数理解析研究所講究録
第 790 巻 1992 年 57-63

3SAT 問題のニューラルネットワーク解法

近松 良知　山下 雅史　阿江 忠
Yoshitomo CHIKAMATSU, Masafumi YAMASHITA, Tadashi AE

広島大学 工学部

1 はじめに

Hopfield らは、ニューロンが相互に結合されたニューラルネットワークを TSP に対して用い、ある種の組合せ最適化問題を近似的ではあるが高速に解けることを示し [1]、また、このネットワークに線形制約を扱うためのネットワークを付加することにより、線形計画 (LP) 問題の解法器としても有効に働くことを示した [2]。

本稿では、NP 完全問題である 3SAT 問題を取り上げ、この問題を解くためのニューラルネットワーク解法について考察する。ニューラルネットワークを用いた 3SAT 問題の解法としては文献 [3]、[4] があるが、ここでは、状態空間を変数次元の超立方体内部として、目的関数と制約がともに双 1 次形式であるような最小化問題への変換を行ない、ホップフィールドの LP 解法器としてのネットワークを多重 1 次形式の制約を扱えるように拡張する。

2 3SAT 問題の変換

2.1 nSAT 問題

nSAT 問題を、n 乗法標準形 (n-CNF) で与えられたブール式

中のクローズのうち、充足していないクローズの数が最小となるような変数の割当てを求める問題と定義する。

2.2 状態空間の拡張と双1次形式の最小化問題への変換

n 個の変数、m 個のクローズから成る 3-CNF のブール式 B が与えられたとき、これは $\{0,1\}^n$から $\{0,1\}$ への写像であるが、次のように $[0,1]^n$から $[0,m]$ への写像に変換する。

まず、Bの否定をとり、変数の定義域を $0 \leq x_i \leq 1$ の実数とする。そして、各リテラルの中で否定で表されているものを $\overline{x_i} = 1 - x_i$ とおき、$\vee$を算術加算演算、$\wedge$を算術乗算演算と考えると、次のような状態空間 $[0,1]^n$内での3次関数の最小化問題が得られる。

$$\begin{cases} minimize \;\; F(\boldsymbol{x}) \\ subject\ to \;\; \boldsymbol{0} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{1} \end{cases} \tag{1}$$

次に、ホップフィールドのネットワークへマッピングするため、問題(1)を目的関数と制約式がともに2次の最小化問題に変換する。

目的関数 F中の各々の3次の項に対して、それを作っている3つの変数のうちの2つの変数の積を改めて新しい変数でおき換える。たとえば、3次項 $x_i x_j x_k$に対して元の Fには含まれていない変数 x_lを新たに導入して $x_l = x_j x_k$とおき、この $x_l = x_j x_k$は制約条件と考える。これをすべての3次項に対して行なえば、目的関数と制約がともに2次の最小化問題となる。

$$\begin{cases} minimize \;\; \tilde{F}(\boldsymbol{x}') \\ subject\ to \;\; \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}') = 0, \;\; \boldsymbol{0} \leq \boldsymbol{x}' \leq \boldsymbol{1} \end{cases} \tag{2}$$

なお、新しく導入される変数の数は、高々元のブール式 B中のクローズ数である。

この問題 (2) は先の定義の 3SAT 問題と等価であり、問題 (1) の最小値を求めそれがゼロであれば、それを与える$\boldsymbol{x}$が B を充足する変数の割当てとなるから、この問題のニューラルネットワーク解法を考えるのであるが、等式制約を扱うことは困難なため、m 本の等式制約 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}') = \boldsymbol{0}$ を $2m$ 本の不等式制約 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}') \leq \boldsymbol{0}$, $-\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}') \leq \boldsymbol{0}$ として扱う。

3 CNF-3SAT 問題のニューラルネットワーク解法

3.1 LP 問題を解くホップフィールドニューラルネットワーク [2] の拡張

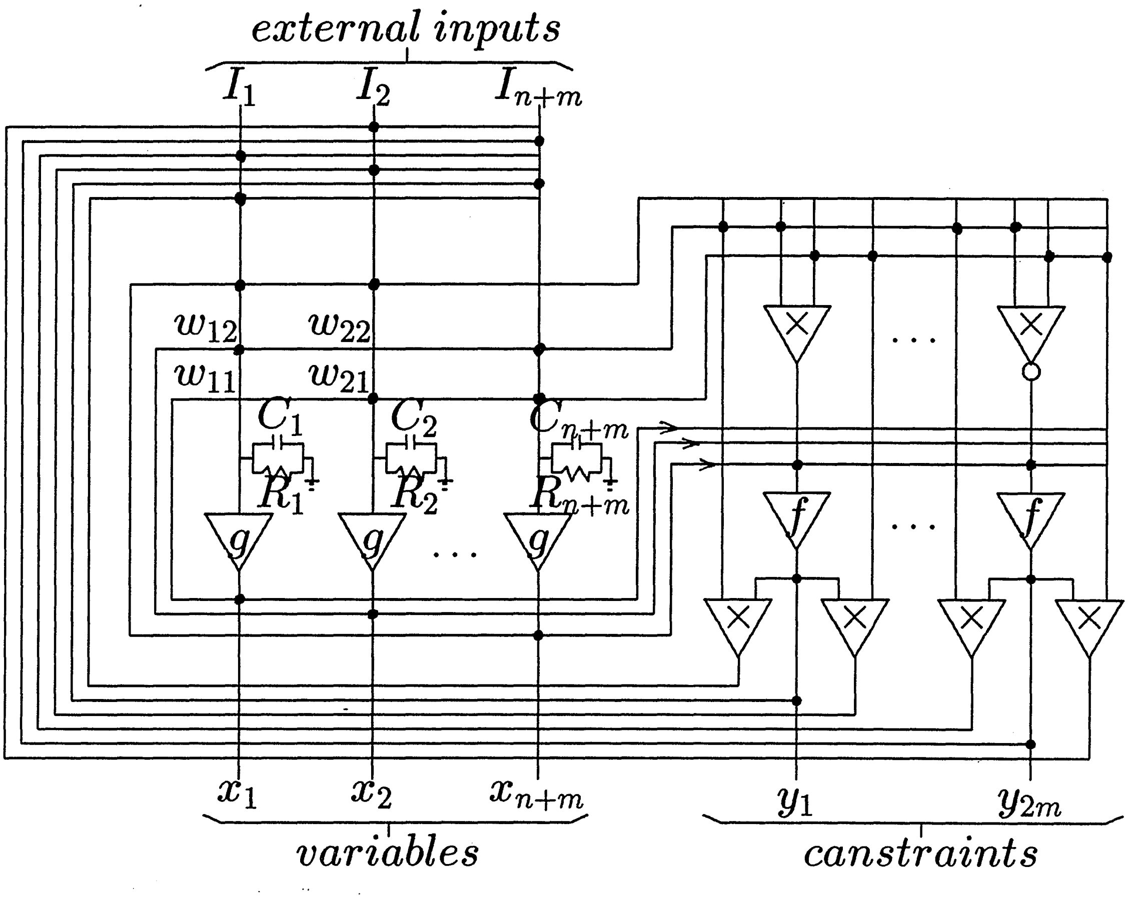

図 1: CNF-3SAT 問題を解くためのニューラルネットワーク

n 個の変数から成る 3-CNF のブール式が与えられたとき、m 個の変数を新たに導入して次の問題を得たとする。

$$\begin{cases} \textit{minimize} \;\; F(\boldsymbol{x}) \\ \textit{subject to} \;\; h_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \;\; i = 1, \cdots, 2m \\ \qquad\qquad\quad 0 \le x_i \le 1, \;\; i = 1, \cdots, n+m \end{cases} \tag{3}$$

変数に対応する $(n+m)$ 個と制約を取り扱う $2m$ 個の計 $(n+3m)$ 個のニューロンを用いて、この問題 (3) を解くネットワークを図 1のように構成する。これはホップフィールドの LP 問題を解くネットワークを拡張したもので、目的関数と制約違反量の和を減少させるネットワークと制約の違反情報を作成するネットワークから成り、2 次の制約を扱うためシグマ-パイニューロン[1] [5] を導入している。図 1中の '×' 印で示した乗算器からの出力を受けているニューロンが、シグマ-パイニューロンである。なお、w_{ij}、I_iはそれぞれ、$F(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T W \boldsymbol{x} - I^T \boldsymbol{x}$ と変形したときの、対称行列Wの第 (i,j) 要素とベクトルIの第 i 要素である。

3.2 ネットワークのダイナミクス

変数に対応するニューロンの入出力関係は、内部状態 u_iに対して出力が $0 \le x_i \le 1$ となる単調増加な関数 gで与え、

$$x_i = g(u_i) \tag{4}$$

[1]シグマ-パイニューロンは、それに結合するニューロンの出力の多重 1 次形式で表現される量を、それへの入力とするニューロンである。それと結合するニューロンの出力の線形和をそれへの入力とするような、一般に用いられるニューロンは、シグマ-パイニューロンの特殊な場合と考えることもできる。

制約の違反量を計算するニューロンの出力y_iを、

$$
\begin{aligned}
y_i &= f(h_i(\boldsymbol{x})) && (5) \\
f(z) &= \begin{cases} 0, & \text{if } z \le 0 \\ Kz, \quad K > 0 & \text{if } z > 0 \end{cases} && (6)
\end{aligned}
$$

で与えると、このネットワークのダイナミクスは次式で表される。

$$
C_i \frac{du_i}{dt} = -\left(\frac{\partial F}{\partial x_i} + \frac{u_i}{R_i} + \sum_{j=1}^{2m} \frac{\partial h_j}{\partial x_i} f(h_j(\boldsymbol{x})) \right) \quad (7)
$$

ここで、次式のエネルギーを考える。

$$
E = F(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{n+m} \frac{1}{R_i} \int_0^{x_i} g^{-1}(z)dz + \sum_{i=1}^{2m} Z(h_i(\boldsymbol{x})) \quad (8)
$$

$$
f(z) = \frac{dZ(z)}{dz} \quad (9)
$$

Eを時間で微分すると、

$$
\frac{dE}{dt} = \sum_{i=1}^{n+m} \frac{dx_i}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x_i} + \frac{u_i}{R_i} + \sum_{j=1}^{2m} \frac{\partial h_j}{\partial x_i} f(h_j(\boldsymbol{x})) \right) \quad (10)
$$

となり、(7) 式を考慮すれば、

$$
\begin{aligned}
\frac{dE}{dt} &= -\sum_{i=1}^{n+m} \frac{dx_i}{dt} C_i \frac{du_i}{dt} \\
&= -\sum_{i=1}^{n+m} C_i g'(u_i) \left(\frac{du_i}{dt} \right)^2 \le 0 && (11)
\end{aligned}
$$

となる。したがって、目的関数と制約違反量の和を減少させるネットワークが、制約の違反情報を作成するネットワークより十分速く動作すると仮定すれば、(7) 式で定義されるネットワークは (8) 式のエネルギーを減少させるように動作する。$dE/dt = 0$ は $du/dt = 0$ を意味しており、出力関数 gがハイ-

ゲインとして (8) 式の右辺第 2 項を無視すれば、Eは下から押えられているから Eの極小点に到達する。

3.3 局所最適解の探索動作について

(6)、(9) 式から、(8) 式の右辺第 3 項はペナルティ関数であることがわかり、ここで提案したネットワークはペナルティ関数を導入して問題 (3) を解いていると見ることができる。(8) 式の右辺第 2 項を無視したとき、ペナルティ係数 ((6) 式の K) を大きくとれば、制約の違反量が小さく押えられながら Eは減少する。制約を扱うネットワークを持たない場合には、超立方体の頂点で安定することが解析的に知られており [6]、Kが十分大きければ、制約を満たしながら Fが小さくなる方向に遷移すると考えられ、したがって、Fの局所最小解が求まることが期待できる。この局所的な最適性に関しては、計算機シミュレーションにより良好な結果を得ている。なお、Kの値は与えられたブール式のクローズ数程度とした。

4 おわりに

シグマ-パイニューロンの導入により、非線形制約を含む最適化問題に適用できる相互結合型のニューラルネットワークを提案し、3SAT 問題をこのネットワークにマッピングする方法について述べた。シグマ-パイニューロンが n 重 1 次形式で表現された入力を処理できるものとすれば、このネットワークは n 重 1 次形式の制約をもつ問題に対しても適用でき、したがって、$(n+1)$SAT 問題を、与えられた問題の節数と同じオーダー

の数のニューロンから成るニューラルネットワークで、近似的に解くことができる。しかしながら、大域的な最適性については未解決であり、今後の課題として残されている。

参考文献

[1] J.J.Hopfield and D.W.Tank, " "Neural" Computation of Decisions in Optimization Problems," Biological Cybern., 52, pp.141-152, 1985.

[2] D.W.Tank and J.J.Hopfield, "Simple "Neural" Optimization Networks : An A/D Converter, Signal Dicision Circuit, and a Linear Programming Circuit," IEEE Trans. on Circuits & Syst., CAS-33, 5, pp.533-541, 1986.

[3] J.Jonson, "A Neural Network Approach to the 3-Satisfiability Problem," J. Parallel and Distributed Computing, Vol.6, pp.435-449, 1989.

[4] 神保, 近松, 藤田, 阿江, "ニューラルネットワークによる論理回路のテスト生成," 信学技報, CPSY91-47, pp.9-16, 1991.

[5] D.E.Rumelhart, J.L.McClelland and the PDP Research Group, "Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstrusture of Cognition," Vol.1, Ch.2, MIT Press, Massachusetts, 1986.

[6] 上坂, "2値変数の実数値関数から導かれるエネルギーを持つニューロン回路網の安定性について," 信学技報, PRU88-6, pp.7-14, 1988.