

自己組織化する ニューラルネットと最適化問題

松山 泰男

1. はじめに

ニューロコンピュータシオンにおいては、数多くの計算素子が一体となって1つの問題を解く。この計算素子は多入力・1出力多分岐であり、互いに結合されてネットワークを構成する。各素子は(人工)ニューロンと呼ばれ、生理学的ニューロンとの類似性は実に多様である。各ニューロンが数学モデルとして非常に抽象化されている場合にはむしろエージェント[1]という、より広い意味の用語が適切となる。

本稿では、ニューロコンピュータシオンのうち、特に自己組織化を最適化問題に当てはめることを行ない、事例を与える。以下での内容はいずれもここで初めて与えるものである。

2. ペナルティのあるコスト

ニューラルネット全体は、コストを最小化するように学習を行なう。このコストはまず第1にニューロンによるデータの近似度を反映する。

$$f_n = f(\mathbf{x}_n, \mathbf{w}_m) \quad (1)$$

ここに \mathbf{x}_n ($n=0, \dots, N-1$) は学習に用いられるデータベクトルであり、 \mathbf{w}_m ($m=0, \dots, M-1$) はニューロンの状態(重み)ベクトルである。すなわち、ニューロンの集合 $\{\mathbf{w}_m\}$ は、コスト $\sum_{n=0}^{N-1} f_n$ を小さくするようにデータ集合 $\{\mathbf{x}_n\}$ を近似する。このとき、このコストの最小値に近い値を実現するニューロン状態は多様である。ここで、それらの内からさらに制約条件についてもこれを小さい値として実現するものを選ぶ。

$$D_n = \sum_{m=0}^{M-1} D_n = \sum_{m=0}^{M-1} \left\{ f_n + \sum_{k=0}^{K-1} \lambda_{nk} g_{nk} \right\} \left(\prod_{l=0}^{L-1} h_{nl} \right) \quad (2)$$

ここに

$$g_{nk} = g_{nk}(\mathbf{x}_n, \mathbf{w}_m, \mathbf{x}^s; n=0, \dots, N-1; m=0, \dots, M-1; s=0, \dots, t), k=0, \dots, K-1. \quad (3)$$

は加法的なペナルティであり、

$$h_{nl} = h_{nl}(\mathbf{x}_n, \mathbf{w}_m, \mathbf{x}^s; n=0, \dots, N-1; m=0, \dots, M-1; s=0, \dots, t), l=0, \dots, L-1. \quad (4)$$

は乗法的なペナルティである。(2)式における $\Sigma(\cdot)$ は、データが一様に与えられる場合には、 $E(\cdot)$ に等価である。もし、非一様な場合には確率に従った重みをかける。

3. 競合, 協調, 自己組織化

いま第 t 回目の学習において、データベクトル $\mathbf{x}^t = \mathbf{x}_n$ がネットワークに提示されたとする。このデータに対して各ニューロンは競合(competition)を起こし、次のような最優位ニューロン(勝者, winner)が決定される。

$$\mathbf{w}_{m(n)} = \arg \min_{0 \leq m < M} D_n \quad (5)$$

この最優位ニューロンは、自分の状態を更新することができる(競合学習)。

$$\mathbf{w}_{m(n)}^{t-1} = \mathbf{w}_{m(n)}^t + \Delta \mathbf{w}_{m(n)} \quad (6)$$

この $\Delta \mathbf{w}_{m(n)}$ は最適化の手法によりいろいろなものがあるが、ここでは最急降下法を用いる。

$$\Delta \mathbf{w}_{m(n)} = -(\varepsilon/2) (\partial D_n / \partial \mathbf{w}_{m(n)}) \quad (7)$$

各ニューロンは、自分が最優位となったときにあらかじめ決められた自分のパートナーを活性化(協調学習)。

$$\mathbf{w}_{\mathcal{N}(m(n))}^{t+1} = \mathbf{w}_{\mathcal{N}(m(n))}^t + \alpha_{\mathcal{N}(m(n))} \Delta \mathbf{w}_{\mathcal{N}(m(n))} \quad (8)$$

ここに $\alpha_{\mathcal{N}(m(n))}$ は、学習パラメータである。

乗法的ハンディキャップ h_{nl} はコンセプト(カテゴリ)[2]を扱うことを可能にする。すなわち、もし $h_{nl} = \infty$ なら

$$\Delta \mathbf{w}_{\mathcal{N}(m(n))} = 0 \text{ (implicit concept learning)} \quad (9)$$

とする。これに対して、より強いコンセプト学習もある。

まつやま やすお 茨城大学 工学部 情報工学科
〒316 日立市中成沢町 4-12-1

$$w_{\mathcal{N}(m(n))}^{t+1} = w_{\mathcal{N}(m(n))}^t - \alpha^t \frac{dw_{\mathcal{N}(m(n))}}{dw_{\mathcal{N}(m(n))}} \quad (\text{explicit concept learning}) \quad (10)$$

上のような、競合・協調・カテゴリ分けによるニューラルネットワーク学習は教師なしの学習であり、この学習は制約条件と協調関係を満たすように進行する。これが自己組織化 (self-organization) であり、その構造はしばしばユークリッド空間に写影される。このようなデータ圧縮された図形は特徴マップ (feature map) [3], [4] と呼ばれる。通常これは、自己組織化の結果を視覚的に理解するため、あるいはその後段における決定過程のために生成される。次節ではこの特徴マップを、ユークリッド空間における巡回セールスマン問題に適用することを行なう。

4. ユークリッド空間における巡回セールスマン問題

いま N 個のデータは、2次元平面上の固定された都市であり、 M 個のニューロンは閉曲線上に配置されているとする。このとき、巡回セールスマン問題 (TSP, traveling salesperson problem) は、次のようなコストを競合学習により最小化する問題と解釈される。

$$D = \sum_{n=0}^{N-1} (f_n + \lambda g) \quad (11)$$

$$f_n = f(x_n, w_n) = \|x_n - w_n\|^2 \quad (12)$$

$$g(w_0, \dots, w_{M-1}) = \sum_{m=0}^{M-1} \|w_m - w_{m+1}\|^2, \quad (\text{mod } M) \quad (13)$$

このとき、学習アルゴリズムは次のようになる。

[アルゴリズム TSP]

[Step 1]

次のようなデータと初期値が与えられる。

- 都市の集合 $X = \{x_0, \dots, x_i, \dots, x_{N-1}\}, x_i \in \mathbb{R}^2$
- ニューロンの状態ベクトルの集合

$$W(t) = \{w_0(t), \dots, w_j(t), \dots, w_{M-1}(t)\}, w_j(t) \in \mathbb{R}^2$$

ただし各 $w_j(t)$ は、 \mathbb{R}^2 における閉曲線上に配置し、 j はその上での順番に対応しているとする。

- 初期学習率 ε^0
- ペナルティ項結合係数の初期値 λ^0
- 勝者分配重み $a(k, t)H(|k| \leq L(t))$

ここに、 $H(\cdot)$ は、インジケータ関数である。

[Step 2]

学習により、各都市が互いに相異なる勝者をもつようにニューラルネットワークが構成されたら、学習を終了する。そうでなければ Step 3 へゆく。

[Step 3]

都市集合 X の要素をランダムに1つ選び、これを x_n とする。そして、

$$w_{m(n)} = \arg \min_{0 \leq m < M} (f_n + \lambda g)$$

となるニューロンを選択する。

[Step 4]

$w_{m(n)}$ および $H=1$ となるニューロン w_k に対して、

$$w_k^{t+1} = w_k^t + \varepsilon^t a(x_n - w_{m(n)}) - \alpha^t \{w_{k+1}(t) - 2w_k(t) + w_{k-1}(t)\}$$

という更新を行なう。

[Step 5]

コストを計算し、 $\varepsilon^t, f(\cdot, t+1), \alpha^{t+1}$ に対して $\varepsilon^{t+1}, f(\cdot, t+1), \alpha^{t+1}$ を求め、 $t=t+1$ として Step 2 へ戻る。

上のアルゴリズム中の関数は、次のように設定されている。

[ε の更新式]

$$f^t > f^{t-1}, g^t < g^{t-1} \text{ のとき, } \varepsilon^{t+1} = \varepsilon^t,$$

上記以外のとき

$$\varepsilon^{t+1} = \varepsilon^t - \gamma_\varepsilon (f^t - f^{t-1}) / f^{t-1}. \quad (14)$$

[λ の更新式]

$$\lambda^{t+1} = \lambda^t + \gamma_\lambda (g^t - g^{t-1}) / g^{t-1} \quad (15)$$

[その他の更新式]

$$f(k, t) = \exp\{-k^2/2\sigma^2(t)\} \quad (16)$$

$$L(t) = 3\sigma(t), \quad \sigma(t) = \sigma(0)(1-s)\lfloor t/M \rfloor \quad (17)$$

図1は、上の方法によりセールスマンの経路を自己組織化している過程である。その結果は、図2のようになる。この方法による解は、 ε^t と λ^t とを前もって決めた方法で変化させる場合 [5] よりも良好な近似解を与える (表1)。

5. 運搬車経路問題

運搬車経路問題 (VRP, vehicle routing problem) は、より複雑な TSP と解釈される。

[VRP] 複数台の運搬車に対して1つの発着都市が与えられている。また、一般の都市にはあらかじめ指定された分量の荷物がある。このとき、運搬車の積載制限を満たし、かつ総走行距離が最小となる経路を求めよ。

この問題は相当に複雑であるが、ここではさらに込み入った問題 (拡張された VRP) を扱う。

[EVRP 1] 上の問題に対して各都市にラベル (コンセプト [2]) を与える。各運搬車には、このラベルにより訪問できる都市と、そうでない都市が決められる。

[EVRP 2] EVRP 1 に対して、さらに各運搬車の

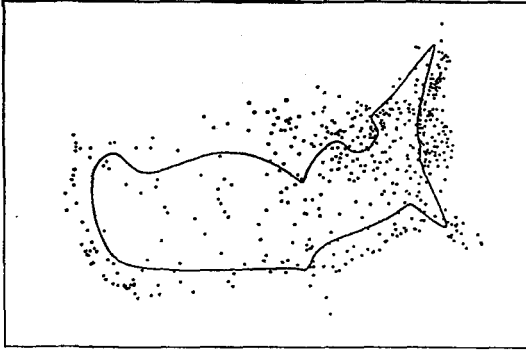


図 1 自己組織化の過程 ($t=20000$)

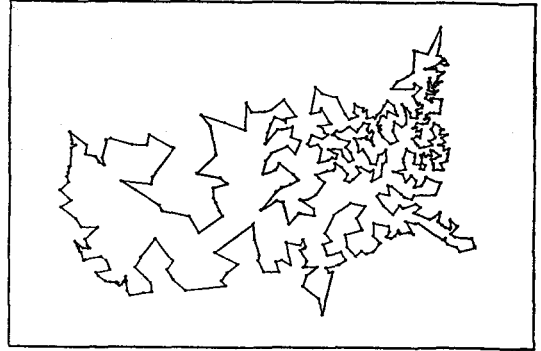


図 2 最終結果 ($t=82042$)

表 1 USA-532 セットに対する解と計算時間の比較

	巡回距離	計算時間	使用計算機
最適解 [6]	8.7550 (0.0%)	5時間58分	CYBER.250 Supercomputer
Pre-defined [5]	9.0827 (3.7%)	2時間48分	Sun SPARC station 1
本手法	9.0046 (2.8%)	4時間28分	Sun SPARC station 1

最大経路長を小さくする。

[EVRP 3] EVRP 1 に対して、さらに各運搬車の積荷量を均等化する。

[EVRP 4] EVRP 1 に対して、さらに EVRP 2 と EVRP 3 の制約を課する。

この問題はアルゴリズム TSP を、運搬車の台数分だけのニューロン環の自己組織化に置き換えることによって解ける。このとき、都市に与えられたラベルと最大経路長および最大積荷量の最小化は、(4) 式の乗法的コストに反映させる。

図 3 は EVRP 2 に対する自己組織化の結果である。運搬車 1 は、○の都市のみを通過できる。運搬車 2 は、○または△の都市を通れる。残りの運搬車は、○△□のどの都市も通過できる。表 2 は各種 EVRP の計算結果

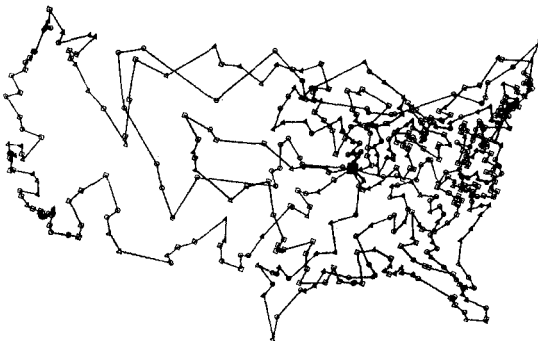


図 3 EVRP 2 の近似解

を比較したものである。この表からわかるように運搬車当たりの経路長と積荷量の均等化は、総経路長を犠牲のもとに可能となる。

6. 多重降下競合学習による最適化特徴マップ

アルゴリズム TSP におけるコストは、ハンディキャップを含んでいるが、全体としては 1 重の最適化である。これに対して、異質な最適化の合成となっている多重降下コストに関する競合学習がある [7]。このような多重降下競合学習においては、レベルの異なる複数種類の特徴マップが自己組織化される。1 つはデータエレメントの最適グループ化により生成されるパターンであ

表 2 EVRP 1~4 の実験結果の比較

	EVRP 1	EVRP 2	EVRP 3	EVRP 4
総巡回経路長	10.2421	11.4987	13.7066	13.3596
経路長 1	0.8385	2.2389	<u>3.6453</u>	<u>3.5326</u>
経路長 2	2.0294	2.8597	3.1572	3.1099
経路長 3	<u>4.4200</u>	<u>3.3520</u>	3.4288	3.1979
経路長 4	2.9542	3.0481	3.4753	3.5193
荷物量 1	118	304	465	415
荷物量 2	442	612	595	629
荷物量 3	816	<u>863</u>	649	<u>680</u>
荷物量 4	<u>1001</u>	598	<u>668</u>	653



図 4 CCITT の原画像



図 5 最適化特徴マップのエッジを間引いた図

る。またもう1つは、グループ化によって得られたスーパーベクトルを学習データとしたときに生成される特徴マップである。このような2つの特徴マップを生成する学習アルゴリズムは次のとおりである。

[多重降下鏡合学習アルゴリズム]

[Step 1]

トレーニングデータとグループ化の初期パターン u_0 、そして重みのスーパーベクトル集合が与えられる。

[Step 2]

グループ化されたデータの一部が学習機構に与えられる。

[Step 3] (部分最適化による最適化特徴マップの更新)

その部分に対して、コストがより小さくなるように再グループ化をする。

[Step 4] (重みのスーパーベクトルの更新)

部分最適化の対象となったスーパーベクトルにより、重みを更新する。

$$w_{m(n)}^{t+1} = w_{m(n)}^t + \epsilon^t (\mathbf{y}(v) - w_{m(n)}^t), \quad v = v(u_i) \quad (18)$$

ここに、 v はグループ化によって生成されたスーパーベクトル、 $w_{m(n)}^t$ は鏡合の勝者である重みスーパーベクトル、そして \mathbf{y} は形状の正規化である。

[Step 4'] (重みスーパーベクトルの特徴マップの更新)

$w_{m(n)}^t$ の位相的近傍である重みスーパーベクトルに対しても(18)式と同様な更新を行なう。

[Step 5]

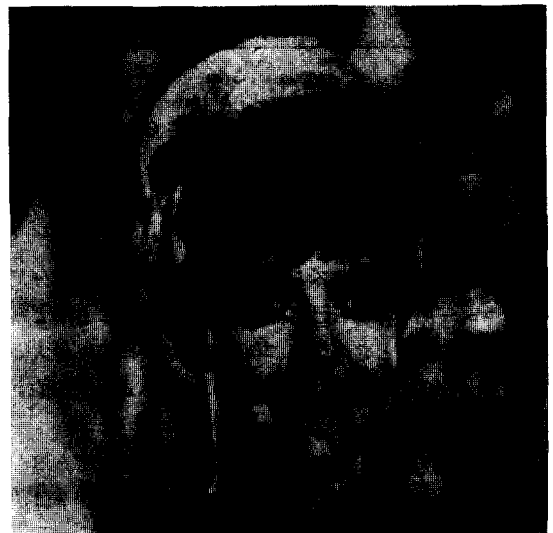


図 6 情報圧縮された画像を変形した結果

あらかじめ決めておいた繰り返し停止条件が満たされた場合には、学習を終了する。そうでなければ、各種の学習パラメータを更新して、Step 2へゆく。

上のような多重降下鏡合学習アルゴリズムを画像処理に適用してみる。図4はCCITTの画像データベースにある原画(8 bits/pix)である。図5は、最適化によるピクセルグループ化(Step 3)により生じる特徴マップから、さらに不要なエッジを間引いた図である。図6は再生画像である(32.0 dB at 0.96 bits/pix)。ただしこの図6においては、図5のパターンを用いて外部からの強制情報により変形を行なっている。すなわち、図

4の現画像においては口を開けているが、図6の再生画像においては、口を閉じている。これは、自己組織化と外部知性との結合を行なった初めての例である。

多重降下競合学習アルゴリズムは、このほかには複数の「子 vehicle」が地方をまわり、1台の「親 vehicle」がそれらの子をめぐるといった問題に当てはめることができる。

7. 最小学習原理 (minimum learning principle)

本稿では学習にもとづく最適化および自己組織化のうち、特に競合を用いるものを取り上げた。計算論的立場に立つと、学習とは Minsky [1] のように、「どのようにして新しいニューロン集合 (エージェント集合) を作り、また古いニューロン集合を変えるのか」という見方になる。このとき、教師なし学習である競合学習の解釈をもう少し進めてみると、次のことがいえる。「集団において学習が進行する場合には、その最も適切な部分集団が学習を行ない、全体としての変更を必要最小限にとどめている」。このことは変分原理と共通であり、(2) 式あるいは (11) 式に反映されている。バックプロパゲーションのような教師ありの学習においても、やはり教師信号と比較される部分集団が学習を担当している。

[謝辞] 黒澤 泰, 森澤幸一, 古屋貴子の諸氏による討

論とソフトウェア作成に感謝する。

参 考 文 献

- [1] Minsky, M.: *The Society of Mind*. Simon and Schuster, New York, 1987 (安西祐一郎訳, 心の科学, 産業図書, 1990).
- [2] Natarajan, B. K.: *Machine Learning*. Morgan Kaufmann, San Mateo, 1991.
- [3] Wilshaw, D. J. and Malsburg, C. von der: How patterned neural connections can be set up by self-organization. *Proc. R. Soc. Lond. B.*, Vol.194 (1976), 431-445.
- [4] Kohonen, T.: *Self-Organization and Associative Memory*. Springer, Berlin, 1984.
- [5] 松山泰男: 自己組織化できるニューラルネットとユークリッド空間におけるいろいろな巡回セールスマン問題. 電子情報通信学会論文誌, **D-II**, 3 (1991), 416-425.
- [6] Padberg, M. and Rinaldi, G.: Optimization of a 532-city symmetric traveling salesman problem by branch and cut. *Opr. Res. Let.*, Vol.6, 1 (1987).
- [7] 松山泰男: 多重降下競合アルゴリズムと並列部分最適化. 情報処理学会論文誌, **31**, 3 (1991), 333-344.

『会員名簿』刊行についてのお願い

名簿刊行委員会

1992年版の会員名簿を作成することになりました。会員原簿のコピーを、会員の方々に送りいたしますので、変更事項につきましては赤字ご訂正ください。

ご変更の有無にかかわらず、原簿はすべて、学会事務局宛ご返送くださるようお願いいたします。

なお、会員名簿は、会員の方々への限定刊行で、有料頒布となります。原簿返送の際、併せてご購入予約を頂ければ幸いです。年内刊行を予定いたしておりますのでどうぞよろしく願いたします。