点のうちで求めたい解は、

$X_i = 1, 0$　　　$i = 1, \cdots, n$

$1 \geqq Y_j \geqq 0$,　あるいは　$Y_j \geqq 1$　, $j = 1, \cdots, k$

である。平衡点を(c, e)として

$X = X' + c$　　　$c_i = 1, 0$

$Y = Y' + e$　　　$1 \geqq e_j \geqq 0$　あるいは　$e_j \geqq 1$

を(11)式に代入して線形化すると

$$dX'/dt = \begin{pmatrix} 2(2C_1-1)(T_1 C + V_1 e + b_1) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 2(2C_n-1)(T_n C + V_n e + b_n) \end{pmatrix} X' \qquad (16)$$

$$dY'/dt = -\begin{pmatrix} f(e_1)d_1{}^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & f(e_k)d_k{}^2 \end{pmatrix} Y' - \begin{pmatrix} f(e_1) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & f(e_k) \end{pmatrix} V^t X' \qquad (17)$$

Theories on the Hopfield Neural Nets with Inequality Constraints

Shigeo ABE, Junzo KAWAKAMI
HITACHI, Ltd.

これよりXの固有値は

$$\lambda c,i=2(2Ci-i)(Ti\ c+Vi\ e+bi) \quad i=1,\cdots,\ n \quad (18)$$

であり、(17)式のY'の係数は負であるから

$$\lambda c,i < 0 \qquad i=1,\cdots,\ n$$

が成立すればY'も安定となる。即ちYは従属変数となりXの収束に影響を与えない。

ここで、次の定理を容易に導出できる。

> 定理2　頂点C＝$(C_1\cdots Cn)$が不等号制約(6)式を満足するとき、(18)式の固有値は、(6)式がないときの固有値に等しい。即ち
>
> $$\lambda c,i=2(2Ci-i)(Ti'C+bi),\ i=1,\cdots,\ n \quad (19)$$

これより頂点Cに隣接する頂点をC(i), i=1,…, nとするとき頂点C, C(i)が全て不等号制約を満たせば文献2)-4)で示した定理は全て成立する。更に

> 定理3　Tii'=0　i=1,…, nとして頂点Cが不等号制約を満足するとと、(5)式のE'に対して
>
> $$E'c < E'c(i) \qquad i=1,\cdots,\ n$$
>
> であれば頂点Cは極小解である。

4．重みの決定法

エネルギーEが次式で与えられるとする。

$$E=Af(X)+Bg(X)^2+Ch(X,\ Y)^2 \quad (20)$$

但し、f(X):目的関数

g(X):等号制約条件

h(X,Y):不等号制約条件

A, B, C:重み

定理2より不等号制約を満たす限りは、不等号制約が安定性に影響を及ぼさないから、A, Bの決め方は不等号制約のない場合と全く同じとなる。即ち

(i)　f(X), $g(X)^2$のXi^2の項をXiに変換したものを新たにf(X),$g(X)^2$とする。

(ii)　制約条件を満たす解をc, i番目の要素を反転したものをC(i)とすると

$$Af(c(i))+Bg(c(i))^2> Af(c)$$

が任意のcとiについて成立するようにBを決める。

これに対しCは、不等号制約を満たさない安定解が不安定となるように決めればよい。

5．輸送問題の収束の改善

不等号制約の導入は、輸送問題のような0, 1問題の収束特性の改善にも貢献できる。

輸送問題とはネットワーク上の任意の2つのノード間の距離を最小にする問題で次のように定式化できる。

$$E = A/2\sum_{i=1}^{n}\ (Ii+\sum_{j\in N(i)}(bji-bij))^2 + B/2\sum_{i=1}^{n}\ \sum_{j\in N(i)} bijbji + D/2\sum_{i=1}^{n}\ \sum_{j\in N(i)}(bij+bji)Cij \quad (21)$$

但し第1項は、各ノードにおいて出入りするフローが0である制約で

Ii：i番目のノードに対するインジェクション

＝1：出発点，-1：終点、　0：その他

bij：ノードiからjへのフロー

＝1：フロー有り　0：フロー無し

n：ノードの総数

A：重み

である。第2項はノードiからj及びjからiへのフローが同時にないという制約でBは重みである。第3項は総コストで

Cij：ノードiとjのフローのコスト

D：重み

である。

この問題は0, 1の組合せ問題で、A, B, Dは次のように決めれば良い。第1, 2項が制約条件からはずれたときのエネルギーの増分は、A, BであるからA=Bとする。また制約条件からニューロンの1出力だけはずれたときの制約条件の増分の最小値はAで第3項の減少分の最大値はD max cijであるから

$$A > D\ \max\ cij \quad (22)$$

とすればよい。このとき隣接したノードの最短径路を求めるのでなければ(5)式のbの要素は全て正となる。従って原点が安定となり、制約条件を満たさない原点が求まるようになる。これに対して、(21)式のEを

$$E'=E+F/2(y-\Sigma bij)^2$$

とし、原点が不安定となるようにFを決めれば収束特性が大幅に改善される。

6．まとめ

不等号制約条件があるときのHopfieldニューラルネットの収束特性を理論的に明らかにした。また不等号制約条件を導入することにより、0, 1問題の収束特性を改善できることを示した。なお数値計算例は、紙面の都合上講演時に示す。

参考文献

1) J.J. Hopfield and D.W. Tank, "Neural Computation of Decisions in Optimizing Problems," Biological Cybernetics, 52, pp141-152, 1985

2) 阿部, "Hopfield型ニューラルネットの理論的考察," 情報処理学会第38回全国大会、5F-2、平成元年3月

3) 阿部, "Hopfield型ニューラルネットの収束特性," 電気学会全国大会1564、平成元年4月

4) S.Abe, "Theories on the Hopfield Neural Networks," IJCNN-89, June 1989

5) 福井他, "ホップフィールド型ニューラルネットによる混合　整数問題の解法," 電気学会全国大会1063、平成元年4月