

Präsentation der Bachelorarbeit

Analyse und Simulation neuronaler Schwarmdynamik

Rene-Marcel Lehner

27.9.2023

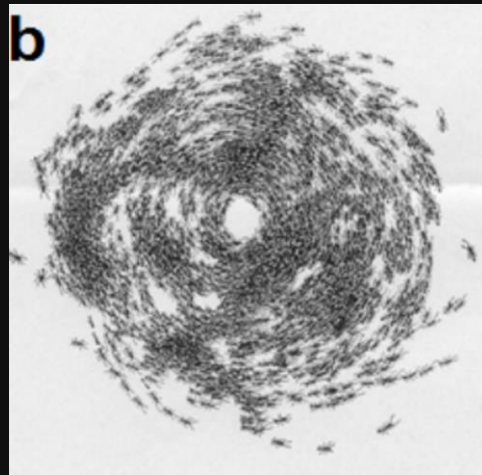
Inhalt

- Motivation
- Vicsek-Modell
- Topologisches Modell
- Metrisch-Topologisches Modell
- Maschinelles Lernen

Was ist Schwarmdynamik?

Schwarm

- Topologische, räumliche Struktur
- Kollektives Merkmal, das durch **individuelle Entscheidungen** entsteht



Was ist Schwarmdynamik?

Schwarm

- Topologische, räumliche Struktur
- Kollektives Merkmal, das durch **individuelle Entscheidungen** entsteht



Abbildungen sind aus Vicsek et al., PR (2012),
zu i: Vicsek et al., Nature (2000)

Begriffsklärung

Schwarm

- Topologische, räumliche Struktur
- Kollektives Merkmal, das durch **individuelle Entscheidungen** entsteht

Dynamik

- **Zeitaufgelöste** Änderungen eines physikalischen Systems
- **Zugrundeliegende Mechanismen**, die das Verhalten des Systems bestimmen (z.B. Wechselwirkungen, Kräfte, Axiome, **Regeln**)

Reichweite und Relevanz

- Wie **weitreichend** ist dieses Thema?

Kollektives Verhalten

Schwarmdynamik

Kollektive Intelligenz

Soziale Netzwerke

- Schwarmintelligenz¹
- Ameisen- und Bienenalgorithmen¹

- Meinungsdynamik²
- Finanz- und Wirtschaftsdynamik²

- **Komplexes** Verhalten bzw. Strukturen bilden sich aus **einfachen individuellen** Entscheidungen bzw. Regeln
- **Universalität** noch **nicht vollständig verstanden**

1 – Kumar et al., IJET (2013)

2 – Aletti et al., Birkhäuser (2010)

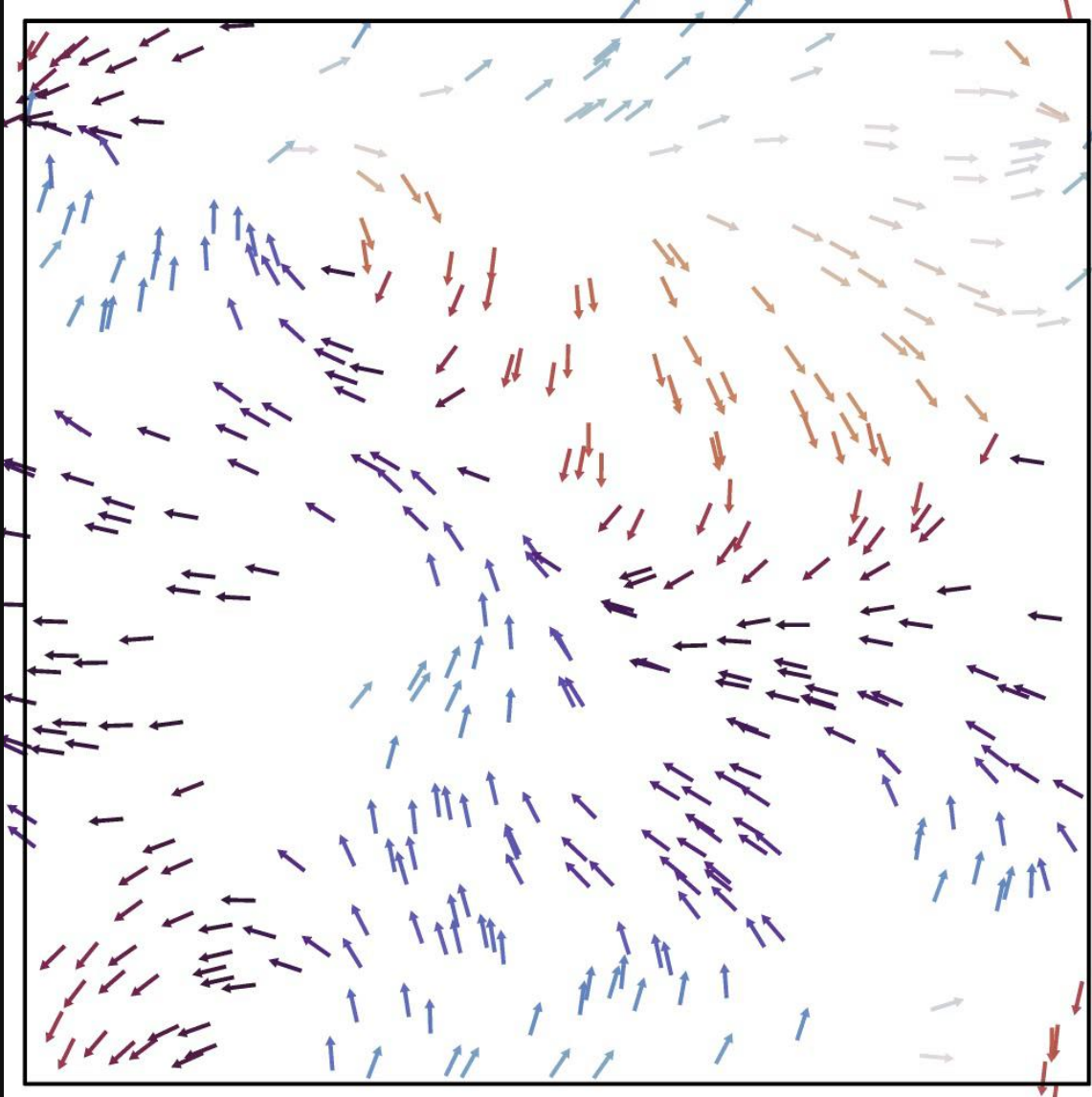
Ziel der Arbeit

- Zentrale Fragen dieser Arbeit:
 - 1) Kann maschinelles Lernen helfen, bestehende Modelle zu verbessern?
 - 2) Lernt ein Algorithmus ohne Hilfestellung die bestehenden Modelle?
- *Proof-of-concept*

Was ist ein grundlegendes Modell der Schwarmdynamik?

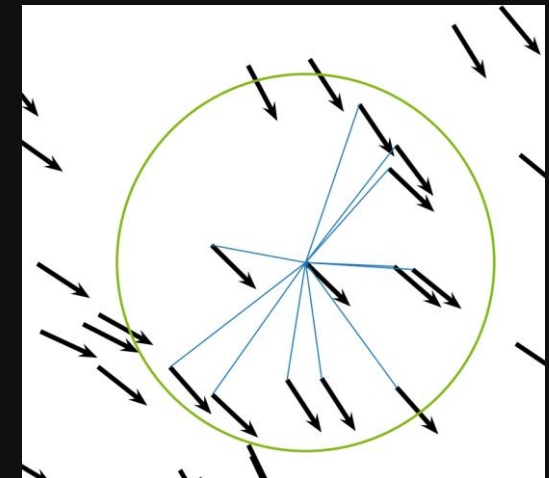
Das **Vicsek-Modell**

Vicsek-Modell - Simulation



- $N = 400$
- $\eta = 0.1$
- $L = 10$
- $\rho = 4$

Veranschaulichung: Wechselwirkungsradius



Vicsek-Modell

- **Entdimensionalisierung** – Charakteristische Größen

- Charakteristische

- Länge

$$r[\text{m}]$$

- Geschwindigkeit

$$v_0[\text{m/s}]$$

- Zeit

$$\tau = \frac{r}{v_0}[\text{s}]$$

- Entdimensionalisierte

- Position

$$\tilde{\mathbf{x}}_i = \frac{\mathbf{x}_i}{r}$$

- Geschwindigkeit

$$\tilde{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{v}_i}{v_0}$$

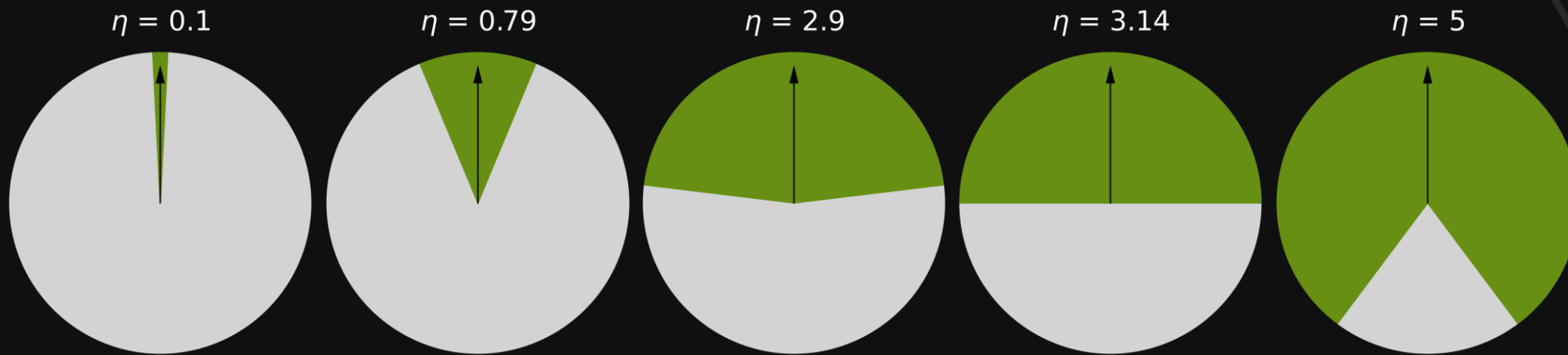
- Simulationszeit

$$\tilde{t} = \frac{t}{\tau}$$

$$\text{mit } \Delta\tilde{t} = 1$$

Vicsek-Modell

- Euler-Methode: $\tilde{\mathbf{x}}_i(\tilde{t} + 1) = \tilde{\mathbf{x}}_i(\tilde{t}) + \tilde{\mathbf{v}}_i(\tilde{t})\Delta\tilde{t}$
- Neuer Winkel: $\theta_i(\tilde{t} + 1) = \langle \theta(\tilde{t}) \rangle_{r,i} + \Delta\theta_i$, $\Delta\theta_i \in [-\eta/2, \eta/2]$
 $\eta \in [0, 2\pi]$



Vicsek-Modell

$$\theta_i(\tilde{t} + 1) = \langle \theta(\tilde{t}) \rangle_{r,i} + \Delta\theta_i$$

- Winkel-Mittelung: $\langle \theta(\tilde{t}) \rangle_r = \arctan \left[\frac{\langle \sin(\theta(\tilde{t})) \rangle_r}{\langle \cos(\theta(\tilde{t})) \rangle_r} \right]$
- Wechselwirkungspartner: $n_r = \rho\pi r^2 = N \frac{\pi r^2}{L^2}$
- Ordnungsparameter: $v_a = \frac{1}{Nv_0} \left| \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \right|$

Ordnungsparameter

- Dienen der **Bewertung eines Systemzustandes**
- Verschiedene Ordnungsparameter (OP) **untersuchen** unterschiedliche **Zustands-Eigenschaften**
- Die Vicsek-Regel *maximiert* den Vicsek-OP v_a

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial \varphi_k} v_a^2 \quad \Rightarrow \quad \varphi_k = \arctan \left(\frac{\langle \sin \varphi \rangle}{\langle \cos \varphi \rangle} \right)$$

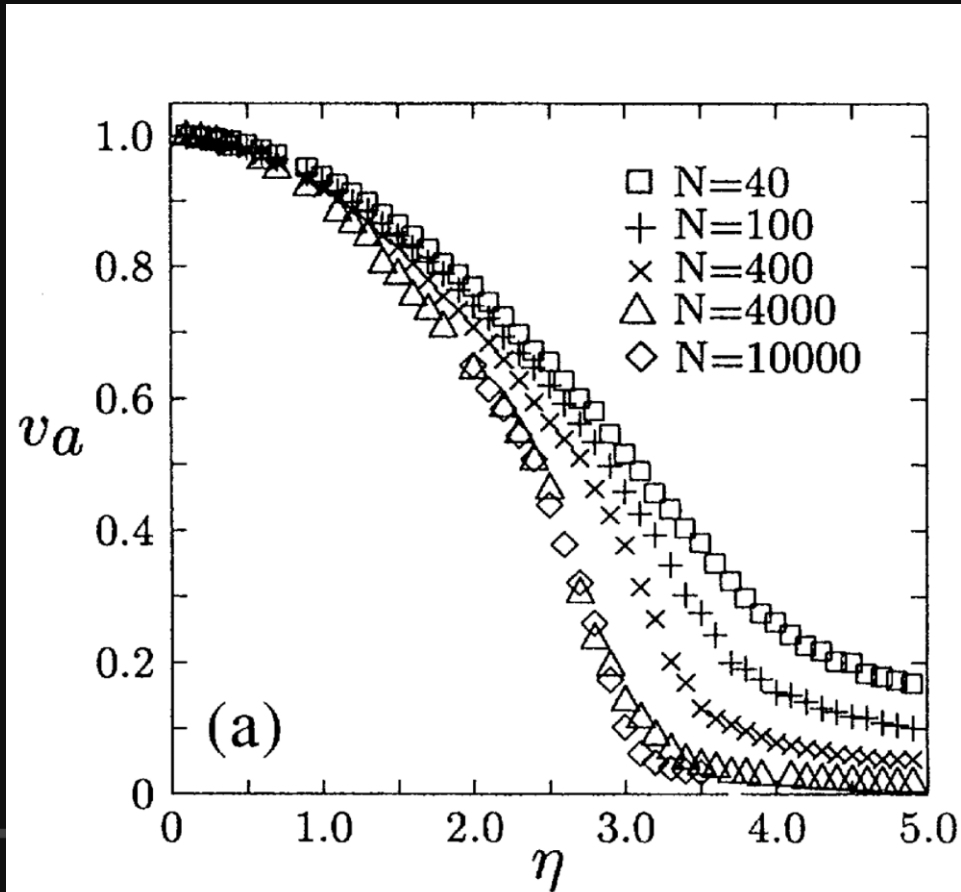
Vicsek-Regel

$$\langle \theta(\tilde{t}) \rangle_r = \arctan \left[\frac{\langle \sin(\theta(\tilde{t})) \rangle_r}{\langle \cos(\theta(\tilde{t})) \rangle_r} \right]$$

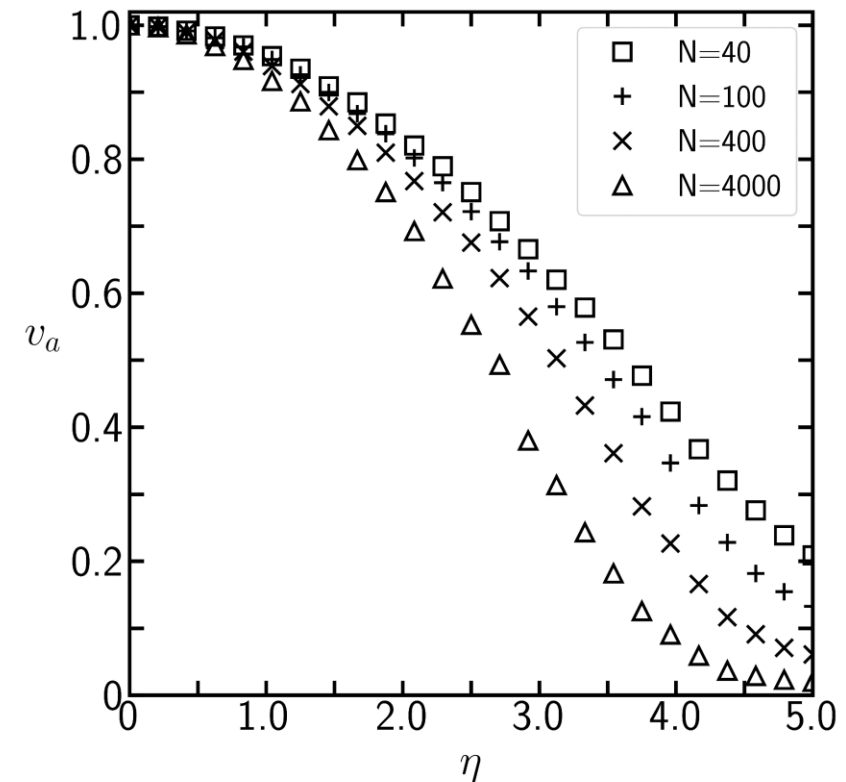
Vicsek-Modell - Ergebnisse

- Ordnungsparameter - Rauschvariation

Referenzergebnisse des Vicsek-Modells



Messergebnisse des Vicsek-Modells

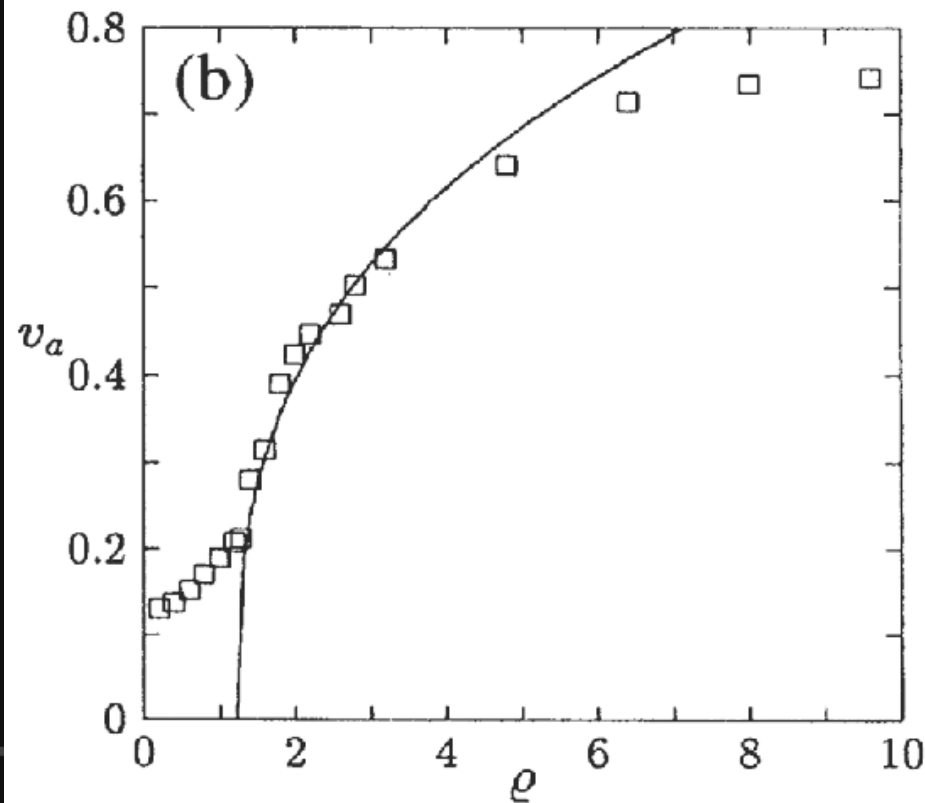


Dichte $\rho = 4$

Vicsek-Modell - Ergebnisse

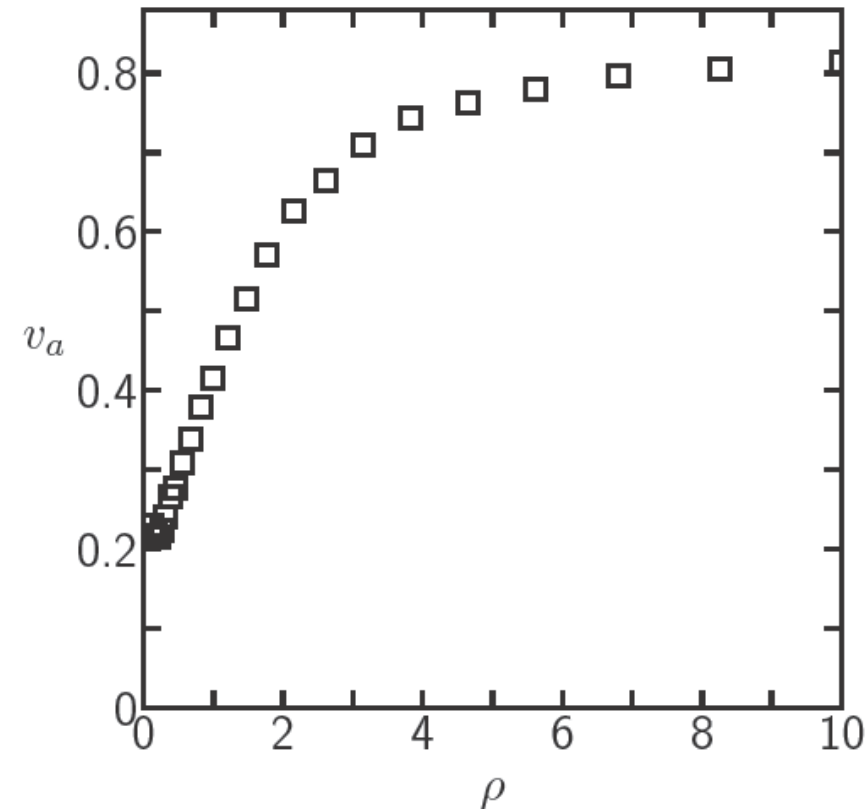
- Ordnungsparameter - Dichtevariation

Referenzergebnisse des Vicsek-Modells



Rauschen η unbekannt

Messergebnisse des Vicsek-Modells

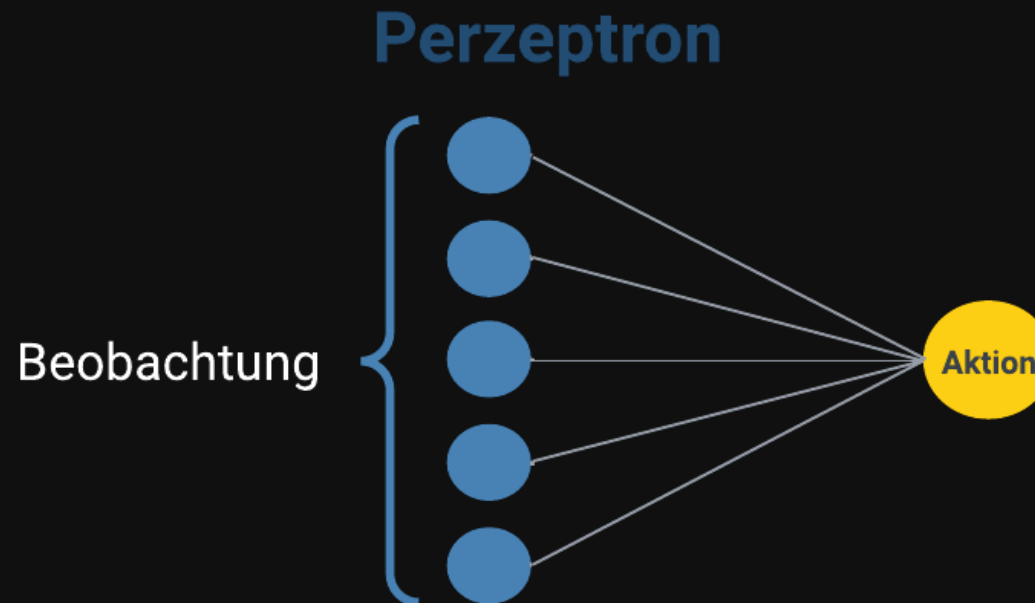


Rauschen $\eta = 2.0$

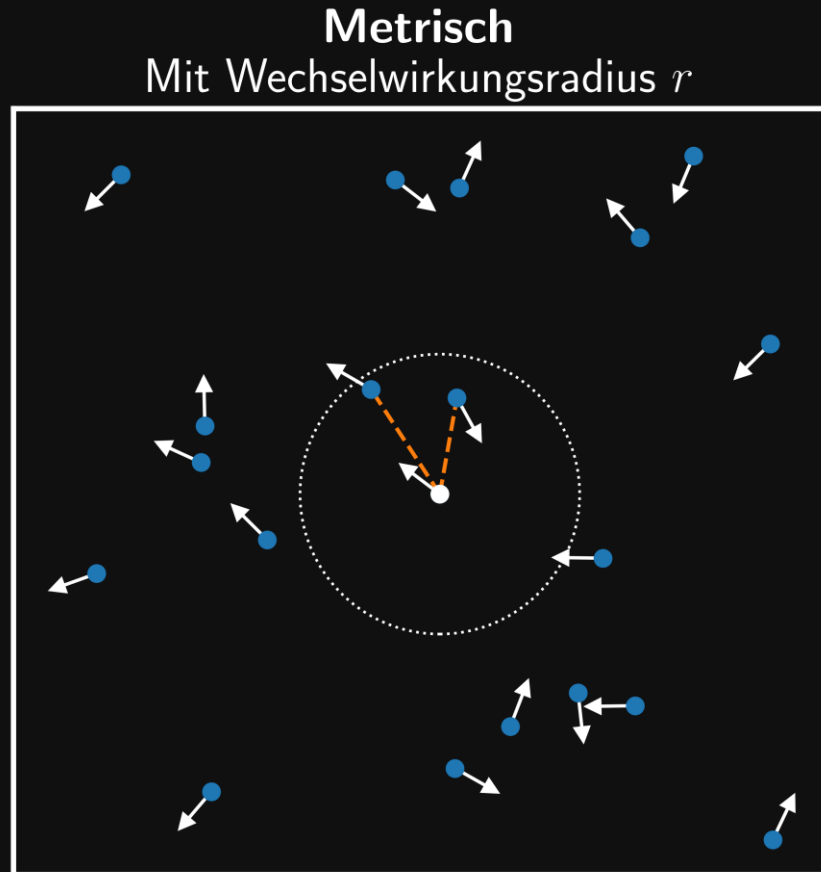
$L = 20$

Motivation eines topologischen Modells

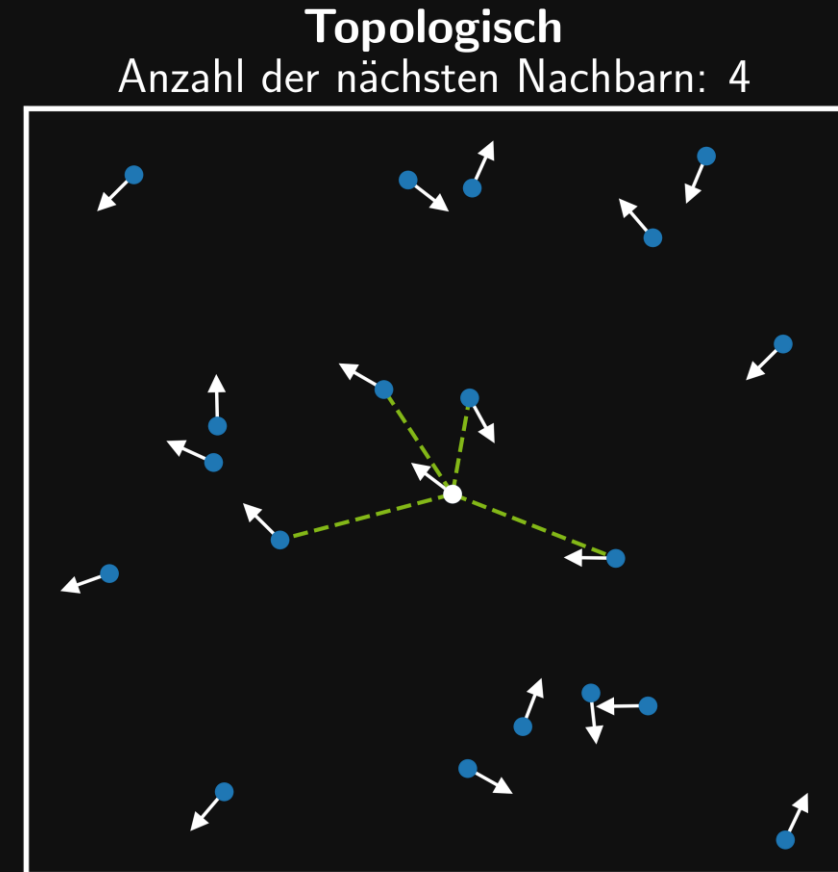
- Reicht das Vicsek-Modell?
- Vicsek-Modell **nicht** für **neuronale Netze** geeignet
- **Feste Anzahl** von Nachbarn wünschenswert
 - Topologische Nachbarschaftsauswahl
- Vicsek-Modell **topologisch** modifizieren



Topologisches Modell - Nachbarschaftsauswahl



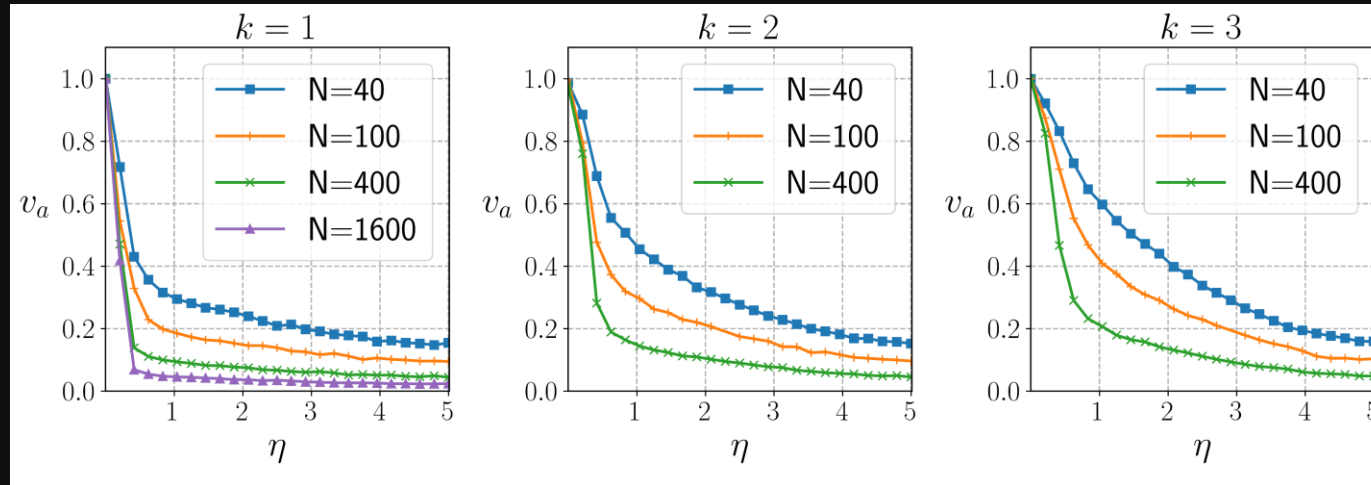
- Unbegrenzte Nachbar-Anzahl möglich
- Räumlich begrenzt



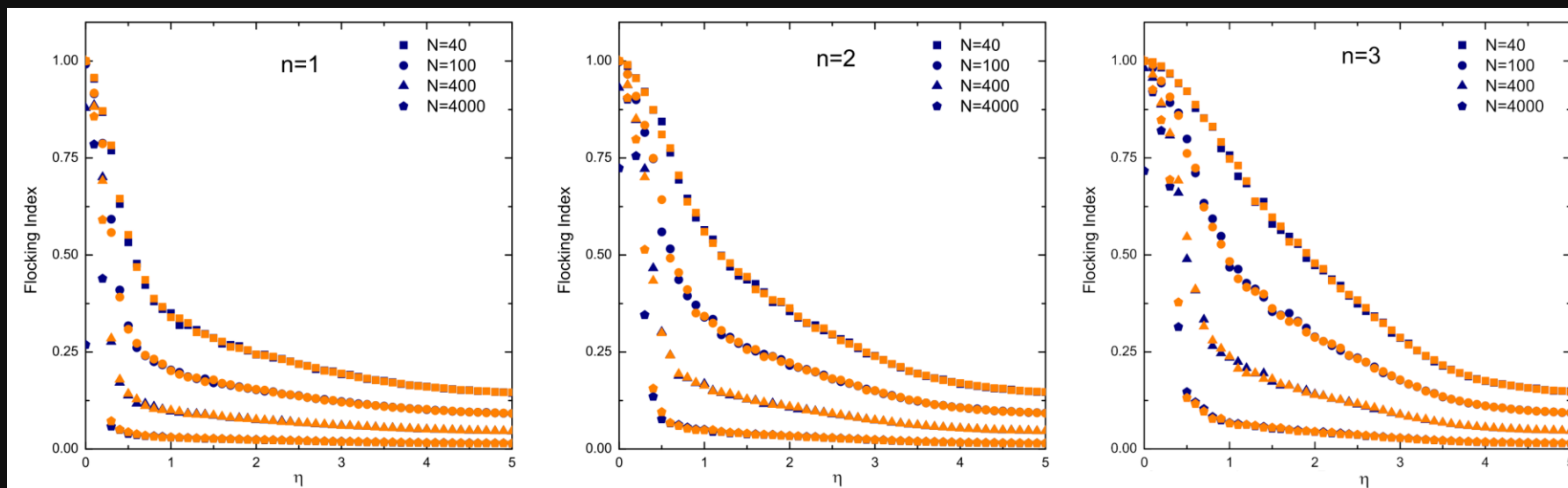
- Begrenzte Nachbar-Anzahl
- Räumlich theoretisch unbegrenzt

Topologisches Modell - Ergebnisse

Messergebnisse des topologischen Modells

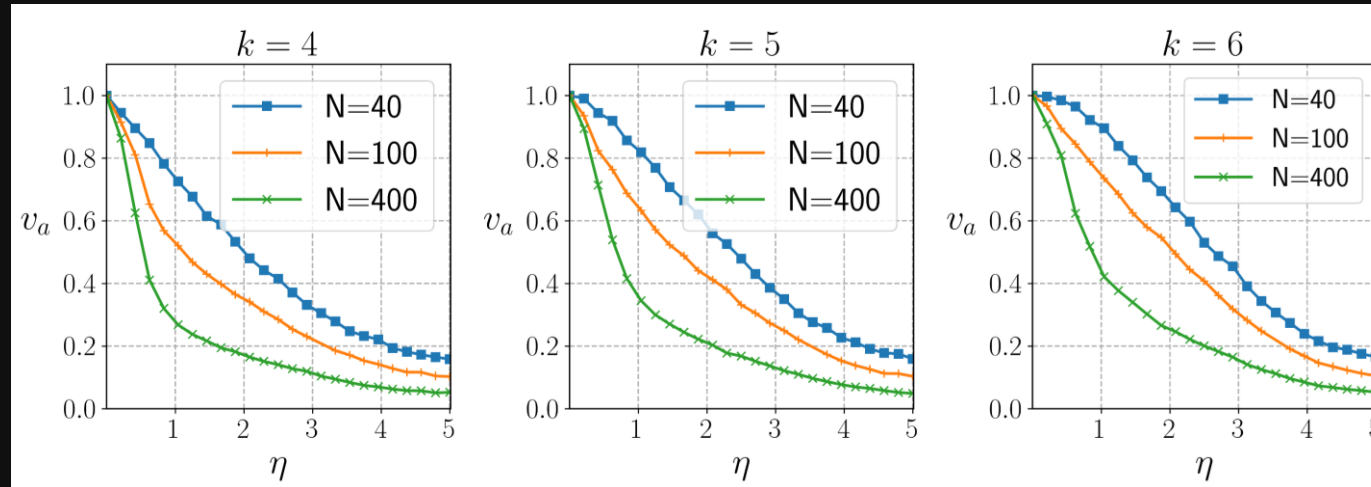


Referenzergebnisse des topologischen Modells (Christodoulidi et al., WS (2014))

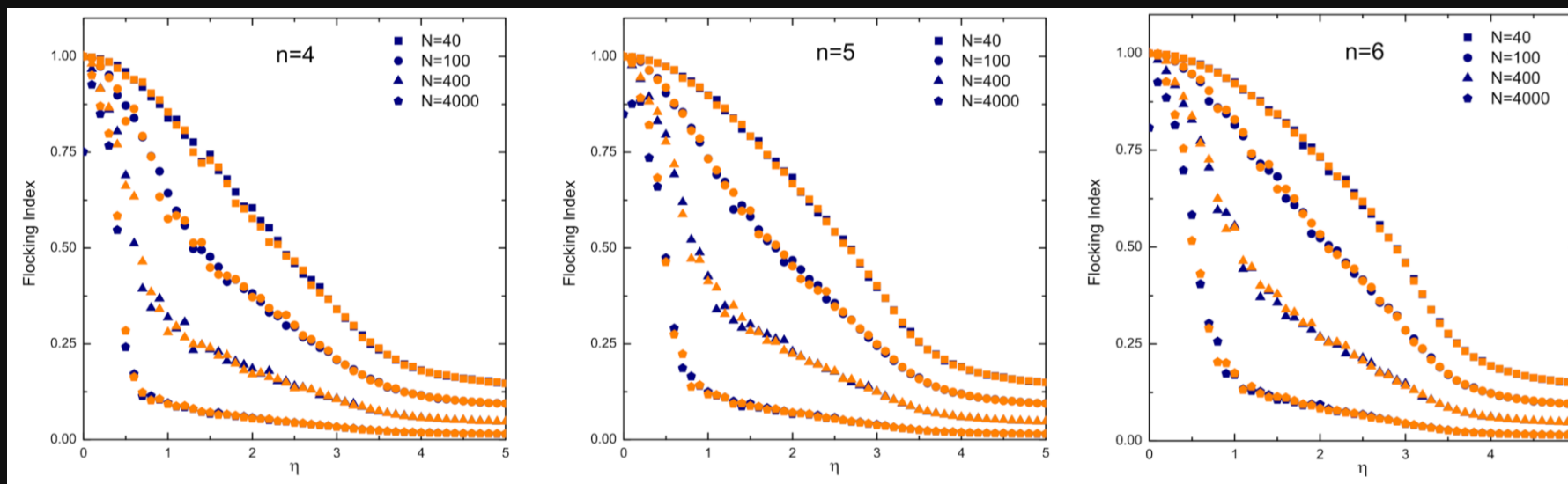


Topologisches Modell -Ergebnisse

Messergebnisse des topologischen Modells

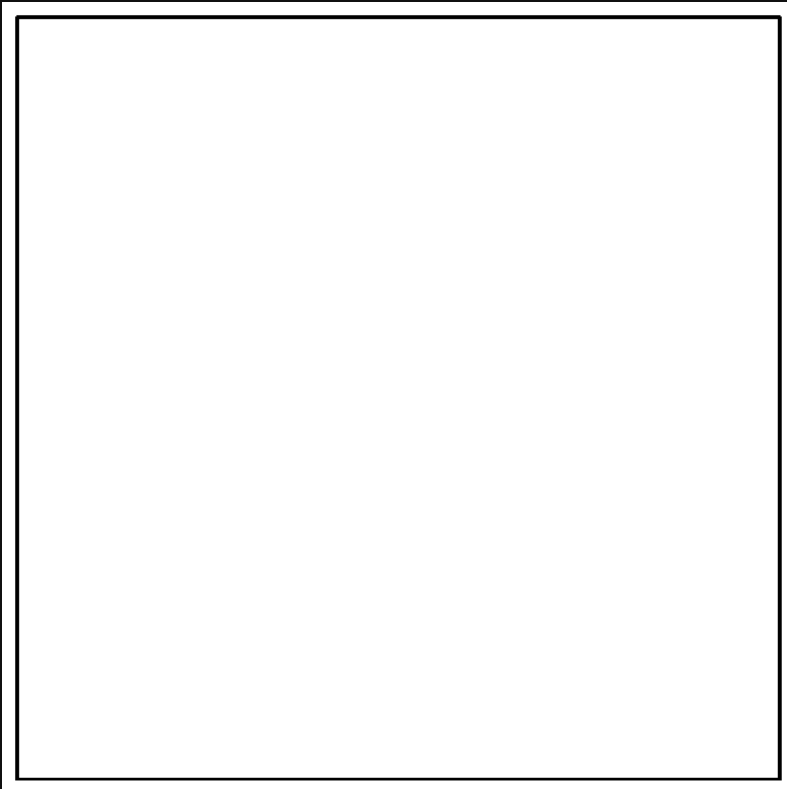


Referenzergebnisse des topologischen Modells (Christodoulidi et al., WS (2014))

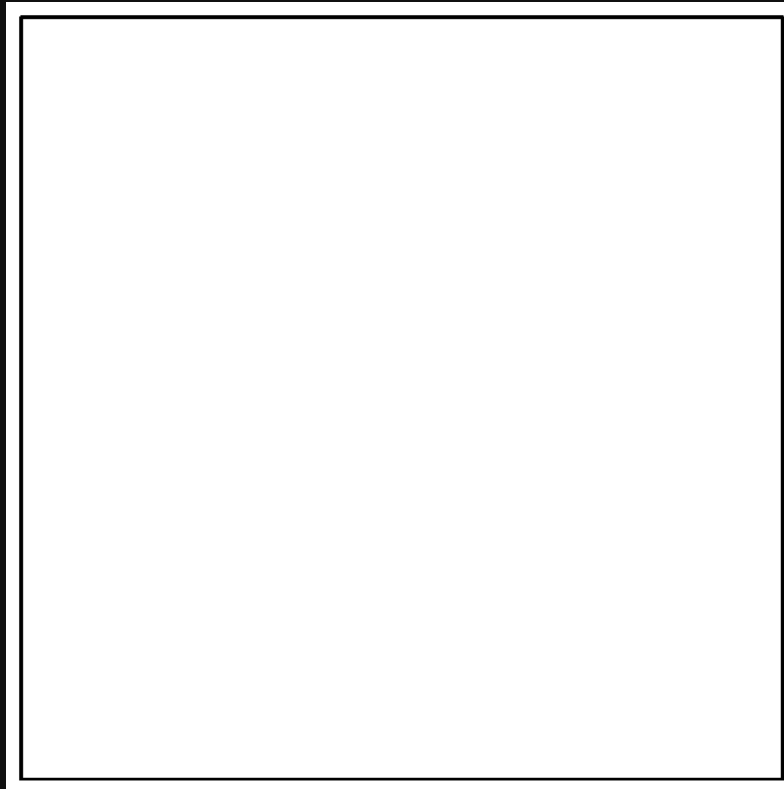


Topologisches Modell - Visualisierung

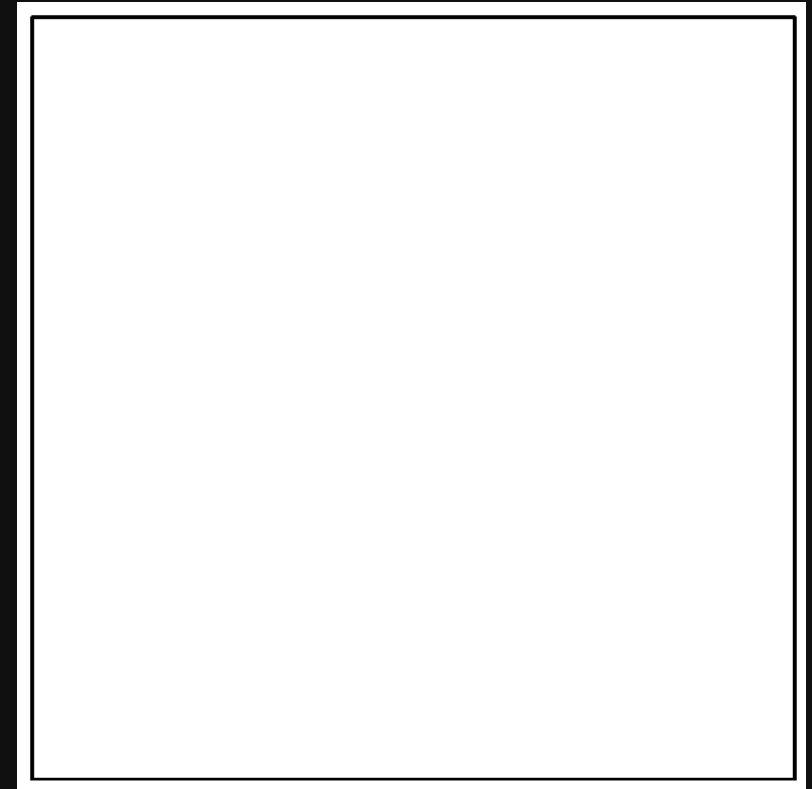
$$k = 1, \eta = 0.1$$



$$k = 2, \eta = 0.1$$



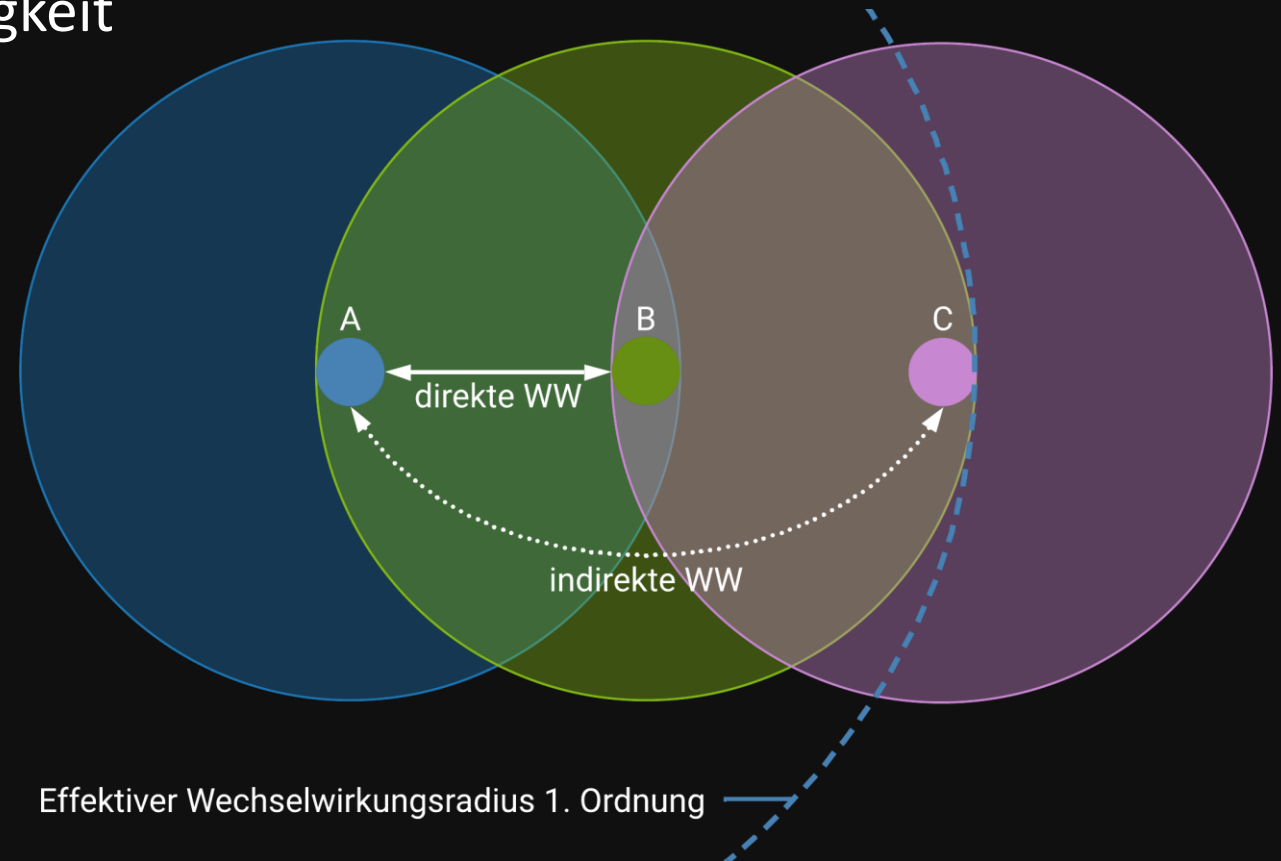
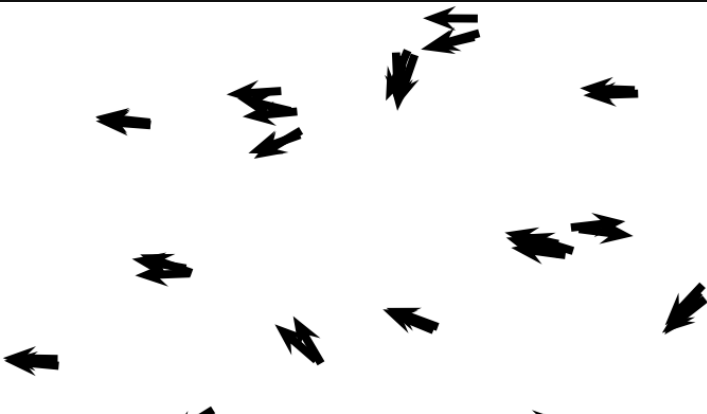
$$k = 4, \eta = 0.5$$



$$N = 400$$

Motivation eines metrisch-topologischen Modells

- Metrische Eigenschaften zurückgewinnen: k Nachbarn in Radius r
- **Einschränkungen** des topologischen Modells
 - Paket-Bildung & Kurzreichweitigkeit

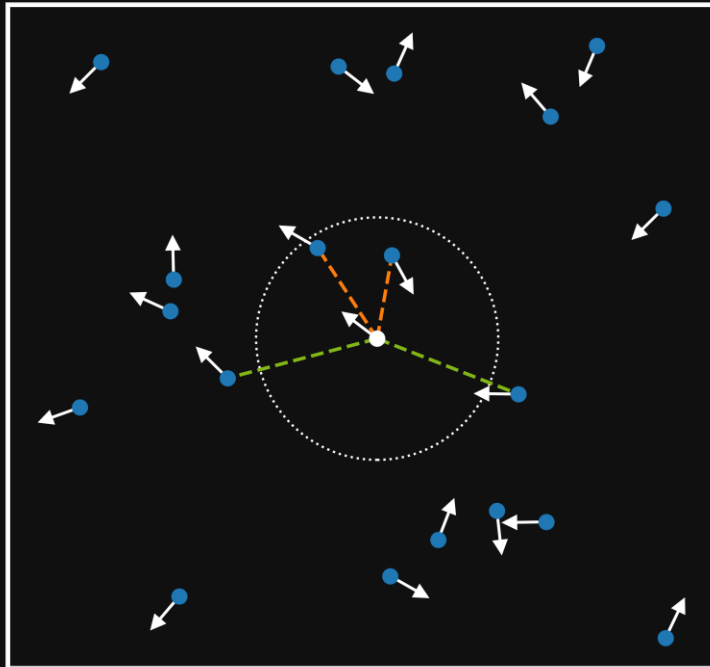


Effektiver Wechselwirkungsradius 1. Ordnung

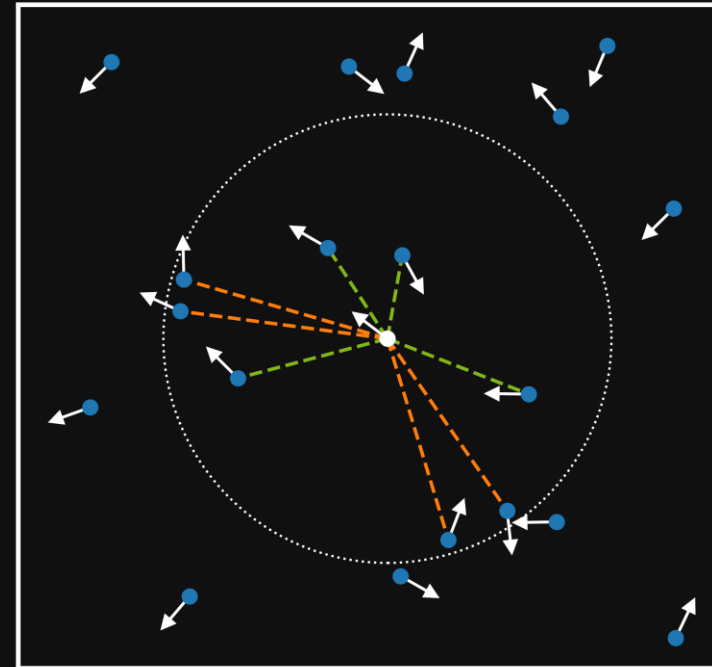
Herausforderungen - Metrisch-topologisches Modell

- **Problem:** Zunächst *schlechter* als das topologische Modell
 - Wechselwirkungsradius r verhindert eine unendliche Reichweite
 - Hat immer gleich viele oder weniger ($M_{mt,i} \leq M_{m,i}$) Mittelungspartner als das metrische Modell

$k = 4$ Nachbarn werden durch r
auf $k = 2$ reduziert.

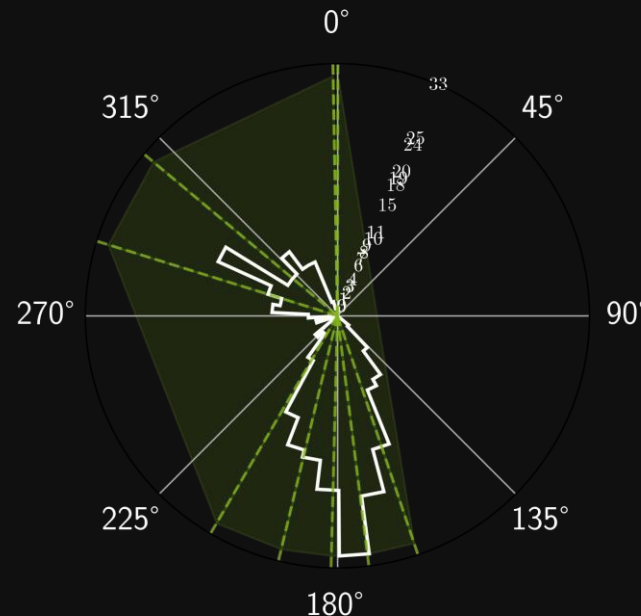
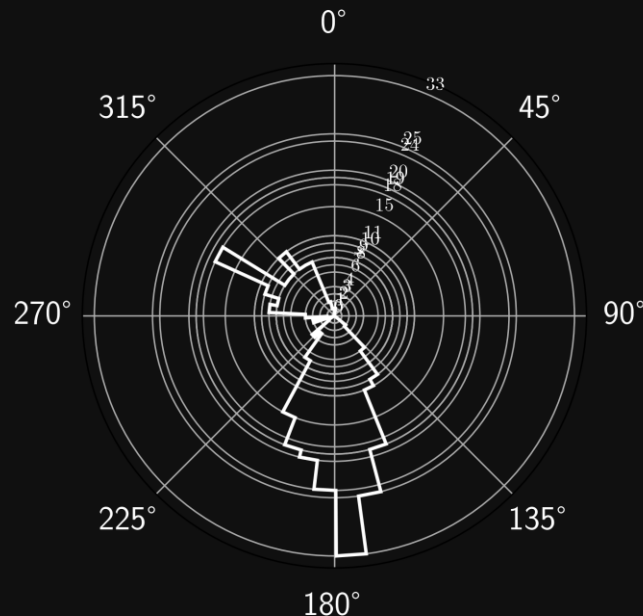


Mögliche Reichweite
durch $k = 4$ Nachbarn beschränkt.



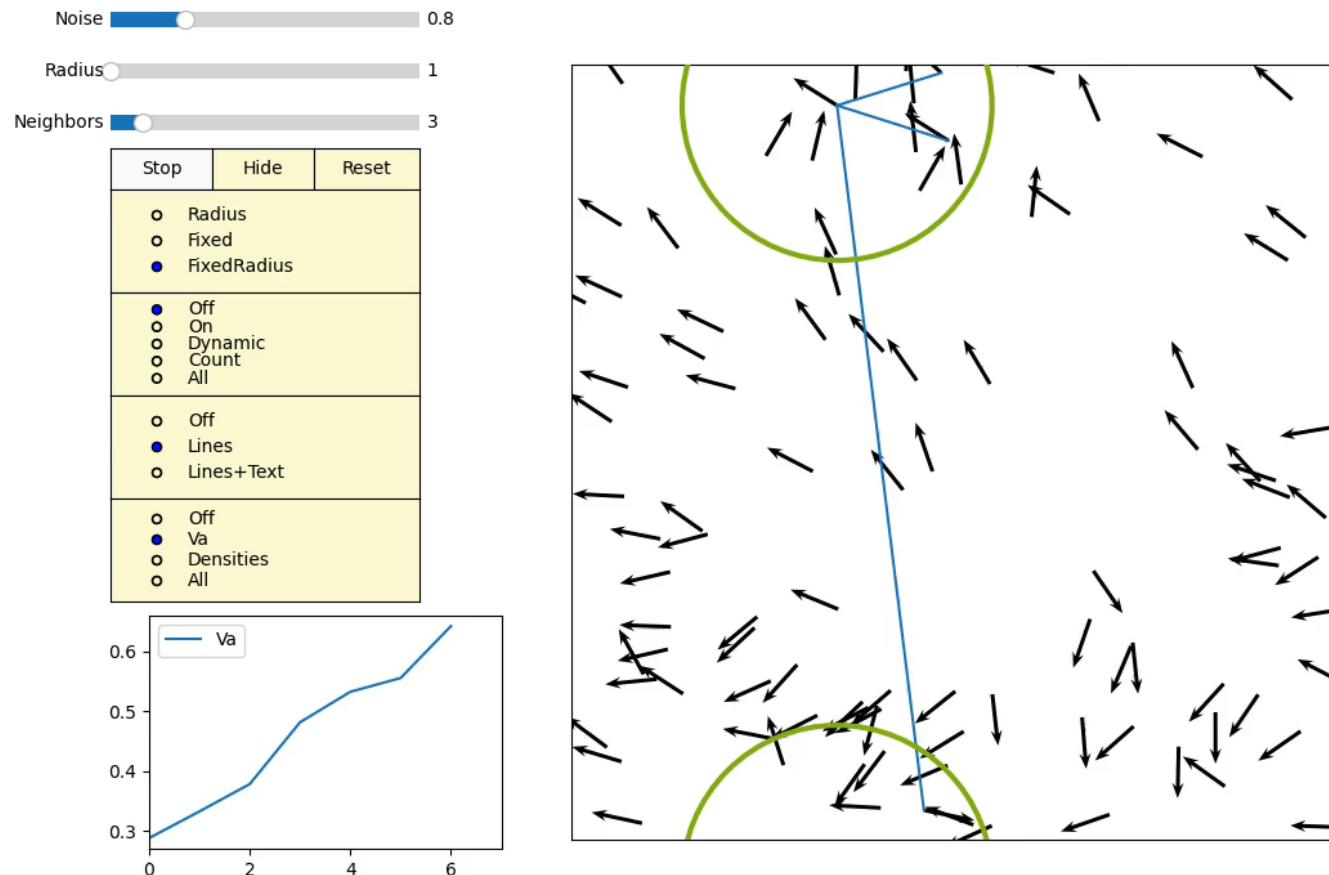
Erweiterung des metrisch-topologischen Modells

- Muss dieser Ansatz verworfen werden? → Nein
- **Vorteile** des metrischen und topologischen Modells **kombinieren**:
 - **Metrisch**: Räumliche Begrenzung + garantierter Wahrnehmungsbereich
 - Viele Kräfte bzw. Potentiale sind metrisch
 - **Topologisch**: Begrenzte Anzahl der Nachbarn
- **Intuition**: Beobachtung in k Bereiche aufteilen



- k -Quantile
- Gleiche Anzahl an Nachbarn in einem Quantil
- Uniforme Verteilung der Bereiche
- *Mit Zufallsziehungen*:
Gleicht einem Monte-Carlo Lösungsansatz für Quantil-Methode

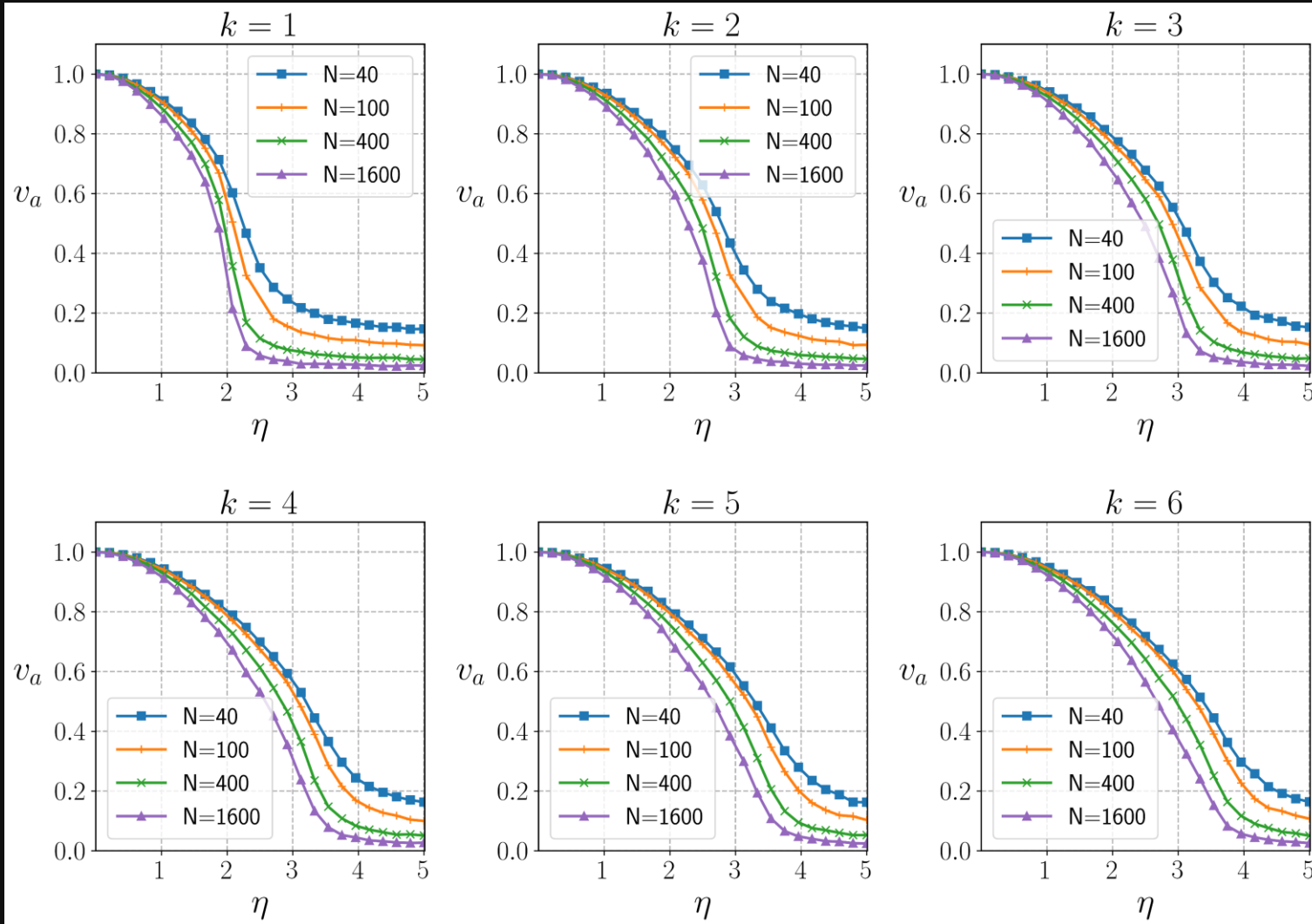
- Visualisierung der stochastischen Modifikation



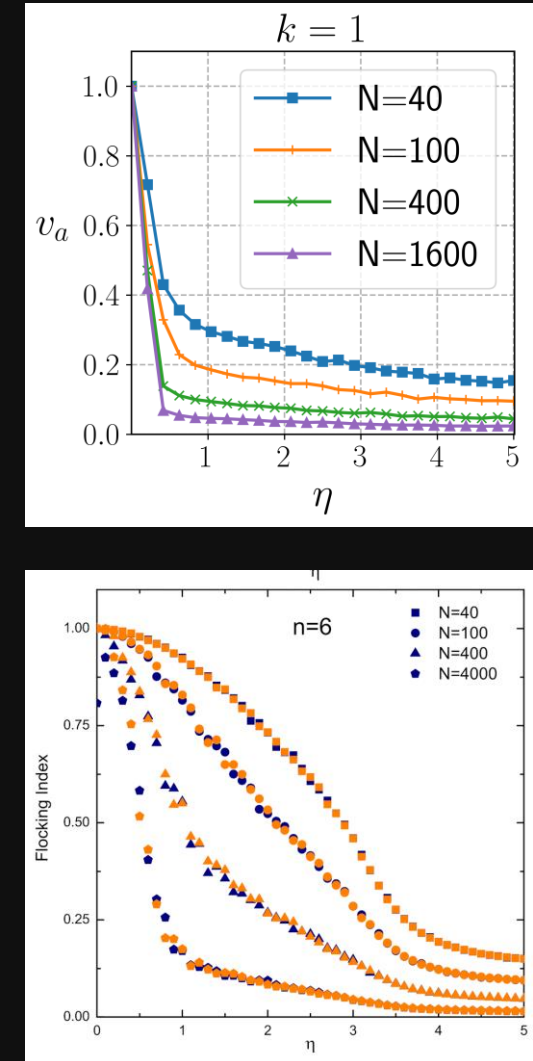
- $N = 400$
- $\rho = 4$
- $L = 10$

Ergebnisse des stochastischen Metrisch-topologischen Modells

Messergebnisse des stochastischen metrisch-topologischen Modells

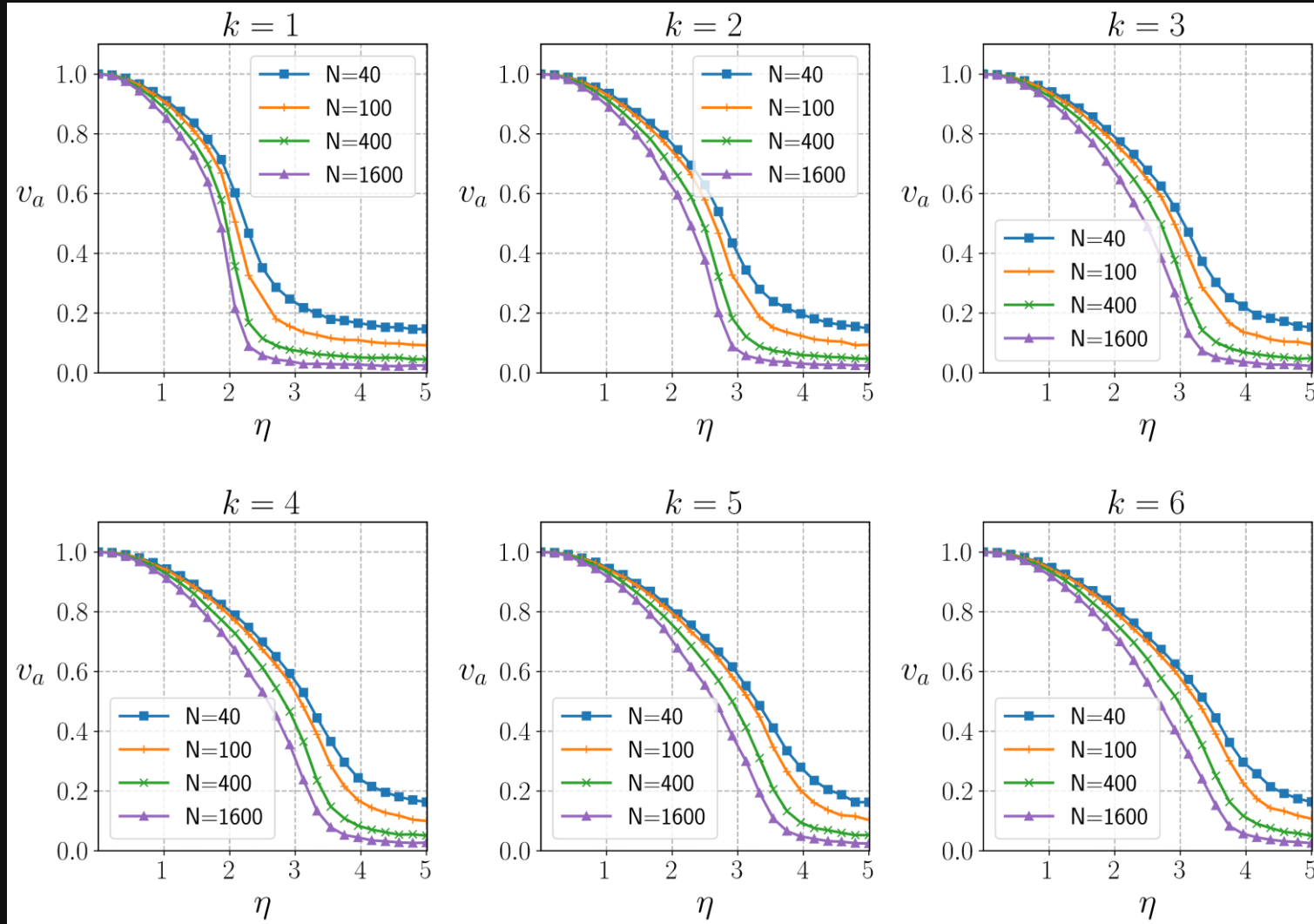


Referenzergebnisse des topologischen Modells

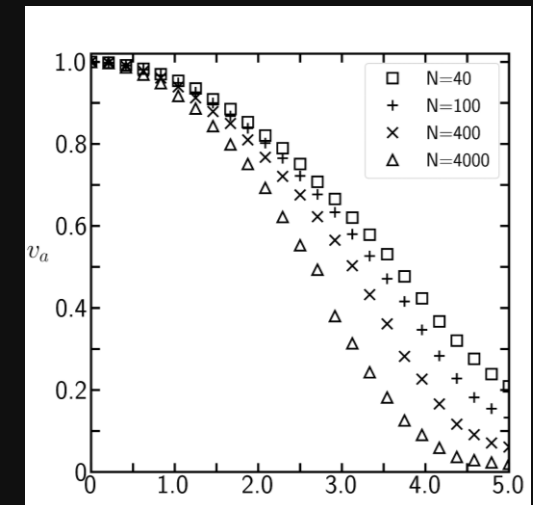
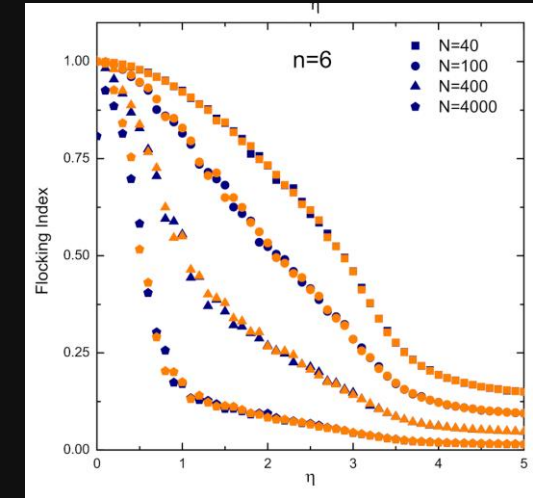


Ergebnisse des stochastischen Metrisch-topologischen Modells

Messergebnisse des stochastischen metrisch-topologischen Modells



Referenzergebnisse des topologischen Modells



Visualisierung des stochastischen metrisch-topologischen Modells

$k = 1, \eta = 0.1$

$k = 1, \eta = 0.1$

rein topologisch

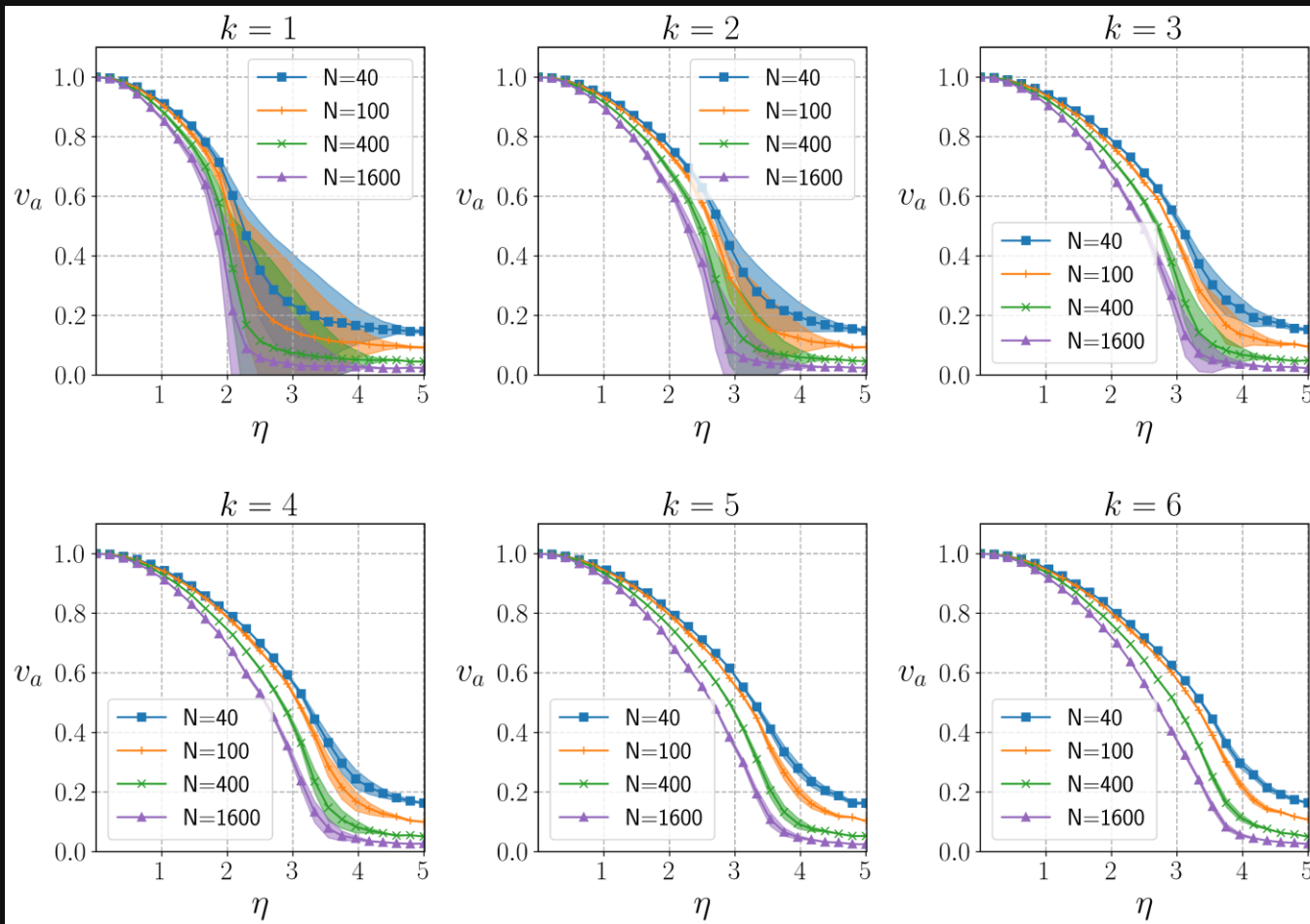
$k = 1, \eta = 1$

$N = 400$

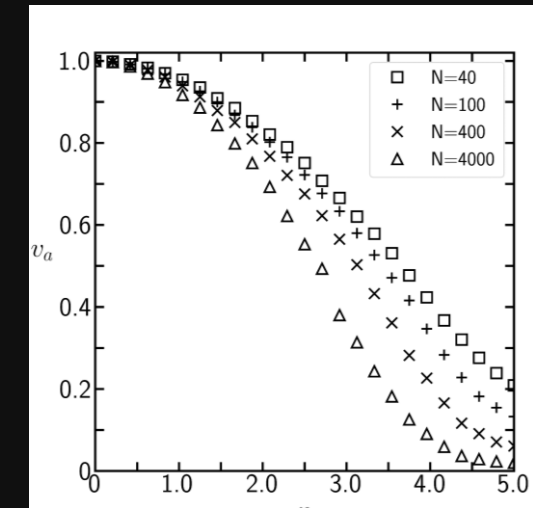
Konvergenz des metrisch-topologischen Modells

- Konvergenzanalyse

- Hypothese:** Für $k \rightarrow N$ konvergiert das stochastische metrisch-topologische Modell (*SMT Modell*) gegen das Vicsek-Modell.



Vergleichsergebnisse, Vicsek-Modell



- Farbige Bereiche:
Quadratische Abweichungen
zum Vicsek-Modell

Vorbereitung Maschinelles Lernen: Ordnungsparameter - Dichtebasiert

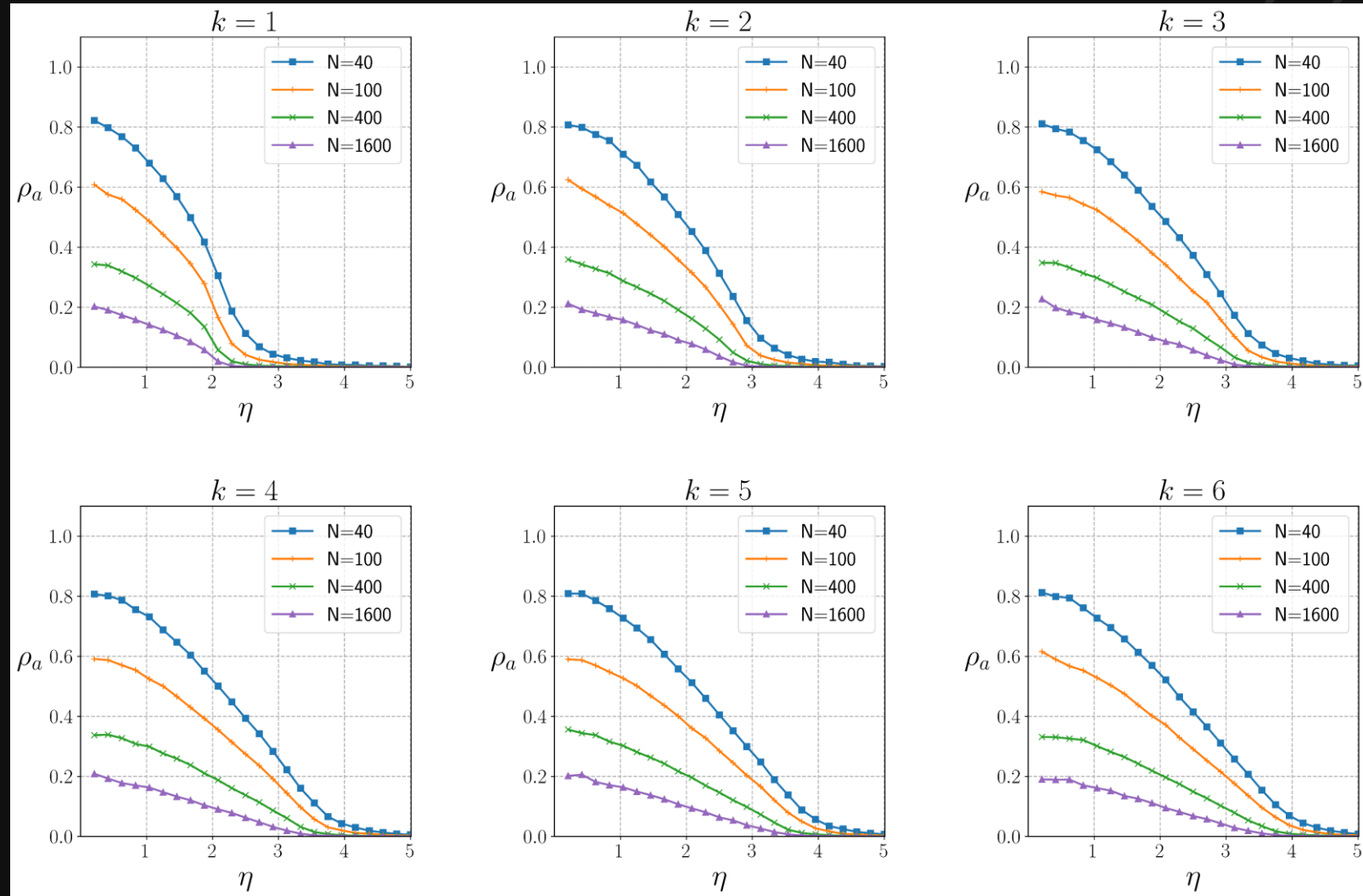
- Gibt es weitere Metriken außer v_a ?
- Wie könnten Ordnungsparameter aussehen, die die **Dichte berücksichtigen**?
- Dichtebasierter Ordnungsparameter:

$$\rho_a = \frac{N(N-1)}{2} \sum_{i < k} \tilde{v}_i \tilde{v}_k \frac{1}{\left(|\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\mathbf{x}}_k|^2 + d^2 \right)^{\frac{\alpha}{2}}} = \frac{N(N-1)}{2} \sum_{k=0}^N \sum_{i=k+1}^N \tilde{v}_i \tilde{v}_k d_{ik}(\alpha, d)$$

$\uparrow$
 $\operatorname{argmax}(d_{ik}^2, d^2)$

Ordnungsparameter – Dichtebasiert Ergebnisse

- SMT Modell
- $\rho = 4$
- $\eta = 0$ ausgelassen, da stark von Anfangsbedingungen abhängig.
- $\alpha = 1$
- $d = r$



Übergang zum Maschinellen Lernen

- Wie kann eine **neue Regel** mit maschinellern Lernen bestimmt werden?

Überwachtes Lernen (supervised)

- **Gelabelte Daten**
 - Wahrheit bekannt
- **Klassifikation oder Regression**
- **Trifft Vorhersagen**

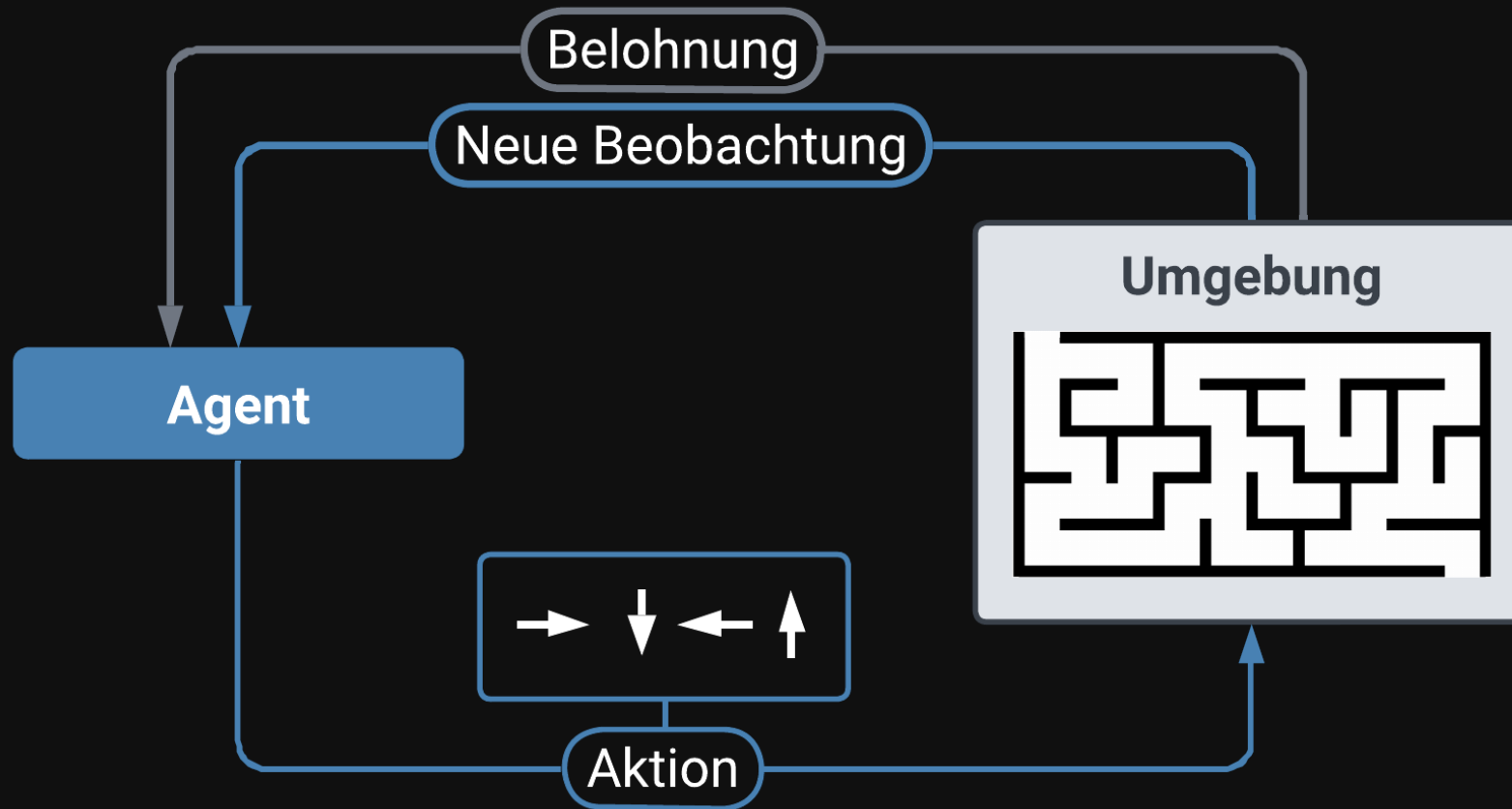
Unüberwachtes Lernen (unsupervised)

- Ungelabelte Daten
 - Wahrheit unbekannt
- **Clustering, Dimensionsreduktion, Dichteschätzung**
- **Vorhersagen, Mustererkennung, Änderung der Datenform**

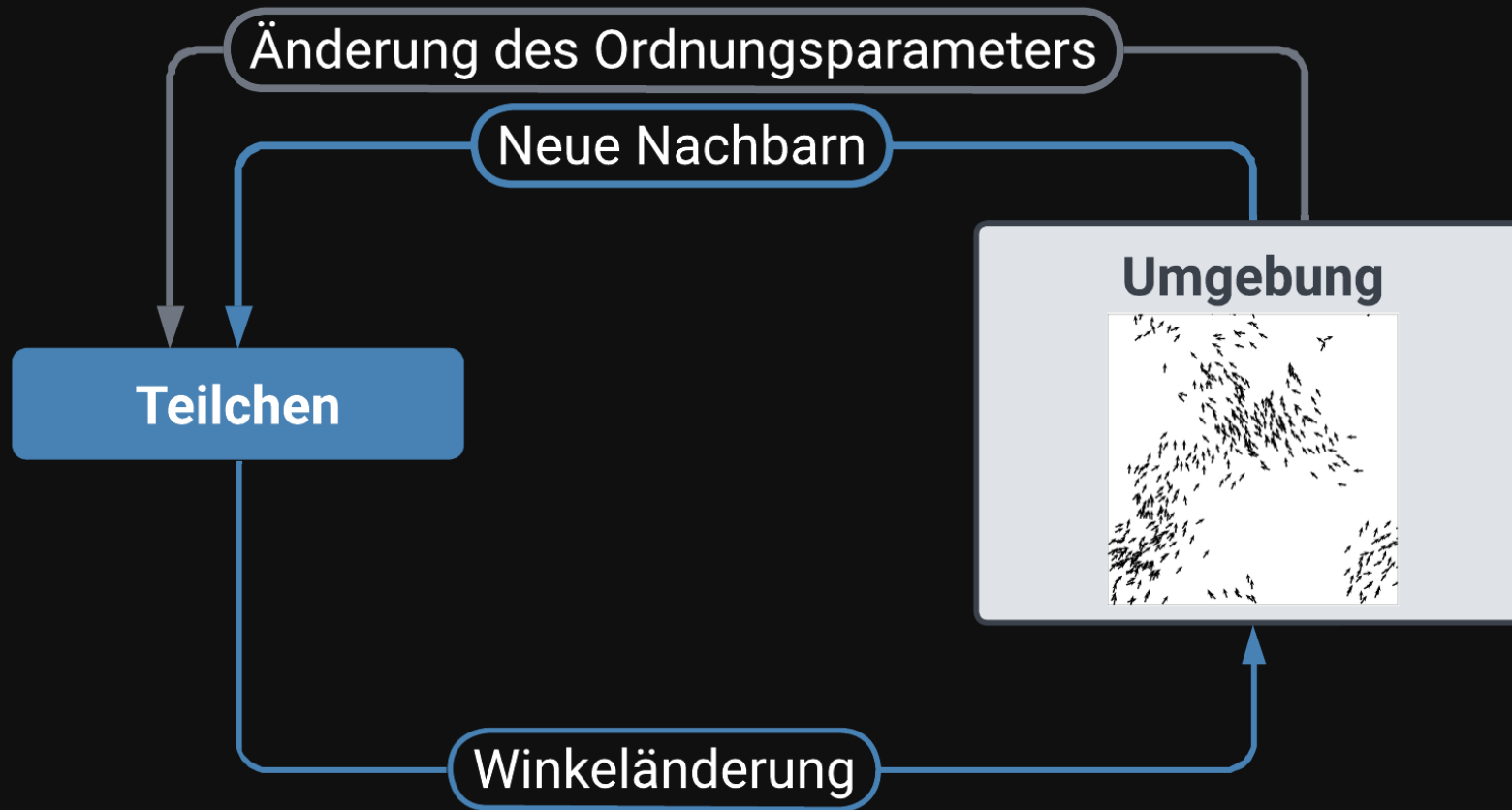
Reinforcement Learning

- **Interaktive Umgebung**
- **Agentenbasiert**
- **Belohnungssystem durch Interaktion mit Umgebung**
- **Agent lernt, Belohnung zu maximieren**

Reinforcement Learning - Konzept



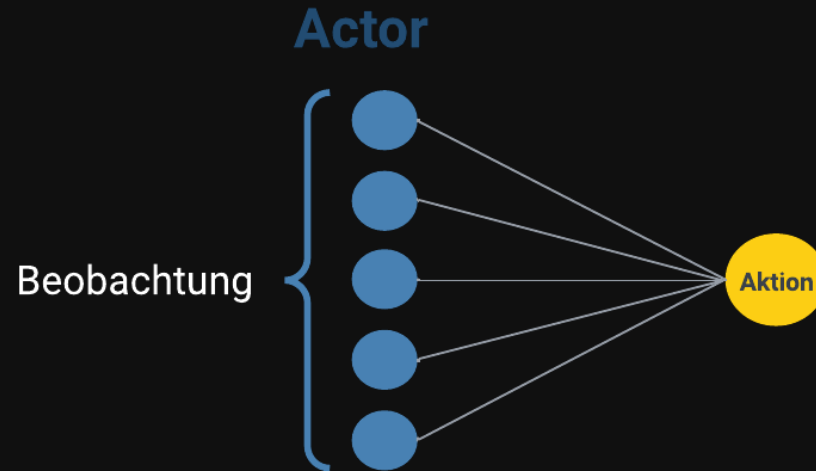
Reinforcement Learning - Konzept

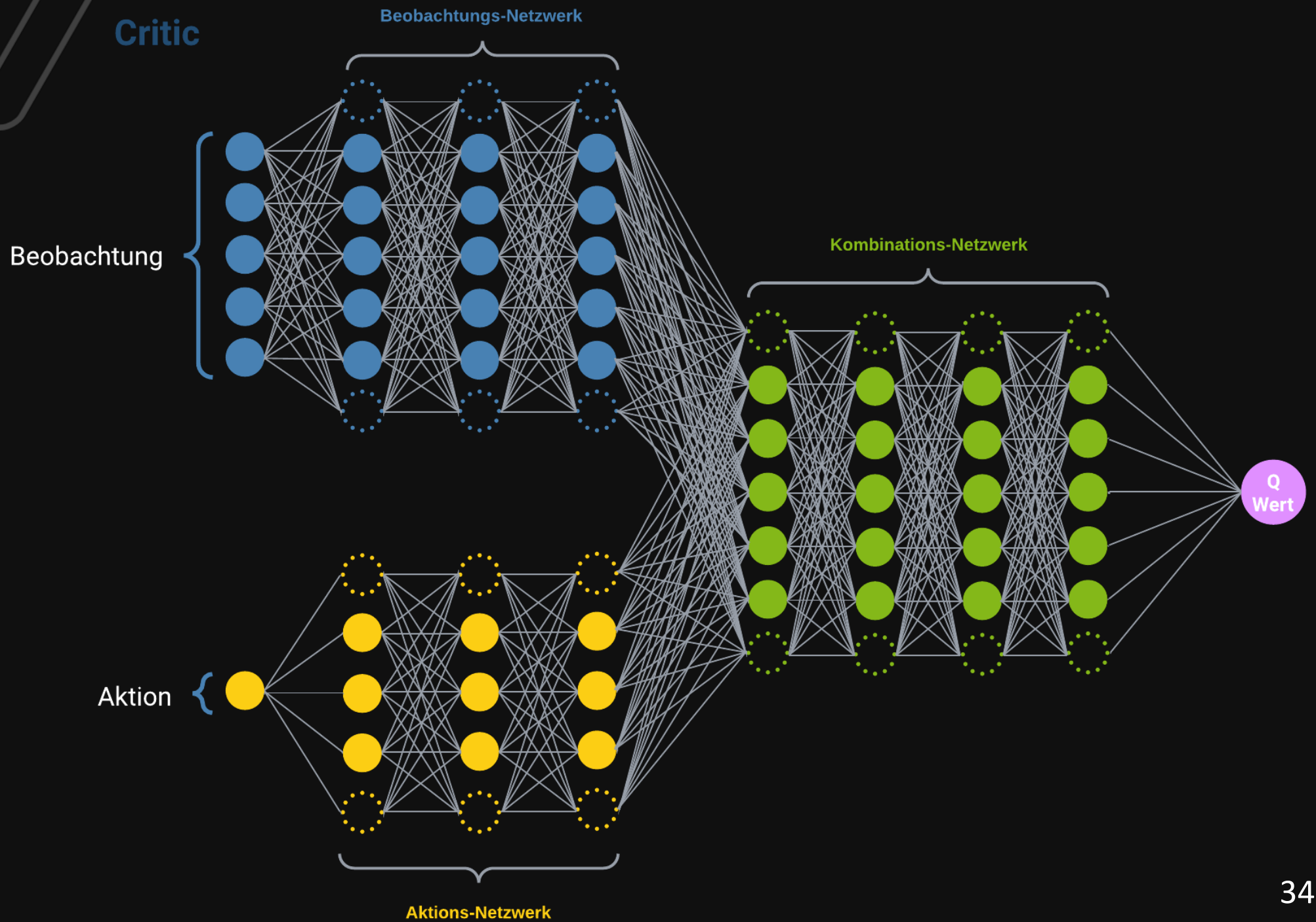


- **Hypothese:** Wird der Vicsek-OP als Belohnung verwendet, lernt das Modell die Vicsek-Regel.

Reinforcement Learning - Actor

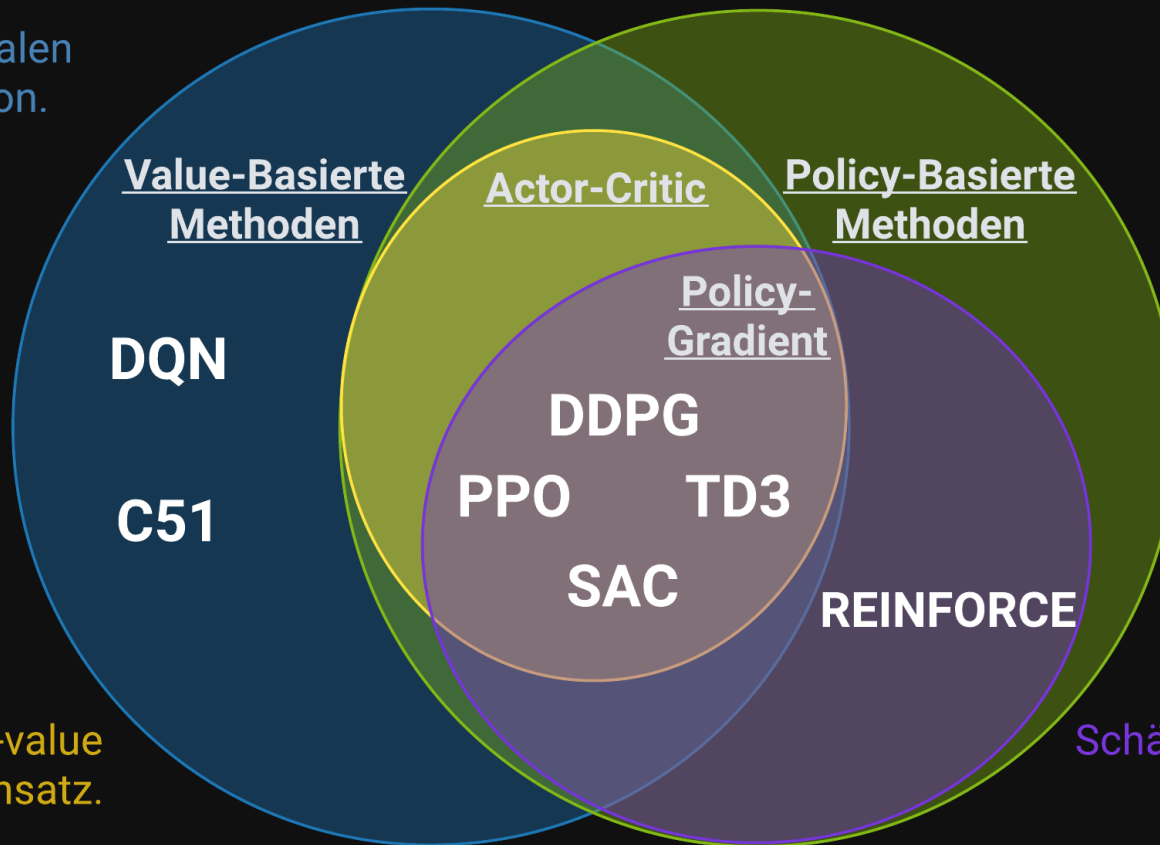
- **Neuronales Netz** als Policy
 - In vielen Algorithmen: **Actor-Critic** Konzept





Reinforcement Learning - Algorithmen

Schätzung der optimalen action-value Funktion.



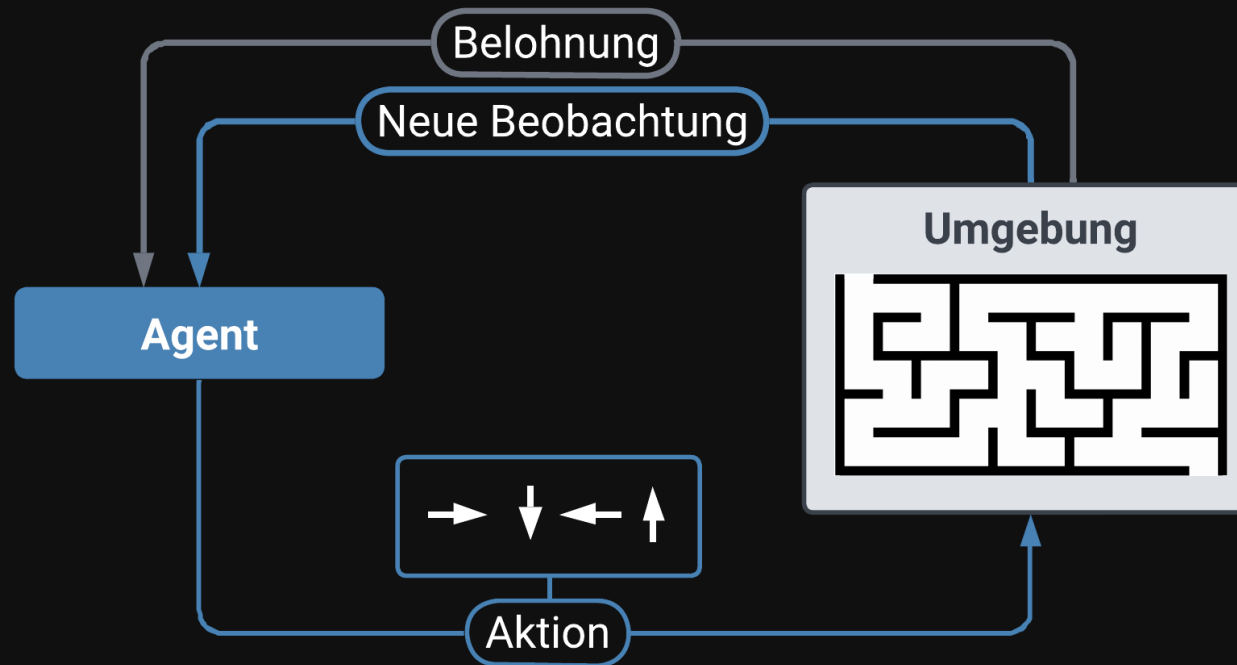
Sucht **direkt** nach der optimalen Strategie.

Kombiniert den action-value und policy basierten Ansatz.

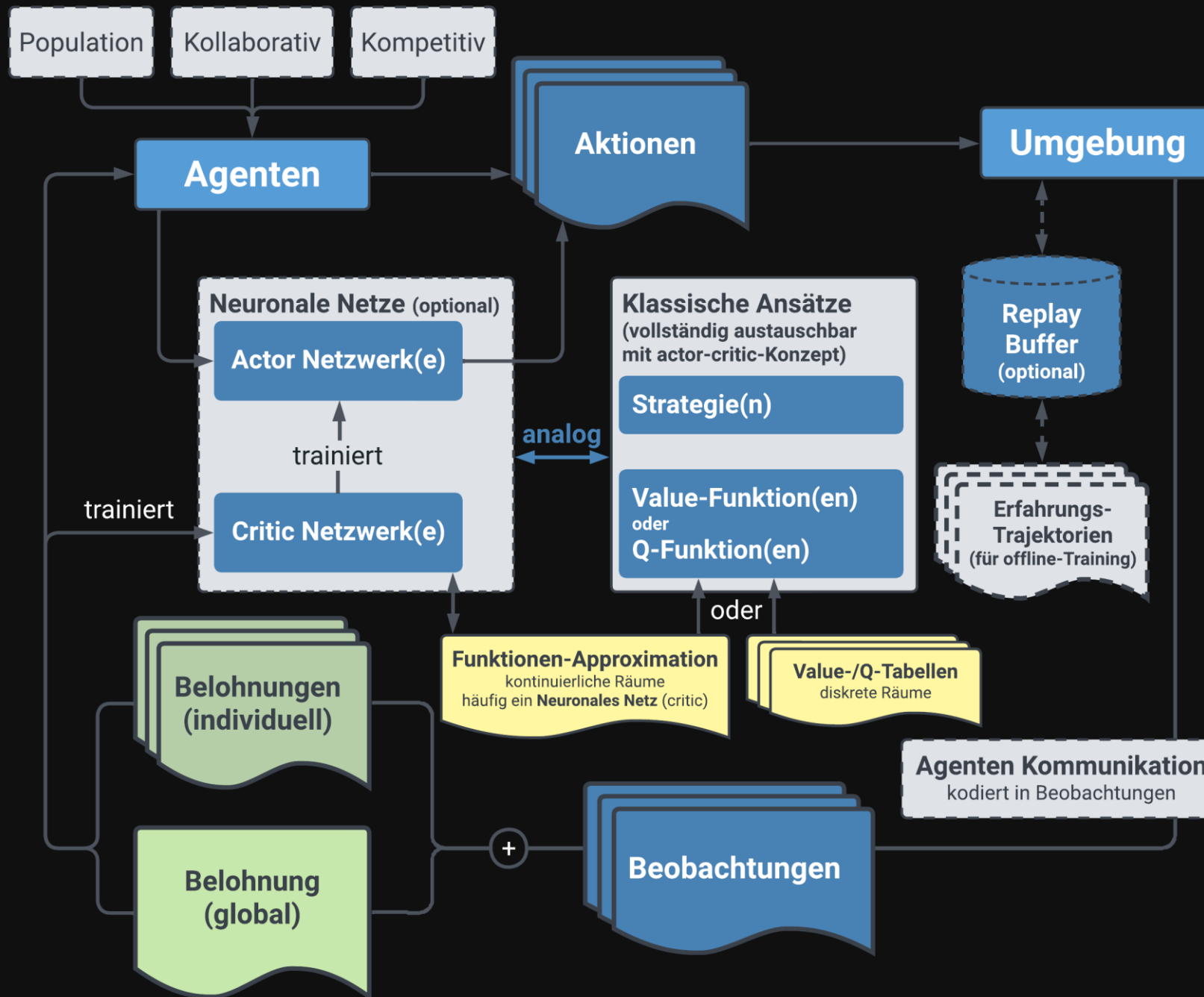
Schätzung der optimalen Gewichte durch gradient descent.

Reinforcement Learning - Herausforderung

- **Herausforderung:** Multi-Agent Reinforcement Learning
- Single agent:



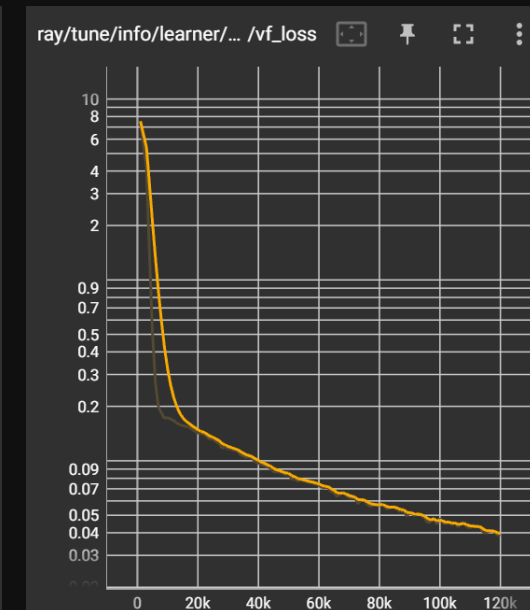
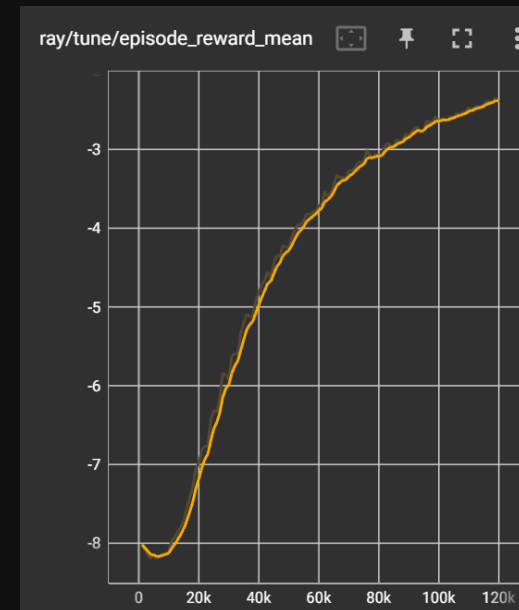
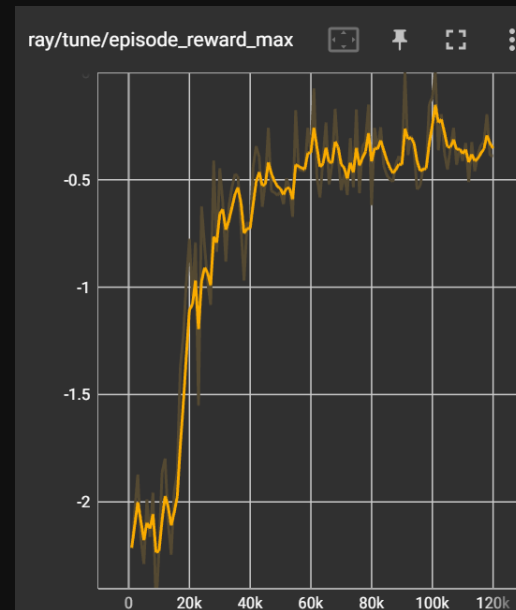
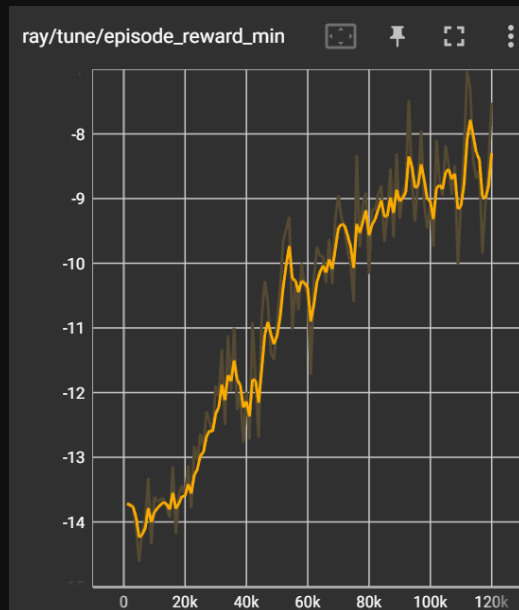
Multi-Agent Reinforcement Learning - Grundaufbau



- Framework
 - RLLib
 - TensorFlow2
 - Keras
- Algorithmus
 - PPO

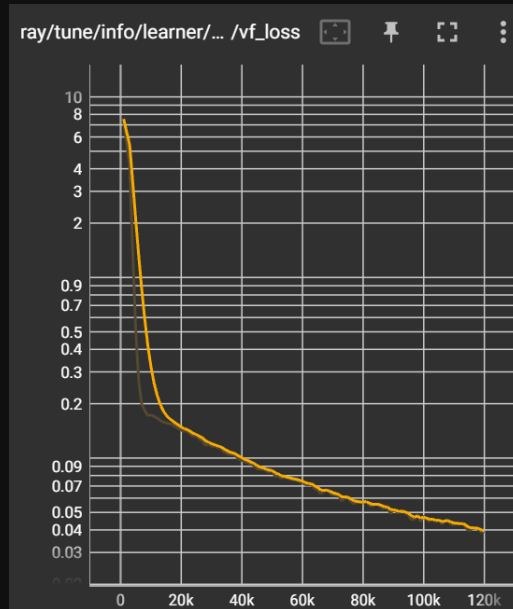
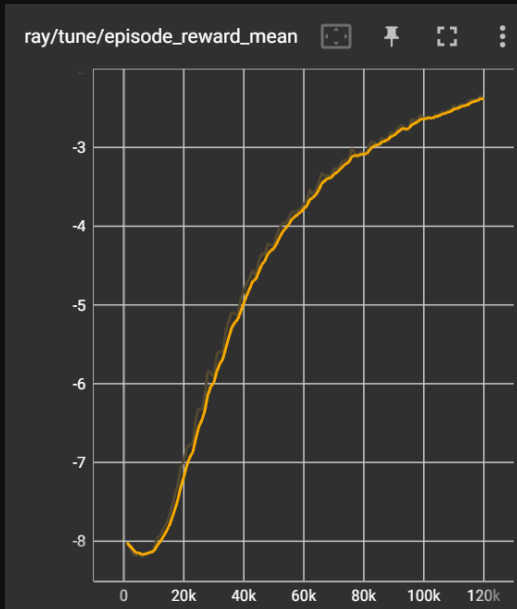
Reinforcement Learning - Ergebnisse

- Ergebnisse über **TensorBoard**
- $\rho = 4$, $N = 20$, $\eta = ?$, **SMT** Modell
- Reward: $v_{a,neu} - v_{a,alt}$

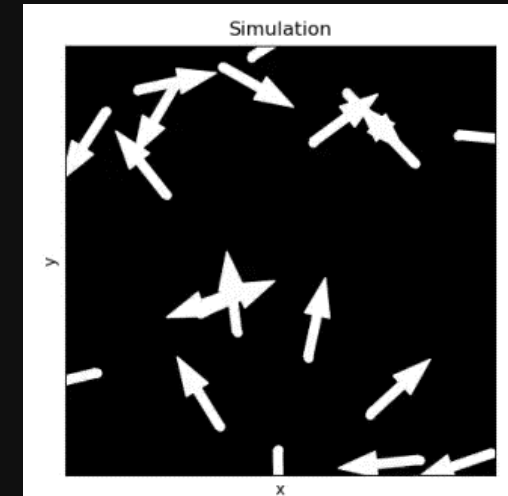


Reinforcement Learning - Ergebnisse

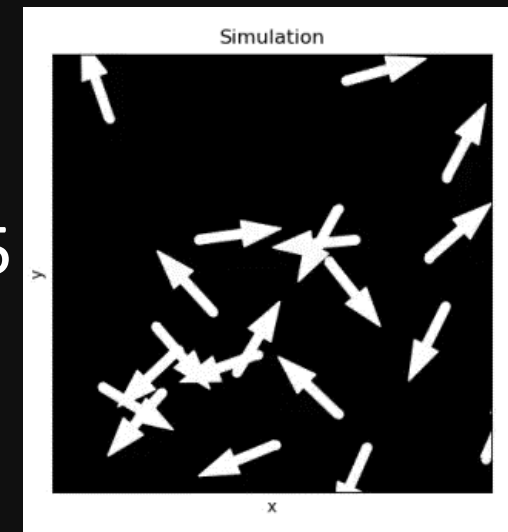
- Ergebnisse über **TensorBoard**
- $\rho = 4$, $N = 20$, $\eta = ?$, **SMT** Modell
- Reward: $v_{a,neu} - v_{a,alt}$



Episode 0



Episode 115



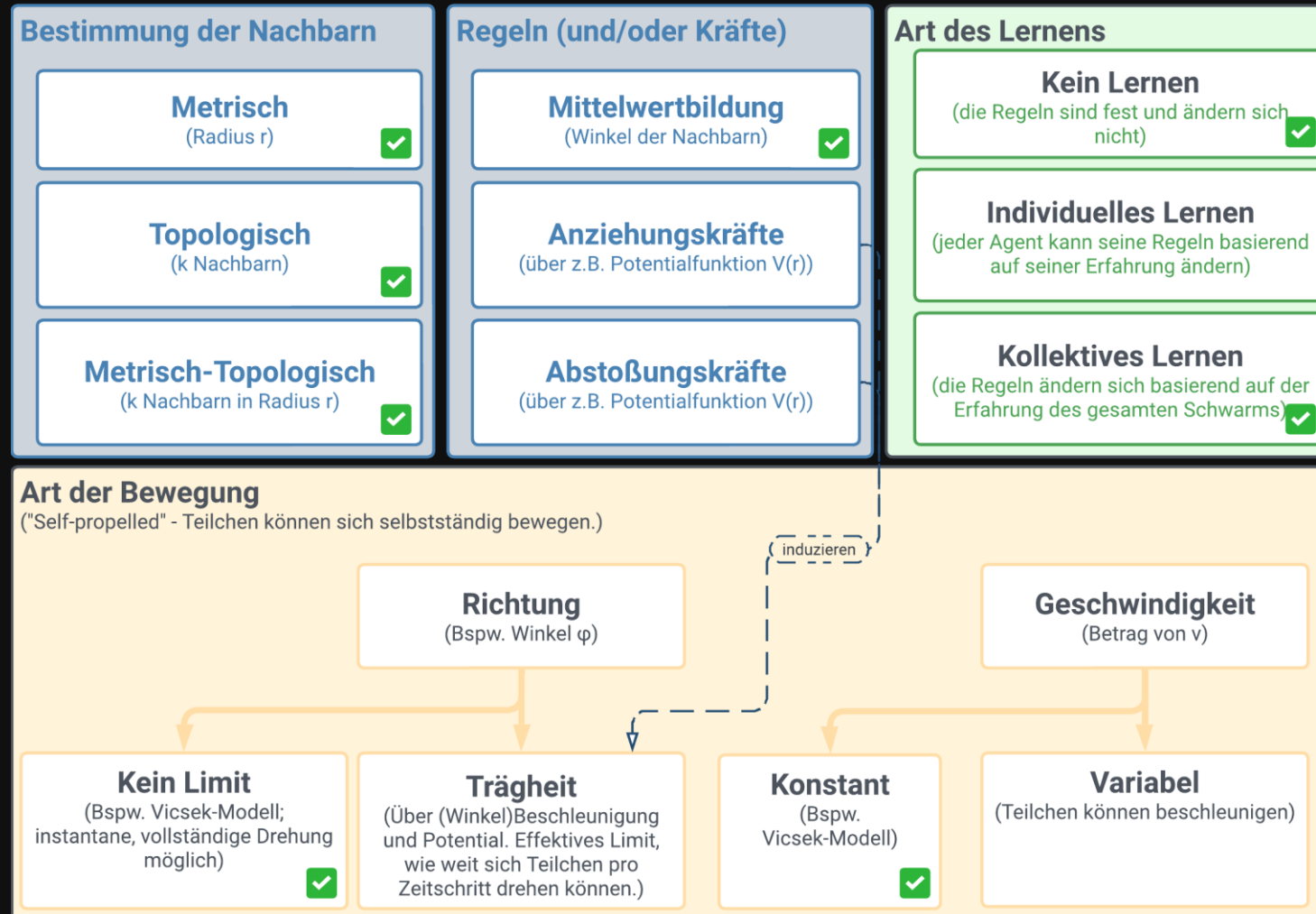
Ausblick – Wie geht es weiter?

- Vicsek-Modell mit PPO lernen
- Dichtebasierten Ordnungsparameter untersuchen
- Neue Ordnungsparameter definieren
- Komplexes Schwarmverhalten durch maschinelles Lernen

Ausblick – Übersichtskarte 1/2

Übersicht

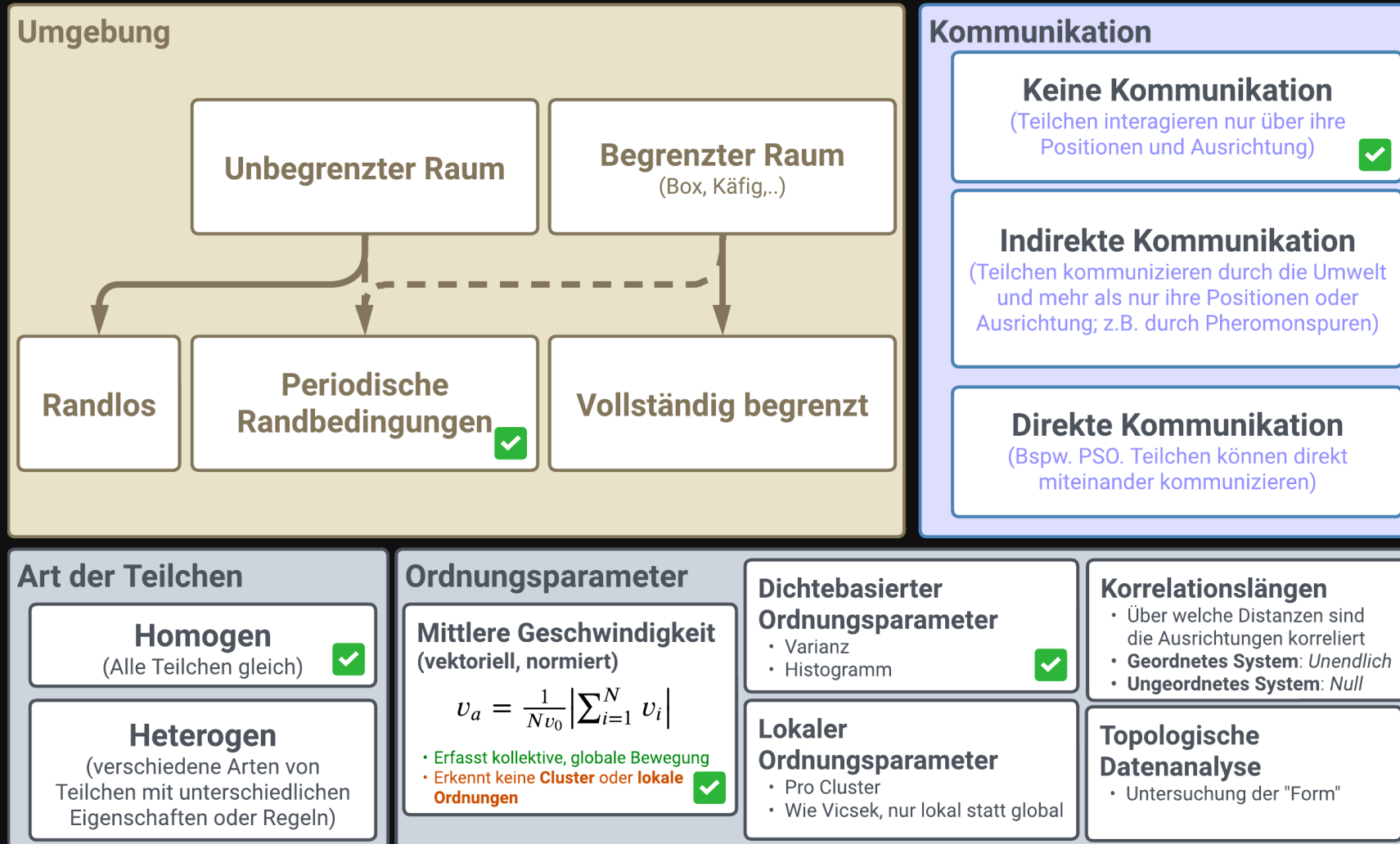
Verschiedene Typen von Simulationen, Algorithmen und Konzepte



Ausblick – Übersichtskarte 2/2

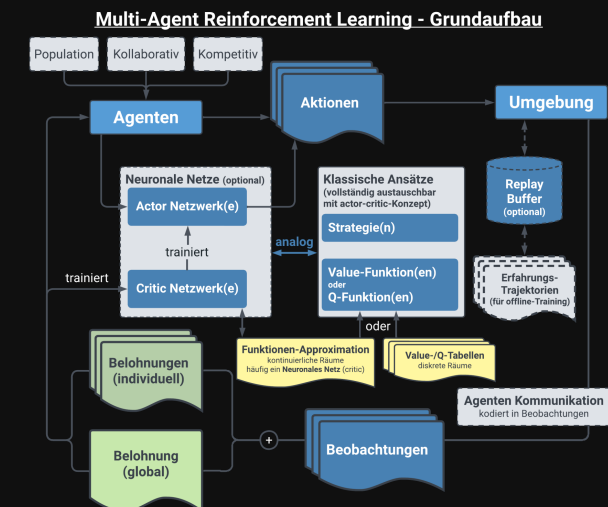
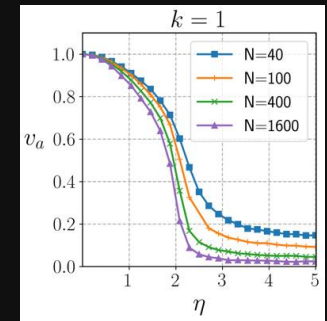
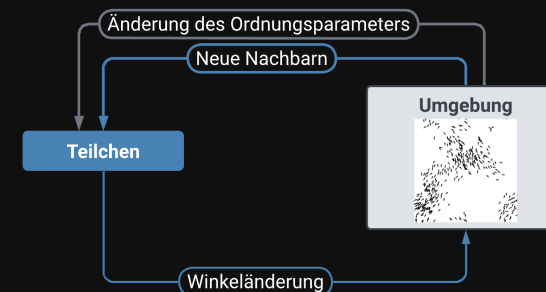
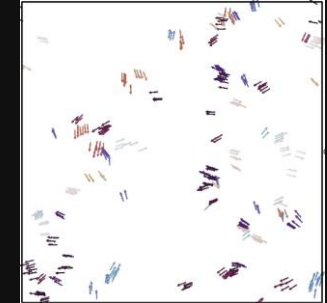
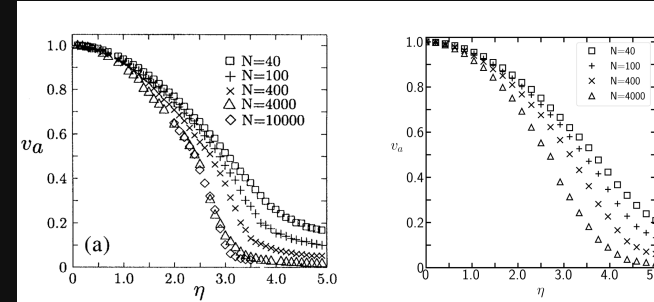
Übersicht

Verschiedene Typen von Simulationen, Algorithmen und Konzepte



Zusammenfassung

- Motivation & Reichweite
- Vicsek-Modell
- Topologisches Modell
- Metrisch-topologisches Modell
- **SMT** Modell
- Reinforcement Learning
- Multi-Agent Reinforcement Learning & PPO
- Ergebnisse & Ausblick



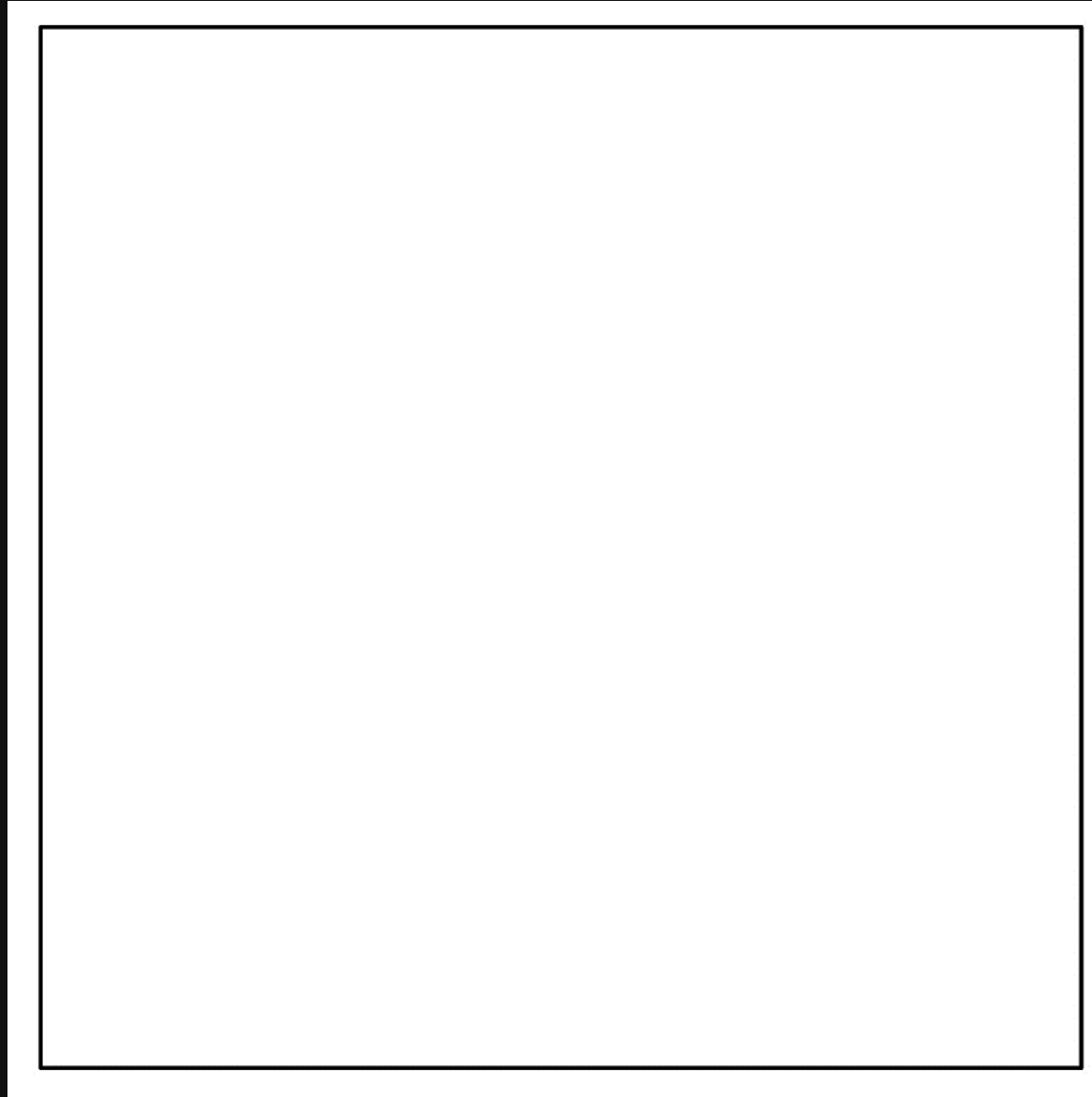
Literaturverzeichnis

- T. Vicsek und A. Zafeiris. „Collective motion“. In: *Physics Reports* **517** (2012), S. 71–140. doi: [10.1016/j.physrep.2012.03.004](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2012.03.004).
- T. Vicsek et al. „Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles“. In: *Physical Review Letters* **75** (1995), S. 1226–1229. doi: [10.1103/PhysRevLett.75.1226](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.1226).
- H. Christodoulidi et al. „Phase Transitions in Models of Bird Flocking“. In: *Chaos, Information Processing and Paradoxical Games*. World Scientific, 2014, S. 383–398. doi: [10.1142/9789814602136_0019](https://doi.org/10.1142/9789814602136_0019).
- G. Aletti, A. K. Naimzada und G. Naldi. „Mathematics and physics applications in sociodynamics simulation: the case of opinion formation and diffusion“. In: *Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences*. Hrsg. von G. Naldi, L. Pareschi und G. Toscani. Boston: Birkhäuser Boston, 2010, S. 203–221. isbn: 978-0-8176-4946-3. doi: [10.1007/978-0-8176-4946-3_8](https://doi.org/10.1007/978-0-8176-4946-3_8).
- B. K. Verma, D. Kumar. "A review on Artificial Bee Colony algorithm". In: *International Journal of Engineering and Technology* **2.3** (2013), S. 204–211. doi: [10.14419/IJET.V2I3.1030](https://doi.org/10.14419/IJET.V2I3.1030).

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit!

Anhang – Große Simulation

- $N = 200000$
- $\rho \approx 4$
- Vicsek-Modell



Vicsek-Modell

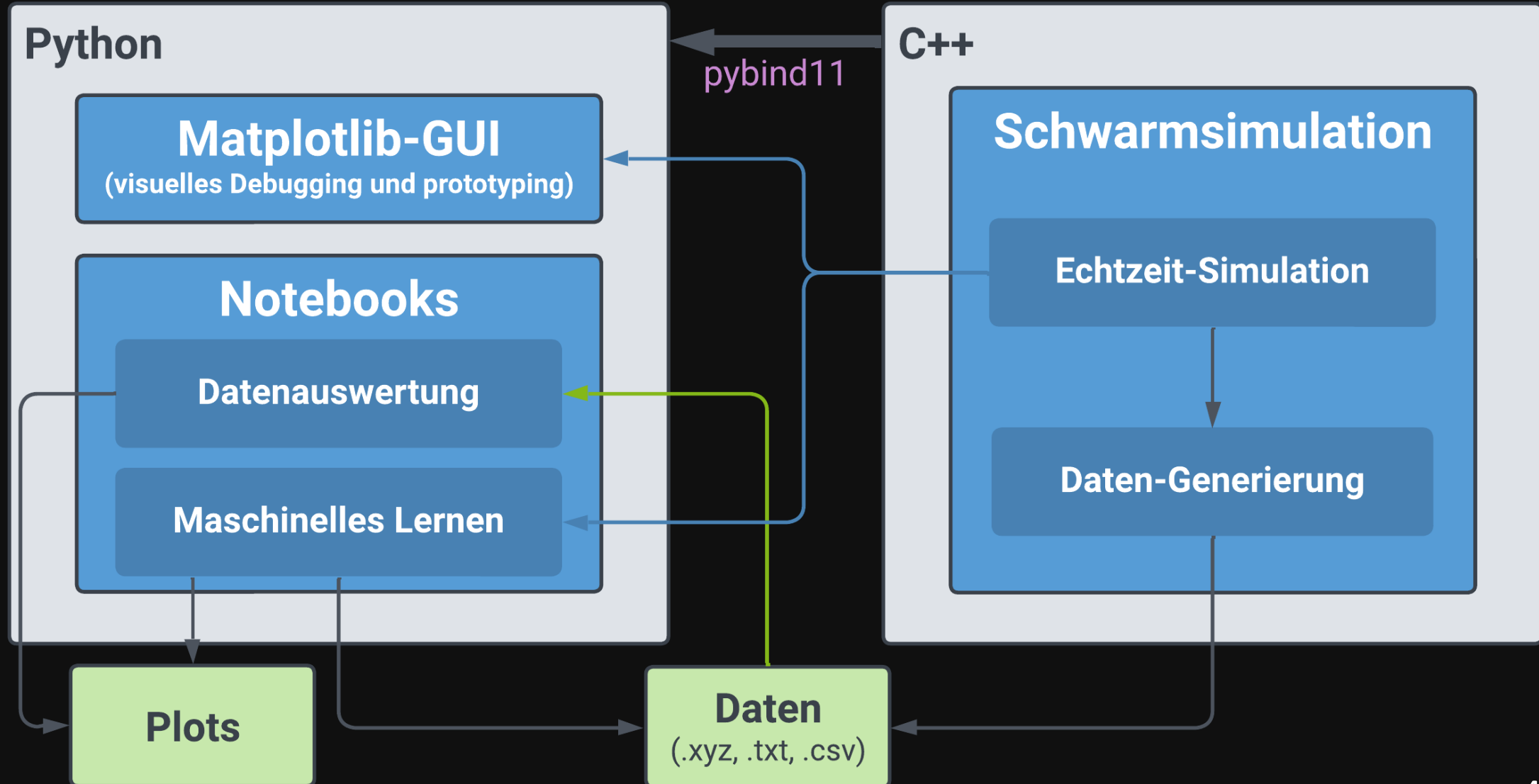
Parameter	Beschreibung
x_i	Teilchenposition
v_i	Teilchengeschwindigkeit
v_0	Konstante Geschwindigkeit aller Teilchen
θ_i	Winkel des i -ten Teilchens
r	Wechselwirkungsradius für die Nachbarschaftsauswahl
L	Systemgröße
N	Teilchen-Anzahl
$\rho = \frac{N}{L^2}$	Teilchendichte
η	Rauschintensität (noise)
v_a	Ordnungsparameter: quantifiziert den Grad der Ausrichtung
t	Simulationszeit

Regel

Nachbarschaftsauswahl

Plots

Schematischer Projektaufbau



Anhang – RL Algorithmen

RL Algorithmen-Übersicht

	DQN	DDPG	C51	TD3	PPO	REINFORCE	SAC
Diskret	✓		✓		✓	✓	
Kontinuierlich		✓		✓	✓		✓
On-/Off-Policy	Off	Off	Off	Off	On	Off	Off
Model-Free/Model-Based	Free	Free	Free	Free	Free	Free	Free
Online-/Offline-Training	Beides	Beides	Beides	Beides	Beides	Beides	Beides

Anhang – Reinforcement Learning

- Begriffe und Konzepte des Reinforcement Learnings

Begriff	Beschreibung
Agent	Autonomer Entscheidungsträger
Umgebung (<i>environment</i>)	Kontext oder Raum, in dem der Agent operiert
Zustand (<i>state</i>)	Spezifische Konfiguration (Beobachtung) der Umgebung
Aktion (<i>action</i>)	Entscheidung, die ein Agent in einem bestimmten Zustand trifft
Belohnung (<i>reward</i>)	Numerischer Wert, der dem Agenten als Feedback für seine Aktion dient
Strategie (<i>policy</i>)	Regelwerk des Agenten, Aktionen zu bestimmen
Value-Funktion	Funktion, die den erwarteten kumulativen zukünftigen Belohnungswert schätzt
Episode	Sequenz von (Zeit-)Schritten

Ordnungsparameter

- Dienen der **Bewertung eines Systemzustandes**
- Verschiedene Ordnungsparameter (OP) **untersuchen** unterschiedliche **Zustands-Eigenschaften**
- Die Vicsek-Regel *maximiert* den Vicsek-OP v_a

$$\begin{aligned} v_a &= \frac{1}{N v_0} \left| \sum_{i=0}^N \mathbf{v}_i \right| = \frac{1}{N v_0} \left| \sum_{i=0}^N v_0 \begin{pmatrix} \cos \varphi_i \\ \sin \varphi_i \end{pmatrix} \right| \\ &= \frac{1}{N v_0} \sqrt{v_0^2 \left[\left(\sum_i \cos \varphi_i \right)^2 + \left(\sum_i \sin \varphi_i \right)^2 \right]} \end{aligned}$$

Anhang - Ordnungsparameter

- Die Vicsek-Regel *maximiert* den Vicsek-OP v_a

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial \varphi_k} v_a^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial \varphi_k} \left(\frac{1}{N^2 v_0^2} v_0^2 \left[(\cos \varphi_1 + \dots + \cos \varphi_N)^2 + (\sin \varphi_1 + \dots + \sin \varphi_N)^2 \right] \right) \\ &= \frac{1}{N^2} \left[-2 \sin \varphi_k \sum_i^N (\cos \varphi_i) + 2 \cos \varphi_k \sum_i^N (\sin \varphi_i) \right] \\ &= -2 \sin \varphi_k \cdot N^{-1} \langle \cos \varphi \rangle + 2 \cos \varphi_k \cdot N^{-1} \langle \sin \varphi \rangle \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \sin \varphi_k \langle \cos \varphi \rangle = \cos \varphi_k \langle \sin \varphi \rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sin \varphi_k}{\cos \varphi_k} = \tan \varphi_k = \frac{\langle \sin \varphi \rangle}{\langle \cos \varphi \rangle}$$

$$\Leftrightarrow \varphi_k = \arctan \left(\frac{\langle \sin \varphi \rangle}{\langle \cos \varphi \rangle} \right)$$

Vicsek-Regel

$$\langle \theta(\tilde{t}) \rangle_r = \arctan \left[\frac{\langle \sin(\theta(\tilde{t})) \rangle_r}{\langle \cos(\theta(\tilde{t})) \rangle_r} \right]$$

Anhang – Modell-Zusammensetzung

Nachbarschaftsauswahl



Metrisch, topologisch,
metrisch-topologisch,
stochastisch metrisch-topologisch

Was **sieht** das Teilchen?
Beobachtung

+ Regel



Mittelungs-Regel

Was **macht** das Teilchen?
Aktion

Anhang

Metrisch-topologisches Modell

- Konvergenzanalyse
 - **Hypothese:** Für $k \rightarrow N$ konvergiert das stochastische metrisch-topologische Modell (*SMT Modell*) gegen das Vicsek-Modell.

