MODELO DE HOPFIELD DE RED NEURONAL

ALEJANDRO ASTRUC LÓPEZ

1. Resumen

Estudio del comportamiento y evolución de una red Hopfield, partiendo de diferentes condiciones iniciales, temperaturas y número de patrones. También se ha realizado una estimación de la capacidad de almacenamiento de la red para un tamaño concreto.

Finalmente se discuten los resultados obtenidos y se comparan con los aportados por [2].

2. Introducción

En 1949 Donal Hebb publicó su ley, esta explica que los disparos repetidos o continuados entre neuronas dan lugar a algún tipo de proceso metabólico o de crecimiento en una o ambas células de forma que la eficiencia con la que se comunica una con la otra aumenta. Este comportamiento en el cerebro explica cómo podemos asociar estímulos e información, así como nuestra forma de aprender que consiste en la asociación de eventos.

La memoria humana funciona entonces de forma contenido direccionada (content-addressable) o asociativa. No existe una localización específica en el cerebro para un recuerdo particular. En su lugar, ese recuerdo es recuperado mediante una cadena de asociaciones relacionadas con el recuerdo, incluso si estas son procesadas por diferentes partes del cerebro. [2]

Una red de Hopfield es una forma de red neuronal artificial recurrente inventada por John Hopfield. Las redes de Hopfield se usan como sistemas de Memoria asociativa con unidades binarias. Están diseñadas para converger a un mínimo local, pero la convergencia a uno de los patrones almacenados no está garantizada. [1]

En este caso se usará el algoritmo de Metrópolis utilizado en el modelo de Ising para simular y estudiar el comportamiento emergente de una red neuronal de Hopfield para cualquier temperatura T . Como en el caso del modelo de Ising, consideraremos una red cuadrada bidimensional con $N \times N = N^2$ nodos y condiciones de contorno periódicas, donde cada nodo de la red (i, j) (con i, j = 1, 2, ..., N) representa una neurona que está activa $(s_{i,j} = +1)$ o inactiva $(s_{i,j} = 0)$. En este caso el Hamiltoniano para cada configuración del sistema s = $\{s_{i,j}\}$ se expresa:

$$H(s) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \omega_{i,j,k,l} s_{i,j} s_{k,l} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \theta_{i,j} s_{i,j}$$

donde las interacción entre la neurona (i, j) y la neurona (k, l), es decir $\omega_{i,j,k,l}$, viene dada en términos de P configuraciones de la red previamente almacenadas $\xi^{\mu} = \{\xi^{\mu}_{i,j}\}$ donde $\xi^{\mu} \in \{0,1\}$ (con i, j = 1, 2, ..., N y μ = 1, 2, ...P). Estos son los llamados patrones, que a su vez minimizan el Hamiltoniano y corresponden a los mínimos de la energía libre para T=0. De esta forma tenemos que,

(2)
$$\omega_{i,j,k,l} = \begin{cases} \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^{P} (\xi^{\mu}_{i,j} - a^{\mu}) (\xi^{\mu}_{k,l} - a^{\mu}), si(i,j) \neq (k,l) \\ 0, si(i,j) \neq (k,l) \end{cases}$$

 con

Fecha: 10 de febrero de 2023.

$$a^{\mu} = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \xi^{\mu}_{i,j}$$

Las interacciones entre neuronas $\omega_{i,j,k,l}$ representan el estado de las sinapsis o conexiones entre neuronas y se denominan pesos sinápticos. Vemos que la red de Hopfield asume interacciones de largo alcance, siendo en particular una red totalmente conectada, pero donde las autoconexiones no están permitidas. Además de esta definición establece una simetría de i,j respecto a k,l.

Por otro lado, el término $\theta_{i,j}$ en la ecuación (1) se denomina umbral de disparo y viene dado en términos de los pesos sinápticos,

(3)
$$\theta_{i,j} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \omega_{i,j,k,l}$$

Por tanto a partir de las ecuaciones (1),(2) y (3) podemos implementar la dinámica del sistema utilizando el algoritmo de Metrópolis dados P patrones previamente almacenados.

Se cambiarán aleatoriamente neuronas de fomar que la probabilidad de que la neurona selecionada cambie (p) será: $p = min(1, exp(-[\Delta H/T]))$ donde T es la temperatura. [3]

La capacidad de alamacenamiento de estas redes es limitada. Un análisis largo y sofisticado muestra que si P/N>0, 138 se pueden acumular pequeños errores que pueden dejar la memoria inservible, siendo P el número de patrones y N la dimensión de los patrones. Luego la capacidad será $P/N\approx 0$, 138. Además cualquier combinación lineal de un número impar de patrones almacenados da lugar a los llamados estados mixtos, y para un número grande de patrones se obtienen mínimos locales no relacionados con con ninguna combinación lineal de patrones almacenados.[2]

Para ver como la red es capaz de recordar los patrones almacenados se ha hecho uso de la función de solapamiento definida así:

(4)
$$m^{\mu} = \frac{1}{N^2 a^{\mu} (1 - a^{\mu})} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} (\xi^{\mu}_{i,j} - a^{\mu}) (s_{i,j} - a^{\mu})$$

Donde μ es el número del patrón y la N y a tienen el mismo significado que anteriormente.

3. Métodos

Para aumentar la eficiencia del programa las matrices se han codificado como arrays unidimensionales de dimensión N^2 , con lo que para seleccionar una posición aleatoria en la red tan solo hace falta un número aleatorio en lugar de dos. Esto convierte a la matriz de las ω en una bidimensional simétrica de traza nula.

Una de las limitaciones del programa en C++ es la cantidad de memoria que ocupan los arrays, siendo limitante en mi caso la matriz de omegas (ω) que es una matriz de datos reales de doble precisión con N^4 elementos, este N máximo es de 127. Una de las medidas para evitar un uso excesivo de memoria es el almacenamiento de los patrones y matriz de neuronas en una clase propia "Neuron" que codifica 1 y 0 reales como datos binarios tipo bool con funciones de clase que permiten inicializar su valor de forma aleatoria así como decodificar el verdadero o falaso en 1 o 0 respectivamente.

Por último el factor más relevante que maximiza la eficiencia del programa es una expresión simplifica para el cálculo de la variación del Hamiltoniano (ΔH) :

(5)
$$\Delta H = (s_j' - s_j) \left[-\sum_{i=1}^{N} \omega_{i,j} s_i + \theta_j \right]$$

Donde la neurona s_j es la que se vería cambiada a s'_j . La expresión tiene una deducción sencilla que tan solo aplica la simetría de ω , y la conmutabilidad del producto.

Empleando P patrones [4] y redes cuadradas de lado N con temperatura $T = 10^{-4}$:

- En primer lugar, con el fin de ver cómo la red es capaz de recordar un solo patron almacenado (P = 1) y N = 120 partiendo de : (i) una condicion inicial aleatoria y (ii) del patron deformado. Se ha calculado el solapamiento en función del tiempo para cuantificar cómo la red se aproxima al patron a medida que el tiempo aumenta.
- De nuevo se ha repetido lo anterior pero para diferentes temperaturas, de manera que se pueda obtener la curva de solapamiento frente a temperatura.
- Del mismo modo pero para varios patrones, partiendo de (i) una condicion inicial aleatoria y de (ii) algunos de los patrones deformados. El solapamiento es una cantidad acotada entre -1 y 1. Cuando es 1 se recupera el patrón perfectamente, y cuando es -1 se recupera el antipatrón que también corresponde a un mínimo del Hamiltoniano, conocido como estado espúreo.
- Finalmente, asumiendo que un patron dado "se recuerda" sin apenas error cuando el solapamiento es mayor que 0.75 se ha calculado como decae la recuperacion de la memoria en funcion del número de patrones almacenados, es decir, como disminuyen el número de patrones recordados en funcion del numero de patrones almacenados considerando una red de N=20 y $T=10^{-4}$. Calculando también la fracción máxima $\alpha_c = P_c/N^2$ de patrones que la red podrá almacenar de forma que todos los patrones se puedan recordar. En este caso es mejor trabajar con patrones aleatorios. [3]

4. Resultados y discusión

Realizando las simulaciones enumeradas anteriormente, se han llegado a los siguientes resultados:

4.1. P=1. (i) Comenzando por el patrón 12b, desde una condición inicial aleatoria se obtuvo el solapamiento representado en 11a.

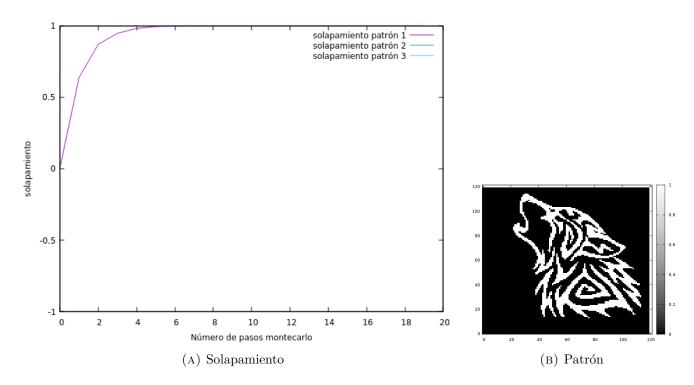


FIGURA 1. Solapamiento en función del tiempo y patrón recuperado

(ii) Seguidamente se repitió la simulación pero partiendo del patrón deformado un 30%, 60% y 90%, es decir con sendos porcentajes de neuronas cambiadas.

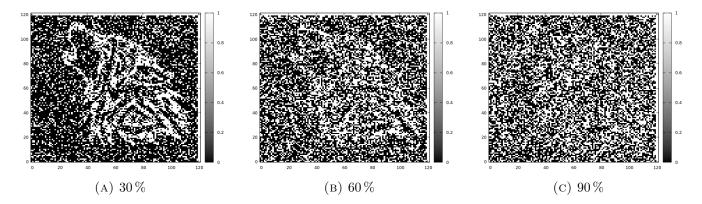


FIGURA 2. Condiciones iniciales.

Representando cada solapamiento en la Figura 3 se aprecia como partiendo de un patrón menos deformado se converge antes al mismo.

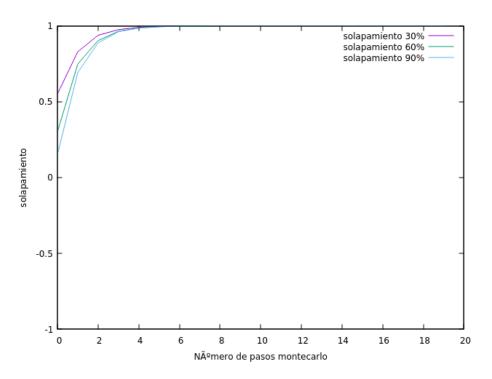


FIGURA 3. Solapamiento partiendo de diferentes condiciones iniciales.

4.2. P=1. Como anteriormente para diferentes temperaturas. Se ha reproducido la subsección anterior pero para distintas temperaturas en el intervalo $T \in [1 \times 10^{-4} , 3,93625 \times 10^{-2}]$ con $\Delta T = 4,3625 \times 10^{-3}$, es decir con 10 temperaturas distintas. Primero para (i) condiciones aleatorias y (ii) condición de patrón deformado un 30 %.

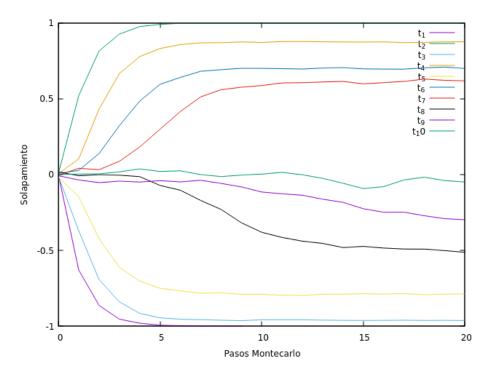


FIGURA 4. Solapamiento partiendo de diferentes temperaturas desde condición aleatoria.

Por último se ha hecho la media en valor absoluto del solapamiento (ya que tanto patrón como antipatrón minimizan la energía) una vez se ha estabilizado. Como podemos observar en la Figura 4 el solapamiento se estabiliza entorno a 15 pasos Motecarlo de evolución.

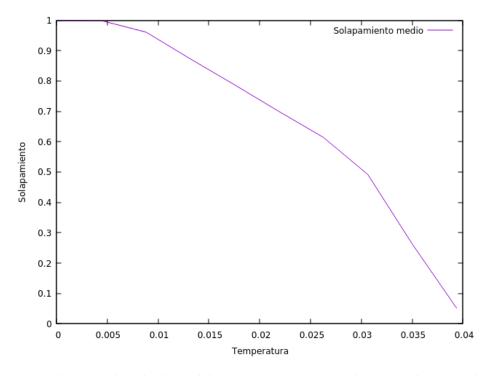


FIGURA 5. Media en valor absoluto del solapamiento partiendo de condiciones aleatorias.

Como se puede apreciar en la Figura 4 entre las temperaturas $t_9 = 0.0306375$ y $t_{10} = 0.0393625$, se encuentra la temperatura crítica a partir de la cual la red nunca convergerá, además en la Figura 5 es claro

como la convergencia decrece casi exponencialmente con la temperatura. A partir de una temperatura superior a 0.02 el solapamiento es menor al 0,75.

Se ha repetido de nuevo pero para (ii) es decir partiendo del patrón deformado. Para facilitar la tarea se han tomado 5 medidas en lugar de 10 con un $\Delta T = 8,725 \times 10^{-3}$ el doble al anterior y en el intervalo de temperaturas $T \in [1 \times 10^{-4}, 3,06375 \times 10^{-2}]$.

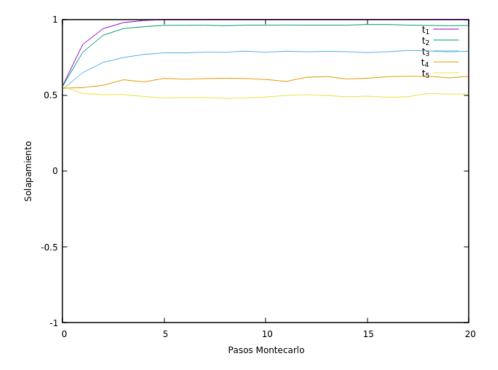


FIGURA 6. Solapamiento partiendo de diferentes temperaturas partiendo del patrón deformado.

Dado que se parte de un solapamiento no nulo, el resultado es similar a la Figura 4 pero desplazada hacia arriba. También es relevante que la tendencia del solapamiento se estabiliza muy rápidamente en torno a 5 pasos Montecarlo independientemente de la temperatura. A temperaturas altas en lugar de tener un solapamiento prácticamente nulo este se conserva de la condición inicial. Si se aumentara la temperatura lo suficiente se acabaría con un patrón de ruido y con un solapamiento casi nulo.

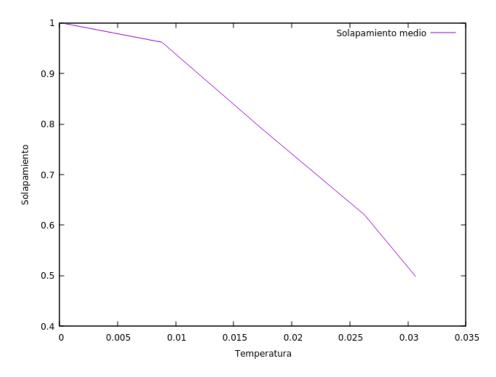


FIGURA 7. Media en valor absoluto del solapamiento partiendo del patrón deformado.

Del mismo modo que en la Figura 5 se ve como decrece el solapamiento medio con la temperatura en la Figura 7. En esta última el decrecimiento es ligeramente más lento pero muy similar.

De la comparación de ambos tanto en (i) como en (ii) podemos inferir que partir de un patrón alterado frente a partir de ruido tendrá un mayor efecto positivo en la estabilización y rapidez de convergencia. El efecto se ve atenuado según aumenta la temperatura, en el mejor de los caso sin introducir ruido en el patrón de inicio y en el peor convirtiéndose en un patrón de ruido.

4.3. Repitiendo 4.1. y 4.2. con P=6. Dado que hay 6 patrones se ha tomando el de máximo solapamiento y con $\Delta T=8,725\times 10^{-3}$ con 7 puntos en el intervalo de $T\in[8,825\times 10^{-3}$, $5,68125\times 10^{-2}]$. Los patrones empleados han sido:

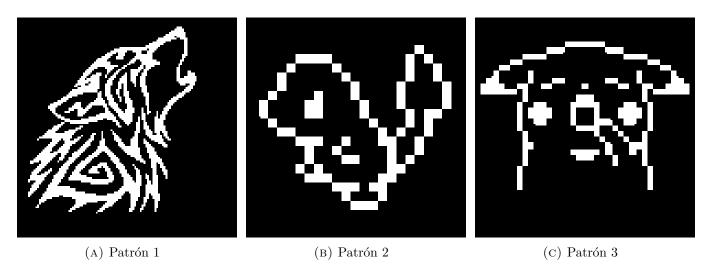


FIGURA 8. Patrones.

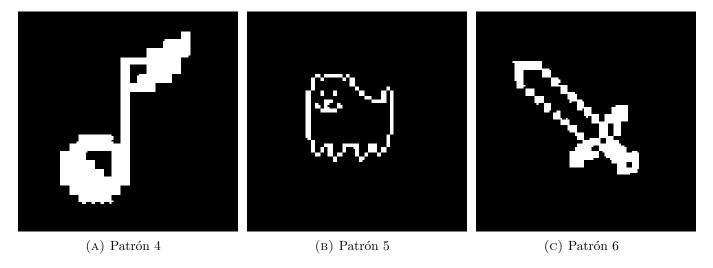


FIGURA 9. Patrones.

Notar que los patrones de salida están reflejados como en un espejo por como se almacenan los patrones en los ficheros.

Partiendo de una condición inicial aleatoria (i) y a T = 0,0001 se han obtenido los siguientes solapamientos y patrón final:

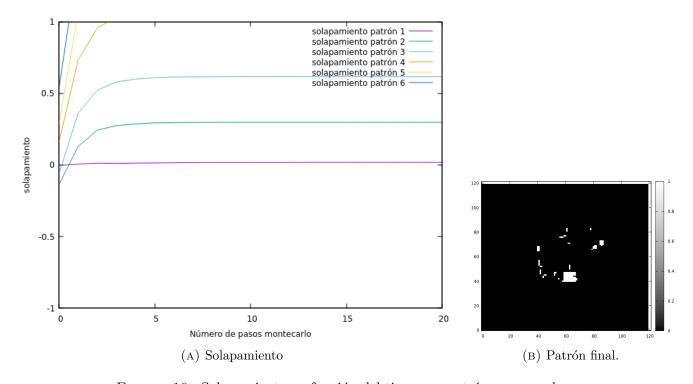


FIGURA 10. Solapamiento en función del tiempo y patrón recuperado

En este caso los patrones 4,5 y 6 son los más presentes ya que al ser mayormente negros les es fácil manifestarse a la vez y así resultar en una mezcla de los tres.

Ahora, partiendo de una condición inicial del patrón 3 con un 30% de sus neuronas cambiadas se ha llegado aun resultado muy similar. Esto pone de manifiesto que a pesar de tener un patrón inicial que guíe la convergencia de la red es mucho más relevante el número de patrones y el parecido entre los mismos

que en este caso da lugar a un mínimo recurrente. Un mínimo que se ha llegado a dar dos veces. También podemos fijarnos en cómo el patrón más complejo de todos, el patrón 1 es el menos solapado. Este hecho podría ser indicador de que cuanto más complejo es el patrón recordarlo se vuelve más difícil.

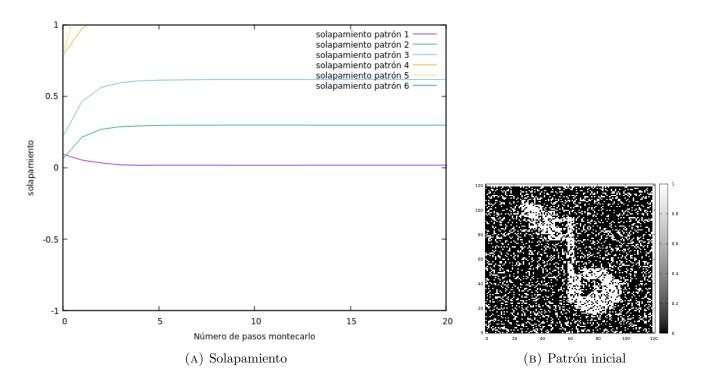


FIGURA 11. Solapamiento en función del tiempo y patrón recuperado

Debido a esta anomalía si realizadnos la simulación para diversas temperaturas, obtendremos frecuentemente el patrón 10b. De hecho se solapa el patrón 6 constantemente con un valor muy cercano a 1, incluso a temperaturas altas.

Por ello y para evitar la anomalía en adelante se ha prescindido del conjunto de patrones 9.

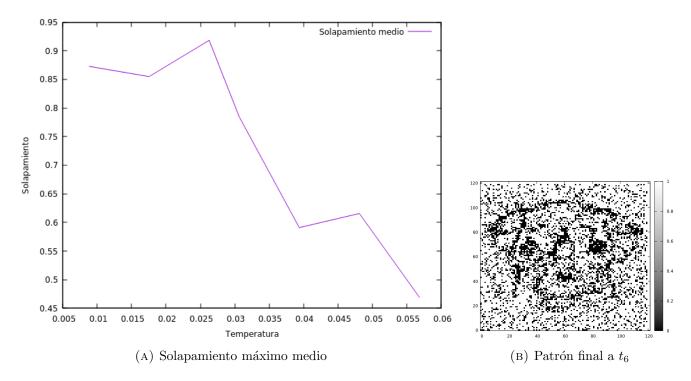


FIGURA 12. Solapamiento en función del tiempo y patrón recuperado (i)

Con una P=3 se ha simulado para 5 temperaturas distintas partiendo de condiciones aleatorias (i) y obtenido un solapamiento medio máximo en valor absoluto representado en la figura 12a.

De la evolución del solapamiento podemos intuir dos posibles factores que afectan al recuerdo de patrones, y es que casi siempre los patrones con mayor solapamiento eran el 2 o el 3 siendo estos más simples que el primero corroborando lo anteriormente mencionado. Además observamos que mantenían un mayor solapamiento con la temperatura a pesar de ser más patrones; de hecho es posible que sea lo que haya permitido que se recuperen a temperaturas más altas.

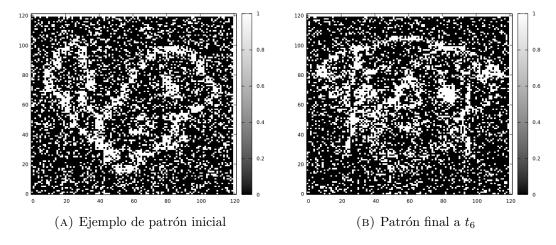


Figura 13. Patrón inicial y patrón recuperado (ii)

Finalmente se ha repetido para la condición inicial (ii) desde el patrón 2 deformado un $30\,\%$ como en la Figura 13a.

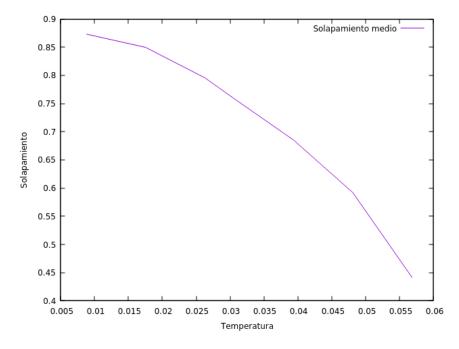


FIGURA 14. Media en valor absoluto del solapamiento partiendo del patrón deformado.

Las condiciones iniciales menos variables han dado lugar una curva más suave pero que aun así no sigue la tendencia esperada ya que partiendo del patrón 2 deformado se ha llegado siempre a una mezcla del 2 y del 3.

4.4. Decaimiento de recuperación. Se ha observado como decae el número de patrones recuperables primero en una red de N=20 y luego en una con N=64. Ambos a una $T=0{,}0001$. Se ha considerado que un patrón no se puede recuperar cunado a pesar de partir de un estado inicial del patrón deformado al 10%, tras 18 pasos Montecarlo, su solapamiento (en valor absoluto) es menor a $0{,}75$.

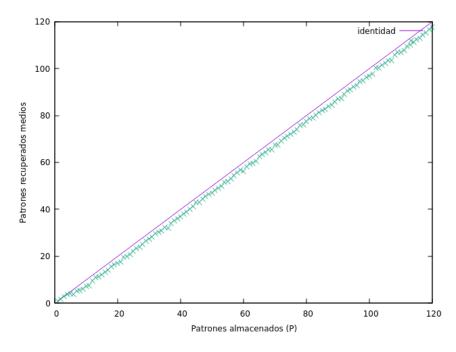


FIGURA 15. Patrones recuperados respecto a almacenados con N=20.

En el caso de N=20 se ha repetido 5 veces cada vez y se ha promediado el número de patrones recuperados respecto a los almacenados como que recogido en la Figura 15. A partir de 3 patrones no se puede recuperar la totalidad de los patrones almacenados, sin embargo el número de patrones no recuperados se mantiene relativamente constante, entrono a 3. Esto se debe a que siempre se parte de un patrón deformado que facilite la convergencia.

Finalmente si calculamos $\alpha_c = P_c/N^2$ obtenemos $\alpha_{c20} = 0{,}0075$.

5. Conclusión

Comenzando por los resultados obtenidos en la sección 4.1. podemos asegurar que para un solo patrón es más fácil de recuperar y converge antes si se parte del patrón con parte de las neuronas cambiadas.

De nuevo en la sección 4.2 para un solo patrón vemos como la temperatura impide y dificulta en gran medida la convergencia al patrón incluso partiendo del deformado. Esta tendencia era de esperar como nos indica el Hamiltoniano tendiendo a cero de forma exponencial. Y por encima de una T=0,0393625 la red no converge en este caso.

Repitiendo las secciones anteriores para diversos patrones en la sección 4.3 nos encontramos con una serie de comportamientos inesperados.

En primer lugar la semejanza y similitud del segundo conjunto de patrones da lugar a una convergencia muy rápida hacia una mezcla de estos tres últimos. Incluso esa fuerte convergencia se mantenía a temperaturas altas obligando a obviarlos para el estudio de la evolución de múltiples patrones respecto a la temperatura. Mientras el patrón 1 de mayor complejidad tenía un solapamiento prácticamente nulo.

Ahora solo con el primer conjunto de tres patrones se ha visto como el tener varios patrones mejora la convergencia de la red respecto a la temperatura; frenando la tendencia decreciente. También se pone de manifiesto como el último patrón almacenado es el más presente en la red dando a entender que los últimos patrones almacenados podrían ser más fáciles de recuperar o recordar; incluso a pesar de partir de condiciones iniciales que faciliten la convergencia a otro.

Finalmente en la sección 4.4 se ha observado como decae la recuperación de patrones respecto al número de patrones almacenado.

Con un tamaño de N=20 no se pueden recuperar algunos patrones cuando hay más de 3 (P>3) patrones. Quedando entonces $\alpha_{c20}=0{,}0075$. A pesar de que la red pierde capacidad el comportamiento de la misma no es el esperado, esta en lugar de volverse inservible tan solo pierde un pequeño número de patrones. Esto es indicativo de un fallo de la red.

Referencias

- [1] Hopfield (RNA). (2020, 13 de mayo). Wikipedia, La enciclopedia libre. Fecha de consulta: 18:08, junio 13, 2020.
- [2] Hopfield networks. (2020, 13 de mayo). Professor Abbas Edalat, London Imperial College, Computing department. Fecha de consulta: 18:08, junio 13, 2020.
- [3] Modelo Hopfield de red neuronal. Apuntes aportados en física computacional (2020), ugr.
- [4] Conversión de imágenes en 0 y 1.

FACULTAD DE CIENCIAS UGR

Email address: alestruclo@correo.ugr.es