

Modelo de Hopfield de la red neuronal.

Álvaro Royán González

Física computacional. Grupo A1

1 Fundamento teórico

Nuestro sistema consta de una red $N \times N$ de “neuronas” que se pueden encontrar en dos estados: encendidas ($s = 1$) o apagadas ($s = 0$). Estas interactúan entre sí alterando la energía total del sistema. Para calcular la probabilidad de que una transición ocurra recurrimos a la estadística de Boltzmann, se considera la expresión 1.

$$P(E \rightarrow E') = \min \left(1, e^{-\frac{E' - E}{kT}} \right) \quad (1)$$

El criterio que se ha seguido para considerar que la transición ocurre o no es la generación de un número aleatorio entre 0 y 1, si el número es menor o igual que $P(E \rightarrow E')$ realizamos el cambio. De esta forma cualquier transición a una energía menor $E' < E$ ocurre siempre, con un número suficiente de pasos se alcanza un mínimo de la energía.

Además se cumple que la hamiltoniana del sistema es independiente del tiempo por lo que su valor coincide con la energía. Suponemos un caso general en el que todas las neuronas interactúan con todas, además añadimos un término de autoenergía resultando en 2.

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

Para calcular la probabilidad de transición necesitamos conocer el valor de $E' - E = \Delta H$. Suponemos que cambia la neurona (n, m) , la energía va a variar por tres motivos: la interacción de todas las neuronas con la (n, m) (suma de ω_{nmkl}), la interacción de la (n, m) con todas las neuronas (suma de ω_{ijnm}) y la variación de la autoenergía, esto teniendo en cuenta que la transición se puede escribir como $1 - s_{nm}$ luego la diferencia entre los dos estados $1 - 2s_{nm}$.

$$\Delta H = -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \omega_{nmkl} (1 - 2s_{nm}) s_{kl} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \omega_{ijnm} s_{ij} (1 - 2s_{nm}) + \theta_{nm} (1 - 2s_{nm}) \quad (3)$$

$$\Delta H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\omega_{nmij} + \omega_{ijnm}) (1 - 2s_{nm}) s_{ij} + \theta_{nm} (1 - 2s_{nm}) \quad (4)$$

Esta última expresión es la que vamos a considerar para calcular la probabilidad de las transiciones. El valor de los coeficientes que se muestran dependen de las configuraciones iniciales de la red, los mínimos del hamiltoniano. Una configuración ξ^μ es una matriz con un estado determinado para cada uno de las neuronas s_{ij} . Si suponemos un total de P patrones iniciales la expresión para obtener los pesos sinápticos ω_{ijkl} es 5, mientras que la que proporciona el umbral de disparo θ_{ij} es 6.

$$\omega_{ijkl} = \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^P (\xi_{ij}^\mu - a^\mu) (\xi_{kl}^\mu - a^\mu) \quad (5)$$

$$\theta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \omega_{ijkl} \quad (6)$$

Donde los a^μ tienen la forma:

$$a^\mu = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \xi_{ij}^\mu \quad (7)$$

De esta forma los P patrones introducidos coinciden con mínimos de la Hamiltoniana, estos se alcanzan en el equilibrio a temperaturas bajas. Puede ocurrir que el sistema llegue al equilibrio formando uno de los patrones iniciales pero invertido ($0 \longleftrightarrow 1$), este modo también es un mínimo del hamiltoniano y se denomina estado espúreo. También puede ocurrir que en lugar de obtenerse un único patrón se llegue a una superposición de varios, proporcionando un estado intermedio. Esto ocurre cuando las configuraciones ξ^μ no son “ortogonales”, es decir, son parecidas. El estado intermedio también resulta en un mínimo de la energía.

Para medir el grado de similitud de una configuración al estado final de la red empleamos el solapamiento $m^1(s)$ dado por 8. Este toma un valor de 1 cuando se llega al propio patrón y -1 cuando se llega al estado espúreo. Cualquier valor intermedio corresponde con un grado menor de similitud, se trata de un mínimo local de la energía.

$$m^1(s) = \frac{1}{N^2 a^1 (1 - a^1)} \sum_{i,j=1}^N (\xi_{ij}^1 - a^1) (s_{ij} - a^1) \quad (8)$$

En el caso de que se introduzcan varios patrones iniciales consideramos el solapamiento $m^\mu(s)$ del patrón ξ^μ según 9.

$$m^\mu(s) = \frac{1}{N^2 a^\mu (1 - a^\mu)} \sum_{i,j=1}^N (\xi_{ij}^\mu - a^\mu) (s_{ij} - a^\mu) \quad (9)$$

Con estas expresiones ya podemos poner en funcionamiento el algoritmo de Metrópolis. Vamos a estudiar el solapamiento para un único patrón y varios predeterminados y en función del número de patrones (desde 1 hasta 50) pero aleatorios.

2 Resultados

2.1 Solapamiento de un solo patrón

Se ha escogido el patrón de la figura 1, es de 30×30 píxeles. Aunque sería interesante considerar patrones más grandes, para tener una definición mayor, el ordenador empleado para la ejecución del programa no soportaba patrones más grandes. Esto se debe a que los pesos sinápticos se corresponden con una matriz de dimensión 4, es decir, si partimos de un patrón de orden N estos coeficientes se introducen en una matriz con N^4 coeficientes, la memoria RAM se satura.

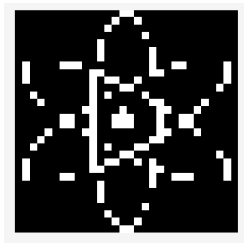
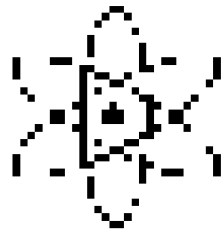


Figura 1: Patrón inicial.

Vamos a estudiar el solapamiento en dos casos: partiendo de unas condiciones iniciales aleatorias o iniciando con el propio patrón deformado al 50%, esto es, con la mitad de los píxeles cambiados de estado. Esto lo hacemos para un total de 9 temperaturas, no se van a mostrar todos los resultados ya que en muchos casos son similares.

- **Patrón inicial aleatorio**

Las temperaturas consideradas para las distintas ejecuciones del programa van desde $T = 0.0001$ hasta $T = 0.05$, cualquier valor superior o inferior devuelve patrones similares. A continuación se muestran algunos de los patrones formados tras 100 pasos Montecarlo, esto es, $100 \times N^2$ intentos de transición.



$T = 0.001$



$T = 0.01$



$T = 0.005$



$T = 0.02$

Todos estos parten del mismo patrón inicial (figura 2). Al inicio se obtiene el propio patrón mientras que conforme aumenta la temperatura comienza a difuminarse hasta hacerse indiscernible.



Figura 2: Patrón inicial aleatorio.

Para cuantificar el grado de similitud se ha calculado el solapamiento δ en función del número de pasos Montecarlo para cada temperatura. Esto se ve representado en la figura 3.

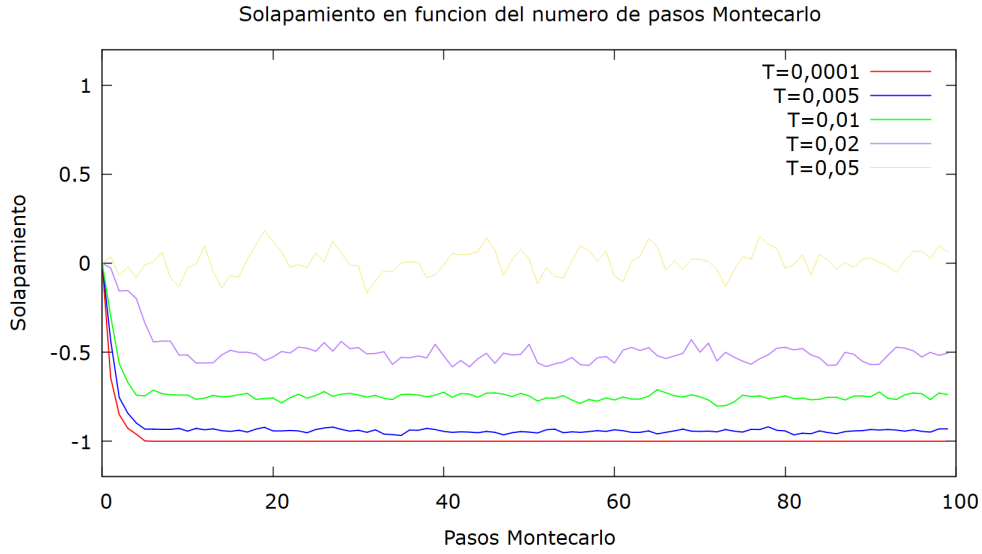


Figura 3: Solapamiento en función de los pasos Montecarlo para distintas temperaturas.

La tendencia en los 4 casos representados es hacia el estado espúreo en lugar de hacia el patrón de 1. Podemos ver como para temperaturas bajas el solapamiento toma un valor de -1, conforme aumenta la temperatura el solapamiento (en valor absoluto) se reduce hasta oscilar en torno al 0 para $T = 0,05$.

Estos resultados eran los esperados pero no permiten intuir el comportamiento de la función $m(T)$, vamos a repetir el procedimiento para un rango más amplio de temperaturas y calculamos el promedio del solapamiento en cada caso una vez el sistema se estabiliza (suponemos que esto ocurre después de 25 pasos Montecarlo).

En la figura 4 se muestra el resultado. Para temperaturas bajas ($T < 0.005$) se tiene un valor de 1 prácticamente, en el rango intermedio ($0.005 < T < 0.03$) hay un decrecimiento aproximadamente lineal y para temperaturas altas ($T > 0.03$) el solapamiento se estabiliza en un valor cercano al cero. En este caso se ha considerado el valor absoluto para evitar que las contribuciones del estado normal y el espúreo se contrarresten.

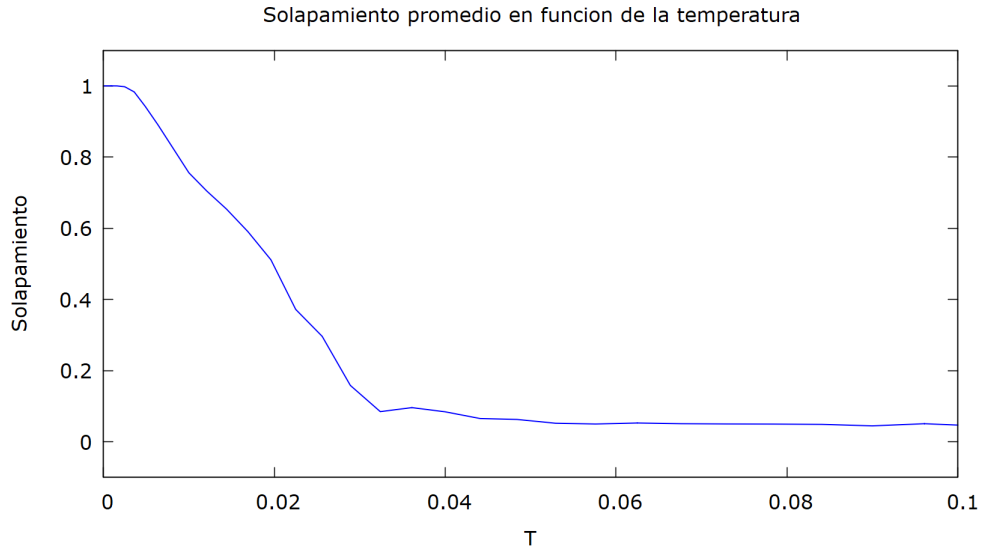


Figura 4: Solapamiento en función de los pasos Montecarlo.

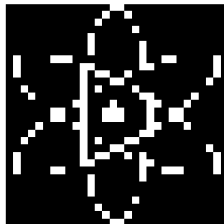
- **Patrón inicial al 50% de deformación**

Realizamos un análisis similar al anterior pero con el patrón inicial deformado en lugar de uno aleatorio. En el instante inicial la configuración del sistema tiene la forma de 5.



Figura 5: Patrón inicial al 50% de deformación.

Con las mismas temperaturas que en el apartado anterior (siempre consideramos estas) realizamos 100 pasos Montecarlo resultando en las siguientes configuraciones al final del proceso.



$T = 0.0001$



$T = 0.002$



$T = 0.01$



$T = 0.02$

La única diferencia destacable es que en este caso se obtiene el estado normal en lugar del invertido, este hecho no tiene relevancia ya que no es algo constante sino una casualidad, en otra ejecución puede obtenerse el estado espúreo con la misma probabilidad (50% de deformación).

También se ha estudiado la curva $m(T)$ en las 9 temperaturas particulares y en un rango mayor. Se llega al resultado de 6 si vemos el solapamiento en función del número de pasos, similar al caso anterior. Si calculamos el solapamiento en función de la temperatura volvemos a obtener la gráfica 4, la deformación no influye en absoluto.

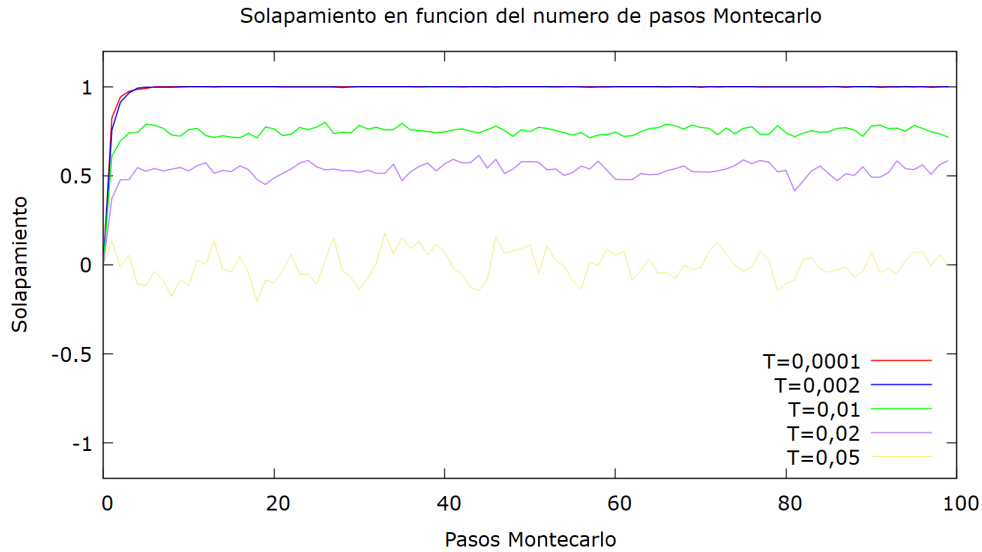


Figura 6: Solapamiento en función de los pasos Montecarlo para distintas temperaturas.

2.2 Solapamiento de varios patrones

En este apartado se han considerado un total de 4 patrones, cada uno de ellos se compone por un número del 1 al 4 en una esquina y el fondo en blanco. Se colocan los números en esta disposición ya que si se pusieran en el centro el patrón final resulta ser una superposición de los números, haciendo difícil discernir de qué patrones se trata.

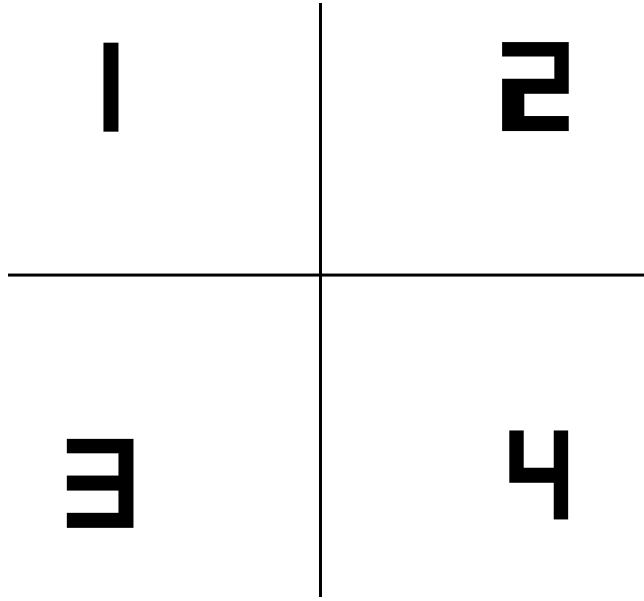


Figura 7: Patrones iniciales.

Vamos a repetir exactamente los pasos del programa anterior solo que en este caso consideramos el solapamiento según 9.

- **Patrón inicial aleatorio**

Las condiciones iniciales generadas por el programa son las de la figura 8.

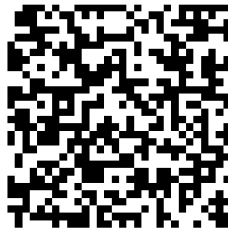
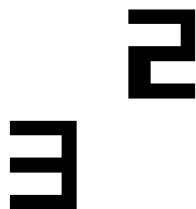
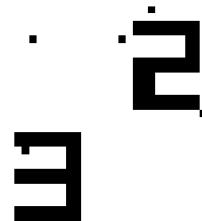


Figura 8: Patrón inicial aleatorio.

Algunos ejemplos de las configuraciones generadas tras 100 pasos Montecarlo son las siguientes.



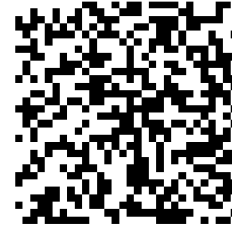
$T = 0.0002$



$T = 0.002$



$$T = 0.01$$



$$T = 0.05$$

Podemos ver como para temperaturas bajas se obtiene una superposición de los patrones 2 y 3, para temperaturas más altas la superposición es de 3 y 4 con 2 en el estado espúreo y finalmente cualquier patrón desaparece para $T = 0.05$.

El resultado para $T = 0.01$ es extraño, se superponen 2 estados normales con un antipatrón. Aunque en principio sería lógico que los patrones que se superpongan lo hiciesen todos en el mismo estado para así alcanzar un mínimo de la energía parece que para temperaturas medias esto no es necesario, el “agitamiento térmico” consigue mover el sistema hacia el antipatrón 2.

En la figura 9 se muestra el solapamiento de cada uno de los patrones en función del paso Montecarlo y para varias temperaturas.

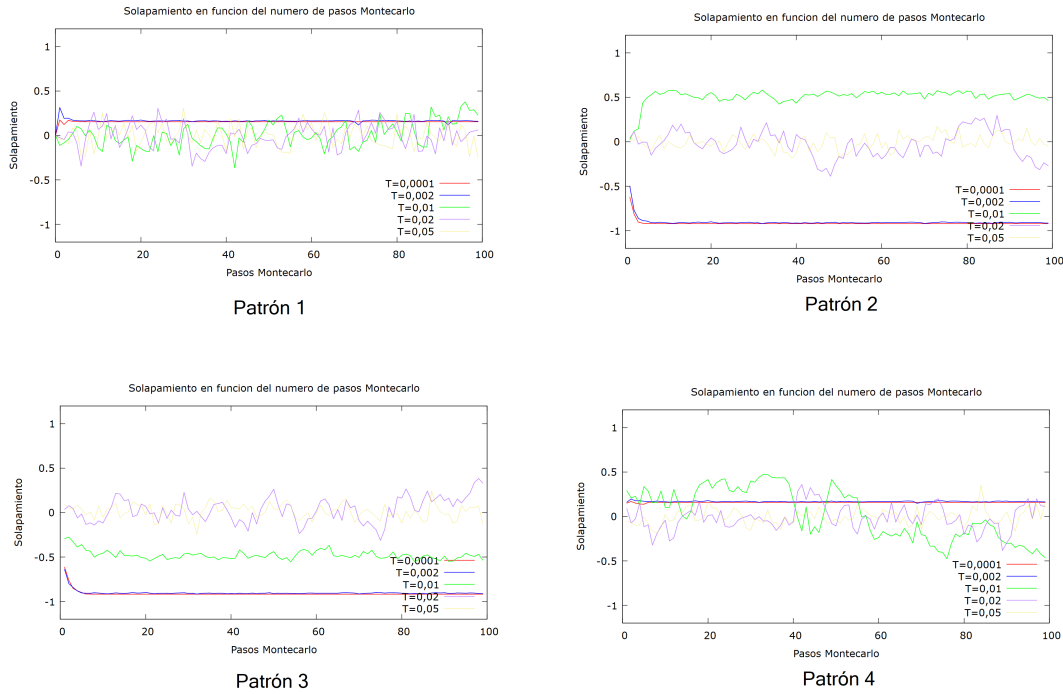


Figura 9: Solapamiento de los patrones en función del paso Montecarlo.

La única tendencia clara es que conforme aumenta la temperatura el solapamiento decae. Puede verse que el solapamiento de los patrones 2 y 3 es mayor pero esto no tiene relevancia, en otra ejecución del programa otros patrones pueden hacerse más relevantes.

Si probamos con un mayor número de temperaturas se obtiene la gráfica de 10.

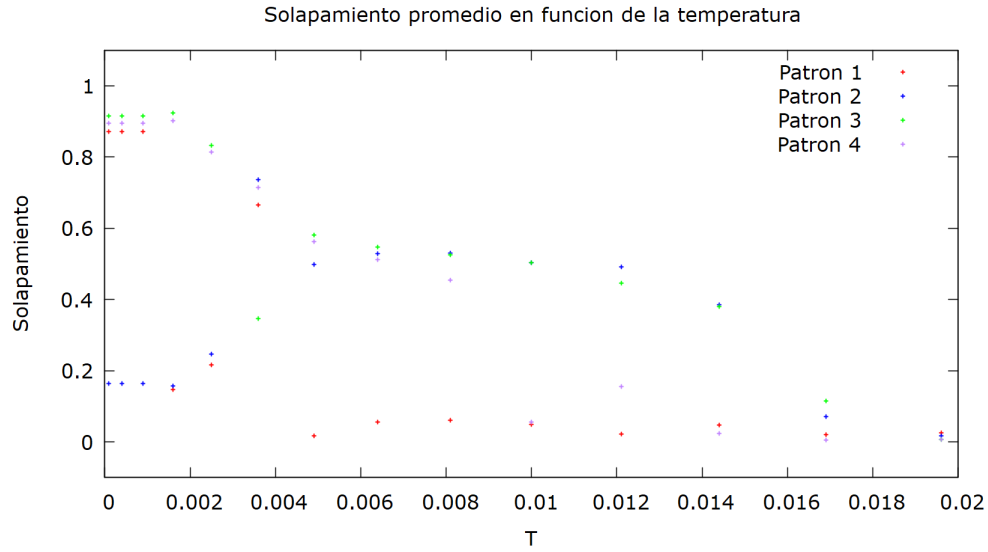


Figura 10: Solapamiento de los patrones en función de la temperatura.

En este caso la tendencia ya no es tan clara además no se obtiene nunca un solapamiento de 1, esto se debe a la superposición de los patrones. El decaimiento es más rápido en este caso, tiende a 0 para $T > 0,016$, en el caso anterior era $T > 0,03$. Que haya varios patrones con un solapamiento elevado se debe a la similitud de los mismos, en el apartado 2.3 veremos como esto ya no ocurre.

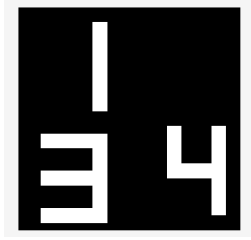
- **Patrón inicial al 50% de deformación**

Como condiciones iniciales deformamos el patrón del 1 al 50% resultando en 11. Como podemos ver no importa demasiado que patrón se escoja deformar ya que no es apreciable desde cual se parte.

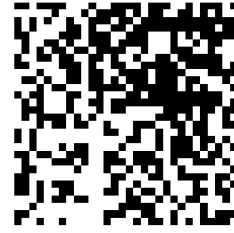


Figura 11: Patrón inicial al 50% de deformación.

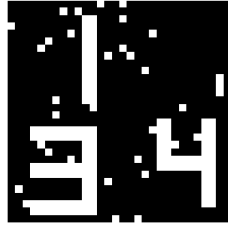
Volvemos a ejecutar el programa con las mismas temperaturas.



$T = 0.0001$



$T = 0.01$



$T = 0.002$



$T = 0.02$

Cuando la temperatura es baja tenemos una superposición de 1, 3 y 4 en el estado espúreo, luego se transiciona al normal.

En este caso no vamos a mostrar los resultados del solapamiento en función de los pasos Montecarlo y la temperatura, son idénticos a los del apartado anterior.

2.3 Solapamiento en función del número de patrones

En este caso realizamos una modificación del programa para que genere patrones aleatorios y aplicamos siempre con condiciones iniciales aleatorias. Calculamos el solapamiento promedio de cada patrón introduciendo desde 1 hasta 50, para esto comenzamos a contar el solapamiento a partir del paso 25 para dejar que el sistema se estabilice. La temperatura considerada es $T = 10^{-4}$, queremos estudiar la memoria de la red en función del número de patrones por esto es necesario que la temperatura sea baja. El tamaño de la red para este apartado es algo más bajo, $N = 20$, y se consideran 100 pasos Montecarlo.

Vamos a considerar que un patrón se recuerda si $|m^\mu(s)| > 0,75$, una vez calculado el solapamiento promedio contamos en cuantos casos se verifica la condición. Se han realizado 10 ejecuciones del programa y se ha calculado la media de patrones recordados en cada caso, el resultado es el de la figura 12.

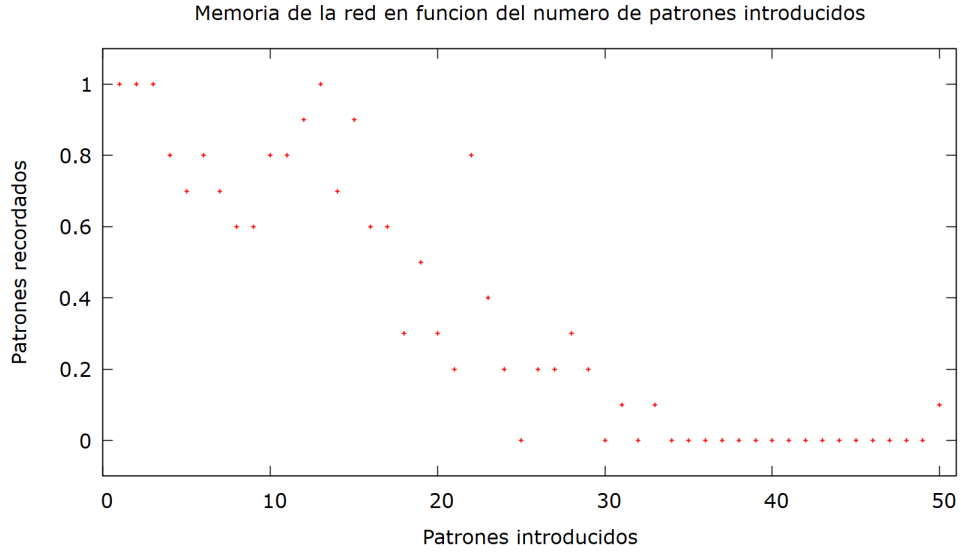


Figura 12: Patrones recordados en función del número total de patrones.

Vemos una clara tendencia decreciente de la memoria conforme el número de patrones aumenta, tendiendo a 0 en torno a los 30 patrones. Aunque la temperatura sea baja un número grande de patrones introduce muchos mínimos locales que no se corresponden con ningún estado introducido. Además como los patrones son aleatorios no van a tener gran similitud y es muy poco probable que se recuerden dos patrones al mismo tiempo, puede verse que nunca se llega a un valor mayor que 1.

Podemos calcular también la fracción de patrones recordados P_c/N^2 , con P_c el número de patrones recordados, naturalmente la gráfica tiene la misma forma en este caso (figura 13).

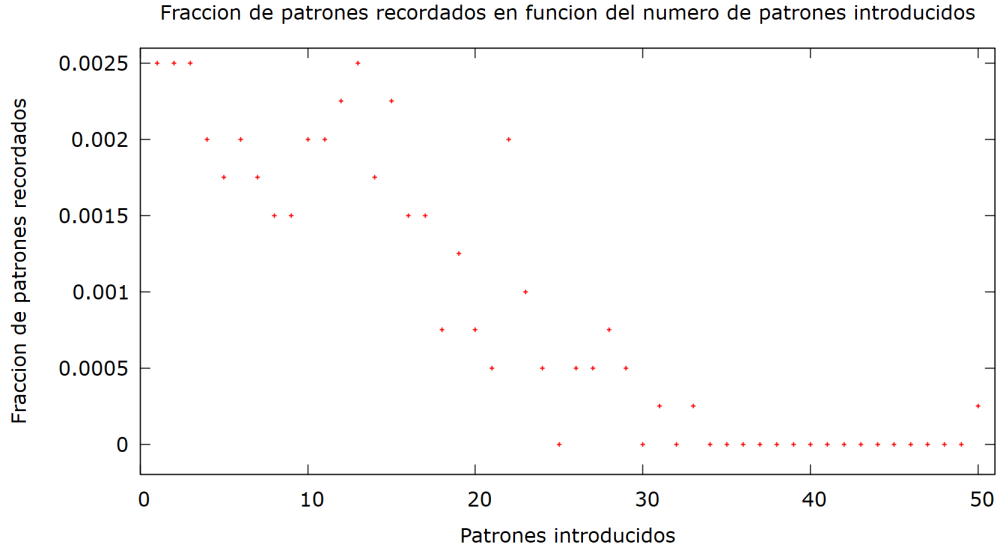


Figura 13: Fracción de patrones recordados en función del número total de patrones.

3 Conclusiones

Se ha comprobado la capacidad de recordar patrones de una red neuronal de Hopfield en función de la temperatura y en función de el número de patrones introducidos, esto para condiciones iniciales aleatorias o bien partiendo de un patrón deformado. Además se ha podido cuantificar el grado de similitud del estado final con los patrones empleando el solapamiento.

Se ha visualizado la forma de la curva $m(T)$, siendo esta constante para temperaturas altas y bajas con una recta que une estas dos zonas para temperaturas medias.

También se ha podido comparar la memoria de la red cuando se introducen patrones ortogonales (2.3) y no ortogonales (2.2), resultando en un grado mayor de solapamiento en el segundo caso.

Se ha podido comprobar como los patrones introducidos efectivamente constituían mínimos de la Hamiltoniana, tanto en su estado normal como en el spúreo, y como los mínimos locales (que no coinciden con el patrón introducido o su inverso) pueden estar formados por patrones normales e invertidos, aunque esto último en el caso de temperaturas medias.

Sin embargo, no se ha realizado ningún análisis de la red en función del número de neuronas. Aunque esta hubiese sido interesante considerar más valores de N este se ve muy limitado por la capacidad del ordenador. Las matrices en 4 dimensiones saturan muy rápidamente la memoria RAM conforme aumenta N .

4 Referencias

1. Hopfield (RNA). (2022, 6 de junio). Wikipedia, La enciclopedia libre. Fecha de consulta: 13:12, junio 26, 2022 desde enlace.
2. El modelo de Hopfield. (2022, 6 de junio). Sociedad andaluza de de ecuación matemática Thales. Fecha de consulta: 13:13 junio 26, 2022 desde enlace.