



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

**AUTOOPTIMIZACIÓN DE UNA RED NEURONAL DE HOPFIELD
BASADA EN EL CONECTOMA DE *C. ELEGANS***

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

PRESENTA:
ALEJANDRO EHECATL MORALES HUITRÓN

TUTOR
DR. TOM FROESE
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATEMÁTICAS APLICADAS Y EN SISTEMAS

CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO

ENERO 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

*A mi madre y mi hermana,
por ser un apoyo constante en mi vida y siempre estar ahí
para aconsejarme y brindarme positivismo.*

Agradecimientos

A mi tutor el Dr. Tom Froese por su extenso conocimiento, paciencia y apoyo que me brindo para iniciarme en la investigación y en general por contagiarme la pasión por la ciencia.

A la Universidad Nacional Autónoma de México y al Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas por brindarme educación de calidad y un ambiente único dentro de Ciudad Universitaria.

Publicaciones

La metodología y resultados de este trabajo se publicaron como artículo en las memorias del congreso *The 2019 Conference on Artificial Life (ALife 2019)* con sede en Newcastle upon Tyne, Reino Unido, donde también se presentó una ponencia sobre el mismo como parte de una de las sesiones sobre redes neuronales. Tanto el artículo como la ponencia llevan el título *Self-optimization in a Hopfield neural network based on the C. elegans connectome*.

También se presentaron dos resúmenes de este trabajo en forma de póster. Uno en *The 20th International Conference on Systems Biology (ICSB 2019)* y otro en *The 3rd International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Robotics (SWARM 2019)*, ambos tuvieron sede en Okinawa, Japón.

Una extensión de los resultados de este trabajo se envió como manuscrito a la revista *Frontiers in Robotics and AI* en la sección *Computational intelligence in Robotics* y el tópico de investigación *Complexity and self-organization*, que lleva como título *Unsupervised learning facilitates neural coordination across the functional clusters of the C. elegans connectome*. Actualmente se encuentra en revisiones.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Redes complejas	2
1.2. Cooperación	3
1.3. Teoría de juegos	4
2. El proceso de autooptimización	7
2.1. Aprendizaje Hebbiano	7
2.2. Red de Hopfield	8
2.3. Procedimiento de autooptimización en una red de Hopfield	8
3. Autooptimización en redes complejas	13
3.1. Reinicio en una red compleja	13
3.1.1. Metodología	14
3.1.2. Resultados	17
3.2. Red con aprendizaje Hebbiano “todo o nada”	17
3.3. Discusión	19
4. Autooptimización en el conectoma de <i>C. elegans</i>	21
4.1. <i>C. elegans</i>	21
4.2. Metodología	22
4.2.1. La red neuronal	23
4.3. Resultados	24
4.4. Discusión	26
5. Conclusiones y trabajo futuro	29

Capítulo 1

Introducción

En inteligencia artificial (IA), la investigación en redes ha cobrado relevancia en los últimos años debido a que modelan fenómenos de diversa índole. Por un lado, las redes complejas inspiradas en redes del mundo real se les puede obtener diversas métricas y realizar análisis de la dinámica de sistemas complejos en dominios tanto biológicos como sociales (Latora et al., 2017). Estas redes poseen características topológicas no triviales, a diferencia de lo que sucede en gráficas regulares o aleatorias. Por otro lado, las redes neuronales artificiales inspiradas en las redes neuronales biológicas, utilizan algoritmos basados en probabilidades para realizar funciones de clasificación y predicción, entre otras. Estas redes usualmente resuelven problemas en situaciones específicas (por ejemplo en ajedrez, Silver et al. (2018)) y su uso se está generalizando en desarrollos para la investigación en IA así como para la industria con la idea de desarrollar modelos que se acerquen más a la meta de replicar la inteligencia humana.

Las redes de Hopfield son redes neuronales artificiales recurrentes. Vistas como sistemas complejos adaptativos, se utilizan para resolver problemas de optimización y modelar memoria asociativa (Watson et al., 2011b). Se ha demostrado que una red neuronal de Hopfield que aprende de sus propias configuraciones de atractores, mediante la reinicialización repetida de la red a un estado arbitrario y aplicando aprendizaje Hebbiano después de que converge, es capaz de formar una memoria asociativa de sus atractores y por tanto facilitar convergencias futuras a mejores atractores. Este procedimiento ha sido probado en estudios acerca de los orígenes de la coordinación social (Froese and Manzanilla, 2018).

La organización de este trabajo es la siguiente: en primer lugar, describiré brevemente conceptos necesarios para mi investigación provenientes de las redes complejas, los estudios de cooperación humana y la teoría de juegos. Después, explicaré el funcionamiento del algoritmo de autooptimización (Watson et al., 2011b), el tipo de redes en las que se aplica y su contexto en estudios de sistemas complejos. Ese algoritmo se implementa en dos modelos descritos en los capítulos 3 y 4. En el capítulo 3 se evalúa un modo de introducir el mecanismo de autooptimización en una red compleja con in-

1. Introducción

teracción en teoría de juegos de manera que favorezca la cooperación en una red social. En el capítulo 4 se evalúa el proceso de autooptimización en el conectoma de *C. elegans*: el único ser vivo cuyo sistema nervioso ha sido mapeado en su totalidad. El mapa de sus conexiones neuronales (llamado conectoma) se traducirá en una red de Hopfield de tiempo y estado discreto, dándole un tratamiento como multigráfica dirigida. Lo anterior indaga si el proceso de autooptimización es biológicamente plausible y puede aplicarse en redes más grandes respecto a las usadas en otros estudios. Por último, se darán las conclusiones y el trabajo futuro.

Todas las implementaciones se realizaron en el lenguaje de programación PYTHON. En específico, para el manejo de gráficas se utilizó la biblioteca *networkx* y para diversas operaciones con arreglos se utilizó *numpy*. Los modelos de red de Hopfield se ejecutaron en el clúster del IIMAS. Para la visualización del conectoma de *C. elegans* se utilizó el software *Cytoscape*.

1.1. Redes complejas

Una gráfica (o red) en general consiste de un conjunto de nodos y enlaces entre ellos (aristas). Las propiedades generales y abstractas de las redes se estudian mediante la teoría de gráficas (Diestel, 2017). Las redes complejas son gráficas que usualmente representan sistemas complejos, mediante los cuales se pueden modelar sistemas sociales, neuronas, mercados financieros, el internet, etc. El estudio de las redes complejas ha recibido mucha atención. Diversas características en su estructura como las redes de mundo pequeño y las redes de escala libre han sido propuestas porque se ajustan a muchas redes que encontramos en la realidad. Estudiar sus propiedades nos informa de propiedades que tienen los sistemas que modelan.

Dos ejemplos de métricas relevantes en este trabajo son el coeficiente de acumulación (C) y el camino promedio más corto (L). La primera mide el número de triángulos a los que pertenece un nodo lo que se traduce en qué tan probable es que dos vecinos de un nodo arbitrario i estén conectados. La segunda es la distancia promedio sobre todos los pares de nodos, entendiendo la distancia entre dos nodos d_{ij} como la longitud del camino más corto del nodo i al nodo j . Las redes de mundo pequeño se caracterizan por tener una longitud de camino promedio muy pequeña y simultáneamente un coeficiente de acumulación largo.

Un modelo para producir una red de mundo pequeño con N nodos es el de Watts and Strogatz (1998). Consiste en que a partir de una gráfica circular (N, m) donde N es el número de nodos y $1 < m < N/2$ que indica el número de enlaces a los $2m - 2$ nodos más cercanos para formar una latiz circular. Posteriormente se reconectan sus aristas con cierta probabilidad p ($0 \leq p \leq 1$). Reconectar una arista significa cambiar uno de sus extremos de nodo con la condición de que dos vértices no pueden tener más de una arista entre ellos y un vértice no puede estar conectado a sí mismo con una arista. El resultado de reconectar todas las aristas ($p = 1$) da como resultado una gráfica aleatoria.

En la Figura 1.1 se visualiza el comportamiento de L y C cuando varía la probabilidad de reconexión p (Latora et al., 2017).

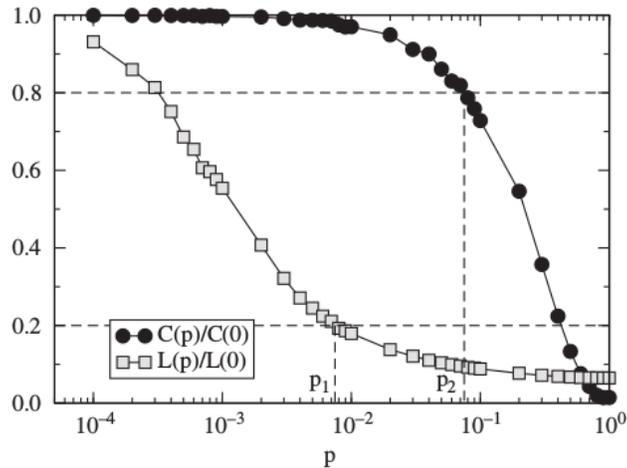


Figura 1.1: Gráfico que muestra el coeficiente de acumulación (C) y el camino promedio más corto (L) como una función de p en el modelo de Watts-Strogatz con $N = 1000$ y $m = 5$. Figura tomada de Latora et al. (2017). Los valores reportados L y C están normalizados.

1.2. Cooperación

Desde el punto de vista de diferentes disciplinas como la antropología, se han estudiado los mecanismos de la cooperación humana: su evolución desde los pequeños grupos humanos de cazadores hasta la revolución cultural y las grandes y complejas sociedades que tenemos en la actualidad, Fuentes (2004). Dado que evolutivamente los seres humanos y otras especies son egoístas como un mecanismo de adaptación y supervivencia, el surgimiento de la cooperación parece contradictorio, y eso ha llevado a preguntas acerca de cómo las sociedades se mantienen en grandes grupos, dependiendo unos de otros, actuando de manera altruista y en muchos casos de una manera totalmente opuesta.

El trabajo de Nowak (2006) muestra algunos mecanismos de cooperación en términos de dos simples parámetros que son el costo c y el beneficio b . Los mecanismos son los siguientes: selección de parentesco, reciprocidad directa, reciprocidad indirecta, reciprocidad en red y selección grupal. Cada uno representable como un juego cuya matriz de pagos es de 2×2 . Estas definiciones aún se usan en la actualidad para estudios de dinámica social (Santos et al., 2018).

1. Introducción

1.3. Teoría de juegos

La teoría de juegos es el estudio matemático de las interacciones entre uno o más individuos cuando se asignan de manera predeterminada recompensas de acuerdo a las decisiones que tomen los involucrados, enfocándose en el resultado de esas interacciones y suponiendo que los agentes son racionales (Binmore, 2007). En otras palabras, un juego es una situación que involucra individuos con intereses en conflicto. La teoría de juegos supone que los agentes son racionales que siempre actúan en su propio interés, situación que no ocurre necesariamente en la realidad y eso puede traer desventajas al modelar situaciones con individuos sociales. Sin embargo, la teoría de juegos es muy usada para el diseño de dispositivos, redes o incluso organizaciones, ya que tener en cuenta participantes egoístas en interacciones estratégicas puede conducir a mejores resultados en los modelos.

La teoría de juegos clásica se deriva de la economía y define diferentes tipos de juegos. Los que usaré en la presente investigación son de dos jugadores y plantean dilemas de cooperación. El dilema del prisionero es un juego de dos jugadores que modela la siguiente situación: dos criminales son arrestados por cometer un delito, se les ofrece cierta cantidad de años en prisión en todos los casos en los que cada uno, por separado, confiesa o niega haber cometido el crimen. Es un juego de dos jugadores (agentes) y dos estrategias discretas, las cuales son confesar (C) y negar¹ (N), para confesar a menudo se utiliza la palabra “cooperar”, relevante en el contexto de utilizar este juego para estudiar la cooperación. El par de jugadores reciben recompensas en cada combinación de C y N como se puede observar en el cuadro 1.1. Las recompensas se denotan por sus siglas en inglés: *R* para la recompensa que obtienen si los dos agentes cooperan, *P* cuando los dos niegan, *S* y *T* para los casos en que uno confiesa y el otro niega.

Cuadro 1.1: Dilema del prisionero

Agente 2 Agente 1	Confesar (C)	Negar (N)
Confesar (C)	<i>R, R</i>	<i>S, T</i>
Negar (N)	<i>T, S</i>	<i>P, P</i>

Variantes del juego son cambiar los valores de *P*, *R*, *S* y *T* bajo el mismo esquema:

- El juego de la gallina, también llamado el del montón de nieve (*snowdrift*): $T >$

¹A los agentes que niegan les llamo “desertores” siguiendo la traducción del inglés que aparece en la literatura.

$$R > S > P$$

- La casa del ciervo (*stag hunt*): $R > T > P > S$
- El dilema del prisionero: $T > R > P > S$

Este juego y sus variantes, utilizado en diversos tipos de juegos (coordinación, cooperación, estrategia, etc.), es un estándar en el análisis de teoría de juegos.

Con el objetivo de modelar el comportamiento estratégico y cooperativo en individuos, la teoría de juegos ha tomado ideas de la evolución biológica para aplicarlas en juegos donde no necesariamente tenemos seres humanos con pensamiento complejo. La teoría de juegos evolutiva utiliza mecanismos como el de la selección natural, la réplica de paquetes de material genético (cuyo mecanismo se considera un jugador llamado replicador), dinámicas de estabilidad en ecosistemas, entre otros. Esta rama de la teoría de juegos ha dado pistas en el estudio de la evolución de la cooperación humana y sobre la pregunta de por qué existen mecanismos de reciprocidad en sistemas humanos reales también en especies animales, incluso durante situaciones donde están presentes severos dilemas sociales en los que la teoría muestra que los jugadores deben actuar en formas no cooperativas (Tanimoto, 2015). En otras palabras, ¿porqué la cooperación está más extendida de lo que la teoría de juegos evolutiva predice (la selección natural favorece al egoísta y al fuerte)?

Sin embargo, otros autores como Santos and Pacheco (2005) han estudiado el problema que representa explicar la cooperación y las acciones altruistas basándose en métodos de juegos y teoría de gráficas, en particular de redes complejas. En estos estudios, los elementos de una población se ponen en los vértices de una gráfica, cuyas aristas definen la red de contactos de los elementos. Antes de hablar con más detalle de este tipo de modelos, en el siguiente capítulo hablaré de cómo funciona el mecanismo de autooptimización y las diferentes réplicas que implementé del mismo.

En el contexto de la sección previa de redes complejas, Cassar (2007) presenta un trabajo en el que evalúa juegos como los vistos en la sección anterior dentro de gráficas aleatorias y de mundo pequeño. A través de cierto número de iteraciones en las que las recompensas de los individuos cambian en función a las de sus vecinos, concluye que la topología de la red influye en la medida en que los individuos cooperan y se coordinan. Este estudio es un precedente para el capítulo 3 en el que utilizaré un modelo de red aleatoria con teoría de juegos en la que la cooperación prevalece aun cuando los individuos ajustan sus conexiones.

1. Introducción

Capítulo 2

El proceso de autooptimización

En este capítulo se presenta la definición de una red de Hopfield de tiempo discreto a la que se modela un proceso de autooptimización como técnica de aprendizaje no supervisado. Este modelo será utilizado en capítulos posteriores con condiciones particulares.

2.1. Aprendizaje Hebbiano

Donald O. Hebb fue un neuropsicólogo que estableció un postulado sobre aprendizaje que es el más antiguo y el más famoso entre todas las reglas de aprendizaje (Hebb, 2005). El postulado indica que cuando el axón de una célula A está lo suficientemente cerca para excitar a una neurona B y repetida o persistentemente B toma parte en la acción activándose, ocurre un proceso de crecimiento o cambio metabólico en una o las dos células de manera que la eficiencia de A , como una célula que activa B , se incrementa.

El postulado de Hebb puede replantearse como una regla en dos partes del siguiente modo (Haykin, 2008):

- Si dos neuronas a cada lado de una sinapsis (conexión) se activan simultáneamente (es decir, sincronamente), entonces la fuerza de esa sinapsis aumenta selectivamente.
- Si dos neuronas a cada lado de una sinapsis se activan asincrónamente, entonces tal sinapsis se debilita o desaparece.

La formulación matemática del aprendizaje Hebbiano considera un peso sináptico w_{kj} de la neurona k con señales presinápticas y postsinápticas x_j y y_k , respectivamente. El cambio aplicado al peso w_{kj} en el tiempo n se expresa de la siguiente forma general:

$$\Delta w_{kj}(n) = f(y_k(n), x_j(n)) \quad (2.1)$$

2. El proceso de autooptimización

Donde $f(\cdot, \cdot)$ es una función de las señales presinápticas y postsinápticas. En lo subsecuente, se utilizará la forma más básica del aprendizaje Hebbiano, descrita por:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta y_k(n) x_j(n) \quad (2.2)$$

Donde η es una constante positiva que define la tasa de aprendizaje.

2.2. Red de Hopfield

En su forma más general, una red neuronal es una máquina diseñada para modelar el modo en que el cerebro lleva a cabo una tarea particular o una función de interés (Haykin, 2008). Usualmente la red se implementa usando componentes electrónicos o una computadora digital. Las redes neuronales emplean elementos de cómputo simples llamados “neuronas” o “unidades de proceso” y han sido ampliamente utilizadas para modelar tareas de aprendizaje o memoria.

Una red de Hopfield es una red neuronal recurrente. Es uno de los modelos más estudiados para reproducir la memoria del cerebro (Hopfield, 1982), así como también se ha usado para reproducir una memoria asociativa (Watson et al., 2011b). El modelo de Hopfield de estado discreto y tiempo discreto consiste en n unidades totalmente acopladas, es decir, cada neurona está conectada con todas las demás excepto ella misma. La red es también simétrica ya que el peso w_{ij} de la conexión entre la neurona i y la neurona j es igual al peso w_{ji} de la conexión de j a i .

2.3. Procedimiento de autooptimización en una red de Hopfield

El modelo de autooptimización usado en este trabajo está basado en el modelo de Watson et al. (2011b), que utiliza el modelo original de red de Hopfield (1982). Se tienen dos valores discretos para los estados de la red $s_i = \pm 1$ que representan la actividad de una neurona. La dinámica del modelo incluye actualizaciones asíncronas de los estados, que se calculan con la siguiente ecuación:

$$s_i(t+1) = \theta \left[\sum_j^N w_{ij} s_j(t) \right] \quad (2.3)$$

donde w_{ij} es el peso de la conexión entre la neurona i y la neurona j , θ es la función de Heaviside que toma valores $+1$ y -1 con argumentos positivos y negativos, respectivamente.

Se distinguen dos aspectos en los pesos de las aristas (w_{ij}). Por un lado, guardamos en w_{ij}^O la configuración original de pesos al inicio del proceso y por otro lado en w_{ij}^L guardamos los cambios que se van acumulando durante el aprendizaje Hebbiano:

$$w_{ij} = w_{ij}^O + w_{ij}^L \quad (2.4)$$

En el modelo de red neuronal de Hopfield implementado por Watson et al. (2011b), una conexión entre un nodo i y un nodo j está satisfecha si $s_i s_j w_{ij} > 0$, de otro modo está insatisfecha o en tensión. La satisfacción es una medida de coordinación neuronal: si dos nodos tienen el mismo signo están coordinados y más conexiones coordinadas nos da a una red autoorganizada. Watson y sus colegas llaman a esta métrica satisfacción de restricciones (*constraint satisfaction*) porque un nodo i satisface una restricción dada por su interacción con el nodo j si $s_i s_j w_{ij} > 0$, es decir, si están coordinados.

El signo de w_{ij} se define inicialmente de manera aleatoria en el intervalo $(-1, 1)$, pero no es muy relevante en la ecuación de la satisfacción porque cuando la red cambia mediante actualizaciones de los estados de las neuronas y pesos en las conexiones, el aprendizaje Hebbiano se encarga de fortalecer las conexiones satisfechas y disminuir las que no lo son por lo que una conexión satisfecha se mide con la coordinación de los signos de los nodos que la componen. Más adelante veremos que bajo otras condiciones, iniciar los pesos positivos o cierto porcentaje de ellos negativos tiene un efecto en la evolución de la red.

Mientras que la interacción actual con los vecinos de un nodo determina el cambio de estado, la energía del sistema representa una medida de las conexiones satisfechas con la configuración original de pesos, w^O , permanece insatisfecha. Esta energía se calcula como sigue:

$$E = - \sum_{ij}^N w_{ij}^O(t) s_i(t) s_j(t) \quad (2.5)$$

El aprendizaje Hebbiano se debe aplicar a todas las conexiones del sistema para incrementar la variación de atractores y reforzar el aprendizaje, esto es, mediante un cambio en los pesos $\Delta w_{ij} = \delta s_i s_j$ (donde $\delta > 0$ es la tasa de aprendizaje). La fórmula es la siguiente:

$$w_{ij}^L(t+1) = w_{ij}^L(t) + \delta s_i(t) s_j(t) \quad (2.6)$$

El algoritmo de autooptimización (que a partir de ahora se le llamará algoritmo de reinicio-convergencia) sigue repetidamente la siguiente secuencia de pasos:

- Los estados de las neuronas son asignados aleatoriamente.
- Los estados de la red se actualizan de manera asíncrona con la ecuación 2.3 durante t pasos. La elección de t depende del tamaño de la red y debe ser suficientemente grande para que el estado de la red medido con la ecuación de energía (2.5) resulte con frecuencia en un atractor.

2. El proceso de autooptimización

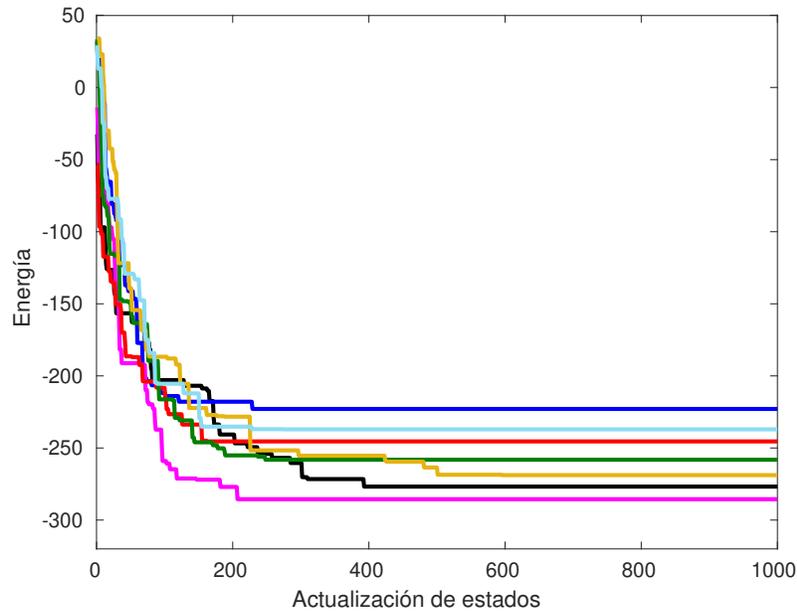


Figura 2.1: Ejemplos del comportamiento de la energía de la red tras 1000 actualizaciones asincrónicas de estados (7 ejecuciones diferentes), en todos los casos se tiene un comportamiento decreciente que finalmente termina en un atractor puntual.

- Se aplica el aprendizaje Hebbiano a las conexiones de la red con la ecuación 2.6.

Aplicando varias veces los pasos anteriores, el sistema comenzará a formar una memoria asociativa de sus propios atractores. La configuración que de manera no supervisada tienen los estados después de cada reinicio (la aleatorización de los estados) hace probable que el estado de la red, medido con la función de energía, converja a un atractor óptimo global, incluso en el caso en el que ese óptimo sea difícil de encontrar debido a la presencia de múltiples óptimos locales. En la Figura 2.1 se puede observar el comportamiento de la evolución del sistema tras llegar a diversos atractores locales y en la Figura 2.2 vemos a convergencia a un óptimo global.

Visto como sistema complejo adaptativo, el proceso de autooptimización que acabo de describir puede modelar tanto redes neuronales (Watson et al., 2011a) como coordinación social (Watson et al., 2011b). A continuación presento una forma de aplicar este proceso a un problema de modelado social con teoría de juegos.

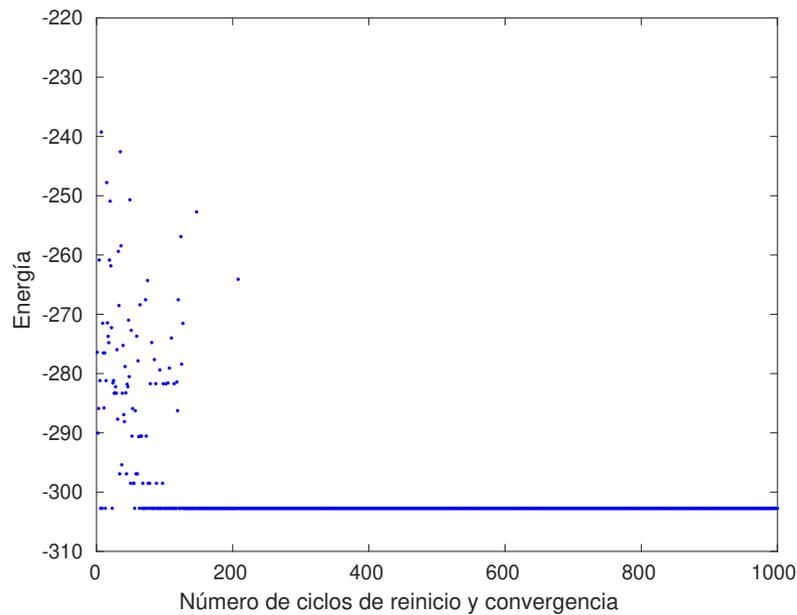


Figura 2.2: Comportamiento de la energía de la red tras aplicar el algoritmo de reinicio-convergencia 1000 veces: en cada paso, cada punto representa un atractor alcanzado como en los ejemplos de la Figura 2.1, después del cual se aplica el aprendizaje Hebbiano que consiste en aumentar o disminuir el peso de cada conexión una cantidad pequeña (dada por la tasa de aprendizaje); posteriormente, se aleatorizan todos los estados y comenzamos un nuevo ciclo de actualizaciones asíncronas. Se puede observar que tras aplicar este proceso repetidamente, se empieza a formar una memoria asociativa que permite la convergencia del valor de la energía del sistema a un atractor óptimo global.

2. El proceso de autooptimización

Capítulo 3

Autooptimización en redes complejas

A continuación presentaré los resultados de combinar el modelo de autooptimización de Watson et al. (2011b) con una red compleja cuyos nodos representan individuos que interactúan en juegos simétricos de dos individuos, pertenecientes a la teoría de juegos. En primer lugar, se evaluará el efecto del mecanismo de reinicio de estados aplicado a un modelo de individuos en una red social que actúan de acuerdo al juego del dilema del prisionero (sección 3.1). En segundo lugar, modificaré la forma en que se aplica el aprendizaje Hebbiano en el modelo de red de Hopfield de modo parecido a la teoría de juegos (sección 3.2).

Estos resultados son parte del trabajo de la tesis que ejemplifican un uso potencial del proceso de autooptimización en un contexto de modelado social. Sin embargo, no se les dará continuidad en el capítulo siguiente que es la parte principal de la tesis. La razón de lo anterior es que los resultados de este capítulo pueden ser mejorables y considero que tienen el potencial para ser analizados de manera más profunda en un trabajo futuro.

3.1. Reinicio en una red compleja

El algoritmo de reinicio-convergencia de Watson et al. (2011b) (sección 2.3) es simple y con potencial para aplicarse en otros dominios, no sólo a redes neuronales. Se puede aplicar por ejemplo en redes reguladoras de genes, redes sociales, redes ecológicas. Funciona correctamente si se asume que esas redes pueden ser descritas en términos del formalismo de Hopfield (Watson et al., 2011c).

Este algoritmo se ha implementado en modelos de redes sociales participando en debates acerca de los orígenes de la complejidad social (Froese, 2018). La idea básica es que la repetición del proceso de reinicio-convergencia podría tener un equivalente en

3. Autooptimización en redes complejas

la dinámica de un proceso ritual: una comunidad lidia con las restricciones de la vida diaria y luego entra en un estado límite caracterizado por su “antiestructura”, y luego se vuelve a reintegrar con las restricciones normales de la vida diaria. Sin embargo, esos modelos han enfrentado dificultades en relacionarse con debates sobre los orígenes de la cooperación, en donde usualmente se utiliza la teoría de juegos.

A continuación presentaré el resultado de aplicar el mecanismo de reinicio-convergencia en el modelo de red compleja de (Santos et al., 2006) con el objetivo de observar si es posible generalizarlo a sistemas que no se satisfacen restricciones de una red de Hopfield, es decir, donde las redes no son gráficas completas ni estáticas.

Las similitudes entre la red de Hopfield y la red compleja con teoría de juegos, donde el proceso de autooptimización se describe como un tipo especial de juego, se explora en un trabajo de Davies et al. (2011). Esto da una pista de que el algoritmo de autooptimización se puede transferir de un formalismo al otro después de hacer los respectivo ajustes.

3.1.1. Metodología

El modelo de Santos et al. (2006) consiste en medir la cooperación en una red cuyos nodos representan individuos que tienen dos estrategias: cooperadores y desertores. En la red se realizan cambios tanto en la estrategia de los individuos como en las conexiones que ellos mismos crean y destruyen. Estos cambios se llevan a cabo con base en uno de los siguientes dilemas sociales de cooperación: el juego de la gallina, la caza del ciervo o el dilema del prisionero (ver sección 1.3). Los cambios en la estrategia de los cooperadores y desertores establecen una interdependencia entre las estrategias individuales y la estructura de la población, lo que hace al modelo coevolutivo.

En este modelo se tienen dos dinámicas de actualización de la red. En una actualización síncrona, todas las estrategias de los nodos (individuos) se actualizan al mismo tiempo, de acuerdo al estado de la red en ese momento. En una actualización asíncrona, la actualización de los estados se realiza uno a la vez.

También se introduce un parámetro W , con el que los individuos adaptan sus conexiones, tenemos dos casos:

- Cuando $W > 0$, una actualización de estrategia se elige con una probabilidad de $(1 + W)^{-1}$, de otro modo se realiza una actualización estructural, ambas de manera asíncrona:
 - Actualizar la estrategia significa que los individuos deciden si siguen siendo cooperadores o desertores, o cambiar su estado. En una actualización de la estrategia, se seleccionan un individuo A y uno de sus vecinos B elegido aleatoriamente. Luego, ellos interactúan con sus vecinos de acuerdo al dilema social especificado, juntando sus recompensas totales $\Pi(A)$ y $\Pi(B)$, respectivamente. La estrategia de B reemplaza la de A con una probabilidad

p dada por la distribución de Fermi ($p = [1 + e^{-\beta[\Pi(B) - \Pi(A)]}]^{-1}$, con $\beta = 0,005$) proveniente de la mecánica estadística, pero aplicable también a modelos de evolución cultural (MacCoun, 2015).

- En una actualización estructural, los individuos interactúan por medio de las aristas en la gráfica. B (A) se satisface (no se satisface) si A (B) es un cooperador (desertor). Con una probabilidad p (dada por la distribución de Fermi), A redirecciona el enlace con un vecino de B . Con una probabilidad de $1 - p$, A permanece conectado a B .
- Con $W = 0$, la red actualiza sus estrategias de manera síncrona, de acuerdo a una probabilidad dada por la función de distribución de Fermi.

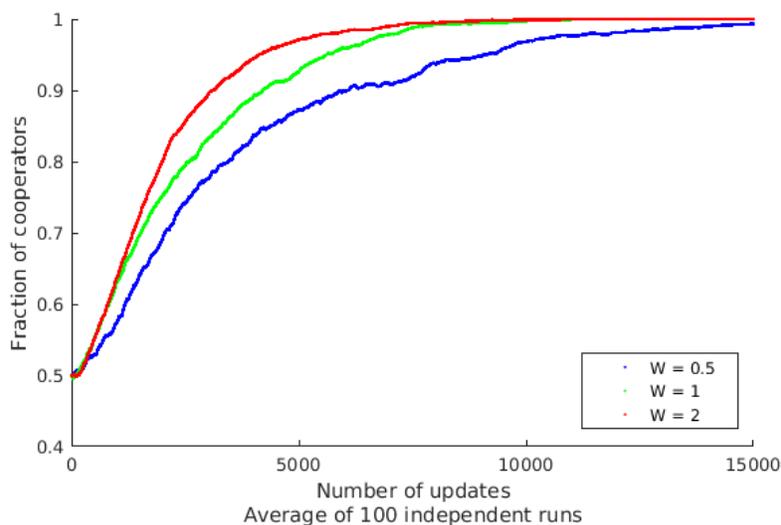


Figura 3.1: Comportamiento del modelo de Watson et al. con el juego de la caza del ciervo (*stag hunt*) donde $R = 1$, $T = 0,5$, $P = 0$ y $S = -0,5$. Se mide el porcentaje de individuos cooperadores en la red tras cada actualización. Los valores de W que son mayores favorecen la cooperación alcanzando la totalidad de individuos cooperadores en la red más rápido.

En la Figura 3.1 se puede observar una mejora en la adaptabilidad de la red cuando los individuos tienen más posibilidades de reconectar con otros tomando en cuenta su utilidad, que provoca que la red llegé más rápido a tener la totalidad de cooperadores. De manera más general, en la Figura 3.2 se muestra que aumentar el parámetro adaptativo W propicia que los estados finales de la red tengan 100% cooperadores, y cómo es esa relación de acuerdo al dilema de cooperación que se trate.

3. Autooptimización en redes complejas

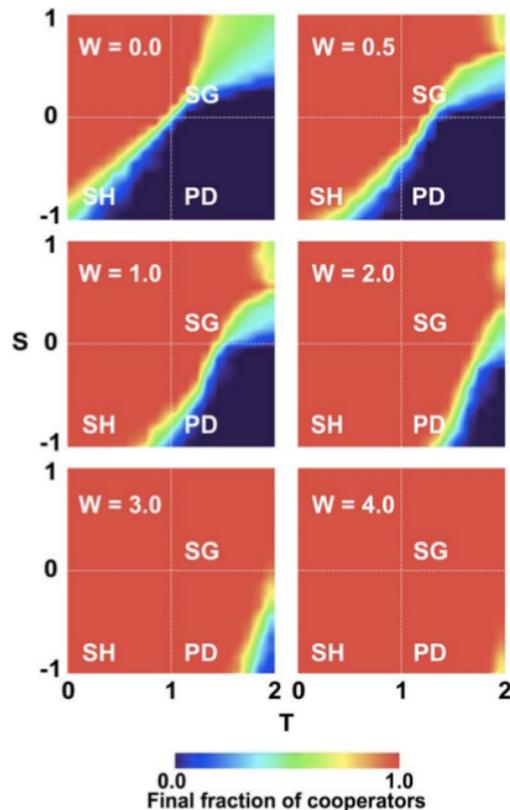


Figura 3.2: Resultados de la proporción de ejecuciones exitosas que terminan en 100% cooperadores para diferentes valores de W en los tres diferentes dilemas clásicos de cooperación: el dilema del prisionero (PD), el juego de la gallina (SG) y el juego de la caza del ciervo (SH) con $R = 1$ y $P = 0$ fijos. Figura tomada de Santos et al. (2006). $N = 10^3$ y $m = 30$ y $p = 1$ de acuerdo con la construcción de una gráfica aleatoria de acuerdo al procedimiento detallado en la sección 1.1

Cambio en el modelo

Para modificar el modelo de Santos et al. a la luz del modelo de Watson et al., el método que propongo es el siguiente:

- Se comienza con 50% de cooperadores distribuidos aleatoriamente y 50% de desertores. Las conexiones y las estrategias evolucionan durante 5000 generaciones, cada generación representa un cambio síncrono o asíncrono de acuerdo al procedimiento de Santos et al. (2006) descrito anteriormente.
- Después se aleatorizan las estrategias de los individuos de nuevo a 50%, y se vuelven a realizar los cambios síncronos y asíncronos.

Se espera que la aleatorización de las estrategias tenga el mismo efecto que tiene la aleatorización de estados en el algoritmo de reinicio-convergencia de la red de Hopfield visto en la sección 2.3. Esto quiere decir que así como aleatorizar los estados de las neuronas tiene el efecto de crear la memoria asociativa de sus atractores, aleatorizar las estrategias tiene el efecto de que la totalidad de individuos cooperadores de la red compleja llegue más rápido al 100 % tras alcanzar la totalidad de individuos cooperadores después del reinicio. En otras palabras, la red compleja actualiza incrementa o disminuye el número de cooperadores en cada paso. Después de cierto número de actualizaciones (haya llegado o no al 100 % de cooperadores) reinicia las estrategias de los individuos, luego se espera que la red llegue más rápido a un estado donde haya un número de cooperadores alto más rápido que antes de hacer la aleatorización.

Para este nuevo experimento se considera una población de $N = 50$ individuos representados en una gráfica aleatoria con conectividad promedio $m = 6$ de acuerdo al procedimiento de generación a partir de latices circulares de la sección 1.1. Se tomaron en cuenta los valores del dilema de cooperación de la Figura 3.1 donde $W = 3$.

3.1.2. Resultados

Los resultados de introducir los reinicios en las estrategias de la red compleja, se observan en la Figura 3.3. En general, la red llega por sí sola a un alto porcentaje de cooperadores en algunos casos o a todos cooperadores en otros, y no es necesario un reinicio de las estrategias de los individuos para mejorar esa tendencia. Tras cada reinicio se observa que la proporción regresa a mitad cooperadores y mitad desertores como es esperado; tiempo después, la red vuelve a aumentar la cooperación, pero no se observa un cambio tras el reinicio que indique presencia de memoria asociativa como en el caso de la autooptimización de la red de Hopfield. Si se varían los parámetros S y T de los dilemas de cooperación se tiene el mismo resultado, la diferencia es que en algunos casos la red no alcanza un alto porcentaje de cooperadores antes del reinicio. El ejemplo que se grafica toma en cuenta el caso más favorable de cooperación de acuerdo al modelo original.

Con el fin de buscar otra posibilidad de juntar los dos modelos y observar una regularidad, presento la introducción de un juego en el procedimiento de reinicio-convergencia de la red de Hopfield.

3.2. Red con aprendizaje Hebbiano “todo o nada”

Para introducir otras variantes al experimento realizado en la sección anterior, se diseñó un experimento que consiste en hacer lo opuesto: introducir una condición del modelo de red con teoría de juegos dentro de la red de Hopfield. En este caso el modelo de Watson et al. (2011b) descrito previamente, tendrá un cambio cuando se aplica el aprendizaje Hebbiano.

3. Autooptimización en redes complejas

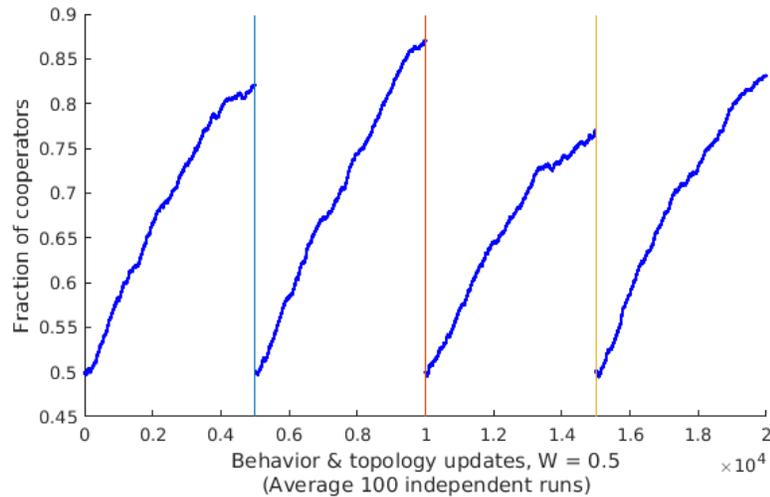


Figura 3.3: Resultados del promedio de 100 ejecuciones, cada una de las cuales consiste en el procedimiento propuesto: durante 5000 actualizaciones de estrategia y estructura se mide el porcentaje de cooperadores de la red, tras lo cual, se aleatorizan las estrategias (cooperar o desertar) y se vuelve a empezar con otras 5000 actualizaciones

Cuando aplicamos aprendizaje Hebbiano en la red de Hopfield, se suma (o resta) una cantidad $r = \delta s_i(t)s_j(t)$ usualmente pequeña a cada valor de las aristas w_{ij} con el fin de incrementar (o reducir) la fuerza de una conexión. El signo de esa cantidad depende de los signos de los estados de los nodos s_i, s_j que la componen y la magnitud de la tasa de aprendizaje δ . En el nuevo modelo, en lugar de añadir o sustraer esa cantidad de cada conexión, vamos a asignar a cada conexión el valor de cero si r es positiva o uno si es negativa.

En el modelo de red compleja con teoría de juegos, una estrategia estructural de dos individuos A (cooperador) y B (desertor) consiste en reconectar A con algún vecino de B seleccionado al azar. Esa conexión perdida entre A y B puede verse como una arista de peso cero en una red de Hopfield que no agrega nada a la energía del sistema. Por otro lado, la conexión nueva de A con el vecino de B agrega una arista no existente previamente entre esos dos nodos, como si en una red de Hopfield cambiáramos el peso de una arista de cero a un número positivo. En ambos casos estamos estableciendo una condición de "todo o nada" en el peso de una conexión (o hay conexión o no la hay) dentro de una red compleja, en lugar de hacer pequeños cambios en el peso de las aristas como lo hace el aprendizaje Hebbiano.

Otra forma de pensar en esta modificación es que estamos aplicando en el aprendizaje Hebbiano los resultados de un juego de coordinación entre los estados de los nodos que forman una conexión: si tienen el mismo signo se le asigna a la conexión peso igual a uno, en otro caso la conexión tiene valor cero.

El resultado de aplicar la variante descrita en esta sección se puede visualizar en la Figura 3.4 para el caso de la convergencia a un atractor local tras sucesivas actualizaciones. Se observa que hay convergencia a un atractor. Si trabajamos la red de Hopfield con interpretación social, la función de energía se invierte cambiando de signo y se le llama utilidad, de este modo se busca encontrar un máximo de utilidad para nuestro sistema social. Al contrario, cuando se trata de neuronas se busca minimizar la energía impuesta por las restricciones de la red: es el mismo resultado pero con el signo cambiado.

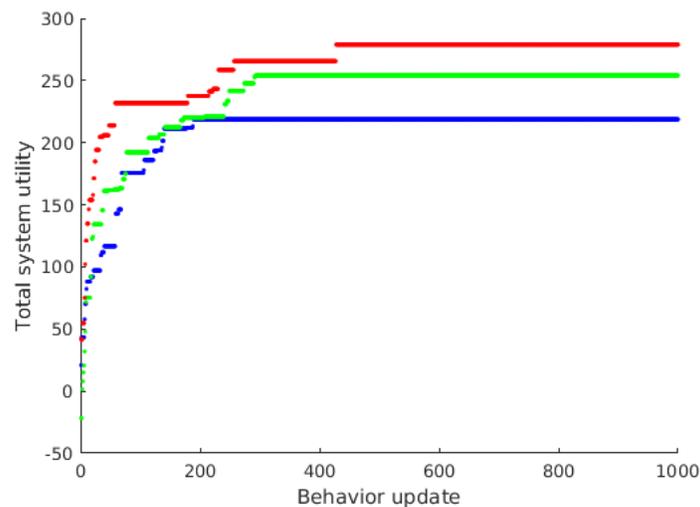


Figura 3.4: Resultado de aplicar 1000 actualizaciones sucesivas a una red de Hopfield de 50 individuos con aprendizaje Hebbiano en el esquema “todo o nada”

En la Figura 3.5 se puede observar que, contrario al atractor global que maximiza la utilidad del sistema, la utilidad de nuestra red se queda estática (tras sucesivos reinicios) en un valor que no aumenta, y por tanto no llega a un máximo global.

3.3. Discusión

En este capítulo se juntó, por una parte, el procedimiento de reinicio y convergencia de una red de Hopfield en una red compleja con interacción en teoría de juegos. Por otra parte, una modificación en el aprendizaje Hebbiano en el modelo de red de Hopfield que es similar a la acción de un juego de coordinación sobre los valores de las conexiones.

Ninguno de estos experimentos arrojó el resultado esperado, pero decidí incluirlos para evidenciar la complejidad al tratar de mezclarlos. Las redes complejas con interacción en teoría de juegos han sido ampliamente investigadas desde hace varios años, debido a su importancia en el estudio de la complejidad social en específico de

3. Autooptimización en redes complejas

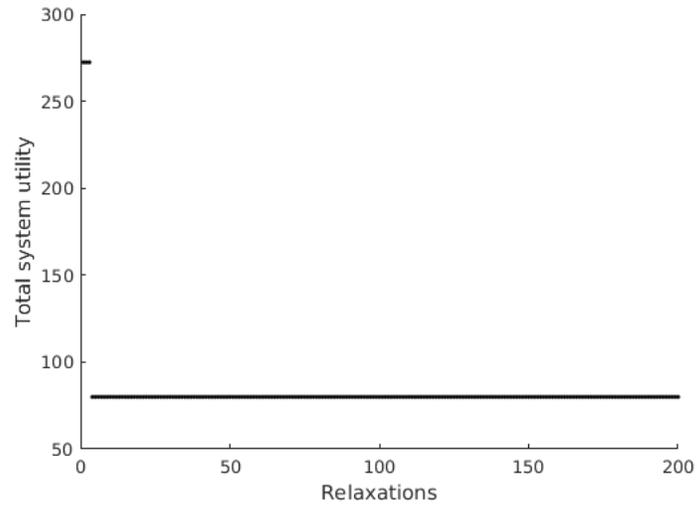


Figura 3.5: Resultado de aplicar 300 ciclos de reinicio-convergencia actualizaciones sucesivas a una red de Hopfield de 50 individuos con aprendizaje Hebbiano en el esquema “todo o nada”

la cooperación y a que se puede programar fácilmente en una computadora. Incluyo estos resultados como precedente para investigaciones en el futuro, así como para dar contexto al siguiente capítulo.

Capítulo 4

Autooptimización en el conectoma de *C. elegans*

El proceso de autooptimización visto previamente ha sido probado hasta ahora en redes neuronales artificiales relativamente pequeñas con topologías regulares o aleatorias. En este capítulo presento la investigación correspondiente a implementar el proceso de autooptimización en una red neuronal biológica real: el conectoma de *C. elegans*.

4.1. *C. elegans*

Caenorhabditis elegans es un gusano nemátodo que mide aproximadamente un milímetro. Está conformado únicamente por 959 células, de las cuales 302 pertenecen al sistema nervioso. *C. elegans* es un modelo para el estudio de casos en biología (Girard et al., 2006), debido a su pequeñez, reducido número de células y rápida reproducción. *C. elegans* fue el primer organismo multicelular al que se secuenció su genoma en su totalidad (Waterston and Sulston, 1998), y además es el primer y único animal hasta la fecha del que se ha completado el mapeo de sus conexiones sinápticas, llamado conectoma (White et al., 1986). El acceso a la topología de las conexiones neuronales de este ser vivo tan básico nos provee una red completa de un sistema biológico que puede ser utilizada para evaluar y probar modelos computacionales del cerebro, como primer paso antes de que se hayan completado mapeos completos de otros conectomas más grandes. Aunque la diferencia entre el número de neuronas en el ser humano y *C. elegans* es muy grande, el conectoma de *C. elegans* es más tratable computacionalmente en términos de costo en memoria y procesamiento a la hora de simularlo.

La ciencia de redes provee información adicional referente al conectoma de *C. elegans*, como por ejemplo las propiedades estadísticas y topológicas de la red creada a partir del conectoma (Watts and Strogatz, 1998; Varshney et al., 2011). En términos de

4. Autooptimización en el conectoma de *C. elegans*

la dinámica de la red, los modelos de simulación comienzan a tener un rol mayor en el ciclo de experimentación-teoría en un intento de entender mejor las bases neurales del comportamiento de *C. elegans* (Izquierdo, 2018).

Si bien estos modelos en simulaciones han funcionado en redes pequeñas, no se han probado con un conectoma completo, por lo que las propiedades del estado de espacios del conectoma aún se desconocen. De lo que trata este capítulo, es abstraer el comportamiento situado de *C. elegans* y enfocarse en la dinámica del conectoma completo. En particular, se tiene el interés de determinar si el conectoma es capaz de autooptimizar su propia conectividad, formando una memoria asociativa de sus atractores de modo que la convergencia sea dirigida a mejores atractores.

A continuación, se aplicará el algoritmo de reinicio-convergencia en la versión más reciente del conectoma de *C. elegans* elaborada por Jarrell et al. (2012). La base de datos contiene información del sistema nervioso de un organismo hermafrodita (los machos no son frecuentes, con 0.1 %) como la dirección sináptica, tipo de conexión sináptica (sinapsis o *gap junction*) y el número de sinapsis entre dos neuronas. El conectoma fue convertido a una gráfica dirigida múltiple, con neuronas como nodos y sinapsis como aristas. Esta representación permite sinapsis múltiples y *gap junctions* entre dos neuronas, lo que ocurre naturalmente en el sistema nervioso de *C. elegans*.

4.2. Metodología

C. elegans tiene en total 302 neuronas distribuidas en dos sistemas nerviosos independientes: un sistema nervioso somático (282 neuronas) y un pequeño sistema nervioso faringeal (20 neuronas) (Jarrell et al., 2012; Albertson and Thompson, 1976; White et al., 1986). Sólo se tomaron en cuenta las neuronas del sistema nervioso somático. A las neuronas se les asignó aleatoriamente estados binarios de activación (-1, 1). En la red neuronal que se está estudiando, las sinapsis químicas se representan con enlaces dirigidos simples (por ejemplo, $A \rightarrow B$ indica que la neurona A es presináptica a la neurona B y B es postsináptica a A). Los *gap junctions* están representados en el conectoma como neuronas doblemente ligadas (si dos neuronas C y D tienen un *gap junction* entre ellas, hay dos enlaces: $C \rightarrow D$ y $D \rightarrow C$). En total hay 5,611 conexiones (aristas), de las cuales 62.5 % del total son sinapsis químicas y 37.5 % son *gap junctions*. Se asignó el número de sinapsis entre neuronas (información presente en el conectoma) como el peso de cada arista normalizado en el intervalo (0, 1). Jarrell et al. (2012) estima la intensidad funcional de las interacciones sinápticas con ese número. En el caso de los *gap junctions* se les asigna el mismo valor a los dos enlaces. Los valores de los pesos de las conexiones previos a ser normalizados varían entre 1 y 81 (5.07 es el promedio). Los pesos de las aristas que son mayores a 44 en el conectoma (antes de la normalización) se les asignó el valor 1, este recorte (clipping) se realizó debido a la distribución de los pesos: las aristas de pesos menores son muy numerosas mientras que únicamente hay 34 que tienen peso mayor a 44. El recorte amplía el espacio de búsqueda de atractores

durante el proceso de autooptimización.

Dado que el conectoma no contiene información acerca de las conexiones neuronales que son inhibitorias y las que son excitatorias, se evaluaron dos escenarios diferentes: uno en el que todas las sinapsis son excitatorias y otro en el que un porcentaje de ellas son inhibitorias. Para el segundo escenario, se seleccionó aleatoriamente al 30 % de las conexiones y se les asignó valor negativo (sobre el valor entre 1 y 44 que previamente se había normalizado). Este 30 % ha demostrado ser óptimo en la simulación de procesos de aprendizaje multitarea, al menos para mamíferos (Capano et al., 2015).

4.2.1. La red neuronal

Después de generar la red a partir del conectoma definiendo sus condiciones iniciales como red de Hopfield, se agregan aristas extras con peso cero de modo que se forma una gráfica completa dirigida. De este modo el aprendizaje Hebbiano podría agregar conexiones extras nuevas cambiando los valores de esas aristas de cero a valores positivos. En otras palabras, se están agregando conexiones en dos direcciones entre neuronas que previamente no existían; estas conexiones extra representan conexiones potenciales que se podrían necesitar para la eliminación de restricciones en las interacciones durante el proceso, o dicho de otra forma, para que haya más conexiones satisfechas de acuerdo a la fórmula de satisfacción $s_i s_j w_{ij} > 0$ durante el proceso. En la red original hay 5611 conexiones que provee el conectoma, a las que se añaden extra conexiones de peso cero de modo que la cantidad de aristas se incrementa hasta 80,213. Esas aristas nuevas no tienen equivalentes anatómicos en el conectoma, pero podrían ser concebidas en términos de conectividad funcional y no estructural.

Cuando se trata de una multigráfica, debemos considerar un identificador (k) para cada arista múltiple que comparta la misma dirección. Ante ello, la suma de los pesos de todas las aristas con la misma dirección se añadió a la ecuación de actualización de estados (Ec. 2.3), que se reescribe del siguiente modo:

$$s_i(t+1) = \theta \left[\sum_j^N \left(\sum_k w_{ijk} \right) s_j(t) \right] \quad (4.1)$$

Un esquema de multigráfica, también se refleja en el modo que se calcula la energía del sistema y el aprendizaje Hebbiano (Ec. 2.5 and 2.6, respectivamente) porque hacemos iteración a todas las aristas incluidas las que son múltiples y comparten la misma dirección:

$$E = - \sum_{ijk}^N w_{ijk}^O(t) s_i(t) s_j(t) \quad (4.2)$$

4. Autooptimización en el conectoma de *C. elegans*

$$w_{ijk}^L(t+1) = w_{ijk}^L(t) + \delta s_i(t) s_j(t) \quad (4.3)$$

En resumen, la red que resulta del conectoma difiere de una red tradicional de Hopfield en los siguientes aspectos:

- Son permitidas conexiones asimétricas.
- Conexiones de nodos a sí mismos.
- Dado que hay *synapses* y *gap junctions* entre las mismas dos neuronas dentro del conectoma, se permiten conexiones múltiples.

Las dos primeras restricciones ya se han abordado en modelos previos de autooptimización Zarco and Froese (2018a); Froese and Manzanilla (2018), sin embargo no se había hecho con una multigráfica. El proceso de autooptimización aplica repetidamente la siguiente secuencia de pasos: (a) aleatorización de los estados, (b) convergencia de la red por cierto periodo de tiempo, resultando frecuentemente en un atractor y (c) aplicación de aprendizaje Hebbiano.

El número de pasos en (b) ha sido ajustado a 18,000 ya que se observó que esa cantidad era conveniente para asegurar la estabilidad o convergencia en cada ciclo. También se fijó la tasa de aprendizaje $\delta = 0,00001$ para todos los experimentos.

4.3. Resultados

En general, los resultados demostraron la factibilidad de la autooptimización en el conectoma. Los resultados se reportan en el escenario donde todos los pesos de las aristas son positivos y en el que el 30 % son negativos.

Primero se examinó la dinámica de los atractores de la red sin autooptimización. En las Figuras 4.1 A, B se muestra la energía del sistema después de actualizaciones sucesivas del estado de las neuronas. La red siempre alcanza un atractor antes del siguiente reinicio en el caso en que todas las sinapsis son excitatorias (A). Las restricciones de la red no satisfechas muestran tendencia a decrecer con las sinapsis inhibitorias, pero el sistema no siempre alcanza un atractor (B). Lo que indica que agregar sinapsis inhibitorias incrementa la dificultad en la coordinación neuronal.

Después se exploró la capacidad de autooptimización de la red. Los experimentos mostrados en la Figura 4.2 A,B consisten en tres etapas. Primero, se define una configuración inicial de pesos tomada del conectoma y normalizada (considerando sólo conexiones positivas en A y el 30 % de negativas en B) y se llevan a cabo 1,000 ciclos de reinicio-convergencia sin aprendizaje Hebbiano. Después, se aplicó el proceso de autooptimización usando 1,000 ciclos de reinicio-convergencia. Finalmente, se aplicaron 1,000 ciclos usando la configuración obtenida con el proceso de autooptimización. La

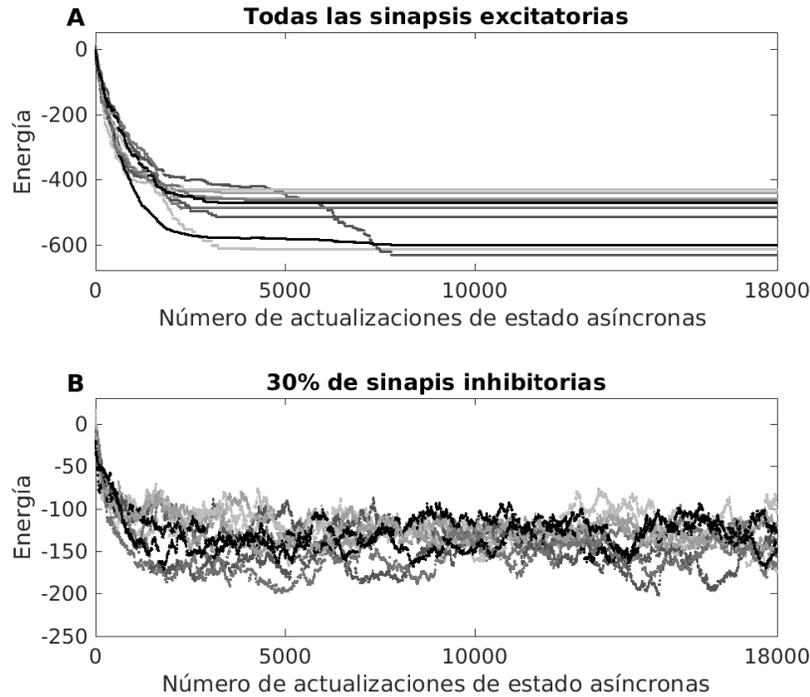


Figura 4.1: Ejemplos que ilustran la convergencia de los estados sin autooptimización. Se muestra la energía de la red después de actualizaciones sucesivas de 10 ejecuciones independientes. El escenario **A** sin sinapsis inhibitorias y el escenario **B** con 30% de conexiones inhibitorias (pesos negativos). Se observa que la adición de conexiones inhibitorias dificulta la coordinación de la actividad neural en el conectoma.

gráfica ilustra la tendencia de la energía a decrecer en A y B, aunque el atractor global no se alcanza en B.

Por último la Figura 4.3 muestra el porcentaje de satisfacción de restricciones antes y después del proceso de autooptimización.

Visualización del conectoma

Para ilustrar el tamaño y la complejidad del conectoma, se presenta una vista generada con el software CYTOSCAPE para el caso en que todas las sinapsis son excitatorias.

En la Figura 4.4 se observa el conectoma antes del proceso de autooptimización con las neuronas distribuidas de manera circular. Las aristas de color negro representan las conexiones satisfechas ($s_i s_j w_{ij} > 0$) y son el 50% de las aristas totales en ese momento, las rojas representan las conexiones insatisfechas y son el otro 50%. En la figura se aplicó

4. Autooptimización en el conectoma de *C. elegans*

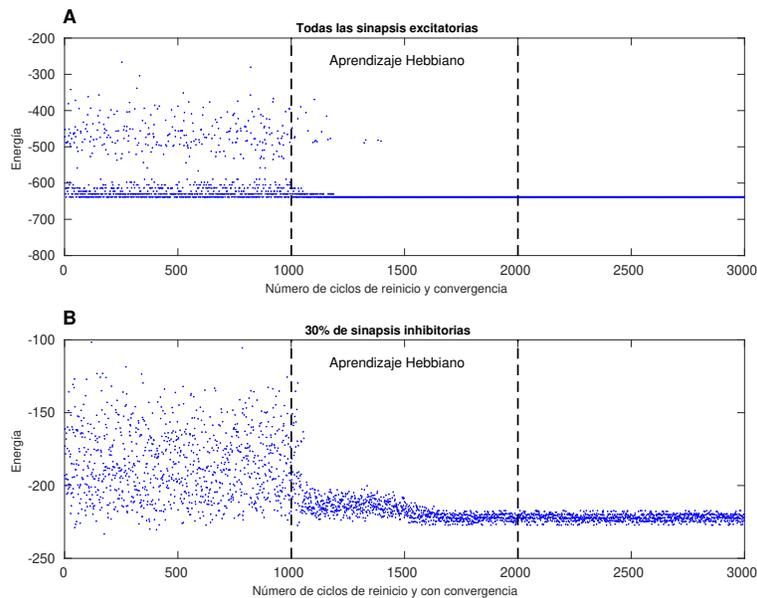


Figura 4.2: Ejemplos de autooptimización en dos escenarios. **A** con conexiones excitatorias (positivas) y **B** con 30 % de conexiones inhibitorias. Cada gráfica muestra la energía de los estados de las neuronas después de 1000 ciclos de reinicio-convergencia en tres fases: antes del aprendizaje (1-1000), durante el aprendizaje (1001-2000) y después del aprendizaje (2001-3000). La autooptimización es evidente en los dos escenarios. Sin embargo, la diferencia entre los procesos se distingue en que mejores atractores tienden a formarse sin sinapsis inhibitorias, pero las sinapsis inhibitorias tienen una mayor diversidad de atractores.

un algoritmo de agrupamiento de las aristas en cúmulos con el fin de visualizar mejor las conexiones, la creación de cúmulos es independiente de las aristas negras o rojas que hay en ellos. En el gráfico los cúmulos se ven como líneas continuas o formados por grupos de líneas que son las conexiones. El reto de nuestro algoritmo es lograr que todas las conexiones se vuelvan negras, es decir, que estén satisfechas.

4.4. Discusión

En esta sección hemos probado la dinámica del conectoma de *C. elegans* con una red de Hopfield y aplicado el procedimiento de autooptimización en una estructura de multigráfica dirigida. Los resultados demuestran que la autooptimización puede ser generalizada a topologías de red más grandes y más plausibles biológicamente. Sin embargo, una pregunta abierta es de qué modo este logro tiene implicaciones para el entendimiento del funcionamiento del sistema nervioso de *C. elegans*. Para responder

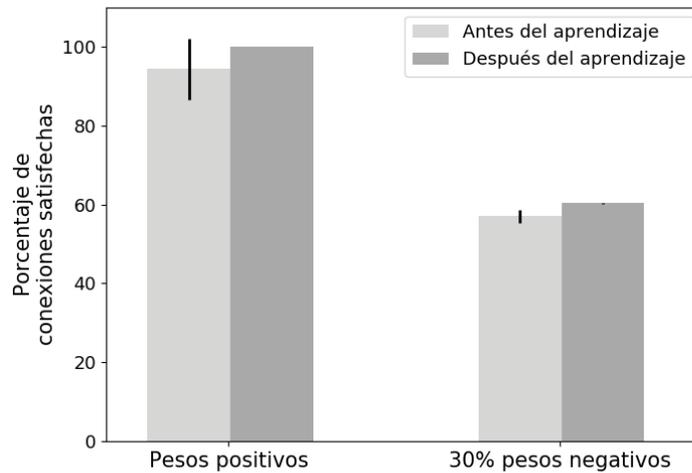


Figura 4.3: Porcentaje de satisfacción de conexiones antes y después del proceso de autooptimización (tomando en cuenta el aprendizaje Hebbiano), medido al final de cada ciclo de reinicio-convergencia. En cada caso se consideró el promedio de 1000 ciclos.

a este pregunta abierta, consideramos tres puntos.

Primero, ¿es biológicamente plausible la conectividad requerida para el proceso de autooptimización? En este trabajo se mostró que bajo las condiciones adecuadas la red del conectoma presentó una tendencia a optimizar su propia conectividad. Esto lo hizo a través de la solución de restricciones por la aplicación de aprendizaje Hebbiano durante la exploración repetida de su espacio de estados. En el modelo original de la red de Hopfield, esto se logra restringiendo las conexiones de modo que el estado de la red converja necesariamente a un atractor puntual, en específico, por ejemplo, asegurando que las conexiones son simétricas y no hay conexiones recurrentes. La condición de tener atractores puntuales y conectividad de una red simétrica y sin autoconexiones no es plausible biológicamente. Un paso importante es por tanto mostrar que la autooptimización se puede lograr en una red asimétrica, con aristas múltiples y recurrente, lo que puede dar paso a un análisis más amplio de la dinámica. Esto se logra con el presente trabajo.

El segundo punto involucra la siguiente pregunta: ¿se requiere el ciclo de reinicio convergencia para que el proceso de autooptimización sea biológicamente plausible? En particular, ¿cuáles podrían ser los mecanismos que periódicamente relajarán las restricciones del funcionamiento normal, que permite a la red explorar su espacio de estados? Siguiendo las especulaciones de Woodward et al. (2015), en nuestro modelo el reinicio del estado de las neuronas podría ser interpretado biológicamente como un tipo de estado de sueño en *C. elegans*, especialmente cuando se encuentra en reposo.

4. Autooptimización en el conectoma de *C. elegans*

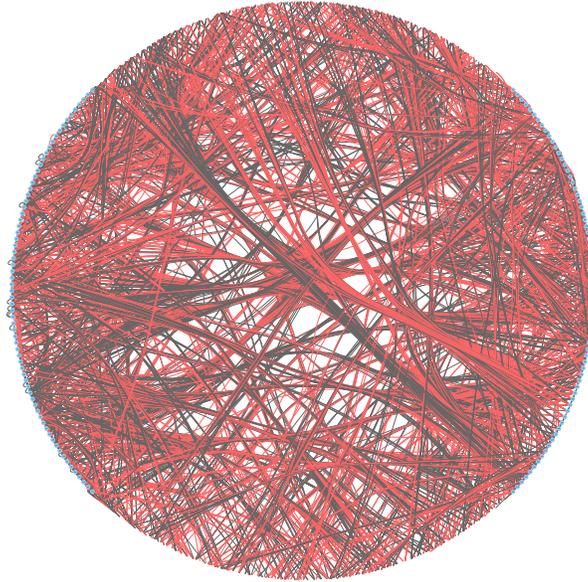


Figura 4.4: Visualización del conectoma antes de la autooptimización. Las conexiones negras son conexiones satisfechas y las rojas no satisfechas. En ese momento cada tipo de conexión representa el 50 % del total.

C. elegans presenta un estado inactivo (inmóvil, de inactividad) durante el letargo, una fase parecida a un estado de reposo durante el desarrollo larvario (Nelson and Raizen, 2013). Más aún, este estado parecido al sueño ocurre durante la saciedad y tras el agotamiento. No obstante, el modo de definir un ciclo de sueño en *C. elegans* sigue siendo controversial. El modelo presentado sugiere que sería útil encontrarlo y ver su relación con la autooptimización de la red, en un proceso semejante al aprendizaje basado en el sueño.

Y en tercer lugar, ¿es la distribución y el porcentaje de conexiones inhibitorias biológicamente plausible? Nuevamente, existe una limitación en la ausencia de información biológica más detallada. Se introdujeron pesos negativos en el segundo escenario del proceso de autooptimización de manera exploratoria. Los resultados sugieren que su presencia restringe la coordinación entre neuronas. Una restricción de la coordinación neuronal como tal a través de todo el conectoma sería deseable biológicamente, por ejemplo ayudando a evitar problemas que surgen con la excesiva sincronía neural en los desórdenes como la epilepsia. Otra ventaja es que hay una creciente diversidad de mejores atractores encontrados al final de la autooptimización en el caso en que hay presencia de conexiones inhibitorias. De este modo se superaron algunas dudas planteadas por Zarco and Froese (2018b) de que la convergencia en atractores simples podría estar limitada si se aplica el proceso de autooptimización en robótica cognitiva, que típicamente requiere la posibilidad de cambiar entre configuraciones de atractores múltiples.

Capítulo 5

Conclusiones y trabajo futuro

El mecanismo de autooptimización de (Watson et al., 2011b) en una red neuronal de Hopfield presentado mediante el proceso de reinicio convergencia es un modelo de memoria asociativa que, mediante aprendizaje no supervisado, es capaz de encontrar atractores globales estables de la función de energía. Lo anterior indica que una red de Hopfield con estados discretos y dinámica discreta es capaz de resolver las restricciones que imponen los nodos respecto a su conexión con otros. En este trabajo se muestra que el procedimiento de autooptimización es aplicable al conectoma de *C. elegans* modelado como una multigráfica dirigida, lo que indica que la conectividad requerida que el procedimiento de autooptimización es biológicamente plausible.

Por otro lado, si el procedimiento de autooptimización puede ser plausible biológicamente es una cuestión limitada por la falta de información biológica disponible de *C. elegans*. Sin embargo, con la información recabada con los experimentos se puede plantear la hipótesis de que el proceso de reinicio-convergencia es interpretable como el ciclo de sueño de *C. elegans*.

El proceso de reinicio convergencia como sistema complejo adaptativo tiene el potencial de aplicarse no sólo a los modelos presentado en este trabajo, sino a otro tipo de redes neuronales e incluso a otros dominios. A continuación presentaré el trabajo futuro y algunas posibilidades en donde esta investigación puede continuar:

- En primer lugar, es deseable trabajar con modelos más cercanos a la realidad. La red de Hopfield que utilicé maneja estados discretos “encendido” y “apagado”. Sería deseable trabajar con activación neuronal de tiempo continuo, implementada a través de una red neuronal recurrente de tiempo continuo CTRNN (Zarco and Froese, 2018b); o bien modelar el conectoma con *Spiking Neural Networks* SNN (Taherkhani et al., 2020).
- Extender esta investigación puede crear precedentes en la modelación computacional de otras configuraciones neuronales. Por ejemplo, Woodward et al. (2018) publicaron un atlas digital del cerebro de un mono tí. Aun cuando este no es un

5. Conclusiones y trabajo futuro

conectoma como el de *C. elegans*, se necesita hacer mejores modelos para avanzar en la comprensión de la organización neuronal.

- También podemos hacer el análisis de aplicar el algoritmo de autooptimización en una partición del conectoma en conjuntos funcionales de neuronas (Sohn et al., 2011) y aplicar el proceso a diferentes distribuciones de neuronas inhibitorias en la red neuronal.
- En un artículo reciente de Fachechi et al. (2019) habla de que poner en “pausa” o a “dormir” una red neuronal de Hopfield puede mejorar la memoria del sistema. Esta fase de sueño de la red se lleva a cabo mediante un proceso de olvido y consolidación similar al que presentan los mamíferos durante la fase de sueño *REM* (*rapid eye movement*) y *SW* (*slow wave*). Esos experimentos muestran resultados acordes con la interpretación del mecanismo de reinicio-convergencia como un estado de sueño en *C. elegans*. Por lo anterior, se podrían hacer más pruebas para comprobar esta interpretación o formular hipótesis similares.

Bibliografía

- Albertson, D. G. and Thompson, J. (1976). The pharynx of *Caenorhabditis elegans*. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Biological Sciences*, 275(938):299–325.
- Binmore, K. (2007). *Game theory: a very short introduction*, volume 173. Oxford University Press.
- Capano, V., Herrmann, H. J., and de Arcangelis, L. (2015). Optimal percentage of inhibitory synapses in multi-task learning. *Scientific Reports*, 5:9895. doi:10.1038/srep09895.
- Cassar, A. (2007). Coordination and cooperation in local, random and small world networks: Experimental evidence. *Games and Economic Behavior*, 58(2):209–230.
- Davies, A. P., Watson, R. A., Mills, R., Buckley, C. L., and Noble, J. (2011). “If you can’t be with the one you love, love the one you’re with”: How individual habituation of agent interactions improves global utility. *Artificial Life*, 17(3):167–181.
- Diestel, R. (2017). *Graph theory*. Berlin: Springer-Verlag.
- Fachechi, A., Agliari, E., and Barra, A. (2019). Dreaming neural networks: Forgetting spurious memories and reinforcing pure ones. *Neural Networks*, 112:24–40.
- Froese, T. (2018). Ritual anti-structure as an alternate pathway to social complexity? The case of ancient Teotihuacan, Central Mexico. *Material Religion*, 14(3):420–422.
- Froese, T. and Manzanilla, L. R. (2018). Modeling collective rule at ancient teotihuacan as a complex adaptive system: Communal ritual makes social hierarchy more effective. *Cognitive Systems Research*, 52:862–874.
- Fuentes, A. (2004). It’s not all sex and violence: Integrated anthropology and the role of cooperation and social complexity in human evolution. *American Anthropologist*, 106(4):710–718.
- Girard, L. R., Fiedler, T. J., Harris, T. W., Carvalho, F., Antoshechkin, I., Han, M., Sternberg, P. W., Stein, L. D., and Chalfie, M. (2006). Wormbook: the online review of *Caenorhabditis elegans* biology. *Nucleic Acids Research*, 35:D472–D475. doi:10.1093/nar/gkl894.
- Haykin, S. (2008). *Neural networks and learning machines*. New Jersey: Pearson Education.

BIBLIOGRAFÍA

- Hebb, D. O. (2005). *The organization of behavior: A neuropsychological theory*. Psychology Press.
- Hopfield, J. J. (1982). Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 79(8):2554–2558.
- Izquierdo, E. J. (2018). Role of simulation models in understanding the generation of behavior in *C. elegans*. *Current Opinion in Systems Biology*, 13:93–101.
- Jarrell, T. A., Wang, Y., Bloniarz, A. E., Brittin, C. A., Xu, M., Thomson, J. N., Albertson, D. G., Hall, D. H., and Emmons, S. W. (2012). The connectome of a decision-making neural network. *Science*, 337(6093):437–444.
- Latora, V., Nicosia, V., and Russo, G. (2017). *Complex networks: principles, methods and applications*. Cambridge University Press.
- MacCoun, R. J. (2015). Balancing evidence and norms in cultural evolution. *Organizational Behavior and Human Decision Processes*, 129:93–104.
- Nelson, M. D. and Raizen, D. M. (2013). A sleep state during *C. elegans* development. *Current Opinion in Neurobiology*, 23(5):824–830.
- Nowak, M. A. (2006). Five rules for the evolution of cooperation. *Science*, 314(5805):1560–1563.
- Santos, F. C. and Pacheco, J. M. (2005). Scale-free networks provide a unifying framework for the emergence of cooperation. *Physical Review Letters*, 95(9):098104.
- Santos, F. C., Pacheco, J. M., and Lenaerts, T. (2006). Cooperation prevails when individuals adjust their social ties. *PLOS Computational Biology*, 2(10):1–8.
- Santos, F. P., Santos, F. C., and Pacheco, J. M. (2018). Social norm complexity and past reputations in the evolution of cooperation. *Nature*, 555(7695):242.
- Silver, D., Hubert, T., Schrittwieser, J., Antonoglou, I., Lai, M., Guez, A., Lanctot, M., Sifre, L., Kumaran, D., Graepel, T., Lillicrap, T., Simonyan, K., and Hassabis, D. (2018). A general reinforcement learning algorithm that masters chess, shogi, and Go through self-play. *Science*, 362(6419):1140–1144.
- Sohn, Y., Choi, M.-K., Ahn, Y.-Y., Lee, J., and Jeong, J. (2011). Topological cluster analysis reveals the systemic organization of the *Caenorhabditis elegans* connectome. *PLOS Computational Biology*, 7(5):e1001139. doi:10.1371/journal.pcbi.1001139.
- Taherkhani, A., Belatreche, A., Li, Y., Cosma, G., Maguire, L. P., and McGinnity, T. (2020). A review of learning in biologically plausible spiking neural networks. *Neural Networks*, 122:253–272.

- Tanimoto, J. (2015). *Fundamentals of evolutionary game theory and its applications*. Japan: Springer.
- Varshney, L. R., Chen, B. L., Paniagua, E., Hall, D. H., and Chklovskii, D. B. (2011). Structural properties of the *Caenorhabditis elegans* neuronal network. *PLOS Computational Biology*, 7(2):1–21.
- Waterston, R. and Sulston, J. E. (1998). The Human Genome Project: Reaching the Finish Line. *Science*, 282(5386):53–54. doi:10.1126/science.282.5386.53.
- Watson, R. A., Buckley, C. L., and Mills, R. (2011a). Optimization in “self-modeling” complex adaptive systems. *Complexity*, 16(5):17–26.
- Watson, R. A., Mills, R., and Buckley, C. L. (2011b). Global adaptation in networks of selfish components: Emergent associative memory at the system scale. *Artificial Life*, 17(3):147–166.
- Watson, R. A., Mills, R., and Buckley, C. L. (2011c). Transformations in the scale of behavior and the global optimization of constraints in adaptive networks. *Adaptive Behavior*, 19(4):227–249.
- Watts, D. J. and Strogatz, S. H. (1998). Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *Nature*, 393(6684):440.
- White, J. G., Southgate, E., Thomson, J. N., and Brenner, S. (1986). The structure of the nervous system of the nematode *Caenorhabditis elegans*. *Philosophical Transactions: Biological Sciences*, 314(1165):1–340. doi:10.1098/rstb.1986.0056.
- Woodward, A., Froese, T., and Ikegami, T. (2015). Neural coordination can be enhanced by occasional interruption of normal firing patterns: A self-optimizing spiking neural network model. *Neural Networks*, 62:39 – 46.
- Woodward, A., Hashikawa, T., Maeda, M., Kaneko, T., Hikishima, K., Iriki, A., Okano, H., and Yamaguchi, Y. (2018). The Brain/MINDS 3D digital marmoset brain atlas. *Scientific Data*, 5:180009.
- Zarco, M. and Froese, T. (2018a). Self-modeling in hopfield neural networks with continuous activation function. *Procedia computer science*, 123:573–578.
- Zarco, M. and Froese, T. (2018b). Self-optimization in continuous-time recurrent neural networks. *Frontiers in Robotics and AI*, 5:96. doi:10.3389/frobt.2018.00096.