



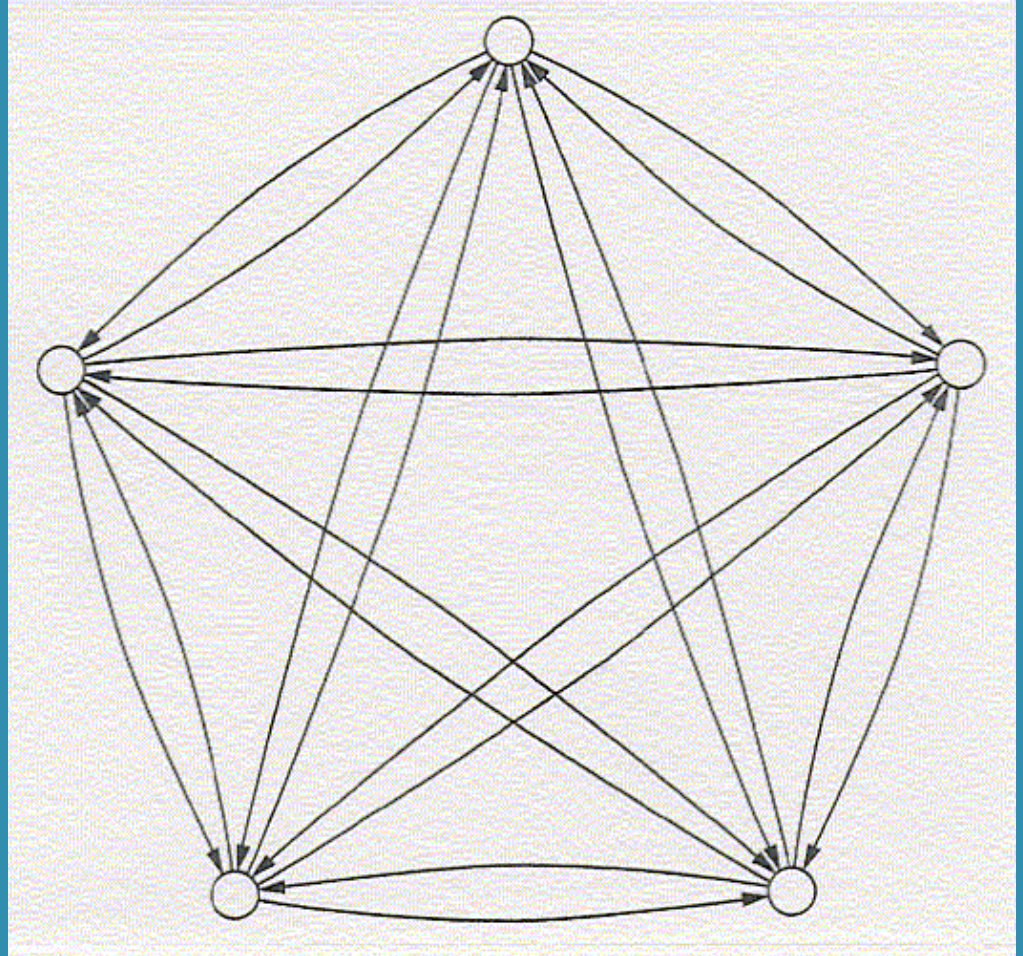
Δίκτυα τύπου Hopfield

Επίλυση προβλημάτων
συνδυαστικής βελτιστοποίησης

Δίκτυο Hopfield

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

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



Διακριτό δίκτυο Hopfield

Διακριτός χρόνος

Δυναμικές / διπολικές τιμές κόμβων

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

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

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

Διακριτό δίκτυο Hopfield

Συνάρτηση ενέργειας

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

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

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

$$y_i = f(u_i)$$

f: sigmoid / tanh
(μονοτονία)

Αναλογικό δίκτυο Hopfield

Συνάρτηση ενέργειας

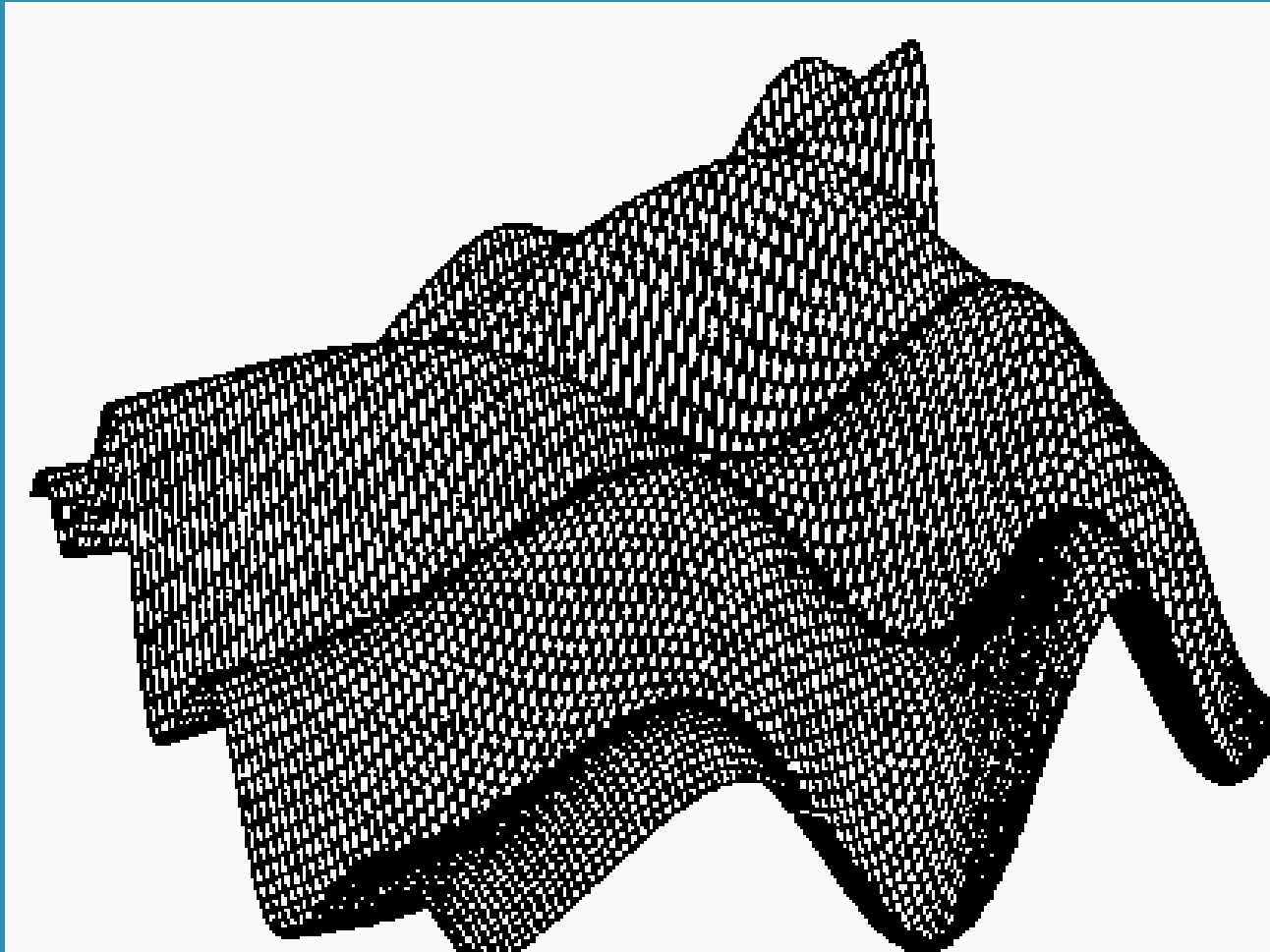
$$E(\vec{y}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ij} y_i y_j - \sum_{i=1}^N \theta_i y_i$$

Σύγκλιση σε κατάσταση ισορροπίας

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

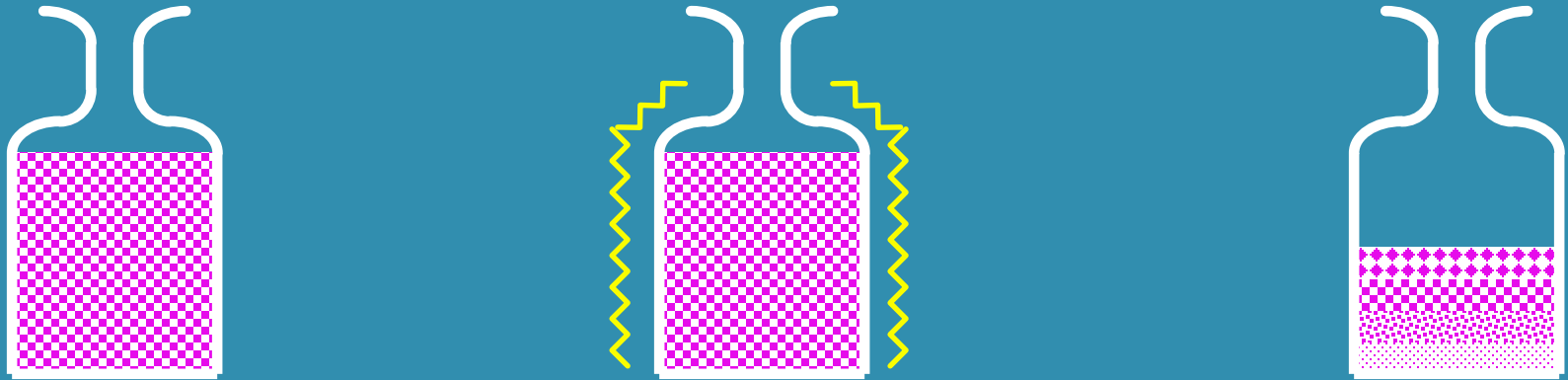
Πρόβλημα
εγκλωβισμού
σε τοπικά ελάχιστα
 \Rightarrow Επεκτάσεις

Το τοπίο της ενέργειας



Προσομοιωμένη ανόπτηση

Simulated Annealing

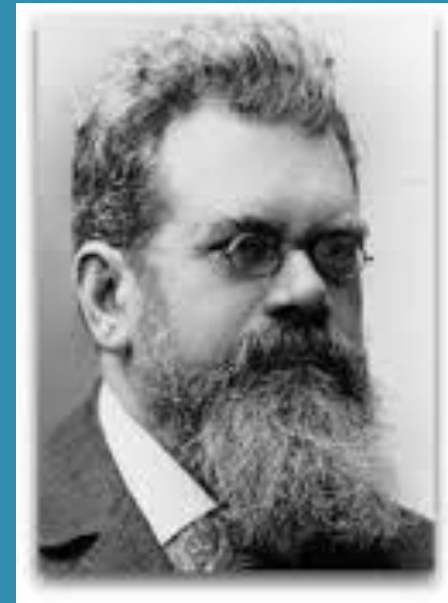


Kirkpatrick, Gelatt, & Vecchi (1983)

- 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
Θερμοδυναμική



Θερμική ισορροπία:

Κατανομή Boltzmann-Gibbs

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

Ludvig Boltzmann
1844-1906

$$k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

(σταθερά Boltzmann)

T : θερμοκρασία (Kelvin)

Προσομοιωμένη ανόπτηση

Στοχαστική κατάβαση κλίσης

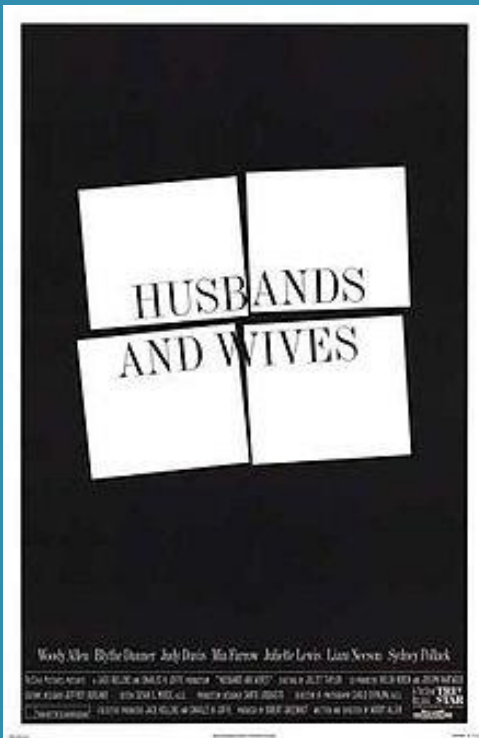
$$P_x/P_y = \exp[-(E_x - E_y)/T] = \exp[-(\Delta E)/T]$$

Ικανή συνθήκη θερμικής ισορροπίας

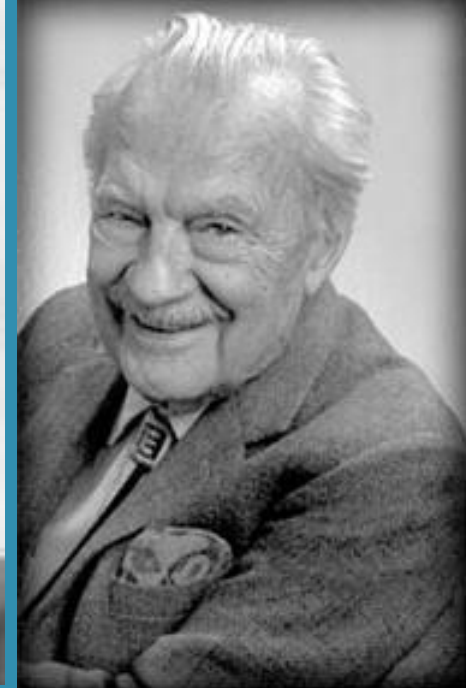
$$P_x P(x \rightarrow y) = P_y P(y \rightarrow x)$$

Αλγόριθμος Metropolis (1953)

Η συμβολή της Φυσικής II



Woody Allen, 1992



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

Computer Pioneer Award (1984)

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 $T \rightarrow 0$

Θεώρημα (Ασυμπτωτική σύγκλιση)

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

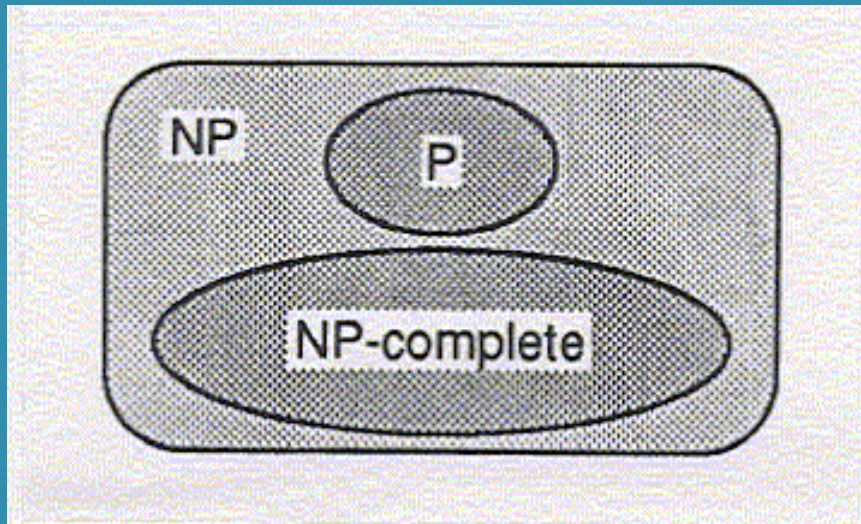
Στοχαστικό δίκτυο Hopfield

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) J

Νευρωνικό δίκτυο τύπου Hopfield:

- Συνάρτηση ενέργειας E

Προσδιορισμός των παραμέτρων του δικτύου ώστε η ενέργεια E του δικτύου να εκφράζει ένα μέτρο του κόστους 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)

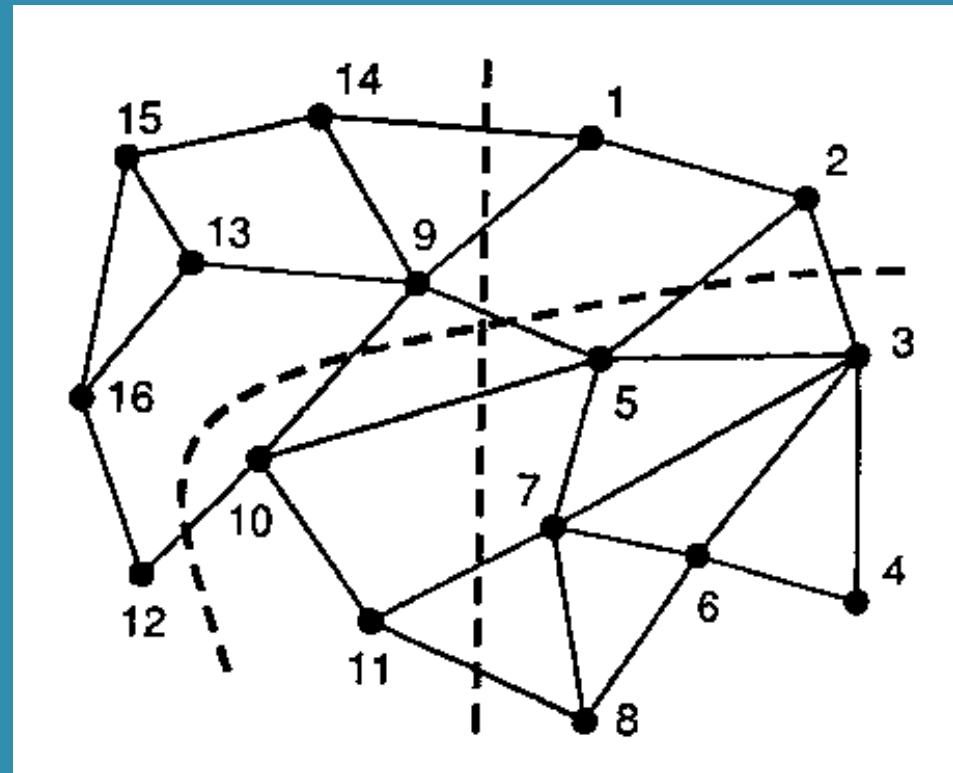
Έμμεση απεικόνιση:

- 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

Graph bipartitioning

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:

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

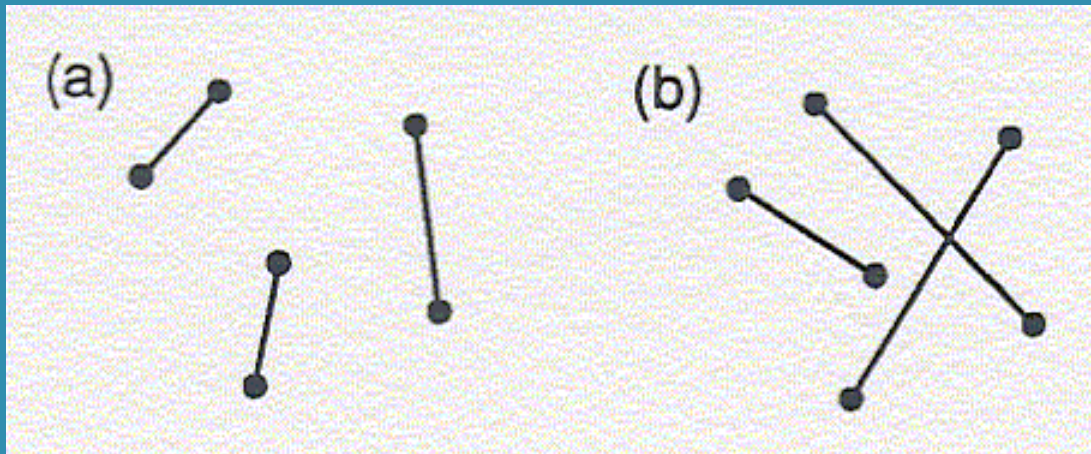
Περιορισμός: $\sum_i y_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{όροι ποινής}$

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

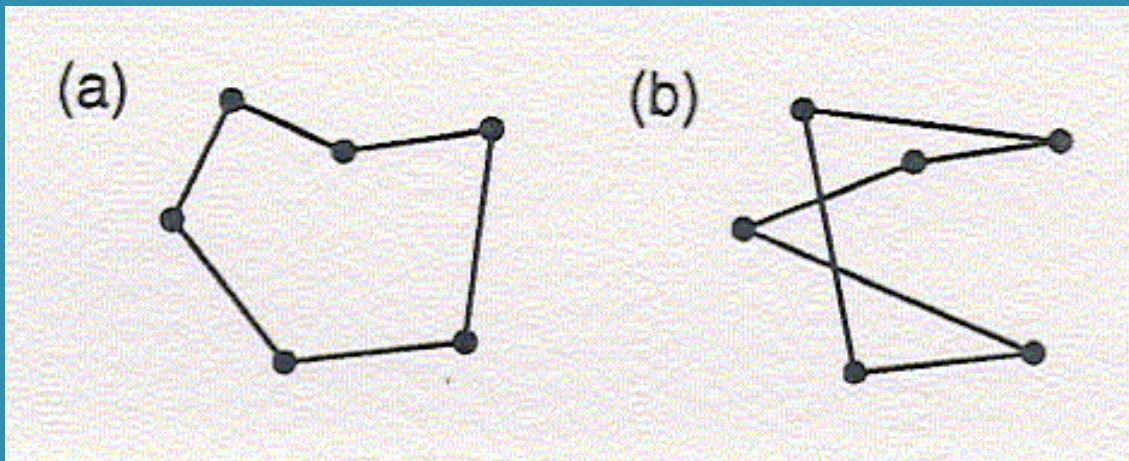
Άμεση απεικόνιση \Rightarrow

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

Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή Traveling Salesperson Problem (TSP)

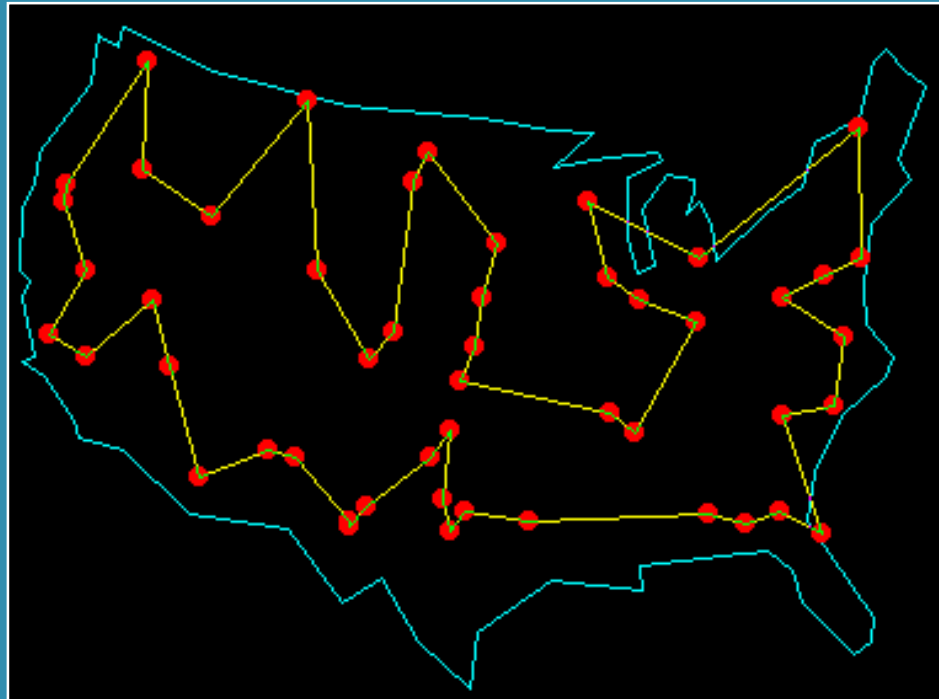
Δίνονται N σημεία (πόλεις). Ζητείται η ελάχιστη κλειστή διαδρομή που επισκέπτεται κάθε πόλη μια φορά και επιστρέφει στο αρχικό σημείο (Hamiltonian circuit).

$N!/2N$
διαδρομές



(a) καλή λύση
(b) κακή λύση

Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή



Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή

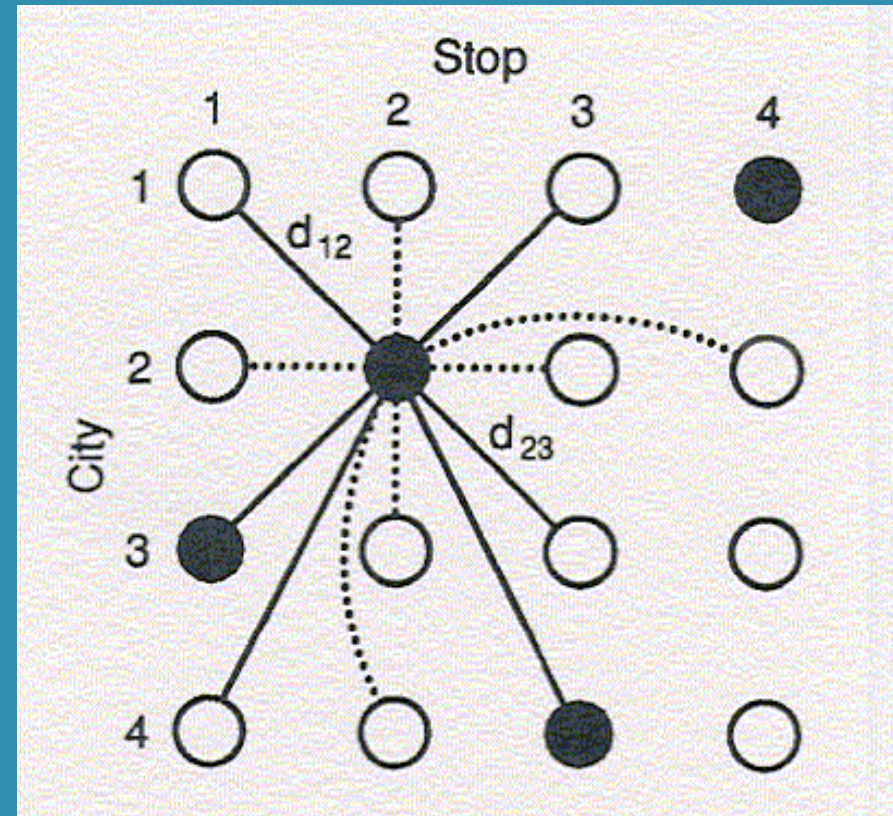
Διδιάστατη απεικόνιση

$y_{ai} \in \{0,1\}$ (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: $\sum_a y_{ai} = 1, \forall i, \quad \sum_i y_{ai} = 1, \forall a$

Μήκος διαδρομής:

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

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 θ

Αρχική διατύπωση (αναλογικό δίκτυο):

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

Προβλήματα ικανοποίησης περιορισμών (Constraint Satisfaction Problems – CSP)

Δυαδικοί περιορισμοί

- Σύνολο μεταβλητών v_i , $i=1, \dots, N$, 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

Πρόβλημα του περιοδεύοντος πωλητή

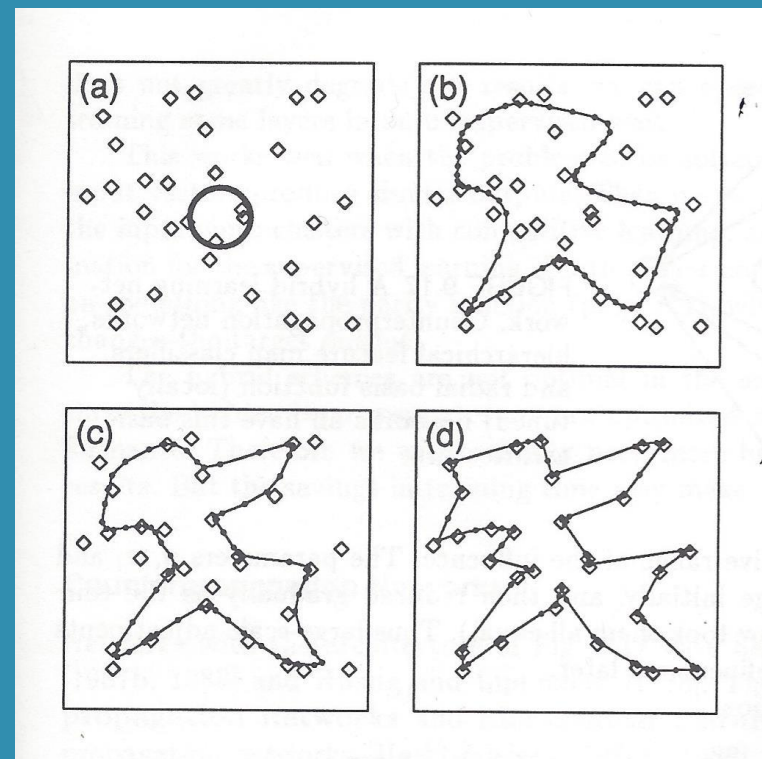
(Ad hoc) Λύση SOM

N πόλεις: διδιάστατο επίπεδο

Διαδρομή: δακτύλιος

Συντεταγμένες: εκπαιδευτικά
δεδομένα

Βελτιστοποίηση κατά την
εκπαίδευση



➤ *Angeniol et al., 1988*

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

$$a > b, \quad e > b \\ (a, b, e > 0)$$

