

ЧИСЛО ЛОКАЛЬНЫХ АТТРАКТОРОВ БЕЗМАСШТАБНЫХ СЕТЕЙ ХОПФИЛДА

С.А. Вакуленко¹, И.С. Морозов²

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, г. Санкт-Петербург;

² Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна, г. Санкт-Петербург

Рассматриваются оценки числа локальных аттракторов для модели Хопфилда с непрерывными состояниями, непрерывным временем и с графом взаимодействия, имеющим безмасштабную структуру. Число локальных аттракторов N_a определяет размер памяти (емкость) сети и является важнейшей характеристикой сети. Проблеме оценки N_a было уделено большое внимание, но в основном рассматривались булевские модели такого типа или модели с симметричным взаимодействием.

Во втором случае емкость пропорциональна числу нейронов N . Мы получаем оценку максимального значения N_a , которая содержит характеристики графа взаимодействия сети. Из нее следует, что емкость может расти как функция $\exp(cN^a)$, где c, a – положительные числа. Далее с помощью компьютерных симуляций найдена связь между N_a и числом центров (сильно связанных нейронов) в сети. При помощи регрессии получена формула для емкости как функции числа центров. Показано, что логарифм емкости пропорционален числу центров, а число центров пропорционально корню N .

Результаты могут иметь приложения к проблемам создания моделей ассоциативной памяти и к моделированию морфогенеза с помощью генетических сетей.

Ключевые слова: нейронные сети, модель Хопфилда, безмасштабные сети, емкость сети, аттрактор.

Введение

В последнее десятилетие сетям со сложной топологией уделялось большое внимание [1–4]. Известно, что нейронные, генетические и метаболические сети имеют схожую структуру [1–3, 5]. В них доля $P(k)$ узлов сети, имеющих k связей с другими узлами, описывается формулой $P(k) \approx Ck^{-\theta}$, где θ – параметр, значение которого находится в пределах $2 < \theta < 3$ и $C > 0$ – коэффициент. Сети такой структуры получили название безмасштабных. В таких сетях имеются некоторые сильно связанные узлы, которые могут быть названы хабами, или центрами, в то время как почти все остальные узлы слабо связаны. Слабо связанные узлы взаимодействуют в основном с хабами. Например, в экологии виды-универсалы взаимодействуют с другими видами-универсалами и видами-специалистами, в то время как последние взаимодействуют с видами-универсалами [5]. Аналогичную картину мы можем наблюдать в генетических и белковых сетях [8].

В этой статье мы рассмотрим нейронные сети Хопфилда с безмасштабной топологией взаимодействия нейронов. Сети Хопфилда являются классической моделью аттракторной нейронной сети [9], которая обладает ассоциативной памятью. В статье Хопфилда [9] было предложено специальное представление для матрицы взаимодействия нейронов (синаптической матрицы), которое ведет к эффекту возникновения ассоциативной памяти. В [9] эта матрица была симметричной и описывала полносвязный граф взаимодействия, т. е. каждый нейрон мог взаимодействовать со всеми другими. Вследствие симметричности синаптической матрицы, динамика нейронной сети Хопфилда обладает функцией Ляпунова, которая не возрастает на траекториях системы. Глобальные аттракторы таких динамических систем хорошо изучены [10]. Они состоят из множества локальных аттракторов, которые являются устойчивыми стационарными решениями. Ассоциа-

тивная память возникает вследствие того факта, что каждый локальный аттрактор имеет открытую область притяжения (бассейн притяжения). Таким образом, число локальных аттракторов N_a является важной характеристикой сети. Отметим, что достижение устойчивого состояния не всегда гарантирует правильный ответ сети. Это происходит из-за того, что некоторые траектории могут сходиться к так называемым ложным аттракторам.

Под емкостью мы понимаем число локальных аттракторов (устойчивых стационарных решений соответствующей системы уравнений) [9], участвующих в работе ассоциативной памяти. Известно, что емкость модели Хопфилда невелика – она допускает оценку μN , где N – число нейронов и μ – малый положительный коэффициент. Помимо этого, классическая модель Хопфилда имеет еще два недостатка. Именно, граф взаимодействия для реальных биологических нейронных сетей не является полным, то есть каждый нейрон взаимодействует лишь с частью других. Кроме того, взаимодействие в реальных нейронных сетях не является симметричным.

Цель настоящей работы – рассмотреть число локальных аттракторов N_a в модифицированной нейронной сети Хопфилда с безмасштабной топологией и несимметричным взаимодействием. Такая сеть моделирует мозг, который растет случайно по алгоритму предпочтительного связывания (preferential attachment) [3]. Хорошо известно, что в начальном периоде мозга роста связи между нейронами формируются случайно и можно ожидать, что это происходит по данному алгоритму.

Мы доказываем теорему, которая выражает N_a через некоторые параметры графа, определяющего взаимодействие нейронов в сети. Этот результат является общим и не зависит от вида графа взаимодействия. Чтобы оценить N_a как функцию числа нейронов N необходимо, таким образом, исследовать, как эти характеристики зависят от N . Эта задача представляет интерес для больших N . Для графов общего вида она, вероятно, довольно сложная. Для решения этой задачи мы использовали программу, которая строит случайные безмасштабные сети по алгоритму предпочтительного связывания. Результаты показывают, что число N_a для таких безмасштабных сетей растет с ростом N не медленнее, чем показательная функция от некоторой степени N . Помимо численного результата, мы доказываем аналитический результат, который показывает, что для сетей, где граф взаимодействия – это лес звезд (объединение несвязанных звездных графов), имеется оценка $\max N_a > \exp(cN)$, где c – положительный коэффициент.

Этот результат не является полностью неожиданным. Ранее предполагалось, что для известной модели Кауффмана протеиновых и метаболических сетей [14] число N_a пропорционально корню N . Этот результат является естественным с биологической точки зрения. Однако в последнее время появились работы, в которых показано с помощью численных и аналитических методов, что в модели Кауффмана N_a может быть функцией от N [15], которая при больших N растет быстрее, чем многочлен от N . Модель Кауффмана – это булевская модель и методы работы [15] трудно обобщить на более реалистические модели с непрерывными состояниями. Метод нашей работы существенно отличается от метода [15], является конструктивным и позволяет найти аттракторы в явном виде.

Опишем основную идею метода. Основная трудность состоит в том, что вследствие несимметричности взаимодействия мы не можем использовать функцию Ляпунова. Однако имеется математический аппарат, позволяющий преодолеть эту трудность. При некоторых естественных условиях, наложенных на взаимодействие нейронов, можно показать, что система Хопфилда является кооперативной динамической системой. Математическая теория таких систем изложена, например, в [6, 7]. Локальные аттракторы кооперативных систем являются устойчивыми стационарными решениями, также как для систем с функцией Ляпунова. С физической (биологической) точки зрения кооперативность означает, что рост активности любого нейрона не уменьшает активности всех других нейронов.

1. Модель

Мы рассмотрим сеть Хопфилда, классическую модель теории аттракторных нейронных сетей:

$$\frac{du_i}{dt} = \sigma\left(\sum_{j=1}^N W_{ij}u_j - h_i\right) - \lambda_i u_i, \quad (1)$$

где $i = 1, \dots, N$; $u_i(t)$ – состояние нейрона, зависящие от времени t ; W – матрица взаимодействия нейронов, элемент W_{ij} определяет, с какой силой нейрон i действует на нейрон j . Параметры

$\lambda_i > 0$ – коэффициенты деградации, функция σ является монотонной и гладкой функцией, такой, что

$$\sigma(-\infty) = 0, \sigma(+\infty) = 1, \sigma(z) > 0.$$

Типичным примером может служить

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}.$$

Взаимодействие нейронов определено с помощью взвешенного графа (V, E, W) с множеством вершин $V = \{1, \dots, N\}$, множеством ребер E и весов W_{ij} . Мы полагаем, что W_{ij} или W_{ji} могут быть отличны от нуля только при условии, что $(i, j) \in E$, то есть, что соответствующие вершины (нейроны) связаны как предписано графом взаимодействия. Отметим, что система (1) рассматривалась также как модель генетического контроля морфогенеза [11, 12].

2. Существование и свойства глобального аттрактора

Зададим начальные условия:

$$u_j(0) = \varphi_j \geq 0. \quad (2)$$

Это означает, что мы предполагаем, что все $u_i(0)$ неотрицательны в начальный момент $t = 0$.

С помощью стандартных методов [10] можно показать, что

$$0 \leq w_i(t) \leq \varphi_i \exp(-\lambda_i t) + \lambda_i^{-1} (1 - \exp(-\lambda_i t)).$$

Мы видим, что решения остаются неотрицательными для всех $t \geq 0$. Кроме того, они ограничены. Согласно известным теоремам теории дифференциальных уравнений, эти оценки гарантируют, что решения задачи Коши (1), (2) существуют для всех положительных t . Эта оценка также показывает, что система (1) обладает компактным глобальным аттрактором [10]. Структура и сложность аттрактора – один из основных вопросов математической теории нейронных сетей.

Известно, что в общем случае при произвольном выборе матрицы взаимодействия W аттрактор системы (1) может быть устроен как угодно сложно [16, 17]. Нас, однако, интересует случай, когда глобальный аттрактор состоит из некоторого числа локальных равновесий. Для этого мы предположим, что для всех различных индексов i и j величина $W_{ij} > 0$.

Тогда система (1) принадлежит к классу так называемых кооперативных систем.

Динамика таких систем полностью изучена в ряде работ (например, [6, 7]). Известно, что все локальные аттракторы кооперативной системы – это притягивающие (устойчивые) равновесия. Это означает, что хотя система (1) не обладает функцией Ляпунова простого вида, тем не менее, динамика (1) обладает тем же самым свойством сходимости траекторий к равновесиям, что и классическая система Хопфилда.

3. Основные результаты

Сформулируем теорему, которая является основным результатом работы. Предварительно сформулируем некоторые вспомогательные определения. В теории графов звезда S_k – это граф $K(1, k)$: дерево с одной вершиной и k листьями. Лес из звезд – это граф, состоящий из P несвязанных между собой компонент связности, каждая из которых – звезда. Напомним, что граф (V_1, E_1) является частью графа (V, E) , если множество его вершин V_1 – это подмножество V , а множество ребер E_1 – подмножество E .

Теорема 1. Пусть в графе взаимодействия (V, E) можно выделить часть, которая является лесом из P звезд вида $K(1, k_1), K(1, k_2), \dots, K(1, k_P)$.

Тогда при подходящем выборе взаимодействий число стационарных устойчивых решений системы (1) не меньше, чем

$$N_{eq} \geq H(k_1) H(k_2) \dots H(k_P),$$

где $H(k)$ – некоторая функция, такая что $H(k) \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$.

Теорема доказывается в два этапа. Первый этап – это доказательство для случая $P = 1$, когда мы имеем всего одну звезду в лесе, и, следовательно, один центр. Это доказательство повторяет аргументы работы [13].

Рассмотрим случай одного центра. Рассмотрим звездный граф, где центр связан в обоих направлениях с m сателлитами с состояниями w_i . Сателлиты не взаимодействуют между собой, но

действуют на центр. Положим $n = 1$, $N_1 = m$, $h = 0$, $v_1 = v$, $\tilde{\lambda}_i = 1$, $\bar{\lambda}_j = \bar{\lambda}$. Предположим для простоты, что все элементы B_{ji} равны $b_j > 0$, а элементы A_{ji} равны $a_i > 0$. В таких обозначениях уравнения (1) принимают вид

$$\frac{dw_i}{dt} = \sigma(b_i v - \tilde{h}_i) - w_i; \quad (3)$$

$$\frac{dv}{dt} = \sigma(S) - \bar{\lambda} v, \quad (4)$$

где $i = 1, \dots, m$; $S = \sum a_i w_i$ обозначает сумму состояний всех спутников.

Лемма о звезде. Пусть $n > 0$ целое число. При некотором выборе параметров $m, a, b, \tilde{h}_i, \bar{\lambda}$ уравнения (3), (4) могут иметь n устойчивых стационарных решений (точек равновесия).

Это значит, что сеть со звездной структурой $K(1, m)$ имеет h локальных равновесий при достаточно большом m .

Доказательство леммы. Чтобы найти равновесия системы (3), (4), мы полагаем $\frac{dw_i}{dt} = 0$ и выражаем w_i через v . Подставляя полученные формулы в уравнение (4), получим следующее соотношение для стационарного значения v :

$$\bar{\lambda} v = \sigma(\sum_{j=1}^m a_j \sigma(b_j v - \tilde{h}_j)). \quad (5)$$

Для специально подобранных параметров m, a, b, \tilde{h} уравнение (5) может иметь m решений. Это следует из теоремы об универсальной аппроксимации при помощи многослойных перцептронов. Из нее следует, что выражение в скобках под знаком сигма может аппроксимировать с любой наперед заданной точностью любую непрерывную функцию аргумента v . Ясно, что мы можем выбрать эту функцию так, чтобы уравнение (5) имело бы n решений.

Чтобы доказать теорему для случая произвольного числа центров, мы используем следующее замечание. Если имеются две динамические системы $dx/dt = F(x)$ и $dy/dt = G(y)$, которые имеют соответственно n и p устойчивых равновесий, тогда прямое произведение этих систем $d(x, y)/dt = (F(x), G(y))$ имеет np устойчивых равновесий. Применяя это замечание по индукции (индукция по числу центров), мы завершаем доказательство теоремы.

Из теоремы следует оценка числа локальных аттракторов:

Максимально возможное число $N_a(E, N)$ локальных аттракторов сетей с заданным графом взаимодействия (V, E) удовлетворяет оценке

$$N_a \geq \sup H(m(S_1)) \dots H(m(S_n)),$$

где верхняя грань \sup берется по всем целым $n > 0$ и всем лесам из n звезд, которые являются частями графа (E, V) , где соответствующая звезда S_k содержит $m(S_k)$ листьев, функция H введена в предыдущей теореме.

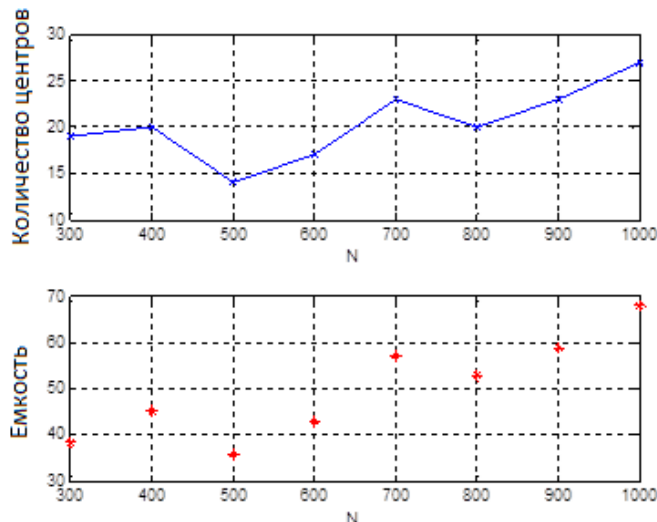
4. Алгоритм построения леса звезд

Для применения теоремы 1 необходим метод поиска леса звезд в графе.

Для безмасштабных сетей, заданных графом (V, E) , предлагается следующий алгоритм построения леса звезд. Выберем некоторое положительное число $M < N$. Найдем все вершины, имеющие степень по крайней мере M . Мы назовем такие вершины M -центрами. Пусть нашлось n таких вершин. Удалим из исходного графа все ребра, которые соединяют M -центры. Далее из оставшихся вершин удалим все вершины, инцидентные одновременно двум разным центрам. После этого останется граф, состоящий из несвязанных звезд. У некоторых звезд может не оказаться листьев, и мы удалим эти звезды.

Формализуем этот алгоритм. Сначала мы ищем степени всех вершин в графе, что дает массив $\text{Deg}(i)$, $i = 1, \dots, N$. Далее находим все центры, то есть номера i_k , такие, что $\text{Deg}(i_k) > M$. Предположим, число центров равно n , тогда $k = 1, \dots, n$. После этого строим массив $C(j)$, $j = 1, \dots, N$, число $C(j)$ определяет, сколько центров связано с вершиной j . Далее мы делаем двойной цикл по всем $k = 1, \dots, n$ и всем $j = 1, \dots, N$. В этом цикле мы проверяем, используя массив $C(j)$, для каждого центра k и каждой вершины j , связана ли вершина только с этим центром. Подсчет числа всех этих операций показывает, что число элементарных шагов этого алгоритма имеет порядок $O(N^2)$.

Для безмасштабных сетей мы можем ожидать $n \gg 1$. Численные результаты, полученные при помощи компьютерного моделирования на Matlab по описанному алгоритму, показаны на рисунке.



Результаты численного моделирования в среде Matlab
для алгоритма построения леса звезд

Было произведено несколько вычислительных экспериментов для случайно сгенерированных безмасштабных сетей, где мы брали $M = N^{0.3}$ и N от 300 до 1600. Для генерации этих сетей использовалась стандартная программа на Matlab.

Все эксперименты дали графики, похожие на график выше (см. рисунок). Мы видим, что число центров пропорционально корню числа нейронов. Результаты были обработаны с помощью регрессии, что дало следующие приближенные формулы для числа центров:

$$N_c = 0,8N^{1/2},$$

точность которой порядка 1–2 %.

Заключение

В работе были рассмотрены оценки числа локальных аттракторов N_a для модели Хопфилда с непрерывными состояниями, непрерывным временем и с графом взаимодействия безмасштабной структуры. Число локальных аттракторов связано с размером памяти (емкостью) сети и является важнейшей характеристикой сети. Проблеме оценки емкости и N_a было уделено большое внимание, но в основном рассматривались булевские модели такого типа или модели с симметричным взаимодействием.

Мы получили оценку N_a через топологические характеристики сети, более точно через параметры графа G взаимодействия нейронов. Здесь возникает задача нахождения части графа G_s графа G , который является объединением (лесом) несвязанных звездных графов. Каждая звезда имеет центр и набор сателлитов, связанных с этим центром. Оказывается, что число N_a пропорционально произведению функций от всех чисел сателлитов. Мы описали алгоритм нахождения таких лесов звезд.

Результаты могут иметь приложения к проблемам создания моделей ассоциативной памяти и к моделированию морфогенеза с помощью генетических сетей. Они ведут к новому подходу к созданию систем ассоциативной памяти, не использующему функцию Ляпунова.

Литература/References

1. Jeong H., Mason S. P., Barabasi A.L., Oltvai Z.N. Lethality and Centrality in Protein Networks. *Nature*, 2001, vol. 411, pp. 41–42. DOI: 10.1038/35075138
2. Lesne A. Complex Networks: from Graph Theory to Biology. *Letters in Mathematical Physics*, 2006, vol. 78, pp. 235–262. DOI: 10.1007/s11005-006-0123-1
3. Albert R., Barabasi A.L. Statistical Mechanics of Complex Networks. *Reviews of Modern Physics*, 2002, vol. 74, pp. 47–97. DOI: 10.1103/RevModPhys.74.47
4. Li X., Cassidy J., Reinke C.A., Fischboeck S., Carthew R.W. A MicroRNA Imparts Robustness against Environmental Fluctuation during Development. *Cell*, 2009, pp. 273–282.

5. Bascompte J. Networks in Ecology. *Basic and Applied Ecology*, 2007, vol. 8, pp. 485–490. DOI: 10.1016/j.baae.2007.06.003
6. Hirsch M. W., and Smith H. L. Competitive and Cooperative Systems: a Mini-review. Positive Systems, *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, 2003, vol. 294, pp. 183–190. DOI: 10.1007/978-3-540-44928-7_25
7. Hirsch M. W., Stability and Convergence in Strongly Monotone Dynamical Systems. *Journal Fur Die Reine Und Angewandte Mathematik*, 1988, vol. 383, pp. 1–58.
8. Aldana M. Boolean Dynamics of Networks with Scale-free Topology. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2003, vol. 185, pp. 45–66. DOI: 10.1016/S0167-2789(03)00174-X
9. Hopfield J. Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities. *Proceedings of the National Academy of Sciences, USA*, 1982, vol. 79, pp. 2554–2558.
10. He L., Hannon G.J. MicroRNAs: Small RNAs with a Big Role in Gene Regulation. *Nature Reviews Genetics*, 2004, vol. 7, pp. 522–31. DOI: 10.1038/nrg1379
11. Manu, Surkova S., Spirov A.V., Gursky V.V., Janssens H., Radulescu O., Samsonova M., Sharp D.H., Reinitz J. Canalization of Gene Expression in the Drosophila Blastoderm by Gap Gene Cross Regulation. *Plos Biology*, 2009, vol. 49, pp. 591–602. DOI: 10.1371/journal.pbio.1000049
12. Ruelle D. Elements of Differentiable Dynamics and Bifurcation Theory. *Academy Press*, 1989, p. 32–43.
13. Vakulenko S., Radulescu O. Flexible and Robust Networks. *Fundamental Informatica*, 2012, vol. 119, pp. 1–25. DOI: 10.1142/s0219720012410119
14. Kauffman S.A. Metabolic Stability and Epigenesis in Randomly Constructed Nets. *Journal of Theoretical Biology*, 1969, vol. 22, pp. 437–467. DOI: 10.1016/0022-5193(69)90015-0
15. Samuelsson B. and Troein C., Superpolynomial Growth in the Number of Attractors in Kauffman Networks. *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, no. 3, pp. 098701-1–098701-4.
16. Vakulenko S.A. A System of Coupled Oscillators Can Have Arbitrary Prescribed Attractors. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1994, vol. 7, pp. 2335–2349. DOI: 10.1088/0305-4470/27/7/015
17. Vakulenko S., Dissipative Systems Generating any Structurally Stable Chaos. *Advances in Difference Equations*, 2000, vol. 5, pp. 42–80.

Вакуленко Сергей Августович, д-р физ.-мат. наук, профессор, Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, г. Санкт-Петербург; vakulenfr@mail.ru.

Морозов Иван Сергеевич, аспирант, Санкт-Петербургский государственный университет технологии и дизайна, г. Санкт-Петербург; mmmmoroz@yandex.ru.

Поступила в редакцию 21 августа 2015 г.

DOI: 10.14529/ctcr150401

NUMBER OF LOCAL ATTRACTORS OF SCALE-FREE NETWORKS OF HOPFIELD

S.A. Vakulenko¹, vakulenfr@mail.ru,
I.S. Morozov², mmmmoroz@yandex.ru

¹ ITMO University, St. Petersburg, Russian Federation,

² St. Petersburg University of Technology and Design, St. Petersburg, Russian Federation

Estimates of the number of local attractors for the Hopfield model of attractor neural network with continuous time and states where the neuron interaction graph has a scale-free structure are

considered. The number of local attractors defines the network capacity, which is an important network characteristic. Numerous works were devoted to the problem of capacity estimations but mainly Boolean networks and the Hopfield models with symmetric interactions were studied.

In the second case the capacity is proportional to the neuron number N . An estimation of the capacity via characteristics of the network interaction graph is found. This estimate implies that the capacity may increase as $\exp(cN^a)$, where $c, a > 0$. Furthermore, a formula, which connects the capacity and the number of strongly connected neurons (hubs) in the network has been found by computer simulations. We show that the logarithm of the capacity is proportional to the hub number and the hub number is proportional to the root of N .

Results can have applications to associative memory neural models and morphogenesis modeling by genetic networks.

Keywords: neural networks, Hopfield model, scale-free networks, capacity, attractor.

Received 21 August 2015

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Вакуленко, С.А. Число локальных аттракторов безмасштабных сетей Хопфилда / С.А. Вакуленко, И.С. Морозов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2015. – Т. 15, № 4. – С. 5–11. DOI: 10.14529/ctcr150401

FOR CITATION

Vakulenko S.A., Morozov I.S. Number of Local Attractors of Scale-Free Networks of Hopfield. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics*, 2015, vol. 15, no. 4, pp. 5–11. (in Russ.) DOI: 10.14529/ctcr150401