Optimizarea cu ajutorul retelelor neuronale recurente de tip Hopfield

Prof.dr. Constanta BODEA
Catedra de Informatica Economica, A.S.E. Bucuresti

Recurrent neural networks represent an important tool for optimization. The paper focuses on the Hopfield networks applications, using three well-known problems: Traveling Salesman Problem, Graph partitioning problem and N-queens problem.
Keywords: *Recurrent networks, Hopfield networks, Energy function, Traveling Salesman Problem (TSP), graph partitioning, N-queens problem.*

1 Retele neuronale recurente de tip Hopfield

Retelele neuronale de tip Hopfield reprezinta retele recurente, simetrice, total conectate si fara auto-asocieri. Simetria conexiunilor se exprima prin egalitatile: $w_{ij}=w_{ji}$, pentru i, j desemnând unitati din retea, iar W matricea intensitatilor conexiunilor din retea. Lipsa auto-asocierii se exprima prin: $w_{ii}=0$.

În cazul retelelor neuronale Hopfield clasice, nivelul de activare al unei unitati j, notat cu Oj, prezinta valori binare (0,1) sau bipolare (-1,1), fiind calculat cu ajutorul unei functii de activare de forma:

$$O_j = F(\sum_i w_{ji} O_i) = \begin{cases} 1, \text{daca} & \sum_i w_{ji} O_i > T_j \\ 0/-1, & \text{in rest} \end{cases}$$

unde Tj reprezinta valoarea prag pentru unitatea j.

O retea neuronala recurenta se afla într-o stare stabila atunci când neuronii din retea actioneaza unii asupra celorlalti, fara a determina schimbarea valorilor de activare ale unitatilor. Daca O^S reprezinta o stare stabila a retelei, un bazin de atractie B este definit prin relatia:

$$B(O^S)=\{O|T^nO=O^S\},$$

unde: T reprezinta transformarea starii, prin intermediul F, iar B reprezinta setul de stari O care evolueaza spre O^S într-un numar finit de tranzitii.

Retelele de tip Hopfield sunt utilizate prin punerea în corespondenta a starilor stabile cu solutiile problemei pe care dorim sa o rezolvam. O astfel de retea va atinge o stare stabila, deci va gasi solutia la problema.

Stabilitatea reprezinta proprietatea unei retele neuronale recurente de a se stabiliza (de a atinge o stare stabila) indiferent de starea initiala. Au fost definite mai multe **teoreme de stabilitate,** dintre care se pot aminti: teorema Cohen – Grossberg, teorema Kosko, teorema Abam. Cohen si Grossberg au demonstrat ca retelele neuronale recurente sunt stabile daca si numai daca: $w_{ij}=w_{ji}$ si $w_{ii}=0$. Deci, orice retea de tip Hopfield este stabila. Aceasta teorema a fost demonstrata cu ajutorul unei functii Lyapunov, utilizata ca functie de energie a retelei.

2. Functia de energie a unei retele de tip Hopfield

Fiecarei stari a retelei i se asociaza o marime E, denumita *energie*, care scade ori de câte ori un neuron îsi schimba starea. Fie ΔE schimbarea de energie datorata schimbarii starii neuronului i. Daca $O_i=0$ si se produce schimbarea $O_i=1$ rezulta ca:

$$\sum_j w_{ij} O_j - T_i > 0, \ \Delta O_i > 0.$$

Daca $O_i=1$ si se produce schimbarea $O_i=0$ rezulta:

$$\sum_j w_{ij} O_j - T_i < 0, \quad \Delta O_i < 0.$$

Deci:

$$\Delta O_i (\sum_j w_{ij} O_j - T_i) > 0.$$

Hopfield a definit schimbarea nivelului de energie al retelei, ca urmare a schimbarii starii neuronului i prin relatia:

$$\Delta E = -\Delta O_i (\sum_j w_{ij} O_j - T_i).$$

Energia nodului i care conduce la aceasta schimbare este

$$E_i = -O_i (\sum_j w_{ij} O_j - T_i) = -\sum_j w_{ij} O_j O_i + O_i T_i.$$

Energia totala a retelei asa cum a fost definita de Hopfield este:

$$E = -1/2 \sum_i \sum_j w_{ij} O_j O_i + \sum_i O_i T_i.$$

În concluzie, tranzitiile de stare coboara nivelul de energie pâna când acest lucru nu mai este posibil, moment în care se produce stabilizarea retelei. Stabilizarea retelei poate fi locala (reteaua s-a fixat pe un minim local al energiei) sau globala.

3. Rezolvarea problemelor de optimizare cu ajutorul retelelor de tip Hopfield

Tranzitiile de stare ale retelelor neuronale Hopfield determina scaderea nivelului de energie a retelei pâna când acest lucru nu mai este posibil (reteaua s-a stabilizat). Prin functionarea sa, reteaua neuronala determina singura minimizarea functiei de energie. Deci, reteaua neuronala poate fi utilizata pentru rezolvarea unor probleme de optimizare, putând determina singura nivelul functiei obiectiv.
Sa presupunem, de exemplu un sistem S, caracterizat cu ajutorul a N variabile de stare S1,...,Sn, fiecare putând lua valorile -1/0 sau 1. Putem afirma ca starea sistemului S este data de tuplul (S1,...,Sn).
Fie o functie cost, E(S) definita pentru acest sistem, patratica si simetrica în raport de Si. Minimizarea lui E poate fi realizata cu ajutorul unei retele Hopfield, având drept intensitati ale conexiunilor coeficientii ecuatiei patratice a lui E.
Doua dificultati apar în rezolvarea cu ajutorul retelelor Hopfield a problemelor de optimizare:
- problemele trebuie sa accepte forma patratica (cuadratica);
- minimul obtinut de rerteaua Hopfield poate fi local.

Procedura de functionare a unei retele de tip Hopfield pentru rezolvarea problemelor de optimizare este urmatoarea:
1) Se determina o functie de energie bazata pe restrictiile problemei.
2) Se compara functia de energie de la etapa 1 cu functia de energie a unei retele Hopfield, în scopul stabilirii parametrilor retelei.
3) La momentul t=0: Oj(t)= valori initiale (valori aleatoare mici)
4) Repeta, pentru t>0:

$$O_j(t+1) = F[\sum_i w_{ji} O_i(t)]$$

pâna la echilibru. Patternul activarilor la echilibru reprezinta solutia optima.

3.1. Problema comis-voiajorului (Traveling Salesman Problem, TSP)

Sa presupunem ca dorim rezolvarea TSP cu N orase. Un traseu al comis voiajorului, ca lista ordonata de orase, se reprezinta cu ajutorul unei retele Hopfield cu N^2 neuroni, fiecare neuron fiind asociat pozitiei în traseu a unui anumit oras. Pentru aplicarea acestei scheme de reprezentare a traseelor se recurge la o tabela cu N linii si N coloane, fiecare linie corespunzând unui oras, iar fiecare coloana unui pas al traseului. O intrare (X,i) a tabelei are valoarea 1, daca orasul X este vizitat la pasul i si 0, altfel. O traseu legal presupune un singur 1 pe fiecare linie si pe fiecare coloana a tabelei. Figura 1 constituie un exemplu de traseu pentru TSP cu 6 orase: A, B, C, D, E si F.

	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**
A	0	1	0	0	0	0
B	0	0	0	1	0	0
C	0	0	0	0	1	0
D	1	0	0	0	0	0
E	0	0	1	0	0	0
F	0	0	0	0	0	1

Fig.1 - Traseu format din sase orase - exemplu

O asemenea tabela poate servi atât la descrierea unui traseu al TSP cât si a unei stari a retelei Hopfield cu N^2 neuroni, în acest din urma caz fiecare intrare (X,i) a tabelei reprezenta nivelul de activare a unui neuron din retea, adica O_{Xi}.

Retelei Hopfield de rezolvare a TSP îi este asociata urmatoarea functie de energie:

$$E = \frac{A}{2}\cdot T_1 + \frac{B}{2}\cdot T_2 + \frac{C}{2}\cdot T_3 + \frac{D}{2}\cdot T_4 \qquad (1)$$

unde: A,B,C,D sunt constante pozitive, care corespund parametrilor Lagrange din procesul transformarii problemei de optimizare cu restrictii într-o problema de optimizare fara restrictii, iar termenii T_1, T_2, T_3 si T_4 sunt definiti astfel:

a) $$T_1 = \sum_X \sum_i \sum_{i \neq j} O_{Xi} \cdot O_{Xj} \qquad (2)$$

Termenul T_1 este 0 daca si numai daca fiecare linie X contine nu mai mult de o valoare 1. Sunt astfel defavorizate starile cu mai mult de o valoare 1 pe linie.

b) $$T_2 = \sum_i \sum_X \sum_{Y \neq X} O_{Xi} \cdot O_{Yi} \qquad (3)$$

Cu ajutorul termenului T_2 sunt defavorizate starile cu mai mult de un 1 pe coloana.

c) $$T_3 = \left(\sum_X \sum_i O_{Xi} - \tilde{N} \right)^2 \qquad (4)$$

unde: $\tilde{N}$ reprezinta un parametru pozitiv, putin mai mare decât N. Se încearca astfel sa se forteze reteaua sa se stabilizeze pe starile cu N pozitii setate pe 1.

Termenii T_1, T_2 si T_3 servesc la impunerea conditiilor de validitate a traseului.

d) $$T_4 = \sum_X \sum_{Y \neq X} \sum_i d_{XY} \cdot O_{Xi} \cdot (O_{Y,(i+1)} + O_{Y,(i-1)})$$

(5)

unde: d_{XY} reprezinta distanta între orasele X si Y. Termenul T_4 implementeaza criteriul de lungime minima a traseului.

Functia de energie descrisa prin relatia (1) se poate exprima sub forma:

$$E = -\tfrac{1}{2}\cdot \sum_X \sum_Y \sum_i \sum_j w_{Xi,Yj} \cdot O_{Xi} \cdot O_{Yj} - C\cdot \sum_X \sum_i \tilde{N} \cdot O_{Xi} + \tfrac{C}{2}\cdot \tilde{N}^2 \qquad (6)$$

cu:

$$w_{Xi,Yj} = -A\cdot\delta_{XY}\cdot(1-\delta_{ij}) - B\cdot\delta_{ij}\cdot(1-\delta_{XY}) - C - D\cdot d_{XY}\cdot(\delta_{j,i+1} + \delta_{j,i-1})$$

unde: $\delta_{ij} = 1$, daca i = j si $\delta_{ij} = 0$, altfel.

Relatia (6) exprima o functie Lyapunov similara celei de definire a energiei totale a retelei, cu deosebirea ca:

- fiecare variabila este dublu indexata deoarece reteaua este bidimensionala, astfel încât sumele duble din relatia de definire a energiei totale a retelei devin sume cvadruple, iar cele simple devin duble.
- apare un nou termen în cadrul relatiei si anume $\frac{C}{2}\cdot\tilde{N}^2$ care nu influenteaza însa procedura de optimizare.
- Facând abstractie de termenul constant, inputul extern este dat de relatia: $I_{Xi} = C \cdot \tilde{N}$.

Procedura de functionare a retelei Hopfield pentru rezolvarea TSP asa cum a fost definita de catre Hopfield si Tank este urmatoarea:

1. Se initializeaza starile neuronilor din retea pe valorile: $O_{Xi} = 0.5 + \nu$, unde: ν reprezinta un numar aleator mic.

2. For each epoca, do:

begin

Se selecteaza în mod aleator un neuron U_{Xi} a carui stare nu a fost actualizata în cadrul epocii curente.

Se determina:

$$net_{Xi} \leftarrow net_{Xi} + \gamma \cdot \left(-\frac{d}{dO_{Xi}} E \right) \quad \text{sau:}$$

$$net_{Xi} \leftarrow net_{Xi} + \gamma \cdot \left(\sum_Y \sum_j w_{Xi,Yj} \cdot O_{Yj} + C \cdot \tilde{N} \right)$$

unde: γ reprezinta un parametru cu o valoare foarte mica.

$O_{Xi} \leftarrow f(net_{Xi})$

if (stare stabila) then exit

endif

end

Experienta practica a aratat ca aplicarea unei asemenea proceduri duce frecvent la obtinerea unor solutii invalide. Pentru evitarea acestei situatii se poate recurge la realizarea urmatoarelor modificari:

- în relatiile (1) si (6) se înlocuieste $\tilde{N}$ cu N.
- primii doi termeni ai relatiei (1) forteaza respectarea unor restrictii similare,

deci ar trebui sa prezinte un acelasi coeficient. Se va considera, prin urmare: A = B.

– numai primii trei termeni din relatia (1) sunt responsabili de validatatea solutiei, din care cauza, analiza bazata pe valorii proprii ale matricii W se poate realiza pe baza unei relatii de definire a elementelor $w_{Xi,Yj}$ care contine numai primii trei termeni.

În aceste conditii, intensitatile conexiunilor se considera definite de urmatoarea relatie:

$$w_{Xi,Yj} = -A \cdot \delta_{XY}(1-\delta_{ij}) - A \cdot \delta_{ij}(1-\delta_{XY}) - C$$

În acest caz, se poate demonstra ca matricea conexiunilor retelei, **W** prezinta trei valori proprii distincte date de urmatoarele relatii:

$$\lambda_1 = -C \cdot N^2 - 2 \cdot A \cdot (N-1)$$
$$\lambda_2 = 2 \cdot A$$
$$\lambda_3 = -A \cdot (N-2)$$

Dinamica retelei Hopfield este puternic controlata de catre aceste valori proprii ([AnHo97]) si anume:

– λ_1 determina numarul de neuroni setati pe 1 în cadrul starii stabile. Pentru ca acest numar sa fie egal cu N valoarea lui λ_1 trebuie sa fie $-C \cdot N^2$. Acest lucru se poate obtine adaugând la fiecare element al lui **W** valoarea $2 \cdot A \cdot (N-1)$.

– λ_2 determina expansiunea valorilor nivelurilor de activare a neuronilor.

– λ_3 are un efect invers fata de cel al lui λ_2.

Pentru ajustarea acestor efecte se recomanda introducerea unui parametru suplimentar, cu valoarea $2 \cdot A_1$, care sa se scada din elementele diagonalei principale a lui **W**, ceea ce înseamna practic diminuarea fiecarei valori proprii a **W** cu $2 \cdot A_1$. Pentru ca λ_1 sa prezinte în continuare valoarea $-C \cdot N^2$ se adauga la fiecare element al matricii **W** valoarea $\frac{2 \cdot A_1}{N^2}$.

Având în vedere toate aceste ajustari, valorile proprii ale **W** devin:

$$\lambda_1 = -C \cdot N^2 < 0$$
$$\lambda_2 = 2 \cdot (A - A_1) > 0$$
$$\lambda_3 = -A \cdot N + 2 \cdot (A - A_1) < 0$$

Efectul de diminuare a valorilor nivelurilor de activare a neuronilor trebuie sa fie mai puternic decât cel de expansiune. Din aceasta cauza în [AnHo97] se recomanda:

$$|\lambda_1| \approx 160 \cdot |\lambda_2|$$
$$|\lambda_3| \approx 160 \cdot |\lambda_2|$$

Analiza valorilor proprii ale W vizeaza numai primii trei termeni ai relatiei 6.2. Ignorarea celui de-al patrulea termen are ca efect obtinerea unor solutii valide dar posibil suboptimale. De aceea, luarea în considerare a acestui ultim termen este foarte importanta. Elementele $w_{Xi,Yj}$ se vor exprima prin relatia:

$$w_{Xi,Yj} = -A \cdot \delta_{XY} \cdot (1-\delta_{ij}) - A \cdot \delta_{ij}(1-\delta_{XY}) - 2 \cdot A_1 \cdot \delta_{XY} \cdot \delta_{ij} - C + \frac{2 \cdot (A \cdot N - A + A_1)}{N^2} - D \cdot d_{XY} \cdot (\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i-1})$$

cu un input extern pe unitate, I_{Xi} egal cu $C \cdot N$

Cel de-al patrulea termen poate deplasa solutia în afara spatiului solutiilor valide, deoarece traseele cu lungime mica sunt, de regula, invalide. Din aceasta cauza, parametrul D trebuie fixat pe o valoare mult mai mica decât λ_1, λ_3 si **I**, mai precis pe o valoare: $D \approx \frac{|\lambda_3|}{80}$. Prin experimente, în [AnHo97] se ajunge la urmatoarele relatii:

$$A_1 \approx A \cdot (1 - \frac{N}{322}),\ C \approx \frac{A}{N},\ D \approx \frac{A \cdot N}{80}.$$

recomandându-se pentru 10 orase: A = 8, A_1 = 7.75, C = 0.80, D = 1, γ = 0.02, iar pentru 20 de orase: A = 8, A_1 = 7.75, C = 0.16, D = 5, γ = 0.05.

3.2. Partitionarea grafurilor

Se considera un graf neorientat format dintr-un numar par, N de noduri si un set de muchii. Se cere sa se separe setul de noduri în doua subseturi cu numar egal de noduri astfel încât numarul de conexiuni între noduri din subseturi distincte sa fie minim. Figura 2 prezinta doua variante de partitionare a unui graf, una în care numarul de conexiuni între noduri din seturi diferite este 2, iar alta în care acest numar este 6.

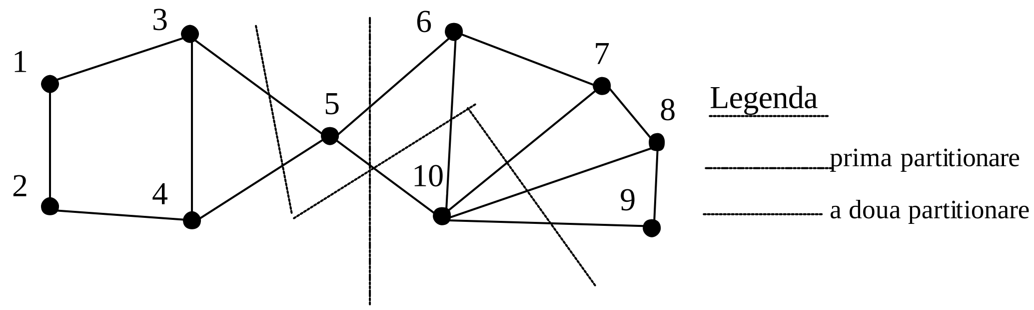

Fig. 2 - Variante de partitionare a unui graf - exemplu

Conectivitatea grafului poate fi reprezentata cu ajutorul unei matrici C, cu elemente cij, care prezinta valoarea 1 daca nodul i este conectat cu nodul j si valoarea 0, în rest. Figura 3 prezinta matricea de conectivitate asociata grafului din figura 2.

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Fig. 3 - Matricea de conectivitate asociata grafului din figura 2

Matricea **C** este simetrica. Cele doua partitii sunt desemnate prin C_A si C_B. Se defineste o variabila O_i, asociata nodului *i* din graf si definita astfel:

$$O_i = \begin{cases} 1 & ,\text{daca } i \in C_A \\ -1 & ,\text{daca } i \in C_B \end{cases}$$

Problema partitionarii grafului se poate exprima sub forma urmatoarei probleme de optimizare:

$\min \sum_i \sum_{j \neq i} c_{ij} \cdot O_i \cdot O_j$, în conditiile în care:

$$\sum_i O_i = 0 \qquad (7)$$

Criteriul de minimizare poate determina plasarea tuturor nodurilor într-o singura partitie, pentru a evita conexiunile interpartitii. Restrictia exprimata prin relatia (7) forteaza partitiile sa prezinte un numar egal de noduri.

Aceasta problema de optimizare se poate rezolva cu ajutorul unei retele Hopfield, recurgând la urmatoarea functie de energie:

$$E = -\tfrac{1}{2} \cdot \sum_i \sum_{j \neq i} O_i \cdot O_j \cdot c_{ij} + \tfrac{\alpha}{2} \cdot \left(\sum_i O_i \right)^2 \qquad (8)$$

unde: α este o constanta (parametru Lagrange).

Functia de energie (8) se poate exprima sub forma:

$$E = \frac{N \cdot \alpha}{2} - \frac{1}{2} \cdot \sum_i \sum_{j \neq i} O_i \cdot O_j \cdot w_{ij}$$

unde: N reprezinta numarul de noduri din graf si $w_{ij} = c_{ij} - \alpha$.

Functia de activare a neuronilor este functia prag bipolara, cu valoarea prag 0.

3.3. Problema celor N dame

Problema consta în plasarea a N dame pe o tabla de dimensiuni NxN, astfel încât nici una dintre piese sa nu fie atacata de celelalte piese. Altfel spus, sa se plaseze nu mai mult de o piesa pe fiecare linie, coloana si diagonala a tablei.

Pentru a rezolva problema celor N dame cu ajutorul unei retele Hopfield se va reprezenta fiecare pozitie a tablei cu ajutorul unui neuron. Daca pozitia este ocupata, neuronul corespunzator va avea nivelul de activare 1, altfel va avea activarea 0.

În acest caz, functia de energie a retelei Hopfield va fi de forma:

$$E = \frac{A}{2}\cdot\sum_i\left(\sum_j O_{ij} - 1\right)^2 + \frac{B}{2}\cdot\sum_j\left(\sum_i O_{ij} - 1\right)^2 + \frac{A+B}{2}\cdot\sum_i\sum_j O_{ij}(1-O_{ij}) +$$
$$+\frac{C}{2}\sum_i\sum_j\sum_{k\neq 0} O_{ij}\cdot(O_{i+k,j+k} + O_{i+k,j-k})$$

unde: A, B si C sunt parametrii Lagrange, iar O_{ij} reprezinta nivelul de activare al neuronului asociat pozitiei (i,j). Functia *E* este o functie Lyapunov, pentru care primul termen este zero atunci când o piesa este plasata pe fiecare linie, iar al doilea termen devine 0 atunci când o piesa este plasata pe fiecare coloana a tablei. Termenul al treilea forteaza neuronii sa prezinte nivelul de activare 0 sau 1, iar al patrulea termen al functiei devine 0 atunci când nu mai mult de o piesa este plasata pe fiecare diagonala. Functia de activare a neuronilor este o functie sigmoida de forma:

$$f(net_{ij}) = \frac{1}{2}\cdot\left(1 + \tanh\frac{net_{ij}}{\beta}\right) = O_{ij}$$

unde:

$$net_{ij} \leftarrow net_{ij} + \eta\cdot\left[-\frac{d}{dO_{ij}}E\right]$$

adica:

$$net_{ij} \leftarrow net_{ij} - \eta\cdot\left[A\cdot\left(\sum_j O_{ij} - 1\right) + B\cdot\left(\sum_i O_{ij} - 1\right) + \frac{A+B}{2}\cdot(1 - 2\cdot O_{ij}) + \right.$$
$$\left. + C\cdot\sum_{k\neq 0}(O_{i+k,j+k} + O_{i+k,j-k})\right]$$

unde: η este o constanta cu valoare mica.

Bibliografie

[AlMo91] Aleksander I., Morton H - *An Introduction to Neural Computing,* Chapman & Hall, 1991.

[AnHo97] Ansari N., Hou E. - *Computational Intelligence for Optimization,* Kluwer Academic Publishers, 1997.

[BoCr97] Bodea C., Cretu A. - *Parallel Algorithm for Neural Networks,* în: Computer Science, INFOREC Printing House Bucharest, 1997.

[BoIC97a] Bodea C., Ivan I, Cretu A. - *Aplicatii ale retelelor neuronale în economie*, Editura INFOREC, Bucuresti, 1997.

[BoIC97b] Bodea C., Ivan I., Cretu A. - *Simulator pentru retele neuronale Hopfield,* în: Informatica Economica, vol 1, nr. 2, 1997.

[Bode02] Bodea C. - *Inteligenta artificiala. Calcul neuronal*, Editura ASE, Bucuresti, 2002.