多入力多出力ニューロンによる多次元的状態遷移の原理と 組合せ最適化への応用[†]

大谷 正 明*・相 吉 英太郎*

Fundamentals of Multi-Dimensional State Transition by Neurons with Multi-Inputs and Multi-Outputs and Their Applications to Combinatorial Optimization

Masaaki OHTANI* and Eitaro AIYOSHI*

Combinatorial optimization by neural networks can be roughly classified into the following two approaches. One is the application of the Hopfield type neural networks with continuous state transitions to continuous versions of combinatorial problems. The other is a direct application of the neural networks with discrete state transitions to original problems. In this paper, our attention is paid to the latter approach in order to propose the fundamentals of a new mechanism in which the artificial neurons have more advanced operational elements.

Discrete state transition rules in usual neural networks are regarded as the operational realization of the comparison between two states whose firing parts have reverse states to each other whether the firing is asynchronous or linked. The proposed transition rule realizes the comparison between more than two states corresponding to every combination of firing neurons' states at once. Concretely, the transition generates the best state among 2^N combinations of states as the outputs from the firing neurons, if the number of firing neurons is N . Such transition rules can be interpreted as a cooperative operation of plural neurons with a single input and a single output. From a different point of view, it can be a new basis to design a single advanced neuron with multi-inputs and multi-outputs which realizes the selection of a vertex with the best state in a unit hypercube composed of the single neuron's multi-dimensional state variables. This paper concentrates on a fundamental development of an advanced operation of a neuron, and limits to confirmation of its effectiveness by computer simulations for simple combinatorial problems.

Key Words: neural network, combinatorial optimization, neuron with multi-inputs and multi-outputs, multi-dimensional state transition

1. はじめに

制約条件付き 2 次関数最小化問題として定式化された 0-1 組合せ問題を、Hopfield¹⁾ 型連続的状态遷移ニューラルネットワーク(以降 N. N. と略記する)で解くためには、等式制約条件をペナルティ法によって最小化関数に組み込み、制約条件付き問題を無制約問題に変換したうえで、さらに超立方体連続領域 $[0, 1]^n$ 上での、連続的

最小化問題に変換するために、多重 1 次関数補間によって最小化 2 次関数の 2 乗項を消去するという 2 段階の問題変換を行わなければならない。このような問題変換過程によって、離散型局所的最適解は多重 1 次関数の連続型局所的最適解に転化しうることが指摘されている²⁾。そこでこのような問題変換の過程を回避し、0-1 組合せ問題を直接解く可能性がある離散的状态遷移 N. N. に対して、最小化関数の離散型局所的最適解を克服するための、複数のニューロンの連動発火と、この下での連動式状態遷移則が文献 3) において提案された。また、ペナルティ法による無制約問題化による局所的最適解の多発を回避するために、常に制約条件を満たすようにニューロンを連動発火させる方式が文献 4) において提案され

[†] 第 14 回システム工学部会研究会で一部発表(1994・4)

* 慶応義塾大学理工学部 横浜市港北区日吉 3-14-1

* Faculty of Science and Technology, Keio University, Yokohama

(Received June 14, 1995)

(Revised October 3, 1995)

た。

ところで、このような離散状態遷移則では、非同期式発火にせよ連動式発火にせよ、発火ニューロンの状態の反転した状態が反転前の現状と比べて最小化関数値を減少させる場合に、その反転状態が受理されて、その発火ニューロン個数分のハミング距離の異状態への遷移が生じる。しかしこのような2状態間の一対比較では、発火ニューロン数が多い程、より長いハミング距離の異状態との比較がされるため、最小化関数値を減少させる状態遷移が受理される可能性が高いとは言えない。それどころか、発火ニューロンの一部の状態が反転した場合の方が、発火ニューロンすべての状態が反転した場合よりも、より大きく関数値を減少させることがあっても、このような状態遷移が無視されてしまう。そこで、それらの発火ニューロンが取りうる2種以上のすべての組合せ状態に関して、対応した関数値の大小による比較が自動的に実現できる動作原理が望まれる。たとえば、2個のニューロンの発火では、現状とこれらのニューロン状態の同時反転した状態だけでなく、発火ニューロンそれぞれの状態が単独に反転した2通りの場合の計4通りの状態に対する関数値の比較が同時かつ自動的に実現できる、2次元の広がりを持つ状態遷移則が与えられることが望ましい。

本論文では、発火ニューロンの反転状態と現状の2つの状態間の遷移しか考慮されない、従来の1次元的な動作原理ではなく、発火ニューロンの状態変数が構成する部分空間内のすべての0-1組合せ状態の中で、最も関数値を減少させる新状態を一挙に選別できる、多次元的状態遷移の基本的動作原理を与えることにする。ところで、このような状態遷移は、従来の単入力単出力ニューロンが複数協調して動作した場合の状態遷移と解せると同時に、発火ニューロンを合体させて1つのニューロンとみなせば、発火ニューロンの入出力変数を寄せ集めた単一の多入力多出力ニューロンで実現した、高機能な状態遷移則ともみなすことができる。また、非同期式発火や連動式発火による状態遷移則もその特殊な場合として包含するばかりでなく、その他のより高機能な状態遷移則の導出の基本ともなりえるなど発展性の高い状態遷移則でもある。

ここで、人工N.N.の研究が神経生理学的知見からの類推により動機づけられたことを意識すれば、従来のような単入力単出力ニューロンによりN.N.を構成することの方がむしろ不自然であると思われる。なぜならば、高等動物が直感的かつ瞬時にある種の組合せ状態を選択判別できるのも、多入力多出力ニューロンが単一ニューロンとして高機能化した状態遷移則を獲得しているため

である、との仮説が許されるからである。本論文で提案する多次元的状態遷移則が神経生理学的に実存するものであるとは主張できないまでも、上記の仮説を工学的に例証するものの1つであると信じたい。

ニューロンの入出力の多変数化(ベクトル化)の考え方は、文献6)でも提案されているが、その内積計算に基づく状態遷移則は、4色塗り分け問題の解法のために特殊化されたものであり、かつその導入法も、標準的2次元関数を最小化するために、演繹的に導出されたものとはいいがたく、N.N.自体も汎用性に乏しい。本論文のアプローチは、2次元関数の離散的な意味での局所的最適解の本質を考察したうえで、それらを直接的に回避することを目的として、多変数化されたニューロンとそれらから構成されるN.N.の構造、および状態遷移則が演繹的に導入されていることを強調しておく。

2. 多次元的状態遷移ニューラルネットワークの動作原理

標準的2次元関数を最小化する0-1組合せ最適化問題

$$\min_x E(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n \theta_i x_i \quad (1)$$

$$\text{subj. to } x_i \in \{0, 1\}, \quad i=1, \dots, n$$

$$\text{where } w_{ij} = w_{ji}, \quad i=1, \dots, n$$

$$j=1, \dots, n$$

$$w_{ii} \neq 0, \quad i=1, \dots, n$$

を考える。ただし $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ である。

状態空間 $\{0, 1\}^n$ における任意の2つの状態を x^p, x^q とすると、2次元関数(式(1))の初等的な性質として、

$$\begin{aligned} E(x^q) - E(x^p) \\ = \nabla E \left[\frac{x^p + x^q}{2} \right] (x^q - x^p) \\ = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2} w_{ij} (x_j^q + x_j^p) + \theta_i \right) (x_i^q - x_i^p) \end{aligned} \quad (2)$$

が成り立つこと、すなわち「2状態間の関数の差分は、その2状態間の中点における勾配と、その2状態間の変位ベクトルの内積で表わされる」という性質が知られている。ただし $\nabla E(x)$ は関数 E の勾配を表わし、横ベクトルとする。この性質を用いると、 N 個の状態集合 $\{x^1, \dots, x^N\}$ の中で、関数 E の値を最小にする状態が x^p であるためには、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2} w_{ij} (x_j^q + x_j^p) + \theta_i \right) (x_i^q - x_i^p) > 0 \\ q=1, \dots, N, q \neq p \end{aligned} \quad (3)$$

が成立すればよい。このような複数の不等式関係がニューロンの動作原理で判定できれば、 N 個の状態の中から、一挙に状態 x^p を選択することができる。

以上の考え方を x のある2成分、第 k_1 成分、第 k_2 成

分のみ異なり、これらの成分以外の値はすべて共通の値をもつ4種類の0-1の組合せ状態

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^1 &= (x_1, \dots, 0, \dots, 0, \dots, x_n)^T \\ \mathbf{x}^2 &= (x_1, \dots, 1, \dots, 0, \dots, x_n)^T \\ \mathbf{x}^3 &= (x_1, \dots, 0, \dots, 1, \dots, x_n)^T \\ \mathbf{x}^4 &= (x_1, \dots, 1, \dots, 1, \dots, x_n)^T \end{aligned}$$

に適用する。まずこれら4種類の状態中、 $\mathbf{x}^1$ が関数 E の値を最小にするには、

$$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2} w_{ij} (x_i^q + x_j^q) + \theta_i \right) (x_i^q - x_i^1) > 0 \quad (4)$$

$$q=2, 3, 4$$

が成り立てばよい。すなわち、

$$\sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_1 j} x_j + \theta_{k_1} + \frac{1}{2} w_{k_1 k_2} > 0 \quad (5a)$$

$$\sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_2 j} x_j + \theta_{k_2} + \frac{1}{2} w_{k_2 k_1} > 0 \quad (5b)$$

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_1 j} x_j + \theta_{k_1} + \frac{1}{2} w_{k_1 k_1} + \frac{1}{2} w_{k_1 k_2} \right) \\ & + \left(\sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_2 j} x_j + \theta_{k_2} + \frac{1}{2} w_{k_1 k_2} + \frac{1}{2} w_{k_2 k_2} \right) > 0 \end{aligned} \quad (5c)$$

が同時に成り立てばよい。ここで u_{k_1}, u_{k_2} を

$$\begin{cases} u_{k_1} = - \sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_1 j} x_j - \theta_{k_1} - \frac{1}{2} w_{k_1 k_1} \\ u_{k_2} = - \sum_{j \neq k_1, k_2}^n w_{k_2 j} x_j - \theta_{k_2} - \frac{1}{2} w_{k_2 k_2} \end{cases} \quad (6)$$

とし、2出力を x_{k_1}, x_{k_2} とすれば、2入力 u_{k_1}, u_{k_2} に対し、

$$u_{k_1} < 0, u_{k_2} < 0, u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} < 0 \quad (7)$$

が成り立てばよいことがわかる。また $\mathbf{x}^2$ がこれら4種類の状態の中で、関数 E の値を最小にするための条件は、

$$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{2} w_{ij} (x_i^q + x_j^q) + \theta_i \right) (x_i^q - x_i^2) > 0 \quad (8)$$

$$q=1, 3, 4$$

で、(6)式とから、

$$u_{k_1} > 0, u_{k_2} - w_{k_1 k_2} < 0, -u_{k_1} + u_{k_2} < 0 \quad (9)$$

を得る。まったく同様に、 $\mathbf{x}^3$ がこれら4種類の状態の中で、関数 E の値を最小にするための条件は、

$$u_{k_2} > 0, u_{k_1} - u_{k_2} < 0, u_{k_1} - w_{k_1 k_2} < 0 \quad (10)$$

であり、 $\mathbf{x}^4$ がこれら4種類の状態の中で、関数 E の値を最小にするための条件は、

$$\begin{cases} u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} > 0 \\ u_{k_2} - w_{k_1 k_2} > 0, u_{k_1} - w_{k_1 k_2} > 0 \end{cases} \quad (11)$$

となる。

以上の4種類の状態遷移則を2個の第 k_1, k_2 ニューロ

ンが協調して実現するニューロンの状態遷移則としてまとめると、

$$(x_{k_1}, x_{k_2}) = (0, 0) \quad \text{if} \quad \begin{cases} u_{k_1} < 0, u_{k_2} < 0 \\ u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} < 0 \end{cases} \quad (12a)$$

$$(x_{k_1}, x_{k_2}) = (1, 0) \quad \text{if} \quad \begin{cases} u_{k_1} > 0 \\ u_{k_2} - w_{k_1 k_2} < 0 \\ -u_{k_1} + u_{k_2} < 0 \end{cases} \quad (12b)$$

$$(x_{k_1}, x_{k_2}) = (0, 1) \quad \text{if} \quad \begin{cases} u_{k_2} > 0 \\ u_{k_1} - u_{k_2} < 0 \\ u_{k_1} - w_{k_1 k_2} < 0 \end{cases} \quad (12c)$$

$$(x_{k_1}, x_{k_2}) = (1, 1) \quad \text{if} \quad \begin{cases} u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} > 0 \\ u_{k_2} - w_{k_1 k_2} > 0 \\ u_{k_1} - w_{k_1 k_2} > 0 \end{cases} \quad (12d)$$

となる。なお、条件式中の入力変数 u_{k_1}, u_{k_2} には時間変数 t 、状態変数 x_{k_1}, x_{k_2} には時間変数 $t+1$ が引数となるが、これらは紙面の都合上省略する。またこのような状態遷移を表わすニューロンの入出力特性を、 $w_{k_1 k_2}$ の値で区別して図示すると、Fig. 1のようになる。これらの関係式や図からもわかる通り、(12)式は任意の2入力を0-1変数の2出力へ対応づける、2次元実平面 R^2 から2次元正方形頂点集合 $\{0, 1\}^2$ への写像を表わしている。なお、 x_{k_1} に関しては u_{k_1} 軸方向のみ、 x_{k_2} に関しては u_{k_2} 軸方向のみを考えれば、閾値関数であることが確認される。

(12)式の状態遷移則は、別の考え方でも導出することができる。まず状態 $\mathbf{x}^1$ を基準状態とし、これと他の状態 $\mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3, \mathbf{x}^4$ との間の関数 E の値の差を、(6)式に基づいて計算すると、

$$\begin{cases} E(\mathbf{x}^2) - E(\mathbf{x}^1) = -u_{k_1} \\ E(\mathbf{x}^3) - E(\mathbf{x}^1) = -u_{k_2} \\ E(\mathbf{x}^4) - E(\mathbf{x}^1) = -u_{k_1} - u_{k_2} + w_{k_1 k_2} \end{cases} \quad (13)$$

となる。したがって、これらの値に0を含めた4つの値を比較することによって、 $\{\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3, \mathbf{x}^4\}$ の中から関数 E の値を最小にする状態を選ぶことができる。具体的には、

$$\begin{aligned} & \text{If } \max \{0, u_{k_1}, u_{k_2}, u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2}\} \\ & = \begin{cases} 0 \\ u_{k_1} \\ u_{k_2} \\ u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} \end{cases} \\ & \text{then } (x_{k_1}, x_{k_2}) = \begin{cases} (0, 0) \\ (1, 0) \\ (0, 1) \\ (1, 1) \end{cases} \end{aligned} \quad (14)$$

となり、この最大成分条件を不等式表現すれば、(12)式の状態遷移則が得られる。このif-then規則による状態遷移則の条件は、 u_{k_1}, u_{k_2} の2入力と定数項 $-w_{k_1 k_2}$ を含

Fig. 1 Two-dimensional input-output relations

むそれらの和, および基準量ゼロとの間で, いわば競争原理が適用されているものともいえる。

以上の考え方を3入力3出力の場合に拡張する。 x の3成分 $(x_{k_1}, x_{k_2}, x_{k_3})$ が状態遷移するものとし, これらの取りうるすべての0-1組合せ状態の中で関数 E を最小にするように, これらの変数が状態遷移する3次元的な状態遷移則は, 入力を

$$\begin{cases} u_{k_1} = - \sum_{j=k_1, k_2, k_3}^n w_{k_1 j} x_j - \theta_{k_1} - \frac{1}{2} w_{k_1 k_1} \\ u_{k_2} = - \sum_{j=k_1, k_2, k_3}^n w_{k_2 j} x_j - \theta_{k_2} - \frac{1}{2} w_{k_2 k_2} \\ u_{k_3} = - \sum_{j=k_1, k_2, k_3}^n w_{k_3 j} x_j - \theta_{k_3} - \frac{1}{2} w_{k_3 k_3} \end{cases} \quad (15)$$

として, 次式のように3次元実空間 R^3 から3次元立方体頂点集合 $\{0, 1\}^3$ への写像として表わされる。

If $\max \{0, u_{k_1}, u_{k_2}, u_{k_3}, u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2}, u_{k_2}$

$+ u_{k_3} - w_{k_2 k_3}, u_{k_1} + u_{k_3} - w_{k_1 k_3}, u_{k_1} +$

$u_{k_2} + u_{k_3} - w_{k_1 k_2} - w_{k_2 k_3} - w_{k_1 k_3}\}$

$$= \begin{cases} 0 \\ u_{k_1} \\ u_{k_2} \\ u_{k_3} \\ u_{k_1} + u_{k_2} - w_{k_1 k_2} \\ u_{k_2} + u_{k_3} - w_{k_2 k_3} \\ u_{k_1} + u_{k_3} - w_{k_1 k_3} \\ u_{k_1} + u_{k_2} + u_{k_3} - w_{k_1 k_2} - w_{k_2 k_3} - w_{k_1 k_3} \end{cases}$$

$$\text{then } (x_{k_1}, x_{k_2}, x_{k_3}) = \begin{cases} (0, 0, 0) \\ (1, 0, 0) \\ (0, 1, 0) \\ (0, 0, 1) \\ (1, 1, 0) \\ (0, 1, 1) \\ (1, 0, 1) \\ (1, 1, 1) \end{cases} \quad (16)$$

以上を一般化して, x のある N 成分 $(x_{k_1}, \dots, x_{k_N})$ が異なり, これらの成分以外の値はすべて共通の値をもつ, 2^N 種類の0-1組合せ状態の中で関数 E を最小にする状態を選別するような, N 次元的な状態遷移則について考える。ここで上記の N 成分の添字集合を

$$K = \{k_1, \dots, k_N\}, \quad N \leq n \quad (17)$$

とおき, 2^N 個の N 次元超立方体頂点に対応する整数 i ($i = 0, 1, \dots, 2^N - 1$)を

$$i = \sum_{r=1}^N p_i(r) \cdot 2^{N-r}, \quad p_i(r) \in \{0, 1\} \quad (18)$$

$$r = 1, \dots, N$$

と2進数変換したとき, その2進数表現の N 桁の数字 $p_i(r)$ に対して集合 P_i を,

$$P_i = \{r | p_i(r) = 1, r = 1, \dots, N\} \quad (19)$$

$$i = 0, \dots, 2^N - 1$$

とおく。ただし集合 P_i は, 整数 i を2進数表現した N 桁の並びにおいて, 1である桁番号(最高位を1桁目とする)を取り出した集合である。さらに N 成分の各入力を,

$$u_{kl} = - \sum_{j \in k} w_{klj} x_j - \theta_{kl} - \frac{1}{2} w_{klkl} \quad (20)$$

$$l=1, \dots, N$$

とおき、集合 P_i を用いて

$$U_i = \sum_{l \in P_i} u_{kl} - \sum_{\substack{l \in P_i \\ m \in P_i \\ l < m}} w_{klkm}, i=0, \dots, 2^N-1 \quad (21)$$

とおくと、 N 次元の状態遷移則は、

$$\begin{aligned} &\text{If } \max \{U_0, \dots, U_{2^N-1}\} = U_i \\ &\text{then } \begin{cases} x_{k_j} = 1, j \in P_i \\ x_{k_j} = 0, j \notin P_i \end{cases} \end{aligned} \quad (22)$$

と表わされる。

たとえば $N=3$ とすると、 $K=\{k_1, k_2, k_3\}$, $i=0, \dots, 7$ である。 $i=0$ (2進数表現: 000) のとき $P_0=\emptyset$, $i=1$ (2進数表現: 001) のとき $P_1=\{3\}$, $i=2$ (2進数表現: 010) のとき $P_2=\{2\}$, $i=3$ (2進数表現: 011) のとき $P_3=\{2, 3\}$, $i=4$ (2進数表現: 100) のとき $P_4=\{1\}$, $i=5$ (2進数表現: 101) のとき $P_5=\{1, 3\}$, $i=6$ (2進数表現: 110) のとき $P_6=\{1, 2\}$, $i=7$ (2進数表現: 111) のとき $P_7=\{1, 2, 3\}$ となる。したがって (21) 式は、 $U_0=0$, $U_1=u_{k_3}$, $U_2=u_{k_2}$, $U_3=u_{k_2}+u_{k_3}-w_{k_2k_3}$, $U_4=u_{k_1}$, $U_5=u_{k_1}+u_{k_3}-w_{k_1k_3}$, $U_6=u_{k_1}+u_{k_2}-w_{k_1k_2}$, $U_7=u_{k_1}+u_{k_2}+u_{k_3}-w_{k_1k_2}-w_{k_1k_3}-w_{k_2k_3}$ となり、(22) 式は (16) 式と等しくなることが確認される。

3. シミュレーション結果

多次元的状態遷移 N. N. の特性を [1] 無制約凸 2 次関数 0-1 組合せ最小化問題, [2] 巡回セールスマン問題, [3] 4 色塗分け問題に対するシミュレーション結果で示す。これらでは、単入力単出力の複数ニューロンの発火による協調的状态遷移, あるいは多入力多出力ニューロンにより高機能化された状態遷移により、離散的局所解への停留性が克服できることを原理的に確認することが主た

る目的である。提案した多次元的状態遷移則では、離散時間軸上の単位時間経過ごとに発火ニューロンが指定されれば、(22) 式で示される多次元的状態遷移を、その単位時間の 1 刻みで瞬時に実現できる素子のハードウェア設計とその実動を期待するものであるが、筆者がこれらの具体的内容まで言及することは、本論文の目的とするところではない。そのためシミュレーションでは、(22) 式の条件部分の判定の大小比較とその実行に、プログラムの逐次演算する通常のコンピュータを用いるを得ない。したがって、大域的最適解に収束するまでに要するシミュレーション実行時間 (CPU time) は、1 時刻で発火するニューロン個数の増大とともに、つまり状態遷移の多次元化とともに増加するのは当然である。シミュレーション結果では念のため平均実行時間を明記しておくが、大域的最適解を得るまでの計算効率に関しては、収束するまでに要した 1 試行あたりのニューロンの平均発火回数を離散時間軸上の所用時間相当量の目安として重視することにする。なお、使用計算機は EPSON 486 GRS (CPU: i 486 DX 2/50 MHz) である。

3.1 2 次関数最小化問題

問題 (1) において $n=10$ とし、文献 3) と同じ凸 2 次関数に対してシミュレーションを行った。この関数には、ハミング距離 1 ビット以上を近傍とする、Table 1 のような離散型局所的最適解が 14 個存在し、非同期式発火による状態遷移では、これらすべてに停留する。1 次元から 4 次元までの多次元的状態遷移モデル、および文献 3) の連動式状態遷移モデルで全初期状態 ($2^{10}=1024$ 通り) からのシミュレーションを行った結果、それらにおける各収束状況を Table 2 に示す。なお 1 次元モデルは通常の非同期式モデルと等価である。また連動モデルでは、4 次元モデルとの比較のため、連動させるニューロンの上限個数を 4 とした。Table 2 には、各局所的適解へ収束する初期状態の割合、各局所的最適解へ収束するまでの 1 試行あたりの平均実行時間、およびニューロンの平均発火回数を示してある。

Table 2 からわかるように、実行時間では 1 次元モデルが圧倒的に速いが、大域的最適解への収束率がわず

Table 1 Local solutions for the convex and quadratic function

State	Local solution	Local value
A	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	0.0
B	0 1 1 0 0 1 1 0 0 0	196.5
C	0 1 1 0 0 1 0 0 1 0	405.0
D	0 0 1 0 0 1 0 1 0 0	543.5
E	0 0 1 0 0 0 0 1 0 1	589.5
F	0 0 0 1 1 0 0 0 0 0	692.0
G	1 0 0 0 1 0 0 0 0 0	693.0
H	0 0 1 0 1 0 0 0 0 0	723.0
I	1 0 0 0 0 0 0 0 1 0	815.5
J	0 1 1 0 1 0 1 0 1 0	819.0
K	0 1 1 0 1 0 0 0 1 1	932.5
L	1 0 1 0 0 0 0 1 1 0	969.0
M	0 0 1 1 1 0 0 1 0 1	1271.5
N	0 1 1 0 0 0 1 1 1 0	1300.5

Table 2 Simulation results for the convex and quadratic function

Transition model	Convergent ratio to the global optimum	Ave. of CPU time	Ave. of firing steps
1-dimensional	12%	0.008 sec	19
2-dimensional	36%	0.026 sec	54
3-dimensional	47%	0.045 sec	88
4-dimensional	100%	0.041 sec	69
Linked	100%	0.078 sec	223

か12%である。これに対して2次元モデルでは、1次元モデルに比べて状態遷移則が複雑になる分、実行時間が3倍程度長くなっているものの、大域最適解への収束率はその3倍に上がっている。なお2次元モデルで停留する局所最適解はA以外にはBとDの2種類しかない。4次元モデル、連動モデルはともに大域最適解への収束確率100%が実現しているが、これはTable 1からわかるように、3次元モデルで停留した局所最適解と大域最適解との距離が、最大で4ビットであり、4個のニューロン発火による状態遷移でこれらの局所最適解への停留を克服したからである。また、連動モデルは4次元モデルに比べて収束するまでのニューロンの平均発火回数が3倍近くかかっている。この原因は、連動発火により関数値が減少した異状態への遷移を受理するニューロンの組の発見に時間を要していると考えられ、この点が連動モデルの低速性を引き起こしている。

3.2 巡回セールスマン問題

制約条件付き組合せ最適化問題にも多次元的状態遷移則が有効に機能することを示す例として、巡回セールスマン問題(TSP)を考える。この問題は「 N 個の都市において各2都市間の距離がわかっているとき、全ての都市を巡回するのに最短の経路を見つける」問題である。都市 i を j 番目に訪問することを $x_{ij}=1$ 、訪問しないことを $x_{ij}=0$ と表わし、都市 i, j 間の距離を d_{ij} と表わすことにするとTSP問題は、

$$\min_X E(X) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n d_{ij} x_{ik} (x_{jk-1} + x_{jk+1}) \quad (23a)$$

$$\text{subj. to } \sum_{i=1}^n x_{ik} = 1, k=1, \dots, N \quad (23b)$$

$$\sum_{k=1}^n x_{ik} = 1, i=1, \dots, N \quad (23c)$$

where $x_{ij} \in \{0, 1\}$, $i=1, \dots, N, j=1, \dots, N$ と定式化できる。ただし行列 $X=\{x_{ij}\}$ である。さらにペナルティ法の理論に基づき、正のペナルティ係数を r とした無制約最適化問題に、

$$\min_X E(X) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n d_{ij} x_{ik} (x_{jk-1} + x_{jk+1}) + r \left\{ \sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^n x_{ik} - 1 \right)^2 + \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i=1}^n x_{ik} - 1 \right)^2 \right\} \quad (24)$$

where $x_{ij} \in \{0, 1\}$, $i=1, \dots, N, j=1, \dots, N$

変換することもできる。

TSPのような制約条件付き組合せ問題では、たとえば、(23b,c)式のような巡回条件式を(23a)式の最小化関数に組み込むと、ペナルティ係数 r の大きさによっては、制約式を満たす許容組合せ状態が拡大最小化関数(24)式の離散型局所最適解になり、もとの距離関

数(23a)式が有する局所最適解以外の無意味な局所最適解を大量に発生させる恐れがある²⁾。文献4)では、このような制約条件付き最小化問題の無制約化に伴う悪状況を回避するために、巡回条件(23b,c)式を常に満たすような発火ニューロンの選択と、それらの連動式状態遷移則を与えている。この場合連動ニューロンの最小個数は4個で、巡回条件を満たす現組合せ状態を $X=\{x_{ij}\}$ とすると、まず任意に2都市番号(行列 X の行番号) i_1, i_2 を選び、つぎに

$$x_{i_1 j_1} = 1, x_{i_2 j_2} = 1$$

なる訪問順番号(行列 X の列番号) j_1, j_2 を i_1, i_2 に対して選び、発火ニューロン集合を

$$K = \{(i_1, j_1), (i_1, j_2), (i_2, j_1), (i_2, j_2)\}$$

とするものである。文献4)の連動式状態遷移則は、巡回条件を侵害する状態を意図的に排除するよう、発火ニューロンの現状態とそれを反転させた状態との2状態の一対比較を行うものである。

ここでは、発火ニューロンに関しては、その集合は連動式モデル同様 K とするが、これら4個のニューロンすべての組合せ状態数 $2^4=16$ 通りの状態の中から、最良の新状態が得られる4次元状態遷移則を、巡回条件を陽には考慮しない無制約問題(24)にあえて適用する。ペナルティ係数 r を比較的大きめに設定しておけば、巡回条件(23b, c)式を侵害した状態への遷移は、拡大最小化関数(24)式の増加をもたらすために自然に除外され、見かけの上では 2^4 個の組合せ状態の中で常に巡回条件を満たす新状態が得られ、連動式状態遷移則と等価になる。このように無制約変換した問題に対して多次元的状態遷移則がもつ、制約条件に対する陰的許容性について確認することをTSPに対するシミュレーションの目的とする。そのために都市数は少な目の $N=10$ とした文献1)の例を用い、まず巡回条件(23b, c)式を満たしている初期状態をランダムにいく通りか選び、前述の陰的許容性を確認した結果、状態遷移過程で巡回条件(23b, c)式を侵害しないことが確認された。ただしペナルティ係数は $r=1000$ とした。つぎに発火ニューロンに関する 2^4 個の組合せ状態すべてを考慮すると、かなりのシミュレーション実行時間を必要とするため、実質的には、文献4)の連動式モデルの場合と同様、巡回条件を満たす2通りの組合せ状態の中から選別する状態遷移則を用い、ランダムに選んだ100通りの初期巡回状態からシミュレーションを行った。発火上限回数に伴う大域最適解への収束割合はTable 3aの通りである。なお、大域最適解(最短巡回距離)は264である。発火上限回数500回時点での局所最小巡回距離とそれに停留した100通りのうちの試行回数を括弧付けで順に示すと、267(1), 286(1),

Table 3a Simulation results for TSP
Firing rule by two cities selection

Upper bound of firing steps	~100	~200	~500
Convergent ratio to the global optimum	16%	48%	76%

Table 3b Simulation results for TSP
Firing rule by three cities selection

Upper bound of firing steps	~100	~200	~500
Convergent ratio to the global optimum	77%	87%	91%

297(3), 306(4), 308(5), 311(5), 314(1), 322(4)であった。

つぎに、任意に3都市の番号 i_1, i_2, i_3 と

$$x_{i_1 j_1} = 1, x_{i_2 j_2} = 1, x_{i_3 j_3} = 1$$

なる訪問順番号 j_1, j_2, j_3 をとり、9個の発火ニューロン集合を

$$K = \{(i_1, j_1), (i_1, j_2), (i_1, j_3), (i_2, j_1), (i_2, j_2), (i_2, j_3), (i_3, j_1), (i_3, j_2), (i_3, j_3)\}$$

として9次元的状态遷移則を、10都市の問題で上と同じ100通りの初期巡回状態から実行した。やはり、無制約問題(24)に適用しても $2^9 = 512$ 通りの組合せ状態のうち、たとえば、Fig. 2 に示したような巡回条件を満たす状態6種類の中で状態遷移が行われ、かつ最終的に停留することが確認された。この場合の大域的最適解への収束割合は Table 3 b の通りである。発火上限回数500回時点での局所的巡回距離とそれに停留した100通りのうちの試行回数を括弧付けで順に示すと、306(3), 308(6)であった。

3.3 4色塗り分け問題

構造的に特徴をもつ問題に対しては、多次元的状態遷移則の適用のしかたに種類があることを示す例として、4色塗り分け問題を取り上げる。4色塗り分け問題は、「4色を用い、地図の N 個の連結領域を、1領域1色で隣接領域は同色ではないという条件を満たすように塗り分ける」という問題で、仮に4色を赤、青、黄、緑とし、領域 j をそれぞれの色で塗ることを

$$\begin{cases} \text{赤: } (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}, x_{4j}) = (1, 0, 0, 0) \\ \text{青: } (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}, x_{4j}) = (0, 1, 0, 0) \\ \text{黄: } (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}, x_{4j}) = (0, 0, 1, 0) \\ \text{緑: } (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}, x_{4j}) = (0, 0, 0, 1) \end{cases}$$

と表わし、また領域 j が領域 k に接していることを $d_{jk} = 1$ 、接していないことを $d_{jk} = 0$ と表わすことにすると、

$$\min_X E(X) = r \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^4 x_{ij} - 1 \right)^2 + \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N d_{jk} x_{ij} x_{ik}$$

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	1	0	0
i_2	0	1	0
i_3	0	0	1

(a) Pattern 1

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	1	0	0
i_2	0	0	1
i_3	0	1	0

(b) Pattern 2

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	0	1	0
i_2	1	0	0
i_3	0	0	1

(c) Pattern 3

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	0	1	0
i_2	0	0	1
i_3	1	0	0

(d) Pattern 4

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	0	0	1
i_2	1	0	0
i_3	0	1	0

(e) Pattern 5

City	Order		
	j_1	j_2	j_3
i_1	0	0	1
i_2	0	1	0
i_3	1	0	0

(f) Pattern 6

Fig. 2 Patterns of firing neurons for TSP

(25)

where $x_{ij} \in \{0, 1\}$, $i=1, \dots, 4$, $j=1, \dots, N$

として定式化される。ただし $X = \{x_{ij}\}$ とする。ここで r は正のペナルティ係数である。従来のニューラルネットワークでは、 $N \times 4$ 個の変数 $\{x_{ij}\}$ をそれぞれ1個ずつ計 $N \times 4$ 個のニューロンの出力状態に対応させ、各ニューロンの入力や出力の変数は (i, j) のような2重添字となり、第 (k, l) 成分から (i, j) 成分への結合係数を w_{ijkl} と表わす。具体的には結合係数や閾値は、

$$w_{ijkl} = 2(r\delta_{jl} + \delta_{ik}d_{ji}) = 2r, 2, \text{ or } 0 \quad (26a)$$

$$\theta_{ij} = -2r \quad (26b)$$

$$i=1, 2, 3, 4, j=1, \dots, N$$

$$k=1, 2, 3, 4, l=1, \dots, N$$

である。ただし δ_{ij} などはクロネッカーのデルタである。

4色塗り分け問題の例として、アラスカ、ハワイを除いたアメリカ本土48州 ($N=48$) の塗り分け問題⁵⁾を取り上げ、これに対し $r=10$ として以下の3通りのニューロンへの変数の対応付けでシミュレーションを行った。なお、4色塗り分け問題では状態遷移の過程で、ある領域に対して塗れる色が複数存在する場合があるが、この場合

どの色を選択しても関数値(25)は変化しない。そこで関数値を最小にする状態が複数存在する場合には、その中から無作為に1つの状態を選択することにする。これは領域の色の塗替えを意味し、これを許すことによって塗分けの行詰りからの脱出が期待できる。

(1) 単入力単出力ニューロンの複数個発火による多次元的状態遷移

$N \times 4$ 個の変数に対して、それぞれ1個ずつニューロンを対応させる。まず、2次元モデルについて考える。(26a)式より結合係数は非負だから状態遷移則は、Fig. 1の(b)か(c)に相当するものしかありえない。もし $w_{k_1 k_2} = 0$ であるような変数の組 (x_{k_1}, x_{k_2}) で2次元的状态遷移をするようなニューロンの組を考えても、Fig. 1bのグラフの形より、 x_{k_1} に関して1次元的に状態遷移をしてから x_{k_2} に関して1次元的に状態遷移をすれば、通常の非同期型の状態遷移と本質的に等価であり、非同期式の状態遷移による局所的停留性の回避にはなんら効果がない。このように、結合係数 $\{w_{ij}\}$ にばらつきがなくて0が多く、かつ閾値 $\{\theta_i\}$ もすべてのニューロンで同じような本例の場合には、多次元的状態遷移が必ずしも有効に機能するとは限らない。多次元的状態遷移を有効に機能させるには、発火ニューロンの組の選び方に、たとえば以下のような工夫が必要である。なお4色塗分け問題の場合は、下記の添字 p や q がそれぞれ2重添字 (i, j) , (k, l) となることに注意されたい。このようなニューロンの組の選択を4色塗分け問題で意味付けると、同じ領域内のニューロン2つ、もしくは互いに隣り合っている2つの領域で同じ色に割り振られている2つのニューロンを、より作為的に選択するルールといえる。

● 2次元モデル: $w_{pq} \neq 0$ を満たす2つのニューロンの組 (p, q) を2次元的状态遷移ニューロンとする。

● 3次元モデル: $w_{pq} \neq 0$ かつ $w_{pr} \neq 0$ かつ $w_{qr} \neq 0$ を満たす3つのニューロンの組 (p, q, r) を3次元的状态遷移ニューロンとする。

● 4次元モデル: $w_{pq} \neq 0$ かつ $w_{pr} \neq 0$ かつ $w_{ps} \neq 0$ かつ $w_{qr} \neq 0$ かつ $w_{qs} \neq 0$ かつ $w_{rs} \neq 0$ を満たす4つのニューロンの組 (p, q, r, s) を4次元的状态遷移ニューロンとする。

ランダムな初期状態100通りに対して、非同期式(1次

元的)モデル、2次元モデル、3次元モデル、4次元モデルで実行した結果をTable 4に示す。上記の選択ルールではニューロンの組合せ総数が、2次元モデルでは716、3次元モデルでは432、4次元モデルでは52であり、選択ルールは大域的最適解への収束率を上げるために理論上貢献するが、少ない発火上限回数(3000)内では2次元モデル、3次元モデルでは必ずしも有効に機能するとはいえない。また、局所的最適解(1以上の領域がどの色でも塗れない状態)からの離脱には2領域以上の塗替えが必要なために、少なくとも4個のニューロンの発火が必要である。このため、4次元モデルによりこのような局所的最適解からの離脱に成功し、収束率99%が実現されたと思われる。

(2) 4入力4出力ニューロンの単一発火による多次元的状態遷移

$N \times 4$ 個の変数を、領域 j ごとに分割し、4個の入力および出力、

$$u_j = \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ u_{3j} \\ u_{4j} \end{bmatrix}, x_j = \begin{bmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ x_{3j} \\ x_{4j} \end{bmatrix}, j=1, \dots, N \quad (27)$$

をもつような N 個の4入力4出力ニューロン(Fig. 3)の出力にそれぞれ対応させる。さらに行列 W_{ji} , ベクトル θ_j を

$$W_{ji} = \begin{bmatrix} w_{1j1i} & w_{1j2i} & w_{1j3i} & w_{1j4i} \\ w_{2j1i} & w_{2j2i} & w_{2j3i} & w_{2j4i} \\ w_{3j1i} & w_{3j2i} & w_{3j3i} & w_{3j4i} \\ w_{4j1i} & w_{4j2i} & w_{4j3i} & w_{4j4i} \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$\theta_j = (\theta_{1j} \ \theta_{2j} \ \theta_{3j} \ \theta_{4j})^T \quad (29)$$

とおくと、エネルギー関数は

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^n x_j^T W_{ji} x_i + \sum_{j=1}^N \theta_j^T x_j \quad (30)$$

と書き換えられる。このとき入力 u_j は

$$u_j = - \sum_{i=1}^n W_{ji} x_i - C_j \quad (31)$$

$$\text{where } C_j = \theta_j - \frac{1}{2} (w_{1j1j} \ w_{2j2j} \ w_{3j3j} \ w_{4j4j})^T$$

となる。したがって、 N 領域の4色塗分け問題は、 N 個

Fig. 3 A neuron with 4 inputs and 4 outputs

Table 4 Simulation results for the four-coloring problem

Transition model	Covergent ratio to the global optimum	Ave. of firing steps	Ave. of CPU Time
1-dimensional	0%	3000.0	12 min 41 sec
2-dimensional	18%	2860.0	23 min 44 sec
3-dimensional	68%	2141.0	35 min 29 sec
4-dimensional	99%	617.2	20 min 13 sec

Fig. 4 A neural network for four-coloring problem

のニューロンによる4次元的状态遷移を行えばよいことになる。このようなN.N.の構造を図示するとFig. 4のようになる。(1)と同じ初期状態100通りの試行について、発火上限回数を3000としてシミュレーションを行った。大域的最適解への収束率は98%、1試行あたりの平均発火回数は651.7、平均実行時間は1233秒であった。なお、平均発火回数には定常状態にならず、3000の上限で停止させた場合も含んでいる。4次元モデルでは、1回の発火ごとに $2^4=16$ 通りの状態からの新状態の選択となる。関数(25)の最小化関数第1項は、1領域1色条件

$$\sum_{i=1}^4 x_{ij}=1, j=1, \dots, N \quad (32)$$

に対するペナルティ項である。ペナルティ係数 r を大きめに設定すると、この条件を侵害する状態は、関数 E の増加をもたらすため4次元的状态遷移では自動的に選択対象から除外され出力しないことが確認される。このことを配慮して、(29)式を侵害する状態を $2^4=16$ 通りの状態から除外した状態遷移則で、改めてシミュレーションをすると、その平均実行時間は404秒に短縮した。なお、わずか2%大域的最適解に収束しなかったが、この原因としては、1領域に対して1個のニューロンを対応させたために隣接領域との関連性が陽になされていないためと考えられる。また、この方法は結果的に(1)の4次元モデルのニューロン選択のしかたと、ほぼ等価なために、同じような結果が得られたといえる。

(3) 4入力4出力ニューロンの複数発火による多次元的状態遷移

(2)と同様、1領域に対して1個の4入力4出力

ニューロンを対応させると同時に、さらに互いに隣接関係にある、任意の2つの領域に対する2つのニューロンを選び発火させ、それら計8入力8出力に関する8次元的状态遷移を行う。(1)と同じ初期状態100通りについて、発火上限回数を3000としてシミュレーションを行った。大域的最適解への収束率は100%に向上すると同時に、1試行あたりの平均発火回数は177.8と大幅に減少した。また、平均実行時間は5696秒であった。8次元的状态遷移則で考慮しなければならない $2^8=256$ 通りの状態の中で、(2)と同様に(29)式を侵害する状態を意図的に除外して、(29)式を満たす $4 \times 4=16$ 個の状態のみを比較する状態遷移則でシミュレーションをすると、平均実行時間は304秒に短縮された。

上記の方式を人工知能的に拡大解釈すれば、(2)の方法は、1つ1つの領域を隣接領域と同色にならないように配色を決定していき、塗分けの行詰りが起きた場合には、別の色に塗替えができる領域を塗り替えて、再び配色をし直していくといった、振舞いをする状態遷移であるといえる。これに対し(3)の方法では、隣接する2領域についてどの色とどの色に塗ったらよいかを同時に考えながら配色を決定していくような状態遷移であり、(2)に比べてさらに高度な振舞いをする状態遷移が行われているといえる。

4. おわりに

複数のニューロンを仮想的に組み合わせさせて動作をさせた多次元的状態遷移によって、非同期分散的状态遷移による局所的最適解への停留を直接的に回避することができを確認した。特に、凸2次関数に対する0-1組合せ最小化問題や、組合せ状態が比較的多数散在するような組合せ問題に対して、有効であることが判明した。またこのような多次元的状態遷移則は、単入力単出力ニューロンを複数発火させる場合の遷移則だけでなく、単一の多入力多出力ニューロンを想定した状態遷移則や、多入力多出力ニューロンを複数発火させる場合の遷移則など、多岐にわたって応用できることもわかった。多次元的状態遷移則を離散時間軸上で動作するデジタル回路に実装する場合の課題が予想されるが、この点に関してはその分野の専門家の判断に委ねたい。

参考文献

- 1) J. J. Hopfield and D. W. Tank: "Neural" Computation of Decision in Optimization Problems, Biological Cybernetics, 52, 141/142 (1985)
- 2) 相吉, 吉川: ニューラルネットワークによる最適化: その疑問と課題—もう一つの接近法—, 計測と制御, 34-5, 358/366 (1995)
- 3) 中村, 和久津, 相吉: 連動式状態遷移ニューラルネット

ワークによる大域的 0-1 組合せ最適化, 計測自動制御学会
論文集, 30-8, 966/975 (1994)

- 4) 和久津, 相古: 制約充足型連動式状態遷移ニューラルネット
ワークとその組合せ最適化問題への応用, 計測自動制御
学会論文集, 31-5, 622/630 (1995)
- 5) Y. Takefuji: Neural Network Parallel Computing,
Kluwer Academic (1989)
- 6) 立石, 田村, 秋田: ベクトルニューロンニューラルネット
を用いた 4 色問題の並列アルゴリズム, 電子情報通信学会
論文誌, J 77-D-II, No. 4, 892/895 (1994)

=====

[著 者 紹 介]

大 谷 正 明

1994 年, 慶応義塾大学理工学部計測工学科卒業。同年同大学大学院理工学研究科修士課程計測工学専攻入学。現在, 最適化計算用ニューラルネットワークの高機能化に関する研究に従事。

相 吉 英太郎 (正会員)

1975 年, 慶応義塾大学理工学部計測工学科卒業。同大学大学院工学研究科修士課程を経て, 80 年同博士課程修了 (工学博士)。慶応義塾大学理工学部助手, 専任講師を経て, 89 年助教授。最適化の理論と計算方法, およびこれら数理論に立脚したニューラルネットワークに関する研究に従事。

=====