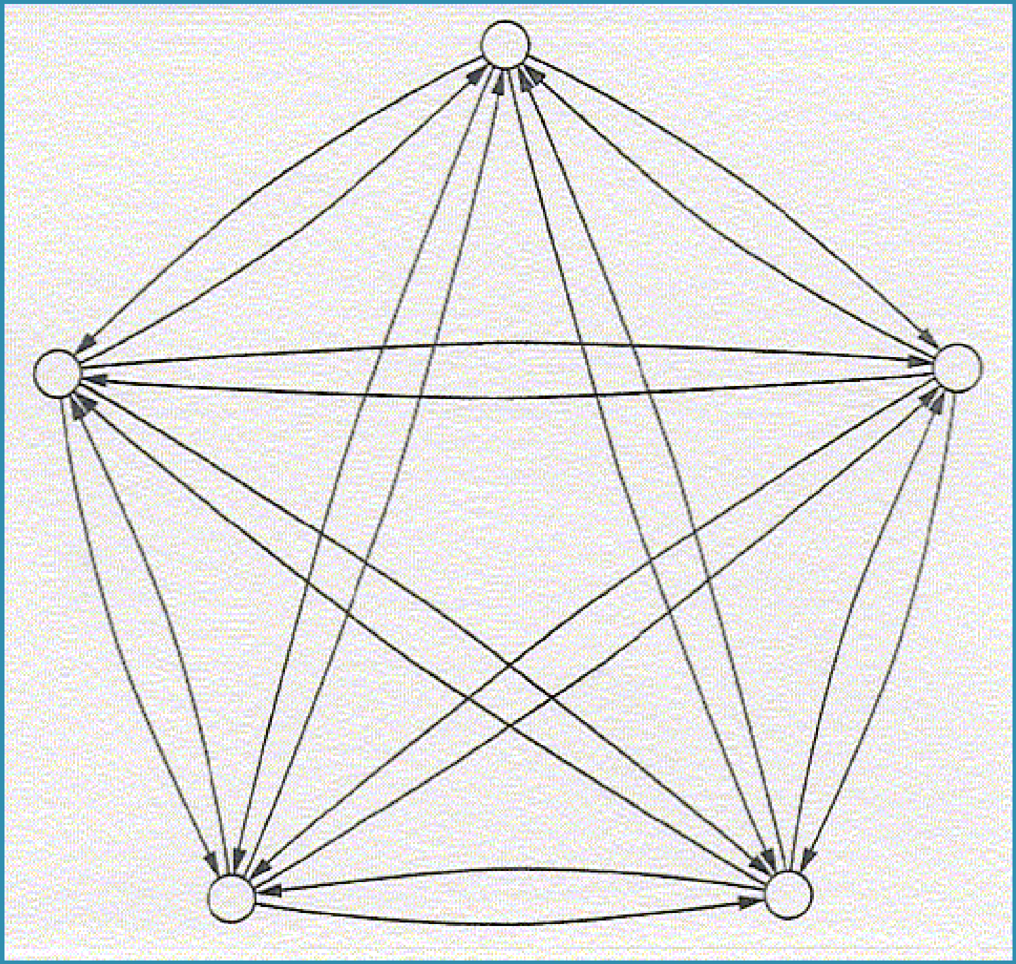
# Δίκτυα τύπου Hopfield

# Επίλυση προβλημάτων συνδυαστικής βελτιστοποίησης

# Δίκτυο Hopfield



$w_{ij}=w_{ji}$, $i,j=1,\ldots,N$

$w_{ii}=0$, $i=1,\ldots,N$

# Διακριτό δίκτυο Hopfield

Διακριτός χρόνος

Δυαδικές / διπολικές τιμές κόμβων

Συμμετρικά βάρη ($w_{ij}=w_{ji}$, $w_{ii}=0$, $i,j=1,\ldots,N$)

$$u_i(t+1)=\sum_{j=1}^{N} w_{ij} y_j(t)+\theta_i$$

$$y_i(t+1)=\begin{cases} 1 & u_i(t+1)>0 \\ y_i(t) & u_i(t+1)=0 \\ 0 & u_i(t+1)<0 \end{cases}$$

# Διακριτό δίκτυο Hopfield

Συνάρτηση ενέργειας

$$E(\vec{y}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} w_{ij} y_i y_j - \sum_{i=1}^{N} \theta_i y_{\mathrm{i}}$$

Ασύγχρονη ενημέρωση (δυαδικές τιμές)

$$\Delta E_i = (2y_i - 1)\left(\sum_{j \neq i} w_{ij} y_j + \theta_i\right)$$

# Διακριτό δίκτυο Hopfield

Αν $\Delta E_i<0$ η ενημέρωση γίνεται δεκτή, αλλιώς απορρίπτεται.

$\Rightarrow$ Σύγκλιση σε κατάσταση ισορροπίας

με $\Delta E_i \geq 0$ για κάθε $i$

(τοπικό ή ολικό ελάχιστο)

Πρόβλημα εγκλωβισμού σε τοπικά ελάχιστα

$\Rightarrow$ *Simulated Annealing*

# Αναλογικό δίκτυο Hopfield (Hopfield & Tank, 1985)

Συνεχής χρόνος

Συνεχείς τιμές κόμβων ( $\in$[0,1] ή [-1,1] )

*Συμμετρικά* βάρη ($w_{ij}=w_{ji}$, $w_{ii}=0$, $i,j=1,\ldots,N$)

$$\dot{u}_i = \sum_{j=1}^{N} w_{ij} y_j + \theta_i$$

$$y_i = f\left(u_i\right)$$

f: sigmoid / tanh
(μονοτονία)

# Αναλογικό δίκτυο Hopfield

Συνάρτηση ενέργειας

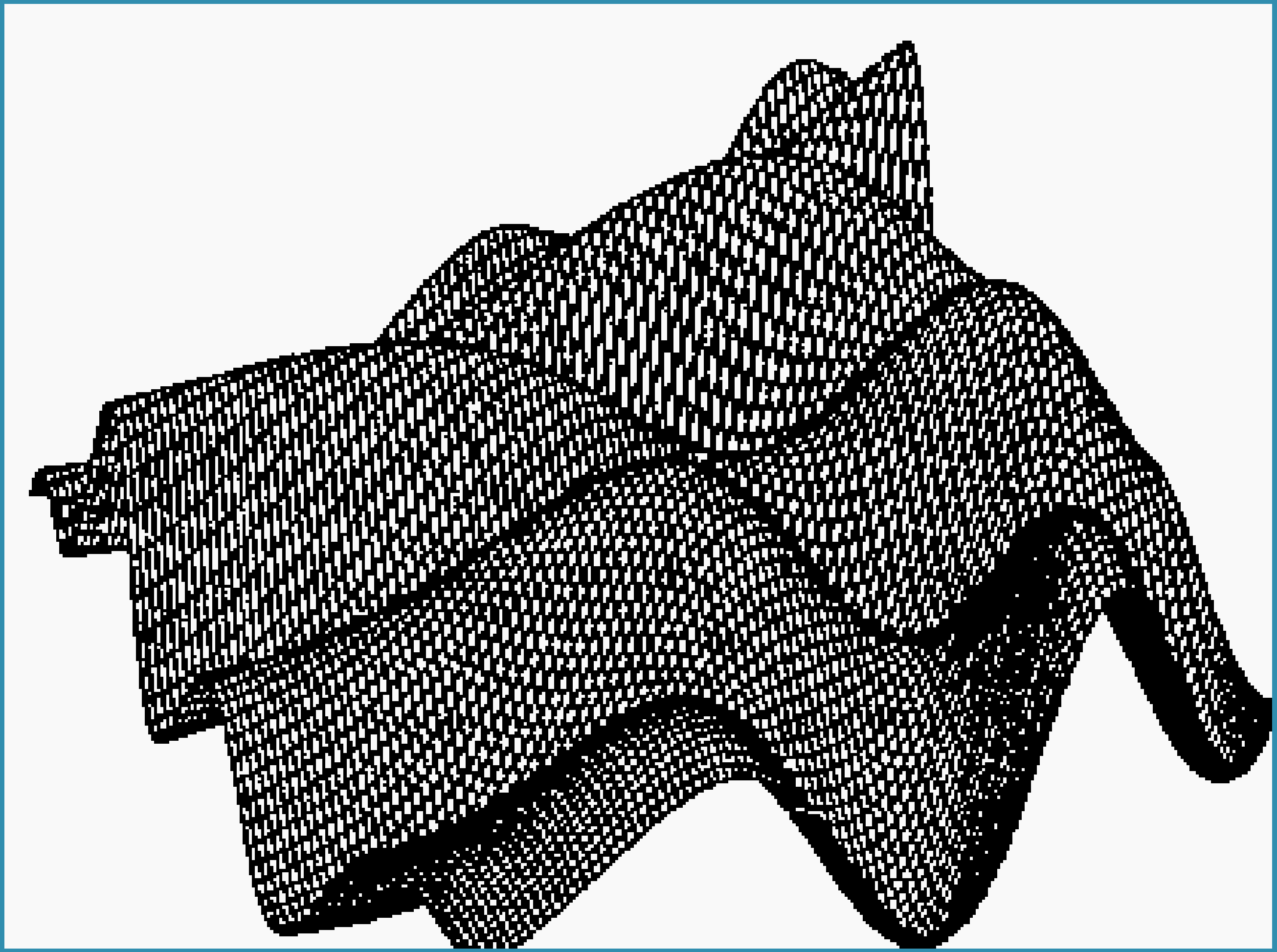
$$E(\vec{y}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} w_{ij} y_i y_j - \sum_{i=1}^{N} \theta_i y_\mathrm{i}$$

Σύγκλιση σε κατάσταση ισορροπίας

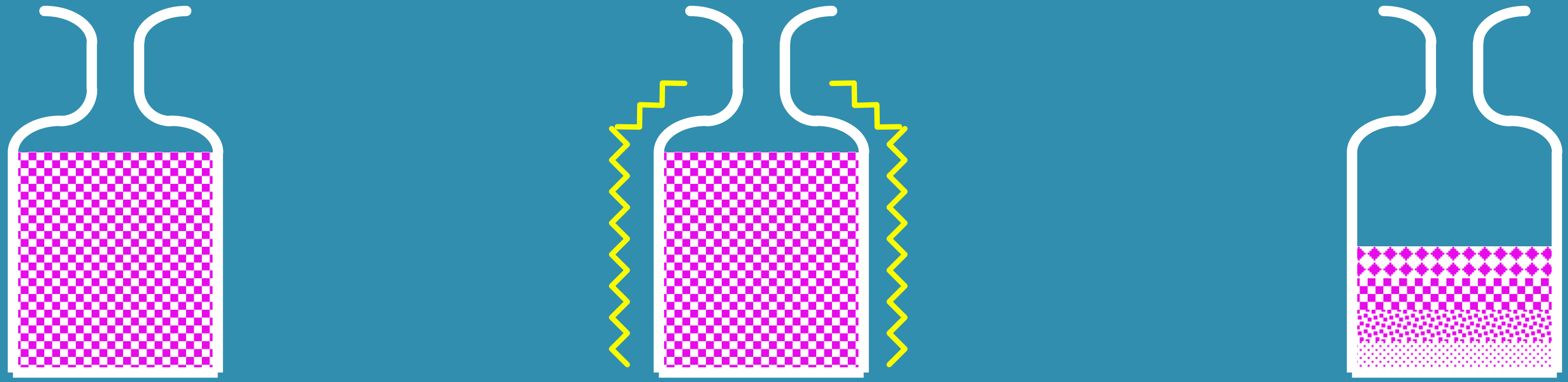
$$\begin{cases} y_i = 1, & \dfrac{du_i}{dt} \geq 0 \\ 0 < y_i < 1, & \dfrac{du_i}{dt} = 0 \\ y_i = 0, & \dfrac{du_i}{dt} \leq 0 \end{cases}$$

Πρόβλημα
εγκλωβισμού
σε τοπικά ελάχιστα
$\Rightarrow$ *Επεκτάσεις*

# Το τοπίο της ενέργειας



# Προσομοιωμένη ανόπτηση
# Simulated Annealing



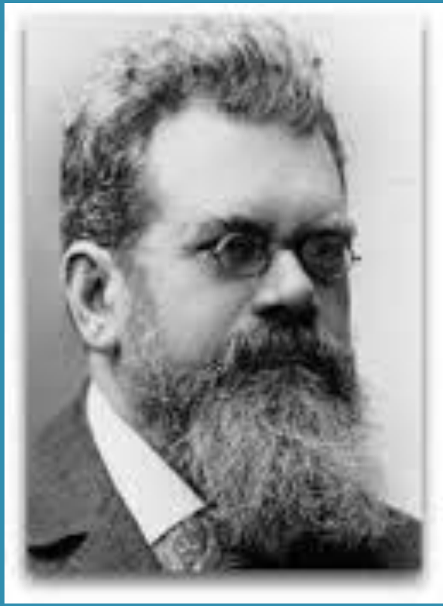
Kirkpatrick, Gelatt, & Vecchi (1983)

- Αντικειμενική συνάρτηση *E*
- Επιλογή νέου σημείου (neighborhood / move set)
- Κριτήριο αποδοχής $p(\Delta E, T)$ του νέου σημείου

  *T*: παράμετρος θερμοκρασίας
- Πρόγραμμα μείωσης θερμοκρασίας (annealing /cooling schedule)
- Σύγκλιση στο ελάχιστο καθώς $T \rightarrow 0$

Από τις ιδιότητες των ατόμων
στις ιδιότητες της ύλης

# Στατιστική μηχανική



Ludvig Boltzmann
1844-1906

Θερμική ισορροπία:

Κατανομή Boltzmann-Gibbs

$$P_x \approx \exp(-E_x/k_B T)$$

$k_B$: σταθερά Boltzmann

$T$: θερμοκρασία (Kelvin)

# Προσομοιωμένη ανόπτηση

Στοχαστική κατάβαση κλίσης

$$P_x/P_y = \exp[-(E_x-E_y)/T] = \exp[-(\Delta E)/T]$$

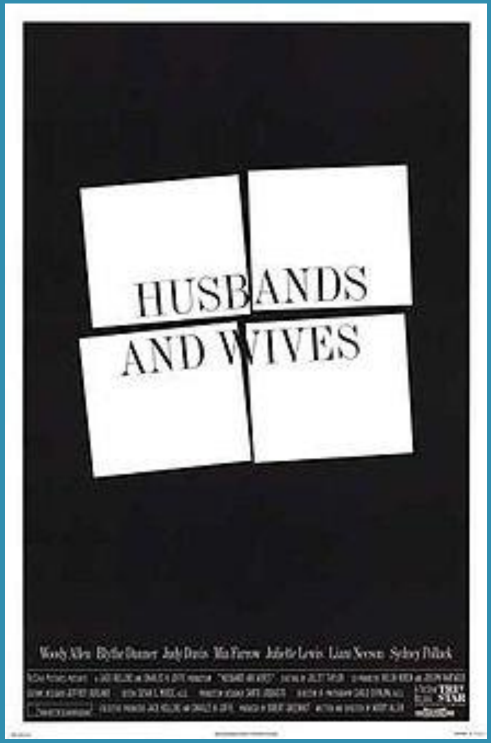
Ικανή συνθήκη θερμικής ισορροπίας

$$P_x P(x \rightarrow y) = P_y P(y \rightarrow x)$$

**Αλγόριθμος Metropolis (1953)**

# Η συμβολή της Φυσικής II

Nicholas C. Metropolis
(Νικόλαος Κ. Μητρόπουλος)
1915-1999




Woody Allen, 1992

Η μέθοδος Monte-Carlo

# Στοχαστικό δίκτυο Hopfield
## Διακριτό Hopfield + Simulated Annealing

- Αν $\Delta E_i < 0$ η ενημέρωση γίνεται δεκτή
- Αν $\Delta E_i \geq 0$ η ενημέρωση γίνεται δεκτή

  με πιθανότητα $p(\Delta E, T) = \exp(-\Delta E_i/(T))$

(Ικανοποίηση συνθήκης θερμικής ισορροπίας)

Διακριτό Hopfield για $T \to 0$

<u>Θεώρημα</u> (Ασυμπτωτική σύγκλιση)

Για $T \to 0$ η στατική κατανομή πιθανότητας συγκλίνει στο σύνολο των βέλτιστων λύσεων.

# Στοχαστικό δίκτυο Hopfield
## Προσέγγιση πεπερασμένου χρόνου

- Αρχική θερμοκρασία $T_0$ (π.χ. $T_0=\Sigma|w_{ij}|$)
- Σε κάθε θερμοκρασία $T$ πραγματοποιούμε $L$ δοκιμές ($L=2N$)
- Μείωση θερμοκρασίας

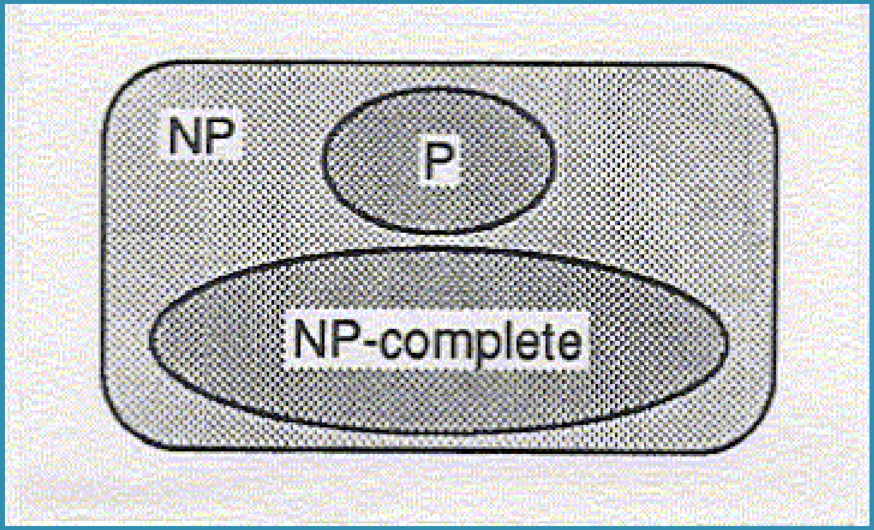
  π.χ. $T_{n+1}=\alpha T_n$, $0,8<\alpha<0.99$

  ή $T_{n+1}=T_n/(1+\log f(n))$, $f(n)=f(n-1)(1+\rho)$

  $f(0)=1$, $\rho<0.001$
- Τερματισμός αν δεν συμβαίνει καμμία ενημέρωση για $k$ διαδοχικές τιμές της θερμοκρασίας

aka $\Longrightarrow$ Μηχανή Boltzmann

# Προβλήματα (διακριτής) συνδυαστικής βελτιστοποίησης




Μέγεθος προβλήματος $N$

Εκθετική πολυπλοκότητα:

πλήθος λύσεων τάξης $e^N$ ή $N!$

Papadimitriou & Steiglitz (1982)

# Απεικόνιση προβλημάτων σε νευρωνικά δίκτυα

Πρόβλημα συνδυαστικής βελτιστοποίησης:

- Σύνολο περιορισμών
- Συνάρτηση κόστους (αντικειμενική) $\boldsymbol{J}$

Νευρωνικό δίκτυο τύπου Hopfield:

- Συνάρτηση ενέργειας $\boldsymbol{E}$

Προσδιορισμός των παραμέτρων του δικτύου ώστε η ενέργεια $\boldsymbol{E}$ του δικτύου να εκφράζει ένα *μέτρο* του κόστους $\boldsymbol{J}$ της λύσης του προβλήματος

# Απεικόνιση προβλημάτων σε νευρωνικά δίκτυα

## Άμεση απεικόνιση:

- Ενσωμάτωση των περιορισμών στο κόστος ***J*** μέσω όρων ποινής (penalty terms)
- Ταύτιση των συναρτήσεων ***E*** και ***J*** (ταύτιση των συντελεστών ομοβάθμιων όρων)

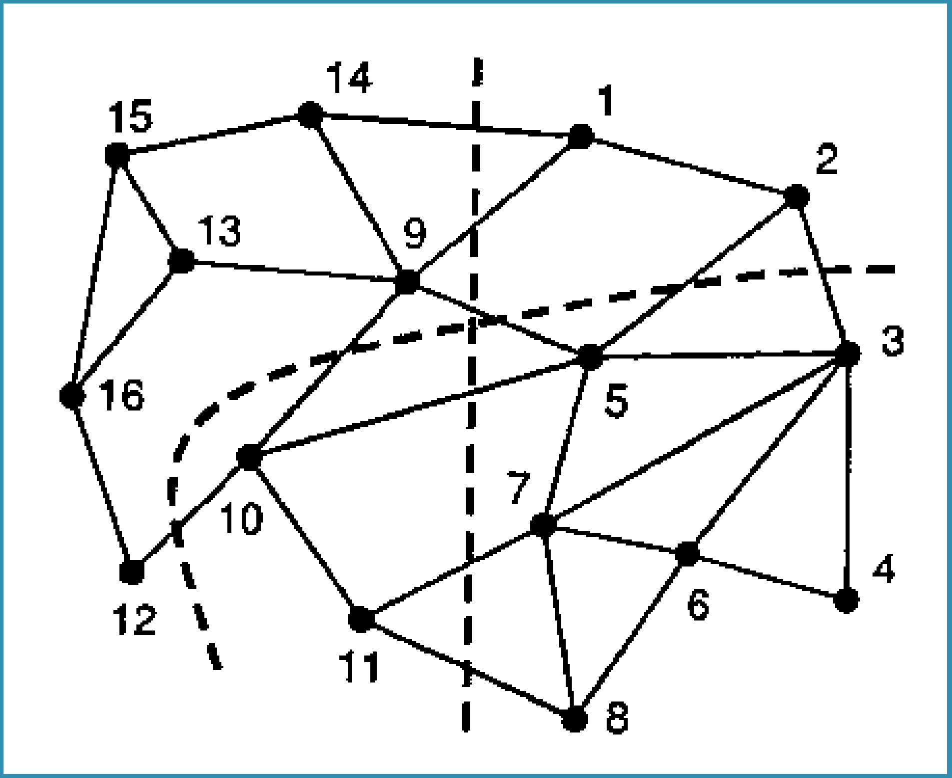
## Έμμεση απεικόνιση:

- Κάθε τοπικό ελάχιστο της ενέργειας ***E*** αντιστοιχεί σε *εφικτή* λύση – ικανοποίηση περιορισμών (feasibility).
- Όσο χαμηλότερο ένα τοπικό ελάχιστο της ενέργειας ***E***, τόσο καλύτερο το κόστος της ***J*** αντίστοιχης λύσης (order preservation).

# Διαμερισμός γράφου

<u>Graph bipartitioning</u>

Διαμερισμός των κορυφών του γράφου σε δύο σύνολα ίσου μεγέθους, ώστε να ελαχιστοποιείται ο αριθμός των ακμών που συνδέουν τα δύο σύνολα κορυφών.



# Διαμερισμός γράφου

$y_i \in \{-1,+1\}$   (συμμετοχή στα δύο σύνολα)
$a_{ij}$: πίνακας διπλανών κορυφών

Ελαχιστοποίηση πλήθους ακμών:
$$L = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_j a_{ij} y_i y_j$$

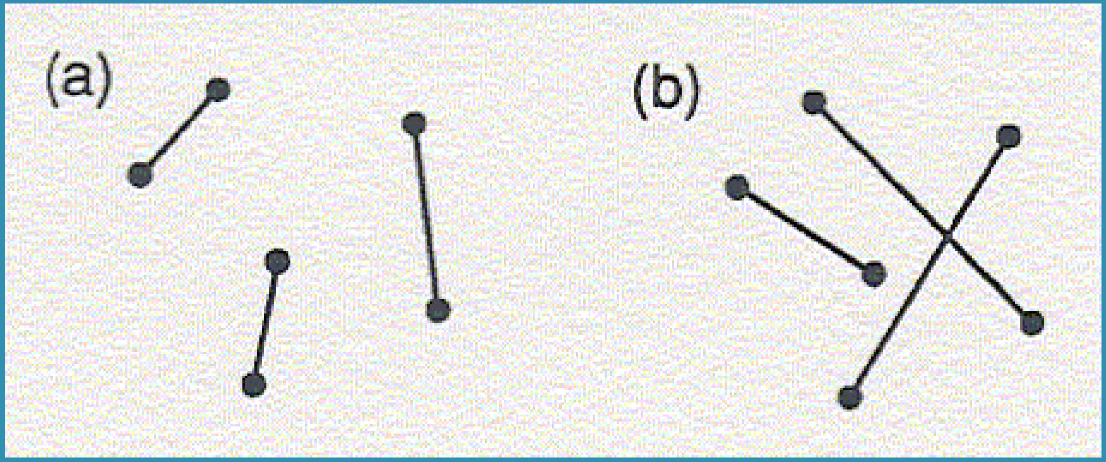
Περιορισμός: $\sum_i y_i = 0$   $\Rightarrow$   όροι ποινής

Συνάρτηση κόστους:
$$J = L + \mu \left( \sum_i y_i \right)^2$$

Άμεση απεικόνιση   $\Rightarrow$   $w_{ij} = a_{ij} - 2\mu$

# Πρόβλημα αντιστοίχισης
# Weighted matching problem

Δίνονται N σημεία. Να συνδεθούν ανά δύο, ώστε κάθε σημείο να συνδέεται με ένα και μόνο ένα άλλο και να ελαχιστοποιείται το συνολικό μήκος των συνδέσμων.




(a) καλή λύση
(b) κακή λύση

# Πρόβλημα αντιστοίχισης

$y_{ij} \in \{0,1\}$ ( $N(N-1)/2$ ζεύγη σημείων)

$d_{ij}$: απόσταση σημείων

Συνολικό μήκος συνδέσμων: $$L = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j d_{ij} y_{ij}$$

Περιορισμός: $$\sum_j y_{ij} = 1, \quad \forall i$$

Συνάρτηση κόστους: $$J = L + \frac{\gamma}{2}\sum_i \left(1 - \sum_j y_{ij}\right)^2$$

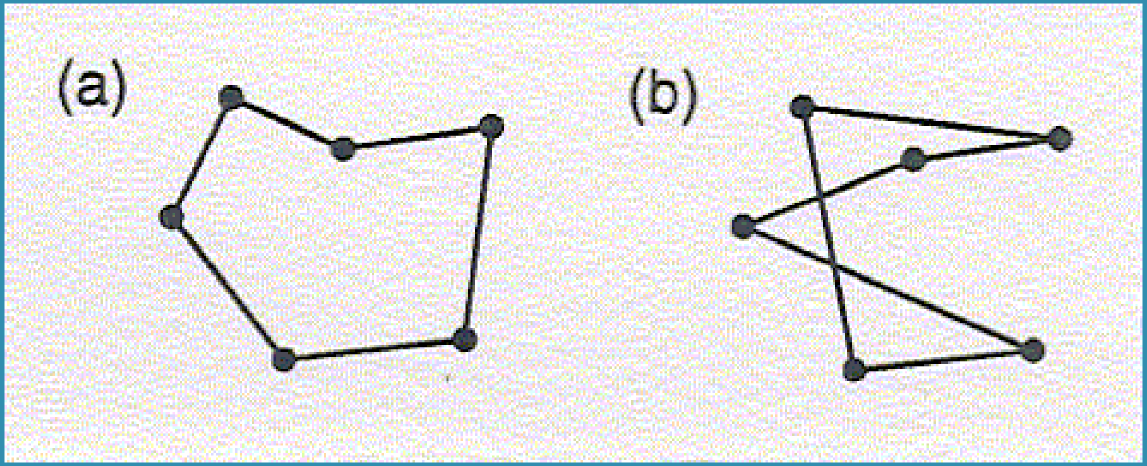
Άμεση απεικόνιση $\Rightarrow$

$w_{ij,kl} = -\gamma$ (ζεύγη με κοινούς δείκτες), $\theta_{ij} = -d_{ij} + \gamma$

# Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή
# Traveling Salesperson Problem (TSP)

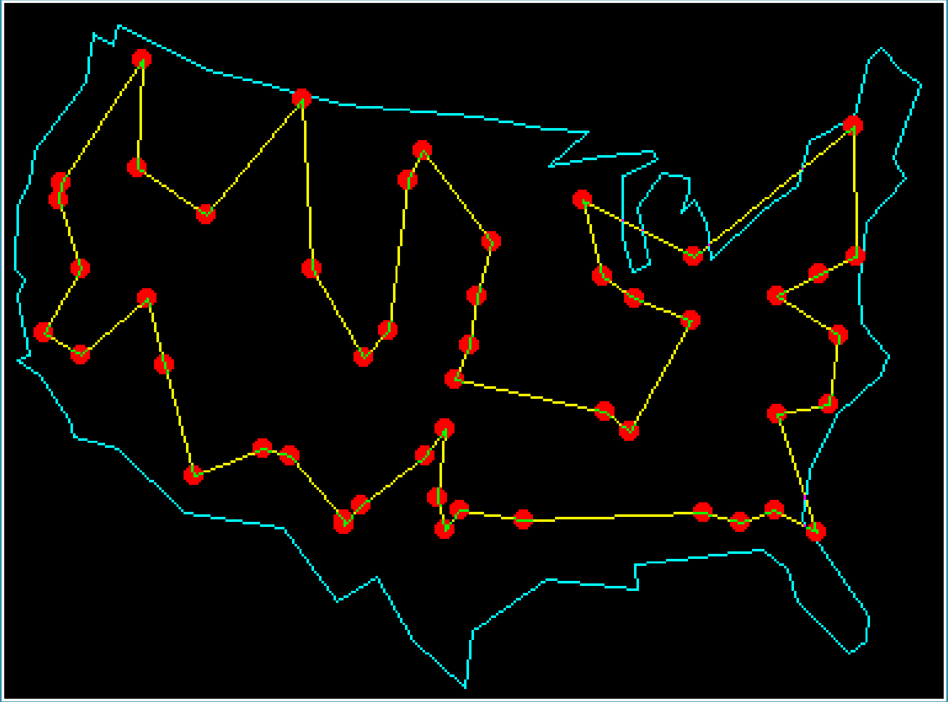
Δίνονται N σημεία (πόλεις). Ζητείται η ελάχιστη κλειστή διαδρομή που επισκέπτεται κάθε πόλη μια φορά και επιστρέφει στο αρχικό σημείο (Hamiltonian circuit).

*N!/2N* διαδρομές




(a) καλή λύση
(b) κακή λύση

# Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή



# Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή

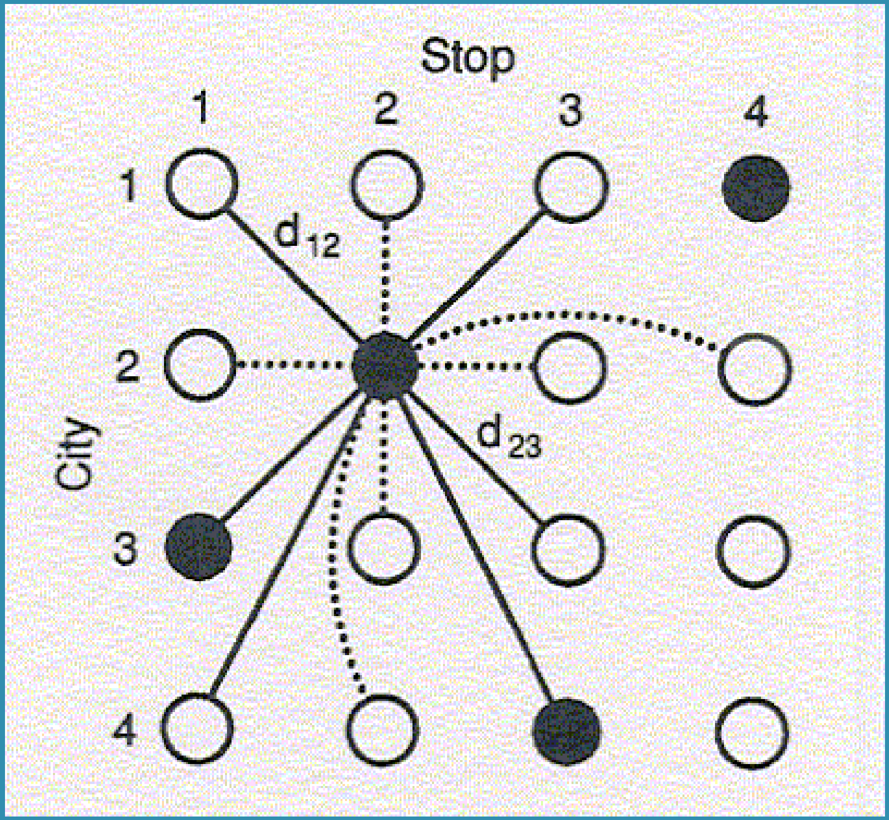
Διδιάστατη απεικόνιση

$y_{ai} \in \{0,1\}$ (η πόλη $a$ στην $i$ θέση της διαδρομής)

$d_{ab}$: απόσταση σημείων

Περιοδικές οριακές συνθήκες:

$i \pm 1 = (i \pm 1) \bmod N$




- $O(N^3)$ συνδέσεις
- permutation matrix

# Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή

Περιορισμοί: $\sum_a y_{ai} = 1, \forall i, \qquad \sum_i y_{ai} = 1, \forall a$

Μήκος διαδρομής:

$$L = \frac{1}{2} \sum_a \sum_i y_{ai} \sum_{\substack{b \\ b \neq a}} d_{ab} \left( y_{b,i-1} + y_{b,i+1} \right)$$

Συνάρτηση κόστους:

$$J = L + \frac{\gamma}{2} \left( \sum_i \left( 1 - \sum_a y_{ai} \right)^2 + \sum_a \left( 1 - \sum_i y_{ai} \right)^2 \right)$$

# Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή

Άμεση απεικόνιση $\Rightarrow$ Συνδέσεις:

- $-d_{ab}$ μεταξύ νευρώνων διπλανών στηλών
- $-\gamma$ μεταξύ νευρώνων της ίδιας γραμμής ή στήλης
- θετικές πολώσεις $\theta$

Αρχική διατύπωση (αναλογικό δίκτυο):

Hopfield & Tank (1985), Wilson & Pawley (1988)

# Προβλήματα ικανοποίησης περιορισμών (Constraint Satisfaction Problems – CSP)

Δυαδικοί περιορισμοί

- Σύνολο μεταβλητών $v_i$, $i=1,\ldots,N$, με τιμές από τα πεδία $D_i$
- Σύνολο περιορισμών $(d_{ij}, d_{kl}) \in C$
- Αναζήτηση μιας ανάθεσης τιμών που ικανοποιεί τους περιορισμούς

Παραδείγματα: N-Queens, Graph coloring

# Προβλήματα ικανοποίησης περιορισμών

Διδιάστατη αναπαράσταση (jagged matrix):
ο νευρώνας (*i*,*j*) αντιστοιχεί στην *j* τιμή της *i* μεταβλητής

Έμμεση απεικόνιση $\Rightarrow$ Συνδέσεις:

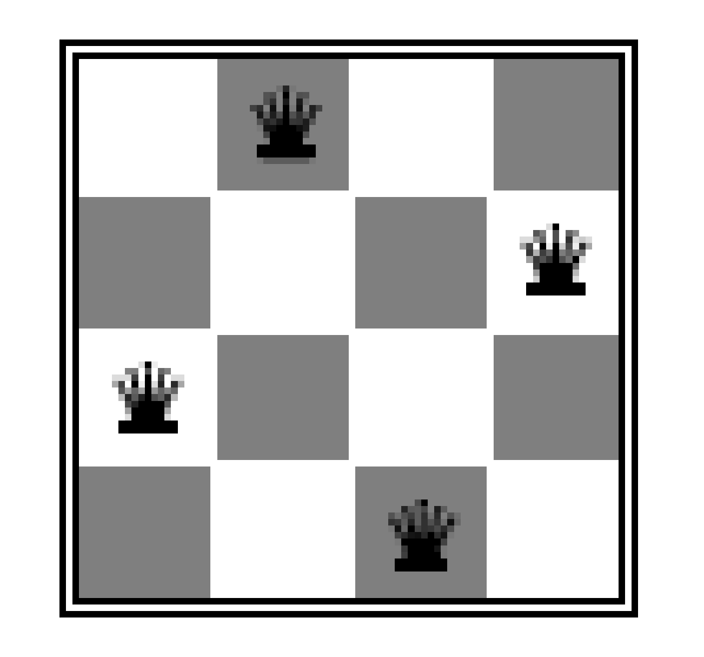
$$w_{ij,ij} = 0$$

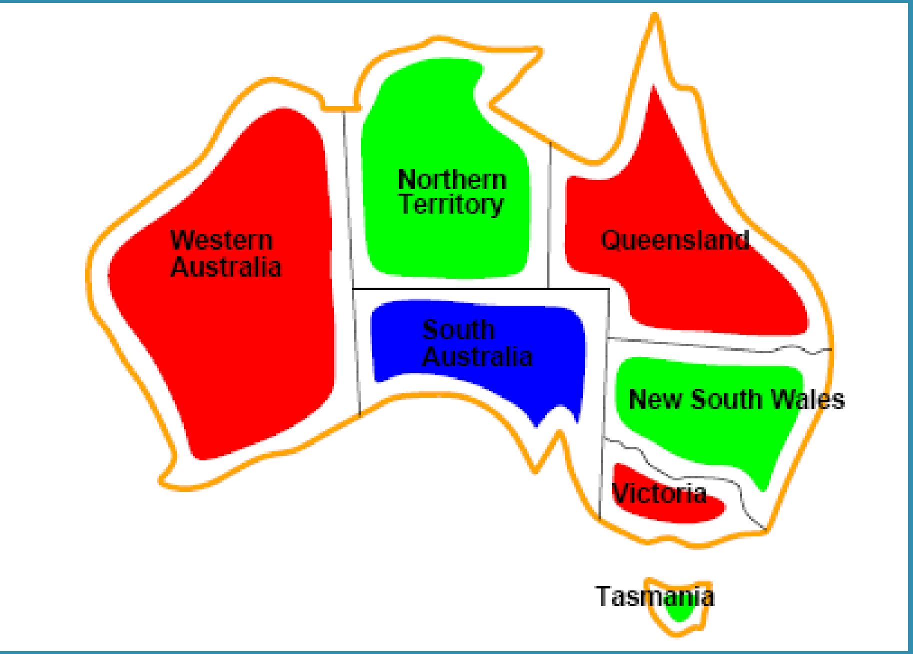
$$\vartheta_{ij} = b$$

$$w_{ij,mn} = \begin{cases} -a & \text{αν } (d_{ij}, d_{mn}) \in C \\ -e & \text{αν } i = m,\ j \neq n \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Ικανοποίηση απαιτήσεων

*a>b, e>b*
*(a, b, e >0)*




Northern Territory
Western Australia
Queensland
South Australia
New South Wales
Victoria
Tasmania