

## Raport științific

privind implementarea proiectului în perioada octombrie – decembrie 2011

Problemele de satisfacere Boolean ( $k$ -SAT) [1, 2] constituie una dintre cele mai dificile clase de probleme de satisfacerea constrângerilor (CSP) și stau la baza multor aplicații legate de decizii, programare în timp, corecție de erori, respectiv biocomputație. Dezvoltarea unor algoritmi eficienți este deci foarte importantă pentru știință și tehnologie.

În ultimele trei decenii s-a manifestat un interes crescut față de implementarea sistemelor analog-dinamice în computație [3]. Deși existența pe plan teoretic a computației eficiente (super-Turing) prin sisteme haotice-dinamice s-a demonstrat deja [4], posibilitățile teoriei sistemelor nonlineare dinamice pentru aceste probleme dificile nu au fost explorate. În același timp inginerii au implementat aparatură care imită sistemul nervos, ca de exemplu rețele celulare neurale/nelineare, numite Cellular Neural/Nonlinear Network (CNN) [5], sau aparate analoge VLSI [6], pentru a rezolva o gamă întreagă de probleme ce țin de optimizare în robotică, computație sensorială (vizuală, auditivă) etc. CNN este un sistem de celule analog-dinamice care procesează în paralel și în timp continuu rezolvând efectiv un sistem de ecuații diferențiale ordinare (ODE) cuplate prin perechi de parametri programabili.

Una dintre cele mai studiate probleme de satisfacere Boolean este  $k$ -SAT ( $k \geq 3$ ) [1]. În  $k$ -SAT sunt date  $N$  variabile de tip boolean  $\{x_1, \dots, x_N\}$ ,  $x_i \in \{0,1\}$  și  $M$  clauze (constrângeri), fiecare clauză fiind disjuncția (OR, semnalată prin  $\vee$ ) a unor  $k$  variabile sau a negației acestora ( $\bar{x}$ ), ca de exemplu  $C = (x_3 \vee \bar{x}_5 \vee x_{12})$  în 3-SAT. Sarcina este de a găsi acele valori pentru variabile care permit ca toate clauzele să fie satisfăcute (TRUE). Atunci când numărul de constrângeri (clauze) este mic, proporția  $\alpha = M/N$  este mică – fiind ușor să găsim soluții (faza SAT ușoară), iar când sunt prea multe constrângeri putem realiza ușor că formula nu poate fi rezolvată (UNSAT). Deciderea rezolvabilității în zona intermediară poate fi însă extrem de dificilă, cazul cel mai complex de algoritm cunoscut fiind cel de  $k$ -SAT ( $k \geq 3$ ) (inclusiv cei mai buni algoritmi euristici [4,17]) fiind exponențial în  $N$ . ( $k$ -SAT fiind o problemă de tip NP-complete [2], aceasta înseamnă că orice altă problemă din categoria NP poate fi transformată în  $k$ -SAT, fapt ce îi amplifică importanța și mai mult.)

Directorul de proiect, Dr. Ercsey-Ravasz a realizat o nouă și precisă aplicație pentru Boolean satisfiability, într-o serie de ODE cu o corespondență unică între seria ei de atractori și soluțiile  $k$ -SAT [7]. Parametrii acestor ODE (determinați de problema  $k$ -SAT) constituie input-ul calculelor, iar output-ul provine din convergența dinamicii cu un atractor ceea ce corespunde unei soluții. Articolul a fost acceptat de Nature Physics, a apărut în versiunea electronică în Octombrie 2001 și pe pagina de titlu al numărului din Decembrie. Chiar dacă articolul este rezultatul unor cercetări realizate înainte de acest proiect, are o relevanță crescută, pentru că arată potențialul acestei echipe și importanța acestui proiect.

Sistemele dinamice în timp continuu (CTDS) prezentate în [7] constituie doar una dintre modelele teoretice posibile, alte modele putând fi construite respectând același principii. Datorită formei ODE-urilor CTDS seamănă cu rețelele neurale. Cellular Neural/Nonlinear Networks (CNN) sunt deja implementate în aparatură reală [5], dezvoltarea unui model asemănător cu CNN putând avea drept rezultat implementarea sistemelor dinamice cu numeroase aplicații în viitor. Cum am arătat în propunere, una dintre obiectivele principale ale acestui proiect este **dezvoltarea unui model Cellular Neural/Nonlinear Network pentru rezolvarea problemelor de satisfacerea constrângerilor**. În primele trei luni ale acestui proiect am definit forma matematică a acestui model și am început implementările computaționale.

O reprezentare naturală a problemei  $k$ -SAT este graful bipartit [8] în care sunt două tipuri diferite de noduri. De asemenea există două tipuri diferite de conexiuni, semnalate cu + respectiv – (Fig. 1). O legătură pozitivă (negativă) cuplează nodurile unei variabile cu cea a unei clauze în care variabilele apar în forma lor normală (negată). Această reprezentare de graf bipartit a fost folosită în mai multe algoritmi diferiți de a transmite mesaje, ca de exemplu „belief propagation” sau „survey propagation” [22, 4]. Au existat și câteva

încercări de a rezolva  $k$ -SAT folosind rețele neurale definite pe grafuri bipartite [9], dar de cele mai multe ori s-au folosit rețele neurale în timp discret.

Când am proiectat acest CTDS ne-am concentrat pe acele însușiri fundamentale care sunt necesare pentru a reda corespondența exactă între soluțiile  $k$ -SAT și atractorii sistemului. Am recurs la cele mai simple ecuații, astfel CTDS-ul nostru folosește variabile auxiliare nemărginite în care implementările fizice sunt evitate. Acest CTSD poate fi însă modificat și este în mod special potrivit pentru a fi reprezentat ca o rețea neurală, pentru că dinamica unei variabile date de  $s_j$  este determinată doar de vecinii acestuia în graful bipartit, adică de clauzele în care  $s_j$  apare. ODE-urile sunt construite pe funcții polinomiale care pot fi realizate folosind circuite analogice de adăuție și multiplicare. Asemănător cu Cellular Neural/Nonlinear Networks [5], fiecare nod în graful bipartit trebuie înlocuit cu un circuit (o celulă), care primește semnalul input de la output-ul celulelor învecinate. Parametrii de cuplare vor fi determinați de formula  $k$ -SAT.

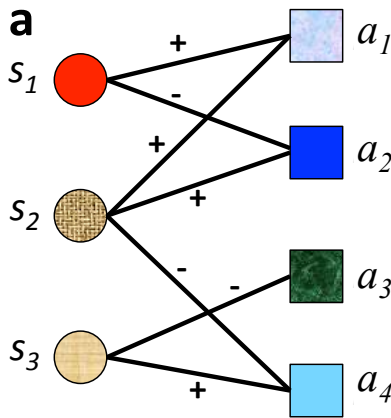


Fig. 1 Graful bipartit reprezentând problema  $k$ -SAT

Ca o primă sarcină am început **proiectarea acestui model de rețea neurală** și determinarea însușirilor necesare a acestuia (ca de exemplu forma funcțiilor output, cuplările, etc.). Această **nouă dinamică pentru rezolvarea problemelor  $k$ -SAT seamănă cu modelele clasice** și poate garanta că procedeul va fi ușor de implementat în viitor (de exemplu chipuri CNN sunt deja folosiți în computația senzorială și în robotică [3]). Forma generală a ODE-urilor ce descriu CNN (ARNN-uri sunt asemănătoare dar folosesc timp discret [6]) este:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = -x_i(t) + \sum_j A_{ij}y_j(t) + \sum_j B_{ij}u_j + z_i,$$

unde  $x_i(t)$  este activarea (numită și funcția de stare sau voltaj de stare) celulei  $i$ ;  $y_i(t) = f(x_i(t))$  este output-ul;  $u_i$  este inputul celulei  $i$

(independent de timp), iar  $z_i$  este un constant. După cum vedem, dinamica  $x_i$  depinde de combinația lineară influențată de output-urile învecinate, iar nonlinearitatea se ascunde în funcția de output  $f(x)$ . De cele mai multe ori  $f(x)$  este o funcție sigmoidă, secvențial lineară, dar poate fi aleasă și în mod diferit.

Vom prezenta pe scurt sistemul pe care l-am dezvoltat până acum. Avem două tipuri diferite de variabile pentru cele două noduri diferite ale grafului bipartit:

- $s_i$  (unde  $i = \overline{1, N}$ ) reprezintă variabilele necunoscute propriu-zise ale problemei  $k$ -SAT, cu singura diferență că variabilele de tip boolean  $\{0,1\}$  sunt proiectate pe regiunea continuă  $[-1,1]$ . Output-ul acestor variabile este determinată de funcția secvențial lineară  $f(s_i) = \frac{|s_i + 1| - |s_i - 1|}{2}$  (Fig. 2a), unde  $f(s_i) = -1$  variabila se consideră a fi **FALSE** (0), respectiv  $f(s_i) = 1$  este **TRUE** (1).
- $a_m$  (unde  $m = \overline{1, M}$ ) reprezintă clauzele. Output-ul fiind  $g(a_m) = \frac{|a_m| - |a_m - 1| + 1}{2}$  (Fig 2b). Această funcție apare ca o funcție de cost pentru fiecare clauză. Are o valoare continuă între  $[0,1]$  și atunci când  $g(a_m) = 0$  înseamnă că constrângerea a fost satisfăcută, iar când  $g(a_m) = 1$  înseamnă că aceasta nu a fost satisfăcută.

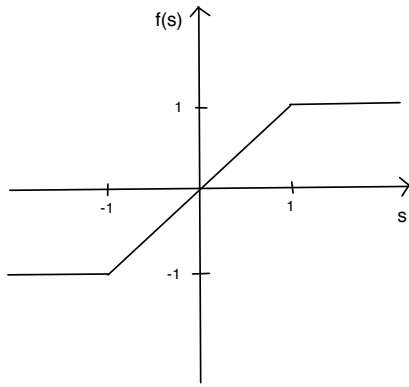


Fig. 2a Funcția output a variabilelor  $s_i$ :

$$f(s_i) = (|s_i + 1| - |s_i - 1|)/2$$

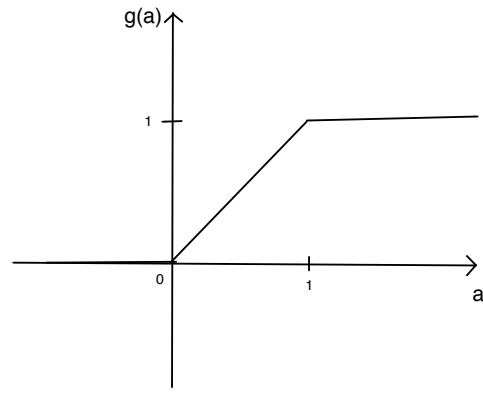


Fig. 2b Funcția output a variabilelor  $a_m$ :

$$g(a_m) = (|a_m| - |a_m - 1| + 1)/2$$

Atunci când proiectăm sistemul dinamic, scopul nostru este că punctele stabile, fixe ale sistemului ( $s^*$ ,  $a^*$ ) să satisfacă următoarele condiții:

1. fiecare variabilă  $s_i^*$  trebuie să aibă un output  $f(s_i^*) = +1$  sau  $-1$ , indicând TRUE sau FALSE
2. Fiecare variabilă  $a_m^*$  trebuie să aibă un output  $g(a_m^*) = 0$  sau  $+1$
3.  $g(a_m^*) = 0$  dacă și numai dacă clauza  $C_m$  este satisfăcută
4.  $g(a_m^*) = 0$  pentru toate  $C_m$ , unde  $m = \overline{1, M}$ , indicând că toate clauzele sunt satisfăcute și astfel avem o soluție

Forma generală a ecuațiilor CNN care rezolvă  $k$ -SAT este:

$$\begin{aligned} \frac{ds_i(t)}{dt} &= -s_i(t) + Af(s_i(t)) + \sum_m c_{mi}g(a_m(t)) \quad , \quad i = \overline{1, N} \\ \frac{da_m(t)}{dt} &= -a_m(t) + Ag(a_m(t)) - \sum_l c_{ml}f(s_l(t)) + 1 - K \quad , \quad m = \overline{1, M} \end{aligned}$$

unde  $c_{mi} = 1$  dacă variabila  $s_i$  apare în forma ei normală în clauza  $C_m$ ,  $c_{mi} = -1$  dacă apare în forma ei negată, și  $c_{mi} = 0$  dacă nu face parte din constrângerea  $C_m$ . Valoarea parametrului  $A$  trebuie să fie în regiunea  $A \in [1, 2)$  iar noi am ales să fie  $A = 1.5$ . Astfel asigurăm condițiile **1.** și **2.**, anume că punctele fixe stabile ( $s^*$ ,  $a^*$ ) ale dinamicii de output sunt  $f(s_i^*) = \pm 1$ , iar  $g(a_m^*) = 0$  sau  $+1$ . (Se poate vedea pe Fig. 3, respectiv Fig. 4.). Cea de-a treia condiție se realizează în felul următor: într-un punct fix în care toate  $f(s_i^*) = \pm 1$ ,  $c_{mi} \cdot f(s_i^*) = 1$  când variabila  $s_i^*$  satisface clauza  $C_m$ , iar  $c_{mi} \cdot f(s_i^*) = -1$  când nu o satisface. Suma  $S = \sum_l c_{ml} \cdot f(s_l^*)$  poate avea valorile  $k, k-2, k-4, \dots, -k$  (unde  $k$  este numărul variabilelor într-o clauză a problemei  $k$ -SAT). Constrângerea nu este satisfăcută atunci și numai atunci când  $S = -k$ . În cazul acesta avem un punct fix în care:

$$\frac{da_m^*}{dt} = -a_m^* + Ag(a_m^*) + k + 1 - k = 0 \Rightarrow a_{m-1}^* = Ag(a_m^*) \geq 0 \Rightarrow a_m^* \geq 1 \Rightarrow g(a_m^*) = 1$$

Atunci când constrângerea este satisfăcută  $S \geq -k + 2$  din care rezultă:

$$\begin{aligned} \frac{da_m^*}{dt} &= -a_m^* + Ag(a_m^*) - S + 1 - k = 0 \Rightarrow S = 1 - k - a_{m-1}^* + Ag(a_m^*) \geq -k + 2 \Rightarrow \\ a_m^* &\leq Ag(a_m^*) - 1 \leq 0.5 \end{aligned}$$

Aici am folosit condiția  $A=1.5$ . Dar  $g(a_m^*)$  poate fi numai 0 sau 1 în punctul fix stabil, deci trebuie să avem  $g(a_m^*) = 0$ , care într-adevăr corespunde unei constrângeri satisfăcute.

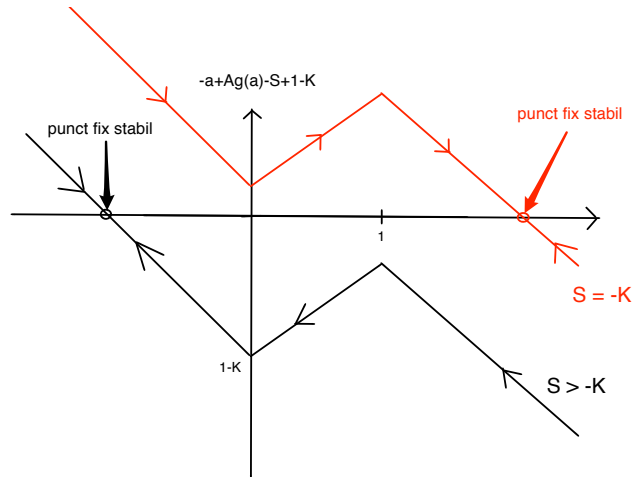


Fig. 3 Dacă constrângerea  $C_m$  este satisfăcută, însemnând că suma  $S > -k$  (negru) punctului fix stabil  $a^* < 0$  și  $g(a^*) = 0$ . În cazul în care constrângerea nu este satisfăcută,  $S = -k$  (roșu),  $a^* > 1$  și  $g(a^*) = 1$

Aici vom arăta că și condiția 4. este realizată prin această dinamică, de aceea dacă suntem într-un punct fix pentru toate  $i = \overline{1, N}$ :

$$\frac{ds_i^*}{dt} = 0 \Rightarrow -s_i^* + Af(s_i^*) + \sum_m c_{mi} \cdot g(a_m^*) = 0 \Rightarrow -s_i^* \cdot f(s_i^*) + Af^2(s_i^*) + \sum_m c_{mi} \cdot f(s_i^*) \cdot g(a_m^*) = 0$$

Știm că  $f^2(s_i^*) = 1$  deoarece  $f(s_i^*) = \pm 1$ . Din cauza condiției 3., demonstrate anterior,  $g(a_m^*) \neq 0$  dacă și numai dacă clauza  $C_m$  nu este satisfăcută, aceasta înseamnă că  $c_{mi} \cdot f(s_i^*) = -1$  din care rezultă  $-s_i^* \cdot f(s_i^*) + A - \sum_m g(a_m^*) = 0$ . Dacă există o clauză nesatisfăcută, adică există un  $m$  pentru care  $g(a_m^*) = 1$  ajungem la rezultatul următor:  $-s_i^* \cdot f(s_i^*) + A \geq 1 \Rightarrow s_i^* \cdot f(s_i^*) \leq A - 1 < 1$ , ceea ce nu este adevărat, pentru că în punctul fix stabil  $f(s_i^*) = \pm 1$ ,  $|s_i^*| \geq 1$  iar  $s_i^* \cdot f(s_i^*) \geq 1$ , după cum am arătat (Fig. 4). Singura posibilitate de a avea un punct fix stabil este de a avea  $g(a_m^*) = 0$  pentru toate  $m = \overline{1, M}$ .

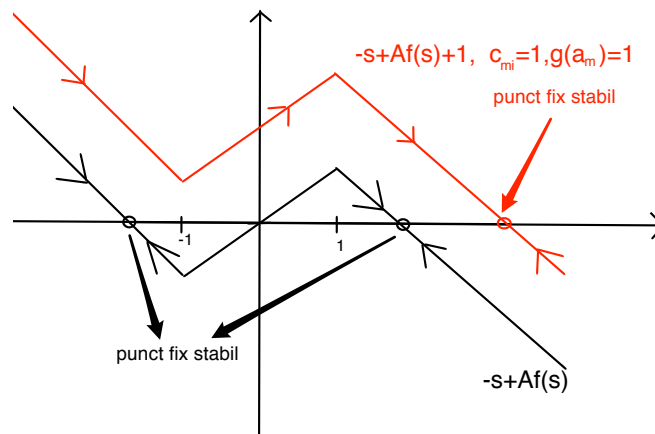


Fig. 4. În puncte fixe stabile output-ul variabilelor  $s_i$  trebuie să fie  $f(s_i^*) = \pm 1$  (negru). Când există clauze nesatisfăcute, dinamica va decurge în mod automat spre punctul fix care va satisface clauza respectivă (roșu).

## Sarcini îndeplinite

În primele trei luni am lucrat la definirea formei matematice exacte potrivite a dinamicii CNN. Am demonstrat că modelul matematic are însușirile necesare pentru a rezolva probleme  $k$ -SAT și am început implementarea acestui model în simulații pe computer.

## Activitatea membrilor grupului

Directorul de proiect, Dr. Ercsey-Ravasz a proiectat modelul CNN și i-a demonstrat însușirile matematice. Cel de-al doilea membru al grupului este studentul doctorand, anul I., Botond Molnár. Directorul de proiect îi acordă asistență în familiarizarea cu subiectul cercetării. A început să studieze bibliografia de specialitate și munca preliminară realizată de directorul de proiect. Totodată a început să folosească unele dintre programele de simulări create de directorul de proiect. În prezent el lucrează la modificarea acestor coduri în vederea implementării lor pe noul model CNN.

În octombrie directorul de proiect a participat la un simpozion organizat de Facultatea de Fizică a Universității Babeș-Bolyai. La acest simpozion au mai participat diferite grupuri și invitați de la Universitatea Catolică Pázmány Péter (Budapesta, Ungaria), Universitatea Tehnică din Budapesta (Ungaria); Facultatea de matematică și Informatică a Universității Babeș-Bolyai. Directorul de proiect a ținut o prezentare despre proiect. În urma discuțiilor din cadrul simpozionului se întrevăd și noi posibilități de colaborare.

Publicația directorului de proiect acceptată în *Nature Physics* [7] este pe pagina de titlu a ediției din Decembrie. Chiar dacă publicația a fost acceptată înainte de începutul acestui proiect și astfel nu poate fi considerată ca fiind rezultatul activității din aceste 3 luni, are totuși un rol crucial în activitatea noastră. Proiectul se bazează pe rezultatele preliminare publicate în *Nature Physics*, ceea ce arată importanța și potențialul uriaș al acestuia.

## Pașii următori

În anul următor vom continua implementarea codurilor de simulații, testarea eficienței modelului și studiul însușirilor haotice. De asemenea, vom avea un nou membru în grup, un cercetător postdoctoral care se va concentra pe studiul tranzițiilor haotice de fază observate în aceste probleme de optimizare.

## Referințe

- [1] S. Cook, *ACM Symposium on Theory of Computing* pp. 151 (1971).
- [2] M.R. Garey, D.S. Johnson, *Computers and Intractability; A Guide to the Theory of NP- Completeness* (W. H. Freeman & Co., NY, USA, 1990). L. Fortnow, *Commun. ACM* **52**, 78 (2009).
- [3] M. Branicky, *IEEE Workshop on Physics and Computation* (Dallas, TX, 1994), pp. 265–274. H.T. Siegelmann, E.D. Sontag, *Theor. Comp. Sci.*, **131**, 331 (1994). C. Moore, *Theor. Comp. Science*, **162**, 23 (1996). C. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2354 (1990). A. Ben-Hur, H.T. Siegelmann, S.A. Fishman, *J. of Complexity* **18**, 51 (2002).
- [4] H. T. Siegelmann, *Science* **268**, 545 (1995).
- [5] L.O. Chua, L. Yang, *IEEE Tr. Circuits and Systems* **35**, 1257 (1988). L.O. Chua, T. Roska, *Cellular Neural Networks and Visual Computing* (Cambridge University Press, NY, USA, 2005). L. O. Chua, T. Roska, P. L. Venetianer, *IEEE Trans. Circ. & Syst.-I: Fundamental Theory and Applications* **40**, 289 (1993).
- [6] S.-C. Liu *et al.*, *Analog VLSI: Circuits and Principles* (MIT Press, Cambridge, MA, 2002).
- [7] M. Ercsey-Ravasz, Z. Toroczkai, „Optimization hardness as transient chaos in an analog approach to constraint satisfaction”, *Nature Physics* **7**, 966 (2011). doi:10.1038/nphys2105.
- [8] F.R. Kschischang, B.J. Frey, H.-A. Loeliger, *IEEE Trans. on Inform. Theory* **47**, 498 (2001). J.S. Yedidia, W.T. Freeman, Y. Weiss, *IEEE Trans. On Inform. Theory* **51**, 2282 (2005). Molloy, M. Cores in random hypergraphs and Boolean formulas. *Random Struct. Alg.* **27**, 124-135 (2005).
- [9] M. Mézard, T. Mora, *J. of Physiology – Paris* **103**, 107 (2009). H. Jönsson, B. Söderberg, *Neural Computation* **13**, 1827 (2001). K. Zhang, M. Nagamatu, *ICANN 2005*, pp. 969

Director proiect (PN-II-RU-TE-2011-3-0121),

Dr. Ercsey-Ravasz Maria-Magdolna