

**Grado en Física**

FÍSICA COMPUTACIONAL

HOPFIELD

Autor:

Alberto Mochón Paredes

## Resumen

En este trabajo se ha implementado el modelo de Hopfield utilizando el algoritmo de Metropolis para evaluar transiciones entre configuraciones de neuronas. Se calcula la convergencia del sistema en escenarios con patrones únicos y múltiples, analizando cómo la temperatura influye en la recuperación de patrones. Los resultados muestran que a bajas temperaturas, la red converge al patrón almacenado, mientras que a altas temperaturas se introduce ruido. Además, se evalúa el impacto de los estados iniciales deformados y la elección de patrones suficientemente distintos para evitar superposiciones.

## Índice

<b>1. Fundamento teórico del modelo de Hopfield y máquinas de Boltzmann</b>	<b>1</b>
<b>2. Metodología</b>	<b>2</b>
<b>3. Resultados y discusión</b>	<b>3</b>
3.1. Un patrón . . . . .	3
3.1.1. Partiendo de un estado inicial aleatorio . . . . .	3
3.1.2. Partiendo del patrón deformado . . . . .	6
3.2. Varios patrones . . . . .	7
3.2.1. Partiendo del patrón deformado . . . . .	9
3.3. Recuperación de la memoria en función del número de patrones . . . . .	9
<b>4. Conclusiones</b>	<b>10</b>

## 1. Fundamento teórico del modelo de Hopfield y máquinas de Boltzmann

El modelo de Hopfield es una red neuronal diseñada para resolver problemas de reconocimiento de patrones y optimización. Se basa en una matriz bidimensional de neuronas interconectadas. Las neuronas son binarias, con dos estados posibles: inactiva (0) o activa (1). Cada neurona está conectada con todas las demás neuronas, excepto consigo misma; estas conexiones vienen descritas por un peso  $\omega_{ijkl}$  que nos indica cuán fuerte es la conexión entre la neurona  $ij$  y  $kl$  y viceversa. La función de activación es de tipo escalón y depende del umbral de disparo de cada neurona, calculadora proporcionalmente a la suma de los pesos asociados.

En este modelo, se introducen patrones preestablecidos que la red intentará recordar, representados por matrices de ceros y unos. El objetivo es que la red converja hacia uno de los patrones introducidos inicialmente, pero la convergencia completa no está garantizada debido a los múltiples mínimos locales en la función de energía.

El modelo de Hopfield se relaciona con el modelo de Ising utilizado en la transición ferromagnética-paramagnética en dos dimensiones. El Hamiltoniano del modelo de Hopfield representa la energía del sistema y está definido por la suma de las entradas de todas las neuronas activadas y la suma de los umbrales de disparo de las neuronas activas, con un signo negativo que refleja la contraposición

entre estos factores:

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

donde las interacciones entre las neuronas  $(i, j)$  y  $(k, l)$ , es decir,  $\omega_{ij;kl}$ , vienen descritas por la expresión (2) donde  $a_\mu u$  viene dado por (3) que depende de las  $P$  configuraciones de la red previamente almacenadas  $\xi = \xi_{ij}$ , donde  $\xi_{ij} \in 0, 1$  y  $\xi$  pertenece a un conjunto de patrones almacenados. Estos patrones minimizan el Hamiltoniano y corresponden a los mínimos de la energía libre para  $T = 0$ .

$$\omega_{i,j,k,l} = \begin{cases} \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^P (\xi_{ij}^\mu - a_\mu)(\xi_{kl}^\mu - a_\mu), & \text{si } (i, j) \neq (k, l), \\ 0, & \text{si } (i, j) = (k, l). \end{cases} \quad (2)$$

$$a_\nu = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \xi_{ij}^\nu \quad (3)$$

El umbral de disparo para cada neurona  $(i, j)$ , denotado por  $\theta_{ij}$ , viene dado por:

$$\theta_{ij} = \frac{2}{N^2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \omega_{ij;kl} \quad (4)$$

El solapamiento nos describe como de parecida es la matriz al patrón, 1 si es idéntica o -1 si es su inversa. Para bajas temperaturas nos podemos encontrar con que el estado del sistema converja al inverso del patrón, esto se denomina estado espúreo y se debe a que este estado también corresponde a un mínimo en  $H$ . Lo podemos calcular aplicando la expresión (5).

$$m_\mu(s) = \frac{1}{N^2 a_\mu (1 - a_\mu)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\xi_{ij}^\mu - a_\mu)(s_{ij}^\mu - a_\mu) \quad (5)$$

## 2. Metodología

El programa se basa en el algoritmo de Metropolis para determinar los cambios de estado de las neuronas: Se propone una nueva configuración, se calcula la diferencia de energía entre los estados  $\Delta E$ , se evalúa la probabilidad de aceptación del estado candidato utilizando la ecuación del factor de Boltzmann, se genera un número aleatorio uniforme entre 0 y 1. Si el número aleatorio es menor o igual a la probabilidad de aceptación, se acepta el estado candidato, en caso contrario se mantiene el estado actual. El factor de Boltzmann permite expresar el cociente de probabilidades entre dos estados:

$$\frac{p_i}{p_j} = e^{\frac{E_j - E_i}{kT}} \quad (6)$$

Sustituyendo en la ecuación (6), el cambio en la energía puede expresarse en función de las probabilidades de cada estado:

$$\Delta E = -kT \ln(p_{\text{final}}) - (-kT \ln(p_{\text{inicial}})) \quad (7)$$

Utilizando que la probabilidad debe estar normalizada ( $p_{\text{inicial}} + p_{\text{final}} = 1$ ) y despejando  $p_{\text{final}}$ , finalmente obtenemos la probabilidad de cambio de estado:

$$p_{\text{final}} = \frac{1}{1 + e^{-\Delta E/T}} \quad (8)$$

Para  $T=0$  tenemos que esta probabilidad corresponde con la función paso con lo que el sistema convergerá al estado de mínima energía. A la hora de proponer la nueva configuración se ha elegido una neurona aleatoria  $(n,m)$  y se ha cambiado su estado con lo que si nos fijamos en la expresión (1)

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\Delta s_{nm} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \omega_{ij;nm} s_{ij} - \frac{1}{2}\Delta s_{nm} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \omega_{ij;nm} s_{kl} + \Delta s_{nm} \theta_{nm}$$

ya que en la variación de energía solo aportarán los términos de la sumatoria que contengan  $s_{nm}$ . Teniendo en cuenta que  $\omega$  es una matriz simétrica y que  $\Delta s_{nm} = 1 - 2s_{nm}$  ya que  $s_{nm} = 0$  obtenemos la expresión final de  $\Delta E$  (9).

$$\Delta E = (1 - 2s_{nm})(\theta_{nm} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \omega_{ij;nm} s_{ij}) \quad (9)$$

Se ha implementado el programa mediante la aplicación de las ecuaciones (3), (2), (4), (8) y (9). Para definir la matriz  $\omega$  se ha usado la función malloc que se utiliza para asignar memoria dinámicamente en tiempo de ejecución ya que, de otro modo, una matriz de dimensión 4 habría dado problemas en la memoria.

### 3. Resultados y discusión

A continuación se muestran los resultados obtenidos para un patrón, varios patrones y se ha estudiado la recuperación de memoria.

#### 3.1. Un patrón

##### 3.1.1. Partiendo de un estado inicial aleatorio

Vamos a trabajar con matrices 40x40. En las figuras 1, 2, 3, 4 se muestran los cuatro estados a los que se han convergido para cuatro temperaturas distintas ordenadas de menor a mayor. Para temperaturas cercanas a 0, el sistema converge al estado de mínima energía, en este caso coincide con el patrón. Tal y como se esperaba, conforme mayor es la temperatura, mayor es el ruido o la diferencia que encontramos con el patrón. El resto de estados finales han resultado ser espúreos.

En la figura 9 se ha representado el solapamiento en función de los pasos Montecarlo para distintas temperaturas. Como se ha comentado, conforme mayor es la temperatura mayor el ruido y menor el solapamiento. Por eso, para temperaturas bajas el solapamiento se estabiliza en 1 o -1 y para mayores temperaturas este se acerca más a 0 pero oscila más por el ruido presente. Podemos inferir de esta gráfica que en general para 10 pasos Montecarlo el solapamiento se estabiliza. Para estudiar mejor la convergencia en función de la temperatura se ha realizado lo siguiente. Se ha corrido el programa de forma iterativa para varias temperaturas tomando como solapamiento final el promedio de los 5 últimos pasos Montecarlo realizados siendo 25 el total de pasos. En la figura

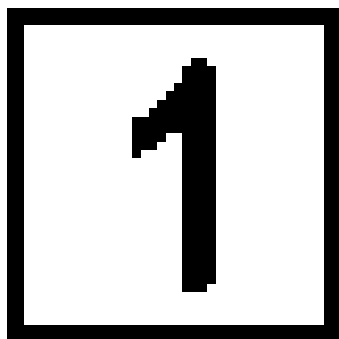


Figura 1: Estado final  
con  $T=0.00001$

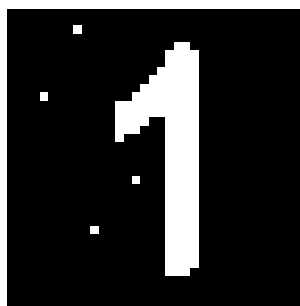


Figura 2: Estado final  
con  $T=0.01$



Figura 3: Estado final  
con  $T=0.03$



Figura 4: Estado final  
con  $T=0.1$

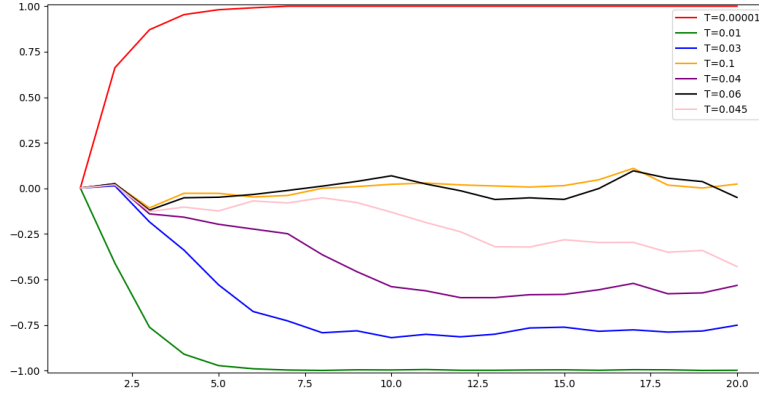


Figura 5: Solapamiento 1 Imagen

6 se muestran los resultados. Aquí se puede ver de forma más clara a partir de qué temperatura el estado final deja de converger al mínimo de energía. Para  $T=0.01$  el solapamiento es perfecto, en el intervalo  $[0.01, 0.045]$  nos encontramos con una zona de transición y para  $T > 0.045$  la red no converge.

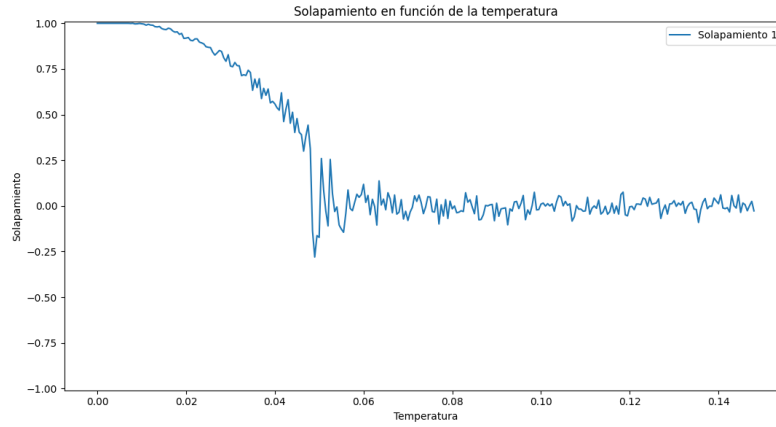


Figura 6: Solapamiento 1 Imagen en funcion de T

### 3.1.2. Partiendo del patrón deformado

En este caso se ha decido tomar como estado inicial el patrón deformado en un 20 % tal y como se muestra en la imagen 7 Al estar el estado inicial más próximo al estado de mínima energía se espera que la convergencia sea más rápida. Para  $T=0.00001$  tenemos como estado final ?? el patrón y en la curva de solapamiento 22 se observa que la convergencia es más rápida.

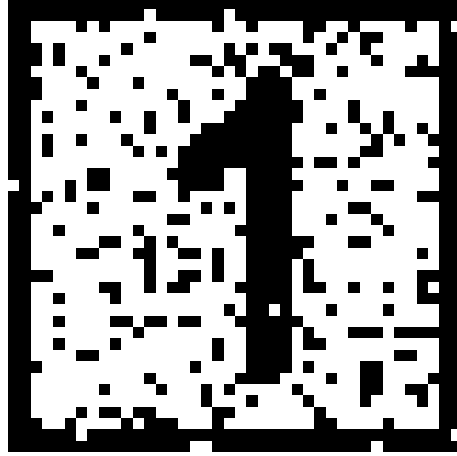


Figura 7: Estado inicial, patron 1 deformado

Como se ha visto en el apartado anterior la gráfica más representativa y que más información contiene es la representación del solapamiento en función de la temperatura. Tal y como se ve en la figura 10. Comparando las gráficas de ambos casos se llega a la conclusión de que para una sola imagen los resultados son muy similares para el caso no deformado y deformado.

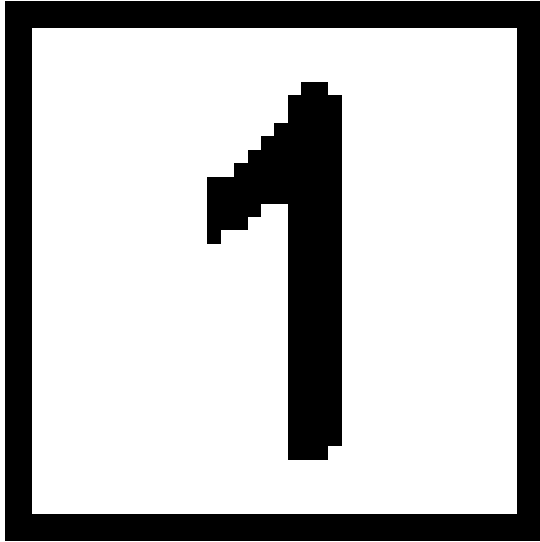


Figura 8: Estado final con  $T = 0,00001$

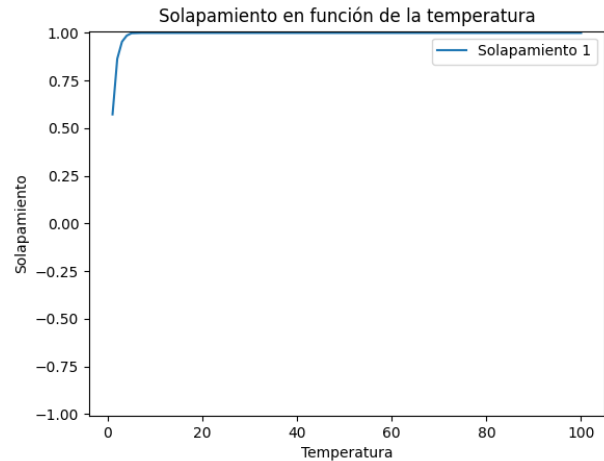


Figura 9: Solapamiento en función del paso

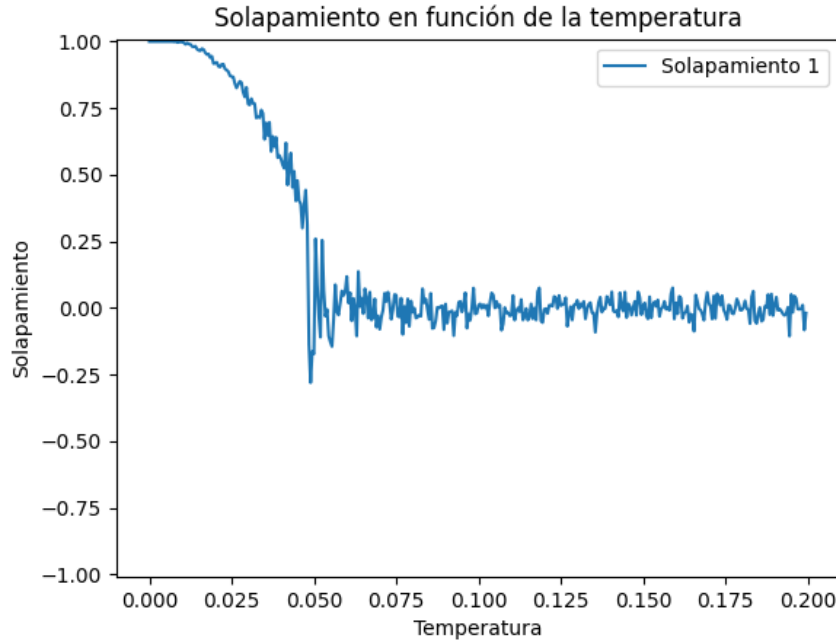


Figura 10: Solapamiento en funcion de T para una imagen caso deformado

### 3.2. Varios patrones

En este caso se ha elegido trabajar directamente con cuatro patrones. En primera instancia se usaron patrones arbitrarios y lo que se obtuvo es que siempre se llegaba a un estado final que era una superposición de estos con lo que se cambiaron los patrones de tal forma que estos fueran lo suficientemente distintos entre ellos como para que el estado final pudiera no ser una superposición de estos. Los patrones elegidos vienen representados en la figura 11.



Figura 11: Patrones predeterminados

Primero se ha trabajado con un estado inicial aleatorio. En las figuras 12, 13, 14, 15 se representan los estados finales para distintas temperaturas. Los resultados son similares, con la salvedad de que en este caso, partiendo de un estado aleatorio, el estado al que se converge es a una superposición de los distintos patrones. Los solapamientos vienen reflejados en las gráficas 16, 17, 18 y 19. Se observa un comportamiento similar, conforme aumenta la temperatura decrece la convergencia al estado de mínima energía, en este caso ese estado se corresponde con una superposición de los distintos patrones. Con el fin de estudiar como varía el solapamiento con la temperatura se ha procedido de forma similar al caso en el que se estudiaba un solo patrón obteniéndose la gráfica 20 En ella se observa que para bajas temperaturas el estado final es una combinación de varios patrones, se ve que hay un intervalo de transición y a partir de cierta temperatura la red no converge.



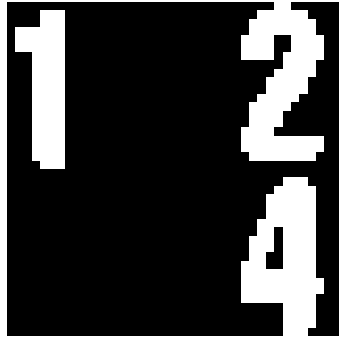


Figura 12: Estado final  
con  $T=0.00001$



Figura 13: Estado final  
con  $T=0.003$



Figura 14: Estado final  
con  $T=0.01$



Figura 15: Estado final  
con  $T=0.03$

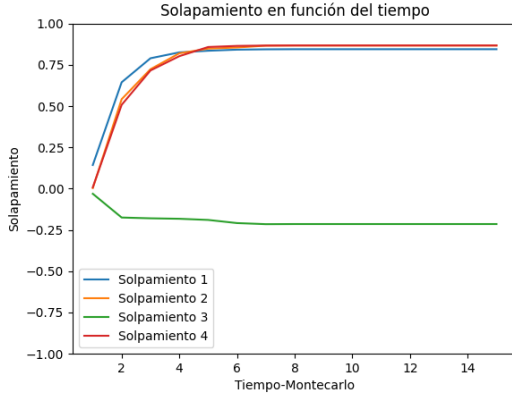


Figura 16: Solapamiento con  $T=0.00001$

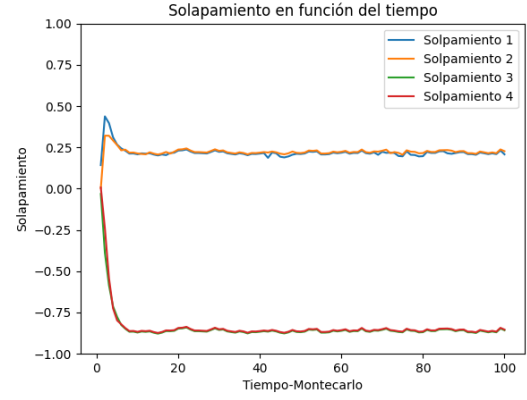


Figura 17: Solapamiento con  $T=0.003$

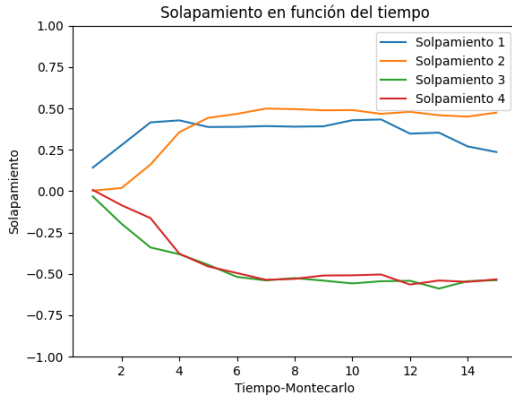


Figura 18: Solapamiento con  $T=0.01$

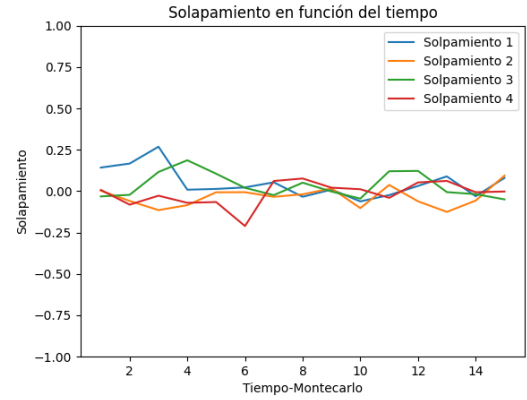


Figura 19: Solapamiento con  $T=0.03$

### 3.2.1. Partiendo del patrón deformado

Se ha elegido partir del primer patrón deformado en un 20 %. Lo que se ha observado es que para temperaturas suficientemente bajas converge al primer patrón y para mayores temperaturas se comporta igual que en el anterior caso. En la imagen 23. Se observa un intervalo en el que converge al patrón o al inverso del patrón y para mayores temperaturas se comporta como en el anterior caso.

## 3.3. Recuperación de la memoria en función del número de patrones

En este caso vamos a trabajar con matrices  $20 \times 20$  y a  $T = 10^{-4}$ . Se ha decidido realizar este apartado de forma manual en vez de modificar el programa. En la figura 24 se muestran los patrones recordados en función del número de patrones introducidos. Puesto que el máximo de patrones recordados es  $1/P_c = 1/20^2$  o 0.

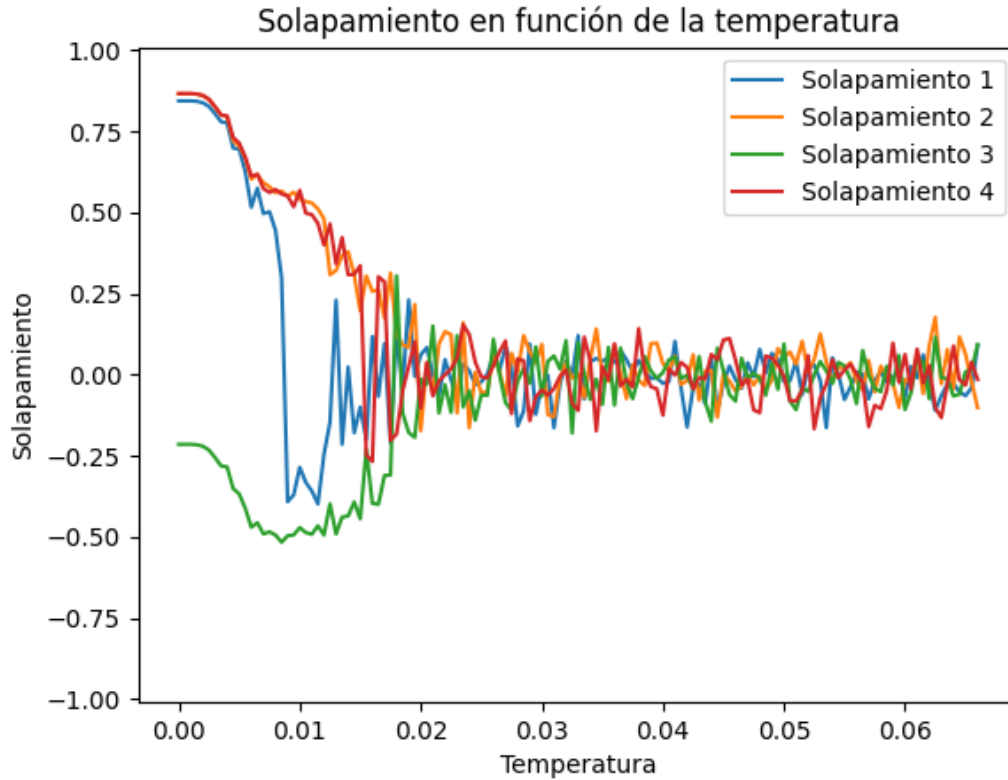


Figura 20: Solapamiento en funcion de T para 4 imagenes



Figura 21: Estado final con  $T=0.00001$

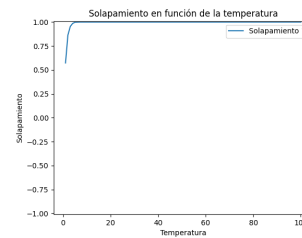


Figura 22: Solapamiento con  $T=0.00001$

## 4. Conclusiones

A lo largo de este informe se han examinado varios aspectos del modelo de Hopfield de red neuronal implementado con el algoritmo de Metrópolis. Los resultados obtenidos se resumen de la siguiente manera:

En primer lugar, se estudió el efecto de introducir un único patrón en la red. Se analizó el solapamiento y su dependencia de la temperatura del sistema. Se observaron tres situaciones distintas: a temperaturas por debajo de un valor  $T_1$ , se obtenía un solapamiento perfecto; para temperaturas por encima de otro valor  $T_2$ , el solapamiento era prácticamente nulo y el sistema terminaba en un

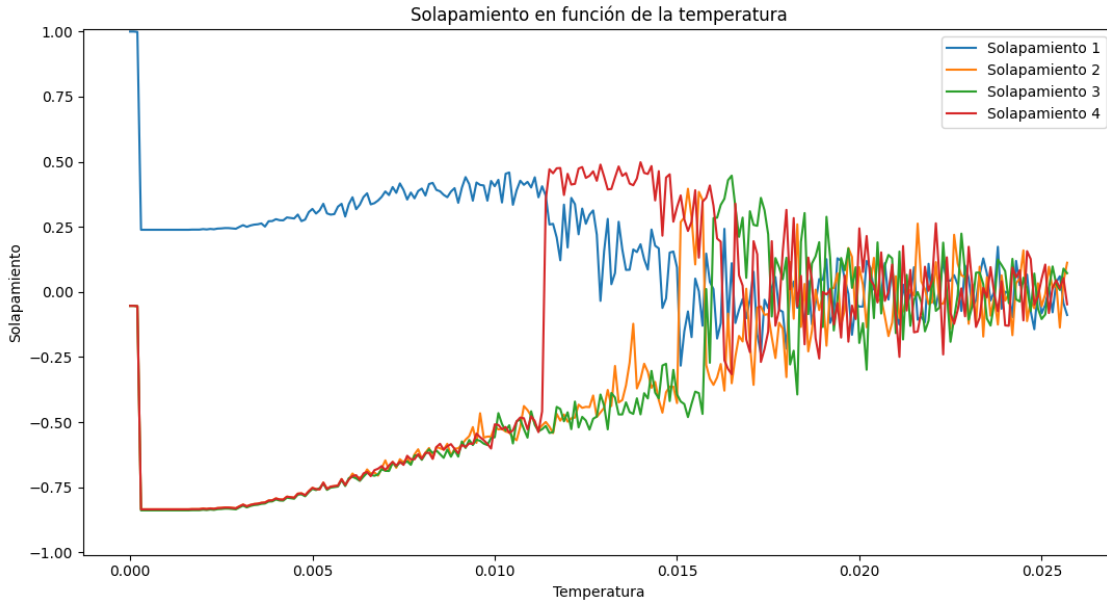


Figura 23: Solapamiento en funcion de T para 4 imagenes caso deformado

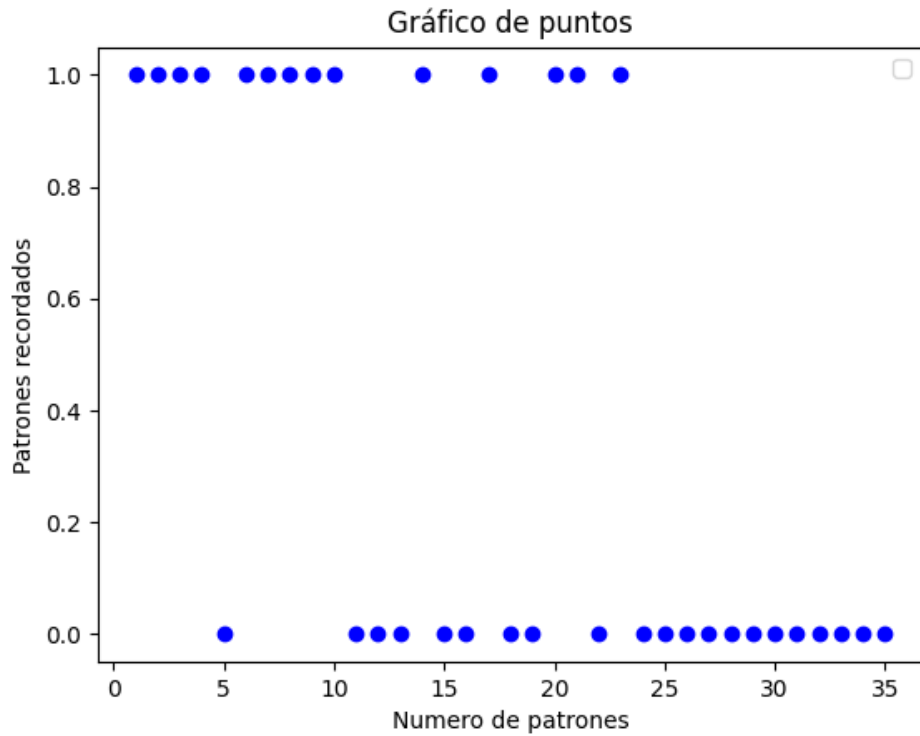


Figura 24: Patrones recordados

estado desordenado; y para valores entre  $T_1$  y  $T_2$ , el solapamiento disminuía con la temperatura. Además, se realizó un experimento para mejorar la zona de solapamiento perfecto utilizando un estado inicial que era una deformación del patrón dado. Sin embargo, se encontró que para defor-

maciones del 20 % el comportamiento del solapamiento con respecto a la temperatura era similar al del primer experimento, lo que indica que el estado inicial no tiene un gran impacto en el estado final, a diferencia de la temperatura.

Posteriormente, se investigó el efecto de introducir varios patrones en la red. Se realizó un análisis similar al del caso de un único patrón y se encontró que, además de los mínimos correspondientes a los patrones introducidos, también se encontraban las superposiciones de varios patrones. Esto implica que la red no solo converge a un patrón o no converge, sino que también existen estados intermedios. El comportamiento del solapamiento con respecto a la temperatura fue similar al caso de un único patrón.

Finalmente, se evaluó cómo cambia la capacidad de memoria de la red al aumentar el número de patrones. Se estableció un umbral de solapamiento para determinar si un patrón se recordaba o no, y se observó cuántos patrones podía recordar la red en función de la cantidad suministrada. Como era de esperar, la red fue capaz de recordar un único patrón cuando se introdujeron pocos patrones, pero no pudo recordar ninguno cuando se saturó con un gran número de patrones. Esto se explica por el hecho de que un alto solapamiento entre patrones dificulta el recuerdo de patrones adicionales.

En resumen, se concluye que tanto el aumento de la temperatura como el aumento del número de patrones introducidos disminuyen la capacidad de memoria de la red. Esto puede relacionarse con el modelo de Ising y la física, ya que ambos factores hacen que los mínimos de la función de energía sean menos pronunciados, dificultando que el sistema converja a un patrón específico. Además, al aumentar el número de patrones, se generan más mínimos en la función de energía, lo que dificulta el recuerdo de los patrones introducidos.

En conclusión, la red neuronal de Hopfield es un modelo sencillo de reconocimiento de patrones, pero su utilidad se ve limitada por el número de entradas utilizadas en su aprendizaje y la forma de dichas entradas.

## Referencias

- [1] Hopfield, J. J. (1982). Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 79(8), 2554–2558.
- [2] Amit, D. J., Gutfreund, H., & Sompolinsky, H. (1985). Storing infinite numbers of patterns in a spin-glass model of neural networks. *Physical Review Letters*, 55(14), 1530–1533.
- [3] Hertz, J., Krogh, A., & Palmer, R. G. (1991). *Introduction to the Theory of Neural Computation*. Addison-Wesley.
- [4] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087–1092.
- [5] Hinton, G. E., & Sejnowski, T. J. (1983). Optimal perceptual inference. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* (pp. 448–453).