# 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 —

新情報処理開発機構 (RWCP)

つくば研究センタ

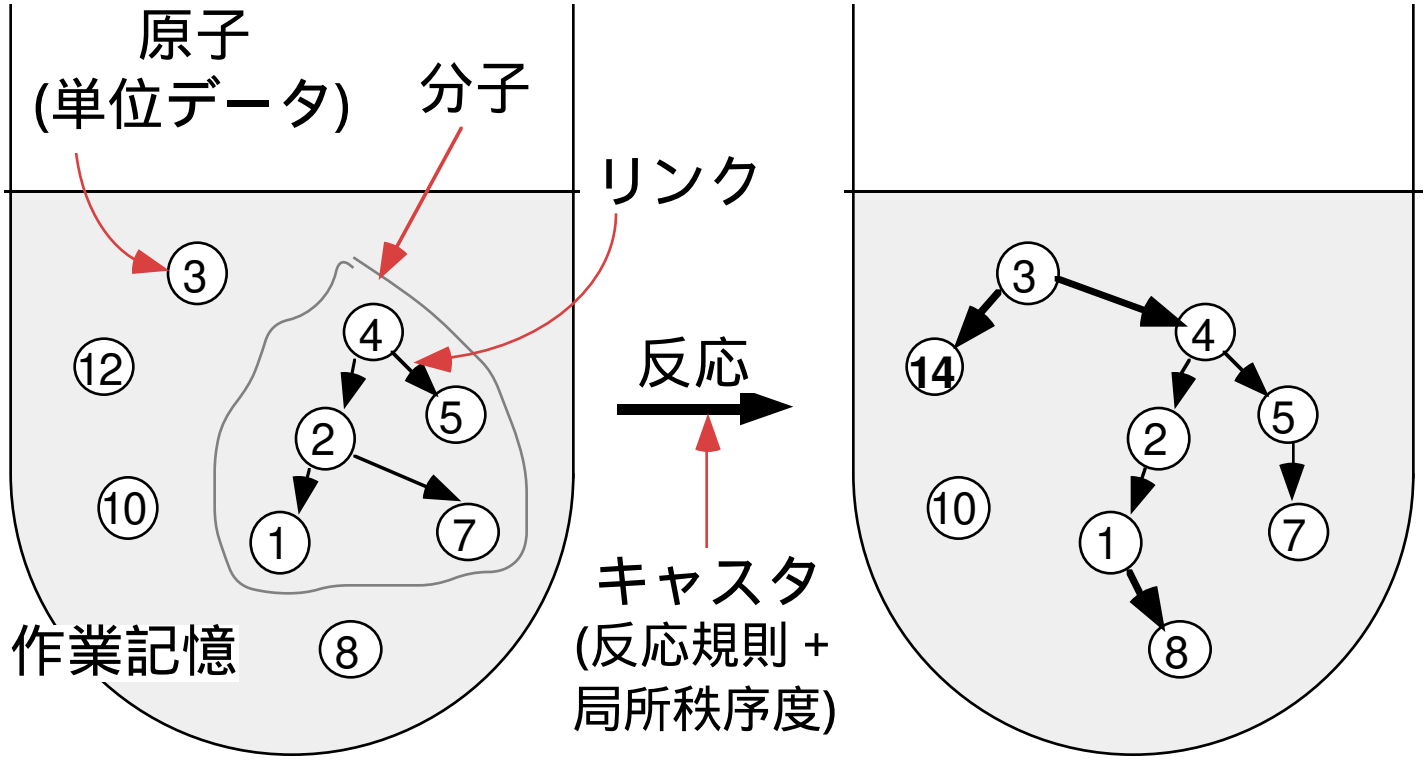
金田　泰

# はじめに

- 研究目標：複雑かつ環境に対してひらかれた実世界の問題をとくための方法論を確立すること．
  - 創発的計算がカギになる(?) — そのためのモデル CCM を提案した．
- 創発的計算 (Emergent Computation)
  - 局所的・部分的な情報だけで計算し，大域的・全体的な結果 (秩序状態) をうみだす自己組織的な計算．
  - あたえられた情報からは予測できないような結果をえる計算．
  - 決定論的ではない — バクチ的 (?)
- これまでは CCM によって閉鎖系の問題をといてきた．
  - 制約充足問題：
    *N* クウィーン問題，地図・グラフの彩色問題，魔方陣の問題，... .
  - 最適化問題：
    整数計画問題，巡回セールスマン問題，... .

# 創発的計算のためのモデル CCM

- Chemical Casting Model というモデルを提案している．
  - “化学的”: 化学反応系とのアナロジーをつかっている．
  - 局所的な情報だけをつかって計算し，大域的な結果をえることをめざす
    — 創発的計算をめざす．
  - CCM はプロダクション・システムにもとづく．



# 創発的計算のためのモデル CCM (つづき)

- CCM の構成要素
  - 反応規則 : 作業記憶の局所的な変化のしかたをきめる規則 .
    - 前向き推論によるプロダクション規則 .
    - 化学反応式に相当する .
  - 局所秩序度 : 原子 (間) に定義される局所的な評価関数 .
- CCM が従来のプロダクション・システムとことなる点
  - 局所秩序度 (局所評価関数) にもとづいて動作
    - 秩序度が増加するときだけプロダクション規則が動作 .
  - 確率的 (ランダム) に動作 .
    - 複数のプロダクション規則・データが反応 (発火) 可能なとき , その反応の順序は非決定的 (ランダムにきめる) .

# 例題： 0–1 整数計画問題

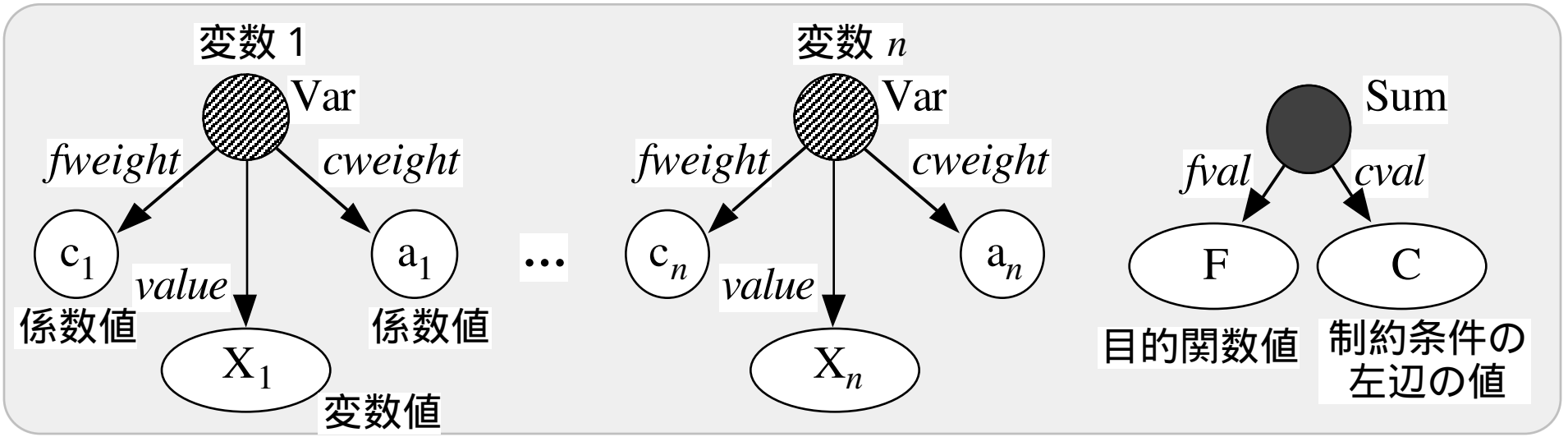
- 目的関数 $F = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$ を最大化 ($c_j$ : 定数, $x_j$ : 変数)
- 制約条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leq b_i$ ($i = 1, 2, \ldots, m$, $a_{ij}, b_i$ : 定数)

  $x_j \in \{0, 1\}$
- 0–1 整数計画問題は NP 困難
  - 最適解をもとめる効率のよい方法は発見されていない．
- 問題の制限
  - $0 \leq c_j < 10^5, 0 \leq a_{ij} < 10^5$ .
  - 制限をはずしても基本的におなじ解法がつかえる．

# Knapsack 問題のためのデータ構造

## CCM にもとづく0–1 整数計画問題の近似解法

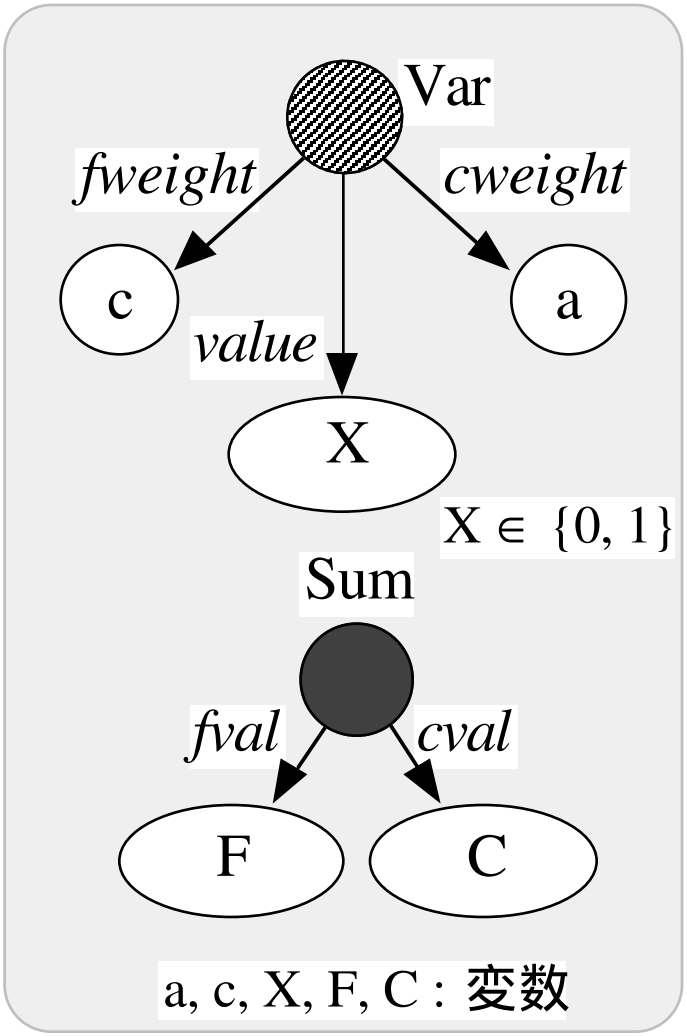
- Knapsack 問題 (制約条件数 $m$ が　1 のとき) のための作業記憶の内容
  - 目的関数：　$c_1 x_1 + \cdots + c_n x_n = F$
  - 制約条件：　$a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n = C \leq b$



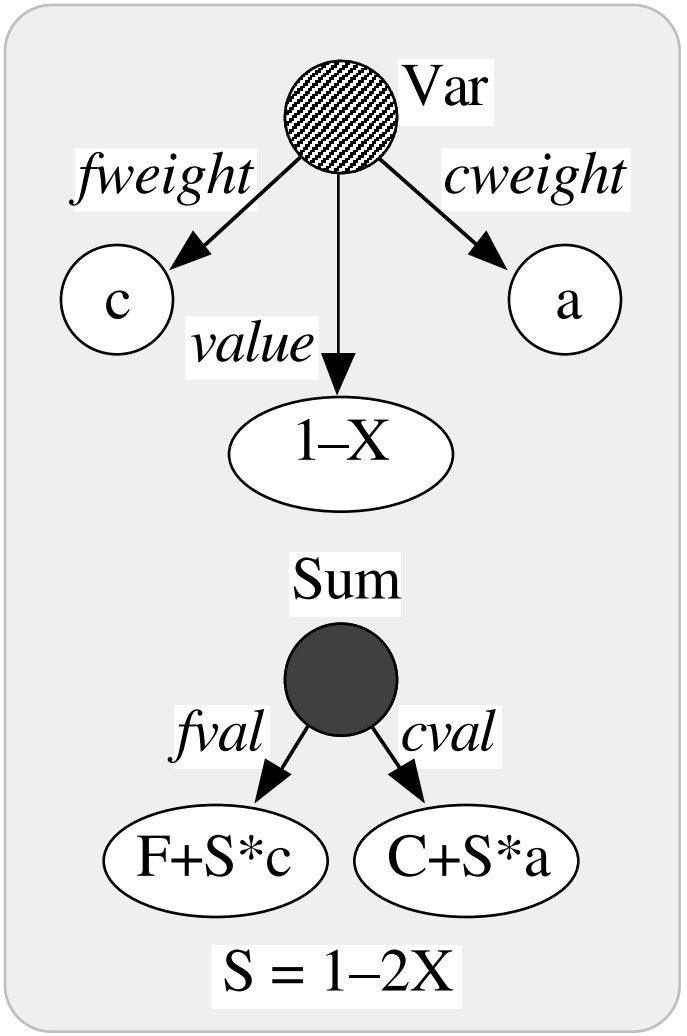
# Knapsack 問題のための反応規則

## CCM にもとづく0–1 整数計画問題の近似解法 (つづき)

条件部 (事前条件)




動作部 (事後条件)



# Knapsack 問題のための局所秩序度

## CCM にもとづく0–1 整数計画問題の近似解法 (つづき)

- 局所秩序度はデータ型ごとに定義する — sum 型と var 型 .
- sum 型のデータ $Y$ に関する局所秩序度 (増加する方向に動作)

$$o_{\mathrm{sum}}(Y) = \begin{cases} Y.fval & \textbf{if } Y.cval \le Y.cmax \\ -\infty & \textbf{if } Y.cval > Y.cmax \end{cases}$$

— 関数値がおおきいほうがよい .

— 制約をみたさないと罰金 .

- var 型のデータに関する局所秩序度は定義しない (つねに 0) .

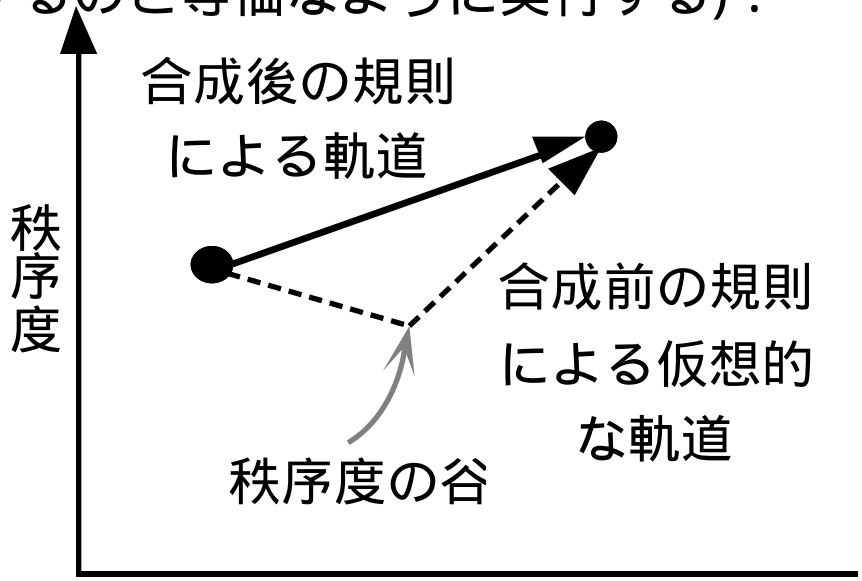
# Knapsack 問題の規則・秩序度の意味とふるまい

- 反応規則は 1 個の変数を非決定的に選択し，その値を 0 から 1 に，またはその逆にかきかえる．
  - $x_i = 1 \leftrightarrow x_i = 0$
- 反応によってよりよい解がもとめられるときだけ反応がおこる．

# 局所最大点へのおちこみと脱出法

## 反応規則の動的合成

- この解法は単純なやまのぼり法を実現している
  — 局所最大点におちこむ．
  - CCM は局所的な計算をおこなう — 通常はやまのぼりにならない．
- 反応規則の合成とは
  - 反応規則を連続して適用するのと等価な作用をする反応規則をつくる.
  - 実行時に反応規則を合成する (合成するのと等価なように実行する) .
- 反応規則の合成の効果
  - 合成しても適用結果はかわらない．
  - 秩序度の谷をこえることができる．
    - もとの反応規則の連続適用途中の状態でのインスタンス秩序度の値を計算しないため．



# 0–1 整数計画問題の比較実験

## ■ 実験内容と条件

- ◆ 制約条件数 $m$ は 10 で固定．
- ◆ $n$ = 10, 20, 30, 40 についてランダムに各 50 題の問題をつくり，各問題を 5 ~ 16 回とく．
- ◆ 反応規則の合成回数は動的に決定 — 秩序度が増加する最小回数 (ただし，上限回数を設定) .

## ■ 実験結果

| $n$ | 動的合成 CCM | | | 拡張前の CCM | | | 分枝限定法 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 最適比 | | 最適確率 | 最適比 | | 最適確率 | 最適比 | |
| 10 | 0.97 | 0.998 | 1.6 | 0.012 | 0.62 | 0.27 | 1 | 1 | 14 |
| 20 | 0.71 | 0.995 | 7 | 0 | - | - | 1 | 1 | 126 |
| 30 | 0.51 | 0.994 | 15.4 | 0 | - | - | 1 | 1 | 343 |
| 40 | 0.38 | 0.993 | 28.8 | 0 | - | - | 1 | 1 | 1013 |

# CCM とニューラルネットとの比較

| 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 (動力学系にちかい表現) |
| 具体的な | 動作単位 | | 反応 (決定的) |
| | 動作順序 | | 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, ... | ? |

# 連動式ニューラルネットと CCM との関係

## CCM とニューラルネットとの比較 (つづき)

- 連動式状態遷移 NN および多次元的状態遷移 NN
  - 局所最小点にとらわれやすいという Hopfield ネットの欠点を緩和するために提案された [慶応 相吉 他] .
  - 複数のニューロンの同時発火をみとめて，逐次発火ではこえられないエネルギー関数のやまをこえることを可能にしている．
  - 具体的なダイナミクスが標準的な Hopfield ネットとはことなる．
- 連動式 NN と CCM における反応規則の合成との比較
  - 目的：評価関数の局所最適点からの脱出 — 共通している．
  - 方法：途中で評価関数値を計算せずに連続動作する — 共通している．
- 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 (?) — なぜ？

# 結言

## ■ 要約

- ◆ 計算モデル CCM について説明した．
  - その基本
  - 反応規則の動的合成
- ◆ CCM とニューラルネット，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．

## ■ 結論

- ◆ 反応規則の動的合成は効果がある — 0–1 整数計画問題のばあい．
  - これは具体的なダイナミクスの設計が重要であることをしめす — ニューラルネットにおいても (?!)

## ■ 今後の課題

- ◆ ひらかれた環境のもとでの学習・自己組織化の方法の開発．