

クロックニューロンを用いたボルツマンマシン

東北大学大学院情報科学研究科 堀口 剛¹, 松本 欣之

d 次元 Q 状態のクロックニューロンを導入し, そのニューラルネットワークに対してボルツマンマシンを構築する. 特に入力層が2つの素子を, 出力層が1つの素子を, 隠れ層がいくつかの素子を持つ相互想起型のニューラルネットワークに対して, 平均場近似を用いたシミュレーテッド・アニーリング法を定式化する. このボルツマンマシンを, 2次元空間と3次元空間でのロボット軌道計画 (Robot Motion Planning) に応用して, d 次元 Q 状態のクロックニューロンに対するボルツマンマシンの有用性を示す.

1 はじめに

多くの研究者により, 人工ニューラルネットワークとして, イジングニューロンやポッツニューロンを用いたボルツマンマシンの研究がなされてきた. [1] [2][3] 最近, イジングニューロンやポッツニューロンのような「離散値をとるニューロン」を「連続値をとるニューロン」へ拡張する一つの方法として, d 次元ローターニューロンが導入され, ローターニューロンを用いたボルツマンマシンの研究がなされている. [4] [5][6] その結果, ローターニューロンはその性質から, 周期的な性質を持つ最適化問題に対して, 有用であることが示された. また d 次元ローターニューロンは d 次元空間における方向に関連する最適化問題を扱うのに有効であることも示された. しかしながら, その動作効率から考えると, 連続値をとるニューロンであるため, (1) 計算時間が長くなる可能性があること, (2) 求めたいニューロンの状態値を良い精度で得ることが難しい可能性があること等の欠点があると考えられる. d 次元空間での方向に関連する最適化問題を扱うのに, 問題によっては必ずしも連続値をとるニューロンを用いる必要はないと思われる.

そこで, 我々は d 次元空間で方向を持った離散値をとるニューロンを導入する. 2次元空間で方向を持ったニューロンに関しては, 2次元 Q 状態クロックニューロンが Cook[7] により導入され, 全結合ニューラルネットワークにおけるパターンの記憶容量についての研究がなされた. 我々は, 2次元 Q 状態クロックニューロンを d 次元 Q 状態クロックニューロンに拡張し, クロックニューロン素子をもつニューラルネットワークに対してボルツマンマシンを構築する. 相互想起型のニューラルネットワークに対して, 平均場近似を用いたシミュレーテッド・アニーリング法を定式化する. クロックニューロン・ボルツマンマシンの応用例として2次元空間と3次元空間におけるロボット軌道計画 (Robot Motion

¹E-mail: tsuyoshi@statp.is.tohoku.ac.jp

Planning) を取り上げ, クロックニューロン・ボルツマンマシンの有用性を示す.

本論文の構成は, 第2節で2次元 Q 状態クロックスピンを d 次元 Q 状態クロックスピ
ンに拡張する. 第3節で d 次元 Q 状態クロックニューロンの状態を d 次元 Q 状態クロッ
クスピ
ンで表し, クロックニューロンを用いたボルツマンマシンを構築する. 第4節でロ
ボット軌道計画への応用を述べる. 第5節はまとめである.

2 d 次元 Q 状態クロックスピン

2次元 Q 状態クロックスピン \mathbf{S} は ± 1 をとるイジングスピンの一般化の一つとして, 次の式で定義される.

$$\mathbf{S} = \cos \theta \mathbf{e}_x + \sin \theta \mathbf{e}_y \quad (1)$$

ここで θ は次の Q 個の値をとるとする.

$$\theta \in \left\{ 0, \frac{2\pi}{Q}, \dots, \frac{2\pi(Q-1)}{Q} \right\} \quad (2)$$

スピン \mathbf{S} は離散化されたプレナーสปินであり, 2次元空間の単位ベクトルである. \mathbf{e}_x と \mathbf{e}_y はそれぞれ x 方向と y 方向の基本ベクトルである. これを d 次元の Q 状態クロックス
ピンへ拡張する.

d 次元の古典ベクトルスピンの表示として, 次の表示を導入するのが自然である.

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^d a_i \mathbf{e}_i \quad (3)$$

ここで \mathbf{S} は d 次元空間の単位球面上のベクトルであり, \mathbf{e}_i は i 軸方向の基本ベクトルである. 係数 a_i ($i = 1, 2, \dots, d$) は極座標表示では

$$a_1 = \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{d-2} \sin \phi \quad (4)$$

$$a_2 = \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{d-2} \cos \phi \quad (5)$$

$$a_3 = \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \cos \theta_{d-2} \quad (6)$$

...

$$a_{d-1} = \sin \theta_1 \cos \theta_2 \quad (7)$$

$$a_d = \cos \theta_1 \quad (8)$$

と表される. ただし, $0 \leq \theta_i \leq \pi$ ($i = 1, 2, \dots, d-2$), かつ $0 \leq \phi < 2\pi$ とする. d 次元 Q 状態クロックスピンは離散値をとるので, d 次元古典ベクトルスピンの離散化を行う必要がある. ここでは, 離散化を行う方法として次の2つの方法を提案する.

はじめの方法は、極座標表示を用いて単位球面上の離散値の集合をつくる方法である。このために、たとえば、

$$\theta_i \in \left\{0, \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots, \frac{(L-1)\pi}{L}\right\} \quad (i = 1, 2, \dots, d-2) \quad (9)$$

$$\phi \in \left\{0, \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots, \frac{(2L-1)\pi}{L}\right\} \quad (10)$$

とおく。このとき、 L を指定すると、 Q 個の単位ベクトルが得られるので、それらを $\mathbf{s}^{(0)}, \mathbf{s}^{(1)}, \dots, \mathbf{s}^{(Q-1)}$ と表す。このようにして d 次元 Q 状態クロックスピンの定義される。式(9), (10)の他に別の離散化も可能である。しかしこの極座標を用いる方法では、たとえば Q と L の間に $Q = 2[(L-1)^d - 1]/(L-2)$ の関係があり、任意の自然数 Q に対して、 L を割り当てることができないという欠点がある。

別の方法は数値計算により求める方法である。 Q 個の単位電荷を d 次元球面上に置く。各電荷の位置ベクトルを \mathbf{r}_i ($i = 1, 2, \dots, Q$)とすると、 Q 個の電荷により作られるポテンシャルエネルギー Ψ は

$$\Psi = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{i=1}^Q \sum_{j=1}^Q \frac{1}{\sqrt{1 - \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j}} \quad (11)$$

と表される。ここで、 $|\mathbf{r}_i| = 1$ ($i = 1, 2, \dots, Q$)である。問題は Ψ を最小にするような配置 \mathbf{r}_i を求める問題になる。そのような配置を解析的に探すことは一般には困難である。数値的に求める1つの方法に、Gislén 達 [5] により提案された、ローターニューロンを用いる方法があるので、その方法を用いる。すなわち、数値的に \mathbf{r}_i ($i = 1, 2, \dots, Q$)が求められたら、その値に $\mathbf{s}^{(i-1)}$ を割り当てればよい。

$d = 3$ と $L = 2$ に対して極座標表示を用いて求めた結果を図1 (a)に、また $d = 3$ と $Q = 6$ に対してGislén 達による方法を用いて数値計算で求めた結果を図1 (b)に示す。

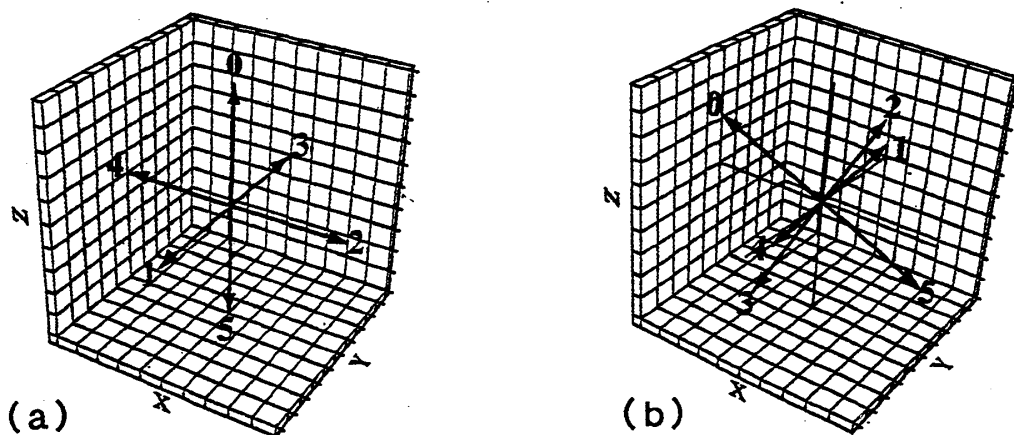


図 1: 3次元6状態クロックスピンの配置図。(a)極座標表示から求めた結果 (b)Gislén 達により提案された数値計算法により求めた結果

3 ボルツマンマシンの構築

d 次元 Q 状態クロックスピンを用いて d 次元 Q 状態クロックニューロンを定義する. d 次元 Q 状態クロックスピン値の集合を d 次元 Q 状態クロックニューロンのとり得る値とする. 言い換えると, ニューロン i の状態を \mathbf{s}_i で表し $\mathbf{s}_i \in \{\mathbf{s}^{(q)} | q \in \{0, 1, 2, \dots, Q-1\}\}$ とする. ここで \mathbf{s}_i は d 次元単位ベクトルであるので, その成分を用いて

$${}^t\mathbf{s}_i = (S_i^1, S_i^2, \dots, S_i^d), \quad |\mathbf{s}_i| = 1 \quad (12)$$

と表すことにする.

N 個の d 次元 Q 状態クロックニューロンからなる体系のエネルギーを

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \sum_{(i,j)} \sum_{\mu,\nu} S_i^\mu W_{ij}^{\mu\nu} S_j^\nu \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{(i,j)} {}^t\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{W}_{ij} \cdot \mathbf{s}_j \end{aligned} \quad (13)$$

で定義する. ここで結合強度 \mathbf{W}_{ij} は対称的であるとする. すなわち, ニューロン i とニューロン j に対して $W_{ij}^{\mu\nu} = W_{ji}^{\nu\mu}$ であり, 自己結合強度 \mathbf{W}_{ii} は 0 とする.

ニューラルネットワークのアーキテクチャには自己想起型と相互想起型がある. 本論文では相互想起型のニューラルネットワークを用い, 次式で与えられる学習則を採用する. すなわち

$$\Delta W_{ij}^{\mu\nu} = \eta\beta \left[\overline{\langle S_i^\mu S_j^\nu \rangle}_{I,0 \text{ clamped}} - \overline{\langle S_i^\mu S_j^\nu \rangle}_{I \text{ clamped}} \right] \quad (14)$$

とする. ここで $\langle A \rangle$ は A の熱平均値を表す. $\overline{\langle A \rangle}_{I,0 \text{ clamped}}$ と $\overline{\langle A \rangle}_{I \text{ clamped}}$ はそれぞれ, 学習パターンに渡っての平均が入力素子と出力素子の値を学習例に固定したときの平均と, 入力素子の値のみを学習例に固定したときの平均を表す.

熱平均値を計算するために平均場近似を用いる. S_i^μ の平均場近似での値を V_i^μ で表すと

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{Z_i^0} \sum_{\{\mathbf{s}_i\}} \mathbf{s}_i \exp(\beta {}^t\mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i) \quad (15)$$

となる. ここで $\beta = 1/k_B T$ であり, T は絶対温度である. 以下ではボルツマン定数 k_B は 1 におくことにする. 式 (15) において現れた Z_i^0 と \mathbf{U}_i は, それぞれ

$$Z_i^0 = \sum_{\{\mathbf{s}_i\}} \exp(\beta {}^t\mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i) \quad (16)$$

$$\mathbf{U}_i = \sum_{j(i)} \mathbf{W}_{ij} \cdot \mathbf{V}_j \quad (17)$$

で定義される. $j(i)$ についての和は素子 i に結合しているすべての素子 j についての和を意味する. 平均場近似を用いた学習則は次のように表すことができる.

$$\Delta W_{ij}^{\mu\nu} = \eta\beta \left[\overline{\langle V_i^\mu V_j^\nu \rangle}_{I,0 \text{ clamped}} - \overline{\langle V_i^\mu V_j^\nu \rangle}_{I \text{ clamped}} \right] \quad (18)$$

多くの最適化問題は、与えられた条件のもとでの基底状態でのニューロンの状態を探す問題に帰着する。次節で扱う問題も基底状態でのニューロンの状態を求める問題である。ボルツマンマシンの基底状態を求める高速なアルゴリズムに平均場シミュレーテッド・アニーリング法 (Mean-field simulated annealing method) がある。この方法は十分に高い温度で平均場方程式を解き、徐々に温度を下げて、近似的に基底状態でのニューロンの状態を求める方法である。式 (15)-(17) から、この手続きは次のように定式化される。

$$\mathbf{V}_i(l+1) = \frac{1}{Z_i^0(l)} \sum_{\{\mathbf{S}_i(l)\}} \mathbf{S}_i(l) \exp(\beta {}^t\mathbf{U}_i(l) \cdot \mathbf{S}_i(l)) \quad (19)$$

$$Z_i^0(l) = \sum_{\{\mathbf{S}_i(l)\}} \exp(\beta {}^t\mathbf{U}_i(l) \cdot \mathbf{S}_i(l)) \quad (20)$$

$$\mathbf{U}_i(l) = \sum_{j(i)} \mathbf{W}_{ij} \cdot \mathbf{V}_j(l) \quad (21)$$

いま、 $\mathbf{V}_i(0)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) の適当な初期値から式 (19)-(21) を $l \rightarrow l+1$ として繰り返し計算し、 $\mathbf{V}_i(l)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) に対して、セルフコンシステントな値が得られたら、温度スケジューリングに従って温度を下げ、いま得られた値を新たな初期値として、再びセルフコンシステントな値を求める。この手続きを十分な低温まで行う。

温度を下げるアニーリングスケジュールは Geman and Geman [8] により議論されているが、次節では、応用上の実行性を考慮した次のスケジュールリングを用いることにする。

$$T(t+1) = \varepsilon T(t), \quad T(0) = C \quad (0 < \varepsilon < 1) \quad (22)$$

ここで C は正の定数である。次節では ε としては 0.85 を選んで計算を行う。一般に、ボルツマンマシンを用いた数値実験では、 $T = 0$ まで温度を下げることは困難である。十分低温ではあるが、しかしオーバーフローが起こる前に、数値計算を止める必要がある。このため、一般には基底状態での正しいニューロンの状態が得られるとは限らない。すなわち、十分低温で得られた値 \mathbf{V}_i ではあるが $\{\mathbf{S}^{(q)} | q \in \{0, 1, \dots, Q-1\}\}$ のどれかの値になっている保証がない。でも十分低温で得られた値であるので $\{\mathbf{S}^{(q)} | q \in \{0, 1, \dots, Q-1\}\}$ のどれかに十分に近づいていると期待できる。そこで、

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}^{(q_i)} \quad (23)$$

$$q_i = \arg \max_q \left\{ \frac{1}{|\mathbf{V}_i|} {}^t\mathbf{V}_i \cdot \mathbf{S}^{(q)} \right\} \quad (24)$$

によって基底状態の値を決めることにする。ここで $\arg \max_q \{f_i(q)\}$ は $\{f_i(q) | q \in \{0, 1, \dots, Q-1\}\}$ に最大値を与える q を選び出す関数である。

4 ロボット軌道計画 (Robot Motion Planning)

この節では、前節で導入した、 d 次元 Q 状態クロックニューロンのボルツマンマシンの学習能力を調べるために、ロボット軌道計画 (Robot Motion Planning) の問題を考える。こ

の問題は、限定された空間においてロボットに出発点の座標と目的地の座標を与えて、その空間に散在する障害物を避けて、ロボットが出発点から目的地まで到達できる軌道を探す問題である。[9]

はじめにクロックニューロンのボルツマンマシンを2次元空間におけるロボット軌道計画に適用する1つの方法を提案する。2次元空間を $L \times L$ の格子点に分割する。ロボットの場所を \mathbf{r} で表す。障害物は最近接格子点对で連結された格子点の集合であるとする。障害物である格子点の各点に単位電荷を付与する。障害物がつくる場所 \mathbf{r} における電場を $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ で表し、場所 \mathbf{r} におけるロボットの目的地の方向を $\mathbf{T}(\mathbf{r})$ で表す。ロボットの位置の更新は

$$\mathbf{r}^{\text{new}} = \mathbf{r}^{\text{old}} + \mu \mathbf{R}(\mathbf{r}) \quad (25)$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) & (-{}^t \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) > 0) \\ \mathbf{T}(\mathbf{r}) & (-{}^t \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) \leq 0) \end{cases} \quad (26)$$

$$|\mathbf{T}(\mathbf{r})| = |\mathbf{E}(\mathbf{r})| = |\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})| = |\mathbf{R}(\mathbf{r})| = 1 \quad (27)$$

で与えられるとする。ここで μ はロボットの移動幅である。 $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ は $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ に垂直で $|{}^t \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r})|$ を最小にするようにとるものとする。

図3にこの節で用いるニューラルネットワークのアーキテクチャの一例を与える。すなわち、入力層に2つの入力素子、出力層に1つの出力素子、一つの隠れ層にいくつかの隠れ素子（本論文では3つと6つとする）を持つニューラルネットワークを用いる。またニューロンとしては16状態のクロックニューロンを用いる。

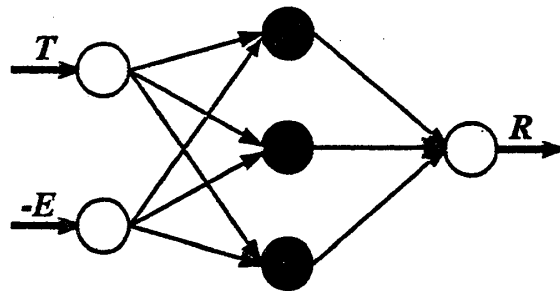


図2: 2つの入力素子、3つの隠れ素子と1つの出力素子を持つニューラルネットワーク

学習は次のようになされる。2つの入力素子に $\mathbf{T}(\mathbf{r})$ と $-\mathbf{E}(\mathbf{r})$ を割当て、1つの出力素子に $\mathbf{R}(\mathbf{r})$ を割り当てる。結合強度行列はすべての入力素子の値の組に対して正しい出力素子の値が得られるように学習させる。比較の為に、3つの隠れ素子を持つニューラルネットワークと6つの隠れ素子をもつニューラルネットワークに対して同じ学習を行い学習過程の比較を行った。

図3に学習過程の比較を示してある。隠れ層が3つの素子を持つアーキテクチャの場合と6つの素子を持つアーキテクチャの場合で学習過程にあまり違いがなかったため、3つの素子を持つ場合を用いて以下の実験を行った。

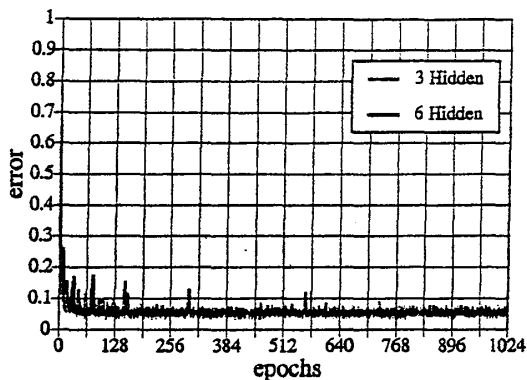


図 3: 2次元16状態クロックニューロンを持つボルツマンマシンの学習過程

障害物の配置の違い, 出発点 (S) と目的地 (G) の割り当ての違いを持つ2つの例, 障害物0 (Obstacle 0) と障害物1 (Obstacle 1) について数値実験を行った. その結果を図4に示す. ■は障害物の一部を示し, ●はロボットの軌道の一部を示す.

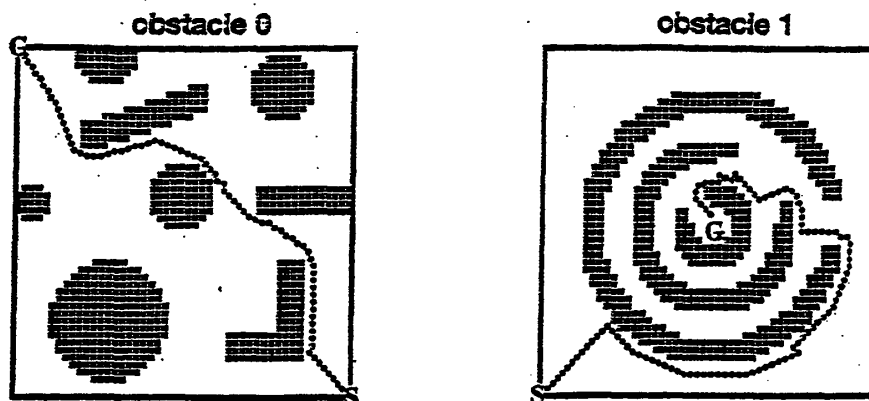


図 4: 2次元空間のロボット軌道計画の例.

次に3次元空間でのロボット軌道計画の計算を行う. 3次元空間は $[-0.5, 0.5]^3$ で表される立方体であるとする. 3次元26状態のクロックニューロンを用いる. ニューラルネットワークのアーキテクチャは2次元空間の場合と同じものを用いる. ニューラルネットワークの学習は2次元の場合と同様に行う. 学習過程は図5 (a) に示してある. 3次元の場合には, 6つの隠れ素子を持つニューラルネットワークの方が学習過程が早いことがわかる. 実際の数値実験では障害物はサイズが $1/32 \times 1/32 \times 1/128$ である薄いスレートを12個ランダムに配置した. $\mu = 1/128$ として, 出発点を $(0.5, -0.5, -0.5)$, 目的値を $(-0.5, 0.5, 0.5)$ とした. 図5 (b) に得られた結果を示す.

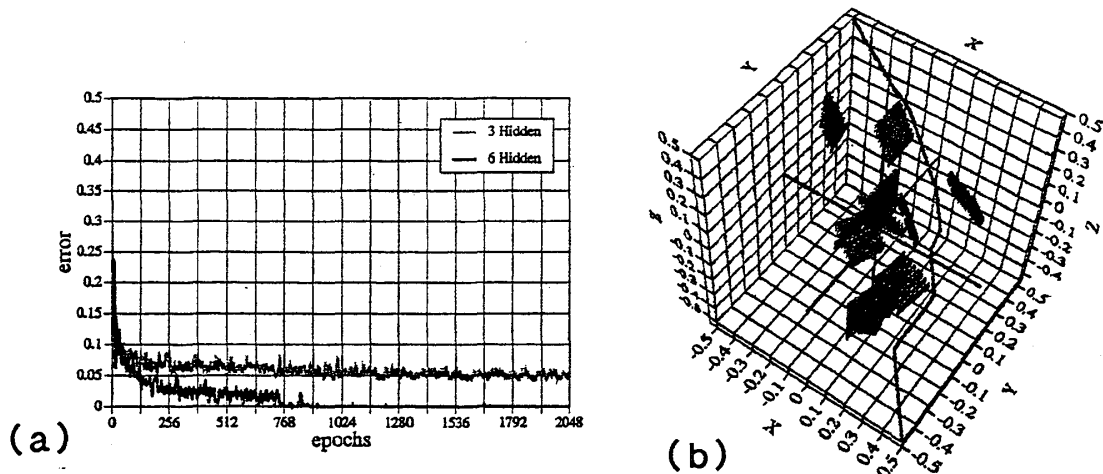


図 5: (a) 3次元26状態クロックニューロンを用いたボルツマンマシンの学習過程, (b) 3次元空間のロボット軌道計画の例.

5 まとめ

この論文では、2次元 Q 状態クロックスピンを d 次元 Q 状態クロックスピンに拡張し、それを用いて d 次元 Q 状態クロックニューロンを定義した。相互想起型のニューラルネットワークに対してボルツマンマシンを構築し、平均場シミュレーテッド・アニーリング法を定式化した。2つの素子を持つ入力層、1つの素子を持つ出力層、3つまたは6つの素子を持つ1つの隠れ層からなるニューラルネットワークアーキテクチャに対する応用例として、2次元空間と3次元空間のロボット軌道計画の例を示した。

参考文献

- [1] J. J. Hopfield, Proc. National Acad. Sci. USA **79** (1982) 2554.
- [2] D. A. Ackley, G. E. Hinton and T. J. Sejnowski, Cogn. Science **9** (1985) 147.
- [3] H. Vogt and A. Zippelius, J. Phys. A **25** (1992) 2209.
- [4] A. J. Noest, Europhys. Lett. **6** (1988) 469.
- [5] L. Gislén, C. Peterson and B. Söderberg, Neural Comp. **4** (1992) 737.
- [6] L. Parra and G. Deco, Neural Networks **8** (1995) 375.
- [7] J. Cook, J. Phys. A **22** (1989) 2057.
- [8] S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. Patt. Anal. Machine Intel. **6** (1984) 721.
- [9] M. de Berg, M. van Kreveld, M. Overmars and O. Schwarzkopf, *Computational Geometry - Algorithms and Applications*, Springer (1997).