

Paweł KAŁUŻNY

Instytut Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej PAN
ul. Trojdena 4, Warszawa
E-mail: pkaluzny@ibib.waw.pl

Modelowanie i symulacje ciągów zdarzeń w grafach czasowych

1 Wstęp

Niektóre procesy naturalne i techniczne mają charakter krótkotrwałych, powtarzających się zdarzeń występujących w określonych chwilach czasu. Są to, na przykład, wyładowania elektryczne komórek nerwowych [2]. Można przyjąć, że czas trwania pojedynczego zdarzenia jest pomijalnie krótki w porównaniu do interwałów czasowych między wystąpieniami zdarzeń. Zależności między chwilami wystąpienia poszczególnych zdarzeń mogą być, w ogólności, bardzo skomplikowane lub niedeterministyczne. Na przykład, wystąpienie wyładowania pewnego neuronu może przyspieszyć, opóźnić, lub nie mieć żadnego wpływu na wyładowanie innego neuronu, zależnie od rodzaju połączenia między nimi. Metody modelowania probabilistycznego takich systemów opierają się na teorii punktowych procesów stochastycznych [4]. Modelowanie deterministycznych systemów zdarzeń występujących w technice, ekonomii i badaniach operacyjnych opiera się na zastosowaniu sieci Petri [1] i obejmuje modele podobne do opisanego w niniejszej pracy: *timed event graphs*, których dynamika wynika jednak z innego mechanizmu synchronizacji zdarzeń.

Mimo różnorodności biologicznych i fizycznych mechanizmów, interesująca jest możliwość ich fenomenologicznego opisu przy pomocy modelu o regularnej strukturze i małej liczbie parametrów. Niniejsza praca definiuje taki prosty model generacji ciągów zdarzeń, dalej nazywany grafem czasowym, przedstawia metodę identyfikacji parametrów tego modelu oraz podejmuje próbę jego charakteryzacji poprzez symulacje.

2 Graf jako model ciągu zdarzeń

Ciąg zdarzeń, w których pojawiają się zdarzenia N różnych typów, jest rozpatrywany jako trajektoria systemu złożonego z N lub więcej jednostek generujących zdarzenia. Zależności przyczynowo-skutkowe między zdarzeniami polegają na tym, że wystąpienie zdarzenia określonego typu może spowodować selektywne opóźnienie wystąpienia innych, późniejszych zdarzeń. Zależności te są wyrażone przez macierz współczynników $w(i, j)$ opisującą wpływ zdarzenia typu j na czas wystąpienia następnego zdarzenia typu i .

Koncepcyjnym modelem systemu generacji zdarzeń jest graf skierowany [3], w którym ponumerowane węzły $i \in \{1, \dots, N\}$ odpowiadają jednostkom generującym zdarzenia, a gałęzie opisują zależności między chwilami wystąpienia tych zdarzeń (Rys.1). W najprostszym grafie czasowym węzły generują ciągi zdarzeń z zadanymi interwałami powtarzania $T(i)$, a waga gałęzi $w(i, j) \geq 0$ określa opóźnienie wystąpienia zdarzenia jednostki i w wyniku uprzedniego wystąpienia zdarzenia innej jednostki j .

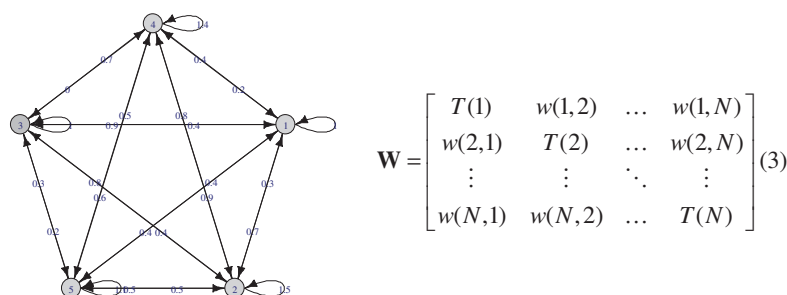
Pojedyncze zdarzenie jest reprezentowane przez jego numer kolejny k , czas wystąpienia $t(k)$ oraz etykietę (numer) jednostki generującej $n(k)$. Niech $\mathbf{p}(k)$ oznacza wektor stanu systemu generacji zdarzeń, odpowiadający sytuacji bezpośrednio po wystąpieniu zdarzenia o numerze k , którego i -ta składowa $p(i; k)$ oznacza czas od chwili początkowej do wystąpienia k -tego zdarzenia w węźle i . Rozpatrywany jest graf czasowy z dynamiką stanu określoną równaniem

$$p(i; k+1) = p(i; k) + w(i; n(k)) \quad (1)$$

gdzie

$$n(k) = \arg \min_{i=1, \dots, N} (p(i; k)) = \arg \min(\mathbf{p}(k)) \quad (2)$$

jest indeksem najmniejszej współrzędnej wektora $\mathbf{p}(k)$, a element $w(i, j)$ macierzy współczynników wyznacza wartość przesunięcia czasowego kolejnego zdarzenia jednostki i w wyniku uprzedniego wystąpienia zdarzenia jednostki $j=n(k)$. W tym zapisie uwzględniono występowanie spontanicznej generacji zdarzeń przez przyjęcie, że $w(i, i) = T(i)$ dla każdej jednostki i . Wartość zerowa parametru przesunięcia czasowego $w(i, j) = 0$, oznacza, że wystąpienie zdarzenia jednostki j nie wywiera wpływu na chwile wystąpienia zdarzeń jednostki i .



Rys. 1. Graf czasowy z zaznaczonymi (przykładowymi) współczynnikami oddziaływań (etykiety krawędzi) oraz interwałami zdarzeń spontanicznych (etykiety pętli) i macierzą współczynników \mathbf{W}

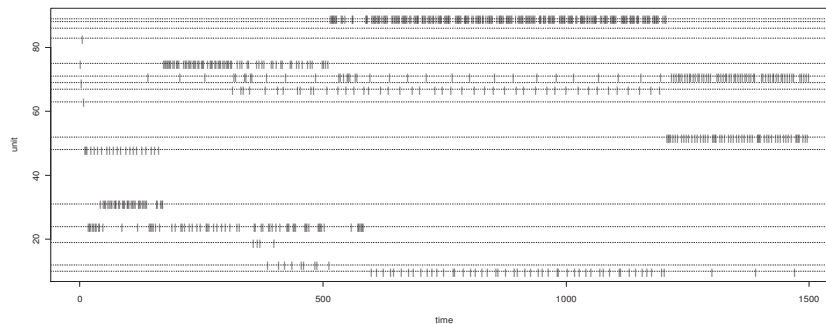
Fig. 1. Timed graph with interaction coefficients of interactions between units (edge labels) and its incidence matrix \mathbf{W}

Wystąpienie dwu kolejnych zdarzeń tej samej, i -tej, jednostki odpowiada zamkniętej ścieżce w tym grafie, która rozpoczyna się oraz kończy w węźle o numerze i . Ścieżka ta może przechodzić przez pewną liczbę (zero lub więcej) innych wierzchołków, co odpowiada występowaniu, pomiędzy kolejnymi zdarzeniami tej jednostki, zdarzeń jednostek o numerach różnych od i . Suma parametrów (opóźnień) wnoszonych przez gałęzie grafu wchodzące w skład tej ścieżki odpowiada łącznemu przesunięciu zdarzenia jednostki i spowodowanemu przez oddziaływanie ze strony innych jednostek

grafu. Gałęzie skierowane z zerowym parametrem opóźnienia $w(i, j)=0$ również mogą wchodzić w skład pętli, ale nie wnoszą żadnego opóźnienia chwili następnego wystąpienia zdarzenia jednostki i . Jeśli wszystkie elementy pozadiagonalne macierzy $\mathbf{W}=[w(i, j)]$ znajdujące się i -tym wierszu są zerowe, $w(i, j)=0, \forall j \neq i$, to jednostka i generuje zdarzenia niezależnie od innych jednostek, ze stałym okresem powtarzania $T(i)=w(i, i)$. Jeśli elementy pozadiagonalne macierzy \mathbf{W} , znajdujące się w i -tej kolumnie, są zerowe, tzn. $w(j, i)=0, \forall j \neq i$, to jednostka i nie wpływa na inne jednostki.

Gdy oddziaływania między jednostkami są małe, wobec wartości interwałów swobodnych $T(i)$, wszystkie jednostki generują zdarzenia, każda ze swoim indywidualnym interwałem powtarzania powiększonym o niewielkie odchylenia. Gdy jednak oddziaływania między jednostkami są porównywalne z wartością tego interwału, to, jak na rys. 2, po wygaszeniu stanu przejściowego związanego z warunkiem początkowym $\mathbf{p}(0)$, część jednostek może zostać całkowicie wyłączonych poprzez to, że czasy wystąpienia ich zdarzeń są w każdym kroku dynamiki większe niż innych, tzn. dla niektórych jednostek j istnieją takie liczby naturalne $K(j)$ że

$$\forall k > K(j) \quad p(j, k) > \min_i p(i, k) \quad (4)$$



Rys. 2. Symulacja przebiegu zdarzeń w grafie złożonym ze 100 jednostek i losowymi współczynnikami oddziaływań. Pionowe kreski oznaczają zdarzenia, przyporządkowane do poziomych linii wyznaczających oś czasu dla poszczególnych jednostek

Fig. 2. Simulated event trajectory in a graph of 100 units with random coefficients

Z praktycznego punktu widzenia szczególnie istotna jest sytuacja, gdy deterministyczny system generujący zdarzenia składa się z dużej liczby jednostek, spośród których tylko część jest dostępna dla obserwacji.

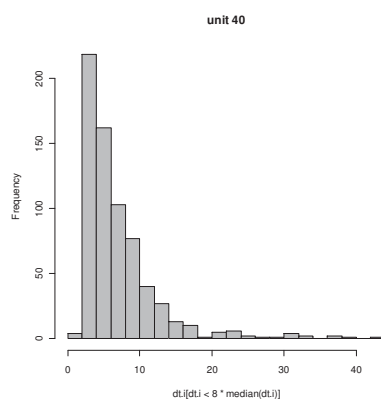
3 Jakościowe własności ciągów zdarzeń

Godny odnotowania jest fakt, że dynamika modelu wykazuje duże zmiany jakościowe polegające na zanikaniu i, niekiedy, ponownym pojawianiu się aktywności niektórych jednostek (rys. 2). Są to procesy, które silnie zależą od warunków początkowych oraz od relacji między wartościami interwałów swobodnych oraz interakcjami ze strony innych jednostek grafu. Duże znaczenie mają także wzajemne proporcje interwałów

własnych poszczególnych jednostek – te jednostki, które mają relatywnie najmniejsze wartości $w(i, i)$ mają dominujący wpływ na dynamikę całego systemu.

W dużych grafach ($N \geq 100$) stwierdzono, że typowy wzorec aktywności charakteryzuje się tym, że znaczna liczba jednostek pozostaje trwale wyłączona – nie generuje żadnych zdarzeń, co także ilustruje rysunek 2, przedstawiający przebieg zdarzeń w systemie złożonym ze 100 jednostek. Mała, dominująca grupa jednostek generuje większość zdarzeń w systemie. Inna, niewielka grupa to jednostki, które generują jedynie sporadyczne, pojedyncze zdarzenia na początku symulacji spowodowane warunkiem początkowym, które szybko wygasają.

Pomimo, że dynamika rozpatrywanych procesów jest całkowicie deterministyczna, symulacje długich ($K \geq 1000 * N$) przebiegów pozwalają wykreślić histogramy częstości występowania interwałów (rys. 3) aktywnych jednostek. Histogramy te, typowo, wykazują charakterystyczne prawo-skośne rozkłady częstości, jakościowo przypominające histogramy otrzymywane dla rozkładów prawdopodobieństwa typu wykładniczego.



Rys. 3. Przykładowe histogramy interwałów między kolejnymi zdarzeniami jednej jednostki w grafie złożonym z 500 jednostek. W histogramie pominięto interwały o długości powyżej 8 wartości mediany

Fig. 3. Histograms of inter-event interval for one unit in a graph of 500 units

4 Identyfikacja parametrów modelu metodą programowania liniowego

Przy danym, zarejestrowanym, ciągu zdarzeń

$$t(k), n(k) \quad k = 1, \dots, K$$

współczynniki oddziaływań między jednostkami mogą zostać wyznaczone poprzez rozwiązanie liniowego zadania optymalizacyjnego. Niech $\mathbf{w} = w(i, :)$ oznacza wektor poszukiwanych współczynników oddziaływań wszystkich obserwowanych jednostek na wybraną jednostkę o ustalonym numerze i , zapisany jako wektor kolumnowy. Wektor ten odpowiada pojedynczemu wierszowi macierzy oddziaływań \mathbf{W} . Rozważamy wszystkie interwały o odstępach

$$\Delta t(k) = t(k+1) - t(k), k = 1, \dots, I, \quad (5)$$

między kolejnymi parami zdarzeń generowanych przez tą jednostkę, w postaci wektora $\Delta \mathbf{t}$ o wymiarze równym liczbie takich interwałów I . Przebieg zdarzeń reprezentuje macierz $\mathbf{E} = [\#(k, j)]$ wymiaru $I \times N$, której elementy są nieujemnymi liczbami całkowitymi oznaczającymi liczbę wystąpień zdarzenia jednostki j w interwale o numerze k . Wliczane są tylko zdarzenia, których wystąpienie może oddziaływać przyczynowo na długość interwału, zatem $\#(k, i) = 1$, to znaczy wliczone jest tylko wystąpienie zdarzenia jednostki i na lewym brzegu interwału. Przy tych konwencjach, dla dowolnych, założonych hipotetycznie wartości współczynników $w(i, j)$ oraz dla każdego interwału k spełniona jest zależność

$$\sum_{j=1}^N \#(k, j)w(i, j) + e^+(k) - e^-(k) = \Delta t(k), \quad (6)$$

gdzie $e^+(k)$, $e^-(k)$ są nieujemnymi zmiennymi dopełniającymi. Liczby $e^+(k) \geq 0$ są elementami wektora \mathbf{e}^+ , oznaczają nieujemną składową błędu wyznaczenia poszczególnych interwałów na podstawie sumy oddziaływań $w(i, j)$. Analogicznie, $e^-(k) \geq 0$, element wektora \mathbf{e}^- , oznacza składową niedodatnią tego błędu. Różnica $e^+(k) - e^-(k)$ jest wartością dopełniającą sumę dla przyjętych, jako hipoteza, wartości współczynników. Jest to typowy zabieg przy formułowaniu zadań programowania liniowego.

Wyznaczenie takich wartości oddziaływań $\mathbf{w} = (i, :)$, które najlepiej reprezentują przebieg zdarzeń określonej jednostki i jest równoważne znalezieniu optymalnego rozwiązania które minimalizuje sumę wszystkich zmiennych dopełniających (błąd całkowity).

Zadanie identyfikacji parametrów \mathbf{w} ma zatem postać:

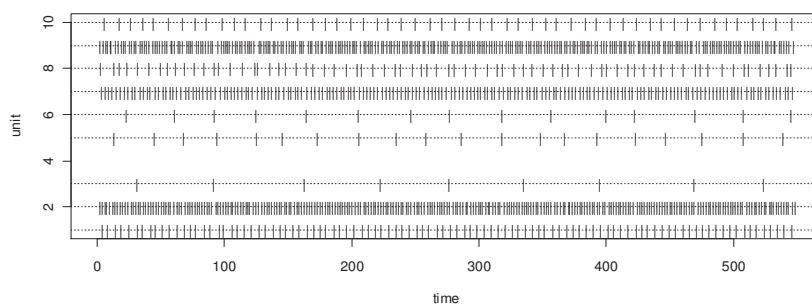
$$\min [\mathbf{0}_{I \times N}, \mathbf{1}_{I \times I}, \mathbf{1}_{I \times I}] \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{N \times I} \\ \mathbf{e}^+_{I \times I} \\ \mathbf{e}^-_{I \times I} \end{bmatrix} \quad (7a)$$

przy ograniczeniach

$$\mathbf{w}, \mathbf{e}^+, \mathbf{e}^- \geq 0 \quad \text{oraz} \quad [\mathbf{E} \quad \mathbf{I} \quad -\mathbf{I}] \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{e}^+ \\ \mathbf{e}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{t} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (7b)$$

gdzie \mathbf{I} jest macierzą jednostkową stopnia I .

Jeśli uzyskana optymalna wartość funkcji celu (7a) wynosi 0, to rozpatrywana seria interwałów jest dokładnie reprezentowana przez model addytywny (1,2). W realistycznych przypadkach należy się jednak spodziewać, że minimalna wartość kryterium pozostaje dodatnia, co oznacza, że niektóre interwały mają długości które nie mogą być reprezentowane przez zadane kombinacje współczynników modelu. Może to być spowodowane przez fundamentalną nieadekwatność modelu lub przez niepełną informację na temat występowania zdarzeń które wpływają na badaną jednostkę. Jeśli bowiem niektóre zdarzenia, które składają się na interwał $\Delta t(k)$ są nieznanne to także



Rys. 4. Testowy ciąg danych dla demonstracji identyfikacji parametrów modelu, w którym występuje 10 jednostek generujących zdarzenia

Fig. 4. Test data for calculation of the parameters of timed graph of 10 event types

wartości liczby zdarzeń występujących w interwale $\#(k, j)$ są obarczone błędem, co powoduje błędy na etapie formułowania problemu optymalizacji.

Przykład obliczeń parametrów modelu

Dla ilustracji metody identyfikacji parametrów grafu rozważmy symulację układu złożonego z $N=10$ jednostek, której wynikiem jest trajektoria pokazana na rys. 4. Zadanie polega na identyfikacji współczynników oddziaływań zdarzeń innych jednostek na zdarzenia jednostki 2. Współczynniki użyte do symulacji (tylko wiersz 2 macierzy, odpowiadający jednostce 2) wynoszą

$$w(2,:) = [0.29, 1.11, 0.27, 0.14, 0.38, 0.73, 0.02, 0.31, 0.58, 0.23]$$

Dla obserwacji dostępne są tylko chwile $t(k)$ faktycznego wystąpienia zdarzeń, przebieg pozostałych wartości stanu $p(j; k)$, $j \neq n(k)$, odpowiadanych zdarzeniom, które nie wystąpiły w kroku k , jest nieznanymi. Dla ilustracji metody przeprowadzono identyfikację tych parametrów dla niektórych przypadków ograniczonej wiedzy na temat zdarzeń.

W przypadku gdy dana jest pełna trajektoria układu, metoda optymalizacyjna odtwarza poprawnie wszystkie elementy wiersza 2 macierzy współczynników, za wyjątkiem $w(2, 4)$, który nie może być znaleziony ponieważ jednostka ta nie wygenerowała żadnego zdarzenia. Metoda wykazuje w takim przypadku $\hat{w}(2, 4) = 0$, przy błędzie równym zero.

Dla weryfikacji przypadku gdy niektóre jednostki nie są obserwowane, rozpatrzono trajektorię, w której usunięte zostały zdarzenia 10, oraz, jak w oryginalnym ciągu, nie występują zdarzenia jednostki 4. Oddziaływania wpływające na jednostkę 2 zostały odtworzone, na podstawie trajektorii z której usunięto wszystkie zdarzenia jednostki 10, jako $\hat{w}(2,:) = [0.29, 1.11, 0.27, 0.00, 0.38, 0.73, 0.02, 0.31, 0.58, 0.00]$,

Widać, że współczynniki zostały odtworzone poprawnie, dla tych oddziaływań, które były reprezentowane w trajektorii. Oddziaływania ze strony jednostek, których

zdarzenia nie były zawarte w danych, mają wartości zerowe. Osiągnięta minimalna wartość błędu jest jednak większa od zera i wynosi w tym przypadku 12.33.

Poprawną identyfikację współczynników uzyskano także gdy usunięte zostały (dodatkowo) wszystkie zdarzenia jednostki 9, wtedy osiągnięto wartość kryterium błędu równą 42.45 oraz

$$\hat{w}(2,:) = [0.29, 1.69, 0.27, 0.00, 0.38, 0.73, 0.02, 0.31, 0.00, 0.00]$$

Poprawne, dokładne współczynniki oddziaływań z jednostkami reprezentowanymi w trajektorii uzyskano także po usunięciu zdarzeń jednostki 7, która jednak oddziałuje tu nieznacznie na jednostkę 2 (z małym współczynnikiem 0.02). Niektóre współczynniki zostały odtworzone poprawnie po usunięciu także zdarzeń jednostki 8, kiedy otrzymano

$$\hat{w}(2,:) = [0.29, 1.71, 0.27, 0.00, 0.38, 1.03, 0.00, 0.00, 0.00, 0.00]$$

W tym ostatnim przypadku, obok prawie poprawnych wartości współczynników oddziaływań z jednostkami 1, 3, 5 pojawiły się jednak także wartości nieprawidłowe dla oddziaływań z jednostką 6, oraz zawyżona wartość $T(2) = w(2,2) = 1.71$.

Przykład ten wskazuje, że proponowana metoda może odtworzyć poprawnie niektóre wartości oddziaływań między jednostkami, przy założeniu, że dynamika ciągu zdarzeń faktycznie opisana jest równaniami (1, 2), wszystkie zdarzenia jednostki podlegającej identyfikacji są zarejestrowane i chwile ich wystąpienia są znane dokładnie.

Inną formą zaburzenia jest spowodowanie zakłócenia dynamiki (1) losowym wektorem $z(k)$. Dla $z(k)$ o rozkładzie równomiernym na przedziale (0,0.1), na podstawie zaburzonych danych opisana procedura wyznaczyła następujące wartości

$$\hat{w}(2,:) = [0.30, 1.09, 0.28, 0.00, 0.42, 0.68, 0.04, 0.33, 0.58, 0.22],$$

które są bliskie oryginalnym.

5 Dyskusja i wnioski

Dzięki temu, że czasy wystąpienia zdarzeń są liniowo zależne od parametrów (ponieważ czasy są wyłącznie wynikiem sumowania parametrów) możliwe jest efektywne wyznaczenie parametrów modelu metodą programowania liniowego.

Uzyskanie dobrych rezultatów identyfikacji, nawet przy nieznaności znacznej części zdarzeń w systemie, jak to demonstruje przykład obliczeniowy w rozdziale 4, jest pozornie zaskakujące. Uzyskanie 'właściwych' wartości parametrów jest częściowo wynikiem tego, że pomimo braku informacji o istnieniu wielu zdarzeń, w danych wejściowych dla optymalizacji pozostała informacja o wartościach znacznej liczby interwałów w których nie występowały zdarzenia nieznanne. Duże znaczenie ma także zgodność faktycznego mechanizmu generacji z mechanizmem założonym w sformułowaniu zadania optymalizacji.

Bardzo poważnym wyzwaniem dla przedstawionej metody mogą być sytuacje, gdy między chwilą wystąpienia (rejestracji) zdarzenia pewnej jednostki w systemie a chwilą, w której oddziałuje ono na zdarzenia innej jednostki mogą występować opóźnienia spowodowane transmisją zdarzeń między jednostkami. Takie opóźnienia, wnoszone przez propagację potencjałów czynnościowych wzdłuż aksonów występują

na przykład w niektórych systemach połączeń neuronów. Opóźnienia transmisji mogą być jednak uwzględnione w zadaniu optymalizacyjnym, jeśli ich wartość jest stała i znana.

Rozwinięciem podstawowej metody identyfikacji parametrów jest uwzględnienie w kryterium minimalizacji (7a), obok błędu aproksymacji interwałów, także wartości samych współczynników $w(i, j)$, co powoduje m.in., że współczynniki które nie przyczyniają się znacząco do minimalizacji błędów uzyskują wartości zerowe. Jest to mechanizm szczególnie ułatwiający interpretację wyników dla dużych wymiarów N . Zadanie optymalizacji parametrów ma postać

$$\min [\lambda \mathbf{1}_{k \times N}, \mathbf{1}_{k \times l}, \mathbf{1}_{k \times l}] \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{N \times l} \\ \mathbf{e}_{l \times l}^+ \\ \mathbf{e}_{l \times l}^- \end{bmatrix},$$

gdzie $\lambda \geq 0$ jest parametrem metody.

W modelu przedstawionym w niniejszej pracy współczynniki oddziaływań nie mogą być liczbami ujemnymi, to znaczy, że oddziaływania między zdarzeniami mają charakter opóźnień. Spełnienie tego warunku jest potrzebne dla interpretacji minimalnej współrzędnej wektora stanu jako monotonicznej, niemalejącej wielkości (czasu) i ułatwia sformułowanie równania stanu (1). Istnieją jednak możliwości rozszerzenia modelu także na oddziaływania o charakterze przyspieszającym, poprzez nadanie współrzędnym $p(i; k)$ sensu nieobserwowanych zmiennych, które wiążą się z chwilami wystąpienia zdarzeń przez wykonanie dodatkowej, nieliniowej transformacji.

Literatura

1. Baccelli F., Cohen G., Olsder G.J., Quadrat, J.-P.: *Synchronization and Linearity: An Algebra for Discrete Event Systems*, Wiley, 1992
2. Gerstein, G.L. and Perkel, D.H.: Simultaneously recorded trains of action potentials: analysis and functional interpretation, *Science* 164, (1969) 828–830
3. Kulikowski J.L.: *Zarys teorii grafów: zastosowania w technice*. PWN, Warszawa 1986
4. Snyder, D.L., Miller, M.I.: *Random Point Processes in Time and Space*. Springer, 1991

Streszczenie

Zaproponowano model generacji ciągów zdarzeń oraz metodę identyfikacji parametrów tego modelu. Model ma postać grafu skierowanego, z dodatkowym wektorem stanu. Macierz incydencji grafu definiuje wzajemne interakcje między zdarzeniami różnych typów. Przebieg zdarzeń jest reprezentowany przez ścieżkę w tym grafie, w której kolejność węzłów wyznaczona jest przez sekwencję wektorów stanu. Metoda wyznaczania parametrów modelu polega na rozwiązaniu zadania programowania liniowego. Przedstawiono przykłady symulacji i jakościowe obserwacje dynamiki modelu.

Modeling and Simulation of Event Series by Timed Graphs

Summary

A model for generation of multivariate series of events evolving in time, like e.g. neuronal action potentials, is proposed. The model consists of a directed graph with additional state vector. Event sequences correspond to paths in the graph, with node sequence determined by the temporal evolution of the state vector. Interactions between events are modeled as weights of the edges in the graph. It is showed, that the parameters of the model can be determined by linear programming. Simulations suggest, that the model, albeit deterministic, generates exponential type inter-event intervals similar to stochastic systems.