



OTDK dolgozat

SZTOCHASZTIKUS OPTIMALIZÁCIÓ HANGOLHATÓ ZAJFORRÁSKÉNT MŰKÖDŐ MEMRISZTOROK SEGÍTSÉGÉVEL

Fehérvári János Gergő

Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Halbritter András**

egyetemi tanár

BME Fizikai Intézet

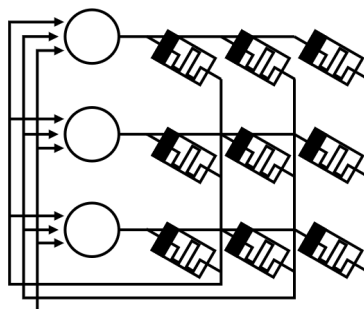
Fizika Tanszék

Dr. Balogh Zoltán

tudományos munkatárs

BME Fizikai Intézet

Fizika Tanszék



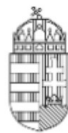
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2023. január 11.

A Kulturális és Innovációs Minisztérium **ÚNKP-22-2-I-BME-73** kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL



Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Neuromorfikus számítás és optimalizáció	4
2.1. Hopfield Neurális Hálózat	4
2.2. Matematikai formalizmus	5
2.3. Optimalizációs feladatok	6
2.4. Sztochasztikus gyorsítás	7
2.5. Memrisztív Hopfield-hálózat	8
3. Szimulációs és mérési módszerek	12
3.1. Grafén-SiO _x -grafén memrisztor és mérés technika	12
3.2. Spektrális teljesítménysűrűség	15
3.3. Szimulációs módszer	15
4. Memrisztoralapú Hopfield-hálózat szimulációja	20
4.1. Optimalizációs feladat	20
4.2. Hálózati szimuláció	20
4.2.1. Dinamikus zaj	22
4.2.2. Statikus zaj	23
4.2.3. Komparálási zaj	25
4.3. Diskusszió	27
5. Összefoglalás és kitekintés	29
6. Köszönetnyilvánítás	31
A. Algoritmus [1]	32

1. Bevezetés

A XXI. századra a számítógépek méretcsökkentésén alapuló gyorsítási lehetősége az atomi mérettartományt megközelítve egyre nehezkesebbé vált, ezért a korábbi teljesítménynövekedés ütemének megtartása érdekében új megoldásokra van szükség. Egy lehetséges megközelítés, ha a méretcsökkentés mellett architektúraszintű gyorsításra is törekszünk, melynek egy ígéretes módja az emberi agy viselkedését modellező neuromorfikus számítási eljárások alkalmazása. Az ilyen hardveresen megvalósított neurális hálózatokban megszűnik a feldolgozóegység és a memória fizikai szétválasztása [2], elősegítve komplex programozási feladatok gyors, nagyfokúan párhuzamosított elvégzését.

Az ún. memória-rezisztorok (memrisztorok) olyan áramköri elemek, melyek ellenállásállapota függ a rajtuk korábban átfolyt áramjelektől. Nanométeres méretskálájú aktív tartományuknak, feszültségjelekkel történő vezérelhetőségüknek, illetve a szilícium technológiába való integrálhatóságuknak köszönhetően ideális jelöltek lehetnek hardveres neurális hálózatok megvalósítására [3]. A memrisztorok egyik gyakori és hasznos tulajdonsága, hogy ellenállásállapotuk analóg módon hangolható, így egy ún. kereszt-huzalozású memrisztormátrix elrendezésben akár egyetlen műveleti lépésben hardveresen megvalósítható a hagyományosan erőforrásigényes mátrix-vektor szorzás, mely a mesterséges neurális hálózatok működésének alpművelete.

Dolgozatomban a kombinatorikus optimalizáció terén használt hálózatok egyik fő csoportjával, az NP-teljes problémák reprezentálására is alkalmas, iteratíván működtetett Hopfield neurális hálózatokkal (HNH) foglalkozom. Korábban több publikációban is beszámoltak memrisztorokból megvalósított HNH sikeres realizációjáról, ezek azonban kérdéseket is felvetnek [4]. Például érdemes-e véletlen hatásokkal (azaz zajjal) befolyásolni a hálózat működését a konvergencia valószínűségének megnövelése céljából, illetve milyen összetételű eszközökkel válik megbízhatóvá a fizikai neurális hálózat működése.

A jelenlegi dolgozattal célom az volt, hogy számítógépes szimuláció útján vizsgáljam egy SiO_x alapú hálózat működését, különös hangsúlyt fektetve a lehetséges zajkomponensek hatására. Ehhez először bemutatom a Hopfield-hálózatok, a kombinatorikus optimalizáció és a memrisztorhálózatok irodalmának egy-egy szép példáját. Összefoglalom a kísérleti elrendezéseken elért eredményeket, majd ismertetem az általam javasolt rendszer szimulációjának fizikai és matematikai hátterét. A szimulációs eljárás részletezését követően pedig bemutatom az eredményeimet és rövid kitekintőt teszek a kutatócsoportunk által vizsgált egyéb eszközök (SiO_x , Ag_2S , Ta_2O_5 és Nb_2O_5) felhasználására.

2. Neuromorfikus számítás és optimalizáció

A dolgozat kezdetén bemutatom a biológiai modellekből kifejlődött neurális hálózatok egy típusát, a Hopfield neurális hálózatot. Ez egy olyan modell, melyben a neuronok kimenetét visszacsatoljuk a bemenetre; iteratívan léptetve a hálózatot pedig annak természetes dinamikája érvényesül. Először egy példán bemutatom, hogy ez milyen tulajdonságoknak ad teret és hogy vizualizálható a dinamika. Ezután a hálózatot leíró matematika ismertetése és az energiafüggvény fogalmának bevezetése következik, majd megmutatom, hogyan használható egy ilyen rendszer optimalizációs feladatok megoldására. Végül egy gyakran használt példa probléma bemutatásával igyekszem motiválni a témát, majd röviden elemzek egy publikációt, melyben fizikai HNH memrisztor alapú megvalósításáról számoltak be.

2.1. Hopfield Neurális Hálózat

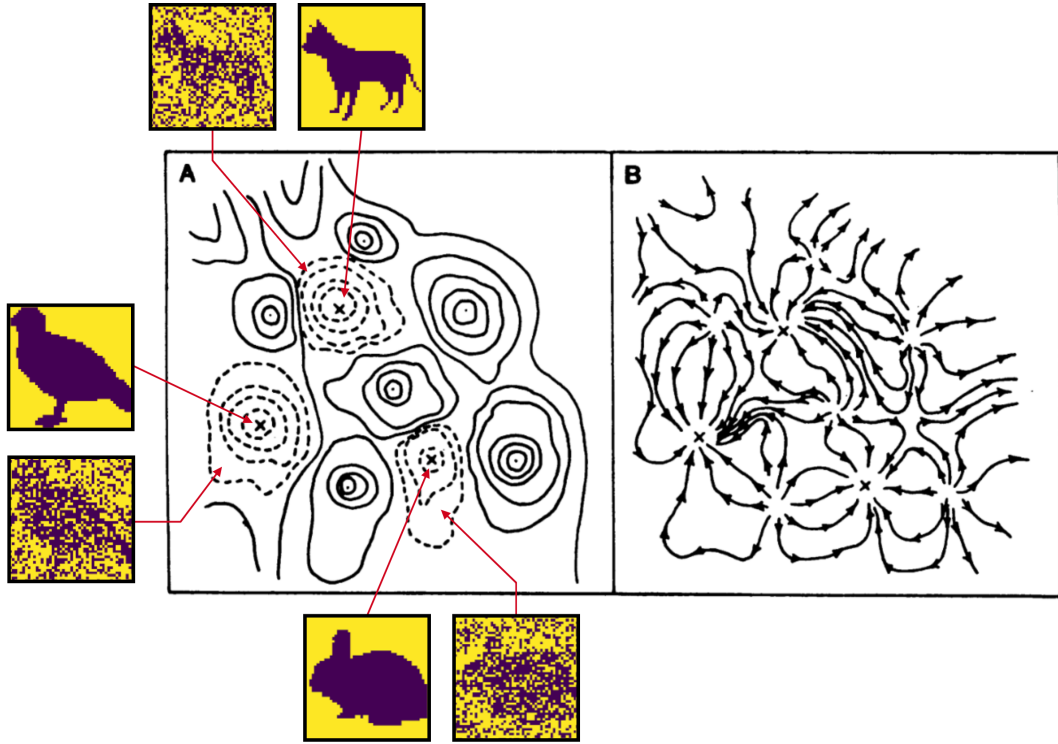
A Hopfield neurális hálózat (HNH) egyik elsőként leírt sajátossága, hogy tartalom-alapú hozzáférést biztosító *asszociatív memóriaként*¹ működik [5]. Ez a kétállapotú neuronok hálózatba rendezéséből fakadó kollektív tulajdonság és annyit tesz, hogy a hálózat képes mintázatokat tárolni. Amikor egy tárolt mintázat torzított alakját adjuk a bemenetre, akkor a hálózat egy iterációs folyamatba kezd, mely során egyesével változtatja a mintázat részleteit, mígnem természetes dinamikájának köszönhetően elérkezik a bemenethez legközelebbi emlékképhez.

A mintázatok a hálózat kétállapotú neuronjaiból képezett rendezett sorozatok, amiket *konfigurációnak* nevezünk és $\underline{x}$ -el jelölünk. A 2.1 ábrán látható példában a tárolt konfigurációk az állatokat ábrázoló, alacsony-magas pixelekből álló fényképek. Az ábrán láthatunk továbbá példákat olyan $\underline{x} + \underline{\Delta}$ torzított képekre is, amelyekből a hálózat képes előállítani a megfelelő eredetit.

Megvizsgálva a 2.1.B ábrán szereplő trajektóriákat, a 2.1.A ábrán látható szintvonalakat generálhatjuk. Így tekintve a működésre, szinte magától értetődő, hogy a rendszer összes lehetséges neuronállapota kifestít egy *konfigurációs teret* és a memóriában tárolt mintázatok egy itt értelmezhető hipersík lokális minimumaihoz tartoznak. Ez azt jelenti, hogy a hálózati dinamika a saját "energiafelületen" való természetes szélsőértékkeresés, ezt pedig széles körben alkalmazhatjuk.

¹content addressable memory, CAM

²<https://github.com/nosratullah/hopfieldNeuralNetwork>, hozzáférve: 2022.10.29.



2.1. ábra. Asszociatív memória konfigurációs terének sematikus rajza [6], kiegészítve egy valós hálózat által tárolt mintázatokkal². A) Az energiafelület szintvonalai egy hipotetikus hálózat konfigurációs terében. Az állatokat ábrázoló fotók, amiket egy valódi Hopfield-hálózat tárol, és képes a bemutatott torzítás ellenére is felismerni. B) Néhány kiválasztott pontból egyértelműen a lokális minimumok felé haladó trajektóriák, mint a hálózati dinamika esszenciája.

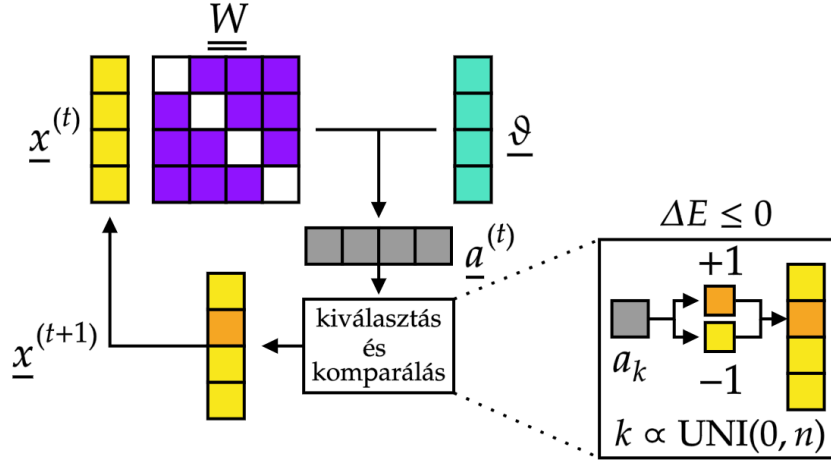
2.2. Matematikai formalizmus

A diszkrét Hopfield-hálózatot matematikailag a $\mathcal{N}(\underline{W}, \underline{\vartheta})$ szimbólumokkal jelöljük, ahol $\underline{W}$ a súlymátrix, $\underline{\vartheta}$ pedig a küszöbvektor. A Hopfield-modellben a neuronok bipolárisak, tehát az n neuront tartalmazó hálózat egy konfigurációja $\underline{x}_j \in \mathbb{B}^n$, $\mathbb{B} = \{-1, +1\}$ alakban írható. A neuronok közötti kapcsolat erősségét, és így a hálózati topológiát a $\underline{W}$ szimmetrikus súlymátrix határozza meg. Amikor az i és a j neuron között nincs szinaptikus kapcsolat, akkor $w_{ij} = w_{ji} \equiv 0$, egyéb esetben $w_{ij} > 0$. Ennek megfelelően, mivel a hálózatban nincs önvisszacsatolás, a súlymátrix diagonális elemei nullák.

A hálózat *aszinkron* működésű, minden lépésben maximum egyetlen neuron értékét változtatja meg. A t . lépésben a véletlenszerűen választott i . neuron állapotát a

$$x_i^{(t+1)} = \begin{cases} +1 & a_i^{(t)} \geq \vartheta_i \\ -1 & a_i^{(t)} < \vartheta_i \end{cases} \quad a_i^{(t)} = \sum_{j \neq i} w_{ij} x_j^{(t)}$$

kifejezés szerint határozza meg. Itt $a_i^{(t)}$ a t . lépésben az i . neuronra kiszámolt *aktiváció*, ϑ_i pedig a $\underline{\vartheta}$ *küszöbvektor* i . komponense. Általában, ha csak a feladat nem kívánja máshogy, $\underline{\vartheta} \equiv \underline{0}$. Az iterációs folyamat áttekintése a 2.2. ábrán látható.



2.2. ábra. $\mathcal{N}(\underline{W}, \underline{\vartheta})$ diszkrét aszinkron Hopfield-hálózat működése.

Könnyen megmutatható, hogy az aszinkron módon működtetett diszkrét $\mathcal{N}(\underline{W}, \underline{\vartheta})$ hálózat az

$$E(\underline{x}) = -\frac{1}{2} \underline{x}^T \underline{W} \underline{x} + \underline{\vartheta}^T \underline{x}$$

energiafüggvényt minden lépésben monoton módon csökkenti [7]. Továbbá az $E(\underline{x})$ formula épp a konfigurációs térben értelmezett energiafelületet határozza meg, így a természetes szélsőértékkeresésről alkotott szemléletes kép képletszintű alátámasztást nyert.

2.3. Optimalizációs feladatok

A Hopfield-hálózat asszociatív memóriaként való működése, amint azt Hopfield és Tank [6] 1986-ban kiemelték, megfeleltethető az optimalizációs feladatok megoldói működésének: olyan trajektórián mozgunk a konfigurációs térben, amely egy minimalizálandó $f_c()$ *célfüggvényt* monoton csökkent. A HNH megoldóként való használatához a kitűzött feladatot rá kell képeznünk a hálózatra. Ez annyit tesz, hogy a neuronok $\underline{x}_k$ konfigurációit megfeleltetjük a probléma lehetséges megoldásainak. Továbbá konstruálunk egy Hopfield-energiafüggvényt, melyre $E(\underline{x}) \propto f_c()$, vagyis a matematikai feladatnak megfelelően állítjuk be a neuronok közti kapcsolatok erősségét illetve a küszöbvektor elemeit. Ezzel pedig - kihasználva a hálózat természetes dinamikáját - elő is állt egy lehetséges megoldási módszer.

A *kényszerfeltételek nélküli kvadrátikus bináris optimalizáció*³ kedvelt példafeladata - amit jómagam is alkalmazok jelen dolgozatban - egy gráf *maximális vágásának*⁴ megkeresése. Ez a gráf csúcsainak olyan két alcsoportba való besorolását jelenti, melyre az alcsoportok között futó élek súlyának összege legalább akkora, mint bármely másik vágásra. Tekintsük a $G(V, E)$ gráfot V csúcsokkal és E élekkel, illetve $\underline{A}$ szomszédsági mátrixszal, ami a csúcsok közti súlyokat határozza meg. Keressük ekkor a gráfnak egy olyan $S \subseteq V$ szerinti

$$\delta(S) = \{ij \in V : i \in S, j \in V \setminus S\}$$

particionálását, melyre a

$$a(\delta(S)) = \sum_{ij \in \delta(S)} a_{ij}$$

súly maximális. (Egy súlyozatlan gráf esetén ez annyit tesz, hogy S és $V \setminus S$ algráfok között futó élek száma maximális.) A Wu és Zang [7] által használt formalizmus szerint vezessük be az $\underline{x} \in \{-1, 1\}^N$ vágás-vektort, mely

$$x_i = \begin{cases} 1 & i \in S \\ -1 & i \in V \setminus S \end{cases}$$

összefüggés szerint kódolja az adott particionálást. Ekkor a két algráf között futó élek teljes súlya

$$\sum_{i < j} a_{ij} \frac{1 - x_i x_j}{2}$$

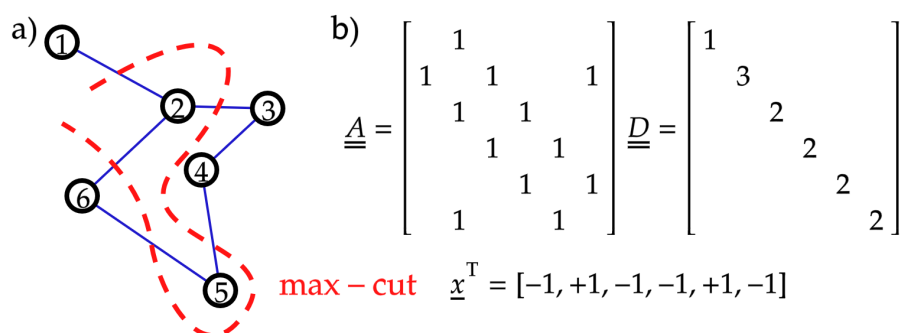
szerint számolható. Itt ugyanis ij minden csúcson végigfut, és ha kettő csúcs között fut él, de egy algráfba esnek, akkor a járuléka az összegben nulla, ha pedig külön algráfba kerültek, akkor járuléka éppen a_{ij} . Kihasználva a szomszédsági mátrix szimmetriáját és a tényt, hogy $x_i \cdot x_i \equiv 1$, belátható, hogy a $\mathcal{N}(-\frac{1}{2}\underline{A}, 0)$ hálózat épp az így meghatározott problémát oldja meg. A vágás szemléltetése egy egyszerű példára a megoldásvektorral együtt a 2.3.a) ábrán tekinthető meg. Itt szintén feltüntettem a gráf $\underline{D}$ foksám mátrixát, ami később szükséges lesz a megoldások leírásához.

2.4. Sztochasztikus gyorsítás

Mintegy 12 évvel Hopfield és Tank méltán elhíresült publikációját követően 1998-ban Kate A. Smith [8] összefoglaló munkájában részletesen tárgyalja a *kombinatorikus optimalizáció* terü-

³quadratic unconstrained binary optimization, QUBO

⁴maximum cut



2.3. ábra. Példa a maximális-vágás feladatra. a) Egy gráf, melynek keressük a maximális vágását és egy lehetséges megoldás (piros szaggatott vonal). b) A gráfot jellemző $\underline{\underline{A}}$ szomszédsági és $\underline{\underline{D}}$ fokszám mátrix, illetve az a) panelen látható megoldás vektoriális alakban kódolva.

letén használt neurális hálózatokat. Ezeket két fő csoportra osztja, melyek egyike a Hopfield-típusú megoldó. Itt már kiemelt figyelmet kapnak a hálózat működésével kapcsolatos problémák: az egyik szembevető nehézség a lokális minimumok jelenléte. Amikor ugyanis tetszőleges feladatot képezünk rá egy HNH-ra, akkor az energiafelület rögzített, az pedig jól ismert tény, hogy a monoton megoldók egy ilyen esetben könnyen ragadnak lokális minimumban.

A cikk több megoldási stratégiát is ismertet és ezeket *determinisztikus* és *sztochasztikus* megközelítésekre bontja. A dolgozatom szempontjából az utóbbi csoport bír fontos jelentőséggel, amit négy további kategóriára osztanak: az aktivációs függvény, a súlymátrix vagy a küszöbvektor véletlen perturbációja, illetve ezek tetszőleges kombinációja. Mindegyik esetben némi véletlenszerűség becsatolásával igyekszünk megtörni a hálózat determinisztikus működését abban a reményben, hogy ezzel biztosítjuk a lokális minimumból való kilépést, de nem gátoljuk a globális minimum elérését és annak megtartását. Kellems egyúttállás, hogy amikor neurális hálózatok fizikai realizációjával foglalkozunk, akkor az elektromos komponensek zaja eredendően kifejti a hatását a hálózat működésére. Felcsillan azonban a lehetőség, hogy ha ezeket a hatásokat mélységükben megértettük, akkor őket ki is használjuk és javítsuk a hardveres működést.

2.5. Memrisztív Hopfield-hálózat

A biológiai ihletésű számítási paradigmák megvalósítására számtalan megközelítés létezik. Az egyik jelölt az ún. *memrisztor*, egy passzív áramkörü egység, melynek legalább kettő, jól elkülönülő ellenállásállapota létezik. Általában az egyes állapotokhoz közel az eszköz konfigurációja dinamikusán hangolható, így folytonos skálán változtatható ellenállású memóriaegységről

beszélhetünk, amely természeténél fogva nem-volatilis, illetve energiahatékony módon képes az információátvitelre és műveletvégzésre is. Az eszközök teljes potenciáljának kihasználását célozza a *kereszt-huzalozású memrisztorhálózat*⁵, melynek sematikus rajzát a 2.4. ábrán láthatjuk. Itt memrisztorokat rendezünk fizikai mátrixsémába, majd az analóg programozhatóságukat használjuk, hogy reprezentáljunk egy lineáris algebrai mátrixot.

A mátrix-vektor szorzás hatékony elvégzésének képességével egy optimális kísérleti Hopfield-hálózat megvalósítása is lehetségessé válik. Bináris mátrix esetében a

$$w_{ij} \in \{0,1\} \xrightarrow{g()} \{G_l, G_h\},$$

hozzárendelés szerint végezzük el az eszközök vezetőképességének beállítását, míg a bipoláris vektorelemeknek egyszerűen a megfelelő feszültségértéket feleltetjük meg

$$x_i \in \{-1,1\} \xrightarrow{v()} \{-1 [V], +1 [V]\}.$$

Az egyes rendszerek finomhangolhatóságától függően a $G_{l/h}$ célértékekhez képest természetesen fogunk eltéréseket tapasztalni a vezetőképesség-értékek felprogramozása során, így a név-értékek tulajdonképpen egy-egy, az adott rendszer precíz programozhatóságától függő eloszlás várható értékei lesznek. Ennek a váltakozó, ± 1 értékű feszültségkomponensek által felerősített fluktuációja a nemideális programozhatóságból fakadó *statikus zaj*.

Amint elő van készítve a kísérleti hálózat, feszültségjeleket kapcsolhatunk a bementére. Ennek hatására az i . sorban a j . eszközön $I_{ij} = G_{ij} \cdot V_i$ áram kezd folyni. A j . oszlop kimenetén pedig az egyes áramjárulékok összegét

$$I_j = \sum_i I_{ij} = \sum_i G_{ij} \cdot V_i$$

mérjük, amivel a mátrix-vektor szorzás műveletét (és egyben az aktivációs komponensek kiszámítását) - egy órajelen belül - sikeresen el is végeztük. Természetesen tudjuk, hogy egy memrisztorra egyenfeszültséget kapcsolva időben fluktuáló jelet fogunk mérni, ami az eszköz belső vezetőképesség-fluktuációnak eredménye. Praktikusan ez azt jelenti, hogy a szorzás, mint célművelet eredménye

$$\underline{W} \underline{x}^{(t)} \rightarrow (\underline{G} + \underline{\Delta G}(t)) \cdot \underline{V}^{(t)}$$

összefüggés⁶ szerinti időfüggést mutat a hardverben. Ez a *dinamikus zaj* jelensége. Amennyiben egy Hopfield-hálózatot működtetünk, ahol a kimeneti I áramvektort feszültségvektorra kon-

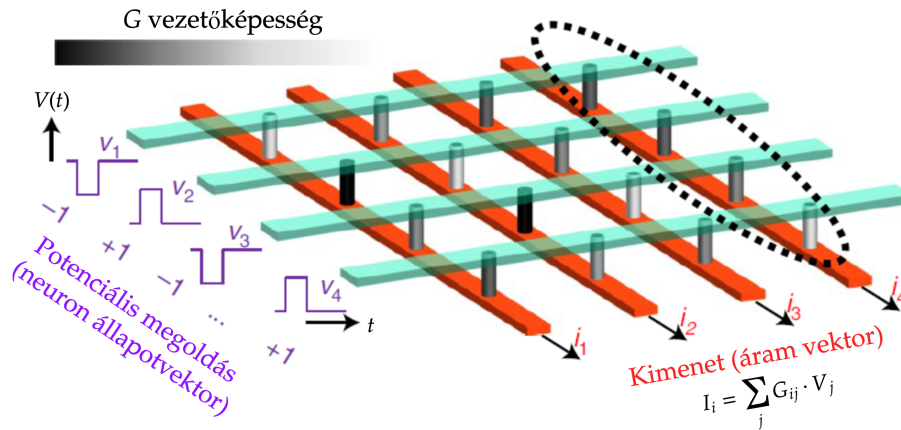
⁵memristor crossbar array

⁶A (t) jelölés a felső indexben az absztrakt hálózat t . lépésére, míg a (t) jelölés a kísérleti rendszer időkoordinátától való függésére utal.

vertálva visszacsatoljuk a bemenetre, akkor lehetőségünk nyílik a komparációs művelet véletlen perturbációjára is

$$\left[(\underline{G} + \underline{\Delta G}(t)) \cdot \underline{V}^{(t)} \right]_i \lesseqgtr \vartheta_i + \eta^{(t)}$$

egy hardveresen megvalósított $\eta^{(t)}$ lépésszámtól függő paraméter segítségével.



2.4. ábra. Kereszt-huzalozású memrisztív hálózat mint a lineáris algebrai mátrix fizikai reprezentációja illetve hardveres mátrix-vektor szorzó egység [4]. Fekete-fehér színskála jelzi az analóg hangolhatóságot mutató memrisztor egységelemeket. Lila színnel vannak kiemelve az $\underline{x}^{(t)}$ bipoláris vektor elemeit reprezentáló feszültségjelek, míg piros szín jelöli az áramvektor-ként mért $\underline{x}^{(t+1)}$ kimenet komponenseit.

Egy ilyen, sztochasztikus javítás elvén működő fizikai hálózatot Cai et. al. [4] sikeresen valósítottak meg 2020-ban. Ebben a hibrid, analóg-digitális memrisztor hálózatban a zajjárulék előállításáért és hangolásáért egy dedikált elektronikai egység és egy számítógép felel. Az egység a memrisztormátrix eszközszintű dinamikus elektronikai zajából és a vezetőképesség hangolási pontatlanságából fakadó statikus zajából nyert sztochasztikus jeleket használja fel véletlen komponensként. Számítógépesen történik az aktivációs függvény számítása, mígnem egy újabb vezérlőelem a bemenetre kapcsolja a kiszámított $\underline{x}^{(t+1)}$ vektort, megkezdve ezzel a következő iterációs lépést.

A hálózat működése közben értelemszerűen szétválaszthatatlan a két zajkomponens, egy speciális méréssorozatban azonban szeparálták a hatásukat és a statikus zaj három nagyságrenddel nagyobbak adódott! A hangolás során pedig a szimulált lehűtéshez⁷ hasonlóan relaxálták az $\eta^{(t)}$ paramétert és kimutatták, hogy *superlineáris* csökkentési séma mellett lesz optimális a konvergencia. Szakdolgozatomban ezt a publikációt részletesen elemeztem és a megértést célzó

⁷simulated annealing

szimulációkat is készítettem [9]. Sikeresen reprodukáltam a zaj hasznosságát alátámasztó, illetve az ideális lehűtési sémákra vonatkozó eredményeket. Egyszerű modellemben a komparálás során csatoltam be egymásra skálázott Gauss-féle normális és egyenletes eloszlású időjeleket, ideálisnak tekintve a hálózatot.

Jelen dolgozatban a célom egy kísérleti eszközzaj befogadására képes kód fejlesztése volt, ami a hálózat összetételétől függően képes a statikus programozási hibák és a dinamikus időfüggő eszközzajok modellezésére. A kód fejlesztését követően pedig izoláltan kezdtem az egyes zajkomponensek hatását vizsgálni normális, illetve komolyabb kísérleti relevanciával bíró $1/f$ spektrumú jelekre.

3. Szimulációs és mérési módszerek

Ebben a fejezetben rátérek munkám technikai hátterére: összefoglalom a grafén-SiO_x-grafén memrisztorok kísérleti viselkedését a kutatócsoportban használatos zajmérési és -kiértékelési technikákkal együtt, majd rövid matematikai összefoglalót követően bemutatom az algoritmust, amellyel tetszőleges spektrális teljesítménysűrűségű jel generálható.

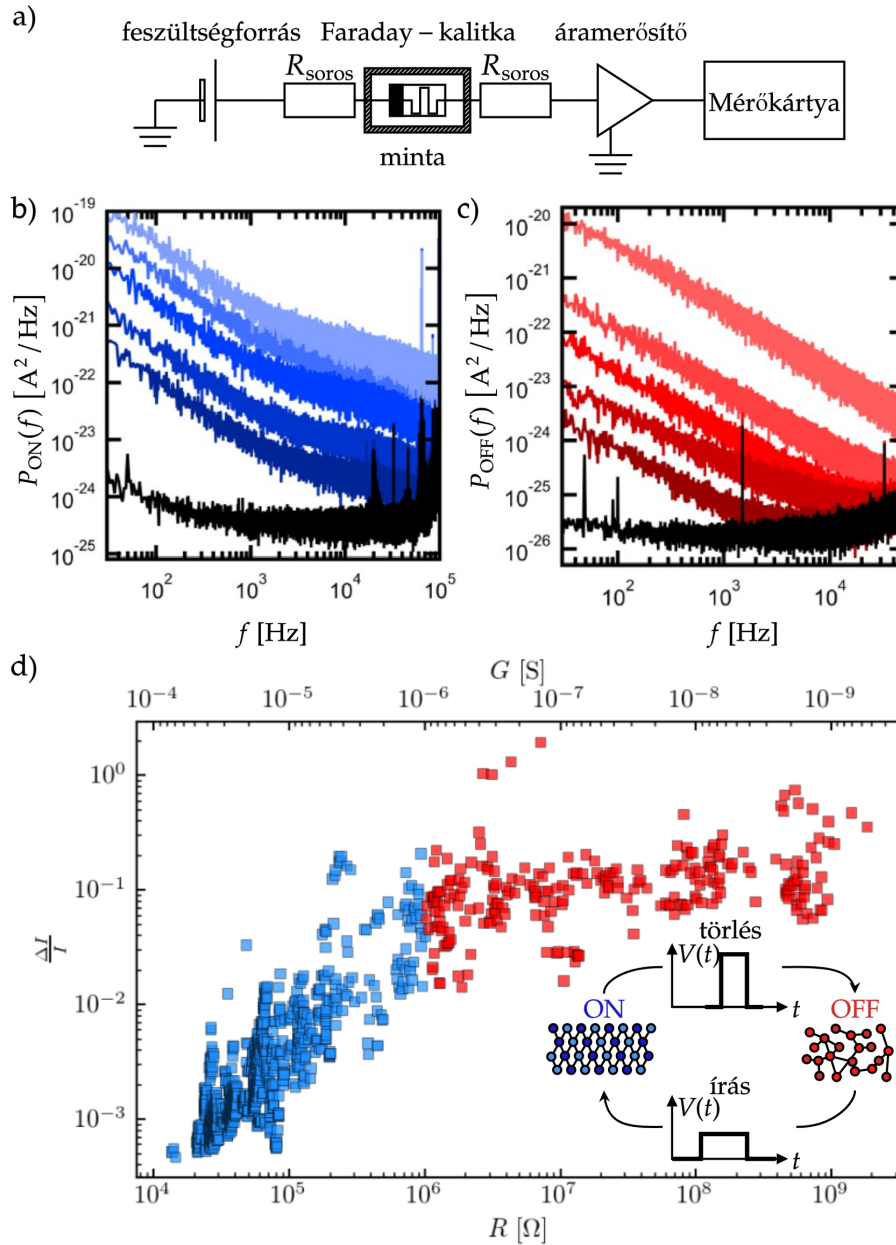
3.1. Grafén-SiO_x-grafén memrisztor és mérés technika

A grafén elektródás SiO_x oxidrétegében feszültségimpulzusokkal való kezelés útján létrehozható egy oxigénszegény *aktív tartomány*. A tartomány vezetőképessége alacsony feszültséggel mérhető (olvasás), magas feszültséggel változtatható (írás). A hangolás hét nagyságrenden keresztül történhet közel folytonosan, amit két további régióra szokás szétosztani: a $G = 10^{-6} - 10^{-4}$ [S] közötti állapotokat kristályos, ON állapotnak nevezzük, a $G = 10^{-9} - 10^{-6}$ [S] sávra pedig amorf, OFF állapotként szokás hivatkozni.

A kristályos és amorf jelzők az aktív tartomány szerkezetére vonatkoznak. Ahogy a 3.1.d) ábra alpanelén láthatjuk, a régiók egymásba való átformázása is eltérő jellemzőjű feszültségimpulzusokkal történik. Amikor az eszköz rendezett ON állapotában található, akkor rövid, nagyfeszültségű impulzusokkal elérhetjük, hogy a rajta átfolyó Joule-hő hatására szerkezete megolvadjon. A kikapcsolást követően pedig hosszabb, kis amplitúdójú feszültségjelekkel az elektromos tér rendező hatása érvényesíthető és a struktúra visszaállítható. Az egyes állapotok hangolásán rendre a rendezettség/rendezetlenség mértékének finomhangolását értjük, ami a vezetőképesség változásában is megnyilvánul.

A grafén-SiO_x-grafén rendszer komplex dinamikájának feltárását csoportunkban Dr. Pósa László kezdte meg doktori munkája alatt [10, 11], majd a rendszer zajjelenségeinek vizsgálatával Krisztián Dávid [12] és később Balázs Péter [13] foglalkoztak MSc diplomamunkáik keretében. Ebbe a kutatásba kapcsolódtam be én magam is és Balogh Zoltán vezetésével méréseket végeztem grafénnel, arannyal és platínával kontaktált SiO_x rendszereken.

A zajkarakterisztika vizsgálata során általában a 3.1.a) ábrán látható kísérleti elrendezésben dolgozunk. Elsőként kimérjük a mérőberendezés zajparamétereit, melyek segítségével később korrigálhatjuk a mért adatsorokat. A zérus feszültség mellett is fellépő háttér megmérését követően az áramkörbe csatoljuk és a környezetétől izoláljuk a memrisztív eszközt. Ezt G vezetőképességű állapotában preparáljuk, majd kicsi, általában $V_m \leq 200$ [mV] előfeszítés mellett f_s



3.1. ábra. Grafén-SiO_x-grafén rendszeren végzett zajmérés legfőbb összetevői és eredményei. a) A zajmérő kísérleti elrendezés sematikus rajza. b) ON állapotban preparált eszköz különböző mérőfeszültségeken mért áramjelének periodogramja (kék színskálájú görbék) illetve a mérés során fellépő háttérzaj (fekete görbe). c) OFF állapotban preparált eszköz különböző mérőfeszültségeken mért áramjelének periodogramja (piros színskálájú görbék) illetve a mérés során fellépő háttérzaj (fekete görbe). d) Relatív áramzaj az ellenállás (vezetőképesség) függvényében a SiO_x rendszerre. Az alábbiakban a memrisztív kapcsolás sematikus modellje látható.

mintavételezési frekvencián $I(t)$ áramjeleket rögzítünk.

Képezve az időtérbeli jel *periodogramját* (lásd a 3.2. alfejezet) vizsgálható a zaj frekven-

ciafüggése. Periodogramok változó V_m értékekre, a SiO_x eszköz ON (OFF) állapotára a 3.1.b) (3.1.c)) ábrán láthatóak. Megfigyelhető, hogy a zaj $1/f$ típusú frekvenciafüggést mutat, a spektrum pedig skálázódik a meghajtó feszültséggel.

A spektrumokból a frekvenciafüggésen túl a megfelelő frekvenciakomponensekre értelmezett ΔI áramfluktuációt is meghatározhatjuk. Ez természetesen, ahogy a spektrumok is, függeni fog a V_m mérőfeszültségtől. Ezért praktikus kiszámolni a jel

$$\langle I(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T I(t) dt$$

átlagát, és ezzel normálni az áramzajt. Amennyiben ugyanis a zajt valóban vezetőképesség-fluktuáció okozza a memrisztor lineáris gerjesztési tartományában, akkor egy mérőfeszültségtől független mennyiséget kapunk

$$\frac{\Delta I}{\langle I(t) \rangle} \propto V_m,$$

amit *relatív áramzaj*-nak nevezünk. A relatív áramzajt meghatározhatjuk egy adott memrisztív rendszer elérhető vezetőképesség-állapotaira; az összesített eredményeket SiO_x -ra a 3.1.d) ábrán tekinthetjük meg.

Egyértelműen látható, hogy az ON állapotban a relatív áramzaj hatványfüggény szerinti összefüggést mutat az eszköz vezetőképességével, ezzel szemben az OFF állapotban a függés megszűnik. Ezek alapján tehát SiO_x -alapú fizikai mátrix tervezésekor a G_1 alacsony vezetőképességű állapotát választhatjuk az OFF-állapoti tartományba, ami egységnyi gerjesztő feszültség esetén $I = G_1 \cdot U \approx 10^{-9} [A]$ járulékot ad, így hatása elhanyagolható. Ezek alapján a bináris mátrix reprezentálása során erre a rendszerre a

$$g(w_{ij}) = \begin{cases} G_h & w_{ij} = 1 \\ 0 & w_{ij} = 0 \end{cases} \quad G_h \in [10^{-6}, 10^{-4}]$$

idealizált hozzárendelési szabályt alkalmaztam a szimulációk során. Egyértelműen látszik, hogy a magas vezetőképességet (a +1 állapot fizikai képét) az elérhető két nagyságrenden belül hangolva az eszközzaj skálázódni fog. Továbbá szintén nagyon fontos, hogy az ON állapot tartományában a relatív áramzaj jó közelítéssel megegyezik a *relatív vezetőképesség fluktuációval*

$$\frac{\Delta G_h}{G_h} \approx \frac{\Delta I}{I},$$

ezáltal lehetőségünk nyílik a hálózati zajok közvetlen modellezésére is.

3.2. Spektrális teljesítménysűrűség

Legyen $x(t)$ egy időtérben, a $[0, T]$ intervallumon rögzített jel és $\tilde{x}(T, f)$ ennek a Fourier transzformáltja. A jel *teljesítménye* ekkor

$$\bar{p}_x(T) = \frac{1}{T} \int_0^T |x(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{+\infty} P(T, f) df,$$

ahol

$$P(T, f) = \frac{|\tilde{x}(T, f)|^2}{T}$$

az ún. *spektrális teljesítménysűrűség*⁸. Azontúl, hogy ezen spektrum analíziséval vizsgálható a frekvenciafüggés, az $x(t)$ jel

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt$$

átlagértéke körüli

$$\Delta^2 x(t) = (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2$$

szórásának átlagát például

$$\Delta^2 x \equiv \langle \Delta^2 x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P(T, f) df$$

összefüggés szerint meghatározhatjuk. A továbbiakban minden adatsorra feltüntettem a T paraméter értékét és a T szimbólumot elhagyom a $P(T, f)$ jelölésből.

Matematikailag precízen tehát a 3.1.d) ábra egy pontját úgy kaphatjuk meg, hogy megfelelő V_m gerjesztő feszültségen, T hosszú $I(t)$ áramjeleket rögzítünk. Ekkor az eszköz $\Delta I / \langle I \rangle$ relatív áramfluktuációját az adott G vezetőképességű állapotra a

$$\frac{\Delta I}{\langle I \rangle} = \frac{\sqrt{\int_{f_A}^{f_B} P(f) df}}{\int_0^T I(t) dt}$$

összefüggés adja meg. Erre az adatsorra $f_A = 100$ [Hz] és $f_B = 50$ [kHz], amit instrumentációs limitációk diktálnak.

3.3. Szimulációs módszer

Ahhoz, hogy egy eszköz fizikai mátrixelemként való működését modellezzük, időjelekre van szükségünk, így vizsgálható, hogy a

$$G_h \rightarrow G_h + \Delta G_h(t)$$

⁸PSD, periodogram

nemidealitás milyen hatással van a műveletvégzésre. Egy standard tesztprobléma 60×60 méretű bináris mátrixot tartalmaz $2 - 3000$ egyes értékkel, tehát egyetlen hálózati szimulációhoz ennyi időjelre van szükség. Gyorsan látszik, hogy az egy eszközön való ismételt mérés nem kínál fenntartható alternatívát. Ahogy azonban láttuk, az $I(t)$ jelek esszenciája zaj szempontjából belesűríthető spektrális teljesítménysűrűségükbe. Célszerű tehát szimulálni az időjeleket a megfelelő PSD-hez egy véletlen faktort tartalmazó módszerrel. Így tetszőleges számban tudunk átlagosan a kísérletinek megfelelő időjeleket generálni, elkerülve, hogy ugyanaz a numerikus szekvencia többször is ismétlődjön.

Az időtérbeli memrisztorzajok generálásához a Carrettoni és Cremonesi [1] által publikált módszert implementáltam. Az alapvetése az, hogy az $f(t)$ azonos alakú időjelek véletlen egymásutánjából képezett súlyozott jel

$$n(t) = \sum_i a_i f(t - t_i)$$

spektrális teljesítménysűrűsége az a_i súlytényezők eloszlásától függetlenül kifejezhető egyetlen időjel spektrális teljesítménysűrűségének segítségével

$$P_{n(t)}(f) = A \cdot P_{f(t)}(f),$$

amennyiben az időjelek átlaga nulla, a t_i eltolások Poisson-eloszlást követnek és az A normálási tényezőt megfelelően választjuk. Ekkor, ha van egy $P_{n(t)}(t)$ spektrum, amihez keressük a generáló időjelet, megfordíthatjuk a tételt: a spektrum alapján konstruálunk egy $f(t)$ függvényt és ennek eltolásával és súlyozásával iteratív módon építhetünk fel egy időjelet, ami a kezdeti feltételeinket kielégíti. Az algoritmus lépésenkénti kifejtése az A. függelékben olvasható, itt annyit jegyeznék meg, hogy a szimulációnak egyetlen szabadsági foka van, egy λ paraméter, ami a t_i értékek eloszlásában szerepel. Ez tehát az összetevő $f(t - t_i)$ függvények számát hangolja és precíz beállítása segíthet a spektrumok pontos illesztésében.

Elkészítve a Python nyelvű megvalósítást, az utolsó lépés a kísérleti spektrumok betáplálása volt. Ahelyett azonban, hogy minden G értékhez rögzített relatív vezetőképességzaj esetére visszafejtettem volna a PSD-eket, a kísérleti tapasztalatot kihasználva numerikusan számoltam ki a betáplált spektrumokat az ON állapot zajmodellje szerint. Megfigyelhetjük ugyanis, hogy a SiO_x eszközök időjeleinek spektrogramja $1/f$ függvénnyel jól közelíthető, továbbá (lásd a 3.1.b) ábra) a relatív vezetőképességzaj adott G esetén rögzített, tehát a

$$P(f, G) \rightarrow \Delta^2 G(G) \cdot \frac{P_0}{f}$$

helyettesítés esszenciális információvesztés nélkül elvégezhető. A P_0 normafaktor szerepe, hogy a generált jel szórását a PSD integrálján keresztül illessze. A feltételből, mely szerint

$$\int_{f_A}^{f_B} P(f, G) = \Delta^2 G(G) \quad f_A = 100 \text{ [Hz]}, f_B = 50 \text{ [kHz]}$$

egyértelműen látszik, hogy

$$P_0 = \left(\int_{f_A}^{f_B} \frac{1}{f} df \right)^{-1}.$$

Összefoglalva tehát egy 60×60 méretű $T = 1$ [s] ideig $f_s = 500$ [kHz] frekvencián mintavételezett kísérleti hálózat szimulációjához:

- Numerikusan kiértékeltem az $1/f$ spektrumot

$$N = \frac{1}{2} f_s \cdot T = 2.5 \cdot 10^5$$

pontban.

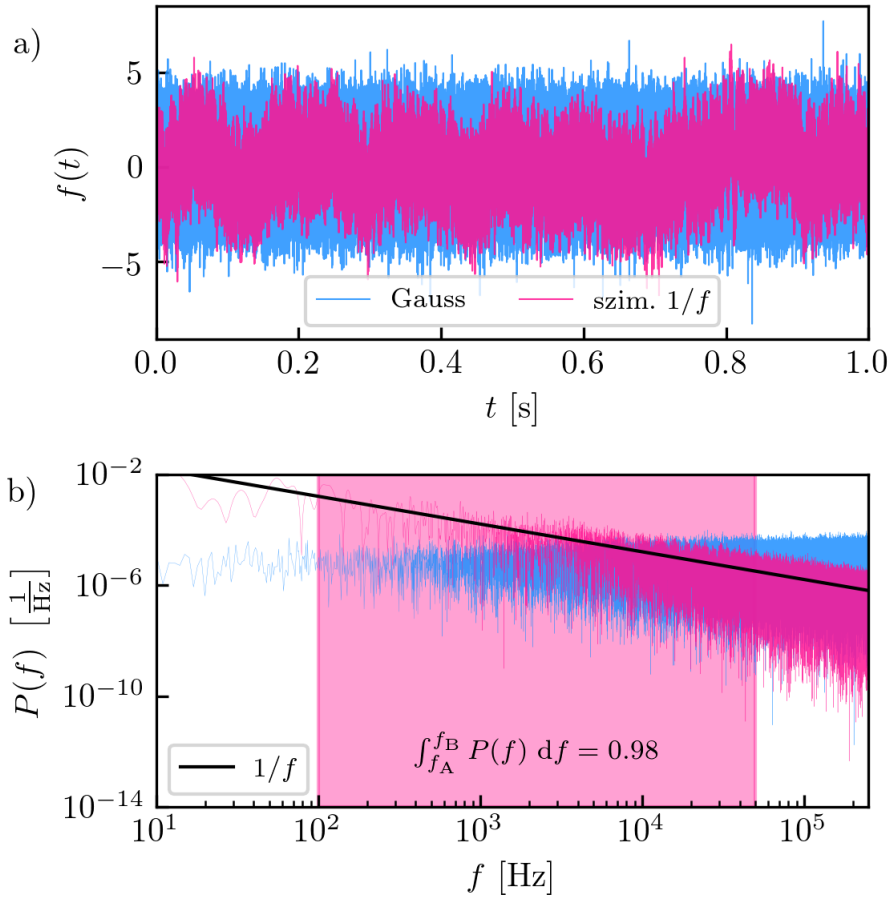
- A szórás illesztéséhez kiszámoltam a P_0 faktort numerikus integrálással

$$P_0 = \frac{1}{\sum_k \frac{P(f_{k-1}) + P(f_k)}{2} \Delta f_k}$$

trapéz módszer szerint az $[f_A, f_B]$ frekvenciatartományban.

- A kísérleti hálózat minden mátrixelemének generáltam egy szimulált jelet $\lambda = 100$ paraméter mellett.

A 3.2.a) ábrán látható egy példa szimulált jelalakra. Ezt a *pink zaj*nak is nevezett szekvenciát a kiértékelte $1/f$ spektrum alapján generáltam. A 3.2.b) ábrán megfigyelhető, hogy a generált jelalak spektruma jól követi a tendenciát, de természetesen zajjal terhelt. Összehasonlításképp mellé helyeztem egy számítógépesen generált Gauss-féle normális eloszlással sorsolt *fehér zaj* szekvenciát, melynek szórása megegyezik az előbbi jel szórásával. Amint az a spektrumban jól látszik, a Gauss-féle fehérzaj nem mutat frekvenciafüggést, eloszlása egyenletes a spektrumban. Az időjelekben pedig egyenesen szembetűnő a különbség: a pink zajra a korreláció jelenléte az egyes adatpontok között jellegzetes és erős tulajdonsága a kísérleti ihletésű görbének. Bár a két jel várható értéke és szórása egyezik, az erős korreláció miatt a pink zaj hosszabb időtartamokra is eltávolodhat várható értékétől, míg ugyanez a fehérzajra nem jellemző. Mivel a Hopfield-hálózat működésének esszenciális lépése egy küszöbértékhez való hasonlítás, érdekes eredménnyel kecsegtet a korrelált és nem-korrelált zajprofilok vizsgálata.



3.2. ábra. Gauss-féle normál eloszlású (kék görbe) és szimulált $1/f$ spektrumú (rózsaszín görbe) zaj összehasonlítása idő- és frekvenciaterben. a) Egy másodperc hosszúságú véletlen időjelek. Fontos különbség, hogy az $1/f$ spektrumú jel pontjai korreláltak egymással, itt tehát előfordulhat tartós növekedés vagy csökkenés a jel átlagértékében. b) A két jel spektrális teljesítménysűrűsége, illetve az $1/f$ spektrumú zaj integrálja a $100 \text{ [Hz]}-50 \text{ [kHz]}$ tartományon (rózsaszín téglalap).

Ezzel tetszőleges 60×60 méretű probléma esetén lehetővé vált a vezetőképessézzajjal terhelt memrisztorhálózat szimulációja, hiszen rendelkezésre áll a $\{f_i\}_{i=1}^{3600}$ görbe, melyek szórása a megfelelő frekvenciatartományon egységnyi. Amint az egyes biteket reprezentáló G_h rögzítésre kerül, a kísérleti adatsor alapján $\Delta G_h \equiv \Delta G(G_h)$ számolható, az i . zajjal terhelt időbeli vezetőképesség pedig

$$G_{h,i} = G_h + \Delta G_h \cdot f_i(t)$$

alakban áll elő, ahol a relatív vezetőképességet leíró függvénnyel való skálázás illeszti a kívánt szórást.

Egyetlen utolsó lépés van még hátra: amennyiben kísérleti hálózatot üzemeltetnénk, akkor a mátrix-vektor szorzás eredményét nem egyetlen időpillanatban mérnénk, hanem egy időablakra átlagolnánk. Ezután következne egy üres időtartam, amíg a hálózaton kívüli számítások zajlanak, de persze a korrelált vezetőképesség-fluktuációk ekkor is jelen vannak a rendszerben, annak ellenére, hogy mérés nem történik. A kísérleti jelek paraméterei alapján láttuk, hogy az időtérben $5 \cdot 10^5$ pontot rögzítünk $dt = 2 [\mu s]$ időfelbontás mellett. Ahhoz, hogy a tesztproblémát megoldhassa, a hálózatnak legalább 10^4 lépést érdemes végeznie, így visszafelé gondolkozva egyetlen hálózati működés plusz végeredmény átlagolásra 50 adatpont jut, amit 4 : 1 arányban osztottam el a periférikus elektronika működése és az átlagolás között. Így tehát a szimulált hálózat egyetlen másodperc alatt 10^4 -szer végez kétütemű működést, melyben $80 [\mu s]$ -ra becsültem a hálózaton kívüli, $20 [\mu s]$ -ra pedig az annak mérésével eltöltött periódus hosszát. Ennek megfelelő arányban szelektáltam az $f_i(t)$ időjelek adatpontjainak mindegyikét, tízes csoportokban átlagolva a maradék pontokat. Továbbá elvégeztem a mátrix sémába való rendezést, így az adatsor dimenziói összességében a

$$3600 \times 5 \cdot 10^5 \rightarrow 60 \times 60 \times 10^4$$

átalakuláson mentek végbe. A továbbiakban a szelektált és átlagolt jelben időfüggés helyett diszkrét időlépéstől való függést feltételezek, ennek megfelelően változik tehát a jelölés is

$$f_i(t) \rightarrow f_{ij}^{(t)}.$$

4. Memrisztoralapú Hopfield-hálózat szimulációja

A hálózati szimuláció célja annak a vizsgálata volt, hogy a kereszt-huzalozású memrisztormátrixban fellépő zajok milyen hatással vannak az optimalizációs feladatok megoldásának a képességére. Először bemutatom a példa könyvtárat, melyet a teszteléshez használok, majd ismertetem a megoldások kvantitatív értékeléséhez szükséges mutatókat. Végül ismertetem a fő hálózati zajkomponensek szimulációs módszereit és ezek meghatározott jellemzőit.

4.1. Optimalizációs feladat

Az eljárások vizsgálatához Cai et. al. [4] mintájára standard tesztkönyvtárat használtam, ami BiqMac Library néven érhető el⁹. Itt $n \in \{60, 80, 100\}$ méretű mátrixokat találunk, melynek maximális vágásaira egzakt megoldási energia van feltüntetve. Ez a korábban bevezetett Hopfield-energiával azonban nem egyezik meg, bár a kettő között egyértelmű megfeleltetés van. A könyvtár által az

$$E(\underline{x}^{(t)}) = (\underline{x}^{(t)})^T \underline{L} \underline{x}^{(t)} \quad \underline{L} = \underline{D} - \underline{A}$$

képlet használatos, ahol a $\underline{L}$ kiindulási gráf ún. Laplace-mátrixa, amit a foksám és a szomszédsági mátrix különbségeként képezhetünk. A következőkben a visszaellenőrizhetőség céljából ezen mennyiséggel dolgozom tovább. A bemutatott számolásokhoz a `g05_60.3` elemet használtam a könyvtárból, lásd a 4.1. ábrán.

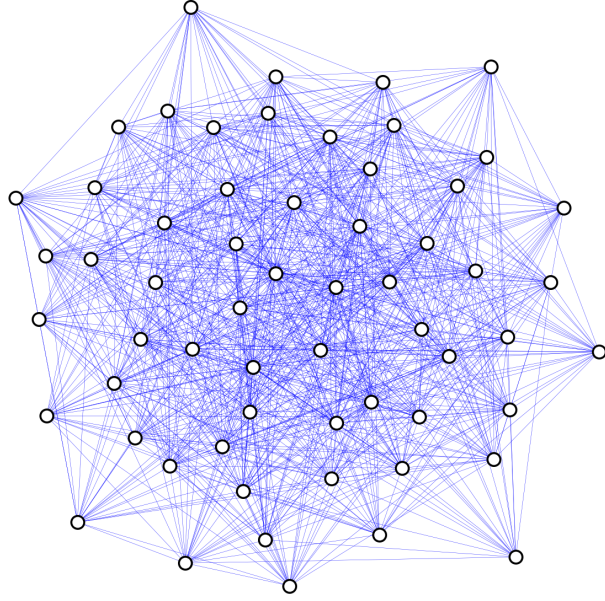
4.2. Hálózati szimuláció

Röviden összegezve az eddigieket azt mondhatjuk tehát, hogy a szimuláció tárgya egy SiO_x memrisztorok alapján elképzelt ideális hálózat. A bináris mátrixok kódolását a

$$g(w_{ij}, \alpha) = \begin{cases} G_h & w_{ij} = 1 \\ 0 & w_{ij} = 0 \end{cases}$$

összefüggés szerint végeztem. A G_1 értéket nullának választottam a szimulációban, mivel a SiO_x esetén $\frac{G_l}{G_h} = 10^{-5}$ vezetőképesség-arány is elérhető. A dinamikus, időbeli zajt egy α paraméterrel súlyoztam és megengedtem, hogy α kívül essen a kísérletileg releváns $10^{-4} - 10^{-1}$ tartományon, így absztrahálva a rendszert és lehetővé téve nem kísérleti értelmű optimális zaj-

⁹<https://biqmac.aau.at/biqmaclib.html>, hozzáférve: 2022.11.03.



4.1. ábra. A *g05_60.3* jelű testprobléma gráfrepresentációja.

szintek megkeresését is. A vizsgálat-specifikus módosításokat ezekben az alapösszefüggésekben és relatív vezetőképesség fluktuációk visszaszámítását a megfelelő pontokban részletezem.

Minden szimulációs beállítás mellett a feltüntetett α illetve $\frac{\Delta G}{G}$ értékek mellett $K = 500$ előre (eredetileg véletlenszerűen) generált $\{x_i^{(0)}\}_{i=1}^K$ vektorból indítottam el a hálózatot és $N = 10^4$ lépésen keresztül futtattam. A neuronok véletlen sorrendjét szintén előre legeneráltam mind az $N \cdot K$ lépésre, hogy a sztochasztikus hálózati futások véges számú szimuláció mellett is összehasonlíthatóak legyenek.

A futásokat két mérőszám szerint értékeltem: egyrészt kiszámítottam a K próbálkozás esetén az N . lépésre elért *végző energiák átlagát*

$$\overline{E}^{(N)} \equiv \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K E(x_i^{(N)}),$$

ami megmutatja, hogy mennyire képes a hálózat adott körülmények között *jó* megoldásokat találni. Bizonyos problémáknál, mint például az integrált áramkörök optimális huzalozásának megkeresésekor nem feltétlenül szükséges ugyanis az egzakt megoldás megtalálása. Minden ahhoz közeli energiájú megoldás is technológiailag jó választásnak számít. Léteznek azonban olyan optimalizációs feladatok is, ilyen a prímfelbontás kettes számrendszerben, melyekre kizárólag egyetlen, helyes megoldásnak van gyakorlati haszna. Így tehát az utolsó lépés átlagos energiája mellett legalább ennyire fontos mutató, hogy a rendszer hányszor éri el és tartja meg

a tényleges $\underline{x}_b$ megoldást. Ezt írja le a *konvergencia-valószínűség*, amit a

$$\mathbb{P}_{\text{konvergencia}} \equiv \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \delta_{E(\underline{x}_i^{(N)}), E(\underline{x}_b)}$$

összefüggés definiál.

Ahhoz, hogy az eltérő típusú zajok hatását összehasonlíthassam, ki kellett számolnom egy közös skálát. Ezért $\alpha = 0.1$ választás mellett kiszámoltam a vezetőképesség μ_{ij} időbeli átlagát és σ_{ij} szórását minden mátrixelemre. A teljes mátrixra elvégezve ezek átlagolását

$$\bar{\mu} = \frac{1}{3600} \sum_i \sum_j \mu_{ij} \quad \bar{\sigma} = \frac{1}{3600} \sum_i \sum_j \sigma_{ij}$$

határozhatjuk meg az

$$\frac{\bar{\sigma}}{\bar{\mu}} = \begin{cases} 0.058 & \text{Gauss} \\ 0.132 & 1/f \end{cases}$$

értékeket, ami az adott α mellett kapott átlagos relatív vezetőképesség-szórás. Mivel $\bar{\sigma}$ α -ban lineáris, az átlag pedig tőle független, könnyen látszik, hogy tetszőleges α esetén

$$\frac{\Delta G}{G} = \alpha \frac{\bar{\sigma}}{\bar{\mu}}.$$

A dinamikus zajok esetén eszerint végeztem az átskálázást.

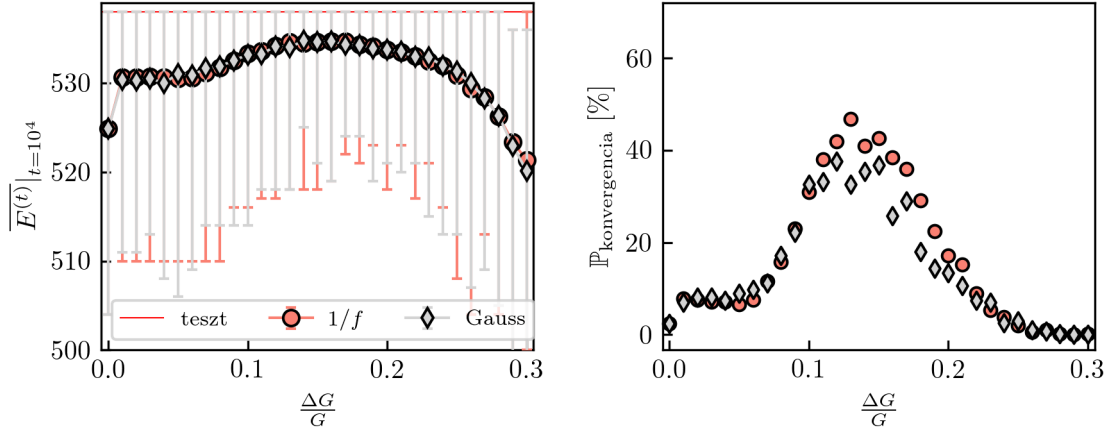
4.2.1. Dinamikus zaj

Ahogy azt a 3.3. alfejezetben levezettem, a magas vezetőképességű mátrixelemekre az időbeli zaj általánosan

$$G_{ij} = G_h(1 + \alpha \cdot f_{ij}^{(t)})$$

alakba írható. Elsőként az α -val skálázott kísérleti $1/f$ zajokra és nulla várható értékű, $\frac{\alpha}{\sqrt{3}}$ szórású normális eloszlású változókból generált $f_{ij}^{(t)}$ függvényekre néztem meg a hálózati viselkedést. Az eltérő zajprofilokra kapott eredmények összehasonlítása a 4.2. ábrán látható.

Látható, hogy az eredmények precízen egymásra skálázódtak. Tehát sem az energia várható értékében, sem pedig a konvergencia-valószínűségben nem tapasztalható jelentős eltérés a Gauss és az $1/f$ típusú zajok hatása között. Ez azt jelenti, hogy a hosszútávú korrelációk nem rontják el a rendszer működését. A legjelentősebb javulás $\frac{\Delta G}{G} = 0.1 - 0.2$ értékek közötti relatív vezetőképesség-fluktuációk esetén volt elérhető a sima Hopfield-hálózathoz képest, az optimális működés pedig $\frac{\Delta G}{G} = 0.13$ értéknél mutatkozott.



4.2. ábra. Memrisztoralapú Hopfield-hálózat szimulált viselkedése $1/f$ spektrumú (narancs kör) illetve Gauss-eloszlású (szürke rombusz) eszközzajra. Viszonyításképp a bal panelen piros vonal jelöli a tesztprobléma ismert megoldását. Az alsó hibaszáv minden esetben az elért legalacsonyabb, míg a felső az elért legmagasabb energiát jelöli.

A következő lépés a szimulált hűtési elvű megoldási stratégia mélyebb megértése céljából a mátrixelemek mesterséges lehűtése volt

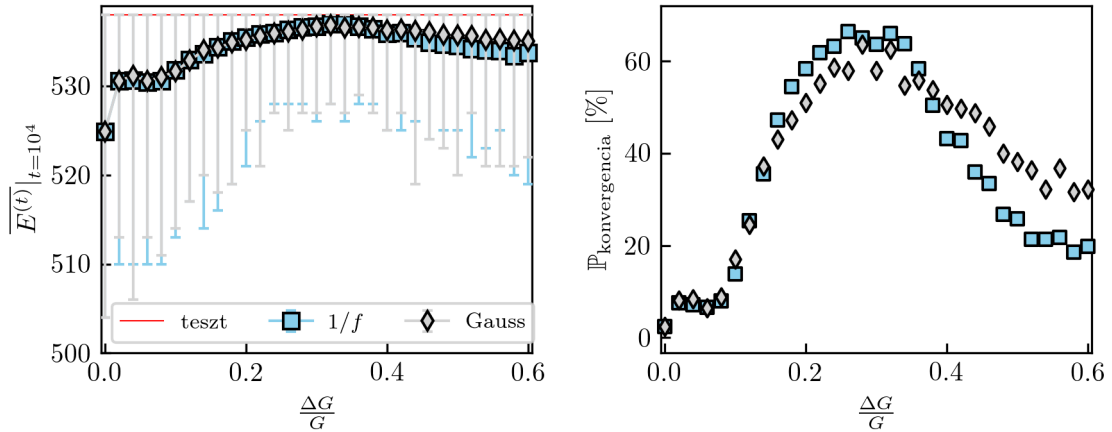
$$\alpha^{(t)} = \log \left(10 - \frac{9 \cdot t}{N} \right)$$

összefüggés szerint. A függvényalak választás mögött kettős motiváció áll: egyrészt szuperlineáris karakterisztikára optimálisak a konvergencia feltételei [4, 9], másrészt szerettem volna csökkenteni az optimalizálandó paraméterterek számát. Ezzel a választással $\alpha^{(0)} = 1$, $\alpha^{(N)} = 0$ és elkerülhető például egy exponenciális függvény τ paraméterére való további optimalizálás. Az így kapott eredmények a 4.3. ábrán láthatóak; a feltüntetett $\frac{\Delta G}{G}$ értékeket a kezdeti $\alpha^{(0)}$ mellett határoztam meg.

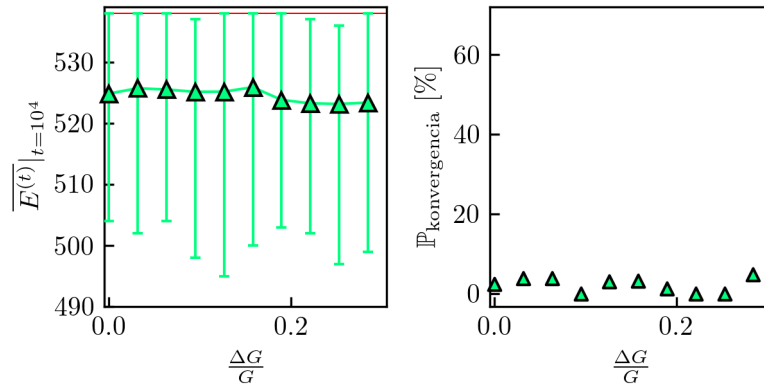
Ismét nem tapasztalható érdemi különbség a Gauss- és $1/f$ típusú zajok hatása között. Javulás mutatkozik azonban a nem-relaxált esethez képest, ami magasabb átlagos energiában és konvergencia-valószínűség mintegy 20%-os növekedésében nyilvánul meg.

4.2.2. Statikus zaj

A programozásból fakadó térbeli hatások vizsgálatához minden α értékre egyetlen $\underline{G}$ -mátrixot definiáltam, melynek magas értékű elemeit G_h várható értékű, $\sigma = \alpha$ szórású normális eloszlásból mintavételeztem. A szórásnak itt természetes felső határt szabott a korábban látott 30%-os



4.3. ábra. Memrisztoralapú Hopfield-hálózat szimulált viselkedése mesterségesen relaxált $1/f$ spektrumú (kék négyzet) illetve Gauss-eloszlású (szürke rombusz) eszközzajra. Viszonyításképp a bal panelen piros vonal jelöli a tesztprobléma ismert megoldását. Az alsó hibasáv minden esetben az elért legalacsonyabb, míg a felső az elért legmagasabb energiát jelöli.



4.4. ábra. Memrisztoralapú Hopfield-hálózat szimulált viselkedése kizárólag statikus zajok figyelembevételével. Viszonyításképp a bal panelen piros vonal jelöli a tesztprobléma ismert megoldását. Az alsó hibasáv minden esetben az elért legalacsonyabb, míg a felső az elért legmagasabb energiát jelöli.

relatív vezetőképesség érték, hiszen ehhez közeledve a hardveres számábrázolás már a reprezentált matematikai feladatot is átkódolja. A statikus zaj hatása a 4.4. ábrán tekinthető meg.

Fontos megjegyezni, hogy ebben az esetben várakozásaim szerint a bemeneti vektorokban az iterálás hatására megjelenő előjelváltozások a mátrixelemek időbeli fluktuációja nélkül is effektív áramfluktuációt okoznak a kimeneten, ennek megfelelően egy effektív időbeli zaj megjelenését vártam a rendszerben. A szimulációk alapján viszont az látszik, hogy a statikus zaj

nem okoz érdemi javulást vagy romlást az ideálisan programozott zajmentes hálózathoz képest.

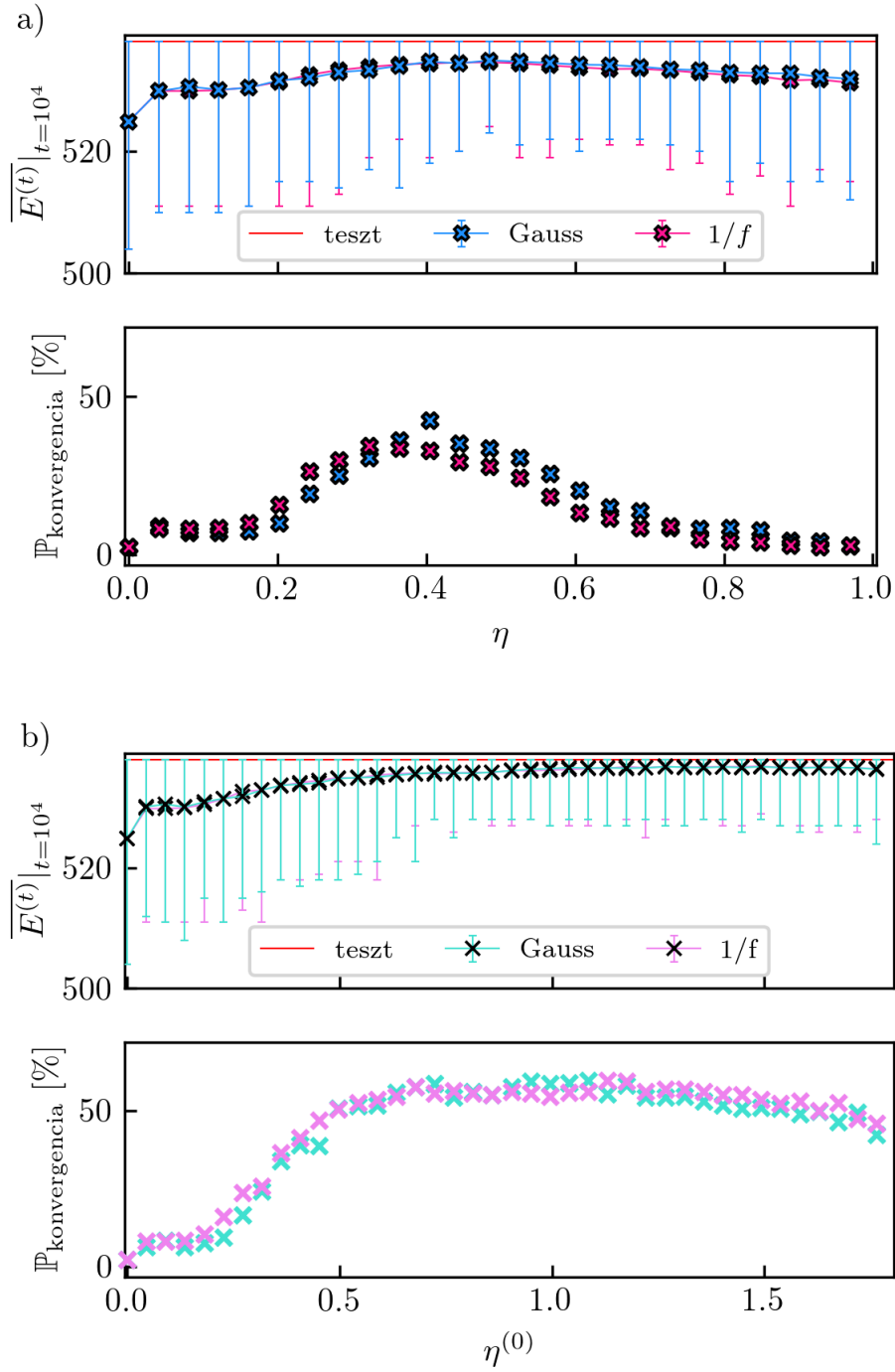
4.2.3. Komparálási zaj

Az utolsó szimulációban a mátrixból elimináltam minden zajt, vagyis a magas értékű bitekre $G_{ij} \equiv G_h$, viszont a komparálási folyamatban használtam a $\eta^{(t)}$ paramétert, megvalósítva a

$$\left[\underline{G} \underline{V}^{(t)} \right]_i \leq \eta^{(t)}$$

sztochasztikus perturbációt a súlyfrissítési szabályban. Mind pink és fehérzajra, mind pedig sima és relaxált esetekre is lefuttattam a kódot. A kapott eredmények a 4.5. ábrán láthatóak.

Ismét megfigyelhetőek voltak a korábbi tapasztalatok: a Gauss és $1/f$ típusú jelekkel elért eredmények érdemben nem különböznek egymástól. Relaxáció nélkül, viszont megfelelően választott amplitúdójú zajjal is érdemi javulást lehet elérni a zajmentes hálózathoz képest. A relaxációval pedig ismét további hatékonyságnövelés érhető el.



4.5. ábra. Komparátorba csatolt zaj hatása az ideális Hopfield-hálózatban. a) Eredmények mesterséges hűtés nélkül Gauss-féle normális eloszlásból mintavételezett (kék kereszt) és $1/f$ spektrumú jel esetén (rózsaszín kereszt). b) Eredmények mesterséges hűtés mellett Gauss-féle normális eloszlásból mintavételezett (zöld kereszt) és $1/f$ spektrumú jel esetén (rózsaszín kereszt). Viszonyításképp mindkét ábra felső panelén piros vonal jelöli a tesztprobléma ismert megoldását. Az alsó hibasáv minden esetben az elért legalacsonyabb, míg a felső az elért legmagasabb energiát jelöli.

4.3. Diszkusszió

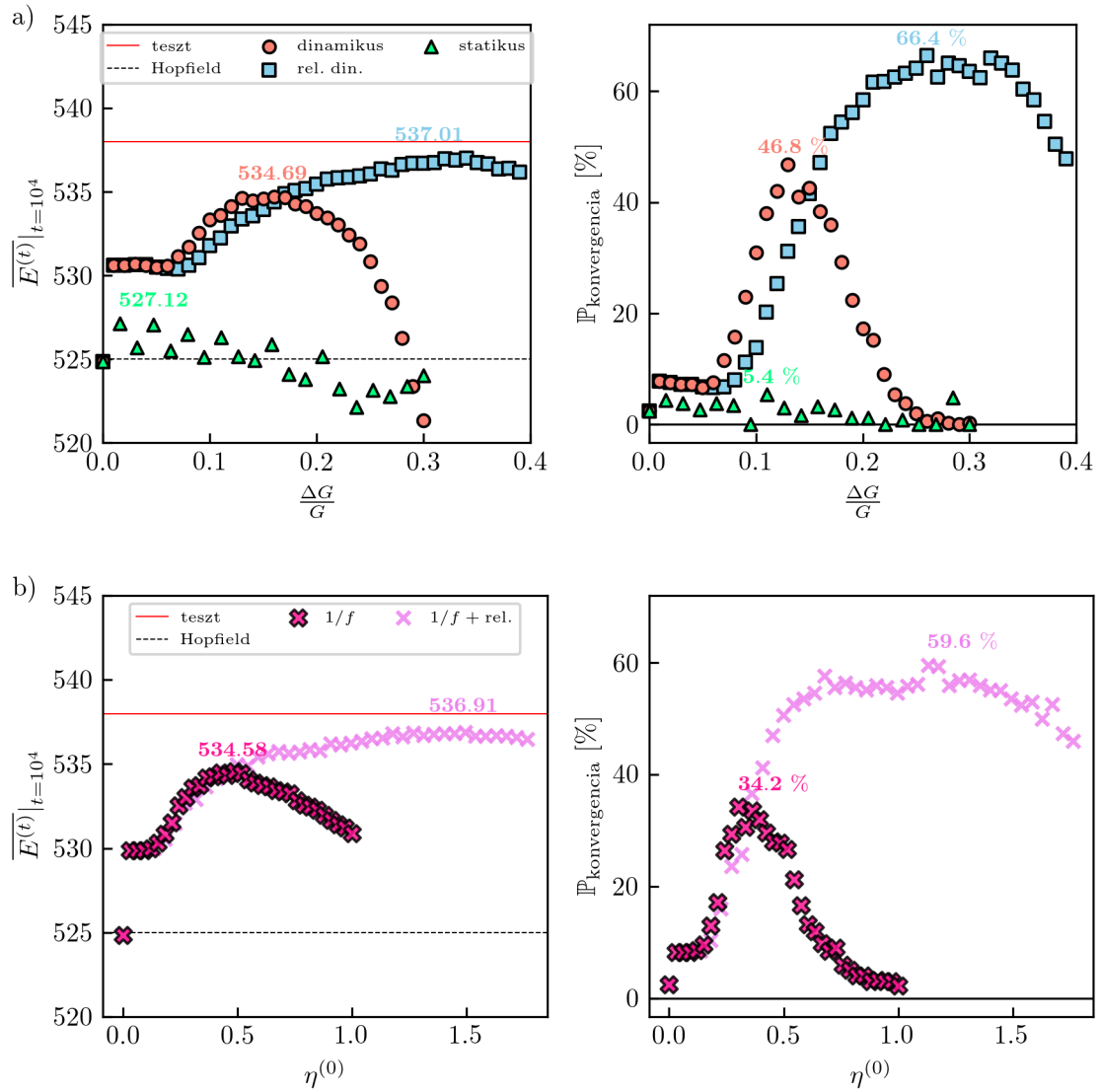
Az egyes szimulációkból származó adatsorokból a 4.6 összefoglaló ábrát készítettem. A komponensek hatásának jobb összehasonlíthatósága kedvéért minden esetben csak az $1/f$ típusú zajjal kapott eredmények szerepelnek, hiszen ezek minden esetben a Gauss-os időjellel egyező eredményre vezettek. A jobb átláthatóság kedvéért pedig az egyes paraméterértékekre csak az energia várható értékét ábrázoltam, az adatsorok terjedelmét nem. Viszont minden esetben feltüntettem a hangolható paraméter ($\Delta G/G, \eta^{(t)}$) változtatásával elért maximális várható energiát és maximális konvergencia-valószínűséget is.

A zaj és programozási hibáktól mentes Hopfield-hálózat várható értékben 2.4%-ra közelíti meg az egzakt energiát és a konvergencia-valószínűsége is csak 2.4%.

A programozási hiba (akár 30%-os szórást is elérve) érdemben nem változtat ezen. Az optimálisan megválasztott dinamikus mátrixzaj esetén viszont az egzakt energia 0.62%-ra, relaxált zaj esetén pedig 0.18%-ra közelíthető meg. A konvergencia-valószínűség az előbbi esetben 46.8%-ra, az utóbbi esetben pedig 66.4%-ra nő.

Összehasonlítva a mátrix dinamikus zaját a komparátor zajával azt látjuk, hogy az utóbbi egy kicsit rosszabbul teljesít mind a konstans, mind a relaxált esetben. Ugyanakkor a mátrix zaját nehéz beállítani az optimális értékre, és még nehezebb az összes mátrixelem vezetőképességét - és ezzel együtt a zaját - relaxálni, ráadásul további vizsgálatot igényel, hogy a statikus és dinamikus zaj együttese jelenlétével mennyivel romlik a teljesítmény.

Mindezeket figyelembe véve az tűnik az optimális választásnak, ha a memrisztormátrix zaját minél inkább elnyomjuk és a komparálásnál - akár egyetlen hangolható zajforrásként használható memrisztor segítségével - keverünk időben relaxált zajt a rendszerhez.

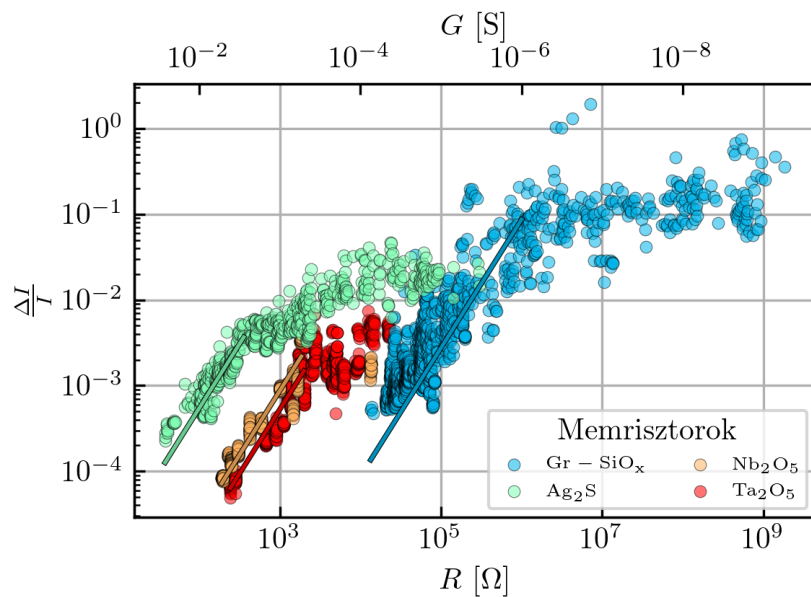


4.6. ábra. Összefoglaló ábra a hálózati szimuláció legfontosabb tapasztalatai alapján. a) A mátrix $1/f$ típusú dinamikus zaját kihasználó eredmények dinamikus (narancs kör), statikus (zöld háromszög) és relaxált dinamikus (kék négyzet) esetén. A determinisztikus Hopfield megoldó eredményét fekete szaggatott vonal, a tesztprobléma megoldását piros vonal jelöli. b) Komparálás során becsatolt $1/f$ típusú zaj mellett kapott eredmények nem-relaxált (vastag kereszt) és relaxált esetre (vékony kereszt). A determinisztikus Hopfield megoldó eredményét fekete szaggatott vonal, a tesztprobléma megoldását piros vonal jelöli.

5. Összefoglalás és kitekintés

TDK munkámban a modern számítógépes architektúrák alkalmazásának egy válfajával, a neurális hálózatok kísérleti megvalósítását célzó kereszt-huzalozású memrisztorhálózatokkal foglalkoztam. Ezek tulajdonképpen fizikai mátrixsémába rendezett hangolható ellenállások, melyek segítségével a műveletigényes mátrix-vektor szorzás hardveresen felgyorsítható.

Egy 2020-as [4] munka alapján tanulmányoztam a memrisztor crossbar hálózatok fő zajjelenségeit és Python nyelven szimulációs kódot fejlesztettem, ami képes ilyen hardveren futó Hopfield-típusú hálózatok emulálására. Ahhoz, hogy a hálózati viselkedés limitált számban rendelkezésre álló kísérleti adat mellett is tetszőleges számú és idejű futtatást lehetővé tegyen, implementáltam egy időjel generálásra alkalmas módszert [1]. Ennek segítségével tetszőleges numerikus spektrumból tudtam jeleket generálni, így elkészítettem egy egy másodpercig működött 60 × 60 méretű zajos SiO_x mátrix számítógépes modelljét. Izolálva a lehetséges zajkomponenseket mind a dinamikus kísérleti, mind pedig a statikus programozási fluktuációkat szimuláltam és vizsgáltam ezek viselkedését, kísérletileg nem elérhető körülmények között is. Szimulációim eredményei megmutatták, hogy a hálózat dinamikus zaja annak spektrális trendjétől függetlenül a legalkalmasabb a Hopfield-hálózat sztochasztikus gyorsítására. Ez az eredmény még a komparáláshoz csatolt fluktuációkkal szemben is érvényes marad, habár a spektrális tulajdonságoktól való függetlenség ez utóbbi körülmények között is fennállt.



5.1. ábra. Néhány memrisztív rendszer relatív áramzaj függése.

Bár a kombinatorikus optimalizáció tárgykörébe tartozó problémák bináris mátrixszal és bipoláris vektorokkal leírható részhalmazával foglalkoztam, a vizsgálatokból egyértelműen kiviláglik, hogy általános megoldási stratégiák kidolgozása nem magától értetődő feladat. Ha belegondolunk például, hogy súlyozott gráfra keressük a maximális vágás megoldását, akkor máris folytonos eszközhangelésben kell gondolkoznunk, ami újabb nemtriviális zajjelenségek megjelenését eredményezheti. Nem is beszélve a nembináris mátrixszal leírható problémák megoldására optimalizált súlyrelaxációs módszerről [14], ahol futás közben teljes újraprogramozás is előfordul.

A téma folytatásaként tervezem statikus és dinamikus zajok együttes hatásának vizsgálatát. Továbbá célom könnyen skálázható tesztproblémát generálni, amivel a hálózat méretei és zaj-tulajdonságai közötti összefüggést feltárhatom. Itt elengedhetetlen lesz további memrisztív rendszerek figyelembevétele. Az 5.1. ábrára tekintve rövid bepillantást nyerhetünk a kutatócsoportunk által aktívan vizsgált eszközök zajkarakterisztikájába [15, 16]. Rögtön szembetűnnek a különbségek a SiO_x rendszer és az ettől eltérő összetételű memrisztorok között: változik a G_h/G_l arány, a $\Delta G/G$ relatív vezetőképesség zaj vezetőképességtől való függése és az elérhető zajamplitúdók nagyságrendje is, amik mind-mind eltérő megközelítést tesznek lehetővé és talán illeszthetőek az adott probléma típusához. Felsejlik tehát a *noise engineering*, vagyis a problémához illesztett ideális zajkarakterisztikájú hálózat összeállításának lehetősége, melynek elméleti és kísérleti megalapozása is tartogat még újdonságokat.

6. Köszönetnyilvánítás

Zárásul pedig szeretném megköszönni Dr. Halbritter Andrásnak, hogy egyengeti a memrisztor-hálózatokhoz kapcsolódó kutatásomat, segít a szükséges mérések és szimulációk, tesztek megtervezésében és az eredmények értelmezésében, kutatási spektrumon való elhelyezésében.

Külön köszönet illeti Dr. Balogh Zoltánt, aki bevezetett a zajmérési eljárások alapjaiba, részletes átbeszélések útján segítette a szimulációs kódok helyes, precíz működését. Továbbá hálával tartozom a matematikai levezetések motiválásáért, alapos ellenőrzéséért és a hibák kijavításáért.

Végül pedig köszönöm Koltai Kristófnak és Dr. Török Jánosnak, hogy segédkeztek a szimulációs kód korai verziójának megszületésében és kérdéseikkel rávilágítottak az apró részletek fontosságára.

A. Algoritmus [1]

Tegyük fel, hogy $P_m(f)$ egy spektrális teljesítménysűrűség a frekvenciaterben és keressük azt a jelet, amelyhez ez a PSD tartozik. Ebben a módszerben L darab $f_i(t)$ diszkrét mintavételezett időtérbeli jelet fogunk generálni, melyekre

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left\langle \frac{|\mathcal{F}[f_i(t)]|^2}{T} \right\rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L \cdot T} \sum_i |\mathcal{F}[f_i]|^2 = P_m(f),$$

ahol $\mathcal{F}$ a Fourier transzformáció operátora. Térjünk át a spektrum és az időtérbeli jelek diszkrét alakjára, ekkor $f[t]$ a numerikusan kiértékelt időjel t . komponense. A diszkrét Fourier transzformáció operátorait ekkor

$$\mathcal{F}[f[t]] \equiv \sum_{t=0}^{N-1} e^{-2\pi i \cdot \frac{kt}{N}} f[t] = F[k] \quad \mathcal{F}^{-1}[F[k]] \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i \cdot \frac{kt}{N}} F[k] = f[t]$$

összefüggések definiálják [17].

A $P[k]$ numerikus spektrum, az eredeti időjel T hosszának és a szimuláció λ *átfedési paraméterének* rögzítésével a következő lépésekben generálhatunk a feltételeknek megfelelő időjelet:

1. Képezzük az $f[t]$ Fourier-transzformáltjának egy becslését az

$$F[k] = \sqrt{P[k]} \cdot e^{i\theta_k} \quad \theta[k] \sim \text{UNI}(0, 2\pi)$$

összefüggések szerint. Az amplitúdók ekkor a mért spektrumból származnak, a komplex fázis tagokat pedig a $[0, 2\pi)$ intervallumon egyenletes eloszlás szerint sorsolt értékekkel töltöttük fel.

2. L darab $F_i[k]$ frekvenciaterbeli jel generálást követően számoljuk ki ezek inverz Fourier transzformáltját

$$f_i[t] = \mathcal{F}^{-1}[F_i[k]]$$

meghatározva az α normálási tényezőt az

$$\alpha = \frac{\sum_k P[k]}{\sum_t |\mathcal{F}[f_i[t]]|^2}$$

összefüggés szerint.

3. Generáljunk L darab t_k λ -paraméterű, Poisson eloszlású valószínűségi változót

$$t_k = t_{k-1} - \frac{\ln(1-R)}{\lambda} \quad R \sim \text{UNI}(0,1),$$

összefüggések szerint. Ekkor látható, hogy ezek rendezett sorozatot alkotnak, vagyis $i < j \Rightarrow t_i \leq t_j$.

4. Toljuk el az $\{f_i[t]\}_{i=1}^L$ generált jeleket a $\{t_k\}_{k=1}^L$ értékekkel $f(t+T) = f(t)$ periodikus határfeltételt alkalmazva.

5. Generáljunk a_i normál eloszlású együtthatókat

$$\varphi(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{a^2}{2\sigma^2}},$$

állandó

$$\sigma^2 = \frac{\alpha}{\lambda \cdot T}$$

szórással.

6. Ekkor a végleges időtérbeli generált $f[t]$ jel a következő

$$f[t] = \sum_i a_i \cdot f_i[t] \quad \text{amíg} \quad \sum_{j \leq i} t_j \leq T$$

összegzés elvégzésével áll elő.

Hivatkozások

- [1] M. Carrettoni and O. Cremonesi. *Generation of noise time series with arbitrary power spectrum*. Computer Physics Communications, **181**, 1982 (2010).
- [2] D. Marković, A. Mizrahi, D. Querlioz, and J. Grollier. *Physics for neuromorphic computing*. Nature Reviews Physics, **2**, 499 (2020).
- [3] Y. Zhang, Z. Wang, J. Zhu, Y. Yang, M. Rao, W. Song, Y. Zhuo, X. Zhang, M. Cui, L. Shen, R. Huang, and J. Joshua Yang. *Brain-inspired computing with memristors: Challenges in devices, circuits, and systems*. Applied Physics Reviews, **7**, 011308 (2020).
- [4] F. Cai, S. Kumar, T. Van Vaerenbergh, X. Sheng, R. Liu, C. Li, Z. Liu, M. Foltin, S. Yu, Q. Xia, J. J. Yang, R. Beausoleil, W. D. Lu, and J. P. Strachan. *Power-efficient combinatorial optimization using intrinsic noise in memristor Hopfield neural networks*. Nature Electronics, **3**, 409 (2020).
- [5] J. J. Hopfield. *Neurons with graded response have collective computational properties like those of two-state neurons*. Proc Natl Acad Sci U S A, **81**, 3088 (1984).
- [6] J. J. Hopfield and D. W. Tank. *Computing with Neural Circuits: A Model*. Science, **233**, 625 (1986).
- [7] Z. J. Wu LY, Zhang XS. *Application of discrete Hopfield-type neural network for max-cut problem*. In ICONIP, 1439–44 (2001).
- [8] K. A. Smith. *Neural Networks for Combinatorial Optimization: A Review of More Than a Decade of Research*. INFORMS Journal on Computing, **11**, 15 (1999).
- [9] G. Fehérvári. *Sztokhasztikus jelenségek rezisztív kapcsoló memóriákban*. BSc thesis, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (2021).
- [10] L. Pósa. *Resistive switching in ultrasmall nanogap devices*. Ph.D. thesis, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (2019).
- [11] L. Posa, M. Abbassi, P. Makk, B. Santa, C. Nef, M. Csontos, M. Calame, and A. Halbritter. *Multiple physical timescales and dead time rule in few-nm sized graphene-SiO_x-graphene memristors*. Nano Letters, **17**, 6783 (2017).

- [12] D. Krisztián. *Zajmérés grafén-SiO_x rendszeren*. Master's thesis, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (2019).
- [13] P. Balázs. *SiO_x fázisváltó memóriák zajjelenségeinek és hőmérsékletfüggő transzportjelenségeinek vizsgálata*. MSc thesis, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (2021).
- [14] Z. Fahimi, M. R. Mahmoodi, H. Nili, V. Polishchuk, and D. B. Strukov. *Combinatorial optimization by weight annealing in memristive hopfield networks*. *Sci Rep*, **11**, 16383 (2021).
- [15] B. Sánta, Z. Balogh, L. Pósa, D. Krisztián, T. N. Török, D. Molnár, C. Sinkó, R. Hauert, M. Csontos, and A. Halbritter. *Noise Tailoring in Memristive Filaments*. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **13**, 7453 (2021). PMID: 33533590.
- [16] Z. Balogh, G. Mezei, L. Pósa, B. Sánta, A. Magyarkuti, and A. Halbritter. *1/f noise spectroscopy and noise tailoring of nanoelectronic devices*. *Nano Futures*, **5**, 042002 (2021).
- [17] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, Í. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors. *SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python*. *Nature Methods*, **17**, 261 (2020).