Análise de redes complexas por interações de ordem superior e em multi-escalas

Palavras-Chave: redes, renormalização, simplícios

Autores:

Gabriel Almeida dos Santos Bonin – IMECC

Prof. Dr. José Antônio Brum (orientador) - IFGW

INTRODUÇÃO:

A representação de sistemas complexos na forma de redes complexas baseia-se na identificação de agentes do sistema por meio de nós (*nodes*) e a interação entre eles por meio de conexões (*links*) [1,2]. Com isso, temos a formação de uma rede complexa. A teoria de redes complexas apoia-se fundamentalmente na teoria de grafos [3].

O principal objetivo desse projeto está no desenvolvimento de metodologias que permitam estudar as redes complexas em diversas escalas. Devido ao grande número de nós e conexões que redes reais possuem, é de interesse buscar uma forma de reduzir o seu tamanho, reescalonando-a, mas sem perder suas propriedades. Isso vai de encontro também à dificuldade que, para muitos sistemas, temos de descrever a rede em sua menor escala possível por limitações técnicas. O foco desse estudo está nas redes neurais do nematódeo *Caernohabditis elegans* (*C. elegans*), embora sua aplicação possa ser estendida para diversas outras áreas. O nosso interesse, portanto, está em dominar e desenvolver métodos de renormalização das redes e, com isso, identificar as propriedades que são persistentes nas diversas escalas mas também identificar propriedades emergentes e que caracterizam escalas específicas [4,5,6].

Nesse projeto damos ênfase a duas técnicas de renormalização: (1) Laplaciano; (2) Geométrica. Além disso, busca-se introduzir o formalismo de complexo simplicial, uma ferramenta vinda da teoria de topologia algébrica [7,8] para calcular buracos de dimensão superior em representações de dimensão superior de redes, definidas como complexo simplicial, tendendo a ser de grande importância na neurociência, descrevendo estruturas do cérebro que não podem ser analisadas usando a teoria de grafos usual.

METODOLOGIA:

A teoria de redes complexas será baseada na teoria de grafos [3], seguindo trabalhos desenvolvidos ao longo dos últimos vinte anos e que podem ser sintetizados nas referências [1,2]. É importante ressaltar que parte da construção da formação básica para esse projeto se deu nos trabalhos de Iniciação Científica anteriores [9]. A aplicação para redes neurais, em particular para redes neurais do cérebro, tem sido uma das áreas de grande aplicação. O estudo de renormalização e escalas em redes utilizará os trabalhos em desenvolvimento do grupo no estudo de renormalização de redes complexas seguindo dois métodos: a renormalização geométrica [4,5,10] e a renormalização pelo laplaciano [6,11]. Finalmente, a análise de redes por complexo simplicial será baseada principalmente nas referências [6,7,8].

Os trabalhos computacionais serão desenvolvidos na linguagem *Python*, utilizando diversas bibliotecas como *Numpy*, *Pandas*, *Networkx*, entre outras. Para visualização, será também utilizado o pacote *Gephi*.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Complexos Simpliciais

Vamos introduzir estruturas de alta ordem além de nós e arestas, para construir um objeto mais robusto: um complexo simplicial [7,8]. Essa descrição de ordem superior da rede é um tópico recente na literatura, e seu uso para entender a estrutura de dados é chamado de análise topológica de dados ou topologia algébrica aplicada. Esse tipo de análise representa uma nova abordagem para compreender problemas na neurociência como a conexão formal entre a rede estrutural e a rede funcional do cérebro.

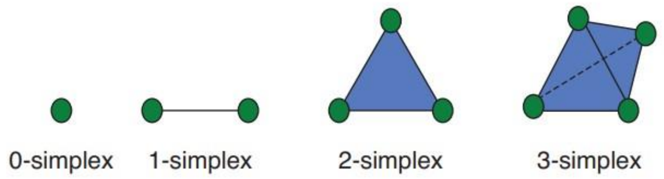


Figura 1: Exemplo geométrico para visualização da definição de simplex. Retirado de [8]

Uma definição informal pode ser escrita como: um *k-simplex* é um esqueleto de um grafo com (k+1) nós e com seu k-volume totalmente preenchido. Em outras palavras, um único nó representa um 0-simplex, uma única aresta é um 1-simplex, um triângulo com área preenchida representa um 2-simplex, um tetraedro com volume preenchido é um 3-simplex e assim por diante. A Figura 1 mostra essa definição vista geometricamente.

Dessa maneira, torna-se necessário introduzir uma série de definições e teoremas com o intuito de estabelecer a base teórica para a caracterização de redes por complexos simpliciais e a análise de cavidades nessas redes. Em um segundo momento, todas as definições e teoremas serão expostos e desenvolvidos satisfatoriamente.

Renormalização Laplaciana

Trata-se de um método para tornar a rede menos detalhada com base em suas propriedades estruturais, adaptando o modelo de *coarse-graining* de correlações diretas desenvolvido por L. Meshulam et al. [12]. Dessa maneira, não se trata de um modelo de renormalização completo, pois ainda resta implementar técnicas de agrupamento dos links, que vem sendo desenvolvido pelo grupo atualmente.

A ideia básica é formar super-nós através do *coarse-graining* de dois nós que possuem uma correlação mais forte. Estamos interessados em realizar o *coarse-graining* da rede estrutural (sem dependência temporal), o que sugere o uso da função de correlação da teoria de campo, $< \phi_i \phi_j >$ - $< \phi_i >< \phi_j >$, em que $<.>$ denota uma média sobre um *ensemble*, utilizando a matriz Laplaciana discreta para obter um procedimento de coarse-graining para a rede estrutural.

Dada uma função de correlação, o coarse-graining dos nós pode ser realizado, de modo que haja uma ordenação com base nos valores de correlação, seguindo o modelo de Bialek [13], ou seja, um "super nó" é formado a partir dos dois nós mais fortemente correlacionados, iterando sobre toda a rede.

Renormalização Geométrica

A renormalização geométrica foi desenvolvida pelo grupo de Angeles Serrano [10] e de maneira geral, a ideia é realizar uma renormalização de uma rede complexa mapeando-a em um espaço hiperbólico. A rede será identificada por métricas (ou variáveis) escondidas associadas à similaridade e à conectividade dos nós. Com essas variáveis, dois modelos para o espaço hiberbólico são considerados, o S^1 e o H^2, que por sua vez são isomórficos. Na prática, e no nosso caso, utilizamos o modelo S^2 no disco de Poincaré.

Análises

Uma vez expostos os conceitos de complexos simpliciais e a teoria de renormalização de redes, é possível agora caracterizar uma rede complexa real utilizandos esses conceitos. A rede binária e não direcionada que trataremos aqui pertence ao conectoma do nematoide *C.elegans*, que pode ser encontrada em [14]. Essa rede possui 279 neurônios e 2287 conexões.

Na Figura 2 temos visualmente a distribuição do número de simplícios em função da dimensão analisada.

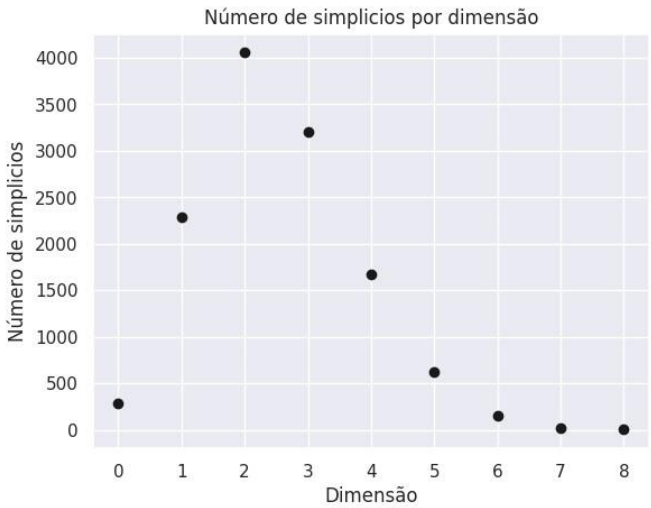
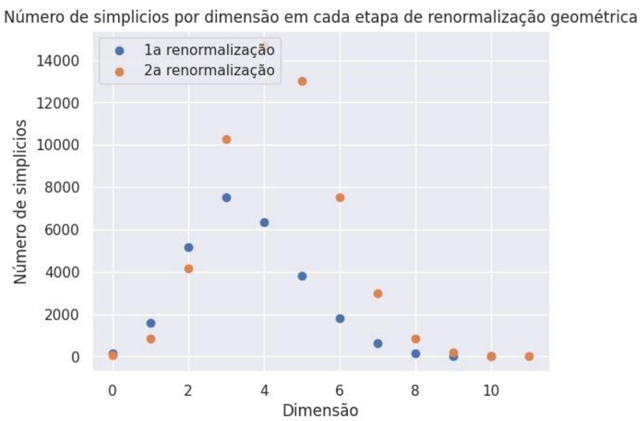


Figura 2: Número de simplicios encontrados na *C.elegans* em função da dimensão

Podemos também introduzir resultados em relação as duas técnicas de renormalização de redes. Isso nos permitirá entender a estrutura da rede da *C.elegans* em mais de uma escala sob o ponto de vista dos complexos simpliciais. Calcularemos o número de simplícios em cada etapa de renormalização (Figura 3).



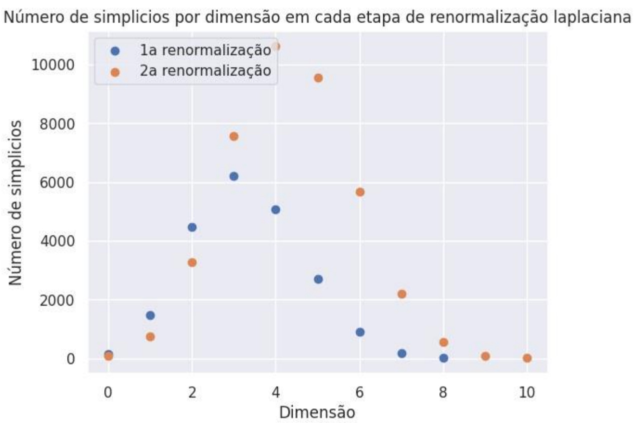


Figura 3: Número de simplícios encontrados na *C.elegans* após duas etapas de renormalização geométrica à esquerda e laplaciana à direita.

Dessa forma, vemos que até em uma estrutura relativamente simples e com poucas conexões, como da *C.elegans*, é possível encontrar interações de ordem superior, que se evidencia na presença de simplícios complexos de dimensão oito.

Além disso, é notável a semelhança entre a distribuição do número de simplícios por dimensão nas duas etapas de renormalização usando dois métodos distintos. Isso pode indicar que os métodos de renormalização são semelhantes em termos das estruturas que surgem a cada etapa de renormalização, pelo menos do ponto de vista de complexos simpliciais.

CONCLUSÕES:

Neste estudo, empregamos o conectoma da *C. elegans* como base para testar métodos de renormalização e identificar as estruturas de ordem superior provenientes da teoria dos complexos simpliciais. Utilizamos a renormalização geométrica como referência, estabelecendo-a como um ponto de comparação com a laplaciana. Durante nossa análise, observamos as propriedades estatísticas que caracterizam essa rede e as comparamos com as mesmas propriedades das redes renormalizadas por meio dos dois métodos.

Os próximos passos do trabalho envolvem entender como conexões com peso, ou seja, redes não binárias, influenciam na preservação da estrutura em diferentes escalas, assim como analisar essas redes do ponto de vista dos complexos simpliciais.

.BIBLIOGRAFIA

[1] M.E.J. Newman. Networks. Oxford; New York: Oxford University Press, 2010.

[2] A.L. Barabási. Network Science. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.

[3] B. Bollobas. Modern Graph Theory. New York, US: Springer, 1998.

[4] A. A. Piovesana. Renormalization Methods in Networks. PIBIC. University of Campinas, 2021.

[5] A. A. Piovesana. Renormalization Methods in Networks. PIBIC. Essay of course conclusion. University of Campinas, 2021.

[6] Matheus de C. Loures. "*Renormalization and scaling in simplicial complexes*". Tese de mestrado. Institute of Physics Gleb Wataghin – University of Campinas, 2022.

[7] A. Hatcher. Algebraic Topology. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2002.

[8] G. Bianconi. *Higher-Order Networks: An Introduction to Simplicial Complexes*. 1st. Cambridge, UK: Springer, 2021.

[9] G. A. dos S. Bonin, Estudo da transmissão de informação em redes complexas. Relatório Final – PIBIC. University of Campinas, 2023.

[10] G. Carcía-Pérez, M. Boguña e M. Ángeles Serrano. "*Multiscale unfolding of real networks by geometric renormalization*". Em: Nature Physics 14 (2018), pp. 583-589. DOI: https://doi.org/10.1038/s41567-018-0072-5.

[11] Matheus de C. Loures, Alan Albert Piovesana e José Antônio Brum. *Laplacian Coarse Graining in Complex Networks.* 2023. arXiv: 2302.07093 [cond-mat.des-nn].

[12] V. Lahoche, D.O. Samary e M. Tamaazousti. "*Field Theoretical Approach for Signal Detection in Nearly Continuous Positive Spectra I: Matricial Data*". Em: *Entropy 23 (2021)* p. 1132. DOI: https://doi.org/10.3390/e23091132.

[13] L. Meshulam et al. "*Coarse Graining, Fixed Points and Scaling in a Large Population of Neurons*". Em: Phys. Ver. Lett. 123 (2019), p. 178103. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.178103.

[14] B.L. Chen, D.H. Hall e D.B Chklovskii. “*Wiring optmization can relate neuronal structure and function*”. Em: Proceedings of National Academy of Sciences 103 (2006). https://www.wormatlas.org/neuronalwiring.html\#Connectivitydata, pp. 4723-4728. DOI: 10.1073/pnas.0506806103.