

化学反応系とのアナロジーにもとづく
 開放的で複雑な計算のためのモデル CCM
 — その連動式ニューラルネットとの関係について —

CCM: A Model Based on Analogies to Chemical Reaction System
 for Open and Complex Computation
 — Its Relation to the Neural Networks with Linked State Transition —

金田 泰
 Yasusi Kanada

新情報処理開発機構 (RWCP) つくば研究センタ
 Tsukuba Research Center, Real World Computing Partnership
 kanada@trc.rwcp.or.jp

Abstract: The basics of CCM (chemical casting model), which is a computation model for emergent computation, is explained, and an extension of CCM, i.e., dynamical composition of rules, is described. The relation between the extended CCM and neural networks, especially the neural networks with linked state transition, is mentioned, and the importance of designing good concrete dynamics is also mentioned.

1. はじめに

われわれは、刻々と変化する環境に対してひらかれた複雑な実世界のための計算システムの開発法をめざして研究している。ひらかれた複雑なシステムをつくるためには従来のシステム開発法は不十分であり、創発的計算 (emergent computation) [For 91] あるいは自己組織的計算というかんがえかたが重要になるとかんがえている [Kan 94a]。そこで、局所的・部分的な情報による創発的計算をめざして、金田 [Kan 92, Kan 94a] は化学的キャスト・モデル (Chemical Casting Model, CCM) という計算モデルを提案した。CCM は、化学反応系とのアナロジーをつかったプロダクション・システムにもとづいている。CCM の特徴は、適用対象データに関する局所的な評価関数によってプロダクション規則の適用が制御されること、非決定的あるいは確率的に動作すること、手続き的な解法よりはるかに単純なプログラムで問題がとけることなどである。

これまでは、とじた問題を中心に CCM を適用してきた。すなわち、 N クウィーン問題 [Kan 93b, Kan

94a]、静的および動的な彩色問題 [Kan 93c, Kan 94c]、0-1 整数計画問題 [Kan 94b]、巡回セールスマン問題 [Kan 93a] などへの CCM の適用をこころみてきた。この報告では CCM の基本とそのひとつの拡張である規則の動的合成法について説明し、そのニューラルネットとくに連動式ニューラルネット [Nak 94, Ota 94] との関係についてのべるとともに、CCM やニューラルネットにおける具体的なダイナミクスの設計の重要性についてのべる。

2. 計算モデル CCM

CCM はエキスパート・システムの開発にもつかわれている前向き推論のプロダクション・システムにもとづくモデルである。プロダクション・システムは if-then 型の規則の集合 (長期記憶) を作業記憶 (短期記憶) にふくまれるデータに適用することによって動作する。古典的なプロダクション・システムは決定論的に動作し、規則の条件部がみたされればそれだけで動作する。しかし CCM においては動作は確率的であり、局所的な情報 (少数のデータ) だけで計算される評価関数 (局所秩序度) によってマクロな動作がきまる。

Keywords: emergent computation, production system, evaluation function, integer programming problem, combinatorial optimization, interlocked neural network.

CCM は化学反応系とのアナロジーにもとづいて (図 1 参照) . したがって作業記憶内の単位データを原子とよぶ . 原子は内部状態をもち , 原子どうしを化学結合に似たリンクによって結合できる . システムの動作をきめるのは , 化学反応式に相当する反応規則 (if-then 規則) である . 局所秩序度は一種の評価関数であり , 作業記憶の局所的な状態が “よりよい” ほどおおきな値をとるように定義される . 局所秩序度は負号をつけた一種のエネルギー (原子間の結合エネルギーのようなもの) だとかんがえることができる .

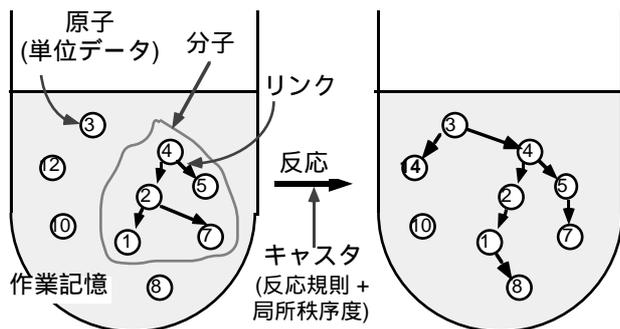


図 1 化学的キャスト・モデルの構成要素

反応すなわち反応規則の適用は , それに関係する (規則の両辺にあらわれる) 原子の局所秩序度の和が反応によって減少しないときだけおこる . したがって , CCM はミクロにみれば決定的に動作する^{注1} . これによりシステムは局所秩序度の平均値すなわち平均秩序度が増加するほうにむかって動作する . 反応しうる原子のくみあわせが存在しなくなると実行は中断する . 反応しうる原子の組が複数あるときの反応順序は非決定的であり , 通常はランダムにきめられる . ある条件をみたせば並列に反応させることもできる . したがって , CCM はマクロにみれば非決定的あるいはランダムに動作する .

3. CCM による例題

CCM による計算の例としては制約充足問題のほうに興味ぶかいが , ここではあとで必要になる 0-1 整数計画問題を取りあげる . 整数計画問題は線形計画問題における変数値を整数に制限した問題であり , NP 困難な問題である [Iba 93] . この報告ではつぎのようなかたちの 0-1 整数計画問題をあつかう :

$$\text{目的関数 } z = \sum_{j=1}^n c_j x_j \text{ を制約条件 } \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \text{ (} i = 1, 2, \dots, m \text{) のもとで最小化する (} x_j \in \{0, 1\}, 0 \leq c_j < 2^5, 0 \leq a_{ij} < 2^5 \text{) .}$$

^{注1} この点で , ミクロにみてもランダムに動作するボルツマンマシンや確率的なセル・オートマタとはおおきなちがいがあがる .

ここでは , かんたんのため制約条件数 m が 1 のとき , すなわち Knapsack 問題についてのべる ($n \geq 1$ の一般の 0-1 整数計画問題については金田 [Kan 94b] 参照) .

Knapsack 問題の解をもとめるとき , 作業記憶には 1 個の sum 型のデータ Z と , n 個の var 型のデータ X_j ($j = 1, 2, \dots, n$) をおく . Z は要素として目的関数値 $fval$, 制約条件式の左辺の値 $cval$, その右辺の値すなわち最大値 $cmax (= b_1)$ をもつ . また X_j は変数 x_j に関する情報をもつが , その要素として変数値 $value$, 目的関数における係数 c_j をあらわす $fweight$, 制約条件における係数 a_{1j} をあらわす $cweight$ をもつ .

ここではもっとも単純なシステムをしめす . ここではいずれの型のデータも 1 個ずつあたえる . 反応規則を図 2 に図示する . 局所秩序度 o は sum 型のデータ Z についてだけ , つぎのように定義される .

$$o(Z) = \begin{cases} Z.fval & \text{if } Z.cval \leq Z.cmax \\ \infty & \text{if } Z.cval > Z.cmax \end{cases}$$

この反応規則では変数値を 0 から 1 に , またはその逆にかきかえる . 制約条件をみたま範囲でよりよい解がもとまるときだけ反応する . すなわち , (最急上昇とはかぎらない) 単純なやまのぼり法が実現される .

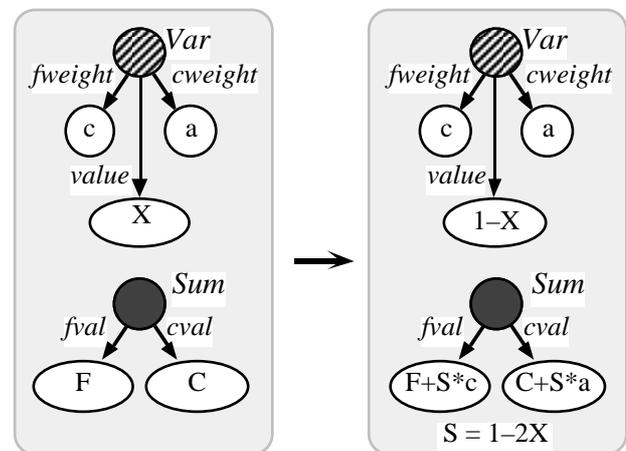


図 2 Knapsack 問題のための反応規則

4. 反応規則の動的合成 — CCM の拡張

前章のシステムは単純なやまのぼり法を実現するため , 容易に局所最大点におちいる . この問題を解決するために反応規則の動的合成という方法をつかうことができる [Kan 94b] . 規則の合成とは , 図 3 に例示するように , 規則を連続して適用するのと等価な規則をつくることである . 合成しても反応結果はかわらない . しかし , 合成規則をつかえばもとの規則の連続適用中の状態での局所秩序度の和を参

照しないため、平均秩序度の谷をこえることができる(図4参照)。前記のKnapsack問題の規則を l 回合成するということは、 l 個の変数値を一度に変更することを意味する。ここでは、乱数できめた合成回数の上限以下の範囲で、局所秩序度の和が増加するような最小の合成回数を動的に決定している。この方法を金田 [Kan 94b] は記号的ランダム・トンネリングとよんでいる。

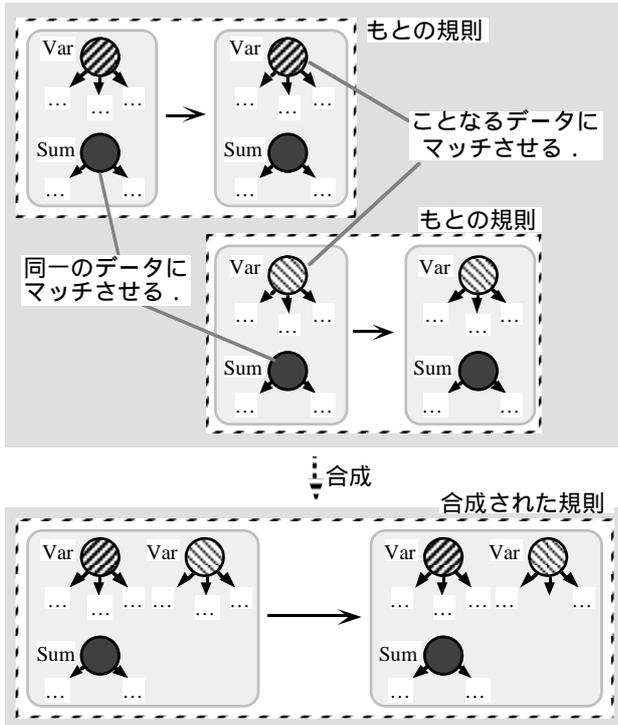


図3 反応規則の合成の例

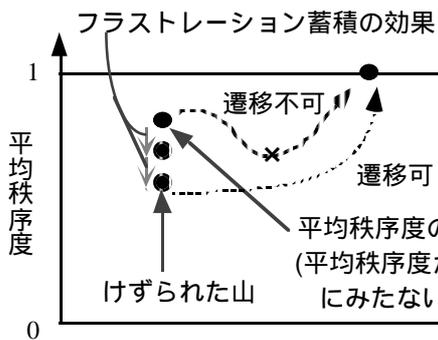


図4 反応規則の合成による平均秩序度の谷こえ

実際に、制約条件数 m を 10 で固定し、 $n = 10, 20, 30, 40$ のばあいについてランダムに各 100 題の問題をつかって実行した。その結果 [Kan 94b] の一部と分枝限定法(整数計画問題をとく標準的な方法)の測定結果とを表1にまとめた。表1では $n = 40$ のときに最適確率(最適解がえられる確率)は 0.38 だが、計算を 10 回程度反復して最良のものをとれば最適確率を 0.9 以上にできる。

表1 0-1 整数計画問題の解の最適性と計算時間

n	動的合成 CCM			拡張前の CCM			分枝限定法		
	最適確率	最適比	計算時間	最適確率	最適比	計算時間	最適確率	最適比	計算時間
10	0.97	0.998	1.6	0.012	0.62	0.27	1.0	1.0	14
20	0.71	0.995	7.0	0	-	-	1.0	1.0	126
30	0.51	0.994	15.4	0	-	-	1.0	1.0	343
40	0.38	0.993	28.8	0	-	-	1.0	1.0	1013

* 最適比とは解の平均値と最適解との比。計算時間の単位は秒。CCMの測定にはMac Quadra 700上のCommon Lisp (MCL)上のSOOC(CCM用言語)を使用。分枝限定法の測定にはMac Quadra 840 AV上のExcelを使用。

5. 連動式ニューラルネットと動的合成

CCMはプロダクション・システムにもとづく計算モデルだが、従来のプロダクション・システムより低位の規則による計算をめざしている。したがって記号的な計算モデルでありながらニューラルネットとも、表2にしめすように、より直接的な対応づけをすることができる。CCMにおける反応によって変化する情報が1 bitであるときには、CCMとHopfieldネットとは非常にちがいかんがえられる。より一般に、CCMにもとづくシステムは記号的なニューラルネットだとかんがえることもできるだろう。

表2 CCMとニューラルネットとの対応

比較項目		ニューラルネット	CCM
データ表現		ニューロン(数値的)	原子(記号的)
抽象的なダイナミクス		微分方程式 or 差分方程式(動力学系)	反応規則 + 局所秩序度(動力学系にちがい表現)
具体的なダイナミクス	動作単位	ニューロンの発火(決定的または確率的(ボルツマンマシン))	反応(決定的)
	動作順序	非同期(決定的 or 確率的) or 同期(並列)	同左(非同期かつ確率的が基本)
評価関数(最適化関数)		エネルギー関数	局所秩序度
学習		逆伝播, GA, ...	?

局所最小点にとられやすいというHopfieldネットの欠点を緩和するため、連動式状態遷移ニューラルネットワーク [Nak 94] あるいは多次元的状態遷移ニューラルネットワーク [Ota 94] が提案されている。連動式ニューラルネットにおいては複数のニューロ

ンの同時発火をみとめることにより，逐次（非同期）発火ではこえられないエネルギー関数の山をこえることが可能になっている．

反応規則の動的合成と連動式ニューラルネットをくらべると，その目的も評価関数の局所最適点の脱出なので一致しているし，方法も途中で評価関数値を計算せずに連続動作するという点で一致している．

ニューラルネットに関してはこのような具体的なダイナミクスが議論される機会がすくないようである．しかし，コンピュータ上で（たとえニューロ・コンピュータであっても）抽象的なダイナミクスがそのまま実現されるわけではない．局所最小点にとらわれないようにするためにも，また並列処理をかんがえるうえでも，具体的なダイナミクスの設計は非常に重要だとかんがえられる．この点は，CCMにもニューラルネットにも，またセル・オートマタにも共通しているとかんがえられる．また，反応規則の動的合成や連動式ニューラルネットは計算につかう情報の局所性・部分性と関係していて，ひらかれた複雑な計算をかんがえるうえで非常に重要だとかんがえられる [Kan 94d, Kan 93c]．

6. 結論

ここでは，ひらかれた複雑な実世界のための計算をめざして開発した，局所的・部分的な情報による創発的計算のための計算モデル CCM の基本とそのひとつの拡張である規則の動的合成法について説明し，そのニューラルネットとくに連動式ニューラルネットとの関係についてのべた．CCM は，記号的な計算モデルでありながらニューラルネットともより直接的な対応づけをすることができる．反応規則の動的合成が連動式ニューラルネットと対応づけられるのもその一例といえることができるだろう．反応規則の動的合成や連動式ニューラルネットが有効であることは，CCM においてもニューラルネットにおいても具体的なダイナミクスの設計が重要だということをしめしているとかんがえられる．

今後の課題の一部についてのべる．CCM はもともと（ニューラルネットにおいてつかわれているのよりひろい意味での）学習あるいは自己組織化をめざしてつくったモデルである．したがって，ニューラルネットとも対応づけられるモデルの単純さをいかして，ひらかれた環境のもとでの学習・自己組織化の方法などを開発していきたい．

謝辞

この論文の草稿を読んでコメントしていただいた RWCP つくば研の波多野 祥二氏に感謝する．

参考文献

- [For 91] Forrest, S., ed.: *Emergent Computation*, MIT Press, 1991.
- [Iba 93] 茨木 俊秀: 離散最適化法とアルゴリズム, 岩波講座 応用数学 [方法 8], 岩波書店, 1993.
- [Kan 92] 金田 泰: コンピュータによる自己組織系のモデルをめざして, 第 33 回プログラミング・シンポジウム報告集, 1992.
- [Kan 93a] 金田 泰: プロダクション規則と局所評価関数による最適化, 第 11 回計測自動制御学会システム工学部会研究会, 27-34, 1993.
- [Kan 93b] 金田 泰, 廣川 真男: プロダクション規則と局所評価関数による制約充足問題の解法, 情報処理学会記号処理研究会, 93-SYM-68-2, 9-16, 1993.
- [Kan 93c] 金田 泰: プロダクション規則と局所評価関数にもとづく計算モデル CCM による問題解決法の特徴, *SWoPP '93* (情報処理学会人工知能研究会), 93-AI-89-2, 11-20, 1993.
- [Kan 94a] Kanada, Y., and Hirokawa, M.: Stochastic Problem Solving by Local Computation based on Self-organization Paradigm, *27th Hawaii Int. Conf. on Sys. Sci.*, 82-91, 1994.
- [Kan 94b] 金田 泰: プロダクション規則の合成による記号的ランダム・トンネリング — 計算モデル CCM* による制約充足と最適化 —, 計測自動制御学会第 14 回システム工学分科会研究会, 45-52, 1994.
- [Kan 94c] 金田 泰: 創発的計算のためのモデル CCM による動的なグラフ彩色, 人工知能学会並列人工知能研究会資料 SIG-PPAI-9401, 7-12, 1994.
- [Kan 94d] 金田 泰: 創発的計算のためのモデル CCM による問題解決法における局所性の制御法, *SWoPP '94* (情報処理学会人工知能研究会), 94-AI-95-4, 29-38, 1994.
- [Nak 94] 中村 孝, 和久津 拓也, 相吉 英太郎: 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.
- [Ota 94] 大谷 正明, 相吉 英太郎: 多次元的状態遷移ニューラルネットワークの動作原理とその組合せ問題への応用, *SICE 第 14 回システム工学部会研究会「組合せ問題とスケジューリング問題の新解法」*, 83-90, 1994.