## MODELOS BASADOS EN ENERGIA

## MEMORIA ASOCIATIVA Y ENERGIA EL MODELO DE HOPFIELD

**Problema**: almacenar un conjunto de patrones de información de tal manera que, cada vez que se pone una entrada al sistema,la salida sea el patrón que más información tiene en común con la entrada.

→ Procedural: un programa secuencial en una máquina von Neumann.

## Soluciones

→ Conexionista: típicamente, una red neuronal.

(existen, claro, otros paradigmas)

#### Ejemplo:

Patrón 1: jorgeBcorrientes1161B49627781

Patrón 2: irmaBBmedranoBBB580BB4873440B

Patrón 3: pabloBcordobaBBB4215BB47751763

(B = espacio en blanco)

Resolución procedural típica: base de datos. Podrá recuperar el patrón 3 con la entrada "cordoba", p.ej., pero nada podrá hacer si la entrada es "bloBcor". La entrada debe ser una unidad de información completa (aunque mínima). La tolerancia a fallas es poca.

Buscaremos asociar una energía a cada posible configuración del sistema y los mínimos de esa energía a las memorias (los patrones a memorizar).

## Sistema físico:

$$X = X_0 + \Delta X = X_0$$

 $x_0$ : estado estable (mínima energía:  $E_p = 0$ ,  $E_c \rightarrow calor$ ))

x : conocimiento parcial de xo

 $\Delta x$ : error

#### Muchas memorias:



## MODELO DE HOPFIELD

Elemento básico: neurona de McCulloch y Pitts (1943)

$$S_i(t+\Delta t) = sgn(\sum w_{ij} S_i(t) - \theta_i)$$

con 
$$sgn(x) = 1 si x \ge 0, -1 si x < 0$$

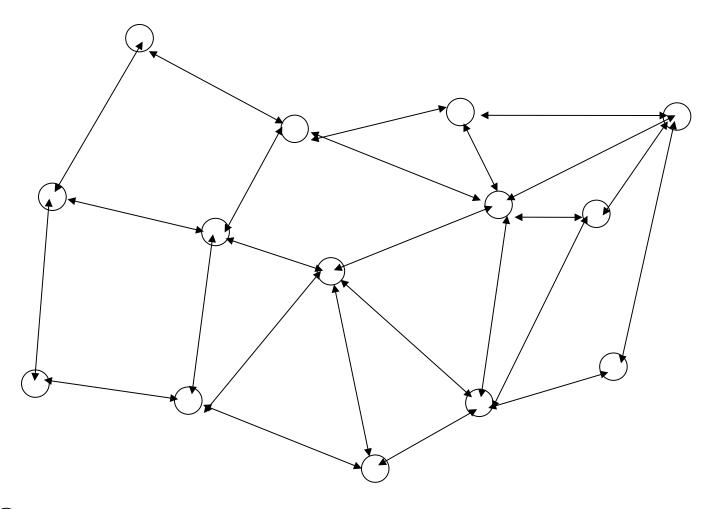
Si estado de la unidad i : 1 ≡ activa , -1 ≡ inactiva

Observación:  $W_{ij}$ ,  $\theta_i$  son invariantes en el tiempo, pues en ellos está contenida la información (las memorias).

#### Formas de actualización:

- Sincrónica: reloj central, supervisor.
- **Asincrónica**: implementación paralela, la probabilidad de que dos unidades se actualicen al mismo tiempo es nula.

# Red recurrente (Hopfield) para memoria asociativa



O neurona

conexión sináptica

## UNA ENERGIA ADECUADA

¿Qué definición de energía será apropiada para la dinámica definida arriba? (i.e. el sistema evolucione hacia sus mínimos) Se propone:

$$E(x) = -x W x = -\sum w_{ij} x_i x_j = -1/2 \sum w_{ij} x_i x_j$$
pares i,j
i,j

Interpretación:  $w_{ij}$  es una restricción que tiende a hacer que i y j tomen el mismo valor, si  $w_{ij} > 0$ , o contrario, si  $w_{ij} < 0$ .

$$E(x) = -1/2 \sum w_{ij} x_i x_j - 1/2 \sum w_{ki} x_k x_i - 1/2 \sum w_{ik} x_i x_k = i$$

$$-1/2 \sum w_{ij} x_i x_j - \sum w_{ki} x_k x_i \qquad \text{siempre que } w_{ik} = w_{ki}$$

$$i,j \neq k \qquad i$$

$$= S - \sum w_{ki} x_k x_i = S - x_k \alpha_k \qquad \alpha_k \text{ activación de } x_k$$

Sea  $E(x') = S - x'_k \alpha_k$  energía después de que k se actualizó

$$\rightarrow \Delta E = E(x') - E(x) = (x_k - x'_k) \alpha_k = -\Delta x_k \alpha_k \qquad (1)$$

$$\rightarrow \Delta E \leq 0$$
 (analizando caso  $\alpha_k \geq 0$  y  $\alpha_k < 0$ )

Pero E es acotada inferiormente  $\rightarrow$  alcanzaría un mínimo (local).

A partir de allí: sólo cambios tales que  $\Delta x \neq 0$  y  $\Delta E = 0$ .

$$\rightarrow$$
 (por (1) )  $\alpha_k = 0 \rightarrow$  cambio de -1 a 1  $\rightarrow$  a lo sumo N más.

Luego, estabilización.

Notar: esta propiedad es independiente de cómo se definan los W<sub>ij</sub>.

## **PESOS**

Hopfield propone:

$$w_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^{p} \xi_{i}^{\mu} \xi_{j}^{\mu}$$
.

Interpretación (semi-intuitiva): correlación entre el estado de la neurona i y la j.

Si <u>frecuentemente</u> (en el conjunto de memorias)  $S_i = S_j \rightarrow \text{cada}$  una contribuye positivamente (excitatoriamente) a que la otra tome su mismo estado.

Si <u>frecuentemente</u> (en el conjunto de memorias)  $S_i = -S_j \rightarrow \text{cada}$  una está haciendo una contribución para que la otra tome el estado contrario)

## INSPIRACION BIOLOGICA: POSTULADO DE HEBB (1949)

Cuando un axón de una célula A está suficientemente próximo para excitar a una célula B o toma parte en su disparo de forma persistente, tiene lugar algún proceso de crecimiento o algún cambio metabólico en una de las células, o en las dos, de tal modo que la eficiencia de A, como una de las células que desencadenan el disparo de B, se ve incrementada.

D. Hebb, The organisation of behaviour, 1949

Observación: Hopfield va más allá de la hipótesis de Hebb, ya que cuando ambas memorias (pre- y post-sináptica) están inactivas, su conexión también se incrementa positivamente, lo cual probablemente no sea realista desde un punto de vista biológico.

## **ESTABILIDAD**

<u>Definición</u>:  $\{\xi_{\mu}\} \mu = 1, ..., p$  se dicen pseudoortogonales sii

$$E\left(\xi\mu\,\,\xi\nu\right)=0$$

cuando µ≠v (ortogonales en valor medio)

- Para un conjunto de patrones pseudoortogonales aprendidos  $\{\xi_{\mu}\}$   $\mu = 1,...,p$ , la probabilidad de que un determinado bit de uno de ellos sea inestable decrece cuando N/p crece.

$$\sqrt{N/2p}$$

$$P(sgn (hiv) \neq \xi iv) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - 2 / \sqrt{\pi} \int_{0}^{\infty} \exp(-u \wedge 2) du \right\}$$

Sólo se refiere a la estabilidad inicial → es cota superior.

- Un análisis más fino (desde la teoria de *spin glasses*) muestra que cuando  $p \approx 0.138 N$  se produce una avalancha de cambios.

## **ESTADOS ESPURIOS**

p/N > valor crítico $\rightarrow$ puntos fijos no deseados ( $\xi \neq \xi(\mu)$  para todo  $\mu$ )

## En general:

- Cuencas de atracción menores
- Energía mayor
- Combinaciones lineales de las memorias

## **ESTADOS ESPURIOS**

- I) **Inversos**: el "negativo" del memorizado: —**ξ**" por la perfecta simetría del modelo. *Misma energía que el original*
- ii) **Espurios mixtos**: combinaciones lineales de número impar de patrones

$$\xi_i^{\text{mix}} = \text{sgn}(\pm \xi_i^{\mu_1} \pm \xi_i^{\mu_2} \pm \xi_i^{\mu_3})$$

Observando que

$$h_i^{\text{mix}} = \frac{1}{N} \sum_{i\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} \xi_j^{\text{mix}} = \frac{1}{2} \xi_i^{\mu_1} + \frac{1}{2} \xi_i^{\mu_2} + \frac{1}{2} \xi_i^{\mu_3} + \text{cross-terms}$$

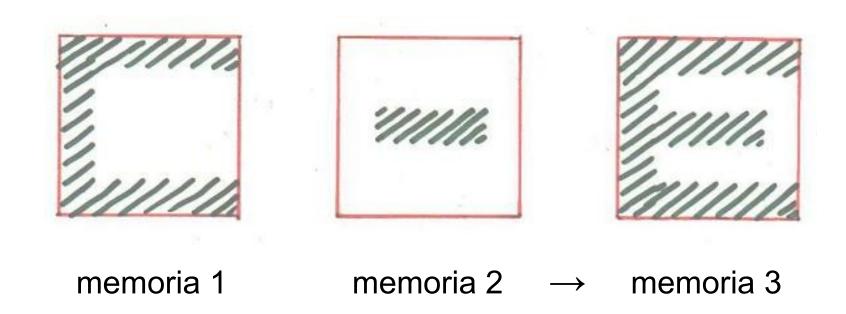
la condición de estabilidad se satisface (en valor medio).

- Vale para 5, 7, etc. términos, con cuencas decrecientes y energía creciente → menos estables
- iii) **Spin glasses**: para *p* grande, no correlacionados con ningún número finito de los patrones originales.

#### IMPORTANCIA DE LA ALINEALIDAD EN EL MODELO

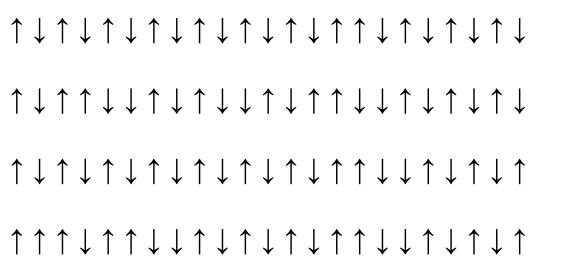
En general, en todas las arquitecturas de RN.

De lo contrario: subespacios de estados estables → *infinitos* estados espurios



#### LA MECANICA ESTADISTICA Y EL MODELO DE HOPFIELD

## Modelo de Ising



#### Postulado básico:

- a alta temperatura, cada spin está en 1 o en -1 con igual probabilidad
- a baja temperatura, cada spin tiende a alinearse paralelo a su campo local

 $h_i = \sum w_{ij} S_j + h_e$  campo magnético sobre la partícula i

S<sub>j</sub> spin de la partícula j

*Wij = Wji* fuerzas de interacción

he campo externo

Energía:

$$H = -1/2 \sum w_{ij} S_i S_j - he \sum S_i$$

Analogía:

## Modelo de Hopfield Modelo de Ising

pesos sinápticos ↔ fuerzas de interacción entrada neta a una neurona ↔ campo sobre un spin umbral ↔ campo externo

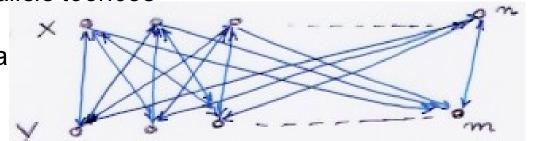
## UN MODELO BASICO, MUCHAS VARIANTES Y EXTENSIONES

- Estocástico (inspirado en la mecánica estadística)  $Si(t+\Delta t) = +1$  con probabilidad g(hi(t)), -1 con probabilidad 1 - g(hi(t))

$$g(h) = 1 / (1 + \exp(-2\beta h))$$
 y  $\beta = 1/KBT$ 

<u>Ventaja</u>: se eluden los estados espurios (mínimos locales) con alta probabilidad. Desventaja: no podemos determinar a qué memoria, dado un estado inicial, converge el sistema

- Variable continua (Hopfield '84):  $V_i = g(u_i) = g(\Sigma w_{ij}V_j)$  $u_i$  entrada neta a i  $V_i$  salida de i
- Ventajas (según su autor)
- .Mayor realismo biológico
- .Posibilidad de aplicaciones mediante implementación circuital
- .Mayor facilidad para los análisis teóricos
- Bidireccional entrada(BAM, Kosko)



# Problema del Viajante (TSP)

Modelo para el problema (Hopfield-Tank):

mínimos de energía ↔ mínimos de la función de costo

Restricciones:

$$\sum_{a} \eta_{ia} = \sum_{i} \eta_{ia} = 1 \quad \forall i, \forall a$$

incorporadas a la función de energía.

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} d_{ij} \eta_{ia} (\eta_{j,a+1} + \eta_{j,a-1})$$

$$E = L + \frac{Y}{2} \left\{ \sum_{a} \left( 1 - \sum_{i} \eta_{ia} \right)^{2} + \sum_{i} \left( 1 - \sum_{a} \eta_{ia} \right)^{2} \right\}$$

Variables de estado: binariàs;  $\eta ia = 1$  si la ciudad i está en la posición j del tour, 0 si no.

J.J. Hopfield y D.W. Tank, Computing with Neural Circuits: a Model, Science, **233**, 625-633.

# Bipartición de grafos

#### Minimizando:

- Número de arcos que cruzan entre un conjunto y otro.
- Diferencia de cardinalidad entre ambos conjuntos

$$Cij = 1$$
 si hay un arco entre  $i$  y  $j$ , 0 si no

Variables de estado: binarias; 
$$S_i = \begin{cases} +1 & \text{si } i \in A \\ -1 & \text{si } i \in B \end{cases}$$

Restricción: ∑Si incorporada a la función de energía

Función objetivo (a minimizar):  $F = -\sum_{pares i,j} C_{ij} S_i S_j$  sujeto a la restricción anterior

$$\Rightarrow H = F + \mu \left(\sum_{i} S_{i}\right)^{2} = -\sum_{pares \ i,j} C_{ij} S_{i} S_{j} + 2 \mu \sum_{pares \ i,j} S_{i} S_{j} + N \mu = N \mu - \sum_{pares \ i,j} w_{ij} S_{i} S_{j}$$

$$con \ w_{ii} = C_{ii} - 2 \mu$$

## MODELO DE HOPFIELD ESTOCASTICO

Inspirado en la mecánica estadística

$$Prob(S_i = \pm 1) = f_{\beta}(\pm h_i) = \frac{1}{1 + \exp(\mp 2\beta h_i)}$$

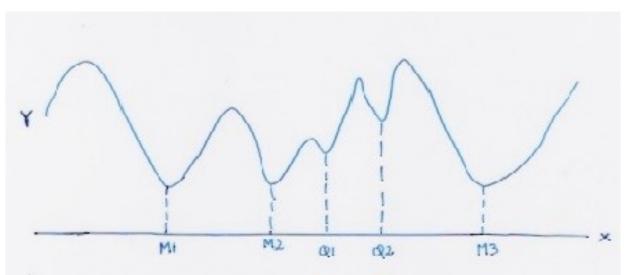
función logística, con  $\beta = 1/K_BT$ 

cada vez que la neurona i es elegida para actualización

<u>Ventaja</u>: se eluden los estados espurios (mínimos locales) con alta probabilidad.

<u>Desventaja</u>: no podemos determinar a qué memoria, dado un estado inicial, converge el sistema.

## METAFORAS Y PAISAJES



#### Funciones de memoria asociativa

Reconocimiento: respuesta positiva a la percepción ("está en memoria").

Recuerdo: reconstrucción de una memoria completa basada en un fragmento.

## El ruido y sus efectos

Bajo: estados espurios

Medio: desestabilización de espurios, pocos errores en recuperación de

memorias

Alto: sin estados espurios, dinámica ergódica

## MODELOS NEUROPSICOLOGICOS

## Hoffman (I)

**Esquizofrenia**: múltiples fragmentos ↔ estados espurios, combinaciones combinados, estructura incoherente estables de fragmentos atractores pero estable.

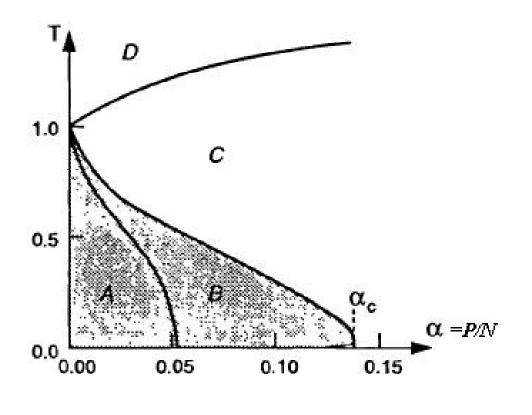
R.E. Hoffman, Computer simulations of neural information processing and the schizophrenia-mania dichotomy, Archives of General Psychiatry, 44, 178

#### **Amit**

**Epilepsia + ritalina**: reconocimiento ↔ recuperación de patrón memorizado, más lento; el número de errores decrece pero demandando más tiempo

D.J. Amit, Modeling Brain Function, Cambridge University Press, 1989

## DIAGRAMA DE FASES



 $\alpha_{c(t)} \approx (1-T)$  frontera entre B y C

A: las memorias son mínimos globales

B:  $E(spin glasses) < E(memorias) \rightarrow los s.g. son los más estables$ 

C: sólo s.g. son estables

D: no hay estados estables ( salvo <Si> = 0 ) para T suficientemente alta

## **ESTABILIDAD**

- Memorias: A, B
- Espurios mixtos: subregión triangular de A U B, decreciente con el número de términos de la combinación lineal, máxima para tres memorias (hasta  $T_c = 0.46$ ;  $\alpha_c = 0.03$ )
- Spin glasses: B, C

memorias estables

 $\rightarrow$  0,46 < T < 1 garantizaría { mixtos inestables y s.g. menos estables si  $\alpha$  pequeño

### HOPFIELD ESTOCASTICO

- Glauber ('63): dotar a Ising de dinámica estocástica.
- → sistema en contacto con un baño de calor a temperatura fija.

#### **Ensamble Canónico:**

- Tamaño (#partículas) : fijo
- *T* : fija
- E : variable

Postulado de Autopromediación (self-averaging): cualquier propiedad del sistema en equilibrio se puede calcular como sobre un "ensemble" de sistemas idénticos con distribución de probabilidades ≈ exp(-E/kT)

- → promedio temporal

   (a intervalos suficientemente grandes)
- promedio sobre muchos sistemas (o en diferentes partes) que aparecen en distintos estados (con frecuencia relativa ≈ exp(-E/kT) y descorrelacionados entre sí)

Hipótesis: *Balance Detallado* (de la teoría de procesos markovianos)

Sea W(A/B) la matriz de probabilidades de transición de B a A.

$$\rightarrow$$
 si existe F:  $W(A/B)$   $F(B) = W(B/A)$   $F(A)$  para todo par A, B

entonces  $\rho_A(n) \longrightarrow F(A)$  (con  $n \to \infty$ ) solución estacionaria

Nuestro caso: si  $F(A) = exp(-E_A/kT) \rightarrow$  el proceso se estabiliza en la distribución de Gibbs (Boltzmann):

$$\rightarrow \rho_A \approx C \exp(-E_A/kT)$$
 C constante de normalización

$$C = 1/Z$$
,  $Z = \sum_{\Delta} exp(-E_A/kT)$  función de partición

<u>TEOREMA</u>: si Wii = 0 para todo i, entonces la dinámica de Hopfield-Glauber cumple balance detallado

<u>Demostración</u>: Wii =  $0 \rightarrow h_i$  independiente de  $S_i$ 

Supongamos  $S_{i,A} = -S_{i,B} \equiv S_i$  i.e.  $P(A/B) = Prob (S_i \rightarrow -S_i)$ 

$$W(A/B) = (1/N) \ 1/(1 + \exp{(2\beta h_i S_i)} \ ; \ W(B/A) = (1/N) \ 1/(1 + \exp(-2\beta h_i S_i)$$

$$\rightarrow$$
  $W(A/B) / W(B/A) = exp(-\beta h_i S_i) / exp(\beta h_i S_i) = exp(-2h_i S_i / kT)$ 

$$\rightarrow$$
  $W(A/B) \exp(-E_B/kT) = W(B/A) \exp(-E_A/kT)$ 

Ergodicidad: cualquier condición inicial conduce al mismo equilibrio

→ clasificador a baja temperatura sorteando espurios (≈ mínimos locales)