

高斯过程回归结合加性周期核用于耦合相位振荡器中两体相互作用分析

Ryosuke Yoneda¹, Haruma Furukawa¹, Daigo Fujiwara², Toshio Aoyagi¹

¹ Graduate School of Informatics, Kyoto University, Yoshida-Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501, Japan

² NTT Communications Corporation, 21F, Granpark Tower, Shibaura, Minato-ku 3-4-1, Tokyo, 108-8118, Japan

Abstract

我们提出了一种具有加性周期核的高斯过程回归框架，用于分析耦合振荡系统中的两体相互作用。虽然通过贝叶斯方法确定的有限阶傅里叶级数仍可能产生诸如高频大幅振动等伪影，但我们的加性周期核方法已被证明能有效地避免这些问题。此外，通过利用耦合函数的加性和周期特性，我们显著降低了推理问题的有效维度。我们首先在简单的耦合相位振荡器上验证了我们的方法，并展示了其对范德波尔和菲茨休-纳戈莫振荡器等更复杂系统，在数据偏差或有限条件下的鲁棒性。接下来，我们将该方法应用于由霍奇金-赫胥黎方程建模的尖峰神经网络中，成功恢复了底层相互作用函数。这些结果突显了高斯过程回归在捕捉振荡网络中的非线性和周期性相互作用方面的灵活性和稳定性。我们的框架为传统方法提供了一种实用的替代方案，使物理、生物和工程领域的同步节奏系统能够进行数据驱动的研究。

1. 介绍

耦合相位振子模型 [1, 2, 3] 常用于描述各种复杂系统中的节律行为，例如大脑中神经元的协调活动 [4] 或萤火虫的同步闪烁 [5]。该模型允许显著降低维度，并能为原始系统的节律行为提供见解。

振子之间的耦合函数表示为相位差的函数，这决定了系统的同步特性。换句话说，从观测数据中估计耦合函数是揭示节律现象潜在机制的关键步骤。许多研究使用诸如傅里叶级数展开等方法解决了这一问题 [6, 7, 8, 9]。然而，决定模型复杂度并对近似精度有显著影响的傅里叶级数截断阶次通常是任意的，并受到证据近似的限制。此外，估计出的傅里叶系数可能会取很大的绝对值，导致高振幅、高频震荡。这种现象是不希望看到的，因为它意味着耦合函数在非自然高的频率下振荡。

为了克服与傅里叶截断相关的问题，我们使用高斯过程回归，这是一种非参数回归方法，通过协方差函数 [10] 允许对复杂函数进行灵活建模。具体来说，我们提出了一种新方法，将耦合函数的关键特性——周期性和可加性——纳入核中，引入了周期性加性核。

本文组织如下。在第 2 节中，我们简要回顾了耦合相位振子模型和高斯过程。在第 3 节中，我们提出了一

种方法，用于从表现出节奏现象的数据中提取振子系统的耦合函数，使用高斯过程回归。这比现有方法提供了更灵活的估计。所提方法将在下一节 4 应用于各种系统。特别是，我们通过耦合 FitzHugh-Nagumo 振子在数据偏倚或有限的情况下展示了所提出的方法优于现有方法的优势。此外，所提出的方法被应用于尖峰神经元的多体系统，并确认所有耦合函数都得到了高精度的估计。最后，我们在第 5 节总结本文并提供进一步的备注。

2. 预备知识

2.1. 耦合相位振荡器

让我们考虑一个由 N 个相互作用的动力系统组成的系统：

$$\dot{X}_i = F_i(X_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N G_{j \rightarrow i}(X_i, X_j) \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

这里，函数 F_i 表示元素 i 的自动力学，而 $G_{j \rightarrow i}$ 表示从元素 j 到元素 i 的弱作用。我们假设每个元素都有一个稳定的极限环（即每个元素都是振荡器）。众所周知，

这样的系统可以简化为耦合相位振荡器 [1, 2]。

$$\dot{\phi}_i = \omega_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \Gamma_{ij}(\Delta\phi_{ij}), \quad \Delta\phi_{ij} := \phi_j - \phi_i. \quad (2)$$

函数 $\{\Gamma_{ij}\}$ 是耦合函数，表示从振荡器 j 到振荡器 i 的作用。

采用相位振子模型的优势在于显著简化了系统。虽然原系统 (1) 通常是多维的，相位振子 (2) 仅为每个极限环分配一个变量 ϕ_i 。因此，焦点可以完全集中在节奏同步特性上。

2.2. 耦合函数的估计

在本文中，我们估计所有相位耦合函数 $\{\Gamma_{ij}\}$ 从相位时间序列 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_j, y_j)\}_{j=1}^{n_{\text{data}}}$ 与 $\mathbf{x}_j \in \mathbb{T}^{N-1}$ 和 $y_j \in \mathbb{R}$ 对于 $j = 1, 2, \dots, n_{\text{data}}$ 。这里， \mathbb{T} 表示一个环面。由于相位耦合函数决定了振荡器的同步特性，因此从观测时间序列中估计这些函数是理想的。

然而，获得全面涵盖高维状态空间的时间序列数据极其具有挑战性。即使获得了这样的数据，数据量也会非常庞大，需要大量的计算资源来进行估计。为了避免这一难题，我们专注于相耦合函数可以表示为两体相互作用之和的事实，这使我们可以使用加性核。详情见第 3.1 节。

3. 方法论：高斯过程回归

我们采用高斯过程回归来估计耦合函数。在本节中，我们简要介绍了高斯过程回归的程序。

假设我们有一个时间序列数据 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_j, y_j)\}_{j=1}^{n_{\text{data}}} \subset \mathbb{T}^{N-1} \times \mathbb{R}$ ，其中包含 n_{data} 个数据点，以及一个函数 $f: \mathbb{T}^{N-1} \rightarrow \mathbb{R}$ ，满足

$$y_i = f(\mathbf{x}_i) + \xi_i, \quad (3)$$

对于 $i = 1, \dots, n_{\text{data}}$ ，其中 ξ_i 是代表输出中噪声的随机变量 $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 。我们的任务是使用高斯过程从数据 \mathcal{D} 中预测未知函数 f 。

我们首先假设未知回归函数 f 是从给定的高斯过程先验中抽取的，

$$f \sim \mathcal{GP}(m, k), \quad (4)$$

其中 $m: \mathbb{T}^{N-1} \rightarrow \mathbb{R}$ 被称为均值函数， $k: \mathbb{T}^{N-1} \times \mathbb{T}^{N-1} \rightarrow \mathbb{R}$ 被称为协方差函数。协方差函数应选择为反映人们对回

归函数 f 的先验知识或信念，并且我们将在下一子节中讨论这个问题。在许多情况下，为了简化问题，将均值函数 m 设置为常数零函数。

后验分布 f 通过线性代数分析计算得出，再次为高斯过程。该分布由以下闭式给出：

$$f | \mathcal{D} \sim \mathcal{GP}(\bar{m}, \bar{k}), \quad (5)$$

其中后验均值函数 \bar{m} 和后验协方差函数 \bar{k} 是

$$\bar{m}(\mathbf{x}) = m(\mathbf{x}) + k_{\mathbf{x}\mathbf{X}}(k_{\mathbf{X}\mathbf{X}} + \sigma^2 I_{n_{\text{data}}})^{-1}(\mathbf{y} - m_{\mathbf{X}}), \quad (6)$$

$$\bar{k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - k_{\mathbf{x}\mathbf{X}}(k_{\mathbf{X}\mathbf{X}} + \sigma^2 I_{n_{\text{data}}})^{-1}k_{\mathbf{X}\mathbf{x}'}. \quad (7)$$

其中

$$[k_{\mathbf{X}\mathbf{X}}]_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j),$$

$$k_{\mathbf{x}\mathbf{X}} = k_{\mathbf{X}\mathbf{x}}^\top = (k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{x}_{n_{\text{data}}}, \mathbf{x}))^\top,$$

$$m_{\mathbf{X}} = (m(\mathbf{x}_1), \dots, m(\mathbf{x}_{n_{\text{data}}}))^\top,$$

$$\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_{n_{\text{data}}})^\top.$$

3.1. 协方差函数的选择

协方差函数 k 是高斯过程回归的基本组成部分，因为它编码了我们对希望预测的函数的假设（详见 [11] 的详细讨论）。在我们的问题设定中，由于耦合函数的定义为环面 \mathbb{T}^{N-1} ，这意味着该函数是 2π 周期性的，因此使用周期核作为协方差函数是合适的。此外，由于耦合函数是加性（即表示为两体相互作用的和），可以看出核函数也是可加的 [12]。总之，我们建议使用以下可加周期核来估计耦合函数：

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{j=1}^{N-1} \theta_0^{(j)} \exp(\theta_1^{(j)} \cos(x_j - x'_j)). \quad (8)$$

这里， $\{\theta_0^{(j)}\}_{j=1}^{N-1}$ 和 $\{\theta_1^{(j)}\}_{j=1}^{N-1}$ 是正的超参数。 $\theta_0^{(j)}$ 决定了协方差函数的振幅。 $\theta_1^{(j)}$ 可以视为一个逆长度尺度，它指定了协方差函数的 j 轴方向的宽度。

3.2. 优化

在迄今为止描述的高斯过程回归中，超参数仍保留在核 $\theta_{0,1}$ 和噪声强度 σ 中。为了简化符号，我们将这些参数写为 θ 。

为了估计 θ ，我们考虑最大似然估计，它对最有可能生成数据 \mathcal{D} 的总体进行推断。参数 θ 的（边际）对数

似然性为

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) &:= \log p(\mathbf{y} | X, \boldsymbol{\theta}) \\ &= -\frac{1}{2} \mathbf{y}^\top \mathbf{K}_\theta \mathbf{y} - \frac{1}{2} \log \det \mathbf{K}_\theta - \frac{n_{\text{data}}}{2} \log 2\pi,\end{aligned}\quad (9)$$

其中 $\mathbf{K}_\theta = k_{XX} + \sigma^2 I_{n_{\text{data}}}$ 是含噪声数据 \mathcal{D} 的协方差矩阵。最可能的参数 $\boldsymbol{\theta}$ 是通过找到对数似然函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ 的最大值来估计的。

寻找在改变超参数时最大化边缘似然性的点的问题被表述为一个优化问题。本文中，我们使用梯度下降法来找到边缘似然性的最大点。超参数 $\boldsymbol{\theta}$ 使用以下方式通过梯度进行更新：

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} \leftarrow \boldsymbol{\theta}^{(t)} + \alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}^{(t)}), \quad (10)$$

其中 α 表示学习率。

随机梯度下降 (SGD) 方法被视为梯度下降优化方法的一种随机近似，是另一种优化方式。在 SGD 方法中，每一步的梯度由不同的小批量数据决定，并相应地进行参数更新。最大的好处是它比使用所有数据每步的梯度方法收敛所需的计算时间更少。由于每个小批量的梯度方向存在随机波动，人们认为它陷入局部解的可能性更低。请注意，我们可以解析地计算协方差函数关于其超参数的导数。这使得可以使用自动微分进行高效优化。实现是使用 GPflow [13] 完成的。

3.3. 使用高斯过程回归的意义

高斯过程回归的一个主要优点是它能够为回归参数提供不确定性估计，在数据嘈杂或稀疏的情况下这可能很有用。它还允许在无需指定固定函数形式的情况下对复杂函数进行建模，而在许多情况下确定这种固定形式是很困难的。此外，使用核函数可以将关于函数的先验知识（如其平滑性或周期性）纳入其中，这可以提高估计的准确性。

高斯过程回归的优势在于所有计算都可以仅通过矩阵运算以封闭形式完成。然而，随着数据数量 n_{data} 的增加，需要对 $n_{\text{data}} \times n_{\text{data}}$ 矩阵进行逆矩阵计算，而内存和计算量是巨大的。已经提出了许多稀疏近似方法来克服高斯过程回归的计算复杂性 [14, 15, 16, 17, 18]。

4. 数值模拟

4.1. 耦合相位振荡器

为了确认我们方法的有效性，我们首先考虑一个由耦合相位振荡器组成的简单 3 体系统：

$$\begin{aligned}\dot{\phi}_1 &= 1.0 + 0.01 \sin(\phi_2 - \phi_1) - 0.02 \sin(\phi_3 - \phi_1), \\ \dot{\phi}_2 &= 1.1 + 0.04 \sin(\phi_1 - \phi_2) + 0.01 \sin(\phi_3 - \phi_2), \\ \dot{\phi}_3 &= 0.95 + 0.01 \sin(\phi_1 - \phi_3) - 0.03 \sin(\phi_2 - \phi_3),\end{aligned}\quad (11)$$

其中 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 是振荡器的相位。通过使用正向欧拉方法从 $t_0 = 0.0$ 到 $t_1 = 15.0$ 求解常微分方程 (11)，并采用随机选取的初始值，我们准备了时间序列数据。以采样率 0.2 对数据进行采样。我们将上述计算重复执行 50 次。估计结果如图 1 所示。

4.2. 耦合范德波尔振荡器

接下来，我们将提出的方法应用于耦合的范德波尔振荡器：

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= y_1 + K(x_2 - x_1) + \xi_{x_1}(t), \\ \dot{y}_1 &= \varepsilon_1(1 - x_1^2)y_1 - x_1 + Kx_2^2y_2 + \xi_{y_1}(t), \\ \dot{x}_2 &= y_2 - Kx_1^2y_1 + \xi_{x_2}(t), \\ \dot{y}_2 &= \varepsilon_2(1 - x_2^2)y_2 - x_2 + Kx_1y_1^2 + \xi_{y_2}(t),\end{aligned}\quad (12)$$

其中参数为 $\langle \xi_\alpha(s) \xi_\beta(t) \rangle = \sigma^2 \delta_{\alpha\beta} \delta(s-t)$ 对于 $\alpha, \beta \in \{x_1, y_1, x_2, y_2\}$ 。参数的值是 $\varepsilon_1 = 0.3, \varepsilon_2 = 0.7, K = 0.01, \sigma = 0.03$ 。

我们使用以下方法从获得的时间序列数据中重构相位时间序列。首先，我们按照如下方式计算几何角度 $\vartheta_i(t)$ ：

$$\vartheta_i(t) = \arg \{-\hat{x}_i(t) + i\hat{y}_i(t)\}, \quad (13)$$

其中， \hat{x}_i 和 $\hat{y}_i(t)$ 分别是 $x_i(t)$ 和 $y_i(t)$ 的中心化时间序列。尽管对于所有的 t 都有 $\vartheta_i(t) \in [0, 2\pi)$ ，将 $\vartheta_i(t)$ 视为振荡器 i 的相位时间序列是不合适的。这是因为，在没有相互作用和噪声的情况下， ϑ_i 并不会单调变化。为了克服这一难题，从 ϑ_i 到 θ_i 的以下变换应该足够了 [19, 20]：

$$\theta_i(t) = 2\pi \int_0^{\vartheta_i(t)} \sigma_i(\varphi) d\varphi, \quad (14)$$

其中 σ_i 表示 ϑ_i 的经验分布。我们将 $\theta_i(t)$ 视为振荡器 i 的相位，并在回归中使用它们。

估计结果如图 2 所示。结果与使用伴随方法得出的真实耦合函数高度一致。为了进行比较，我们还展示了现有方法 [9] 估算的耦合函数。

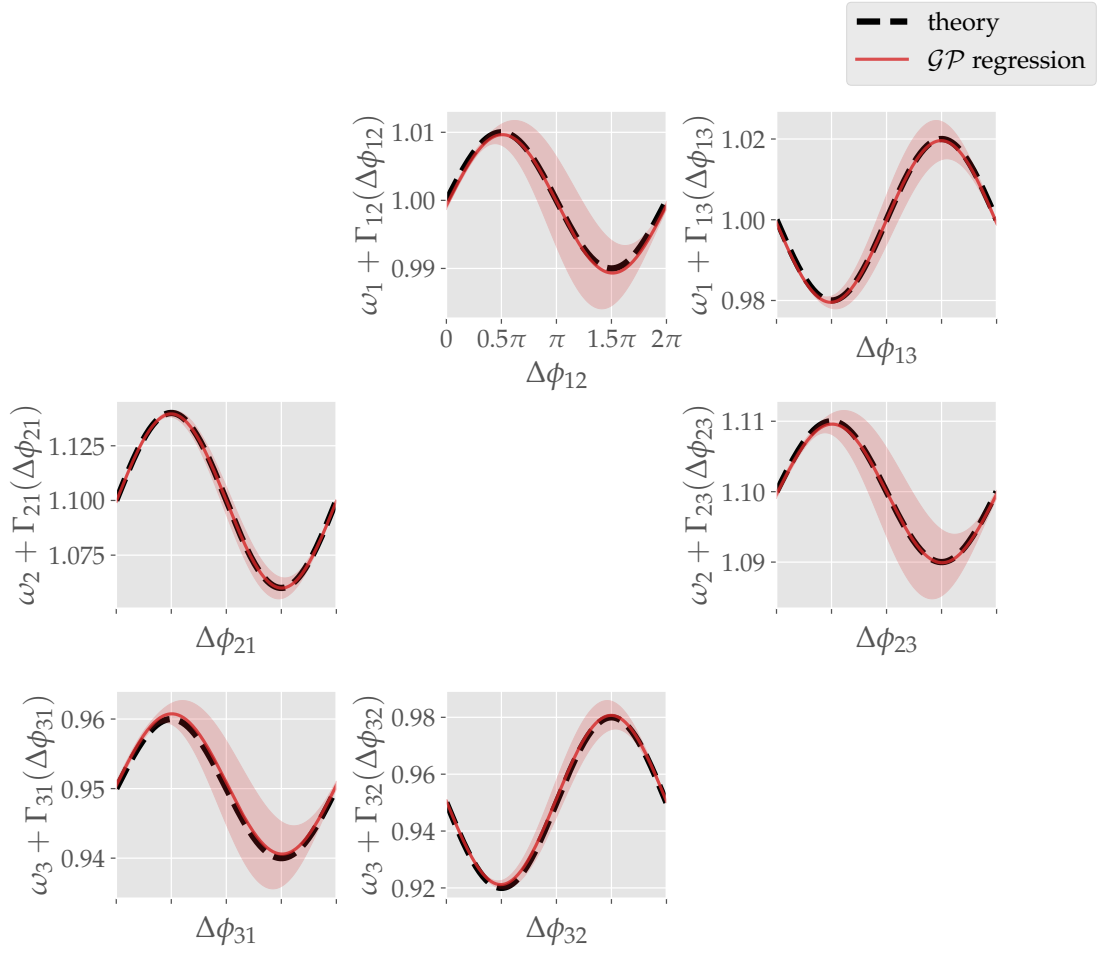


图 1: 估计的所有耦合函数 (红色) 和真实的耦合函数 (黑色, 虚线)。请注意, 估计的结果并非严格意义上的耦合函数本身, 而是加上频率后的结果。

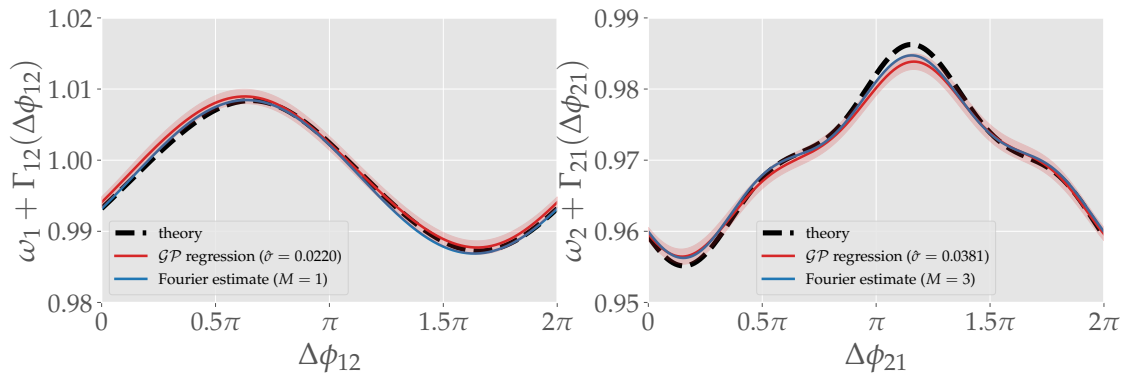


图 2: 方程 12 中耦合函数的估计结果。理论 (黑色虚线)、现有方法获得的结果 (蓝色实线) 和提出的方法获得的结果 (红色实线)。理论曲线是用伴随方法获得的。傅里叶级数的最高阶是由证据近似确定的。

4.3. 耦合的 FitzHugh-Nagumo 振荡器

这是一个展示所提出方法有效性的另一个示例。考虑以下耦合的 FitzHugh-Nagumo 振子 [21, 22]:

$$\begin{aligned}\dot{v}_1 &= v_1 - \frac{1}{3}v_1^3 - w_1 + I_{\text{ext}} + Kv_1v_2^3 + \xi_{v_1}(t), \\ \tau_1\dot{w}_1 &= v_1 + a - bw_1 + \xi_{w_1}(t), \\ \dot{v}_2 &= v_2 - \frac{1}{3}v_2^3 - w_2 + I_{\text{ext}} + \xi_{v_2}(t), \\ \tau_2\dot{w}_2 &= v_2 + a - bw_2 + \xi_{w_2}(t),\end{aligned}\quad (15)$$

其中 $\langle \xi_\alpha(s)\xi_\beta(t) \rangle = \sigma^2\delta_{\alpha,\beta}\delta(s-t)$ 对于 $\alpha, \beta \in \{v_1, w_1, v_2, w_2\}$ 成立。这里, $a = 1, b = 0.8, I_{\text{ext}} = 0.8, K = 0.0087, \tau_1 = 0.1^{-1}, \tau_2 = 0.09^{-1}$ 。

我们估计了不同数量数据的耦合函数 (图 3)。具体来说, 我们变化了用于创建数据的初始值的数量 (用 N_{init} 表示) 以及每个初始值用于估计的振子循环次数 (用 N_{cycle} 表示)。我们将采样率设置为 0.2。相位时间序列使用与第 4.2 节所述相同的方法进行重构。

从图 3 可以看出, 当数据样本量较小时, 我们提出的方法在估计耦合函数时准确地与理论结果一致, 而现有方法的估计失败。这表明当数据数量较少且数据有偏时, 我们的方法优于其他方法。

4.4. 尖峰神经网络振荡器

最后, 我们考虑一个由多个耦合的 Hodgkin-Huxley 模型组成的网络 [23], 并估计所有这些模型的耦合函数。有七个神经元, 其中五个是兴奋性的, 两个是抑制性的。关于 Hodgkin-Huxley 模型的细节总结见附录 A。

我们采用方程 (8) 形式的核函数与 $N = 7$ 。参见图 4 和图 5 下方的图形, 以比较估算结果与通过相位约简方法获得的理论耦合函数。我们确认每个振荡器之间的耦合函数在定性上与高斯过程回归的结果及理论结果一致。

5. 结论与讨论

在这篇论文中, 我们关注代表节奏现象的实际数据, 并从中考虑估计以相位振荡器系统建模的耦合函数。提出了一种使用高斯过程回归来估计耦合函数的方法。通过灵活设计核函数, 可以无需进行傅里叶级数的有限阶近似来进行回归。我们证实了这种方法对于简单的相位振荡器、范德波尔方程和菲茨休-纳古莫方程的

情况效果良好。我们也确认该方法能够成功地从多达七个耦合脉冲神经元多体系统中定性估计出耦合函数。

最后, 我们评论了使用高斯过程回归提出的该方法。主要思想是将数据简化为一个关于相位微分方程场的回归问题。然而, 可能会出现所使用的回归数据包含系统性误差的可能性, 因为这涉及到由于有限时间而以差值形式近似导数的问题。为了克服这个问题, 最近提出了一种新的想法, 即利用伴随方程来计算从参数化向量场获得的时间序列数据的参数导数。我们将伴随方程在耦合函数估计中的应用留作未来工作。

致谢

这项工作部分得到了以下资助: MEXT 科学研究费补助金号 JP23H04467; JSPS 科学研究费补助金号 JP24H00723, JP22KJ1902, JP20K20520; JST BOOST 资助编号 JPMJBS2407。

References

- [1] Yoshiki Kuramoto. Chemical oscillations, waves, and turbulence. In *Springer Series in Synergetics*, pages 22–34, 1984.
- [2] Arthur T. Winfree. *The geometry of biological time*. Springer New York, NY, 1980.
- [3] Hiroya Nakao. Phase reduction approach to synchronisation of nonlinear oscillators. *Contemporary Physics*, 57(2):188–214, 2016.
- [4] Atthaphon Viriyopase, Raoul-Martin Memmesheimer, and Stan Gielen. Analyzing the competition of gamma rhythms with delayed pulse-coupled oscillators in phase representation. *Phys. Rev. E*, 98:022217, Aug 2018.
- [5] B. Ermentrout. An adaptive model for synchrony in the firefly *pteroptyx malaccae*. *Journal of Mathematical Biology*, 29(6):571–585, 1991.
- [6] Roberto F. Galán, G. Bard Ermentrout, and Nathaniel N. Urban. Efficient estimation of phase-resetting curves in real neurons and its significance for neural-network modeling. *Phys. Rev. Lett.*, 94:158101, Apr 2005.

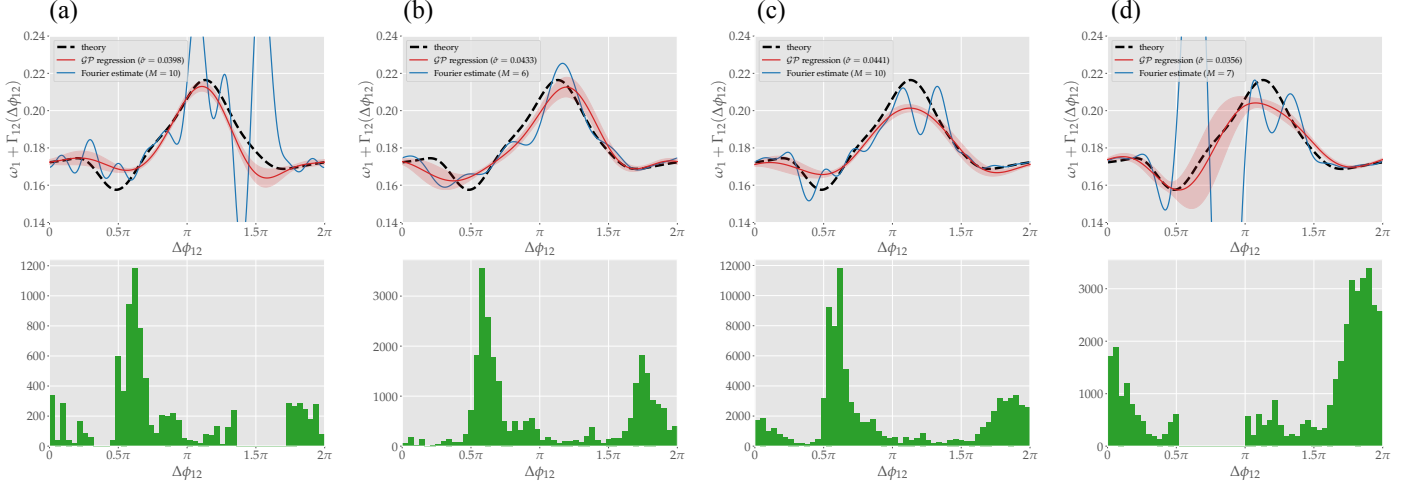


图 3: 估计的耦合函数 Γ_{12} 为耦合 FitzHugh-Nagumo 系统 (15)。理论 (虚黑线)、现有方法获得的结果 (实蓝线) 和提议的方法结果 (实红线)。(a) $N_{\text{init}} = 10, N_{\text{cycle}} = 5$ 。(b) $N_{\text{init}} = 30, N_{\text{cycle}} = 5$ 。(c) $N_{\text{init}} = 100, N_{\text{cycle}} = 5$ 。(d) 当相位差为 0.5π 或以上且 π 或以下的数据部分被丢弃时的 $N_{\text{init}} = 100, N_{\text{cycle}} = 5$ 。

- [7] Isao T. Tokuda, Swati Jain, István Z. Kiss, and John L. Hudson. Inferring phase equations from multivariate time series. *Phys. Rev. Lett.*, 99:064101, Aug 2007.
- [8] Tomislav Stankovski, Andrea Duggento, Peter V. E. McClintock, and Aneta Stefanovska. Inference of time-evolving coupled dynamical systems in the presence of noise. *Phys. Rev. Lett.*, 109:024101, Jul 2012.
- [9] Kaiichiro Ota and Toshio Aoyagi. Direct extraction of phase dynamics from fluctuating rhythmic data based on a bayesian approach, 2014.
- [10] Carl Edward Rasmussen and Christopher K. I. Williams. *Gaussian Processes for Machine Learning*. The MIT Press, 2006.
- [11] Motonobu Kanagawa, Philipp Hennig, Dino Sejdinovic, and Bharath K Sriperumbudur. Gaussian processes and kernel methods: A review on connections and equivalences. *arXiv preprint arXiv:1807.02582*, 2018.
- [12] David K Duvenaud, Hannes Nickisch, and Carl Rasmussen. Additive gaussian processes. In J. Shawe-Taylor, R. Zemel, P. Bartlett, F. Pereira, and K.Q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 24. Curran Associates, Inc., 2011.
- [13] Alexander G. de G. Matthews, Mark van der Wilk, Tom Nickson, Keisuke Fujii, Alexis Boukouvalas, Pablo León-Villagrà, Zoubin Ghahramani, and James Hensman. GPflow: A Gaussian process library using TensorFlow. *Journal of Machine Learning Research*, 18(40):1–6, apr 2017.
- [14] Edward Snelson and Zoubin Ghahramani. Sparse gaussian processes using pseudo-inputs. In *Proceedings of the 18th International Conference on Neural Information Processing Systems*, page 1257 – 1264, Cambridge, MA, USA, 2005. MIT Press.
- [15] Joaquin Quiñero Candela and Carl Edward Rasmussen. A unifying view of sparse approximate gaussian process regression. *J. Mach. Learn. Res.*, 6:1939 – 1959, 2005.
- [16] Michalis Titsias. Variational learning of inducing variables in sparse gaussian processes. In *Proceedings of the Twelfth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, volume 5 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 567–574. PMLR, 16–18 Apr 2009.
- [17] James Hensman, Nicolò Fusi, and Neil D.

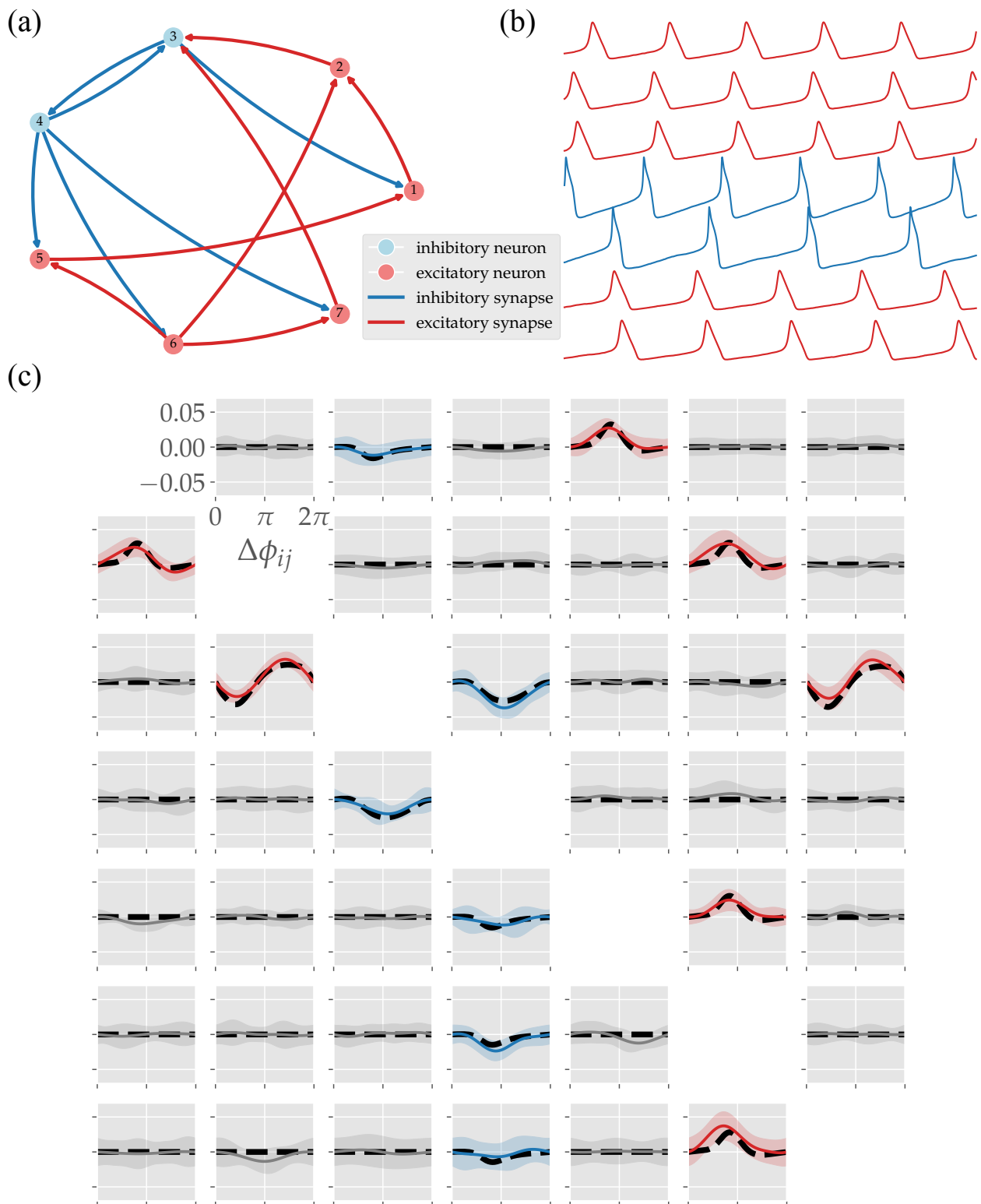


图 4: (a) 由五个兴奋性神经元和两个抑制性神经元耦合而成的脉冲神经网络, (b) 每个神经元的动作电位的时间序列, (c) 理论推导出的每个神经元之间的耦合函数 (黑色虚线) 以及使用高斯过程回归从数据中估计出的耦合函数 (红色实线: 兴奋性连接; 蓝色实线: 抑制性连接; 灰色实线: 无连接)。请注意, 每个耦合函数 Γ_{ij} 被翻译为在 $\Delta\phi_{ij} = 0$ 处取 0 以进行比较。

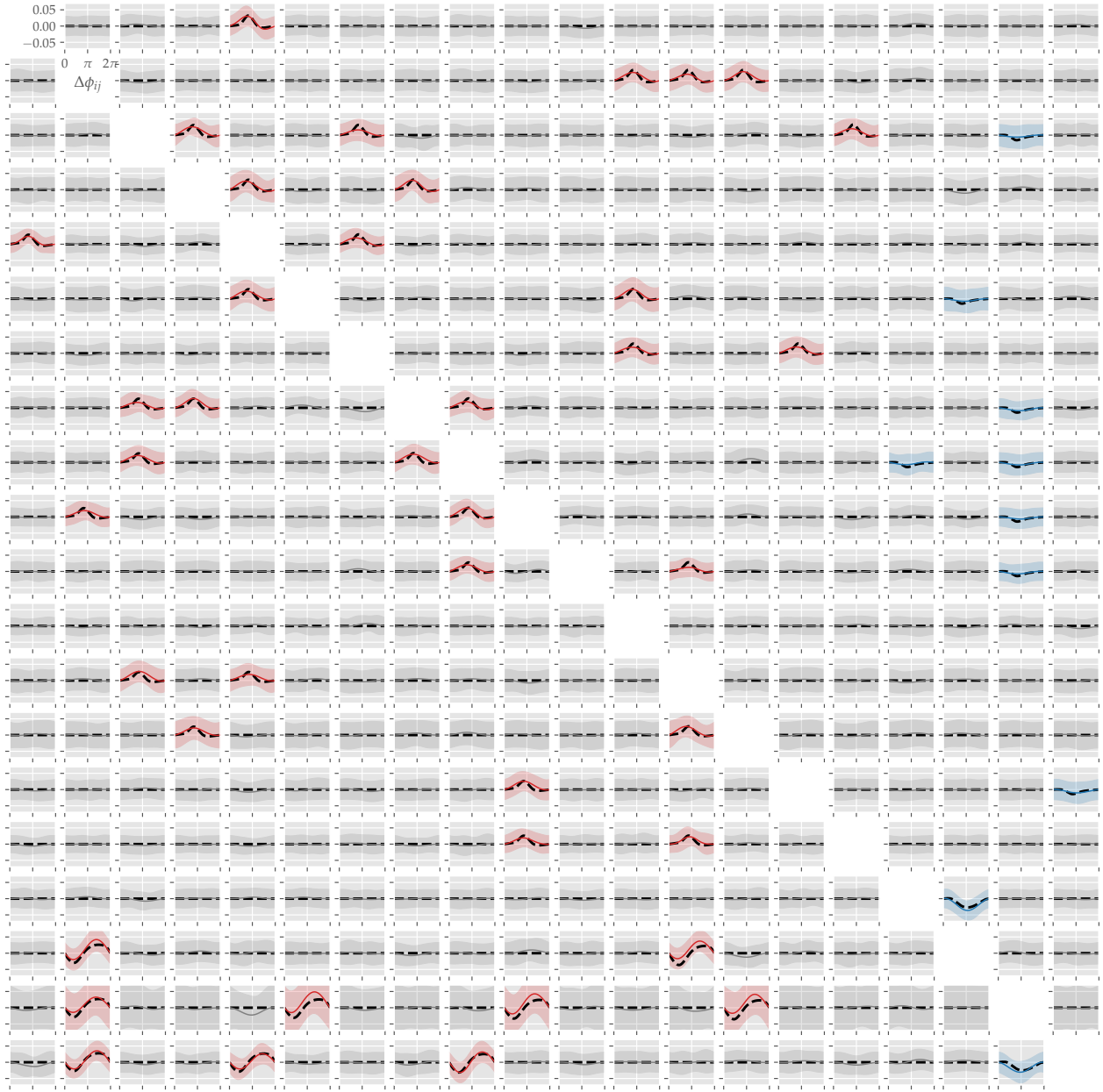


图 5: 理论上推导出的每个神经元之间的耦合函数 (黑色虚线) 和使用高斯过程回归从数据中估计出的耦合函数 (红色实线: 兴奋性连接; 蓝色实线: 抑制性连接; 灰色实线: 无连接)。请注意, 每个耦合函数 Γ_{ij} 经过转换在 0 时取 $\Delta\phi_{ij} = 0$ 进行比较。

Lawrence. Gaussian processes for big data. In Proceedings of the Twenty-Ninth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, UAI'13, page 282 – 290, Arlington, Virginia, USA, 2013. AUAI Press.

[18] James Hensman, Alexander Matthews, and Zoubin Ghahramani. Scalable Variational Gaussian Process Classification. In Guy Lebanon and S. V. N. Vishwanathan, editors, Proceedings of the Eighteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, volume 38 of Proceedings of Machine Learning Research, pages 351–360, San Diego, California, USA, 09–12 May 2015. PMLR.

[19] Björn Kralemann, Laura Cimponeriu, Michael Rosenblum, Arkady Pikovsky, and Ralf Mrowka. Uncovering interaction of coupled oscillators from data. Phys. Rev. E, 76:055201, 2007.

[20] Björn Kralemann, Laura Cimponeriu, Michael Rosenblum, Arkady Pikovsky, and Ralf Mrowka. Phase dynamics of coupled oscillators reconstructed from data. Phys. Rev. E, 77:066205, Jun 2008.

[21] Richard FitzHugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. Biophysical Journal, 1(6):445–466, 1961.

[22] J. Nagumo, S. Arimoto, and S. Yoshizawa. An active pulse transmission line simulating nerve axon. Proceedings of the IRE, 50(10):2061–2070, 1962.

[23] A. L. Hodgkin and A. F. Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. The Journal of Physiology, 117(4):500–544, 1952.

[24] A. Destexhe, Z. F. Mainen, and T. J. Sejnowski. An Efficient Method for Computing Synaptic Conductances Based on a Kinetic Model of Receptor Binding. Neural Computation, 6(1):14–18, 01 1994.

附录 A. 尖峰神经元

我们下面写出 Hodgkin-Huxley 模型的细节 [23].

$$\begin{aligned} C\dot{V} &= G_{\text{Na}}m^3h(E_{\text{Na}} - V) + G_{\text{K}}n^4(E_{\text{K}} - V) \\ &\quad + G_{\text{L}}(E_{\text{L}} - V) + I_{\text{input}} + \xi_V, \\ \dot{m} &= \alpha_m(V)(1 - m) - \beta_m(V)m + \xi_m, \\ \dot{h} &= \alpha_h(V)(1 - h) - \beta_h(V)h + \xi_h, \\ \dot{n} &= \alpha_n(V)(1 - n) - \beta_n(V)n + \xi_n, \end{aligned} \tag{A.1}$$

参数值为 $C = 1, G_{\text{Na}} = 120, G_{\text{K}} = 36, G_{\text{L}} = 0.3, E_{\text{Na}} = 50, E_{\text{K}} = -77, E_{\text{L}} = -54.4$ 。辅助函数 $\alpha_{m,h,n}, \beta_{m,h,n}$ 是

$$\begin{aligned} \alpha_m(V) &= \frac{0.1(V + 40)}{1 - \exp[(-V - 40)/10]}, \\ \alpha_h(V) &= 0.07 \exp \frac{-V - 65}{20}, \\ \alpha_n(V) &= \frac{0.01(V + 55)}{1 - \exp[(-V - 55)/10]}, \\ \beta_m(V) &= 4 \exp \frac{-V - 65}{18}, \\ \beta_h(V) &= \frac{1}{1 + \exp[(-V - 35)/10]}, \\ \beta_n(V) &= 0.125 \exp \frac{-V - 65}{80}, \end{aligned}$$

快速放电神经元的模型,

$$\begin{aligned} C\dot{V} &= G_{\text{Na}}m^3h(E_{\text{Na}} - V) + G_{\text{K}}n^2(E_{\text{K}} - V) \\ &\quad + G_{\text{L}}(E_{\text{L}} - V) + I_{\text{input}} + \xi_V, \\ \dot{m} &= \alpha_m(V)(1 - m) - \beta_m(V)m + \xi_m, \\ \dot{h} &= \alpha_h(V)(1 - h) - \beta_h(V)h + \xi_h, \\ \dot{n} &= \alpha_n(V)(1 - n) - \beta_n(V)n + \xi_n, \end{aligned} \tag{A.2}$$

参数值为 $C = 1, G_{\text{Na}} = 112, G_{\text{K}} = 224, G_{\text{L}} = 0.1, E_{\text{Na}} = 55, E_{\text{K}} = -97, E_{\text{L}} = -70.0$ 。辅助函数 $\alpha_{m,h,n}, \beta_{m,h,n}$ 是

$$\begin{aligned} \alpha_m(V) &= \frac{40(V - 75)}{1 - \exp[(75 - V)/13.5]}, \\ \alpha_h(V) &= 0.0035 \exp \frac{-V}{24.186}, \\ \alpha_n(V) &= \frac{V - 95}{1 - \exp[(95 - V)/11.8]}, \\ \beta_m(V) &= 1.2262 \exp \frac{-V}{42.248}, \\ \beta_h(V) &= \frac{0.017(-51.25 - V)}{\exp[(-51.25 - V)/5.2] - 1}, \\ \beta_n(V) &= 0.025 \exp \frac{-V}{22.222}. \end{aligned}$$

对于每个细胞 i ，输入电流是偏置电流和突触电流之和，

$$I_{\text{input},i} = I_{\text{bias},i} + \sum_{j \in \text{pre}_i} I_{\text{syn},ij}. \quad (\text{A.3})$$

这里， pre_i 表示向第 i 个细胞发送突触输入的细胞索引集。我们将偏置电流设置为 $I_{\text{bias},i} = 30, 32, 6, 6.5, 34, 36, 38$ 对应于 $i = 1, 2, \dots, 7$ 。

通过突触的电流， $I_{\text{syn},ij}$ ，使用动力学突触模型 [24] 进行建模，在该模型中表示为

$$I_{\text{syn},ij} = G_{ij} r_{ij}(t) [V_i(t) - E_{ij}]. \quad (\text{A.4})$$

结合受体蛋白的比例由 r_{ij} 表示，其动态变化通过以下方程描述：

$$\frac{dr_{ij}}{dt} = \alpha_{ij} T_{ij} (1 - r_{ij}) - \beta_{ij} r_{ij}, \quad (\text{A.5})$$

其中， T_{ij} 是神经递质的浓度，在前突触细胞发出尖峰时设置为 1，并在 1 毫秒后重置为 0。常数 α_{ij} 和 β_{ij} 控制 r_{ij} 的动力学，而 E_{ij} 是反向电位且 G_{ij} 是突触电导。兴奋性和抑制性突触使用的值分别为 $(\alpha_{ij}, \beta_{ij}, E_{ij}, G_{ij}) = (1.1, 0.67, 0, 0.5)$ 和 $(9.8, 0.2, -75, 0.4)$ 。此外，一个弱的、独立的噪声函数 $\xi_{x,i}$ 被添加到膜电位 V_i 和通道变量 m_i 、 h_i 和 n_i 中。噪声遵循高斯白噪声分布，其中 $\langle \xi_{x,i}(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \xi_{x,i}(t) \xi_{y,j}(s) \rangle = \sigma_x^2 \delta_{xy} \delta_{ij} \delta(t - s)$ ，其中 $x, y = V, m, h, n$ ，以及 i 和 j 是单元索引。使用的噪声强度为 $\sigma_V = 0.5$ 和 $\sigma_m = \sigma_h = \sigma_n = 5 \times 10^{-6}$ 。