2L−1

幾何学的制約緩和問題への コネクショニスト・アプローチ（1）

高井 昌彰+, 金 那美++
+ 北海道大学工学部, ++ 東京大学理学部

1．はじめに

相互結合型ニューラルネットワークの組合せ最適化問題への適用は，J.J.Hopfield によって拓かれた新しい応用である[1]．しかしながら，ネットワークのエネルギー関数がユニット状態の2次形式で表現されるため，適応可能な問題は必然的に線形のクラスに限定されてしまう[2][3]．一方，コンピュータ・グラフィクス（CG）の分野では，高次・非線形の幾何学的制約(geometrical constraints) を解くことによって，図形を空間に配置，あるいは構築する描画(picture description)問題があり[4]，その高速かつ安定な解法が望まれている．

本論文では，相互結合型ニューラルネットワークの一種であるボルツマンマシン[5][6]のエネルギー関数を拡張し，高次・非線形の最適化問題への適用を試みる．応用の具体例として，簡単な2次方程式の解法を示す．本手法は，一般の非線形問題に適用可能であり，CGにおける幾何学的制約緩和問題の高速ソルバーとしての応用が期待できる[7]．

2．エネルギー関数の拡張

ボルツマンマシンにおけるネットワークのエネルギー関数は，ユニット状態（1または0）の2次形式であるため，適用可能な最適化問題は，基本的に

$$\sum_j a_{ij}\cdot x_j = c_i,\quad x_j \in \{0,1\},\ a_{ij}, c_i \text{は定数}$$

の形をもった線形のクラスに限定される．従って，高次・非線形の最適化問題を解くためには，エネルギー関数がユニット状態の3次以上の項を含む必要がある．そこで，高次項を含む，拡張されたエネルギー関数Gを導入する．

(1)自由ユニットとエネルギー関数

自由ユニット(free unit)の集合を

$$U = \{u_1, u_2, \ldots, u_n\},\quad n \geq 1$$

とするとき，U上の論理コネクション (logical connection)の集合Lを次式で定義する．

$$L = 2^U - \phi$$

ここで，重み関数 W:L→$\mathbf{R}$ を導入し，ネットワークの様相(configuration)kにおけるエネルギー関数 E(k)を次式で定義する．

$$E(k) = -\sum_{c \in L} W_c \cdot S_c$$

ただし，

$$S_c = \prod_{u \in c} k(u)$$

ここで，k(u)は様相kにおけるユニットuの状態（0または1）を表わす．明らかに，定義された関数Eはユニット状態の2次の項を含み，ネットワークのエネルギーの自然な拡張となっている．

(2)準ユニットと物理コネクション

論理コネクション c の個々の要素uに対して，準ユニット(quasi-unit)$\overline{u}_c$を定める．準ユニットの状態 k($\overline{u}_c$) は，c に属する他の自由ユニットの状態を用いて定められる．

$$k(\overline{u}_c) = S_{c-\{u\}} = \prod_{v \in c-\{u\}} k(v)$$

ここで，$\{u, \overline{u}_c\}$ を自由ユニットuの，論理コネクション c 上の物理コネクション(physical connection)と呼ぶ．ただし，c={u} の場合，

$$k(\overline{u}_c) = S_{c-\{u\}} = S_{\{\}} = 1$$

と定義する．これは，準ユニット$\overline{u}_c$が恒真ユニットであることを意味する．|c-{u}|＝mのとき，$\overline{u}_c$はm次の準ユニットと呼ばれる．また，c上のすべての物理コネクションには，等しく重みw_cが対応付けられる．

3．エネルギー関数のリアプノフ性

エネルギー関数Eがリアプノフ性（ユニットの状態遷移に伴い，エネルギーが減少する性質）を持つことは以下のように示される．これは，任意の自由ユニットuの状態を反転させて得られるネットワークの様相をk_uとしたとき，

$$\triangle E_k(u) = E(k_u) - E(k)$$

で与えられるエネルギー関数の変化量が，自由ユニットuの状態遷移に対して常に負であることを示せばよい．エネルギー関数Eにおいて，uを論理コネクションに含まない項 $W_c \cdot S_c$, ($u \notin c$) のエネルギー変化△Eに対する寄与はゼロだから，uを要素として含む論理

A Connectionist Approach to Geometrical Constraint-Solving (1)
Yoshiaki TAKAI+ and Nami KIN++
+ Hokkaido University, ++ The University of Tokyo

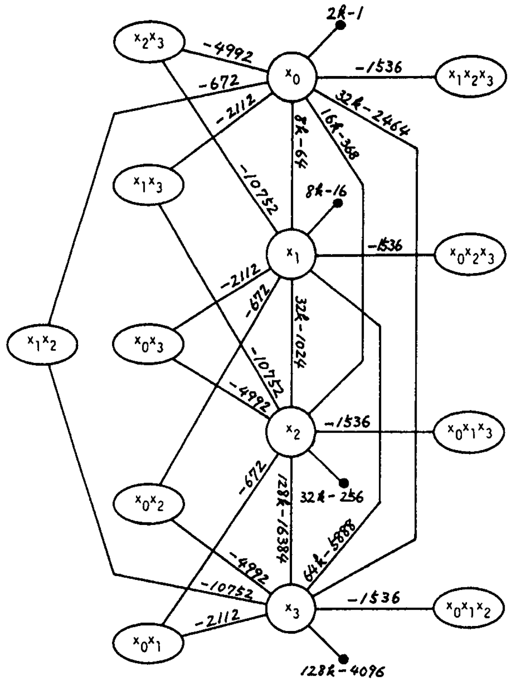

図1．4ビットの開平計算を行なうネットワーク．
○：自由ユニット（兼1次の準ユニット），
○：2次以上の準ユニット，●：恒真ユニット．

コネクションのみ考えればよい．このとき，

$$k_u(v) = \begin{cases} k(v) & \text{if } u \neq v \\ 1 - k(v) & \text{if } u = v \end{cases}$$

だから，

$$E(k_u) = - \sum_{c \in L,\, c \ni u} W_c \cdot (1 - k(u)) \cdot S_{c-\{u\}}$$

従って，$S_{c-\{u\}} = k(\bar{u}_c)$の関係を用いて次式を得る．

$$\triangle E_k(u) = (2 \cdot k(u) - 1) \cdot \sum_{c \in L,\, c \ni u} W_c \cdot k(\bar{u}_c)$$

即ち，自由ユニットuのすべての準ユニット$\bar{u}_c$の状態と物理コネクションの重みW_cから計算される入力総和が正であれば，uの状態を1に更新し，負であれば0に更新することで，ネットワーク全体のエネルギーEを減少させることができる．この過程で，Eの極小値を統計的緩和によって避ける方策は，通常のボルツマンマシンと同様である．よって，エネルギー関数Eを最小化するための逐次型アルゴリズムは，”焼き鈍し”の過程を除けば，次の4ステップの繰返しで表わされる．

Step 1. ランダムに自由ユニットuを選択する．

Step 2. uの入力総和g(u)を求める．

$$g(u) = \sum_{c \in L,\, c \ni u} W_c \cdot k(\bar{u}_c)$$

Step 3. 次の確率Pでuの状態を1に更新する．

$$P = 1/(1 + \exp(-g(u)/T))$$

ただし，Tはネットワークの温度である．

Step 4. すべての準ユニットの状態を更新する．

4．2次方程式の解法

応用例として，最も簡単な2次方程式 $x^2 = k$, $(k>0)$を解くこと（開平計算）を考える．これは，評価関数 $f = |x^2 - k|^2$ の最小化問題だから，xをnビットの2進数で表現すれば，n個の自由ユニットからなるネットワークを用いて，任意のxの初期値から状態遷移を開始し，解 $x=\sqrt{k}$ に収束させることができる．n＝4の場合，評価関数fは次の4次式となる．

$$f = |(x_0 + 2 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2 + 8 \cdot x_3)^2 - k|^2$$

$x_j^n = x_j$ (n>2) に注意して上式を展開し，エネルギー関数Eと係数比較を行なえば，各物理コネクションの重みを容易に定めることができる．図1に開平計算を行なうネットワークを示す．ここで，自由ユニットは1次の準ユニットの機能も果たしている．

逐次型アルゴリズムのシミュレーションによる実験では，最適解への収束は十分速く，非線形の最適化問題に有効であることが確かめられた．

5．まとめ

本論文では，ボルツマンマシンのエネルギー関数を拡張し，高次・非線形の最適化問題への適用が可能であることを示した．本手法は，CGにおける幾何学的制約緩和問題，特にグラフのレイアウト問題にも応用可能であり，” **Neurographics** ”（Neural Networks ＋ Computer Graphics）の新しい発展が期待できる．

■参考文献

[1] J.J. Hopfield, "Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities", Proc. of National Academy of Sciences, Vol.79, pp.2554-2558, 1982.

[2] D.W. Tank and J.J. Hopfield, "Simple Neural Optimization Networks: An A/D Converter, Signal Decision Circuit, and a Linear Programming Circuit", IEEE Trans. on Circuits and Systems, Vol.33, No.5, pp.533-541, 1986.

[3] M. Takeda and J.W. Goodman, "Neural Networks for Computation: Number Representations and Programming Complexity", Applied Optics, Vol.25, No.18, pp.3033-3046, 1986.

[4] N. Kin, T. Noma, and T.L. Kunii, "Picture-Editor: A 2D Picture Editing System Based on Geometric Constructions and Constraints", Proc. of CG International '89. pp.193-207. 1989.

[5] D.H. Ackley, G.E. Hinton, and T.J.Sejnowski, "A Learning Algorithm for Boltzmann Machines", Cognitive Sciences, Vol.9, pp.147-169, 1985.

[6] E. Aarts and J. Korst, "Simulated Annealing and Boltzmann Machines", John Wiley & Sons, 1989.

[7] 金那美，高井昌彰，國井利泰，"幾何学的制約緩和問題へのコネクショニスト・アプローチ(2)"，情報処理学会第41回全国大会論文集，1990.