Bezskalowość i fenomen małego świata w grafach przepływu aktywności w sieciach neuronowych Autoreferat rozprawy doktorskiej

Jarosław Piersa

2012 - 06 - 26

1 Cel naukowy rozprawy

Celem naukowym rozprawy jest analiza funkcjonalnych grafów w modelu przepływu aktywności w sieciach neuronowych w kontekście fenomenów bezskalowości i małego świata. Do analizy powyższych sieci stosowane są narzędzia wywodzące się z matematycznej teorii grafów losowych, zapoczątkowanej przez Erdősa oraz Rényiego w połowie dwudziestego wieku [7]. Przejawem bezskalowości jest zachowanie potęgowej formuły rozkładu stopni wierzchołków w grafie na przestrzeni kilku rzędów wielkości. Fenomen małego świata, czyli koncepcja wysokiej przepustowości globalnej i wysokiej lokalnej klasteryzacji przy zachowaniu rzadkiej struktury grafu, jest badany z wykorzystaniem pojęć charakterystycznej długości ścieżki oraz współczynnika skupienia przy porównaniu wyników do wartości, właściwych grafom z całkowicie losową procedurą doboru krawędzi. Obie własności są analizowane dla sieci neuronowych rzadkich, w których dostępne połączenia synaptyczne są zależne od ich geometrycznego zanurzenia w przestrzeni euklidesowej.

Rezultatem pracy jest potwierdzenie obu zjawisk w analizowanym modelu geometrycznie osadzonych sieci neuronowych. Ponadto uzyskane wyniki są porównywane do tych, otrzymywanych w badaniach z wykorzystaniem aparatury medycznej, co podkreśla adekwatność siły opisu modelu.

Słowa kluczowe: sztuczne sieci neuronowe, grafy bezskalowe, grafy małego świata.

2 Definicje

Perceptron Matematyczny model neuronu bazujący na prostych i wydajnych obliczeniowo operacjach arytmetycznych i pewnej nieliniowej funkcji (zazwyczaj progowej). W zastosowaniach perceptrony są wykorzystywane m. in. jako klasyfikatory danych.

Maszyna Boltzmanna Matematyczny model rekurencyjnej sieci neuronowej, konstrukcją inspirowany nieco perceptronami. Maszyna Boltzmanna składa się z układu dwuwartościowych jednostek, połączonych w pełną sieć z symetrycznymi wagami. Sieć ta jest poddawana stochastycznej, sterowanej energią ewolucji. Model maszyn Boltzmanna jest wykorzystywany do rozwiązywania problemów optymalizacyjnych z ograniczeniami np. kolorowanie grafu, problem komiwojażera etc.

fMRI (ang. Functional Magnetic Resonance Imagining) Obrazowanie z wykorzystaniem funkcjonalnego rezonansu magnetycznego; jest to metoda neuroobrazowania bazująca na zmianach stężenia tlenu we krwi. Zaletą metody jest jej nieinwazyjność i brak promieniowania, wadą — niskie rozdzielczości przestrzenne i czasowe pomiarów.

Graf (losowy) Erdősa-Rényiego Schemat konstrukcji grafu, w którym dla zadanej liczby wierzchołków N oraz prawdopodobieństwa $p \in [0, 1]$ zbiór wierzchołków jest ustalany na N różnych elementów, zaś zbiór krawędzi powstaje poprzez dodanie krawędzi (u, v) z prawdopodobieństwem p niezależnie dla każdej pary $(u \neq v), u, v \in \mathcal{V}$, zob. [7].

Graf / model grafu Wattsa-Strogatza Procedura generowania grafu, która startuje z cyklicznej siatki, w której każdy wierzchołek jest połączony do k najbliższych sąsiadów. Następnie niezależnie z prawdopodobieństwem $p \in$ [0,1], każda istniejąca krawędź, jest przepinana do innego losowo wybranego wierzchołka w \mathcal{G} (z pominięciem multikrawędzi i samo-połączeń). Model został zaproponowany w pracy [16].

Graf / model grafu Alberty-Barabasiego Iteracyjna procedura konstrukcji grafu losowego polegająca na wzroście i preferencyjnym dołączaniu krawędzi, zaproponowana w [2]. Procedura startuje z małego niepustego grafu (np K_2) po czym iteracyjne wykonuje następujące kroki:

- wzrost dodaje nowy wierzchołek v do grafu,
- preferencyjne dołączenie losowo podpina nowo-dodany wierzchołek do aktualnego grafu dodając krawędź między v a innym wierzchołkiem wylosowanym z prawdopodobieństwem:

$$\mathbb{P}(\{v, u\} \in \mathcal{E}) = \frac{\deg(u)}{\sum_{w \in \mathcal{V}} \deg(w)}.$$
(1)

Grafy Alberty-Barabasiego są grafami bezskalowymi (zob. definicja niżej).

Graf strukturalny Graf, stanowiący ramy fizyczne, w obrębie których działa dynamika. W przypadku sieci mózgowych za graf strukturalny są uznawane neurony i połączenia synaptyczne. Koncepcja rozróżnienia grafów strukturalnych i funkcjonalnych (definicja poniżej) została zaproponowana w [4].

Graf funkcjonalny aktywności Podgraf grafu *strukturalnego*, składający się wyłącznie z węzłów (neuronów) i połączeń (synaps), które mają istotny udział w trakcie dynamiki. W praktyce często jest to podgraf indukowany poprzez krawędzie, których aktywność przekroczyła określoną wartość progową.

Prawa potęgowe Zależność modelowana funkcją potęgową tj. $f(x) = x^{\alpha}$. W wypadku rozkładów probabilstycznych musi dodatkowo zachodzić $\alpha < -1$, aby gęstość była całkowalna. **Graf bezskalowy** $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ (ang. *scale-free graph*) Graf, którego rozkład stopni zachowuje formułę potęgową przez kilka rzędów wielkości

$$\mathbb{P}(\deg_{in}(v) = k) \propto k^{\alpha} \tag{2}$$

gdzie $\alpha < -1$ oraz $v \in \mathcal{V}$, zob. [2].

Charakterystyczna długość ścieżki w grafie $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ Średnia długość najkrótszych ścieżek pomiędzy każdą parą wierzchołków

$$L = \frac{2}{|\mathcal{V}||\mathcal{V} - 1|} \sum_{v,u \in \mathcal{V}} p(u,v), \tag{3}$$

Gdzie p(u, v) jest długością najkrótszej ścieżki (tj. liczbą krawędzi) w grafie między u oraz v. W wypadku grafów niespójnych przyjmuje się $L = +\infty$.

Współczynnik klasteryzacji wierzchołka v w grafie $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ jest to stosunek liczby istniejących krawędzi w sąsiedztwie wierzchołka v do maksymalnej możliwej liczby krawędzi, jaką w sąsiedztwie v można rozpiąć (odliczając multikrawędzie i samo-połączenia):

$$C(v) = \frac{|\{(w, u) \in \mathcal{E} : (v, w) \in \mathcal{E} \lor (v, u) \in \mathcal{E}\}|}{|\{w \in \mathcal{V}: (u, w) \in \mathcal{E}\}|(|\{w \in \mathcal{V}: (v, w) \in \mathcal{E}|-1\})}$$
(4)

Współczynnik klasteryzacji grafu $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ jest średnią arytmetyczną współczynników klasteryzacji jego wierzchołków \mathcal{V}

$$C = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{v \in \mathcal{V}} C(v).$$
(5)

Graf małego świata (ang. *small world graph*) Graf charakteryzujący się jednocześnie krótką charakterystyczną długością ścieżki i wysokim współczynnikiem klasteryzacji oraz małym zagęszczeniem połączeń (tj. graf rzadki).

3 Motywacja i bieżący stan wiedzy

Sztuczne sieci neuronowe są biologicznie inspirowanymi modelami matematycznymi dla komórek nerwowych i całych układów mózgowych. Zagadnienie to obejmuje również problematykę uczenia sieci neuronowych. Dwa najszerzej omawiane paradygmaty uczenia to nadzorowane (z nauczycielem) i nienadzorowane (bez nauczyciela). Postulowana już przez Hebba plastyczność sieci była dalej rozwijana w algorytmach mapowań topologicznych, wyszukiwania składowych głównych, w uczenia przez konkurencję np. zwycięzca bierze wszystko (ang. WTA — Winner Take All) etc. Interesującym aspektem jest samoistna tendencja sieci do samoorganizacji podczas takich procesów. Ten fenomen w nieco mniejszym stopniu jest widoczny w uczeniu nadzorowanym, np. w wykształcaniu wewnętrznych reprezentacji w warstwach ukrytych sieci podczas algorytmu propagacji wstecznej.

3.1 Samoorganizacja w dużych sieciach

Fenomen samoorganizacji jest również dyskutowany w kontekście rzeczywistych grafów, nierzadko ogromnej skali. Badania dotyczące sieci WWW, sieci społecznych portalu Facebook, współ-aktorstwa w filmach, czy współ-autorstwa w redagowaniu prac naukowych potwierdzają dość skomplikowane hierarchiczne struktury w/w sieci, zob [2]. Nie zawsze widać powody, dla których dana sieć miała by być taką, a nie inną topologię. A nawet jeżeli, to stwierdzenie dlaczego dany wierzchołek zajmuje takie, a nie inne miejsce w tejże topologii jest już zadaniem niemal niemożliwym.

Badania, prowadzone na przytoczonych powyżej grafach, potwierdzają, że ich struktura jest daleka od losowej (w rozumieniu grafów Erdősa-Rényiego). Są zdecydowanie bliższe grafom bezskalowym, lub bezskalowym z obcięciem wykładniczym, ibidem.

Innym dość zaskakującym kryterium analizy dużych grafów jest *fenomen* małego świata. Pierwszą z cech takich grafów jest, klasycznie rozumiana możliwość przejścia między dowolną parę wierzchołków w niewielkiej ilości kroków. W terminach grafowych warunek ten jest tłumaczony na krótką charakterystyczną (i maksymalną) długość ścieżki w grafie [16]. Ten fenomen jest znany jako "odległość sześciu uścisków dłoni" między dowolną parą ludzi żyjących na świecie, bywa też tematem gier np. "jak w pięciu skojarzeniach przejść od kisielu do żetonu?".

Drugim warunkiem charakteryzującym graf małego świata jest wysoka klasteryzacja grafu. Poszukując przykładów w grafach rzeczywistych ponownie uciekniemy się do sieci społecznych, w których grupy znajomych zazwyczaj dobrze znają się wzajemnie. Choć oczywiście każdy z nich może mieć pewną liczbę innych "indywidualnych" kontaktów, to ogólną zasadą pozostaje "znajomy mojego znajomego również jest moim znajomym".

Niejako sytuacją ekstremalną jest graf jaskiniowców żyjących w tej samej jaskini. Każdy z nich zna każdego, zatem i ilość uścisków dłoni potrzebnych do przekazania maczugi między dowolną parą jest niska. Jeżeli jednak rozważana jest duża liczba wierzchołków w grafie (lub jak kto woli: jaskiniowców w jaskini), graf staje się duży, choć nadal silnie sklasterysowany, a ilość krawędzi w grafie rośnie kwadratowo (i może przekroczyć możliwości jaskiniowców do utrzymywania takiej liczby znajomych). Dlatego też czasem dodawany jest wymóg, aby analizowany graf był rzadki.

Struktury małego świata zostały odnalezione między innymi we wspomnianych wyżej sieciach socjalnych, kooperacji, WWW, ale również sieciach metabolicznych, lingwistycznych, a nawet importów w kodach źródłowych programów.

W roku 2005, wraz z rozwojem nowoczesnych technik obrazowania w medycynie, ukazały się rezultaty badań dotyczących grafów aktywności funkcjonalnej w mózgu [6]. Poprzez grafy funkcjonalne rozumiano nie faktyczne połączenia neuronowe w korze, a korelację aktywności (mierzonej poprzez poziom utlenienia) danych jej obszarów podczas wykonywania nieskomplikowanych czynności. Wyniki wpisują się w listę grafów, charakteryzujących się potęgowym rozkładem stopni. Inne prace łączą prawa potęgowe i bezskalowość z krytycznością dynamiki. Jak jest argumentowane w pracy [5], mózg ludzki operuje właśnie w stanie krytycznym lub okołokrytycznym, co wzmacnia hipotezę.

Kolejne badania analizowały grafy mózgowe pod kątem charakterystyki małego świata [1, 3, 15] i potwierdziły obecność również i tego fenomenu. Jest to zatem punkt, w którym koncepcje samoorganizacji w sieciach neuronowych i teoria grafów losowych spotykają się.

3.2 Dotychczasowe wyniki

Istniejące badania na tym polu można dość zgrubnie podzielić na eksperymentalne i teoretyczne. Wśród tych pierwszych należy wymienić już wspomniane wyżej prace Eguiluza [6], Bullmore'a [3, 4], Salvadora [15] i innych, w których analizowane są sieci biologiczne, tj uzyskane na podstawie badań na rzeczywistych systemach nerwowych.

Prace teoretyczne, natomiast usiłują zaproponować nieskomplikowany model, który byłby wstanie odtworzyć rezultaty, uzyskane w badaniach eksperymentalnych. W dotychczas osiągniętych rezultatach na tym polu Piękniewski i Schreiber analizowali grafy aktywności w rekurencyjnych oraz impulsujących sieciach neuronowych [10, 11]. W badaniach pokazali, że grafy funkcjonalne oparte na w pełni połączonych sieciach neuronowych zachowują rozkład stopni (wejściowych) zgodny z prawem potęgowym z wykładnikiem $\gamma = -2$. Niniejsza rozprawa również wpisuje się w ten tor badań.

4 Metodologia i rezultaty

Rozprawa doktorska jest naturalną kontynuacją badań prowadzonych przez Piękniewskiego i Schreibera. Konstruując model idziemy o krok dalej, zwracając uwagę na spatialne rozmieszczenie neuronów. Przyświecającą ideą jest, zgrubne choćby, odzwierciedlenie rozkładu długości połączeń mózgowych. Co za tym idzie w grafie strukturalnym znajduje się duża liczba połączeń krótkich oraz odpowiednio mniejsza liczba długich, co już samo w sobie redukuje ilość dostępnych w sieci "skrótów". Opracowane rezultaty są podsumowaniem z opublikowanych przez nas badań [12, 13, 14].

4.1 Model przypływu aktywności

Metodologia badań w dużej mierze bazuje na numerycznych symulacjach opracowanego modelu matematycznego. W dużym skrócie sieć neuronowa $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ składa się z N losowo rozrzuconych na sferze (lub innym ograniczonym podzbiorze \mathbb{R}^3) abstrakcyjnych *neuronów*. Każdy z nich otrzymuje początkową nieujemną (oraz całkowitoliczbową) wartość określającą *poziom aktywności* lub zgromadzony ładunek σ_v , gdzie $v \in \mathcal{V}$. Pomiędzy neuronami rozpinane są *połączenia synaptyczne*. Prawdopodobieństwo istnienia krawędzi między parą jednostek u i v zanika z kwadratem odległości euklidesowej między nimi, jednak w pewnym niewielkim promieniu powinno wynosić 1, aby otrzymana sieć była spójna. Połączeniom synaptycznym przypisywane są ich wagi w_{uv} określające pobudzający lub hamujący charakter synapsy. Dla tak określonej sieci zdefiniowana jest energia zależna od konfiguracji $\bar{\sigma} - [\sigma_1, ..., \sigma_N]$:

$$E(\bar{\sigma}) = \sum_{u,v \in \mathcal{E}} w_{uv} |\sigma_v - \sigma_u|.$$
(6)

W obrębie tak zdefiniowanej sieci strukturalnej połączeń dopuszczana jest dynamika re-dystrybuująca aktywność w sieci, ale w sposób dyfuzyjny, tj. za-

chowujący sumaryczną ilość ładunku w układzie. Jednostka aktywności jest transmitowana zu do v, rozpiętą pomiędzy losowy wybraną parą jednostek o ile:

- (u,v)są połączone krawędzią oraz uposiada dodatnią aktywność $\sigma_u \geq 1,$ oraz
- transfer zmniejsza wartość energii; jeżeli taki transfer zwiększa energię, to jest akceptowany z prawdopodobieństwem:

$$\mathbb{P}(\bar{\sigma}^1 \to \bar{\sigma}^2) = e^{-\beta(E(\bar{\sigma}^2) - E(\bar{\sigma}^1))},\tag{7}$$

gdzie $\bar{\sigma}^1$ oraz $\bar{\sigma}^2$ są konfiguracjami odpowiednio wyjściową oraz po ewentualnym zaakceptowaniu transferu, natomiast $\beta \gg 0$ jest temperaturą odwrotną.

W trakcie tak zdefiniowanej symulacji zarysowuje się graf funkcjonalny aktywności, przez nas zdefiniowany jako podgraf sieci strukturalnej zawierający wszystkie wierzchołki i te krawędzie, które charakteryzują się sumarycznym przepływem aktywności przekraczającym wartość progową tj. $\mathcal{G}' = (\mathcal{V}, \mathcal{E}')$ oraz $\mathcal{E} = \{e \in \mathcal{E} : d_e \geq \theta\}$, gdzie d_e jest sumarycznym przepływem przez synapsę e, θ jest natomiast ustalonym progiem.

4.2 Uzyskane wyniki

Dla grafu \mathcal{G}' analizowane są omawiane wcześniej statystyki z teoriografowe. Pierwszym z nich jest dystrybuanta empiryczna stopni wierzchołków. Uzyskane wyniki potwierdzają zachowanie się rozkładu stopni w sieci funkcjonalnej jako

$$\mathbb{P}(deg_v = k) \propto k^{-2} \tag{8}$$

z występującym czasami odcięciem wykładniczym. Do estymacji wartości wykładnika wykorzystana została regresja liniowa na danych numerycznych, choć jego wartość udało się potwierdzić zaledwie w przybliżeniu. W naszych wynikach uzyskaliśmy średnią wynoszącą $\bar{\gamma} \simeq -2.1$ dla większych próbek oraz $\bar{\gamma} \simeq -1.8$ dla mniejszych z dodatkowo limitowaną początkową aktywnością, zob. Rys. 1. Podkreślić należy, że tę formułę wraz z przybliżonymi wartościami wykładnika uzyskano również w badaniach medycznych [6].

O ile publikacja Eguliza z 2005 roku [6] koncentruje się bezskalowości, to prowadzone później badania poruszają również i "fenomen małego świata", np. [1, 9, 15]. Mając takie dane porównawcze, mogliśmy rozszerzyć analizy modelu o wspomniany aspekt. Punktem wyjścia tych analiz są, jak zostało wcześniej wspomniane charakterystyczna długość ścieżki w grafie L oraz współczynnik klasteryzacji C oraz porównanie tych wyników do wartości odpowiadającym grafom losowym Erdősa-Rényiego.

Dokładniej dla analizowanej sieci przepływu aktywności obliczane są stosunek rzeczywistej klasteryzacji do odpowiadającej grafowi losowemu $\gamma := \frac{C_{Real}}{C_{ER}}$ oraz stosunek podobny charakterystycznej długości ścieżki: uzyskanej do odpowiadającej w grafie losowym: $\lambda := \frac{L_{Real}}{L_{ER}}$. Obliczając wartość ilorazu $\sigma = \frac{\gamma}{\lambda}$ otrzymujemy "wskaźnik małego świata". Dane medyczne, zależnie od sposobu pomiaru, wielkości próbki i stosowanych parametrów progowych zawierają się



Rysunek 1: Wykres uzyskanych wartości wykładnika dla różnych topologii sieci.

w przedziale $\sigma \in (2, 140)$, porównaj Rysunek 2. Dla porównania teoretyczna wartość dla grafów losowych Erdősa-Rényiego wynosi $\sigma_{ER} = 1$. Wartości $\sigma \gg 1$ są charakterystyczne dla grafów małego świata. Nasze rezultaty potwierdzają, że analizowane grafy są istotnie grafami małego świata i dają rezultaty porównywalne z danymi medycznymi. Uzyskane dane z symulacji dają rezultat $\sigma \in (2, 70)$, przy czym wartość to rośnie wraz z wielkością sieci.



Rysunek 2: Porównanie wyników statystyk teoriografowych dla analizowanego modelu oraz badań medycznych. Oznaczenia: Eg — [6], fMRI — dane medyczne, model oparty o szkła spinowe Isinga [8], AF — model przepływu aktywności.

Literatura

- S. Achard, R. Salvador, B. Whitcher, J. Suckling, E. Bullmore, A Resilient, Low-Frequency, Small-World Human Brain Functional Network with Highly Connected Association Cortical Hubs, The Journal of Neuroscience, no 26(1) 2006, pp.63-72, January 2006, doi:10.1523/JNEUROSCI.3874-05.2006
- [2] R. Albert, A. L. Barabasi, Statistical mechanics of complex networks, Reviews of modern physics, Vol 74, January 2002, doi:10.1103/RevModPhys.74.47.

- [3] D. S. Bassett, E. Bullmore, Small-World Brain Networks, The Neuroscientist, Volume 12, Number 6, 2006, doi:10.1177/1073858406293182.
- [4] E. Bullmore, O. Sporns, Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems, Nature Reviews, Neuroscience, vol 10, March 2009, doi:10.1038/nrn2575.
- [5] D. R. Chialvo, Critical brain networks, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Vol. 340, Issue 4, September 2004, doi:10.1016/j.physa.2004.05.064.
- [6] V. Eguiluz, D. Chialvo, G. Cecchi, M. Baliki, V. Apkarian, Scale-free brain functional networks, Physical Review Letters, PRL 94 018102, January 2005, doi:10.1103/PhysRevLett.94.018102.
- [7] P. Erdős, A. Rényi, On random graphs I, Publ. Math. Debrecen 6, 290–297, 1959.
- [8] D. Fraiman, P. Balenzuela, J. Foss, D. R. Chialvo, Ising-like dynamics in large-scale functional brain networks, Physical Review E, Volume 79, Issue 6, June 2009. doi:10.1103/PhysRevE.79.061922
- [9] Y. He, Z. J. Chen, A. C. Evans, Small-World Anatomical Networks in the Human Brain Revealed by Cortical Thickness from MRI, Cerebral Cortex; 17:2407-2419 October 2007, doi:10.1093/cercor/bhl149.
- [10] F. Piękniewski, T. Schreiber, Emergence of scale-free spike flow graphs in recurrent neural networks, Proc. IEEE symposium series in computational intelligence — foundations of computational intelligence. pp. 357–362, April 2007, doi:10.1109/FOCI.2007.371496
- [11] F. Piękniewski, Spontaneous scale-free structures in spike flow graphs for recurrent neural networks, Ph.D. dissertation, Warsaw University, Warsaw, Poland, 2008.
- [12] J. Piersa, F. Piękniewski, T. Schreiber, Theoretical model for mesoscopiclevel scale-free self-organization of functional brain networks, IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 21, no. 11, November 2010. doi:10.1109/TNN.2010.2066989
- [13] J. Piersa, T. Schreiber, Scale-free degree distribution in information-flow graphs of geometrical neural networks. Simulations in concurrent environment Postproceedings of Mathematical Methods in Modelling and Analysis of Concurrent Systems (MASYW 2010), pp. 143–151, IPI PAN, Warsaw, July 2011.
- [14] J. Piersa, Diameter of the spike-flow graphs of geometrical neural networks, accepted for postproceedings 9th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Lecture Notes on Computer Science, September 2011.
- [15] R. Salvador, J. Suckling, M. Coleman, J. Pickard, D. Menon, E. Bullmore, Neurophysiological Architecture of Functional Magnetic Resonance Images of Human Brain, Cerebral Cortex, September 2005;15, pp. 1332–1342, September 2005, doi:10.1093/cercor/bhi016

[16] D. Watts, S. Strogatz, Collective dynamics of 'small-world' networks, Nature, vol 393, pp. 440–442, 4 June 1998, doi:10.1038/30918.

Jarosław Piersa