

# Una red neuronal binaria para la identificación de mecanismos isomorfos.

**G. Galán Marín, J. M. del Castillo Granados.**

Departamento de. Electrónica e Ingeniería Electromecánica. Área de Ingeniería Mecánica.  
Escuela de Ingenierías Industriales; Avda. de Elvas s/n; 06071 Badajoz. España.  
E-mail: [gloriagm@unex.es](mailto:gloriagm@unex.es).

(Recibido el 12 de Diciembre del 2001, aceptado el 15 de Febrero del 2002).

## Resumen.

Un problema de importancia primordial en el diseño mecánico es identificar los mecanismos isomorfos, puesto que los isomorfismos no detectados generan soluciones duplicadas y por tanto suponen un esfuerzo innecesario en el proceso de diseño. Desde 1960, una gran cantidad de métodos han sido propuestos para la detección de mecanismos isomorfos. Sin embargo, diversos trabajos han mostrado que aunque pueden existir algoritmos eficaces para casos particulares, en el caso general los métodos tradicionales para la detección de isomorfismos en cadenas cinemáticas no proporcionan usualmente soluciones eficientes para este problema, que ha sido clasificado como NP-duro. Un eficaz método alternativo para la resolución de problemas NP-duros ha surgido recientemente con las redes neuronales. En este trabajo proponemos un nuevo modelo de red neuronal binaria diseñado para la resolución del problema de detección de mecanismos isomorfos. El modelo propuesto se halla basado en unas dinámicas discretas que garantizan una rápida y correcta convergencia de la red hacia soluciones aceptables. Las simulaciones numéricas muestran en los mecanismos analizados que la red neuronal propuesta proporciona excelentes resultados, mostrándose además muy superior a la red de Hopfield continua tradicional en lo que respecta al tiempo de computación y en la facilidad de su implementación.

**Palabras claves:** Mecanismos isomorfos, síntesis de mecanismos, isomorfismo de grafos, red neuronal binaria, redes de Hopfield.

## 1. Introducción.

Un problema importante en síntesis de mecanismos es la detección de mecanismos isomorfos, en particular, para identificar todas las alternativas posibles de mecanismos que en principio podrían ser soluciones razonables a un problema de diseño mecánico. Desde 1960, una gran cantidad de métodos han sido propuestos para la detección de isomorfismos en grafos de mecanismos [1]. Métodos que podríamos clasificar como heurísticos y visuales han sido desarrollados por Crossley [2], Davies y Crossley [3] y Woo [4]. La dificultad principal de este tipo de técnicas estriba en que son difíciles de implementar computacionalmente, puesto que su desarrollo se basa fundamentalmente en la experiencia del diseñador.

Otros métodos basados en el polinomio característico de la matriz de adyacencia de la cadena cinemática del mecanismo también han sido propuestos [1,5,6]. Sin embargo, la ineficacia de este tipo de técnicas ha sido probada a través de varios contraejemplos [6]. Además de que el polinomio característico no identifica de forma única a una cadena cinemática, se muestra que estos métodos son computacionalmente muy costosos.

Asimismo han sido propuestas también aproximaciones basadas en el cálculo de un código canónico [7-9]. Aunque estos métodos han proporcionado ciertos éxitos computacionales, sin embargo no se consideran aún como la técnica definitiva en la identificación de mecanismos isomorfos, debido a que la implementación de los complicados algoritmos asociados a estas técnicas impide el tratamiento de cadenas cinemáticas de una cierta complejidad.

A través de su análisis, Tischler et al. [16] muestran que, aunque pueden existir algoritmos eficaces para casos particulares, en el caso general los métodos tradicionales para la detección de isomorfismos en cadenas cinemáticas no proporcionan generalmente soluciones de forma eficiente. Hay que notar que los métodos mencionados anteriormente pueden considerarse básicamente como algorítmicos y analíticos, y presentan por ello ciertas desventajas a la hora de enfrentarse a este problema que ha sido clasificado como NP-duro. Para este tipo de problemas, con la mayoría de los algoritmos propuestos el tiempo de computación crece exponencialmente con el tamaño del problema (convirtiéndose en absolutamente intratables a los problemas de gran tamaño), o bien se basan en la

relajación de algunas de las restricciones a satisfacer (permitiendo la resolución de sólo unos pocos casos particulares). Por ello un método alternativo para la resolución de problemas NP-duros ha surgido recientemente con las redes neuronales. Los sistemas de neuronas artificiales se encuentran entre la ingeniería y la inteligencia artificial, siendo una tecnología con un riguroso fundamento matemático.

Desde que en 1985 J. Hopfield presentó conjuntamente con D. Tank la primera red neuronal aplicada a la resolución de problemas NP-Complejos [10], el desarrollo de algoritmos neuronales para problemas de optimización combinatoria se ha convertido en un activo campo de investigación. Recientemente Kong, Li y Zhang [11] han presentado una nueva aproximación al problema de detección de mecanismos isomorfos basada en técnicas de redes neuronales artificiales. El modelo de red neuronal propuesto se basa en la red de Hopfield continua, que es uno de los más populares en optimización. Sin embargo, trabajos recientes han demostrado que este modelo, implementado en computación digital tal y como usualmente se utiliza, no garantiza el decrecimiento de la energía asociada al sistema y genera por tanto en ocasiones comportamientos erróneos.

Las primeras críticas hacia el modelo continuo de Hopfield comienzan en 1988 con los trabajos de Wilson y Pawley [12] que a través de simulaciones masivas demuestran la ineficacia del modelo para obtener soluciones aceptables en el problema del viajante. En 1991, Takefuji y Lee [13] demostraron que uno de los términos que aparece en la ecuación diferencial que rige la dinámica de las neuronas del modelo de Hopfield continuo tradicional, bajo algunas condiciones puede incrementar la función de energía de la red y generar por tanto resultados erróneos. Para salvar este inconveniente, Takefuji y Lee [13] proponen el denominado modelo de Hopfield continuo modificado. Sin embargo, en 1997, Wang [14] demostró que en muchos casos frecuentes en optimización, también el modelo de Hopfield continuo modificado puede generar resultados incorrectos y comportamientos oscilatorios en el proceso de convergencia de la red neuronal. Básicamente, el modelo de Hopfield tiene dos versiones: continua y discreta. El modelo continuo es el que posee una aplicación mas extendida en optimización, tal y como hemos señalado. El modelo discreto [15] generalmente se utiliza tan sólo como memoria asociativa. Sin embargo, recientemente han sido propuestos nuevos modelos de redes neuronales basados en el modelo de Hopfield discreto, que basándose en la eficacia de las neuronas binarias en lugar de continuas han obtenido excelentes resultados en variados problemas NP-duros de optimización combinatoria [17-20]. En este trabajo proponemos un nuevo modelo de red neuronal diseñado para la

resolución del problema de detección de mecanismos isomorfos. Se demuestra que el modelo propuesto, basado en unas dinámicas discretas que garantizan una correcta convergencia de la red hacia soluciones aceptables, proporciona en los casos analizados unos excelentes resultados requiriendo un tiempo de computación mucho menor que el de la red continua propuesta anteriormente por Kong, Li y Zhang [11] para la detección de mecanismos isomorfos. Asimismo hay que notar que en la red neuronal propuesta por Kong, Li y Zhang [11] hay que determinar de forma completamente empírica 7 parámetros, lo que constituye un proceso muy largo que desemboca en una falta de exactitud en los resultados proporcionados por la red. Sin embargo, la red propuesta en este trabajo depende de un sólo parámetro de fácil determinación. También se destaca que el hecho de que Kong, Li y Zhang utilicen neuronas continuas dificulta en muchos casos la identificación de la solución propuesta por el sistema, inconveniente que queda salvado con la utilización de neuronas binarias como las aquí propuestas que determinan completamente la solución aceptable.

## 2. El problema de la detección de mecanismos isomorfos.

La representación en forma de grafo de un mecanismo permite condensar toda la información estructural del mismo de un modo eficiente para la red neuronal. Obsérvese que, matemáticamente se puede plantear que dos grafos  $G(V,E)$  y  $G'(V',E')$  son isomorfos si existe una función biyectiva de mapeo  $f:V \rightarrow V'$  tal que para todo vértice  $V_i \in V$ ,  $V_x \in V'$  se cumple  $f(V_i) = V_x$ , y donde además si un arco  $(V_i, V_j) \in E$ , entonces  $(V_x, V_y) \in E'$ , donde  $f(V_j) = V_y$ . El modo más sencillo de demostrar que dos grafos son isomorfos es encontrar una matriz de permutación que refleje los intercambios de filas y columnas que nos transforman la matriz de adyacencia de un grafo en la del otro. Esta matriz de permutación, que denominamos MP, posee la característica de que existe solo un elemento que vale uno en cada fila y columna, siendo el resto de los elementos de la matriz iguales a cero.

La técnica utilizada en las redes tipo Hopfield consiste en la minimización de una función de energía, que contiene varios términos y parámetros y que se obtiene a partir de la función objetivo y de las restricciones del problema a resolver. Para modelar el problema de detección de mecanismos isomorfos se utilizará en principio la idea básica propuesta por Kong, Li y Zhang [11] que consiste en, dados dos grafos con  $N$  vértices, considerar una red neuronal de dimensiones  $N \times N$  de forma que la salida neuronal  $V$  coincida con la matriz de permutación buscada MP. El paso siguiente es construir una función de energía asociada al sistema de

manera que dado dos grafos  $G$  y  $G'$  definidos por sus respectivas matrices de adyacencia, la red establecerá que son isomorfos siempre que la salida del sistema converja hacia una matriz de permutación. Para ello

$$E = \frac{A}{2} \sum_i \sum_x \sum_{y \neq x} v_{ix} v_{ij} + \frac{B}{2} \sum_i \sum_{j \neq y} \sum_x v_{ix} v_{jx} + \frac{C}{2} \left( \sum_i \sum_x v_{ix} - N \right)^2 + \frac{D}{2} \sum_x \sum_y \sum_i \sum_j v_{ix} v_{jy} |a_{ij} - b_{xy}| \quad (1)$$

Donde:  $(a_{ij})$  y  $(b_{xy})$  son las matrices de adyacencia de  $G$  y  $G'$  respectivamente,  $v_{ij}$  la salida de la neurona  $ij$ , y  $A, B, C, D$  parámetros positivos a determinar. Observar que los tres primeros términos obligan al sistema a converger hacia una matriz de permutación, mientras que el último término es la función objetivo a minimizar. Por tanto se tendrá cuatro parámetros a determinar en la red, además de tres parámetros más que surgen cuando se discretiza para su implementación las ecuaciones diferenciales que rigen el comportamiento de la red de Hopfield continua. Por ello, en el apartado siguiente se propone para la red neuronal unas

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \left( \sum_k v_{ik} - 1 \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_j \left( \sum_k v_{kj} - 1 \right)^2 + \frac{D}{2} \sum_x \sum_y \sum_i \sum_j v_{ix} v_{jy} |a_{ij} - b_{xy}| \quad (2)$$

Hay que observar que el modelo de Hopfield tradicional, que es el empleado por Kong, Li y Zhang, es esencialmente secuencial o asíncrono pues está basado en el concepto de actualización única, es decir que una sola neurona es seleccionada para su actualización en cada iteración de la red. Esto va degradando su efectividad a medida que aumenta el tamaño del problema. Por otra parte, la red de Hopfield paralela o síncrona, en la que todas las neuronas son actualizadas en cada iteración, requiere que la matriz de conexiones de la red sea definida positiva y así solo puede aplicarse a un número muy reducido de problemas de optimización combinatoria, entre los que no se incluye el problema de detección de mecanismos isomorfos. Por ello en este trabajo se aplicará una nueva red binaria tipo Hopfield propuesta recientemente, la Red de Hopfield Competitiva [17], basada en el concepto de actualización n-paralela. En este modelo un grupo de  $n$  neuronas es actualizado simultáneamente en cada iteración, lo que permite diseñar para la detección de isomorfismos una red que se enfrenta con éxito a mecanismos de cierta complejidad.

Para aplicar la Red de Hopfield Competitiva en este problema se debe realizar una partición eficiente de las neuronas de la red en grupos disjuntos. La forma más sencilla y eficaz es considerar los grupos de neuronas de forma que siempre se satisfaga automáticamente una de las restricciones. Obsérvese que si se considera que cada fila de la red es un grupo, la restricción de fila se verá

Kong, Li y Zhang [11] proponen la utilización de la siguiente función de energía:

dinámicas discretas completamente determinadas que no requieren para su implementación la determinación de ninguna clase de parámetro. Además, la función de energía propuesta por Kong, Li y Zhang es del mismo tipo que la inicialmente propuesta por Hopfield y Tank [10], función que ya ha sido superada en trabajos posteriores [13] que han demostrado que se obtienen mejores resultados utilizando una energía modificada del tipo de la que se propone a continuación y en la que se observa que aparece tan solo un parámetro a determinar en la red.

siempre satisfecha automáticamente y el primer término puede ser eliminado de la función de energía. Análogamente ocurriría con la restricción de columna si consideráramos que cada grupo es una columna de la red. En nuestra implementación se considerará que cada grupo de la Red Competitiva es una fila de la matriz neuronal de salida y de esta forma la función de energía que se utilizará a partir de ahora se reduce a la siguiente expresión.

$$E = \frac{1}{2} \sum_j \left( \sum_k v_{kj} - 1 \right)^2 + \frac{D}{2} \sum_x \sum_y \sum_i \sum_j v_{ix} v_{jy} |a_{ij} - b_{xy}| \quad (3)$$

### 3. Descripción de la Red Neuronal propuesta.

El modelo de red neuronal propuesto consiste en una sola capa formada por  $N$  neuronas, conectadas cada una de ellas con todas las demás y consigo misma. Supóngase que la red se divide en  $n$  grupos disjuntos, donde cada grupo está formado por  $m$  neuronas de forma que  $M = n \times m$ . El estado de salida de la neurona  $i$  del grupo  $x$  se representa por  $v_{xi}(k)$  y su umbral por  $\theta_{xi}$ , para  $x=1,2,\dots,n$ ,  $i=1,2,\dots,m$ , donde  $k$  denota tiempo discreto;  $\omega_{xi,yj}$  es un número real que representa el valor del peso de la conexión entre las neuronas  $xi$  e  $yj$ , donde se consideran interconexiones simétricas  $\omega_{xi,yj} = \omega_{yj,xi}$ , y

donde se permiten valores arbitrarios de las autoconexiones de las neuronas. La red neuronal considerada se halla caracterizada por una función de energía del tipo Hopfield:

$$E(k) = -\frac{1}{2} \sum_{x=1}^n \sum_{i=1}^m \sum_{y=1}^n \sum_{j=1}^m \omega_{xi,yj} v_{xi} v_{yj} + \sum_{x=1}^n \sum_{i=1}^m \theta_{xi} v_{xi} \quad (4)$$

Las entradas a las neuronas se calculan mediante la denominada regla de actualización de Hopfield.

$$u_{xi}(k) = \sum_{y=1}^n \sum_{j=1}^m \omega_{xi,yj} v_{yj}(k) - \theta_{xi} \quad (5)$$

A continuación se introducirá la noción de actualización n-paralela o actualización de grupo. En este tipo de actualización, en lugar de seleccionar en cada iteración una sola neurona como en la red de Hopfield tradicional, se selecciona y actualiza todo un grupo G formado por n neuronas. Basada en este concepto se propone una definición generalizada de la red binaria de Hopfield Competitiva.

#### Definición.

Sea M una red binaria (1/0) caracterizada por una función de energía de Hopfield en la que las entradas de las neuronas vienen dadas por la regla de actualización de Hopfield. Si la red es dividida en grupos de neuronas disjuntos, diremos que M es una Red de Hopfield Competitiva (CHOM) si una y solo una neurona por grupo está activada, es decir, tiene como estado de salida  $v_i(k)=1$  en cada instante k.

#### Teorema. Dinámicas Óptimas de la red CHOM.

Sea M una Red de Hopfield Competitiva en la que un solo grupo x, para  $x=1 \dots n$ , es seleccionado para su actualización en el instante k. Sea  $x_0$  la neurona del

$$\Delta E(k) = \Delta E_x(k) = -\sum_{i=1}^m \Delta v_{xi} \left[ u_{xi}(k) + \sum_{y=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{\omega_{xi,yj}}{2} \Delta v_{yj}(k) \right] \quad (10)$$

Supóngase ahora que en el instante k la neurona  $x_0$  es la única activada (on) en el grupo x, y que la neurona  $x_c$  es la neurona "candidata" del grupo x, es decir, la que estará activada en el instante k+1. Entonces el incremento de energía anterior puede expresarse:

$$\Delta E_x(k) = u_{x_0}(k) - [u_{x_c}(k) - K_{x_0,x_c}] \quad (11)$$

grupo x activada en dicho instante k. Si la dinámica de la computación de la red viene dada en la forma:

$$v_{xi}(k+1) = \begin{cases} 1 & \text{si } u_{xi}(k) - K_{x_0,x_i} = \max_{j=1 \dots m} \{u_{xj}(k) - K_{x_0,xj}\} \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (6)$$

en otro caso,

$$K_{x_0,x_j} = -\frac{1}{2} (\omega_{x_0,x_0} + \omega_{x_j,x_j} - 2\omega_{x_0,x_j}) \quad (7)$$

Entonces la convergencia de la función de energía a un mínimo local o global está garantizada.

#### Demostación del Teorema.

El incremento de la función de energía generada como consecuencia de un cambio cualquiera en el estado de salida de las neuronas de la red puede expresarse:

$$\Delta E = -\sum_{x=1}^n \sum_{i=1}^m \Delta v_{xi} \left[ -\theta_{xi} + \sum_{y=1}^n \sum_{j=1}^m \omega_{xi,yj} (v_{yj} + \frac{1}{2} \Delta v_{yj}) \right] \quad (8)$$

Puesto que se utilizarán dinámicas de computación discretas se tendrá:

$$\Delta E(k) = E(k+1) - E(k); \quad \Delta v_{xi}(k) = v_{xi}(k+1) - v_{xi}(k) \quad (9)$$

Si el potencial sináptico o entrada de cada neurona se expresa mediante la regla de actualización de Hopfield, y se considera que se actualiza solo el grupo de neuronas x, entonces el incremento de energía es:

De aquí se observa que si en el instante k la neurona con el máximo valor de:

$$\{u_{xi}(k) - K_{x_0,x_i}\}$$

en el grupo x es seleccionada como la neurona  $x_c$  candidata a activarse en el instante k+1, entonces el decrecimiento de la energía está garantizado.

Además, el valor absoluto del decrecimiento de la energía es el máximo posible en dicho instante. Observe que, puesto que  $E$  está acotada por abajo, entonces la función de energía convergerá en un cierto instante  $k_e$ . En este valor de equilibrio, en cada grupo  $x$  de neuronas se verificará:

$$u_{x_0}(k_e) = \max_{j=1\dots m} \{u_{x_j}(k_e) - K_{x_0,x_j}\} \quad (12)$$

Si se activa cualquier otra neurona  $x_c \neq x_0$  en este estado estable de  $E$ , se tendrá siempre un incremento de energía resultante positivo o nulo. Por tanto, la red se halla en un estado correspondiente a un mínimo global o local de  $E$ .

#### 4. Simulación de la Red Neuronal.

La red neuronal propuesta puede simularse fácilmente a través de las ecuaciones de las dinámicas descritas en el apartado anterior. Para ello basta identificar la función de energía (1) propuesta para la detección de mecanismos isomorfos con la función de energía clásica de la red de Hopfield. Obtendremos así los valores de los pesos sinápticos o conexiones de la red, que sustituidos en la regla de actualización de Hopfield nos proporcionan para cada neurona la siguiente expresión para el cálculo del valor de la entrada:

$$u_{ix} = 1 - v_{ix} - \sum_{r \neq i} v_{rx} - D \sum_j \sum_y v_{jy} |a_{ij} - b_{xy}| \quad (13)$$

A continuación describimos el algoritmo propuesto para la detección de isomorfismos en grafos de mecanismos basado en la Red de Hopfield Competitiva:

1. Establecer el estado inicial de la Red de Hopfield Competitiva asignando aleatoriamente el valor 1 a una neurona de cada grupo (fila) y a todas las demás el valor cero.
2. Evaluar el valor inicial de la función de energía (1)
3. Seleccionar un grupo (fila)  $i$
4. Calcular las entradas  $u_{ix}$  de las neuronas del grupo (fila)  $i$  mediante la ecuación (2), para  $i=1,2,\dots,N$
5. Seleccionar la neurona  $i_0$  activada en el grupo (fila)  $i$  y seleccionar la neurona  $i_c$  que posee el valor máximo de  $u_{ij} - K_{i_0,ij}$  en el grupo (fila)  $i$ .
6. Si  $\max\{u_{ij} - K_{i_0,ij}\} \neq u_{i_0}$ , entonces  $v_{i_0} = 1$ ,  $v_{i_c} = 0$  y  $\Delta E = u_{i_0} - u_{i_c} + K_{i_0,i_c}$  en caso contrario no se realiza ninguna actualización.
7. Repetir desde el paso 3 hasta que la energía alcance un valor de equilibrio.

Obsérvese que en el paso 3 puede seleccionarse un grupo (fila)  $i$  aleatoriamente o por simplicidad, seguir el orden natural. Si existen varias neuronas con el valor máximo del potencial sináptico  $u$  en la fila  $i$ , el algoritmo en el paso 5 debería aleatoriamente seleccionar una cualquiera de ellas. Sin embargo, por simplicidad se selecciona la primera neurona de la fila con el valor máximo de  $u$ .

Para evaluar la efectividad de la red neuronal propuesta para este problema consideraremos los dos ejemplos utilizados por Kong, Li y Zhang en su trabajo. El primero de ellos consiste en las dos cadenas cinemáticas de 10 barras que aparecen en la figura 1, donde el problema es entonces averiguar si dichos grafos son isomorfos. La figura 2 nos muestra la representación de las matrices de adyacencia  $A$  y  $B$  de los grafos de dichas cadenas cinemáticas, donde un cuadro sombreado indica que el elemento es igual a uno y un cuadro en blanco que dicho elemento es cero.

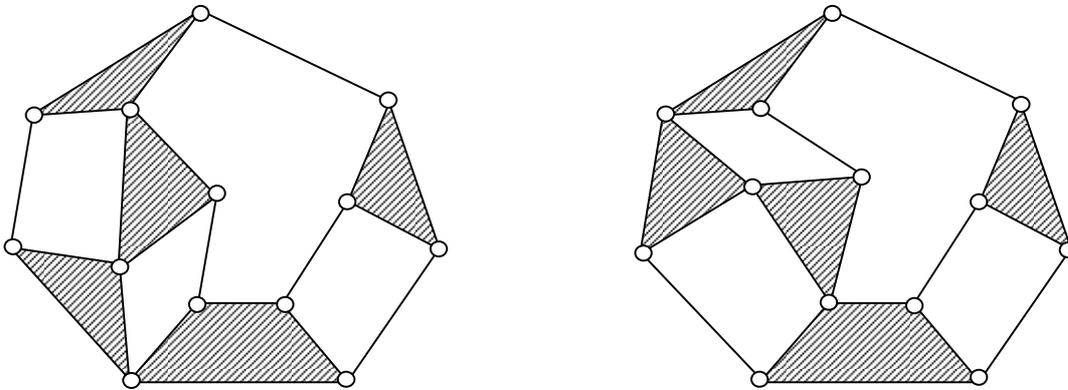
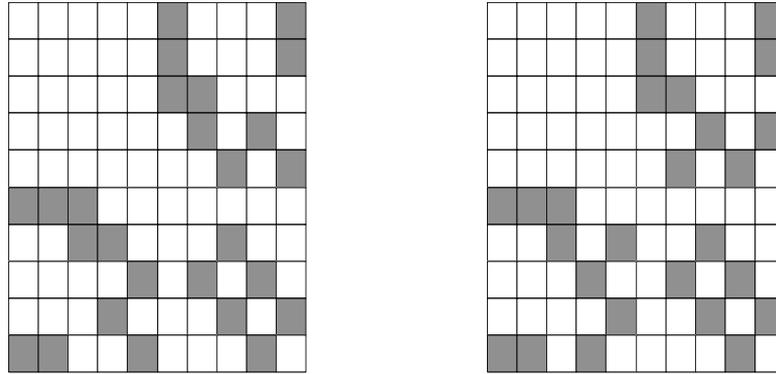


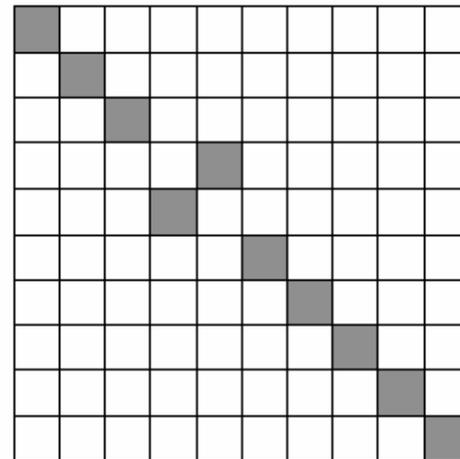
Figura 1: Dos cadenas cinemáticas de 10 barras.



**Figura 2:** Matrices de adyacencia de las cadenas cinemáticas de la figura 1. Los cuadros sombreados indican los elementos iguales a 1 y el resto las salidas iguales a cero.

Iterando como es usual la red neuronal binaria desde diferentes estados iniciales aleatorios y considerando el valor del único parámetro de la red como  $D=1$ , se observa que desde algunos de ellos la red consigue alcanzar el estado  $E = 0$ , es decir converge hacia una matriz de permutación. Esto indica que, puesto que la red consigue encontrar la matriz de permutación buscada, evidentemente dichos grafos son isomorfos. La figura 3 nos muestra la salida neuronal con energía nula encontrada por la red binaria. Dicha salida nos determina directamente la matriz de permutación buscada  $V$  que relaciona las matrices de adyacencia  $A$  y  $B$  en la forma  $B=V^t AV$ . La evolución de la energía de la red neuronal en cada iteración aparece en la figura 5, donde se han representado tres estados iniciales distintos a partir de los cuales la red converge hacia una matriz de permutación. Se observa como diferentes estados iniciales de la red generan distintas evoluciones de la función de energía, aunque el estado estable con energía nula al que converge la red es siempre el mismo en los tres casos.

El segundo ejemplo implementado consiste en las dos cadenas cinemáticas de 12 barras que aparecen en la figura 4. Mruthyunjaya y Balasubramanian [6] demostraron que dichos grafos no son isomorfos, a pesar de tener los mismos coeficientes en su polinomio característico. Evidentemente este hecho puede generar que erróneamente puedan ser considerados como isomorfos si utilizamos el método del polinomio característico. Se observa que la red binaria en este caso no encuentra ningún estado inicial a partir del cual pueda converger hacia  $E = 0$ , lo que es un indicativo de que dichos grafos no son isomorfos. Sin embargo, hay que tener en cuenta que, al igual que ocurre en la red de



**Figura3:** Salida binaria que genera la red neuronal para la cadena cinemática de la figura 1. Observar que dicha salida nos proporciona directamente la matriz de permutación buscada que indica que ambos grafos son isomorfos.

Hopfield continua, en las redes neuronales empleadas en optimización siempre puede aparecer el problema de los mínimos locales, esto es, que la red no consiga acceder al mínimo global y encontrar el isomorfismo a pesar de que éste exista.

Obsérvese que los mismos resultados obtenidos en estos dos casos por la red binaria propuesta pueden ser obtenidos utilizando la red continua de Kong, Li y Zhang. Sin embargo, hay que tener en cuenta una serie de problemas que aparecen a la hora de implementar la red continua. El primero es la determinación empírica de los parámetros  $\Delta$ ,  $\tau$ ,  $U_0$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$ , frente a la determinación del único parámetro  $D$  (considerado igual a uno en nuestras simulaciones) que aparece en la red

binaria propuesta. El segundo problema de la red continua es la determinación de las funciones de activación de cada neurona, que son del tipo tangente hiperbólica, lo que requiere una gran cantidad de tiempo de computación. Tal y como señalan Kong, Li y Zhang, este tiempo de computación llega a ser significativo comparado con el que requiere la red para su convergencia. En contraposición, la activación de cada neurona de la red binaria aquí propuesta queda completamente determinada a través de las dinámicas presentadas. El tercer inconveniente de la red de Kong, Li y Zhang es la identificación de la solución proporcionada por la red, puesto que al tratarse de neuronas con salida continua con valores entre cero y uno es difícil determinar cuales son las neuronas activadas, es decir, a partir de qué valor puede a una neurona considerarse como tal. Por el contrario, en la red binaria es evidente que la solución se extrae directamente del estado final.

Como último inconveniente de la red continua señalamos que la convergencia hacia un estado estable no está siempre garantizada, puesto que sus dinámicas no son correctas. Por ello como señalan Kong, Li y

Zhang, debe imponerse un límite en el número máximo de iteraciones de la red, puesto que ésta en muchos casos oscilará indefinidamente sin proporcionar ninguna solución.

Por el contrario, la red discreta propuesta alcanza siempre rápidamente un estado estable, tal y como muestran las simulaciones realizadas sobre los dos ejemplos propuestos. Una vez alcanzado el valor estable de la función de energía, basta comprobar si dicho valor es cero, en cuyo caso dicho estado se corresponde con una matriz de permutación, pudiendo asegurar entonces que los grafos son isomorfos.

Además de los inconvenientes reseñados de la red de Hopfield continua, el factor más importante a considerar para decidimos por la implementación de la red binaria propuesta a la hora de resolver un problema de tamaño medio es la magnitud del tiempo de computación requerido. Se observa que, mientras que la red de Hopfield continua requiere para su convergencia un tiempo de computación cuya magnitud es de horas, la red binaria propuesta tarda solo unos segundos en alcanzar un estado estable.

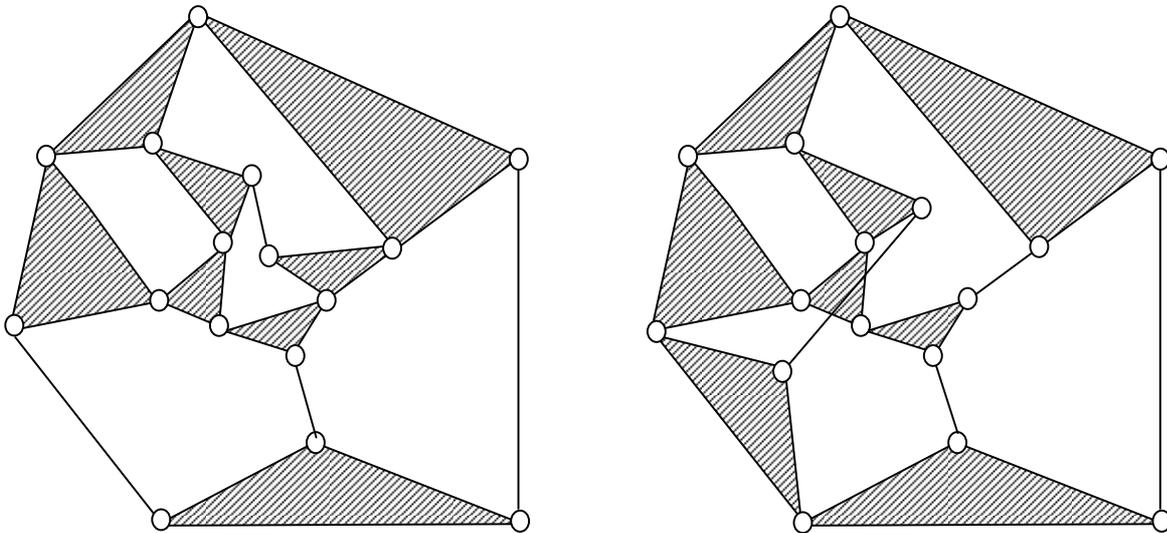
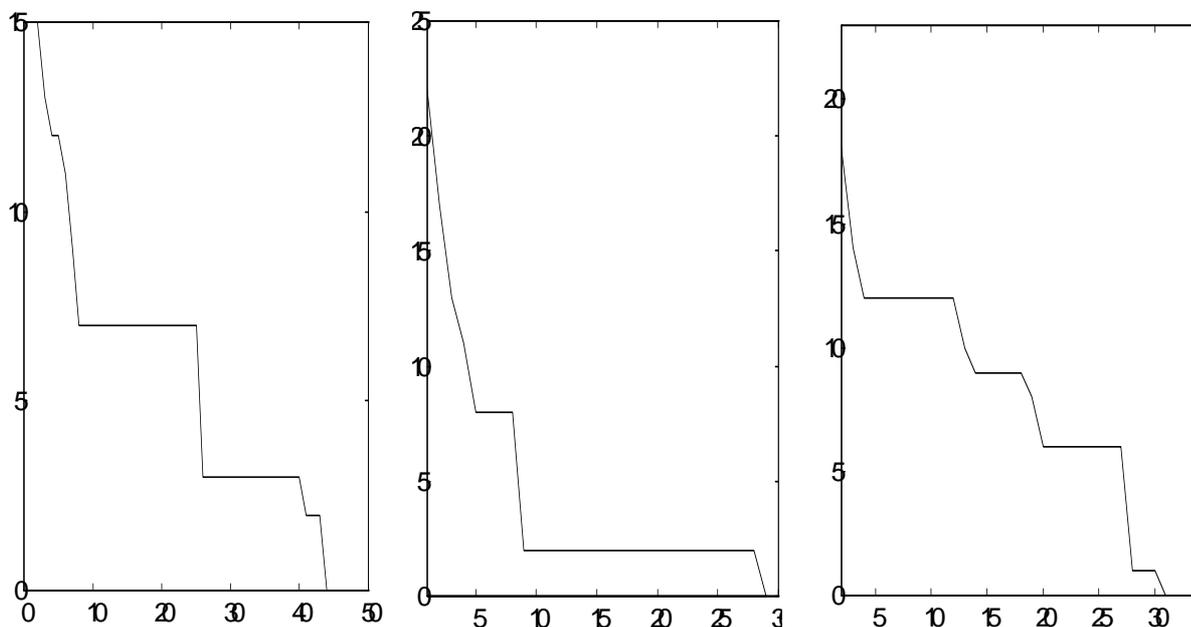


Figura 4: Dos cadenas cinemáticas de 12 barras



**Figura 5:** Representación gráfica de la evolución de la función de energía de la red neuronal en cada iteración para la cadena cinemática de la figura 1. Consideramos en cada caso un estado inicial distinto de la red.

## 5. Conclusiones.

- El problema de detección de mecanismos isomorfos es un problema NP-duro importante en el proceso de diseño mecánico. Aunque pueden existir algoritmos eficaces para casos particulares, en el caso general los métodos tradicionales para la detección de isomorfismos en cadenas cinemáticas no proporcionan generalmente soluciones de forma eficiente. Por esta razón se proponen como método alternativo de resolución a las redes neuronales, y en particular a las redes tipo Hopfield por ser las más eficaces y extendidas en la resolución de problemas del tipo NP-duro.
- Aunque Kong et al.[11] han propuesto ya una red neuronal basada en el modelo continuo de Hopfield para la detección de mecanismos isomorfos, sin embargo críticas recientes hacia este modelo muestran que no es un método adecuado para la resolución de un problema NP-duro como es la identificación de isomorfismos. De esta forma la red continua en muchos casos oscila indefinidamente, puesto que la convergencia del sistema no se halla bien definida.
- Asimismo se observa que frecuentemente es difícil la identificación de la solución final

obtenida por la red debido a que las salidas de las neuronas son continuas en lugar de binarias.

- También es destacable el hecho de que la red continua necesite para su completa definición de la determinación experimental de siete parámetros, así como de la determinación de la función de activación sigmoideal de cada neurona, lo que dificulta enormemente su implementación.
- En contraposición hemos presentado en este trabajo una nueva red binaria para detección de isomorfismos en grafos de mecanismos, cuyas dinámicas discretas completamente definidas garantizan siempre una correcta convergencia de la red. Los resultados experimentales muestran que la red propuesta converge rápidamente hacia un estado estable sin comportamientos oscilatorios, por lo que se muestra muy superior a la red de Kong et al. en lo que se refiere al tiempo de computación, además de su fácil implementación puesto que las dinámicas dependen de un único parámetro.

## 6. Bibliografía.

- [1] J.J. Uicker, A. Raiku, A method for the identification and recognition of equivalence of kinematic chains, *Mechanism and Machine Theory* 10 (1975) 375-383.

- [2] F.R.E. Crossley, The permutations of kinematic chains of eight members or less from the graph-theoretic viewpoint, *Developments in Theoretical and Applied Mechanics 2* (1965) 467-486.
- [3] T.H. Davies, F.R.E. Crossley, Structural analysis of plane linkages, *Journal of Mechanism I*, (1966) 171-183.
- [4] L.S. Woo, Type synthesis of planar linkages, *ASME J. of Engineering for Industry* 89 (1967) 159-172.
- [5] H.S. Yan, A.S. Hall, Linkage characteristic polynomials: assembly, theorems, uniqueness, *ASME Journal of Mechanical Design* 104 (1982) 11-20.
- [6] T.S. Mruthyunjaya, H.R. Balasubramanian, In quest of a reliable and efficient computational test for detection of isomorphism in kinematic chains, *Mechanism and Machine Theory* 22 (1987) 131-139.
- [7] A.G. Ambekar, V.P. Agrawal, Canonical numbering of kinematic chains and isomorphism problem: min code, *Mechanism and Machine Theory* 22 (1987) 453-461.
- [8] T.J. Jongsma, W.J. Zhang, An efficient for finding optimum code under the condition of incident degree. *ASME DE. vol 47, Flexible Mechanism, dynamics and analysis, USA, 1992*, pp. 431-436.
- [9] W.J. Zhang, Breteler A.J. Klein, An approach to mechanism topology identification with consideration of design progression, *Institute of Mechanical Engineering (U.K.) J. of Mechanical Engineering Science* 211 (1996) 175-183.
- [10] J. J. Hopfield y D. W. Tank, Neural computation of decisions in optimization problems, *Biol. Cybern.* 52 (1985) 141-152.
- [11] F.G. Kong, Q. Li, W.J. Zhang, An artificial neural network approach to mechanism kinematic chain isomorphism identification, *Mechanism and Machine Theory* 34 (1999) 271-283.
- [12] G.V. Wilson y D. Pawley, On the stability of the TSP algorithm of Hopfield and Tank, *Biol. Cybernetics* 58 (1988), pp. 63.
- [13] Y. Takefuji y K.C. Lee, Artificial neural networks for four-colouring map problems and K-colorability problems, *IEEE Trans. Circuits Syst.* 38 (1991), pp. 326-333.
- [14] L. Wang, Discrete-time convergence theory and updating rules for neural networks with energy functions, *IEEE Trans. Neural Networks* 8 (1997), pp. 445-447.
- [15] J.J. Hopfield, Neural Networks Pyphysical systems with emergent collective computational abilities, *Proc. Ac. Academy Sci. USA* 79 (1982), pp. 2554-2558.
- [16] C.R. Tischler, A.E. Samuel, K.H. Hunt, Kinematic chains for robot hands-I, Orderly number-synthesis, *Mechanism and Machine Theory* 30 (8) (1995), 1193-1215.
- [17] G. Galán Marín y J. Muñoz Pérez, Design and Analysis of Maximum Hopfield Networks, *IEEE Transactions on Neural Networks* 12 (2) (2001), pp. 329-339.
- [18] G. Galán Marín y J. Muñoz Pérez, A new input-output function for binary Hopfield Neural Networks, *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 1606, pp. 311-320, Springer Verlag, Berlin 1999.
- [19] G. Galán Marín y J. Muñoz Pérez, Diseño de una Red Neuronal para la resolución del Problema de los Cuatro Colores, *Revista Iberoamericana de Inteligencia Artificial* 8 (1999), pp. 6-17.
- [20] G. Galán Marín, E. Mérida Casermeiro y J. Muñoz Pérez, Modelling Competitive Hopfield Networks for the Maximum Clique Problem., *Computers & Operations Research* (2002) (En prensa).

## A binary Neural network for identifying isomorphic mechanisms.

### Abstract

An important step in the kinematic mechanism synthesis process is to identify graph isomorphism while generating new mechanisms. Undetected isomorphisms result in duplicate solutions and unnecessary effort. Since 1960, a lot of methods have been proposed for the graph isomorphism identification. Some authors have concluded that, in the general case, the traditional methods of detecting kinematic chain isomorphism have been not found to be an efficient solution of the kinematic chain isomorphism problem, classified as NP-hard. This has motivated to attempt a new direction of approach based on neural networks. In this paper we present a new binary neural network designed for solving this problem. The model is based on appropriate dynamics for a binary network in order to always generate fast and correct solutions. Simulation runs for the selected mechanisms show that our network provides fast and good quality solutions and performs better than the traditional continuous Hopfield network, because of its easier implementation and smaller computation time.

**Keywords: isomorphic mechanisms, synthesis of mechanisms, graph isomorphism, binary neural network, Hopfield networks.**