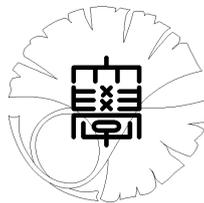


数理科学実践研究レター 2023-11 May 15, 2023

**Hopfield ネットワークと最小頂点被覆問題**

by

小林 健太



**UNIVERSITY OF TOKYO**

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

# Hopfield ネットワークと最小頂点被覆問題

小林健太\*<sup>1</sup> (東京大学大学院数理科学研究科)

Kenta Kobayashi (Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)

## 概要

有限グラフの最小頂点被覆を求める問題へのアプローチとして, Hopfield ネットワークと呼ばれるニューラルネットワークを用いて, その近似解を求めるというものがある. この Hopfield ネットワークにはあるパラメータが存在し, この値によって得られる近似解の精度が異なる. そこで本研究ではいくつかの有限グラフの不変量と最も精度の良い解を得られるパラメータの関係性を考察した.

## 1 はじめに

Hopfield ネットワークとは, ニューラルネットワークの一種である. 時間発展を非同期的に計算することが出来, その結果としてとある定常状態に到達する. NP(Non-deterministic Polynomial time) とは, 計算の複雑さのクラスであり, これに属する問題を NP 問題という. 例として, 巡回セールスマン問題, 地図の塗分け問題, 最小頂点被覆問題などが存在する. NP 問題は一般に解を求めるのが困難であるが, 特定の Hopfield ネットワークを設定し, その最低エネルギー状態が求めたい組み合わせ最適化問題の解である場合, その定常状態は解または, 解に近い性質を持つものと期待される. 定常状態に達するまでの計算量は比較的小さいため, 計算量の多い問題の近似解を高速に求める手段として考えられる.

有限グラフに対して, その頂点集合の部分集合であって, すべての頂点とその要素と隣接するものを, グラフの被覆と呼ぶ. 最小頂点被覆問題とは, そのような被覆のうち最小濃度を持つ被覆を求める問題である. 最小頂点被覆問題に対する先行研究として, サプライチェーンへの応用を念頭に Hopfield ネットワークを適用し考察した [1] や, Hopfield ネットワークにボルツマン因子を加えたボルツマンマシンを用いて考察した [2] などがある.

以上に挙げた先行研究では 3 章に登場する外場のパラメータ  $A$  を固定してシミュレーションを行っているが, パラメータを変更すると一般に定常状態が異なる. 傾向としては, ある程度までは  $A$  を大きくすると定常状態として得られる解の精度が上がり,  $A$  が一定以上になると途端に意味のある解が得られなくなる. そこで本研究ではランダムに生成したグラフに対し, Hopfield ネットワークを用いてそれらの被覆の構成を行い, それが外場のパラメータ  $A$  を変化させたときにどのような影響が出るのかを計測した.

2 章では Hopfield ネットワークを定義し, 3 章では被覆と最小頂点被覆を定義し, 最小頂点被覆問題を解くための Hopfield ネットワークを構成する. 4 章ではグラフの中心性を定義し, それと Hopfield ネットワークを用いたシミュレーションの結果を比較する.

## 2 Hopfield ネットワーク

まずは本研究の主要な道具である Hopfield ネットワークを定義する.

**定義 1 (Hopfield ネットワーク)**  $I$  を有限集合とする. 以下では  $I$  の元を頂点と呼ぶことにする.

- 1) 時刻  $t = 0$  で各頂点  $i \in I$  に対して, 状態  $x_i(0) \in \{0, 1\}$  を割り振る.
- 2) 頂点  $i, j \in I (i \neq j)$  に対して, 相互作用  $T_{ij} \in \mathbb{R}$  を時間に寄らない定数として設定する.  $i \in I$  に対して, 外場  $\theta_i \in \mathbb{R}$  を時間に寄らない定数として設定する.
- 3) 時刻  $t$  の状態が与えられたとき, 時刻  $t + 1$  の状態は, 頂点をランダムに 1 つ選択し, 以下の式に

\*<sup>1</sup> kobayasi@ms.u-tokyo.ac.jp

従って状態を更新するものとする (選択されていない頂点の状態は  $t$  のものと同じとする):

$$x_i(t+1) = \begin{cases} 1 & (\sum_{i \neq j} T_{ij} x_j(t) > \theta_i) \\ x_i(t) & (\sum_{i \neq j} T_{ij} x_j(t) = \theta_i) \\ 0 & (\sum_{i \neq j} T_{ij} x_j(t) < \theta_i). \end{cases} \quad (1)$$

以上のようなルールで逐次的に計算される状態の組の列  $\{\{x_i(t)\}_{i \in I}\}_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$  のことを **Hopfield ネットワーク** という.

**定義 2 (エネルギー関数)** Hopfield ネットワーク  $(\{\{x_i(t)\}_{i \in I}\}_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}, \{T_{ij}\}_{i,j \in I}, \{\theta_i\}_{i \in I})$  に対して, **エネルギー関数** を以下のように定義する:

$$E(t) = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} T_{ij} x_i(t) x_j(t) + \sum_i \theta_i x_i(t). \quad (2)$$

**命題 3** エネルギー関数  $E(t)$  は時間発展で単調減少する. 即ち,  $t_1 < t_2$  に対して,  $E(t_2) < E(t_1)$  である.

**命題 4** 任意の Hopfield ネットワークと任意の正の実数  $\epsilon > 0$  に対して, 十分大きな時刻を表す整数  $T$  を取ること出来て, Hopfield ネットワークが時刻  $T$  において定常状態に到達しない確率を  $\epsilon$  で抑えられる.

**証明** 各時刻における取り得る状態の組み合わせは有限であり, また最小のエネルギーを持つ状態は時間発展で変化をしない. そのため, Hopfield ネットワークの時間発展の際にランダムに選ばれる頂点を仮に恣意的に選択した場合, 有限回の時間発展でどの頂点を選んでも状態が更新されない状態, 即ち, 定常状態に到達する. 実際の Hopfield ネットワークの時間発展では, 全ての頂点を等確率で選出するため主張のようになる.

### 3 最小頂点被覆問題と Hopfield ネットワークの構成

Hopfield ネットワークは NP 困難な問題に対して, 確率的な近似解を与えることが出来る. 例えば巡回セールスマン問題, 地図の塗分け問題, 最小頂点被覆問題などに応用することが出来るが, 特に本研究では最小頂点被覆問題に絞って観察をした.

**定義 5 (有限グラフ)** 有限集合  $V$  と  $E \subseteq V \times V$  の組  $G = (V, E \subseteq V \times V)$  であって,  $E$  が  $V \times V$  の左右を入れ替える変換に対して不変なものを有限グラフという.  $V$  の元を  $G$  の頂点といい,  $E$  の元を  $G$  の辺という. 任意の  $V$  の元  $v$  に対して,  $\#\{(v, v') \in E\}$  を  $v$  の  $G$  における degree という.

**定義 6 (被覆, 最小頂点被覆, 最小頂点被覆問題)**  $G = (V, E \subseteq V \times V)$  を有限グラフとする.

- 1) 任意の  $G$  の頂点  $v \in V$  が,  $C \subseteq V$  に属する点とある辺  $e \in E$  によって結ばれているとき,  $C$  は  $G$  の**被覆**であるという.
- 2)  $G$  の被覆の中で最小の濃度を持つものを**最小頂点被覆**という.
- 3) 与えられたグラフ  $G$  に対し, 最小頂点被覆を求める問題を**最小頂点被覆問題**という.

$G = (V, E \subseteq V \times V)$  を有限グラフとする. このときに以下のような Hopfield ネットワークを構成する.

- 1)  $I = V$  とする.

2)  $A$  を任意に選んだ正の実数として, 相互作用  $T_{ij}$  と外場  $\theta_i$  を以下のように定める:

$$T_{ij} = \begin{cases} -1 & (i \text{ と } j \text{ が } G \text{ の辺で結ばれているとき}) \\ 0 & (\text{そうでないとき}), \end{cases} \quad (3)$$

$$\theta_i = -(i \text{ の degree}) + A. \quad (4)$$

3) 時刻  $t = 0$  のとき, すべての頂点の状態が 0 であるとする.

**注意 7** 1) 相互作用項によって, 状態が 1 の頂点が隣り合うと, エネルギーが大きくなる.

2)  $\theta_i - A$  の項によって, degree の大きな頂点の状態が 1 になるとエネルギーが小さくなる.

3)  $A$  の項によって, 状態が 1 の頂点の数が大きいほど, エネルギーが大きくなる.

以上で構成した Hopfield ネットワークの定常状態に対し, そこで状態が 1 の頂点のなす集合を **Hopfield ネットワークによって提案された被覆の候補**と呼ぶことにする. またそれが実際被覆になっていた場合, **Hopfield ネットワークが被覆を構成した**と言うことにする.

**注意 8**  $A > \#V$  とすれば, すべての頂点の状態が 0 の場合が唯一の定常状態であり, Hopfield ネットワークによって提案された被覆の候補は被覆にならない. 特に, 最小頂点被覆が定常状態に対応しているとは限らない.

頂点数が 10 の場合が無作為に作成した 20 のグラフに対して各 1000 回の数値計算を試みたところ, 以下のような結果を得た. Rust を用いて, シミュレーターは実装した. 初期状態として, 全ての頂点に 0 を割り当てた状態から時間発展させた.

- 1)  $A$  の値が大きいほど, Hopfield ネットワークによって提案された被覆の候補が被覆である確率が下がる.
- 2)  $A$  の値が大きいほど, Hopfield ネットワークが被覆を構成していた場合, その被覆の濃度は小さくなりやすい.
- 3) ある一定より大きな  $A$  に対して Hopfield ネットワークは被覆を構成しない.
- 4) グラフごとに被覆を構成できる  $A$  の上限値が異なる.
- 5) 必ずしも最小頂点被覆を構成できるわけではない.

**例 9** 頂点数が 10, 辺数が 15 である下図のグラフに対し, Hopfield ネットワークを用いて, 各  $A$  の値に対し, 1000 回の実験を行った. 以下の表は, 1000 回のうち被覆を構成できた数, 構成された被覆の中でその濃度の平均値, 構成された被覆の中で最も小さな濃度を持つ被覆の濃度, 1000 回のうちでその最小の濃度の被覆で構成出来た数をまとめたものである. またグラフの赤丸のついた頂点の集合が最小頂点被覆の例である.

$A$	被覆となった数	被覆の濃度の平均	構成された被覆のうち最小の濃度	構成された最小の被覆の数
0.5	1000	5.7	5	496
1.0	783	4.9	4	177
1.5	956	4.0	4	956
2.0	577	3.7	3	153
2.5	571	3.0	3	571
3.0	0	-	-	-

$A \geq 3.0$  では, 被覆が構成されなかった.

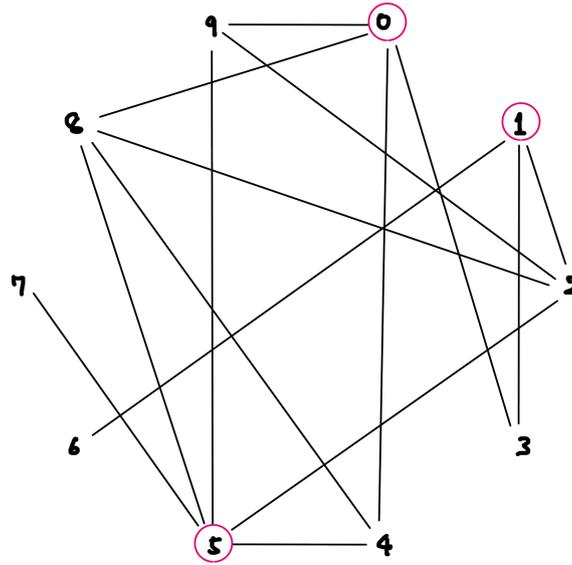


図 1 頂点数が 20, 辺数が 15 のグラフ

## 4 グラフの中心性, 頂点の最大 degree と $A$ の許容上限の関係

### 4.1 準備

3章のシミュレーションの結果により, Hopfield ネットワークの被覆が構成できる確率が正の状態, かつ可能な限り大きい  $A$  を選ぶことが出来ると, より精度の高い近似解を得られる. このような性質から, これ以降, 許容される  $A$  の上限値 ( $A$  の許容上限) とグラフの構造の関係を調べる. ここでは, 頂点数と辺の個数が同じグラフに対して, ハブとなる頂点が存在する場合に,  $A$  の許容上限がどのように変化するかをシミュレーションにより確かめる. ハブの存在の指標として, グラフの中心性 (TMH) と頂点の最大 degree を採用した. グラフの中心性については, 次のように定義する:

**定義 10 (グラフの中心性 (TMH, Tendency of Making Hub))**  $G = (V, E \subseteq V \times V)$  を有限グラフとする. このときグラフの中心性 (TMH) を以下のように定義する:

$$\text{tmh}(G) = \frac{\sum_{i \in V} (\text{deg } i)^2}{\sum_{i \in V} (\text{deg } i)}. \quad (5)$$

### 4.2 シミュレーションの実施

ここでは, 頂点数  $N$ , 平均 degree  $K$  のランダムに生成された連結グラフとは,  $N$  個の頂点を持つ完全グラフの辺のうち  $N \times K/2$  本を無作為に抽出して出来たもののうち連結なグラフを指す. 全ての実験で各頂点に 0 を割り当てたものを初期状態とした.

#### 4.2.1 実験 1: TMH と $A$ の許容上限の比較

頂点数 10, 平均 degree 3 の連結グラフをランダムに 5000 個生成し, それらの TMH と  $A$  の許容上限の値を比較した. 図 1 はバブル散布図によってその分布を表したもので, 大きさはそのプロットの重複度を表している. 図 2 では TMH ごとの平均と標準誤差を表した折れ線グラフである. グラフ生成のアルゴリズムの事情で両端のサンプル数が少ないが, 4.0 以下の区間では平均が 2.5 に近い値になっている.

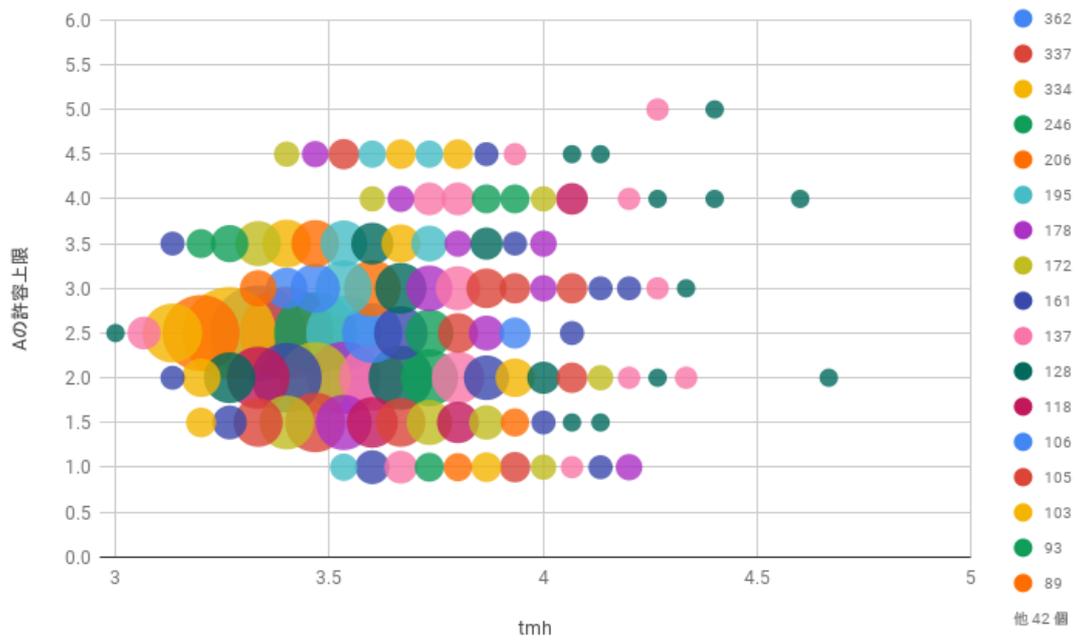


図2 TMH と  $A$  の許容上限: バブル散布図

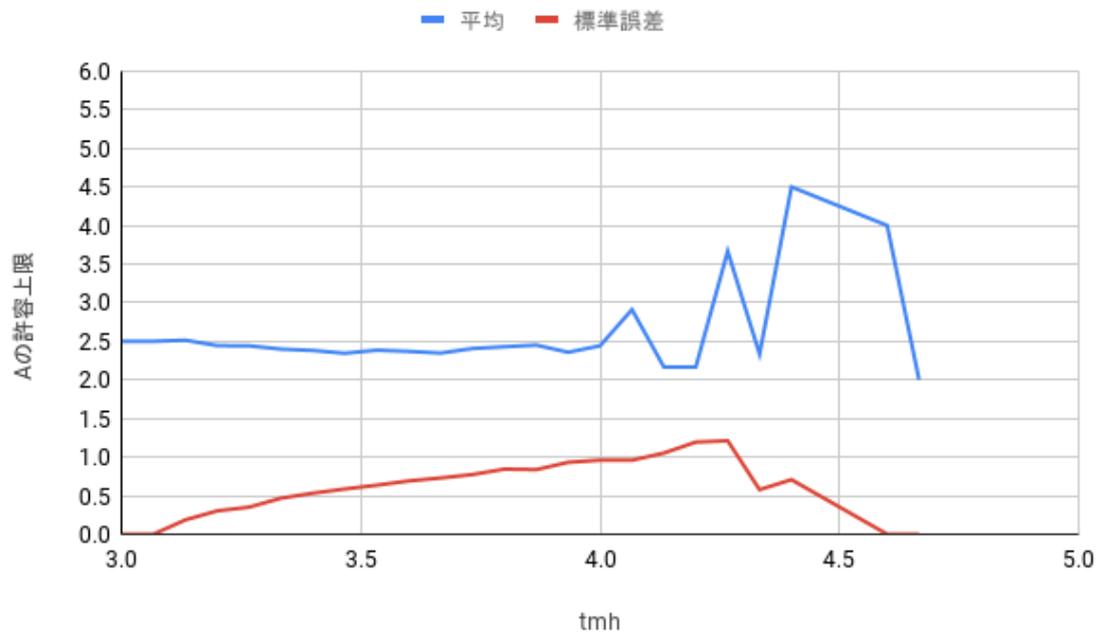


図3 TMH と  $A$  の許容上限: 平均と標準誤差

#### 4.2.2 実験2: 頂点の最大 degree と $A$ の許容上限の比較

頂点数 10, 平均 degree 3 の連結グラフをランダムに 5000 個生成し, それらの最も degree の大きな頂点の degree と  $A$  の許容上限の値を比較した. 図 3 はバブル散布図によってその分布を表したもので, 大きさはそのプロットの重複度を表している. 図 4 では頂点の最大 degree ごとの平均と標準誤差を表した折れ線グラフである. こちらも生成アルゴリズムの事情で両端の十分なサンプルを取れなかったが,

頂点の最大 degree が 4 から 7 の範囲では頂点の最大 degree に依らず, 平均がおおよそ 2.5 である.

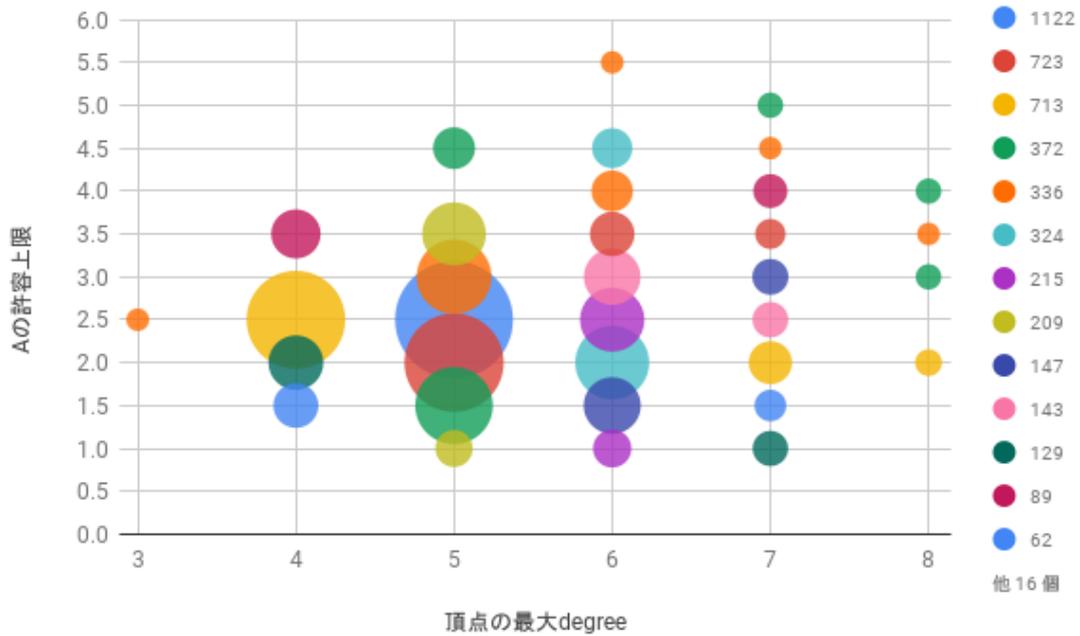


図 4 頂点の最大 degree と  $A$  の許容上限: バブル散布図

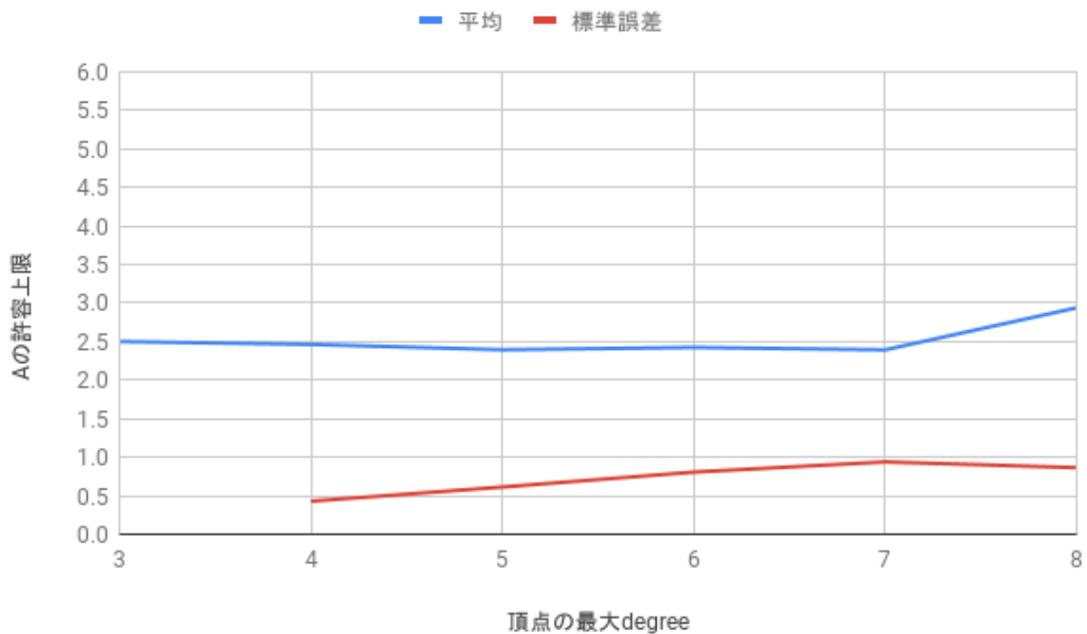


図 5 頂点の最大 degree と  $A$  の許容上限: 平均と標準誤差

#### 4.2.3 まとめ

どちらの実験においても, サンプル数が少ない両端部を除いて, TMH や頂点の最大 degree に依らず,  $A$  の許容上限の平均が 2.5 付近に存在することが分かった. 今回の実験からは TMH や頂点の最大 degree

が  $A$  の許容上限と関係があるという根拠は得られなかった。

## 5 おわりに

本研究では Hopfield ネットワークを用いて、有限グラフの最小頂点被覆の近似解を求める際にその外場のパラメータ  $A$  の変更によって得られる解の精度が異なるという観測事実から出発し、最も良い精度で被覆を構成することの出来る  $A$  とグラフの不変量の関係を探した。候補として試した TMH や頂点の最大 degree との関連性は本研究の検証の範囲では認められなかった。また  $A$  の許容上限はグラフごとには大きく異なるが、複数のグラフの平均を取ると少なくとも TMH や頂点の最大 degree には依らず、2.5 付近に平均を持つことが分かった。

今後の展望としては、TMH や頂点の最大 degree が多く生成できるような数値計算を行い、グラフの両端に関して信頼性を高めることや、頂点数や辺の本数を変えた時にその  $A$  の許容上限の平均がどう変化するかを確かめ、それを理論的に説明することなどが挙げられる。またもし存在するなら、グラフごとの  $A$  の許容上限を計算できる不変量も構成したい。

**謝辞** 本研究において、矢野良輔先生と山本宏子先生には文献の紹介や研究の方向性に関して数多くのアドバイスをいただきました。また山本先生は本稿の初稿を丁寧に読んでくださり、構成や内容に関して重大なアドバイスをいただきました。また同じくリスク班の林晃平さんと渡辺彬生くんからも有益な指摘やアドバイスをいただきました。匿名のレフェリーの貴重なコメントにも感謝いたします。

## 参考文献

- [1] C. C. Nikolopoulos, S. Small, H. Dwyer, A. Grichnik, M. Mohan and V. Vishwanathan, "Calculating the Topological Resilience of Supply Chain Networks Using Hopfield Neural Networks," 2020 IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies (BDCAT), 2020, pp. 116-123, doi: 10.1109/BDCAT50828.2020.00011.
- [2] Xinshun Xu, Zheng Tang, Xiaoming Chen, Jiahai Wang, A Modified Hopfield Neural Network for the Minimum Vertex Cover Problem, IEEJ Transactions on Electronics, Information and Systems, 2004, Volume 124, Issue 10, Pages 2155-2161, Released January 01, 2005, Online ISSN 1348-8155, Print ISSN 0385-4221, <https://doi.org/10.1541/ieejeiss.124.2155>, [https://www.jstage.jst.go.jp/article/ieejeiss/124/10/124\\_10\\_2155/\\_article/-char/en](https://www.jstage.jst.go.jp/article/ieejeiss/124/10/124_10_2155/_article/-char/en).