

単電子回路によるニューラルネットワークの
構成に関する研究

山田 崇史

2002年

目次

第1章 序論	7
1.1 研究の主旨	8
1.2 研究背景	8
1.2.1 単電子デバイスの歴史	8
1.2.2 組合せ最適化問題と求解	8
1.2.3 研究内容とその構成	9
参考文献	11
第2章 ホップフィールドネットワーク	12
2.1 はじめに	13
2.2 ニューラルネットワーク	13
2.2.1 ホップフィールドネットワークとその応用	15
2.2.2 ニューラルネットワークのハードウェア	18
参考文献	20
第3章 確率的ホップフィールドネットワーク (ボルツマンマシン)	21
3.1 はじめに	22
3.2 ボルツマンマシンの概要	22
3.3 アニールリングスケジュール	25
3.4 ボルツマンマシンの動作	25
3.5 ボルツマンマシン LSI	25
参考文献	26
第4章 多値ホップフィールドネットワーク	27
4.1 はじめに	28
4.2 多値ホップフィールドネットワークの概要	28
4.2.1 多値ホップフィールドネットワークの動作	33

4.2.2	多値ホップフィールドネットワークの応用	34
第 5 章	単電子回路によるボルツマンマシンの構成	36
5.1	はじめに	37
5.2	ボルツマンマシンに必要なニューロンの動作	37
5.3	単電子回路を用いたニューロン回路の設計	38
5.3.1	単電子回路ニューロン回路	38
5.3.2	単位ニューロン回路の動作	40
5.4	単電子ボルツマンマシンのネットワーク構成	41
5.4.1	容量結合によるネットワーク構成	42
5.4.2	MOS トランジスタ結合回路によるネットワーク構成	42
5.5	ネットワーク回路の求解動作	42
5.5.1	Max Cut 問題をネットワーク回路で実現する方法	43
5.5.2	サンプルネットワークのエネルギー関数とローカルミニマム	44
5.5.3	サンプルネットワークの求解動作	44
第 6 章	単電子回路による多値ホップフィールドネットワークの構成	55
6.1	ホップフィールドネットワークの概念	56
6.1.1	一般的なホップフィールドネットワーク	56
6.1.2	多値ホップフィールドネットワーク	58
6.2	単電子回路を用いた多値ニューロンの構成	60
6.2.1	単電子回路の概念	60
6.2.2	単電子回路による多値特性	61
6.2.3	単電子回路で多値ニューロン回路を構成する	61
6.2.4	ニューロン回路の安定領域図	63
6.3	多値ホップフィールドネットワークの動作	64
6.3.1	多値ホップフィールドネットワークの構成	64
6.3.2	ネットワークの求解動作	65
第 7 章	結論	70
7.1	研究成果	71
7.2	今後の展開	71
	謝辞	72

目 次

2.1	相互結合形ニューラルネットワークの例	13
2.2	ニューロンモデルの概念図	14
2.3	階層型ネットワーク	15
2.4	全結合型ネットワーク	16
2.5	ホップフィールドネットワークにおけるニューロンの伝達特性	17
2.6	ネットワーク状態の時間変化によるエネルギー関数の変化	18
2.7	光ニューラルネットワークの概念図	19
3.1	ボルツマンマシンの入出力関数	23
4.1	二値ニューロンによる多値表現	29
4.2	目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} > 0$)	30
4.3	多値ニューロンの伝達関数 ($w_{kk} > 0$)	31
4.4	目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} < 0$)	32
4.5	目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} = 0$)	32
4.6	多値ニューロンの伝達関数 ($w_{kk} \leq 0$)	33
4.7	目標関数 $E(x)$	34
4.8	5 値 4 ニューロンネットワークのシミュレーション例	35
5.1	ボルツマンマシンニューロンの動作。入力に応じてランダムなバイナリ 列を出力する	38
5.2	単電子ボルツマンマシンの単位ニューロン回路の構成	39
5.3	図 5.2 の単位ニューロン回路の安定領域図。軸は入力電圧 s とオフセット 電圧 V_b である。回路の容量パラメータは文中を参照。電源電圧 V_{dd}, V_{ss} を 増加させ、それぞれに対応した安定領域図を図 5.3.2(a) から図 5.3.2(d) に します。電源電圧は ($V_{dd}, -V_{ss}$): (a) (2.723 mV, -3.287 mV), (b) (2.738 mV, -3.302 mV), (c) (2.797 mV, -3.361 mV), (d) (2.870 mV, -3.434 mV)。	46

5.4	単位ニューロン回路の出力波形の例 (パラメータセットは (2.797 mV, -3.361 mV, -0.865 mV)。二つの入力電圧値に対する応答例を示す:(a) $s = 1$ mV, (b) $s = -1$ mV。温度は 0 K を仮定。	47
5.5	単位ニューロン回路の確率特 (素子パラメータは文中のものを仮定): (a) は制御パラメータ ($V_{dd}, -V_{ss}, V_b$) の異なる 4 つの条件における、入力に対する出力 1 を生成する確率。(b) は制御パラメータを設定するグラフである。制御パラメータは図 (b) のパラメータセット 1~4 を用いて、図 (a)1 から 4 の曲線を計算した。	48
5.6	容量結合による単電子ボルツマンマシンネットワークの構成。ニューロンの出力 (1+, 2+, ...) とその反転出力 (1-, 2-, ...) が、単位ニューロン回路の入力としてフィードバックする。ニューロン間の結合は結合容量 C_{ij} で実現する。またニューロンのしきい値は結合容量 C_i を通じて与える。	49
5.7	バッファと負重み生成のために用いた単電子インバータの回路図	50
5.8	Max cut 問題の例とそれに対応した結合容量: (a) 重み付グラフ、(b) ニューロン間の結合重み W_{ij} , (c) ネットワーク回路の結合容量	51
5.9	Fig. 5.8(a) の例題に対応するネットワークのエネルギー関数図中の記号 (+ + - + -) は、5 ニューロンの出力の組を表す。状態 (- + + + -) と (+ - - - +) は問題の解を表すエネルギー関数の最小値である。次にエネルギー関数の低い (+ - + + -) は (- + - - +) 局所最適解を表す極小値である。	52
5.10	State transition in the sample network without the annealing (computer simulation). The results of three trials are plotted.	53
5.11	State transition in the sample network under the annealing (computer simulation). The results of a trial is plotted. The network can successfully reach the global minimum state.	54
6.1	Concept of the Hopfield network. Denoted by W_{ij} is the weight of connection between neuron i and neuron j ($W_{ij} = W_{ji}$), (θ) is the weight of connection between neuron i and a bias of 1, s_i is the input for neuron i given by Eq. 1 in the text, and x_i is the output of neuron i	56

6.2	Elements for an ordinary (binary) Hopfield network: (a) the transfer function for neurons, and (b) the connection weights for mapping the quadratic 0-1 programming given by Eq. 2 in the text.	58
6.3	Elements for the multiple-valued Hopfield network: (a) the staircase transfer function for neuron i , and (b) the connection weights for mapping the quadratic integer programming given by Eq. 4 in the text. . .	59
6.4	Modified elements for the multiple-valued Hopfield network: (a) the modified staircase transfer function for neuron i , and (b) the connection weights for mapping the quadratic integer programming given by Eq. 4 in the text.	60
6.5	Configuration of the neuron circuit for the multiple-valued Hopfield network.	62
6.6	The transfer function (input-output curve) of the multiple-valued neuron circuit of Fig. 5. Simulated using the Monte Carlo method given in Ref. 8. The temperature is 0 K.	63
6.7	Stability diagram for the multiple-valued neuron circuit. For the capacitance parameters, see the text. The value of $-V_{ss}$ is set at -0.17 mV. The circuit is operated on line PQ	66
6.8	Another instance of the staircase transfer function. The set of parameters is: $C_{j1} = C_{j4} = 3$ aF, $C_{j2} = C_{j3} = 6$ aF, $C_1 = C_2 = 5$ aF, $C_3 = C_4 = 10$ aF, $C_5 = 300$ aF, $V_{dd} = 4.85$ mV, $-V_{ss} = -0.17$ mV. The temperature is 0 K.	67
6.9	The value of the problem function given by Eq. 6 in the text, tabled for all possible combinations of variables x_1 , x_2 , and x_3 . The function takes the minimum, -50 , for the variable set $x_1 = 2$, $x_2 = 2$, and $x_3 = 0$. . .	68
6.10	The configuration of the multiple-valued Hopfield network together with the values of the connection weights. This circuit is for the quadratic integer-programming problem given by Eq. 6 in the text.	69

第1章 序論

1.1 研究の主旨

本研究は、非ノイマン型情報処理アーキテクチャであるニューラルネットワークを、量子効果を利用した単電子回路を用いて構成することによって、新たな情報処理 LSI の開拓を目指すものである。単電子回路の特徴である電子の確率的なトンネルリングや、電子のトンネルによる過剰電子の量子化を積極的に利用した回路を用いて、ノイマン型アーキテクチャでは計算量の多い NP 問題を解くニューラルネットワークの設計方針を確立するとともに、その有効性を示す。

1.2 研究背景

1.2.1 単電子デバイスの歴史

近年、単電子回路に関する研究が盛んに行われている。単電子回路は超高集積化と低消費電力を両立する技術であると期待されている。この背景には、近い将来訪れるであろうトランジスタの微細化限界の問題がある。既存の情報処理の中心的デバイスであるトランジスタは 1965 年に発表されたムーアの法則 [2] に従うように微細化を続けており、最近ではゲート長が $6\mu\text{m}$ のトランジスタの試作に成功している [1]。しかし、今のペースで微細化が進めば、今世紀には物理的な微細化限界が訪れると考えられている。このような微細化領域では、電子は波動性を持つため、従来の粒子性だけを考慮したデバイスは正常な動作が望めなくなるためである。また、微細化技術の発展によって単電子回路の実デバイスの作製が可能になったことも研究の発展に大きく寄与している。

このような微細構造のトンネル接合では、クーロンブロック現象を利用して電子のトンネルリングを制御することが可能である。この現象を利用して、CMOS トランジスタのような相補的なスイッチング特性を示す単電子トランジスタをはじめ AND/OR などのバイナリ論理回路、デジタル論理表現の方法の一つである二分決定グラフ (BDD) による論理回路や多値メモリなどさまざまな回路が提案されている。

1.2.2 組合せ最適化問題と求解

組合せ最適化問題 (Combinatorial Optimization Problem) とは、有限の解集合から目的関数を最大化 (または最小化) するものを見つける問題である。従来の手法でこ

の問題を解くためには解集合の全ての組合せにおける目的関数を計算しなければならない。従って問題の規模に対して指数関数的に計算量が増大し、求解が事実上困難となる。このような問題を NP(Nondeterministic Polynomial) と呼ぶ。NP 問題を多項式時間で解くアルゴリズムが存在するかどうかということは現代数学における未解決問題の一つであるが、現在有効なアルゴリズムが発見されていないこともあり、存在しないという予想が一般的である。

組合せ最適化問題の具体例には、指定された都市を巡回して戻ってくる最短の経路を求める巡回セールスマン問題 (TSP Traveling Salesman Problem), 価値と重さを持つ様々な品物がある重量制限内で価値の総和の高い組合せを選択するナップサック問題などがある。このような問題はわれわれの周辺にも多く存在する。例えば LSI チップや基板に効率的にトランジスタや部品を配置するというのも組合せ最適化問題の一種である。

このような問題を求める方法として、従来の逐次検索以外にもいくつか手法が提案されている。問題の系と相似な物理系を準備し、その物理系の振る舞いを観測することで解を求めるアナログコンピューティングの手法や、T.Kohonen が開発した自己組織化マップ (SOM : Self Organizing Map) を持ちいる手法、相互結合形ニューラルネットワークなどである。

1.2.3 研究内容とその構成

本研究では、組合せ最適化問題を解く相互結合形ニューラルネットワークの持つ単電子回路における物理現象との共通点に着目し、この共通点を利用した単位回路の実現を目的としている。

本論文は 7 章から構成されている。以下に各章の要旨を示す。

第 1 章では、本研究の歴史的背景と目的を述べ、各章の概要を記す。

第 2 章では、相互結合形ニューラルネットワークの一種である二値ホップフィールドネットワークについてその動作原理、応用の説明を行い、連想記憶を例に具体的な動作について述べる。

第 3 章では、ホップフィールドネットワークの単位素子を確率的に動作させたボルツマンマシンについて、その動作を説明し、既存のボルツマンマシン LSI の製作例を示す。

第 4 章では、ホップフィールドネットワークの基数を多値に拡張した多値ホップフィー

ルドネットワークについて、その動作原理を示す。

第5章では、単電子トンネル現象を利用したボルツマンマシンデバイスの構成法について説明する。提案したボルツマンマシンデバイスを組み合わせたネットワークの構成法を説明する。このネットワークを用いて組合せ最適化問題を解くため必要なアニーリング駆動の方法を二種類提案し、それぞれの検討を行っている。

第6章では、量子ドットにおける過剰電子数の離散性を利用した多値ホップフィールドネットワークの構成を示し、提案したネットワーク回路が整数計画問題を解くことを確認する。また、このネットワークに確率性を導入することで、比較的良い解（極小解）から最適解への収束を可能にするネットワークを提案し、その動作を説明する。

第7章では本論文の結論と今後の課題について述べる。

参考文献

- [1] **, “Extreme Scaling with Ultra-thin Silicon Channel MOSFETs,” International Electron Devices Meeting (IEDM) December 9-11 in San Francisco (2002).
- [2] G. Moore, “Progress in sigital integrated electronics,” International Electron Devices Meeting (IEDM) Tech. Digest. pp.11-13 (1975).
- [3] Hiroshi DATE, Mitsuho SEKI and Terumine HAYASHI, “LSI Module Placement Methods Using Neural Computation Networks,” Proc. of International Joint Conference on Neural Networks 1990, San Diego, 1990.
- [4] Hiroshi DATE, Yoshihisa OHTAKE and Kazuo TAKI, “A Parallel LSI Router Based on the Concurrent Object Model,” Proc. of Logic Programming Conference 1991, Tokyo, 1991- 7.

第2章 ホップフィールドネットワーク

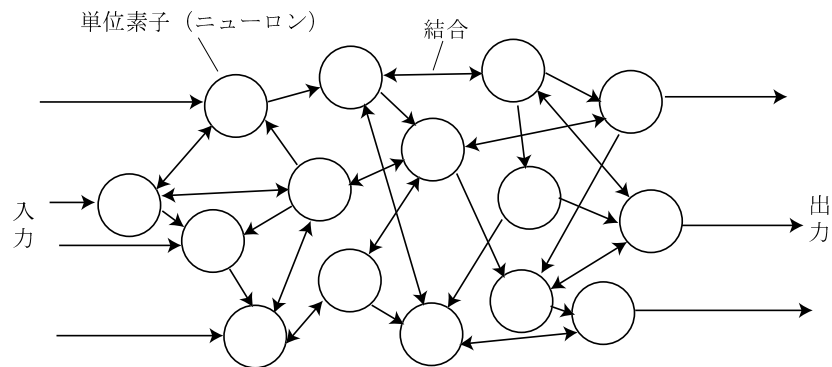


図 2.1 相互結合形ニューラルネットワークの例

2.1 はじめに

相互結合形ニューラルネットワークは、出力から入力へのフィードバック結合を含む再帰型ニューラルネットワークの一種である。フィードバックを含まない非再帰的なネットワーク（階層型ネットワーク）と比較すると再帰的ネットワークは系が不安定な反面、複雑な動作をするため工学的な応用の可能性を秘めている。

本章では、相互結合ネットワークとその一形態であるホップフィールドネットワークについてその特徴と動作を述べる。

2.2 ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークコンピューティングとは、実際の神経の動作を、忠実または一部の特徴的な部分を再現するように定義した神経モデルを結合して構成した情報処理アーキテクチャである。ニューラルネットワークの概念図を図 3.1 に示す。ネットワークにおいて、各演算単位素子（ニューロン）は結合重みを持って互いに結合し影響を及ぼしあう。外部からの入力を与える場合も結合重みを介して任意のニューロンへ接続する。全てまたは任意のニューロンの出力がネットワークの出力となる。個々のニューロンは比較的単純な信号処理を行うが、多数のニューロンが結合することによって複雑な情報処理を行うことが可能となる。

情報処理によって、1) ニューロンにどのような特性を持たせればよいか、2) ニューロン間をどのように結合するか、が異なってくる。生体におけるニューロンの出力（膜電位）は入力の空間的・時間的な重みつき総和によって定まり、また入力と出力は非

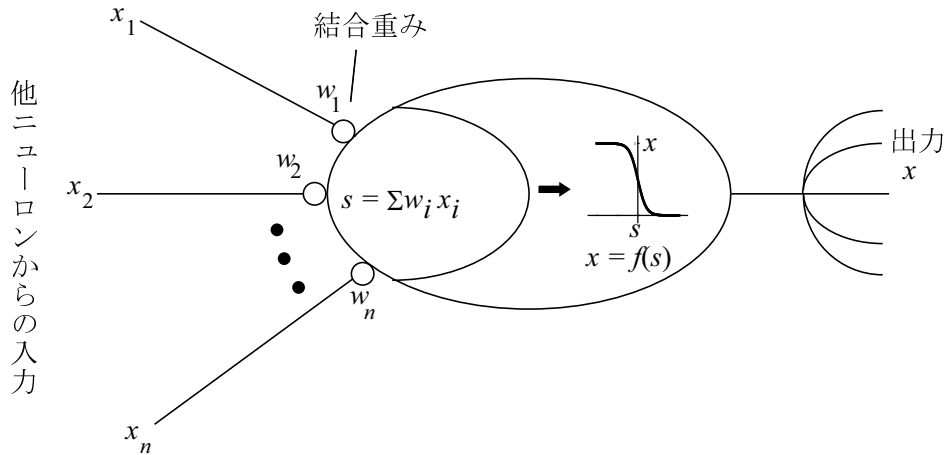


図 2.2 ニューロンモデルの概念図

線形な関係にある。これらの特徴のうち時間的な変化を考慮しないニューロンモデルの一例を図 2.2 に示す。結合重み w は神経のシナプス結合の強度を表しており、 w が正であればニューロンを活性化する興奮性シナプス、負であれば抑制性シナプスに相当する。ニューロンは他ニューロンからの入力 x_i の重み付き総和 $s = \sum w_i x_i$ によって出力が決定する。重み付き総和 s と出力間の伝達関数には、いくつかの関数が提案されているが、次式のシグモイド関数を用いることが多い。

$$f(s) = \frac{1}{1 + \exp(-ks)} \quad (2.1)$$

ここで k は、特性を決定するパラメータである。

この他にも、画像処理や連想メモリの性能が向上する非単調な伝達関数や、 s を入力の n 多項式にすることによって複雑な情報処理を少ないニューロン数で可能にする高次ニューロンなど、さまざまなモデルが提案されている。

ニューロンの結合方式にはフィードバック構造を持つか持たないかで大きく二つに分類できる。各々のネットワークの代表的な構造を図 2.3, 2.4 に示す。階層型ネットワークなどのフィードバックループを持たないネットワークは入力に対して出力が一意に決まるスタティックな特性を持つ。このネットワークは誤差逆伝播 (Back Propagation: BP) 法と呼ばれる教師有り学習によって、アルゴリズムの不明な任意の入出力関数の近似が可能であり、文字認識やロボットアームなどの制御装置への応用が研究されている。一方、フィードバックループを持つネットワークは、以前のネットワークの内部状態にも影響を受ける。そのため、階層型に比べ入出力関係は複雑になる。ホップ

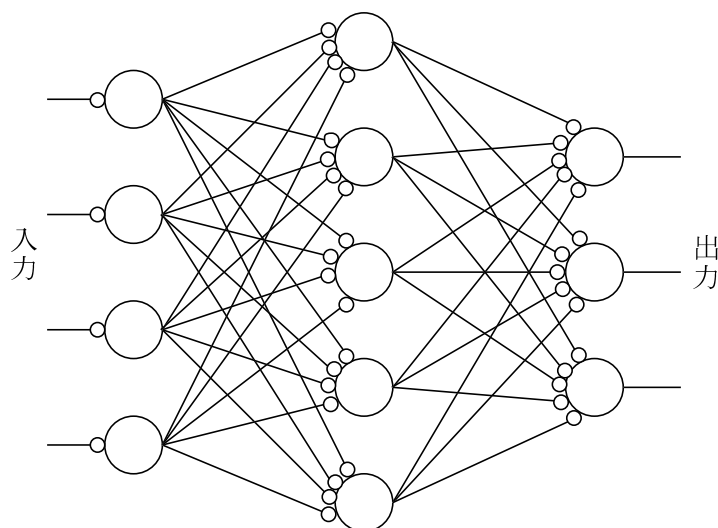


図 2.3 階層型ネットワーク

フィールドネットワークによる連想記憶や組合せ最適化問題への応用が研究されている。次節にこれらの応用例について詳しく述べる。

2.2.1 ホップフィールドネットワークとその応用

フィードバックループを持つネットワークの一種であるホップフィールドネットワークは、今日のニューラルネットワーク研究ブームのきっかけの一つとなったネットワークである。1985年にHopfieldとTankによって、このネットワークのエネルギーと呼ばれる関数が時間とともに減少することが発見された。この性質を利用して連想記憶や二値の組合せ最適化問題を解くことを提案している。組合せ最適化問題は計算量が多く求解が困難であったため、さまざまな組合せ最適化問題への応用が検討されている。

ホップフィールドネットワークは図2.4の構造をとる。 i 番目のニューロンは次の微分方程式に従うものとする。

$$\frac{ds_i(t)}{dt} = \sum_j w_{ij}x_j(t) + \theta_i \quad (2.2)$$

$$x_i(t) = f(s_i(t)) \quad (2.3)$$

ここで、 $x_i(t)$ は時刻 t における i 番目のニューロンの出力、 θ_i はしきい値、 f は伝達関数である。

ホップフィールドネットワークではネットワーク全体の特性を表す量として、エネ

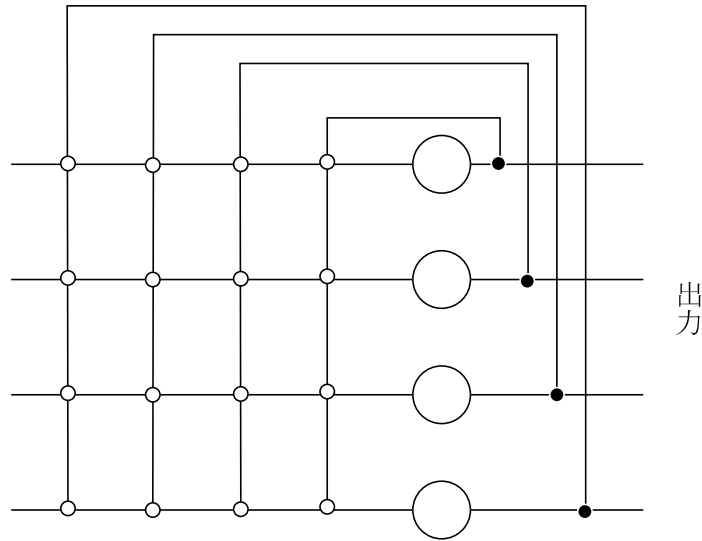


図 2.4 全結合型ネットワーク

ルギー関数 E を導入する。このエネルギー関数は物理的なエネルギーとは無関係なものである。

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j w_{ij} x_i x_j - \sum_i \theta_i x_i \quad (2.4)$$

ここで、自分自身へのフィードバックはなく ($w_{ii} = 0$)、二つのニューロン間の結合重みの値は等しい ($w_{ij} = w_{ji}$)、伝達関数 f は単調増加関数であるとする。以上のような条件の下において、このネットワークは系のエネルギー E が減少するように自らの状態を遷移させていく。エネルギー関数 E の時間微分 dE/dt は

$$\frac{dE}{dt} = \sum_i \frac{\partial E}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} = \sum_i \frac{\partial E}{\partial x_i} \frac{dx_i}{ds_i} \frac{ds_i}{dt} \quad (2.5)$$

また前述の条件の下で E の x_i による偏微分は

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = - \sum_j w_{ij} x_j(t) - \theta_i \quad (2.6)$$

となり、式 (2.2) から

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = - \frac{ds_i(t)}{dt} \quad (2.7)$$

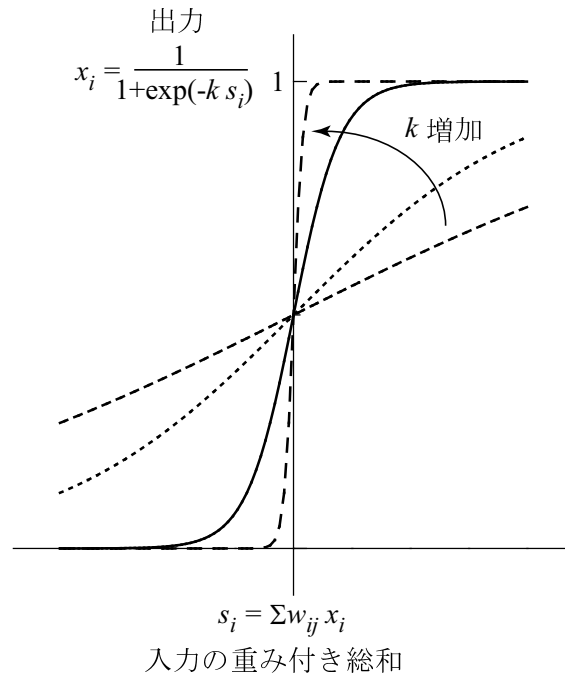


図 2.5 ホップフィールドネットワークにおけるニューロンの伝達特性

となるのは明らかである。式 (2.2), (4.5) より、(2.5) は

$$\frac{dE}{dt} = - \sum_i \left(\frac{ds_i(t)}{dt} \right)^2 \frac{dx_i}{ds_i} \quad (2.8)$$

$$= - \sum_i \left(\sum_j w_{ij} x_j(t) + \theta_i \right)^2 f'(s_i(t)) \quad (2.9)$$

$f(s_i(t))$ が単調増加関数なので上式右辺の $f'(s_i(t)) \geq 0$ となるので、 $dE/dt \leq 0$ すなわちネットワークは系のエネルギーは単調に減少する。この状態の時間変化のイメージを図 2.6 に示す。ネットワークにある初期値を与えてその時間変化を見ると、エネルギー関数が減少する方向へと遷移していく。エネルギー関数は多変数の関数であり、多くの極小値を持つ。そのため、ネットワークはエネルギー関数の最小値か極小値となる状態で収束する。このような性質を利用した情報処理への応用が連想記憶と組合せ最適化問題の求解である。

連想記憶とは、与えられた入力パターンに最も近い自身の記憶パターンを思い出すというものである。これによって、ノイズののった画像の修復や、文字認識といった画像処理が可能となる。この場合、記憶パターンを先ほどの極小値（および最小値）となるよう結合重みを設定する。

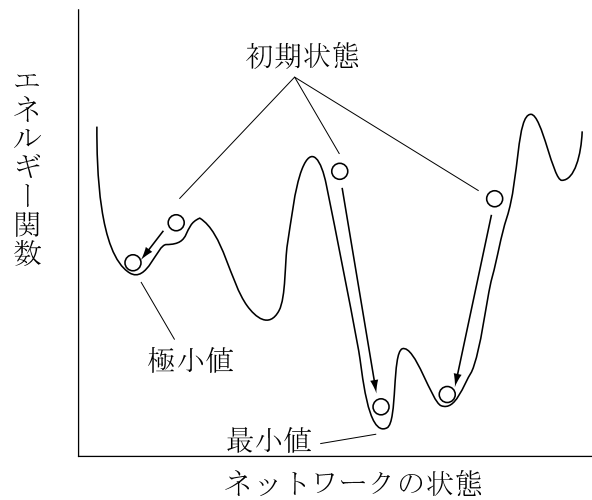


図 2.6 ネットワーク状態の時間変化によるエネルギー関数の変化

組合せ最適化問題は、前章でも述べたが問題の規模に対して解を求めるための計算量が指数関数的に増大するため、最適解の求解は困難であることが多い。そのため、近似解法を用いて求解法などが利用されている。組合せ最適化問題をホップフィールドネットワークで解くためには、ホップフィールドネットワークのエネルギー関数と似た関数で問題の解において値が最小となるような関数を定義する。問題の条件によってニューロン数・結合などを決定することで、ネットワークは問題の解に近い方向へと遷移する。しかし、図 2.6 のように一般には多くの極小値が存在し、問題の解で最小値に収束しない場合が多い。そのため、カオスを利用した方法や、ニューロンの伝達関数に確率を導入する方法などが研究されている。

2.2.2 ニューラルネットワークのハードウェア

ニューラルネットワークのハードウェアは大きく分けてアナログ方式とデジタル方式がある。アナログ方式では、一般的にニューロンを LSI チップ上に多数集積する。デジタル方式に比べニューロンを構成するデバイス数が少ないため、多数のニューロンを集積できる。一方のデジタル方式は多数のニューロンをチップ上に集積できないため、処理を時分割で行う。そのため、ニューロン数やクロック周波数によってはアナログ方式の方が高速に演算できる。しかし、アナログ方式には、演算精度が低い、プロセスや温度による特性ばらつきの影響を受けやすいといった問題点がある。デジタル方式は複雑な処理が可能で、精度が高く、時分割処理によって大規模ネットワーク

も可能であるといった特徴を持つ。

ニューラルネットワークのハードウェアで最も研究が盛んなものは半導体デバイスによる LSI である。**

また、半導体素子を使わないニューラルネットワークのハードウェアも提案されている。結合した SQUID を用いたニューロン回路 [2] や光を用いた光ニューラルネットワークなどが提案されている。光を用いた情報処理は、光の回折効果を利用して行列演算や畳み込み積分などが容易に実現できる。これを利用して入力の重み付き総和の計算を行う。また光を用いることで結合配線の問題を解決できる。例として、二次元画像の連想記憶を行う光ニューラルネットワークの概念図を図 2.7 に示す [3]。液晶デバイス (LCD) を用いて、入力画像 I_{ij} が複数二次元に配列した多重画像 I_{ijkl} を生成する。LED アレイを用いて多重画像と重みマスクに光照射する。多重画像とマスクを通過する際、光は画像とマスクの階調に応じて減衰する。これは乗算に相当する。マスクを通過した光をレンズを用いて集光することによって加算を行う。出力の各画素 O_{kl} には他の入力の重み付き加算に応じた光が照射される。これを受光素子で電気に変換し、入力画像へとフィードバックすることで連想記憶を実現できる。

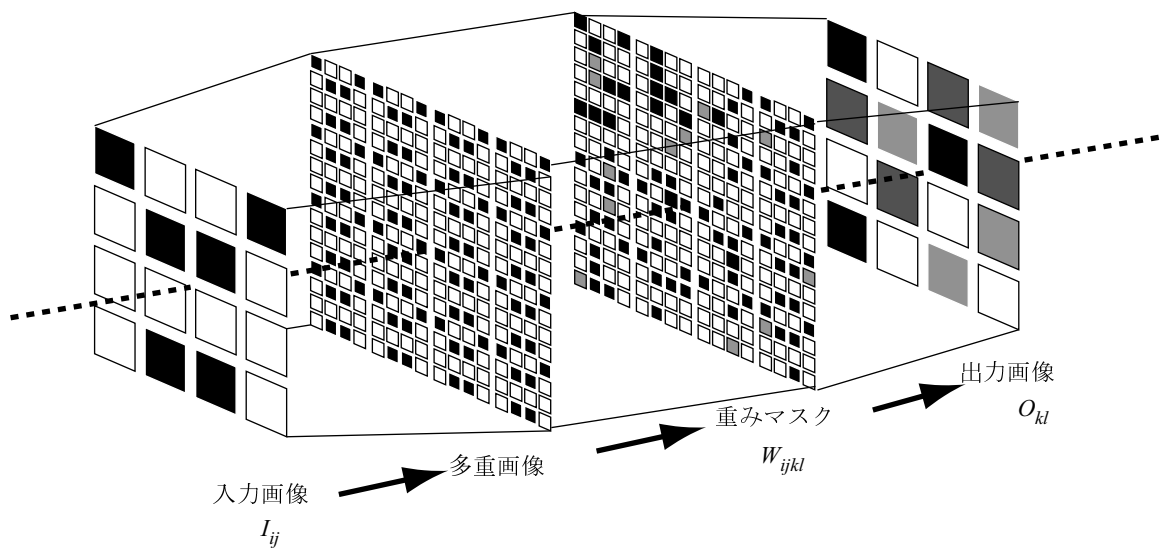


図 2.7 光ニューラルネットワークの概念図

参考文献

- [1] "Ferroelectric neuron integrated circuits using SrBi₂Ta₂O₉-gate FET's and CMOS Schmitt-trigger oscillators," IEEE Trans. on Electron Devices, Vol.47, No.8, pp.1630-1635, Aug. 2000
- [2] Y. Mizugaki, K. Nakajima, Y. Sawada, and T. Yamashita, "Implementation of new superconducting neural circuits using coupled SQUIDs," IEEE Trans on Applied Superconductivity, Vol. 4, No. 1,pp. 1-8(1994)
- [3] M. Mori, Y. Yagai, T. Yatagai, and M. Watanabe, "Optical learning neural network with a Pockels readout optical modulator," Applied Optics, Vol. 37, No. 14, pp.2852-2857(1998).

第3章 確率的ホップフィールドネットワーク (ボルツマンマシン)

3.1 はじめに

ボルツマンマシンはホップフィールドネットワークに確率性を導入したものである。系の挙動に確率的なゆらぎを与えることで、常にエネルギーが減少する方向へとは遷移しなくなる。しかしこれによって局所解から脱出し最適解へと収束することが可能となる。本章ではボルツマンマシンの動作原理とその特徴を述べる。

3.2 ボルツマンマシンの概要

前章で述べたホップフィールドネットワークによる組合せ最適化問題の求解では正解ではない極小解に収束することがある。これを回避するために、ニューロンの伝達特性に確率性を導入する。このときの、系の振る舞いを以下に述べる。

ニューロンの入出力関数 f に確率性を導入する。にノイズを加えることを考える。ニューロンの出力を $1/-1$ の二値するとニューロンの出力が $1, -1$ をとる確率は

$$P_{x_i=1} = f(s_i) \quad (3.1)$$

$$P_{x_i=-1} = 1 - f(s_i) \quad (3.2)$$

である。 f は 0 から 1 の範囲をとり入力に対して単調に増加する関数である。通常 f は次のような関数が用いられる。

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x/T)} \quad (3.3)$$

ここで T は温度と呼ばれるパラメータであり、正の値をとる。 $T = 0$ では f は 0 と 1 の二値しか持たない、すなわち決定論的に動作する。すなわち前章で述べたホップフィールドネットワークとなる。

式**の s_i は他のニューロンから i 番目のニューロンのへの入力の重み付き総和であり

$$s_i = \sum_j w_{ij}x_j + \theta_i \quad (3.4)$$

である。式 (3.4) から式 (3.1), (3.2) を一つにまとめると、

$$P_{x_i=a} = \frac{1}{1 + \exp\left(-a \sum_j w_{ij}x_j/T\right)} \quad (3.5)$$

と書き直すことができる。

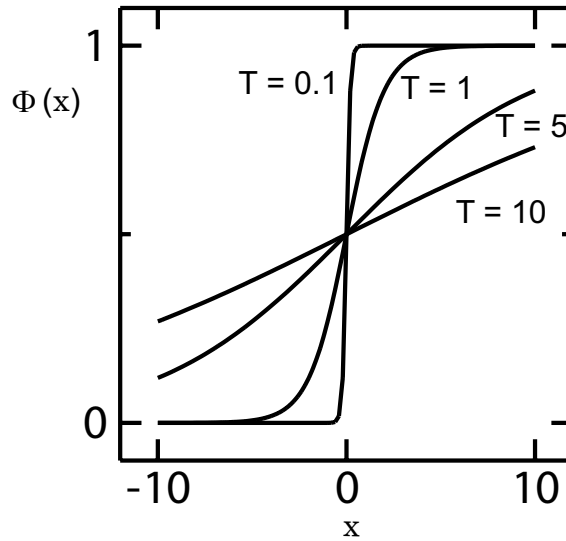


図 3.1 ボルツマンマシンの入出力関数

このネットワークは温度パラメータ T を時間とともに下げていくことによって、エネルギー関数が最小となる状態へと収束する。これを確認するために、定常状態あるときにエネルギー関数が最小の状態からの遷移確率を求める。

ネットワークの状態 $[x_1, x_2, \dots, x_N]$ を α, β, \dots と表すことにする。ある状態にあるネットワークが次にどの状態に遷移するかは確率的にしか定まらないので、現在の状態 α から状態 β へと遷移する確率を議論しなければならない。一般的なボルツマンマシンでは、ある時刻に出力を更新するニューロンは一つだけである。

時刻 t において、状態が α である確率を $P_t(\alpha)$ とする。確率 $P_t(\alpha)$ の時間変化 $P_t(\alpha)/dt$ は、一度に更新するニューロンは一つなので、1) α とハミング距離が 1 離れた状態 β から状態 α に遷移する確率の和と、2) 状態 α からハミング距離が 1 離れた状態 β へと遷移する確率の差、すなわちマスター方程式で表すことができる。状態 α にあるニューロンの出力値を $\{X_1, X_2, X_3, \dots, X_N\}$ とすると確率 $P_t(\alpha)$ の時間変化 $P_t(\alpha)/dt$ は、

$$\frac{dP_t(\alpha)}{dt} = \sum_{j=1}^N P_t(F_j(\alpha))P_{x_j=X_j} - \sum_{j=1}^N P_t(\alpha)P_{x_j=-X_j} \quad (3.6)$$

となる。ここで、 $F_j(\alpha)$ は状態 α の j 番目のニューロンの出力を反転 ($X_j \rightarrow -X_j$) させる関数である。右辺第一項は、状態 α と j 番目のニューロン出力だけが異なっている状態から α へ遷移する確率を表し、右辺第二項は α から j 番目のニューロン出力だけが異なる状態へ遷移する確率を表している。

定常状態では $dP_t(\alpha)/dt = 0$ なので (3.7) から

$$\sum_{j=1}^N \{P_t(F_j(\alpha))P_{x_j=X_j} - P_t(\alpha)P_{x_j=-X_j}\} = 0 \quad (3.7)$$

となる。さらに、今は定常状態を考えているので、詳細釣り合いを仮定する。詳細釣り合いとは、平衡状態において任意のふたつの部分間になんらかの相互作用や流れがあるのであれば、ちょうどそれと逆向きの相互作用や流れが同じ統計性で発生し、局所的に打ち消しあい釣り合いがとれるというものである。この詳細釣り合いを仮定すると

$$P_e(F_j(\alpha))P_{x_j=X_j} - P_e(\alpha)P_{x_j=-X_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (3.8)$$

が得られる。ここで $P_e(\alpha)$ は定常状態においてネットワークの状態が α となる確率である。式 (3.5), (3.8) から、定常状態において、状態 α である確率と、そこからハミング距離が 1 離れている状態に確率の比を求めると、

$$\begin{aligned} \frac{P_e(F_j(\alpha))}{P_e(\alpha)} &= \frac{P_{x_j=-X_j}}{P_{x_j=X_j}} \\ &= \exp\left(-\frac{s_j x_j}{T}\right) \quad (j = 1, 2, 3, \dots, N) \end{aligned} \quad (3.9)$$

となる。

定常状態においてエネルギー関数の最小の状態を α とする。このとき任意の j において、 $x_j s_j \geq 0$ である。そのため、式 (3.3) から $T \rightarrow 0$ において (3.9) は、

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{P_e(F_j(\alpha))}{P_e(\alpha)} = 0 \quad (3.10)$$

となる。同様に $T \rightarrow \text{inf}$ において、(3.9) は、

$$\lim_{T \rightarrow \text{inf}} \frac{P_e(F_j(\alpha))}{P_e(\alpha)} = 1 \quad (3.11)$$

となる。このことは、温度 T が高いとエネルギー最小の状態をとる確率は低くなり、温度 T を下げるとその確率は高くなる。しかし、 $T = 0$ と等価なホップフィールドネットワークでは、極小解に収束する。これは、温度が低いとエネルギー極小値から抜け出るのに要する時間が長くなるからである。($T \rightarrow 0$ では、無限大の時間がかかる。すなわち抜け出すことはできない。)

この問題を解決するためにアニーリング法を用いる。すなわち、初めは T を高い状態に設定し、時間とともに温度を下げていく。次節にアニーリング法について述べる。

3.3 アニールスケジュール

3.4 ボルツマンマシンの動作

3.5 ボルツマンマシン LSI

参考文献

- [1] **, “Extreme Scaling with Ultra-thin Silicon Channel MOSFETs,” International Electron Devices Meeting (IEDM) December 9-11 in San Francisco (2002).
- [2] E. Cela, The quad

第4章 多値ホップフィールドネットワーク

4.1 はじめに

多値ホップフィールドネットワークは連続値か二値の出力を取っていた従来のホップフィールドネットワークを多値に拡張したものである。これにより、ホップフィールドネットワークの応用である組合せ最適化問題のうち、変数を多値にした整数計画問題を解くことが可能である。多値ホップフィールドネットワークでも従来のホップフィールドと同様にエネルギーの減少する方向へのみ状態遷移が行われていることが証明されている。本章では多値ホップフィールドネットワークの動作原理とその特徴を述べる。

4.2 多値ホップフィールドネットワークの概要

整数計画問題は、組合せ最適化問題の一種である。問題の変数が2種類以上の状態を取りうるので、組合せの数は0-1計画問題よりも多くなり、より多くの計算量が必要となる。

整数計画問題は変数を変換することができればホップフィールドネットワークで解く事も可能である。図4.1にホップフィールドで用いた二値ニューロンによる多値変数の表現法を示す。このように、多数のニューロンを使用することで、整数計画問題を解くことができるが、ニューロン数、配線数が指数関数的に増大するため、集積化には向かない。多値特性を持つニューロンをコンパクトに設計することができれば、高集積なニューラルネットワークLSIを作ることができる。また、このような手法で整数計画問題を解くには解きたい問題の変数を変換してネットワークのエネルギー関数に相似させる必要があり、求解のための作業工程が増加する。

一方、秋吉らが提案した多値ホップフィールドネットワークは、ニューロンの出力を多値化することで整数計画問題を解くネットワークである。多値ホップフィールドネットワークは、ホップフィールドネットワークのような変数変換を行うことなく問題を解くことが可能である。その動作原理を述べる。

ここで取り上げる多値ホップフィールドネットワークは二次整数計画問題を解くことが可能である。いま最小化したい二次関数を

$$E(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n \theta_i x_i \quad (4.1)$$

とする。ここで $w_{ij} = w_{ji}$, $w_{ii} \neq 0$, $i = \{1, 2, \dots, n\}$, $j = \{1, 2, \dots, n\}$ を仮定する。式

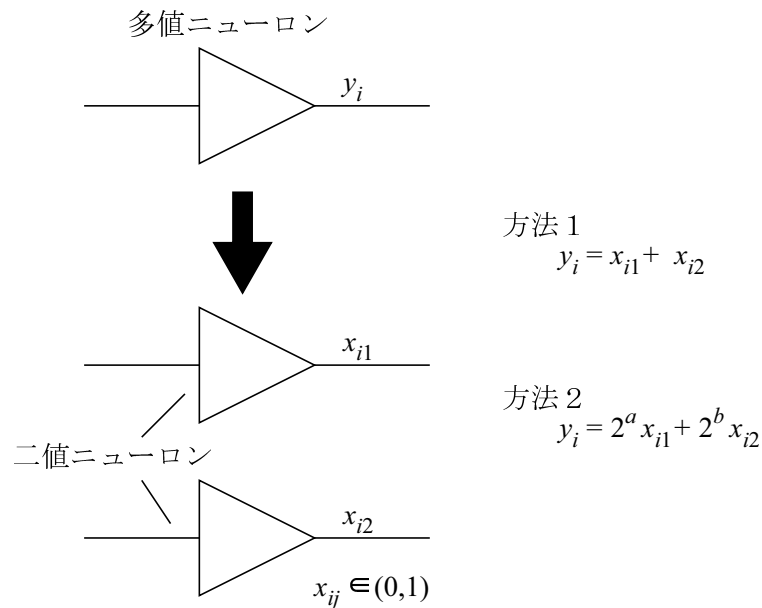


図 4.1 二値ニューロンによる多値表現

(4.1) は

$$E(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_{ii} x_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n w_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n \theta_i x_i \quad (4.2)$$

のように変形することができる。前章で述べたのホップフィールドネットワークおよびボルツマンマシンで求解可能なのは $w_{ii} = 0$ の場合のみである。多値ホップフィールドネットワークでは $w_{ii} \neq 0$ かつ x_i が多値であるとする。このネットワークが、(refefunction) の関数値が減少する方向に状態遷移することを示す。

第 i ニューロンから第 k ニューロンへの結合重みを $-w_{ij}$ とすると、第 k ニューロンの入力 u_k は

$$u_k = - \sum_{i=1, i \neq k}^n w_{ik} x_i - \theta_k \quad (4.3)$$

となる。

第 k ニューロンの出力 x_k に関する $E(x)$ の偏微分係数は

$$\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} = w_{kk} x_k + \sum_{i=1, i \neq k}^n w_{ik} x_i - \theta_k \quad (4.4)$$

$$= w_{kk} x_k - u_k \quad (4.5)$$

と表すことができる。 $E(x)$ は二次関数なので、離散値の中間点における偏微分係数の正負によって各離散値における $E(x)$ の大小を判定することが可能である。ここでは一

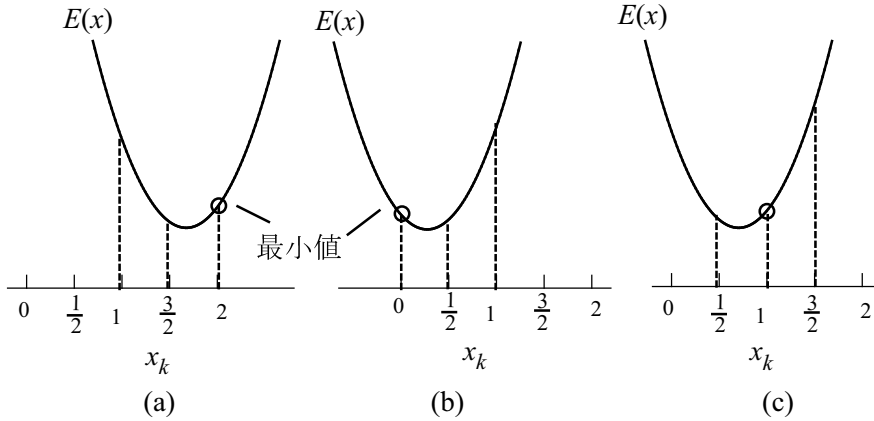


図 4.2 目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} > 0$)

例として、 $x_i = \{0, 1, 2\}$ の三値を取る場合を示す。 $w_{kk} > 0$ において、 $x_i = \{0, 1, 2\}$ の各々に状態のときに $E(x)$ が最小となる条件は図 4.2 から明らかである。

$$(a) \left[\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} \right]_{x_k=3/2} < 0 \text{ であれば } [E(x)]_{x_k} = 2 \text{ が最小}$$

$$(b) \left[\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} \right]_{x_k=1/2} > 0 \text{ であれば } [E(x)]_{x_k} = 0 \text{ が最小}$$

$$(c) \left[\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} \right]_{x_k=1/2} < 0 \text{ かつ } \left[\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} \right]_{x_k=3/2} > 0 \text{ であれば } [E(x)]_{x_k=1} \text{ が最小}$$

となる。上記の条件においてニューロン値が $E(x)$ になるようにニューロンの伝達関数を定義すれば、目的関数が減少する方向へネットワークの状態が遷移する。そこで、このような条件において、ニューロンの入出力特性をニューロン値が $E(x)$ となるニューロンの伝達特性は、

$$(a) \quad x_k(t+1) = 2 \quad \text{if} \begin{cases} u_k(t) > \frac{3}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) : \text{任意} \\ u_k(t) = \frac{3}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) = 1 \end{cases} \quad (4.6)$$

$$(b) \quad x_k(t+1) = 0 \quad \text{if} \begin{cases} u_k(t) < \frac{1}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) : \text{任意} \\ u_k(t) = \frac{1}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) = 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

$$(c) \quad x_k(t+1) = 1 \quad \text{if} \begin{cases} \frac{1}{2}w_{kk} < u_k(t) < \frac{3}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) : \text{任意} \\ u_k(t) = \frac{3}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) \neq 1 \\ u_k(t) = \frac{1}{2}w_{kk} \text{ かつ } x_k(t) \neq 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

となる。このニューロンへの入力重み付き総和とニューロン出力の関係を図 4.3 に示す。

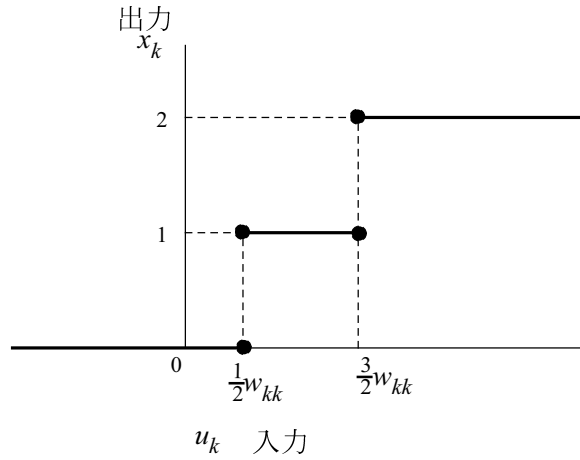


図 4.3 多値ニューロンの伝達関数 ($w_{kk} > 0$)

次に $w_{kk} < 0$ の場合を考える。 $E(x)$ は上に凸な関数となる。そのため $E(x)$ が最小となるのは、 x が最小または最大のときである (図 4.4)。関数 $E(x)$ が最小となる x は、 x の最小値と最大値の間値 (4.4 では $x = (0 + 2)/2 = 1$) における偏微分係数が正であれば最小の x で $E(x)$ 最小 (4.4(a)), 負であれば最大の x で $E(x)$ 最小 (4.4(b)), ゼロであれば x の最小値と最大値の両方において $E(x)$ が最小となる (4.4(c))。先ほどと同様にニューロンの入出力特性を求めると、

であるので、 $E(x)$ が最小となるのは

$$(a) \quad x_k(t+1) = 0 \quad \text{if} \quad u_k \geq 0 \quad (4.9)$$

$$(b) \quad x_k(t+1) = 2 \quad \text{if} \quad u_k \leq 0 \quad (4.10)$$

$$(a) \quad x_k(t+1) = 0 \quad \text{if} \quad u_k < w_{kk} \quad (4.11)$$

$$(b) \quad x_k(t+1) = 2 \quad \text{if} \quad u_k > w_{kk}$$

$$(c) \quad x_k(t+1) = 0, 2 \quad \text{if} \quad u_k = w_{kk}$$

同様に $w_{kk} = 0$ の場合は、 $E(x)$ は一時関数となるので、 $E(x)$ が最小となるのは x が最小または最大のときである。式 (4.5) から、

$$\frac{\partial E(x)}{\partial x_k} = -u_k \quad (4.12)$$

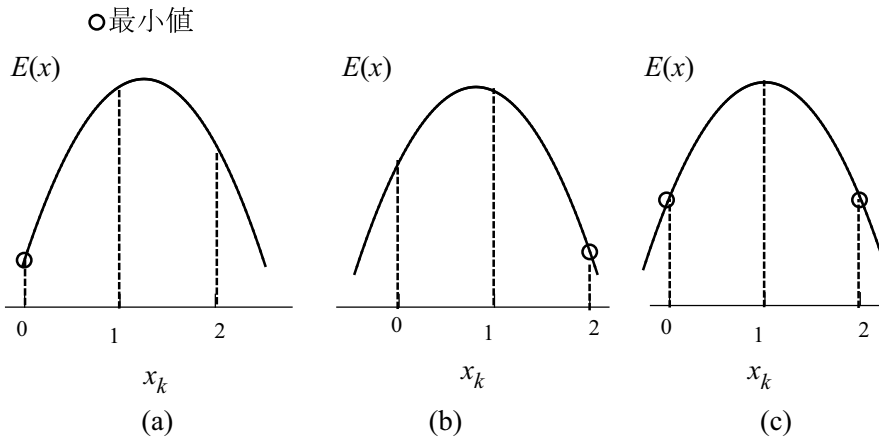


図 4.4 目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} < 0$)

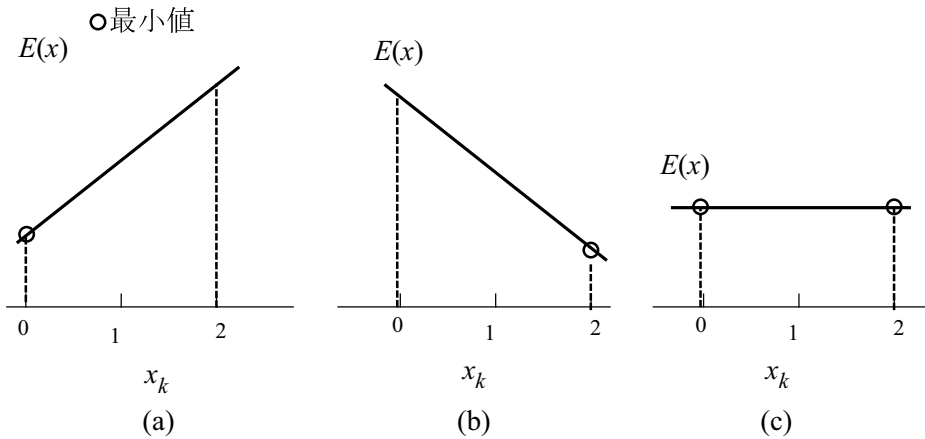


図 4.5 目標関数 $E(x)$ の最小値 ($w_{kk} = 0$)

であるので、 $E(x)$ が最小となるのは

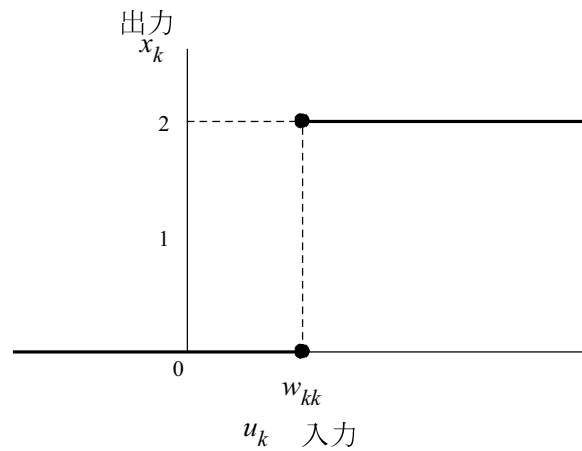
$$(a) \quad x_k(t+1) = 0 \quad \text{if} \quad u_k < 0 \quad (4.13)$$

$$(b) \quad x_k(t+1) = 2 \quad \text{if} \quad u_k > 0 \quad (4.14)$$

$$(c) \quad x_k(t+1) = 0, 2 \quad \text{if} \quad u_k = 0 \quad (4.15)$$

$$(4.16)$$

である。これは $w_{kk} = 0$ とおいたときの (4.12) と等価であるので、これら二つの場合は一つにまとめることが可能である。そこで、この二つの場合をまとめた $w_{kk} \leq 0$ におけるニューロンの入出力特性は (??) であり、これをグラフに描くと図 4.6 のようになる。これは、前章のボルツマンマシンにおける $t \rightarrow 0$ の入出力特性と等価である。

図 4.6 多値ニューロンの伝達関数 ($w_{kk} \leq 0$)

4.2.1 多値ホップフィールドネットワークの動作

例として次の目標関数を最小にする整数計画問題を考える。

$$E(x) = 3x_1^2 + 6x_2^2 + 6x_3^2 + 4x_1x_2 - 2x_2x_3 + x_3x_1 - 20x_1 - 31x_2 + x_3 \quad (4.17)$$

ただし、 $x_1, x_2, x_3 \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ 。この目標関数は $(x_1, x_2, x_3) = (2, 2, 0)$ において最小値 -50 をとる (図 4.7)。

別の目標関数の例を示す。

$$E(x) = 3x_1^2 + 3x_2^2 + 3x_3^2 + 3x_4^2 - 4x_1x_2 - 5x_1x_3 - 2x_1x_4 + 2x_2x_3 + 1x_2x_4 + 2x_3x_4 + 12x_1 - 12x_2 - 14x_3 - 9x_4 \quad (4.18)$$

ただし、 $x_1, x_2, x_3, x_4 \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ 。このネットワークは状態 (x_1, x_2, x_3, x_4) が $(4, 3, 4, 1)$ の時に $E(x) = -28$ の最小値をとり、 $(1, 2, 2, 1)$ 、 $(2, 2, 3, 1)$ のときにそれぞれ $E(x) = -25, -27$ の局所最適解を持つ。このような局所最適解をもつネットワークは、初期値や乱数によって最適解に収束しないことは既に述べた。これを確認するために数値シミュレーションを行った。その結果を図??に示す。

$x_3=0$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	0	-17	-28	-33	-32
1	-25	-38	-45	-46	-41
x_2 2	-38	-47	-50	-47	-38
3	-39	-44	-43	-36	-23
4	-28	-29	-24	-13	4

$x_3=3$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	57	43	35	33	37
1	26	16	12	14	22
x_2 2	7	1	1	7	19
3	0	-2	2	12	28
4	5	7	15	29	49

$x_3=1$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	7	-9	-19	-23	-21
1	-20	-32	-38	-38	-32
x_2 2	-35	-43	-45	-41	-31
3	-38	-42	-40	-32	-18
4	-29	-29	-23	-11	4

$x_3=4$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	100	87	80	79	84
1	67	58	55	58	67
x_2 2	46	41	42	49	62
3	37	36	41	52	69
4	40	43	52	67	88

$x_3=2$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	26	11	2	-1	2
1	-3	-14	-19	-18	-11
x_2 2	-20	-27	-28	-23	-12
3	-25	-28	-25	-16	-1
4	-18	-17	-10	3	22

図 4.7 目標関数 $E(x)$

4.2.2 多値ホップフィールドネットワークの応用

既に述べた通り多値ホップフィールドネットワークは二次の整数計画問題を解くことができる。二次整数計画問題を高速に求解できれば、さまざまな分野での利用が可能である。例えば、サッカーや野球の試合においてチームが総当りで試合をおこなうスケジューリングを行う。この際に、週末など視聴率の高くなる日に注目度の高い試合を行うといった条件付加すると二次整数計画問題となる [?]。しかしこのような問題は計算量がおくチーム数が 18 程度でも現実的な厳密解を求めるのは困難である??。

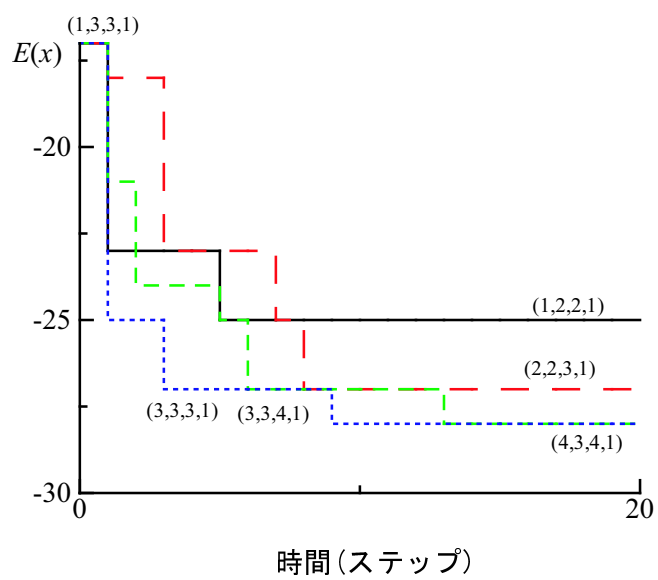


図 4.8 5 値 4 ニューロンネットワークのシミュレーション例

第5章 単電子回路によるボルツマンマ シンの構成

5.1 はじめに

単電子回路の際立った特徴の1つは、回路の動作が確率的であるということである。これは、電子のトンネリングが確率事象であることに起因する。単電子回路は入力に応じて、連続した電子のトンネリングを経てその内部状態を変化させる。この時、それぞれのトンネル事象の待ち時間は確率的な揺らぎをもつ。(すなわち、非常に短い時間のちトンネルするときのあれば、長い時間トンネルが起こらないときもある。) 結果として、単電子回路の出力状態は明確に予想できず、確率関数から推測できるだけである。このような確率特性を持つ電子回路でノイマン型アーキテクチャの回路を構成すると、確率に起因するエラー率が必ず生じる。そのため、エラー率を十分低くするようトンネル待ち時間に十分な時間をとる、すなわちクロック周波数を低くしなければならなくなる。そのため単電子回路の確率的特性は通常のデジタル応用には不利であるため、通常はできるだけ確率的特性を抑制するような構成で設計されてきた。しかしボルツマンマシンはニューロン単体が確率動作するネットワークである。さらに、ネットワーク内のどのニューロンが値を更新してするかというのも確率的事象である。単電子回路は本質的に確率動作をすることをうまく利用することができれば、ボルツマンマシンの確率動作をコンパクトな構成でつくることことができる。以下に単電子回路によるボルツマンマシンの構成を示す。

5.2 ボルツマンマシンに必要なニューロンの動作

ボルツマンマシンネットワークでは、それぞれのニューロンがすべての瞬間に自分自身の信号を更新するために他のニューロンを信号をやり取りしている。このニューロンの動作を表現するために、いくつかの変数を定義する。 w_{ij} をニューロン j からニューロン i への結合重みを定義する ($w_{ij} = w_{ji}$, $w_{ii} = 0$)。 T_i はニューロン i へのしきい入力であり、 x_i はニューロン i の出力と定義する。今後ニューロンの出力を 1 か -1 と表現する (すなわち $x_i \in \{1, -1\}$)。なぜなら、次節でニューロン回路はバイポーラ出力を生成するからである。

各ニューロンの動作 (図 5.1) は、入力に応じて以下のシグモイド確率関数に従い、ランダムに 1/-1 列の信号を出力する。

$$f(s) = \frac{1}{1 + \exp(-s/C)}, \quad f(s) = \frac{1}{1 + \exp(s/C)} \quad (5.1)$$

$f(s)$ は出力 1 を生成する確率で、 s は入力の重み付き総和である。(ニューロン i におい

図 5.1 ボルツマンマシンニューロンの動作。入力に応じてランダムなバイナリ列を出力する
 では、 $s = \sum w_{ij} x_i x_j + T_i$ 式中の C は、確率関数を調整する制御パラメータである。
 アニーリング動作の時に C を大きな値から 0 へとゆっくり変化させる。このアニーリ
 ング動作をすることによって、ボルツマンマシンネットワークはエネルギー関数

$$-\frac{1}{2} \sum \sum w_{ij} x_i x_j - \sum T_i x_i \quad (5.2)$$

が最小となるようその内部状態（出力 x_i の組）を変化させる。

5.3 単電子回路を用いたニューロン回路の設計

ボルツマンマシンの動作は単電子回路で構成されるデジタル発振器を用いることで
 実現しうる。ここでは、Tucker'a inverter に近い回路構成を持つデジタル発振器を設計
 し、設計した発振器がボルツマンマシンのニューロン回路に利用できることを示す。

5.3.1 単電子回路ニューロン回路

デジタル発振器は 1/-1 列の出力を生成する回路で、この回路を単電子回路で構成す
 れば、出力 1 の持続期間（または出力 -1）は電子のトンネリングのためランダムに揺
 らぐ。結果として、ボルツマンマシンの動作に必要なランダムの 1/-1 列の出力を得る

ことができる。ニューロンの機能を完全に実現するには、出力1の確率が信号入力(式5.1中の s)によって、また制御入力(式5.1中の C)により調整しうるシグモイド関数に従い、変調されるようにデジタル発振器を設計しなくてはならない。この目的のために、タッカー型単電子インバータを取り上げ、ニューロンの機能を出すように回路の構成を変更した。(タッカーのオリジナル回路の詳細は文献[?]を参照)

我々がニューロン回路として提案した回路を図5.2に示す。この回路は4つのトンネル接合(C_{j1} から C_{j4})と7つの入力キャパシタ($C_1 \sim C_7$)、2つの電源電圧 V_{dd} と $-V_{ss}$ からなる。回路は入力電圧 s (入力の重み付き総和)を受け、それに応じた1/-1列の出力電圧 V_{out} を生成する。 V_b は回路の動作点を調節するためのオフセット電圧である。この回路はバイポーラ型の出力を生成する。出力1は V_{dd} に近い値の正の電圧であり、出力-1は $-V_{ss}$ に近い値の負の電圧である。今後この回路を単位ニューロン回路と呼ぶ。

図 5.2 単電子ボルツマンマシンの単位ニューロン回路の構成

確率ニューロンの機能を出すために、回路が発振状態で動作するような回路パラメータを決定した。最適なパラメータを決定するために、回路を安定領域図を用いた。(この安定領域図は回路変数(すなわち電源電圧や入力電圧、キャパシタやトンネル接合の容量)の多次元空間によって単電子回路の内部状態を示すものである。安定領域

図の詳細は文献 [?] を参照)。キャパシタパラメータの望ましい組を以下に示す。

$$\begin{aligned}
 C_{j1} &= C_{j4} = 1 \text{ aF}, & C_{j2} &= C_{j3} = 2 \text{ aF}, \\
 C_1 &= C_2 = 12 \text{ aF}, & C_3 &= C_4 = 4 \text{ aF}, \\
 C_5 &= C_6 = 10 \text{ aF}, & C_7 &= 24 \text{ aF}.
 \end{aligned}
 \tag{5.3}$$

5.3.2 単位ニューロン回路の動作

回路には3つの島 (L, M, N) があり、この3つの島に存在する過剰電子数の組 (l, m, n) で内部状態が記述される。上記のキャパシタンスパラメータを仮定すれば、4つの変数 ($s, V_b, V_{dd}, -V_{ss}$) の4次元空間の安定領域図を描くことになる。図 5.3.2(a) から図 5.3.2(d) は2つの変数電圧 (s, V_b) を軸とした安定領域図の一部である。図の白い領域は安定領域で、全てのトンネル接合に対してクーロンブロッケード条件が成立しているため、回路は状態 $(0, -4, 0)$ か $(0, 0, 0)$ で安定している。島 M は出力ノードとなっているので、出力は M の過剰電子数 m に大きく依存する。回路の安定状態 $(0, -4, 0)$ と $(0, 0, 0)$ のうち前者の状態は正の電圧を出力し (出力 1)、後者は負の電圧を出力する (出力-1)。各状態での出力を電子数の組の前のアルファベットで表している。(H は出力 1、L は出力-1) 図の灰色の部分は不安定領域でここでは電子のトンネリングが頻繁に起こり、回路が2つかそれ以上の状態へと変化しつづけるランダムな 1/-1 列を生成する。不安定領域の幅は、図の (a) ~ (d) のように電源電圧 V_{dd} と $-V_{ss}$ を調節することで制御できる。

我々はこの回路をの動作線を図の PQ に示すように動作させる。入力 s を増加させていくにつれ、動作点が PQ 上の点 $H(0, -1, 0)$ 領域から $L(0, 0, 0)$ 領域へと移動し、出力 1 を生成する確率は 1 から 0 へと連続的に変化することが予想される。加えて、電源電圧 V_{dd} と $-V_{ss}$ を調節することで不安定領域の幅を変化させ、確率関数の制御パラメータを変化させることができるはずである。電源電圧 V_{dd} と $-V_{ss}$ を調節する際、入力ゼロ ($s = 0$) の時に不安定領域中の線の中心にいるように、従って出力 1 の確率が 0.5 になるようにオフセット電圧 V_b も同時に調整する。今後 ($V_{dd}, -V_{ss}, V_b$) の組を制御パラメータセットと呼ぶことにする。

我々はこの回路の動作を、電荷分布や静電エネルギー、トンネル確率の基本的な式を結合させたモンテカル口法を用いてシミュレーションを行った。(詳細は文献 [?] を参照) 用いたパラメータは、5.3 章で述べられたものと同じであり、 C_{j1} と C_{j4} のトン

ネル抵抗は 5 M 、 C_{j2} と C_{j3} のトンネル抵抗は 100 K を仮定した。温度は 0 K を仮定している。

シミュレーション結果を図??に示す。この時、図 5.3.2(c) 中の動作線 PQ に相当する制御パラメータセットは $(2.797\text{mV}, -3.361\text{mV}, -0.865\text{mV})$ である。図は出力電圧の波形 (ランダムな $1/-1$ 列) の例を 2 つ示す。入力電圧は: (a) $s = 1\text{mV}$ (図 5.3(c) 中の点 Y) と (b) $s = -1\text{mV}$ (図 5.3(c) 中の点 X) である。出力 1 の確率は入力 s によって変化する。入力 s が負の大きな値 (図??(a)) の時は負の出力 (出力 -1) が優位であり、一方入力 s が正の大きな値 (図??(b)) の時は正の出力 (出力 1) が優位になる。中間状態もまた生成される。(すなわち図 5.4(a) 中の状態 $(0, -1, 1)$ や $(-1, 0, 0)$ である。しかし、この状態にある時間は非常に短いため問題にならない。この例では、回路は $L(0, 0, 0) \rightarrow L(-1, 0, 0) \rightarrow L(0, -1, 0) \rightarrow L(0, -1, 1) \rightarrow L(0, 0, 0)$ のようなサイクルで変化する。

いくつかの制御パラメータセット $(V_{dd}, -V_{ss}, V_b)$ での出力 1 の確率を入力 s の関数として図??に示す。これは出力波形を μs の間観測して出力 1 の総合時間を計算したものである。この図からボルツマンマシンに要求される確率特性が得られていることがわかる。制御パラメータセットを調整することで確率も制御されている。各曲線についている # 1 から # 4 の数字はその確率特性を出す制御パラメータセットを指し示す。図 5.3.2(b) に制御パラメータセットの設定のための図を示す。この図の # 1 から # 4 の数字は図 5.3.2(a) の曲線を生成するパラメータセットである。曲線 # 1 の状況では、確率動作をしない単純なしきい素子として振る舞う。これは、式 5.1 において $C = 0$ に相当する。(厳密に言えば、得られた特性は式 5.1 の波形を幾分違う。ロジスティック関数というよりむしろ線形関数である。この特性による違いは後述。

5.4 単電子ボルツマンマシンのネットワーク構成

前節で設計したボルツマンマシンニューロン回路を組み合わせることでネットワークを構成できる。ここでは結合回路として容量結合と MOS トランジスタを用いた構成を述べる。

5.4.1 容量結合によるネットワーク構成

ボルツマンマシンは単位ニューロン回路を結合させることで構成できる。ネットワーク全体の構成を図 5.6 に示す。ネットワークはいくつかの単位ニューロン回路とそれに接続されているバッファインバータ、負重みインバータ、結合キャパシタで構成される。バッファインバータの出力 ($1+, 2+, \dots$) をニューロンの出力を定義する。負重みインバータは、ニューロンの出力 ($1+, 2+, \dots$) に反転電圧信号 ($1-, 2-, \dots$) を生成する。この反転電圧信号は負の重み結合を実現するために用いられる。(バッファインバータと負重みインバータには、図 5.7 で示す単電子インバータを用いた。) ニューロンの出力と反転出力は前段へフィードバックして単位ニューロン回路の入力となる。2つのニューロン間の結合は、結合キャパシタ C_{ij} で構成する。各ニューロンのしきい値は、結合キャパシタ C_i に接続された正のバイアス電圧 V_1 (もしくは負の電圧 V_2) で設定される。

ニューロン間の結合重みは結合キャパシタの容量値を決定することで、所望の値に設定できる。各重み(式 5.2 中の W_{ij} と T_i) は次式で与えられる。

$$|W_{ij}| = \frac{C_{ij}}{C_{ij} + C_i}, \quad |T_i| = \frac{C_i}{C_{ij} + C_i}. \quad (5.4)$$

正の重み ($W_{ij} > 0$) の場合は、結合キャパシタはニューロン i の入力とニューロン j の出力 ($1+, 2+, \dots$) の間に接続される。負の重み ($W_{ij} < 0$) の場合は、結合キャパシタはニューロンの入力と反転出力 ($1-, 2-, \dots$) の間に接続される。しきい容量結合は ($T_i > 0$) の場合はニューロンの入力と正のバイアス V_1 の間に接続され、($T_i < 0$) の場合はニューロンの入力と負のバイアス $-V_2$ の間に接続される。

5.4.2 MOS トランジスタ結合回路によるネットワーク構成

5.5 ネットワーク回路の求解動作

結合重みを適切に設定することで、ネットワーク回路上に様々な最適化問題を実現できる。ここでは、容量によるネットワーク結合を用いて我々はいくつかの問題のネットワーク回路を設計し、問題の求解をコンピューターシミュレーションし正しい動作を行っていることを確認した。例として、max cut 問題を解くネットワーク回路の例

を紹介する。次節では、まず例題の実現のため結合重みを決定する。次に、決定された結合重みをもつネットワーク回路の求解動作を示す。

5.5.1 Max Cut 問題をネットワーク回路で実現する方法

max cut 問題は次のようなものである。辺に正の重みを持ったグラフ $G = (V, E)$ が与えられた時、節点 $V = \{1, 2, \dots, n\}$ を2つの組 V_0 と V_1 に分割する。このとき、辺の1つの終点 V_0 に属し、もう一方が終点 V_1 に属するような辺の重みの和が最大になるような組合せを求まる。この問題のコスト関数を定式化するために、いくつかの変数を定義する。辺 $\{i, j\}$ についている重みを d_{ij} と定め（定義により $d_{ij} = d_{ji}$ ）、変数 x_i を 次のような 1/-1 変数と定義する。

$$\begin{aligned} x_i &= 1(\text{if } i \in V_1) \\ &= -1(\text{if } i \in V_0) \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$(5.6)$$

次に、max cut 問題を以下のように定式化する。

$$\sum \sum \frac{d_{ij}}{4} (x_i - x_j)^2 \quad (5.7)$$

を最大にする。さらに次のように書き直せる。

$$- \sum \sum d_{ij} x_i x_j \quad (5.8)$$

$$(5.9)$$

を最小とする。

max cut 問題は各ニューロンの出力が変数 x_i を表すようにネットワーク回路を設計することで実現する。例として図 5.8(a) のような重み付きグラフを取り上げ、グラフに一致した構造のネットワーク回路を設計した。この例題を実現するため、5つのニューロンを持ったネットワーク回路を用意し、ニューロン問題の節点 i を i 番目のニューロン ($i = 1 \sim 5$) で表すようにする。必要なニューロン間の結合重み W_{ij} は、エネルギー関数式 5.2 と目的関数式 5.9 を比較して図 5.8(b) のように決定した。この重みの値から、式 5.4 を用いて結合キャパシタンスの値を決定した。結果を図 5.8(c) に示す。この結合キャパシタンスを含んだネットワーク回路を今後サンプルネットワークと呼ぶ。

5.5.2 サンプルネットワークのエネルギー関数とローカルミニマム

サンプルネットワークの内部状態は5つのニューロンの出力 (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) で表現される。 (x_i は 1 か -1) 読みやすくするため、値を符号で (+ + - + -) のように表す。 + は $x_i = 1$ を表し、- は $x_i = -1$ を表す。 サンプルネットワークは32の内部状態が考えられる。式5.2から計算した全ての状態でのエネルギー関数の値を図5.9に示す。状態 (- + + + -) と (+ - - - +) が最小値で問題の正しい解を表す。(つまり、図5.8(a)のグラフを最大にカットする組合せは、{1, 5} と {2, 3, 4} である。) ネットワークはその内部状態がハミング距離1の遷移のみが許される。次に低い値である状態 (- + + - +) と (+ - - + -) から最小状態へは、ハミング距離1のパスがない。それ故この2つはローカルミニマムとして振る舞う。

5.5.3 サンプルネットワークの求解動作

問題の求解には、ある与えられた初期状態から始めてネットワーク回路がエネルギー最小の状態へと収束することが重要である。サンプルネットワークのこの振る舞いを観測するために、我々はコンピュータシミュレーションでネットワークの遷移を調べた。

まず、アニーリング動作をさせないでサンプルネットワークを動作させた。(つまり、全ての単位ニューロン回路が単一しきい値の状態 (図5.3.2(a)の#5) に設定した。) 結果を図5.10に示す。ネットワークは初め状態 (+ + + + +) に設定しておき、それからネットワークに抑制を与えないで変化させた。ある程度の遷移時間の後、回路は最終状態で安定化した。この手順を乱数の値を変えて、何度も試行した。3つの試行の結果を図に示した。ネットワークは時には最小状態 (- + + + -) か (+ - - - +) に収束できるが (図中の1の遷移)、度々極小状態 (+ - + + -) または (- + - - +) に捕らわれ、最小状態へとたどり着く事ができない。(図中の2, 3の遷移)

次に、アニーリング動作の下サンプルネットワークを動作させた。アニーリング動作では、単位ニューロン回路の制御パラメータを適切なスケジュールに基づき、時間の経過と共に徐々に変化させる。今回の試行では、制御パラメータセットを $V_{dd} = 2.72 + 0.822e^{\frac{t}{50}}$ のスケジュールに従い変化させた。($-V_{ss}$ と V_b も図5.3.2(b)に従って変化する。) このとき変数 t は時間で、単位は ns である。アニーリング動作の下でのシミュレーション結果を図5.11に示す。ネットワークは初め状態 (+ + + + +) に設定しておき、それからネットワークにアニーリング動作以外の抑制を与えないで変化させた。結果を図に示している。我々はこの試行を何度も繰り返し、全ての試行が正しく収束する

ことを確認した。このように、ネットワークの最小状態を見つけることができ、そこから問題の正しい解を見つけることができる。

図 5.3 図 5.2 の単位ニューロン回路の安定領域図。軸は入力電圧 s とオフセット電圧 V_b である。回路の容量パラメータは文中を参照。電源電圧 V_{dd}, V_{ss} を増加させ、それぞれに対応した安定領域図を図 5.3.2(a) から図 5.3.2(d) にします。電源電圧は $(V_{dd}, -V_{ss})$: (a) (2.723 mV, -3.287 mV), (b) (2.738 mV, -3.302 mV), (c) (2.797 mV, -3.361 mV), (d) (2.870 mV, -3.434 mV)。

図 5.4 単位ニューロン回路の出力波形の例 (パラメータセットは (2.797 mV, -3.361 mV, -0.865 mV)。二つの入力電圧値に対する応答例を示す:(a) $s = 1$ mV, (b) $s = -1$ mV。温度は 0 K を仮定。

図 5.5 単位ニューロン回路の確率特 (素子パラメータは文中のものを仮定): (a) は制御パラメータ ($V_{dd}, -V_{ss}, V_b$) の異なる 4 つの条件における、入力に対する出力 1 を生成する確率。(b) は制御パラメータを設定するグラフである。制御パラメータは図 (b) のパラメータセット 1 ~ 4 を用いて、図 (a) 1 から 4 の曲線を計算した。

図 5.6 容量結合による単電子ボルツマンマシンネットワークの構成。ニューロンの出力 ($1+$, $2+$,) とその反転出力 ($1-$, $2-$,) が、単位ニューロン回路の入力としてフィードバックする。ニューロン間の結合は結合容量 C_{ij} で実現する。またニューロンのしきい値は結合容量 C_i を通じて与える。

図 5.7 バッファと負重み生成のために用いた単電子インバータの回路図

図 5.8 Max cut 問題の例とそれに対応した結合容量: (a) 重み付グラフ、(b) ニューロン間の結合重み W_{ij} , (c) ネットワーク回路の結合容量

図 5.9 Fig. 5.8(a) の例題に対応するネットワークのエネルギー関数图中的記号 (+ + - + -) は、5ニューロンの出力の組を表す。状態 (- + + + -) と (+ - - - +) は問題の解を表すエネルギー関数の最小値である。次にエネルギー関数の低い (+ - + + -) は (- + - - +) 局所最適解を表す極小値である。

図 5.10 State transition in the sample network without the annealing (computer simulation). The results of three trials are plotted.

図 5.11 State transition in the sample network under the annealing (computer simulation). The results of a trial is plotted. The network can successfully reach the global minimum state.

第6章 単電子回路による多値ホップ フィールドネットワークの構成

6.1 ホップフィールドネットワークの概念

6.1.1 一般的なホップフィールドネットワーク

ホップフィールドネットワークは組合せ最適化問題を解くための計算装置であり、特定のリカレントネットワークを用いる。(詳細は文献*****を参照) ネットワークの構成を図5.1に示す。ネットワークはニューロン(図中の三角形)と結合(図中の黒点)を構成する。

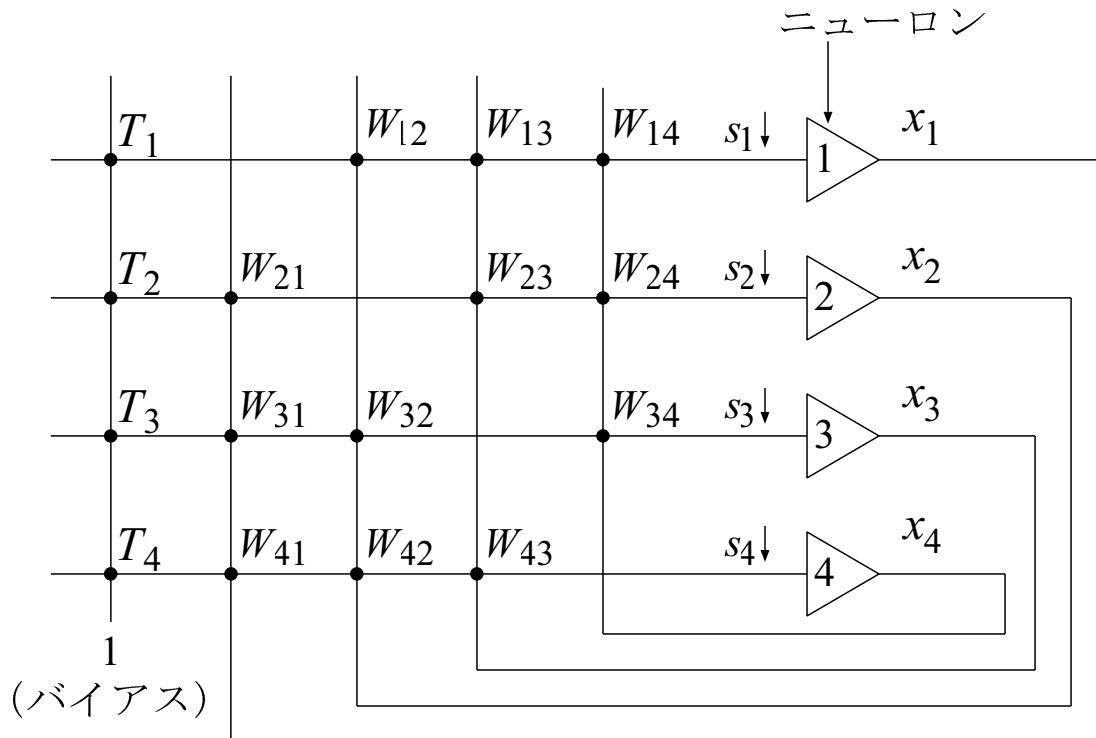


図 6.1 Concept of the Hopfield network. Denoted by W_{ij} is the weight of connection between neuron i and neuron j ($W_{ij} = W_{ji}$), θ_i is the weight of connection between neuron i and a bias of 1, s_i is the input for neuron i given by Eq. 1 in the text, and x_i is the output of neuron i .

で構成される。ここのニューロンの出力は他のニューロンの入力へフィードバックされる。図中の W_{ij} はニューロン j からニューロン i への結合重みであり、 θ_i は 1 に設定されたバイアスとのバイアス結合重みである。そして、 x_i はニューロン i の出力である。結合重みである W_{ij} と θ_i は、 $W_{ij} = W_{ji}$ かつ $W_{ii} = 0$ という制約の下で望ましい値を取る事ができる。一般的なホップフィールドネットワークでは、ニューロンの出力 x_i は 2 値である。(例えば $x_i = 1$ または 0) ニューロンの出力 x_i の組はネットワーク

の”状態”と呼ばれる。

このネットワークにおいて、個々のニューロン x_i は下記の等式に従って、積和入力をとる。

$$s_i = \sum_j W_{ij} x_j + \theta_i. \quad (6.1)$$

そして、個々のニューロンは、ある更新関数によって積和入力に対応する出力 x_i ($= 1$ または 0) を生成する。このネットワークでは、すべてのニューロンが各々の出力を連続的に更新するよう並列に動作している。そして、ネットワーク全体は更新課程を経てある最適の配置へと収束する。結合重みと適切な更新関数を設定することで、与えられた最適化問題をホップフィールドネットワークにマッピングする事ができる。このように、問題の解を求めることは、ネットワークの最適の配置を見つけることへ置き直す事ができる。救済の際、まず、ネットワークを初期状態(どのような状態でもかまわない)に設定する。それから、何も規制をしないでネットワークの状態を変化させる。ある移行時間の後、ネットワークは最終状態へと収束する。収束が成功すれば、ネットワークの最終状態から、問題の解が得られる。

例として、以下のような2次の整数計画問題を取り上げる。係数 A_{ij} と B_i ($A_{ij} = A_{ji}$, $A_{ii} \neq 0$; $i, j = 1, 2, \dots, n$) の組が与えられた時、下記の目的関数を最小化する。

$$\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n A_{ij} x_i x_j + \sum_i^n (B_i + \frac{1}{2} A_{ii}) x_i. \quad (6.2)$$

この問題を解くために、それぞれのニューロンの出力が??式の変数 x_i を表すようなホップフィールドネットワークを準備する。2値出力の一般的なホップフィールドネットワークでは、容認できる問題は変数が2値(例えば $x_i = 1$ または 0) であるものに限定される。そのような2値の制約の下で2乗の項 x_i^2 は x_i に置き換えることができる。その結果、式6.2は次のように書き換えられる。

$$\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{j \neq i}^n A_{ij} x_i x_j + \sum_i^n (B_i + \frac{1}{2} A_{ii}) x_i. \quad (6.3)$$

この0-1問題は、図6.2(a)のような単一しきい値を持つ更新関数を用いることでホップフィールドネットワークにマッピングできることが証明されている。その時の結合重みは図6.2(b)のように設定する。式6.3で表される目的関数を最小とする解 x_i の値はネットワークの最終状態から読み取ることができる。つまり、解の値 x_i はニューロン i の出力と等しい。

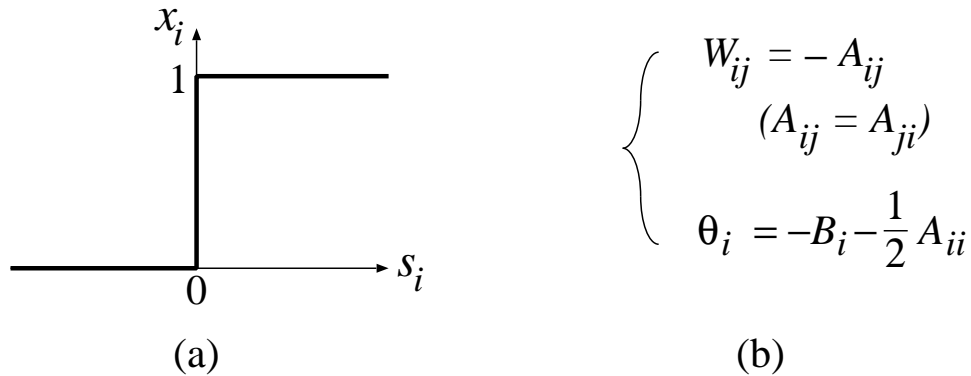


図 6.2 Elements for an ordinary (binary) Hopfield network: (a) the transfer function for neurons, and (b) the connection weights for mapping the quadratic 0-1 programming given by Eq. 2 in the text.

6.1.2 多値ホップフィールドネットワーク

ここで、式 6.2 で表された問題について 0-1 の制約を緩め、各変数 x_i は 0 から N までの整数をとることができるかと仮定する。それゆえ、この問題は次のように表される：
minimize

$$\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^n A_{ij} x_i x_j + \sum_i^n B_i x_i, \quad \text{where } x_i \in 0, 1, 2, \dots, N \ (i = 1, 2, \dots, n). \quad (6.4)$$

この拡張された問題（2次の整数計画問題）は一般的なホップフィールドネットワークの可能な範囲を超えている。この問題の求解には、より高度なアーキテクチャが必要となる。（厳密に言えば、一般的なホップフィールドネットワークでも多数のニューロンを用いることでこの問題を解く事ができる。しかし、LSI化するには実用的ではない。）この要求に答えるために、相吉と吉川は多値変数を扱う改良型ホップフィールドネットワークを開発した。（文献**** **を参照）このネットワークは多値ホップフィールドネットワークと呼ばれる。

この多値ホップフィールドネットワークは一般的なホップフィールドネットワークと同じ構成であり（図 6.1 参照）、また $W_{ij} = W_{ji}$ かつ $W_{ii} = 0$ という同じ制約をもつ。これら 2 つの違いはニューロンの動作である。多値ホップフィールドネットワークのニューロンは、複数のしきい値を持った階段状更新関数に従い、量子化された出

力を生成する。ニューロン i に要求される更新関数を図 6.3(a) に示す。この多値ニュー

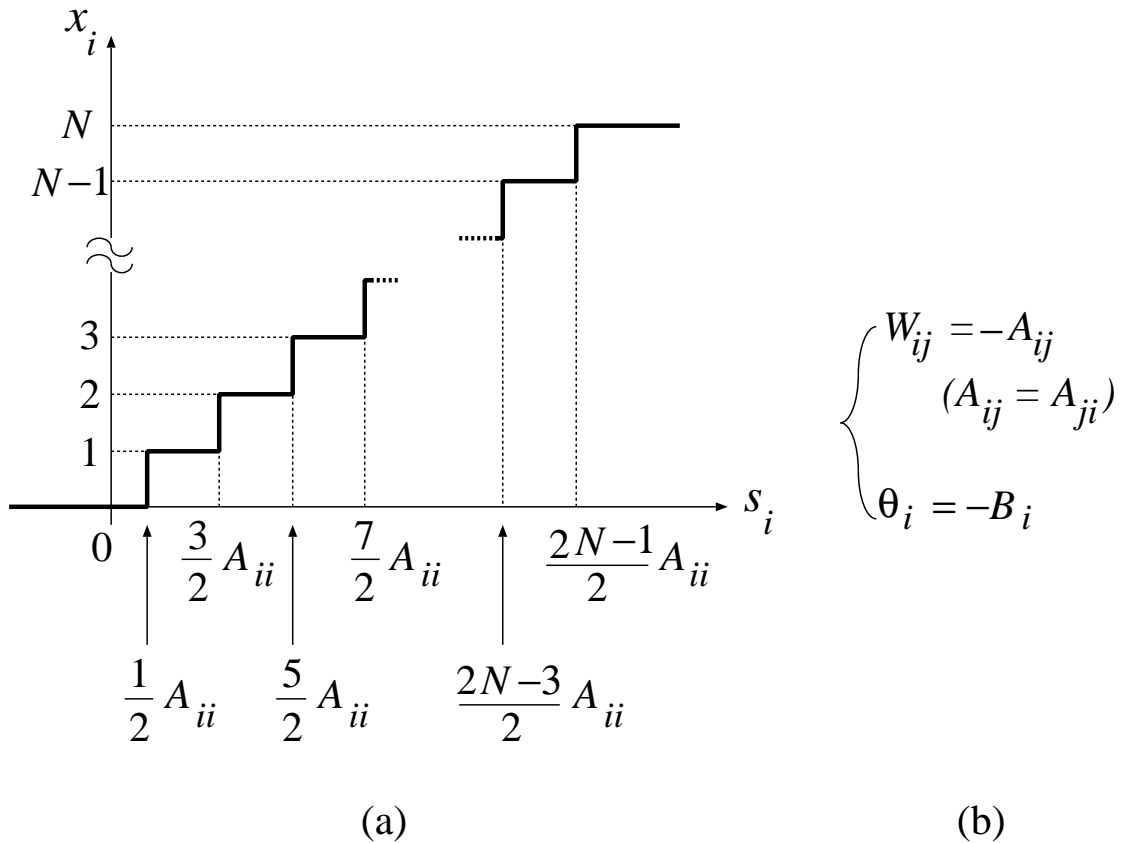


図 6.3 Elements for the multiple-valued Hopfield network: (a) the staircase transfer function for neuron i , and (b) the connection weights for mapping the quadratic integer programming given by Eq. 4 in the text.

ロンを用いることで、式 6.4 で表される 2 次の整数計画問題はホップフィールドネットワークにマッピングされる。その時の結合重みは図 6.3(b) で与えられる。一般的なホップフィールドネットワークと同様に、問題の解はネットワークの最終状態から得られる。つまり、解の値 x_i はニューロン i の出力と等しい。(厳密に言えば、ニューロン i の更新関数の形は係数 a_{ii} の符号に依存する。図 6.3(a) で示された関数は、 $A_{ii} > 0$ の場合である。 $A_{ii} < 0$ と $A_{ii} = 0$ の場合は文献 *** と *** を参照。) 次に、与えられたニューロンが図 6.3(a) ではなく、図 6.4(a) で示されるような更新関数であると仮定する。(図 6.4 の a, b, c は更新関数の形を決定する固有係数である。) これが、次節で述べられるニューロンデバイスの特性である。式 6.4 で表された問題もまた 図 6.4(b) で与えられた結合重みを用いることでうまくマッピングすることができる。

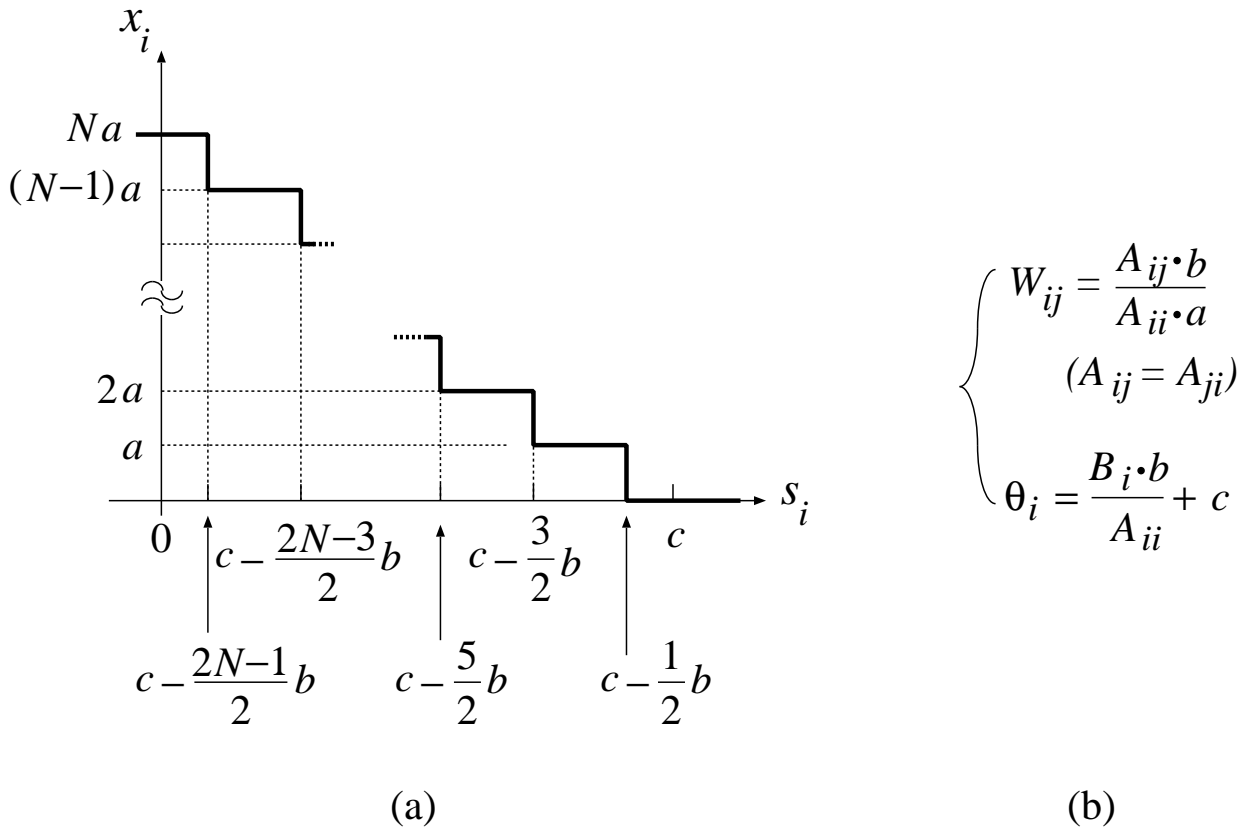


図 6.4 Modified elements for the multiple-valued Hopfield network: (a) the modified staircase transfer function for neuron i , and (b) the connection weights for mapping the quadratic integer programming given by Eq. 4 in the text.

6.2 単電子回路を用いた多値ニューロンの構成

6.2.1 単電子回路の概念

単電子回路はトンネル接合とキャパシタで構成される電子回路で、個々の電子の移動を制御することによって電氣的に（必要な機能を）出すように設計されている。（詳細は文献****を参照）単電子回路ではトンネル接合で囲まれた島と呼ばれる微小空間がある。各島内の電子はトンネル接合を通して他の島へ移動することができる。この回路内の状態は電子の配置（すなわち各島に分布している電子のパターン）によって決定される。この回路は入力に応じて、電子のトンネルを起こし内部の電子配置を変える。その結果、入力の関数として出力電圧が決定される。電子配置の変化は、低温ではトンネリングによって回路の自由エネルギーが減少する方向へとトンネリング

する。この現象はクーロンブロッケードと呼ばれる。この現象を利用することで、単電子回路はデジタル論理やメモリーなどのさまざまな機能を電子の移動を制御することで実現する。単電子回路は、高集積化と低消費電力を実現する可能性があり注目を集めている。単電子回路を構成する際のキーとなるのはトンネル接合やキャパシタンスといった回路要素を非常に小さい寸法（50nm かそれ以下）で作ることである。なぜなら、クーロンブロッケードはそれぞれの要素の容量がフェムトファラッドのオーダーかそれ以下のときに現れるからである。このようなナノファブリケーションの技術は、まだ未熟ではあるが着実な進歩を遂げている。論理ゲートやメモリーセルなどのいくつかの基本素子は最近作れている。そして、近い将来単電子回路による LSI の試作が期待される。

6.2.2 単電子回路による多値特性

単電子回路の際立った特性は「量子化された振る舞い」見せることである。この量子化は電子のトンネリングによってのみ単電子回路の島の電荷が変化することに起因する。なぜなら、1個の電子がトンネル事象によって移動すると、島の電荷の変化は必然的に電荷の単位に量子化される。それゆえ、島の電荷は不連続に変化し、島のポテンシャルもまた不連続である。結果として、単電子回路の出力電圧は入力電圧に対して不連続な関数となる。つまり、簡潔な構成で多値ニューロンを構成することができる。

6.2.3 単電子回路で多値ニューロン回路を構成する

ここでの我々の目的は出力端の島の電荷（その結果として出力電圧）を入力に対し階段状に変化させる単電子回路をつくることである。この目的のために、我々は *Tucker* 型単電子インバータを採用し、階段状の特性を出すために回路パラメータを変更した。（*Tucker* 型単電子インバータの詳細は文献****を参照）我々がニューロン回路に用いた単電子回路を図 6.5 に示す。この回路は4つのトンネル接合 (C_{j1} から C_{j4}) と2つの入力キャパシタ (C_1 と C_2)、2つのバイアスキャパシタ (C_3 と C_4)、そして出力キャパシタ (C_5) と2つの電源電圧 V_{dd} と $-V_{ss}$ からなる。回路は入力電圧 V_{in} を受け、それに応じた出力電圧 V_{out} を生成する。回路には3つの島 (L , M , N) があり、この3つの島に存在する過剰電子数の組 (l, m, n) で内部状態が記述される。

キャパシタのパラメータ次第でこの回路は複雑な内部状態を見せ、それゆえにさま

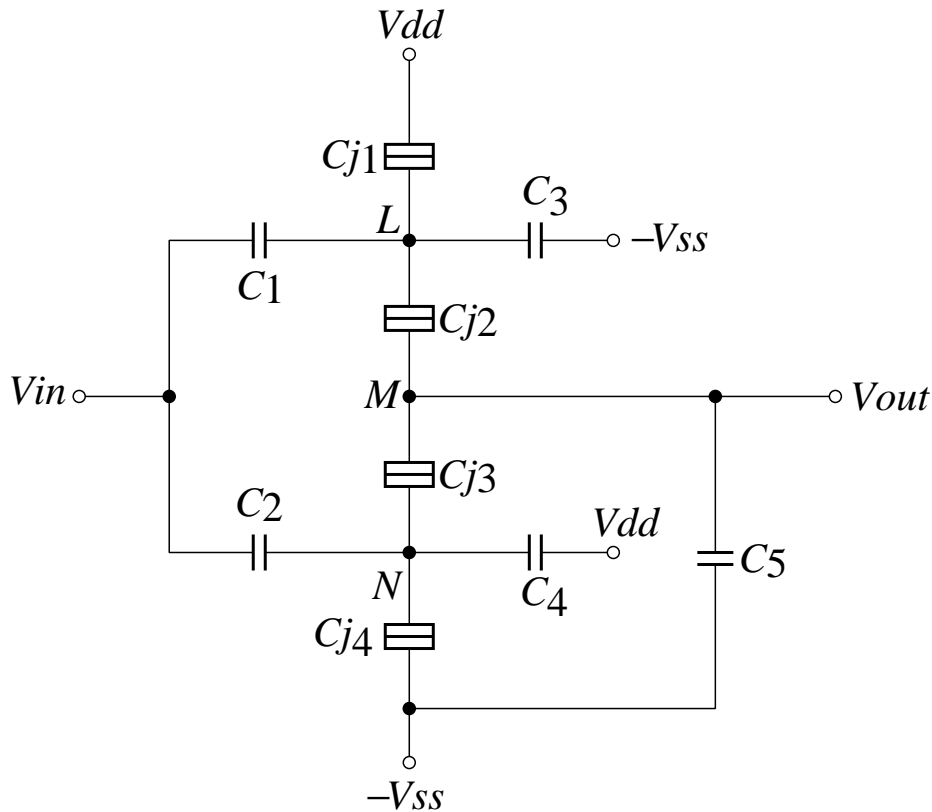


図 6.5 Configuration of the neuron circuit for the multiple-valued Hopfield network.

ざまな入力-出力特性を見せる。多値ニューロン回路をつくるには、回路が階段状の特性を出すようにパラメータを設定しなければならない。最適なパラメータを決定するために、我々は回路の安定領域図を用いた。(この安定領域図は回路変数(すなわち電源電圧や入力電圧、キャパシタやトンネル接合の容量)の多次元空間によって単電子回路の内部状態を示すものである。安定領域図の詳細は文献****を参照)最適な組合せはどんな階段状波形を必要とするかによる。言い換えれば、どのような図 6.4(a)の係数 a , b , c の値が必要かということになる。パラメータの組合せの例を示す。

$$\begin{aligned}
 C_{j1} &= C_{j4} = 3 \text{ aF}, & C_{j2} &= C_{j3} = 6 \text{ aF}, \\
 C_1 &= C_2 = 5 \text{ aF}, & C_3 &= C_4 = 10 \text{ aF}, & C_5 &= 150 \text{ aF}, \\
 V_{dd} &= 4.85 \text{ mV}, & -V_{ss} &= -0.17 \text{ mV}.
 \end{aligned}
 \tag{6.5}$$

このパラメータでの回路の入出力特性を図 6.2.3 に示す。入力電圧が増加するにつれ出力電圧は一定の割合で不連続に減少している。結果的に階段状の特性が得られた。(我々

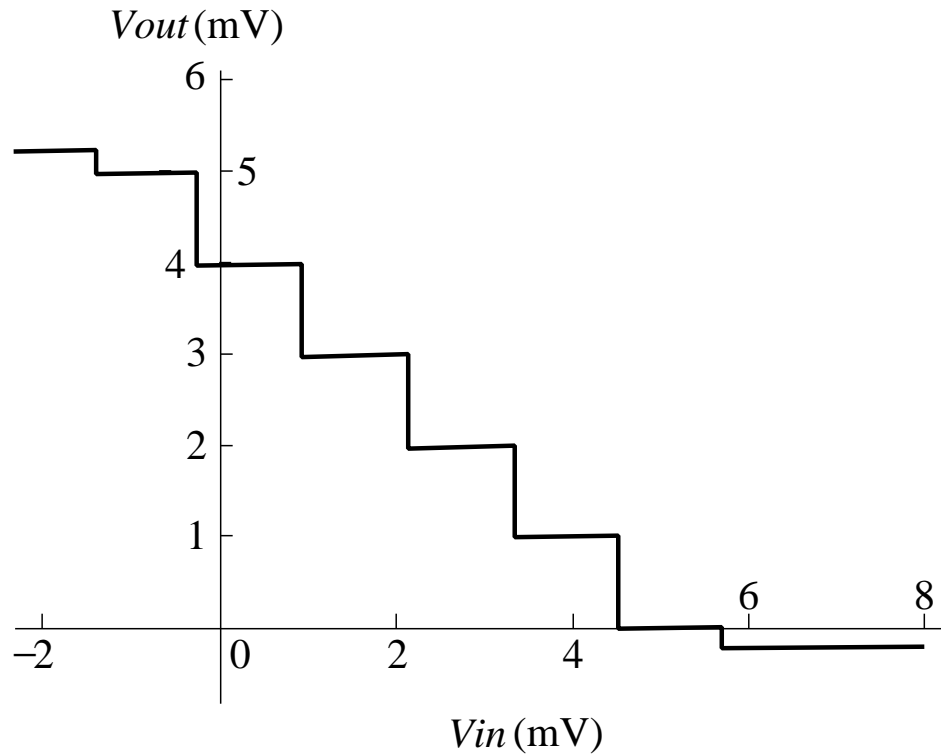


図 6.6 The transfer function (input-output curve) of the multiple-valued neuron circuit of Fig. 5. Simulated using the Monte Carlo method given in Ref. 8. The temperature is 0 K.

は単電子回路の動作を、電荷分布や静電エネルギー、トンネル確率の基本的な式を結合させたモンテカルロ法を用いてシミュレーションを行っている。モンテカルロ法の詳細は文献****を参照)

6.2.4 ニューロン回路の安定領域図

安定領域図を用いてニューロン回路の動作を説明する。この回路における先述のパラメータでの安定領域を図 6.7 に示す。(この図では入力電圧 V_{in} と電源電圧 V_{dd} を軸にとっている。 $-V_s$ の値は $-0.17mV$ に固定している。) 図の (l, m, n) と書かれた白い領域は内部状態が (l, m, n) で安定している安定領域である。図の灰色の部分は不安定領域でここでは電子のトンネリングが頻繁に起こり、回路が 2 つかそれ以上の状態へと変化しつづける。安定な領域は色々な電子状態で存在し、それぞれの安定領域は他のものと重なりうる。

この回路を図 6.7 中の PQ で示された動作線上で動作させる。(式 6.5 にあるように

$V_{dd} = 4.85 \text{ mV}$) この動作線上では安定領域の重なりはないので、回路の内部状態は入力電圧 V_{in} によって一意に決まる。例えば、図中点 P では状態 $(0, -4, 0)$ をとり、点 R では状態 $(0, -2, 0)$ をとる。入力電圧を点 P から増加させていくと状態は次のよう

に変化していく。 $(0, -4, 0), (0, -3, 0), (0, -2, 0), (0, -1, 0), (0, 0, 0)$
 入力電圧 V_{in} が増加するにつれ、出力端の島にある電子数が1個ずつ増加する。その結果出力電圧は入力に対して階段状の特性を持ち、図 6.2.3 のようになる。

回路パラメータを設計することで階段状波形の段数を制御することができる。図 6.2.4 に先ほどとは違うパラメータでの入出力特性を示す。

6.3 多値ホップフィールドネットワークの動作

6.3.1 多値ホップフィールドネットワークの構成

多値ホップフィールドネットワークは先述のニューロン回路を結合させることで構成できる。ここで、例題として2次の整数計画問題を解くネットワークを取り上げる。まず始めに例題の結合重みの値を決定する。次に、決定された結合重みを用いて、求解のネットワーク動作をシミュレーション解析する。次の2次整数計画問題が与えられたとする minimize

$$\begin{aligned} 3x_1^2 + 6x_2^2 + 6x_3^2 + 4x_1x_2 - 2x_2x_3 + x_3x_1 \\ -20x_1 - 31x_2 + x_3, \end{aligned} \quad (6.6)$$

$$\text{where } x_i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}.$$

ホップフィールドネットワークでの求解に先立って、すべての変数 x_i に対し関数の取りうる値を計算した。計算結果を 6.3.1 に示す。この関数は最小値 -50 をとり、その時の変数 x_i は $x_1 = 2, x_2 = 2, x_3 = 0$ である。この例題のために、 i 番目のニューロンが問題の変数 x_i に対応しているように3つのニューロンを持ったネットワークを用意する。このニューロンは図 6.7 で示した特性のものを用いる。(固有係数の値は $a = 1.00 \text{ mV}, b = 1.18 \text{ mV}, c = 5.13 \text{ mV}$ である。) 要求されるニューロン間の結合は図 6.4(b) の関係式によって決定される。ネットワーク全体の構成を決定された結合重みと共に図 6.3.1 に示す。

6.3.2 ネットワークの求解動作

問題の求解において、ある与えられた初期状態から始めるとネットワークが最低エネルギー状態へと収束するはずである。例題のネットワークがこのように振る舞うことを確かめるために、ネットワークの状態遷移をシミュレーションした。

ネットワークはニューロン部と重み結合部からなる。(図 6.3.1 参照) それぞれの部分は以下のような方法でシミュレーションを行った。(i) ニューロン部: モンテカルロ法を用いてニューロン部のシミュレーションを行った。なぜなら、単電子回路における不連続なトンネル事象のシミュレーションを行うにはモンテカルロ法が不可欠であるからである。シミュレーションでは 6.2.3 章で述べたパラメータと同じものを用いた。トンネル抵抗は全て $3M\Omega$ を仮定し、温度は 0 K を仮定した。(ii) 重み結合部: 我々は結合部を入力 x_i に対応した出力 s_i を生成するブラックボックスを仮定し、単純に式 6.1 を用いて入出力特性を計算した。モンテカルロ法を用いずこのような単純な計算を行った理由は以下に示す。結合部は図 6.3.1 で示すように入力よりも大きな値を生成しなくてはならない場合がある。これを実現するには線形増幅器が必要となる。そのような増幅器は単電子回路では構成する事ができない。そのため、この結合部を実現するには CMOS 回路を用いなくてはならない。(これは多値ホップフィールドネットワークの LSI は単電子回路のニューロン部と CMOS 回路の重み結合部のハイブリッド構造にしなくてはならないということである。) CMOS 回路のシミュレーションにはモンテカルロ法を用いる必要がない。(CMOS 回路のシミュレーションをモンテカルロ法で行うと莫大な計算時間を要する。なぜならば、関係してくる電子の数が多すぎるからである。)

シミュレーションの結果を図??に示す。この図で、例題のネットワークの状態は3つのニューロンの組 (u_1, u_2, u_3) で表される。 u_i は固有係数 a で規格化された i 番目のニューロンの出力である。(すなわち $u_i = x_i/a$ 回路を初期状態 $(4, 4, 4)$ に設定し、それから制限なしに状態を変化させた。ある程度の遷移時間の後、回路は最終状態 $(2, 2, 0)$ で安定していた。この手順を乱数を変えて多くの試行を行った。そのうちの2つの試行結果を図に示してある。この図から状態は正しく最小状態へと収束していることがわかる。この他の試行でも全て正しく収束する事を確認した。このように我々はネットワークの最小エネルギーを見つける事ができ、その結果問題の解が求まる。

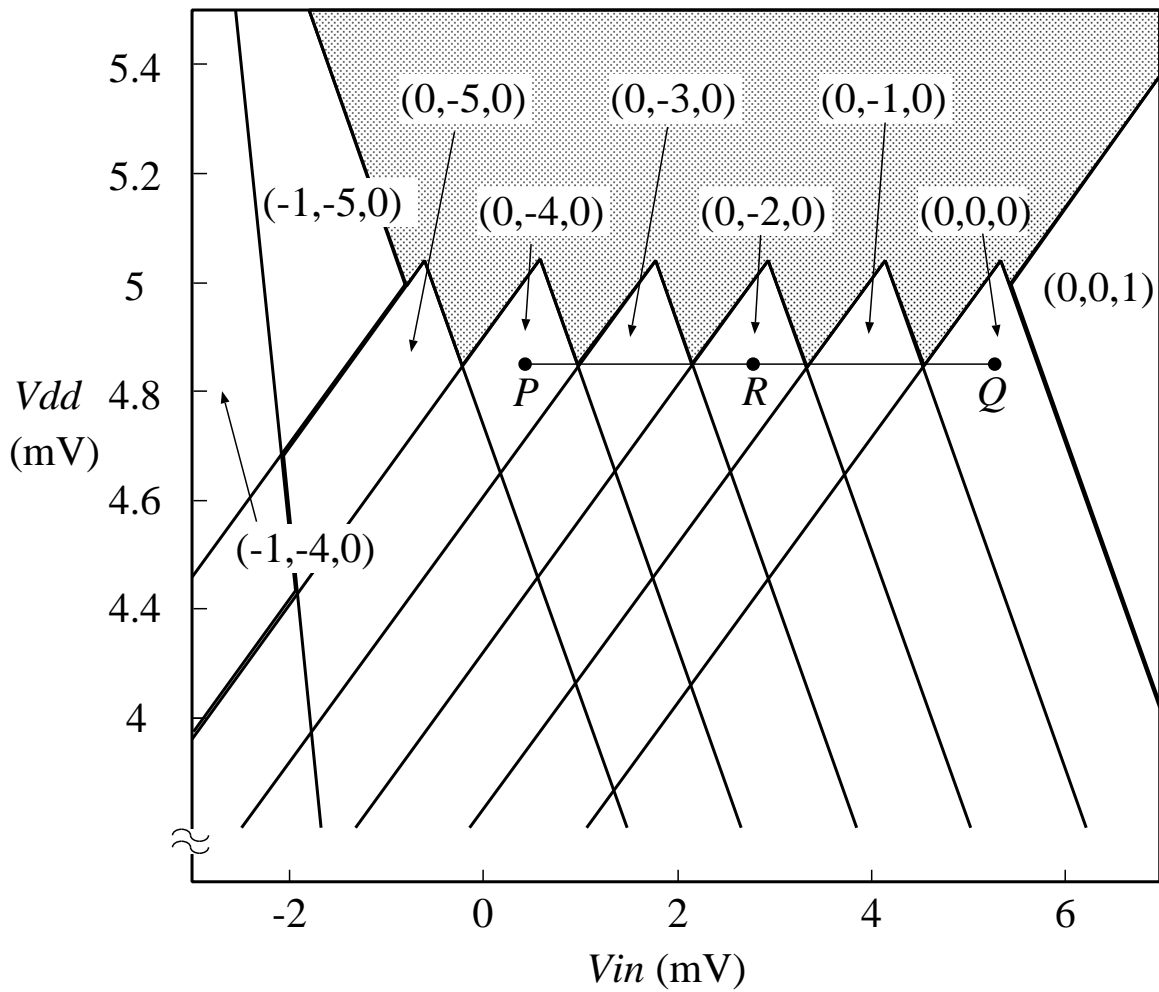


図 6.7 Stability diagram for the multiple-valued neuron circuit. For the capacitance parameters, see the text. The value of $-V_{ss}$ is set at -0.17 mV. The circuit is operated on line PQ .

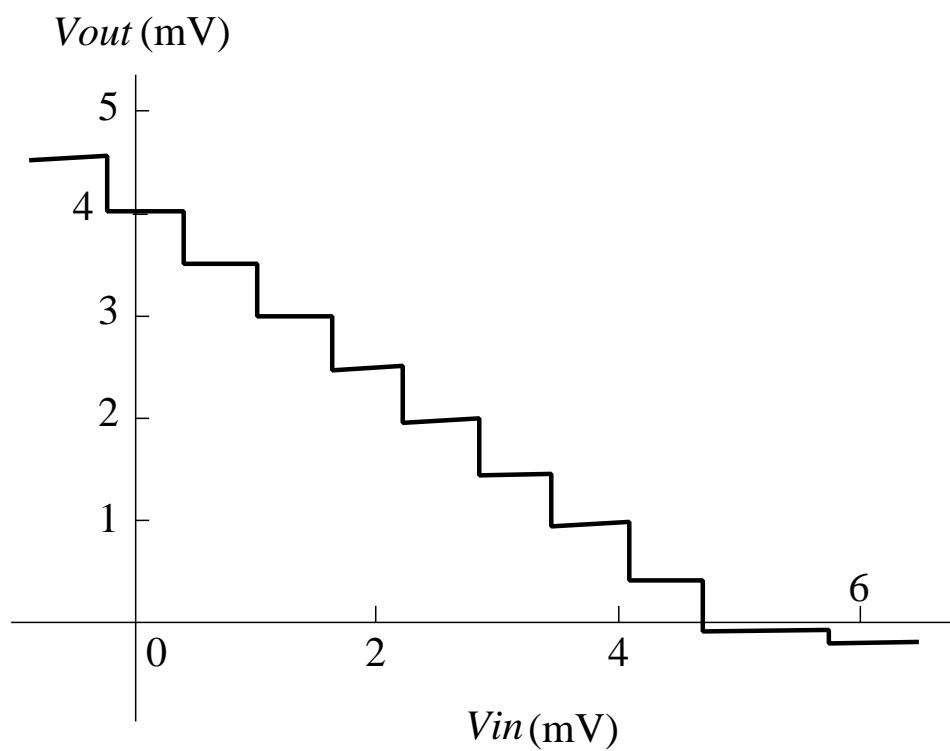


図 6.8 Another instance of the staircase transfer function. The set of parameters is: $C_{j1} = C_{j4} = 3$ aF, $C_{j2} = C_{j3} = 6$ aF, $C_1 = C_2 = 5$ aF, $C_3 = C_4 = 10$ aF, $C_5 = 300$ aF, $V_{dd} = 4.85$ mV, $-V_{ss} = -0.17$ mV. The temperature is 0 K.

$x_3=0$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	0	-17	-28	-33	-32
1	-25	-38	-45	-46	-41
x_2 2	-38	-47	-50	-47	-38
3	-39	-44	-43	-36	-23
4	-28	-29	-24	-13	4

$x_3=3$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	57	43	35	33	37
1	26	16	12	14	22
x_2 2	7	1	1	7	19
3	0	-2	2	12	28
4	5	7	15	29	49

$x_3=1$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	7	-9	-19	-23	-21
1	-20	-32	-38	-38	-32
x_2 2	-35	-43	-45	-41	-31
3	-38	-42	-40	-32	-18
4	-29	-29	-23	-11	4

$x_3=4$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	100	87	80	79	84
1	67	58	55	58	67
x_2 2	46	41	42	49	62
3	37	36	41	52	69
4	40	43	52	67	88

$x_3=2$	x_1				
	0	1	2	3	4
0	26	11	2	-1	2
1	-3	-14	-19	-18	-11
x_2 2	-20	-27	-28	-23	-12
3	-25	-28	-25	-16	-1
4	-18	-17	-10	3	22

図 6.9 The value of the problem function given by Eq. 6 in the text, tabled for all possible combinations of variables x_1 , x_2 , and x_3 . The function takes the minimum, -50 , for the variable set $x_1 = 2$, $x_2 = 2$, and $x_3 = 0$.

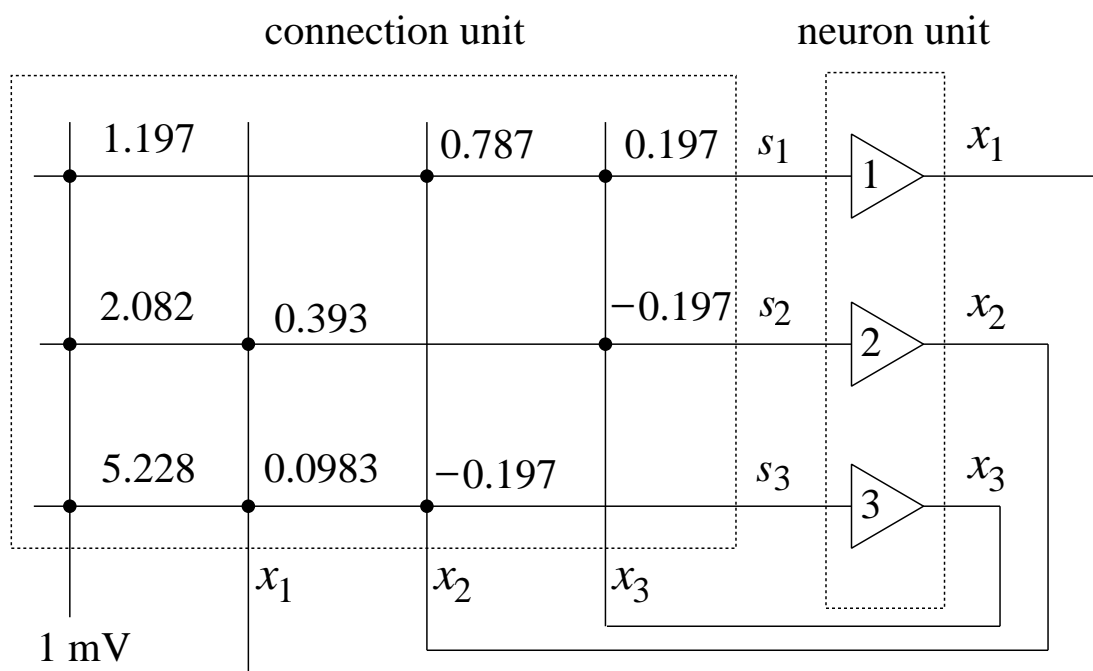


図 6.10 The configuration of the multiple-valued Hopfield network together with the values of the connection weights. This circuit is for the quadratic integer-programming problem given by Eq. 6 in the text.

第7章 結論

7.1 研究成果

本研究で得られた研究成果は以下の通りである。

組合せ最適化問題を解くニューラルネットワークの単位演算素子が持つべき特性は、確率的に動作しその確率を制御できること、離散値を出力することなどである。これらの特性を持つ回路はCMOSで構成可能ではあるが回路規模が大きくなる。単電子回路における物理現象を利用した回路を設計することで、回路を簡単に構成する方法を提案した。

7.2 今後の展開

本研究では単電子回路を用いてニューラルネットワークを構成する方法について検討を行った。今後はデバイス作製後にさまざまな問題に適用できるように、結合を可変にする構成を検討していく。さらにこれらの研究成果をもとにデバイス作製時のさまざまな問題について考えなくてはならない。単電子ボルツマンマシンは電子一個のトンネルで出力を変化させているため、熱雑音に非常に弱いことがわかった。高温動作を目指すためには第5章後半で提案した確率ニューロン回路のようなクーロンブロックードを利用しない回路アーキテクチャが必要となるだろう。加工技術と回路設計との間には大きなギャップがあり、容量のばらつきやオフセット電荷のゆらぎのためにニューロン回路が正常に動作しない可能性もある。生体のように複数のニューロンを利用しネットワークに冗長性を持たせることができればこれらの影響を軽減することが可能であろう。

謝辞

本研究は、北海道大学工学研究科電子情報工学専攻において1997年から現在に至るまでの6年間に行った研究をまとめたものである。

本研究を遂行するにあたり、終始懇切な御指導を賜った北海道大学工学研究科電子情報工学専攻 雨宮 好仁教授に心より厚く御礼申し上げます。また、本学位論文をまとめるにあたり御専門の立場から様々にご指導くださった北海道大学工学研究科電子情報工学専攻 長谷川 英機教授、酒井 洋輔教授、福井孝志教授に謹んで感謝申し上げます。

常日頃貴重な御意見、御助言をいただきました北海道大学工学研究科電子情報工学専攻 浅井 哲也助教授に深く感謝いたします。単電子回路のシミュレータに関しては朝日 昇氏、岩村 広樹氏、上野 友邦氏に多くの助言をいただきました。この他にも多くの先生方、先輩・後輩方から御助言や御支援頂きました。謹んで感謝の意を表します。