ElegansNet：简要科学报告与初步实验。

Francesco Bardozzo*‡, Andrea Terlizzi*, Pietro Li´o †, Roberto Tagliaferri** *NeuroneLab*- DISA-MIS - 萨莱诺大学 - 意大利† 计算机实验室 - 剑桥大学 - 英国 ‡ 如需联系，请发送邮件至：fbardozzo@unisa.it

arXiv:2304.13538v1 [cs.NE] 6 Apr 2023

摘要—**本研究报告介绍了 ElegansNet，这是一种模拟真实神经元网络电路的神经网络，旨在更好地理解连接组拓扑结构与深度学习系统之间的相互作用。该方法利用生物神经元回路强大的表征能力，设计并生成拓扑结构类似于自然网络的改进型深度学习系统。由于秀丽隐杆线虫连接组完整、规模适中且标注了功能性神经元类别，因此将其用作参考。研究表明，简单生物的连接组呈现出神经元之间特定的功能关系；将其转化为可学习的张量网络并集成到现代架构中后，便可提供生物学上合理的结构，从而高效解决复杂任务。研究将模型性能与随机连线网络进行比较，并与在全局基准测试中排名靠前的人工网络进行对照。首先，*ElegansNet* 的表现优于随机连线网络。有趣的是，*ElegansNet* 模型的表现仅与基于 Watts-Strogatz 小世界性质的模型略为相近。与 Transformer 或基于注意力的自编码器等最先进的人工神经网络相比，*ElegansNet* 在有监督图像分类任务和无监督手写数字重构任务中，均优于知名深度学习模型和传统模型，在验证集上分别于 CIFAR-10 和 MNIST 无监督任务中达到 99.99% 和 99.84% 的 Top-1 准确率。**

I. 简短报告

几十年来，科学家一直致力于开发算法和机器，使其越来越多地受到大脑和神经系统通信机制的启发。在神经网络（连接主义）模型中，重点是构建基于网络的人工架构，使其能够通过解决各种任务并具备充分的泛化能力来从示例中学习 [1]。尽管这些现代问题解决方法已得到科学界的广泛认可和应用，但以将神经网络塑造为连接组为重点的“生物启发式”改进仍具有相当大的潜力。一方面，大脑是由共同协作以执行认知任务的神经元组成的复杂网络，而对这些网络的研究，即连接组学，已经为了解大脑的功能提供了宝贵洞见 [2]。实际上，连接组学研究人员已经表明，神经元连接拓扑结构对于理解神经元回路如何处理信息至关重要 [3]。另一方面，深度学习通过设计基于人工神经元电路的网络架构，彻底改变了人工智能领域，并在广泛的任务中展现出卓越性能 [4], [5], [6], [1]。尽管已经取得了重大进展，在各自领域中，从事人工深度神经网络研究的人员很少复制生物神经元回路（也称为连接组）的拓扑结构，这主要是由于维度限制以及与跨域考量相关的约束等多种因素。受 [7],一组研究人员工作的启发，他们于 2019 年提出使用深度连接组网络（DCNs） [8] 。这是首次从学习能力的角度出发，尝试设计受现实神经元网络启发的小世界神经网络。另一方面，他们并未以一一对应的方式复制生物连接组的拓扑结构。截至 2023 年 4 月 5 日，据我们所知，DCNs 的发展已经停滞。为填补这一空白，我们设计了一种能够有效利用生物连接组强大表征能力的方法。我们的方法基于通过几乎 1:1 的转换来设计和生成连接组启发的学习系统，将张量中的神经元表示和张量连接中的突触分别进行转换。具体而言，我们利用连接组的结构信息对深度学习架构进行建模，并利用传感器、中间神经元和运动器官的功能组织结构来增强基于反向传播的学习能力 [9]。我们的初步实验表明，简单生物体 秀丽隐杆线虫 [10], 的连接组中，神经元之间存在由进化压力塑造和优化的特定功能关系，这些关系能够更好地形成一个可学习的张量网络（如第 II-A 节简要讨论并在图 1 中所示）。通过将连接组转换为可学习的张量网络，并将其整合到现代深度学习架构中，我们揭示了其在知名分类和重构任务上的学习潜力。图 1 展示了从连接组到张量网络的转换过程示例。具体而言，连接组启发的张量网络包含一个分层过程，将传感器视为输入空间，将中间神经元视为潜在空间，将运动神经元视为输出空间。因此，分层连接组通过编码器和解码器，根据其图表示进行重构，而输入和输出则取决于学习问题。理想情况下，编码器/解码器层旨在充当外部环境，使人工蠕虫能够与之交互（见图 1 - 框 （**c**）和 **e**）。本报告第 II-B 和 II-C 节展示了我们的 *ElegansNet*模型与随机重连的连接组以及

从秀丽隐杆线虫连接组到可学习的张量网络。

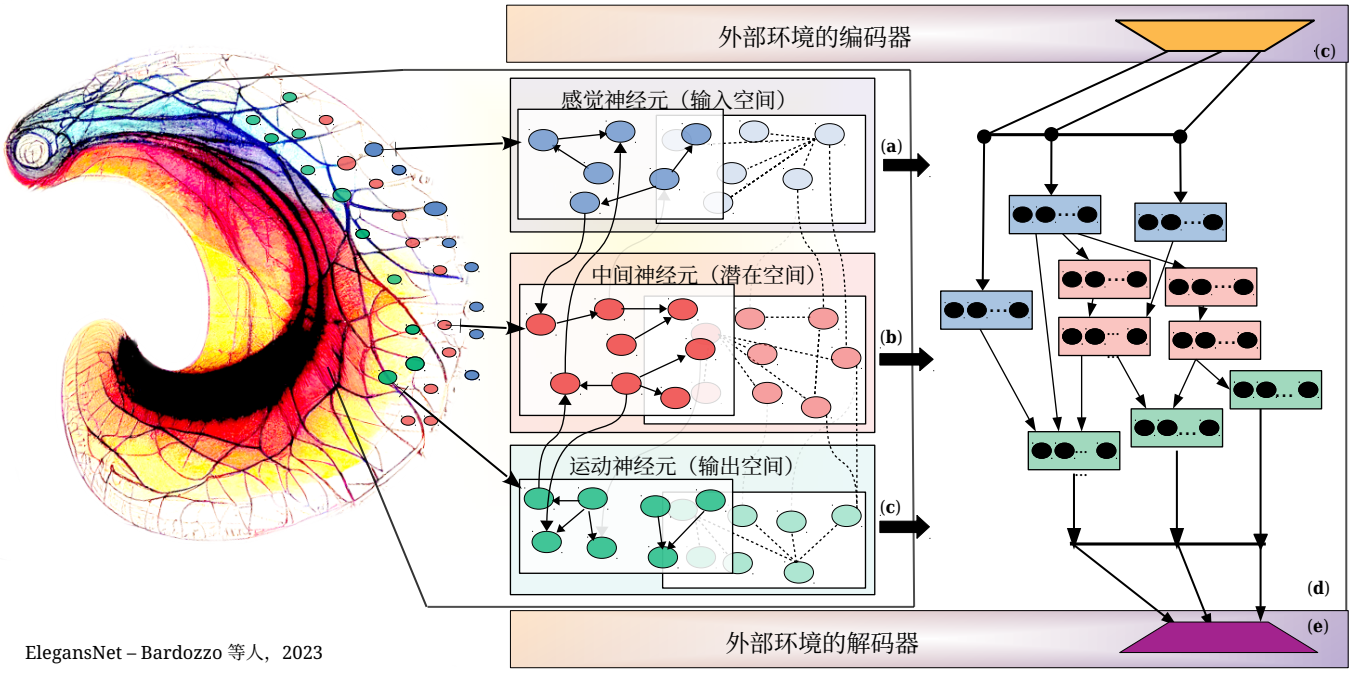

图1。秀丽隐杆线虫 的连接组表示为一个具有两个重叠层的全连接图，其中实线边表示化学突触和有向突触，虚线边表示电突触和无向突触。感觉神经元以蓝色表示（框（**a**）），中间神经元以红色表示（框（**b**））。最后，运动神经元以绿色表示（框（**c**））。编码器（框（**c**））可能因不同的深度学习任务而异，负责生成作为潜在空间中感觉张量输入的特征图。可学习的张量网络（框（**d**））是由参考图投影到外部环境中心后形成的分层模型。该张量网络采用有向无环图的形式，作为我们模型的潜在空间。在张量网络的输出端，会收集运动单元张量，并在解码器部分（框（**d**））选择最重要的特征。

全局基准测试在两个知名问题上的性能对比：*CIFAR-10* [1]（监督问题）和 *MNIST-Unsup* [2]（无监督问题）。

II. 结果

A. 连接组进化保守性。

参考连接组上的进化保守性证据，是构建深度学习模型时至关重要的优化依据。因此，在研究的第一部分，我们深入探讨了秀丽隐杆线虫神经元回路的特征，考察网络结构如何影响神经元特征之间的关系。模体熵 [11] 和二元／反二元算法 [12], 及其扩展算法被用于分析各种神经元功能的分布及其随时间的演化。值得注意的是，Watts 和 Strogatz [13] 证明了秀丽隐杆线虫连接组具有小世界性质，这为设计类似于自然网络的网络提供了宝贵的见解。这一性质也体现在第二节 B 部分所讨论的性能比较中。此外，我们对秀丽隐杆线虫学习能力的分析神经元回路表明，运动神经元和感觉神经元以及中间神经元之间的功能交互具有保守性，但随着重新布线比例的增加，这些特征的重要性会逐渐降低。这与多重二元／反二元效应相关：只要连接组尚未被随机化，该效应就是一种高度保守的特征。即使是轻微的重新布线，也足以破坏长度小于 2/3 条边的最短路径上的这一效应。这些结果为构建模拟连接组行为的图优化深度学习模型提供了宝贵的见解。更普遍地说，了解某些拓扑模式如何分布于整个连接组网络中，可能会为设计深度学习模型提供进一步线索，正如一些研究所证明的那样 [14], [15], [16]。

B. 与随机生成网络的比较

本节从深度学习建模的角度，将随机连接的小世界网络与秀丽隐杆线虫 连接组的自然网络组织结构进行比较。不同于其他研究 [7], [8], [15], [16], [14], ，本文采用了一种可将输入图节点直接转换为神经网络张量的算法。这些张量依据上述图的边，在功能上彼此关联。因此，无需预先设定起始架构（例如用于 [7], [8]

[1]基准测试 CIFAR-10[2]基准测试 MNIST 无监督

的 ResNet），即可生成所构建网络的张量和连接与源图之间近乎一一对应的映射。基于秀丽隐杆线虫 天然连接组构建的模型被称为*ElegansNet*。在首次进行*CIFAR-10* 分类任务比较时，*EleganNet*$M1$ 迅速达到 99.99% 的准确率，相较于随机生成的网络表现更佳（另见图 2 - 框**(a)**），并且在各训练轮次中保持稳定，优于基于随机小世界图构建的全部 30 个模型。如图 2 - 框**(a-b)**所示，采用 Watts-Strogatz（WS） [13]生成算法构建的模型，其平均性能略优于采用 Barabási-Albert（BA） [17]（绿色虚线）或 Erdos-Renyi（ER） [18]（橙色虚线）生成算法构建的模型，这一结论在*CIFAR-10* （EleganNet $M1$）和*MNIST*-Unsup（EleganNet $M2$）训练中均成立。相反，在图 2 - 框**(b)**中，采用 ER 算法构建的模型在后续训练轮次中保持了更高的准确率。这些发现进一步凸显了天然网络连接的重要性，彰显了其与随机连接之间的差异，并为设计更高效的人工神经网络提供了新的见解。

C. 与最先进模型的比较

如表 I 所示，*EleganNet M1* 在.CIFAR-10 分类任务上达到了 99.99% 的 Top-1 准确率。因此，*EleganNet M1* 优于多种最先进模型，包括经典的视觉 Transformer 架构，如*ViT*、*CvT*、*CaiT*、*BiT* 或*DeiT* [19], [20], [21], [22], [23], [24], 基于进化的 Transformer 方法，如 μ2Net [25], , 以及纯卷积架构，如 *EfficientNetV2* [26]。值得注意的是，尽管*EleganNet* $M1$ 的可训练参数数量（$107M$）远少于最佳 Transformer*ViT-H 14* [20], （其拥有*623M* 个参数），它仍然超越了后者，以及拥有 $121M$ 个参数的*EfficientNetV2-L* [26], 和*ResNet*启发的 Transformer*BiT-L* [22]。

表 I*EleganNet* $M1$ 与最先进 模型在 *CIFAR-10* 上的比较

模型	前 1 准确率	参数量
EleganNet $M1$（我们的模型）	**99.9**	107M
ViT-H/14 [20]	99.5	632M
μ2Net [25]	99.5	
ViT-L/16 [20]	99.4	307M
CaiT-M-36 U 224 [21]	99.4	
CvT-W24 [24]	99.4	
BiT-L [22]	99.4	
ViT-B [27]	99.3	
Heinsen 路由 +BEiT-large 16 224 [28]	99.2	309.5M
ViT-B/16 [29]	99.1	
CeiT-S [30]	99.1	
AutoFormer-S 384 [31]	99.1	23M
TNT-B [5]	99.1	65.6M
DeiT-B [23]	99.1	86M
EfficientNetV2-L [26]	99.1	121M

EleganNet $M2$ 配置为重建手写数字（MNIST 无监督）。在这种情况下，该模型在全局基准测试中也优于基于机器学习/深度学习的最先进模型。这些模型涵盖了广泛的机器学习技术，从堆叠胶囊自编码器或对抗自编码器等类自编码器架构[32], [33],，到 CatGAN、InfoGAN 或 PixelGAN 等基于生成对抗网络的方法 [34], [35], [36], , 再到不变信息聚类（IIC）和稀疏流形变换等基于信息论和拓扑学的算法 [37], [38]。表 II 展示了我们的*EleganNet* $M2$ 结果，并将其与深度学习和传统机器学习问题的结果进行了比较。如第 I 节所述，所展示的所有结果均取自在线基准测试库；例外是堆叠胶囊自编码器（AE） [32], , 其报告的并非在 MNIST 上的性能，而是在 40×40 *MNIST* 数据集上取得了 98.2 的准确率。*EleganNet* 的*Top-1* 准确率 达到 99.78，均方误差（*MSE* ）为 0.0018，在图表中超过了所有报告该指标的其他模型。至于*F1* 分数 ，其为 99.27，超过了得分为 96.6 的*DenMune* [39] 模型。所提出的模型展现出非常有前景的结果，提升了无监督数字重建的性能，并为设计和理解深度学习架构提供了一种新方法。

表 II*EleganNet* $M2$ 与 MNIST 无监督的最先进模型对比

模型	top-1 准确率
EleganNet $M2$（我们的方法）	**99.8**
IIC [37]	99.3
稀疏流形变换 [38]	99.3
SubTab [40]	98.3
堆叠胶囊自编码器 [32]	98.0
自组织映射 [41]	96.9
双向 InfoGAN [35]	96.6
对抗自编码器 [33]	95.9
CatGAN [34]	95.7
InfoGAN [42]	95.0
PixelGAN 自编码器 [36]	94.7
模型	**F1（%）**
EleganNet $M2$（我们的）	**99.3**
DenMune [39]	96.6

D. 结论

正如这份初步研究报告[3]所示，这些发现表明，基于秀丽隐杆线虫 连接组的自然图结构设计模型，可能是解决复杂任务的一种有前景的方法。对受连接组启发的神经网络与人工神经网络进行的两项比较揭示了前者非凡的复杂性、效率、鲁棒性和灵活性。要全面理解神经元回路的功能，并开发出能够更好地近似其生物对应物的复杂性和适应性的更先进人工网络，还需要进一步研究。一方面，尽管人工网络取得了重大进展，但其能力仍未达到生物网络的高度。另一方面，由于我们*EleganNet*等新颖方法的出现，将生物结构融入人工神经网络正变得越来越可行

[3]由于这是一份初步报告，因此没有详细说明进化连接组优化，也未介绍其如何构建以表示连接组神经网络。

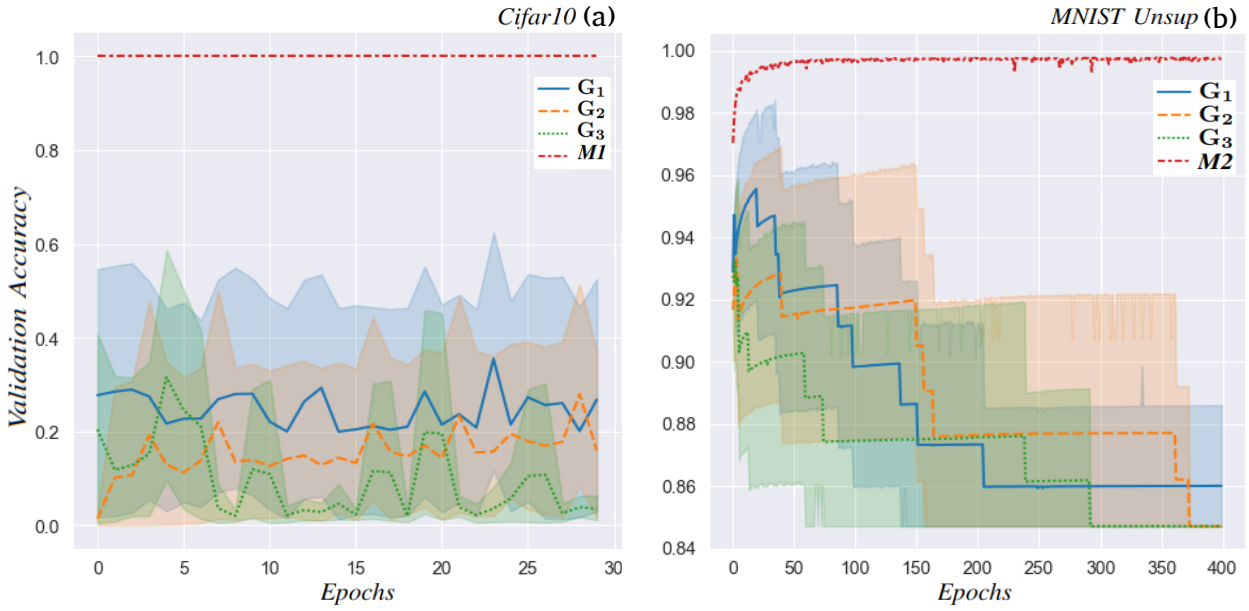

图2. 本图比较了构成*EleganSNet* $M1$ 和 $M2$ 模型的原始神经回路与随机重连模型在两个著名问题上的表现：*CIFAR-10* 和*MNIST* 无监督，分别见方框**(a)** 和**(b)**。 y轴表示验证集 Top-1 准确率，x轴表示训练轮数。基于原始连接组张量网络构建的模型以红色虚线表示；基于随机重连小世界图构建的模型（共30个）则以均值和方差表示，具体如下：$\mathbf{G}_1$ （蓝线）对应 Watts-Strogatz，$\mathbf{G}_2$ （橙色点线）对应 Erdős-Rényi，$\mathbf{G}_3$ （绿色点线）对应 Barabási-Albert 生成模型。

学习系统。这项工作开辟了以往无法企及的新研究方向，预计未来的神经网络研究将更加深入地整合生物系统与人工系统，从而为该领域带来新的洞见与突破。

参考文献

1 Goodfellow, I., Bengio, Y. 和 Courville, A.，《深度学习》。MIT出版社，2016年。2 Fornito, A., Zalesky, A. 和 Bullmore, E.，《脑网络分析基础》。Academic出版社，2016年。3 Van Veen, F. 和 Leijnen, S.，“神经网络动物园（2016）”，网址 *https://www.asimovinstitute. org/neural-network-zoo*，2017年。4 Bardozzo, F., Collins, T., Forgione, A., Hostettler, A. 和 Tagliaferri, R.，“Stasis-net：一种用于现代三维腹腔镜深度重建的堆叠式孪生视差估计网络”，*Medical Image Analysis*，第77卷，第102380页，2022年。5 Han, K., Xiao, A., Wu, E., Guo, J., Xu, C. 和 Wang, Y.，“Transformer in Transformer”，神经信息处理系统进展，第34卷，第15 908–15 919页，2021年。6 Velickovic, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Lio, P., Bengio, Y. 等，“图注意力网络”，统计，第1050卷，48 550，2017 20，第10期，页码 – 。7 Xie, S., Kirillov, A., Girshick, R. 和 He, K.，“探索用于图像识别的随机连线神经网络”，载于*IEEE/CVF*国际计算机视觉会议论文集，2019年，第1284–1293页。8 Roberts, N., Yap, D. A. 和 Prabhu, V. U.，“深度连接组学网络：受神经元网络启发的神经网络架构”，*arXiv*预印本 *arXiv:1912.08986*，2019年。9 Lillicrap, T. P., Santoro, A., Marris, L., Akerman, C. J. 和 Hinton, G.，“反向传播与大脑”，*Nature Reviews Neuroscience*，第21卷，第6期，第335–346页，2020年。10 Varshney, L. R., Chen, B. L., Paniagua, E., Hall, D. H. 和 Chklovskii, D. B.，“秀丽隐杆线虫神经元网络的结构特性”，*PLoS Computational Biology*，第7卷，1001066，2011 2，第 e 页。

11 Adami, C., Qian, J., Rupp, M. 和 Hintze, A.，“复杂网络中彩色模体的信息含量”，*Artificial Life*，第 17 卷，第 4 期，第 375–390 页，2011年。12 Park, J. 和 Barab´asi, A.-L.，“复杂网络中节点特征的分布”，美国国家科学院院刊，第 104 卷，第 46 期，第 17 916–17 920 页，2007年。13 Watts, D. J. 和 Strogatz, S. H.，“‘小世界’网络的集体动力学”，*Nature*，第 393 卷，第 6684 期，第 440–442 页，1998年。14 Nowak, A. 和 Janik, R. A.，“发现影响神经网络性能的连接模式”，载于 *ECML/PKDD*，2022年。15 Janik, R. A. 和 Nowak, A.，“基于随机图分析神经网络。”*arXiv: Learning*，2020年。16 Waqas, A., Rasool, G., Farooq, H. 和 Bouaynaya, N. C.，“通过图度量探索神经网络的鲁棒性”，*arXiv*，第 abs/2106.15850 卷，2021年。17 Albert, R. 和 Barab´asi, A.-L.，“复杂网络的统计力学”，《现代物理评论》，第 74 卷，第 1 期，第 47 页，2002年。18 Erd˝os, P., R´enyi, A. 等，“随机图的演化”，匈牙利科学院数学研究所出版物，第 5 卷，第 1 期，第 17–60 页，1960年。19 Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, Ł. 和 Polosukhin, I.，“Attention Is All You Need”，神经信息处理系统进展，第 30 卷，2017年。20 Dosovitskiy, A., Beyer, L., Kolesnikov, A., Weissenborn, D., Zhai, X., Unterthiner, T., Dehghani, M., Minderer, M., Heigold, G., Gelly, S. 等，“一张图像胜过 16×16 个词：用于大规模图像识别的 Transformer”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2010.11929*，2020年。21 Touvron, H., Cord, M., Sablayrolles, A., Synnaeve, G. 和 J´egou, H.，“使用图像 Transformer 进行更深层次的学习”，载于 *IEEE/CVF*国际计算机视觉会议，2021年，第 32–42 页。22 Kolesnikov, A., Beyer, L., Zhai, X., Puigcerver, J., Yung, J., Gelly, S. 和 Houlsby, N.，“Big Transfer（BiT）：通用视觉表征学习”，载于 计算机视觉—*ECCV 2020*：第 *16* 届欧洲会议，英国格拉斯哥，*2020*年*8*月*23*日至*28*日，论文集，第 *V* 部分 *16*。Springer，2020年，第 491–507 页。23 Touvron, H., Cord, M., Douze, M., Massa, F., Sablayrolles, A. 和 J´egou, H.，“通过注意力训练数据高效的图像 Transformer 并进行蒸馏”，载于 国际机器学习大会。PMLR，2021年，第 10 347–10 357 页。

24 Wu, H., Xiao, B., Codella, N., Liu, M., Dai, X., Yuan, L. 和 Zhang, L.，“CvT：将卷积引入视觉 Transformer”，载于 *IEEE/CVF*国际计算机视觉会议，2021年，第 22–31 页。25 Gesmundo, A. 和 Dean, J.，“在大规模多任务学习系统中动态引入任务的进化方法”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2205.12755*，2022年。26 Tan, M. 和 Le, Q.，“EfficientNetV2：更小的模型和更快的训练”，载于 国际机器学习大会。PMLR，2021年，第 10 096–10 106 页。27 Touvron, H., Cord, M., El-Nouby, A., Verbeek, J. 和 J´egou, H.，“每个人都应了解的关于视觉 Transformer 的三件事”，载于 计算机视觉—*ECCV 2022*：第 *17* 届欧洲会议，以色列特拉维夫，*2022*年*10*月*23*日至*27*日，论文集，第 *XXIV* 部分。Springer，2022年，第 497–515 页。28 Heinsen, F. A.，“序列中的向量路由算法”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2211.11754*，2022年。29 Tseng, C.-H., Liu, H.-C., Lee, S.-J. 和 Zeng, X.，“单元空间内用于深度学习的扰动梯度更新”，载于 *2022*年国际神经网络联合会议（*IJCNN*）。IEEE，2022年，第 01–08 页。30 Yuan, K., Guo, S., Liu, Z., Zhou, A., Yu, F. 和 Wu, W.，“ 将卷积设计融入视觉 Transformer”，载于 *IEEE/CVF* 国际计算机视觉会议，2021年，第 579–588 页。31 Chen, M., Peng, H., Fu, J. 和 Ling, H.，“Autoformer：为视觉识别搜索 Transformer”，载于 *IEEE/CVF*国际计算机视觉会议，2021年，第 12 270–12 280 页。32 Kosiorek, A., Sabour, S., Teh, Y. W. 和 Hinton, G. E.，“堆叠胶囊自编码器”，神经信息处理系统进展，第 32 卷，2019年。33 Makhzani, A., Shlens, J., Jaitly, N., Goodfellow, I. 和 Frey, B.，“对抗自编码器”，*arXiv* 预印本 *arXiv:1511.05644*，2015年。34 Springenberg, J. T.，“使用类别生成对抗网络进行无监督和半监督学习”，*arXiv* 预印本 *arXiv:1511.06390*，2015年。35 Hinz, T. 和 Wermter, S.，“基于无监督学习的解耦表示进行推理”，*arXiv* 预印本 *arXiv:1803.02627*，2018年。36 Makhzani, A. 和 Frey, B. J.，“PixelGAN 自编码器”，神经信息处理系统进展，第 30 卷，2017年。37 Ji, X., Henriques, J. F. 和 Vedaldi, A.，“用于无监督图像分类和分割的不变信息聚类”，载于 *IEEE/CVF*国际计算机视觉会议，2019年，第 9865–9874 页。38 Chen, Y., Yun, Z., Ma, Y., Olshausen, B. 和 LeCun, Y.，“使用稀疏流形变换进行简约的无监督学习”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2209.15261*，2022年。39 Abbas, M., El-Zoghabi, A. 和 Shoukry, A.，“DenMune：使用互为最近邻的基于密度峰值的聚类”，模式识别，第 109 卷，第 107589 页，2021年。40 Ucar, T., Hajiramezanali, E. 和 Edwards, L.，“SubTab：为自监督表示学习选取表格数据的特征子集”，神经信息处理系统进展，第 34 卷，18 865，2021年 18 853页。– 。41 Khacef, L., Rodriguez, L. 和 Miramond, B.，“通过无监督特征提取改进自组织映射”，载于 神经信息处理：第 *27* 届国际会议，*ICONIP 2020*，泰国曼谷，*2020*年*11*月*23*日至*27*日，论文集，第二部分 *27*。Springer，2020年，第 474–486 页。42 Chen, X., Duan, Y., Houthooft, R., Schulman, J., Sutskever, I. 和 Abbeel, P.，“InfoGAN：通过信息最大化生成对抗网络进行可解释表示学习”，神经信息处理系统进展，第 29 卷，2016年。