

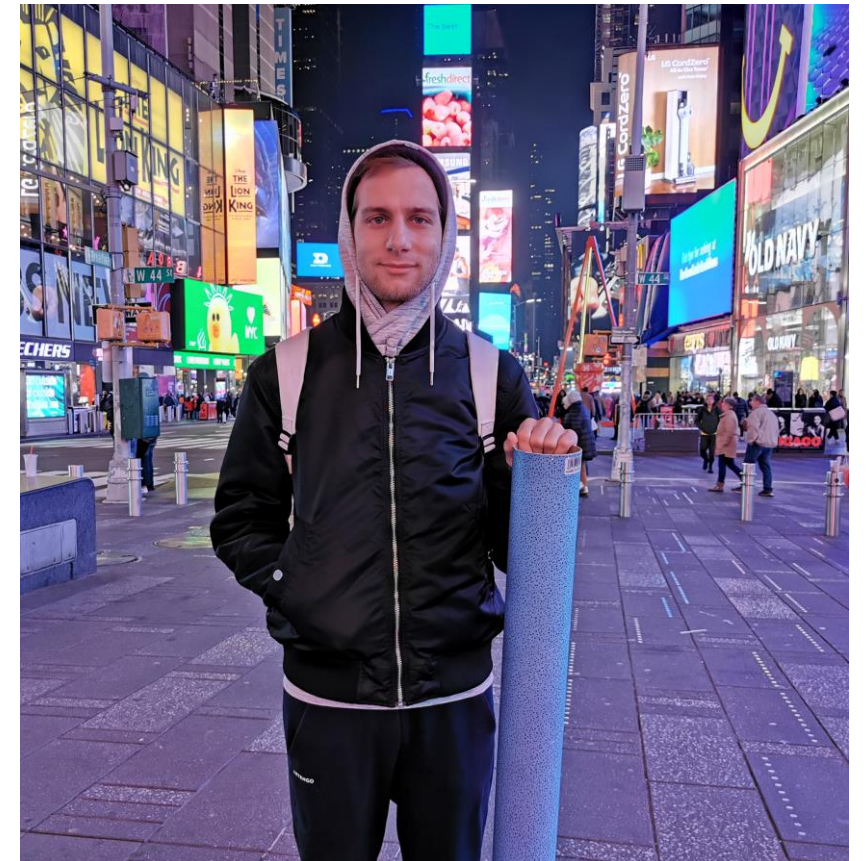
UNYI DÁNIEL

GEOMETRIAI MÉLYTANULÁS:

MIT ÁRUL EL RÓLUNK
AZ AGYFELSZÍN GEOMETRIÁJA?

BEMUTATKOZÁS

- **BME-VIK Informatikai Doktori Iskola**
- **Távközlési és Médiainformatikai Tanszék**
- **Témavezetőm:** Dr. Gyires-Tóth Bálint
- **Kutatási témám:** gráf neurális hálók és alkalmazásai
 - 1) metatanulás (ensemble, pruning, one-pass pretraining)
 - 2) agyi MRI felvételek vizsgálata (felületek rekonstrukciója, felületek osztályozása, pretraining, explainability)
- **OTDK II. helyezés**
- **Open source fejlesztés:** PyTorch Geometric (PyG), The Computational Geometry Algorithms Library (CGAL)
- **Oktatás:** Deep Learning, Deep Learning a gyakorlatban, témavezetés



GRÁF NEURÁLIS HÁLÓK

Hálózatok mindenütt



Image credit: [Medium](#)

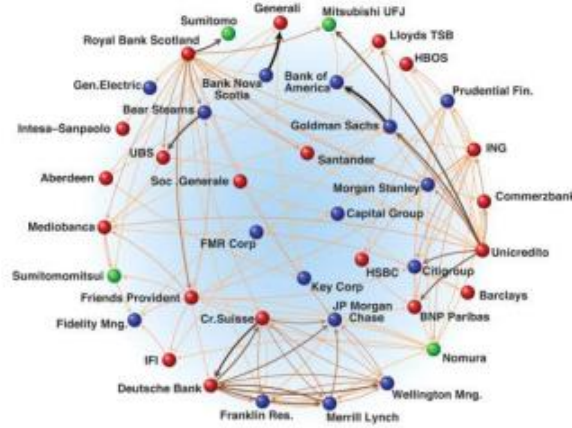


Image credit: [Science](#)



Image credit: [Lumen Learning](#)

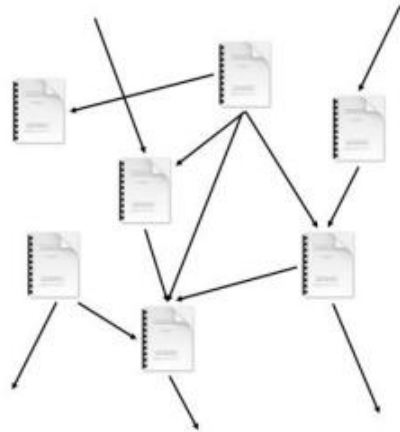


Image credit: [Missoula Current News](#)

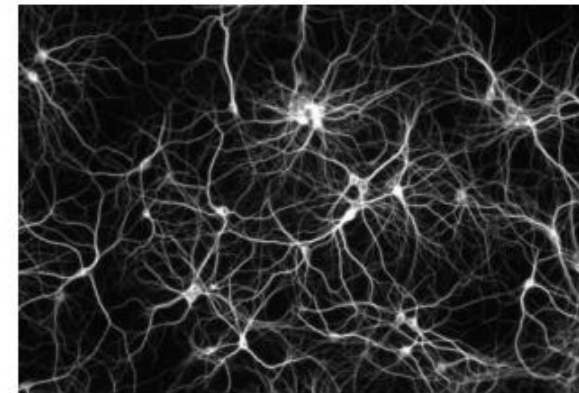


Image credit: [The Conversation](#)

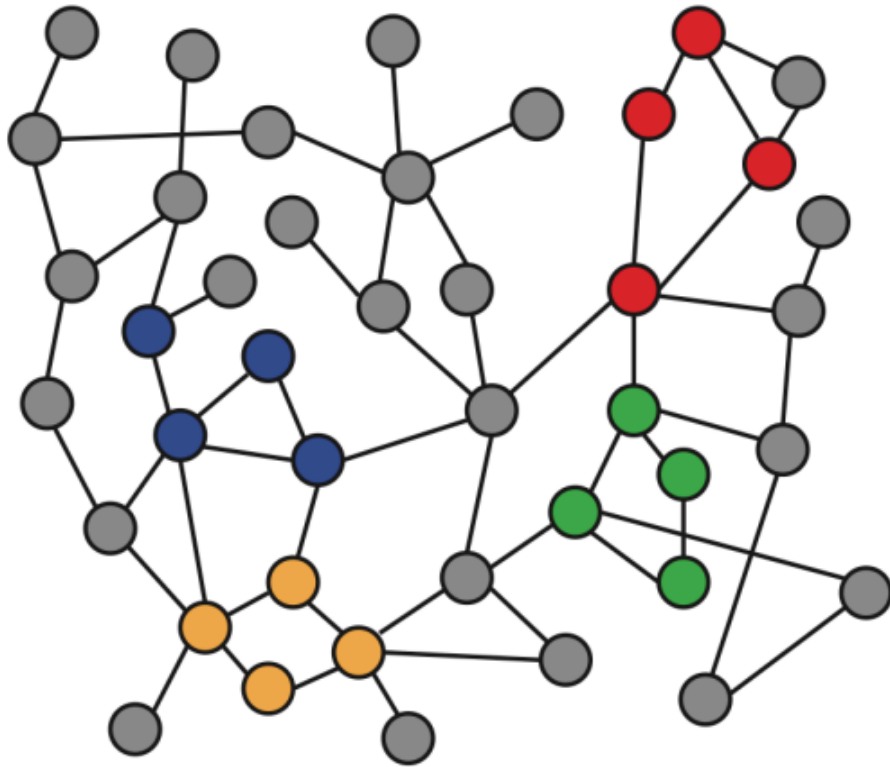
Hálózatstudomány

hálózatstudomány: fizikai, biológiai és társadalmi jelenségek hálózati reprezentációjának tanulmányozása, melyek ezen jelenségek prediktív modelljeihez vezetnek
(US National Research Council)

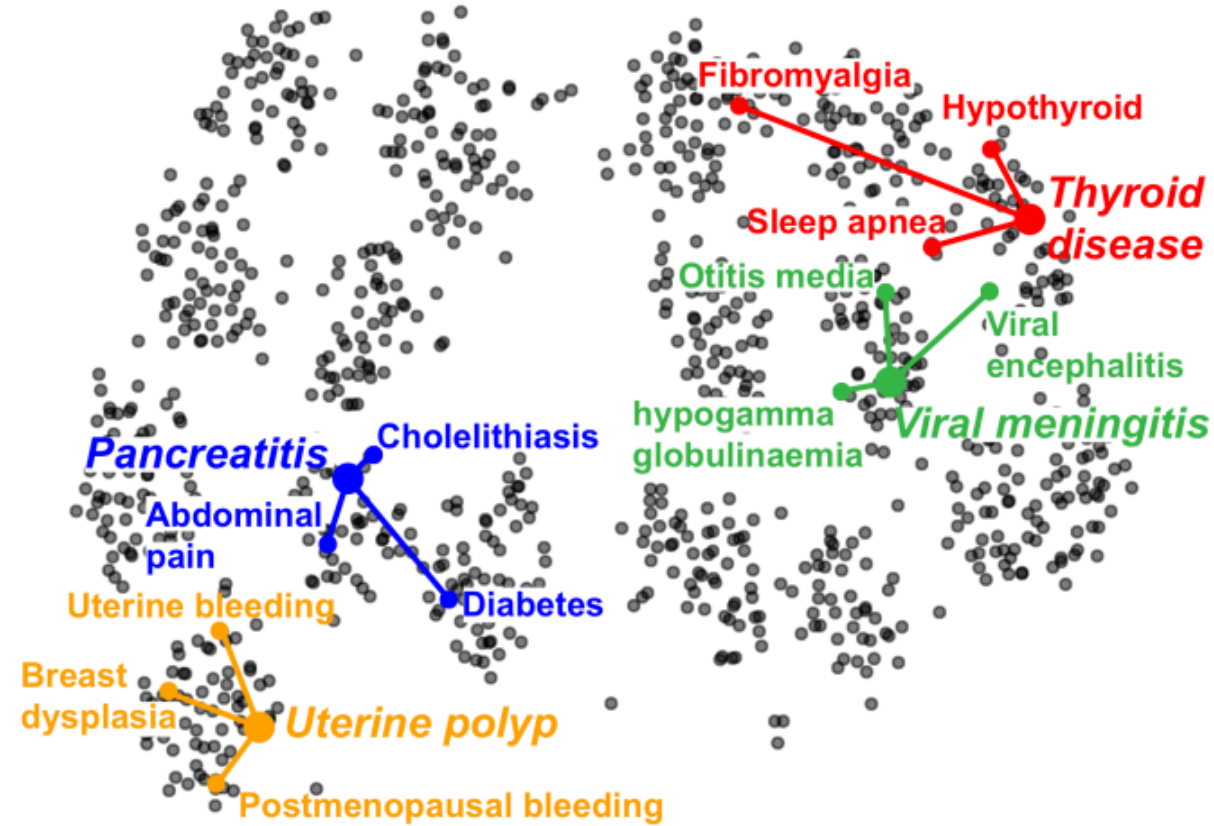
prediktív modell: gépi tanulás, mélytanulás módszerei

feladatok: csúcs szintű, él szintű, algráf szintű, gráf szintű predikció

Példa: csúcsok beágyazása



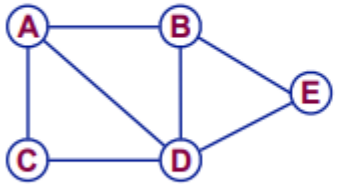
Input



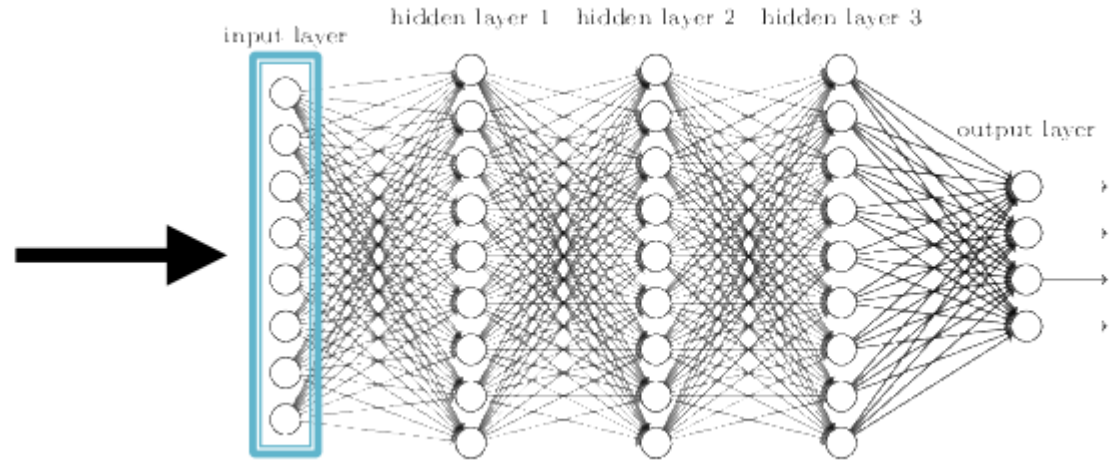
Output

Forrás: <http://snap.stanford.edu/deepnetbio-ismb/>

A naív módszer



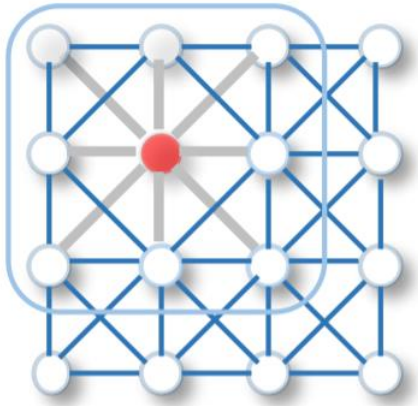
	A	B	C	D	E	Feat	
A	0	1	1	1	0	1	0
B	1	0	0	1	1	0	0
C	1	0	0	1	0	0	1
D	1	1	1	0	1	1	1
E	0	1	0	1	0	1	0



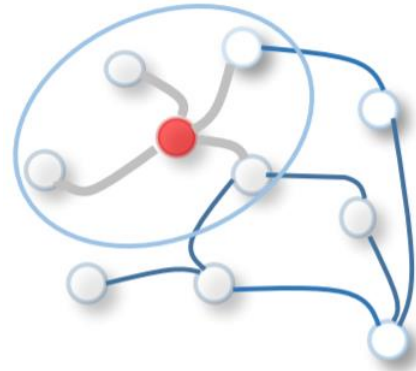
- $O(N)$ paraméter!
- az inputok nem lehetnek különböző méretű gráfok
- nem invariáns a csúcsok permutációjára

Forrás: <http://snap.stanford.edu/deepnetbio-ismb/>

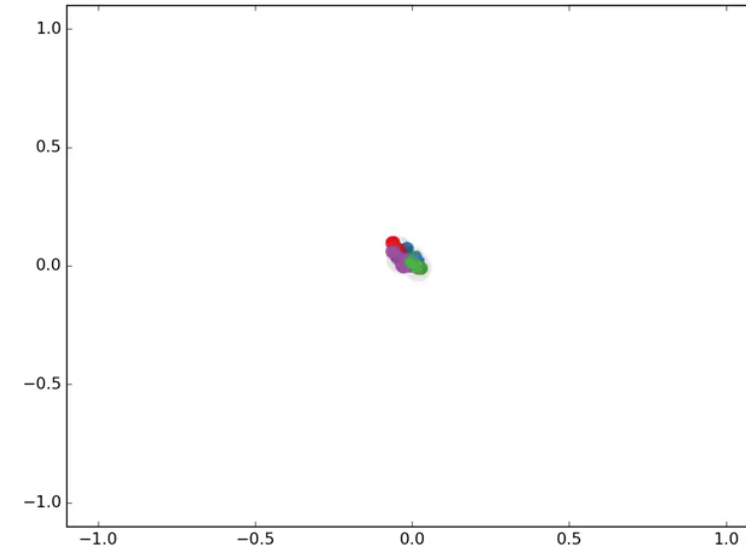
Gráf neurális hálók, üzenetovábbítás



2D konvolúció



gráf konvolúció

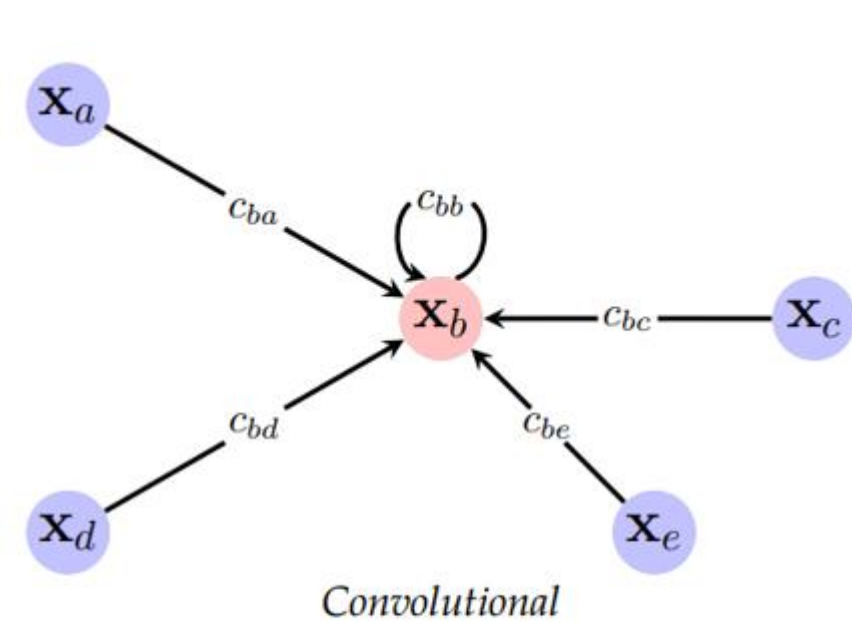


WU, Zonghan, et al. A comprehensive survey on graph neural networks.
IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2020, 32.1: 4-24.

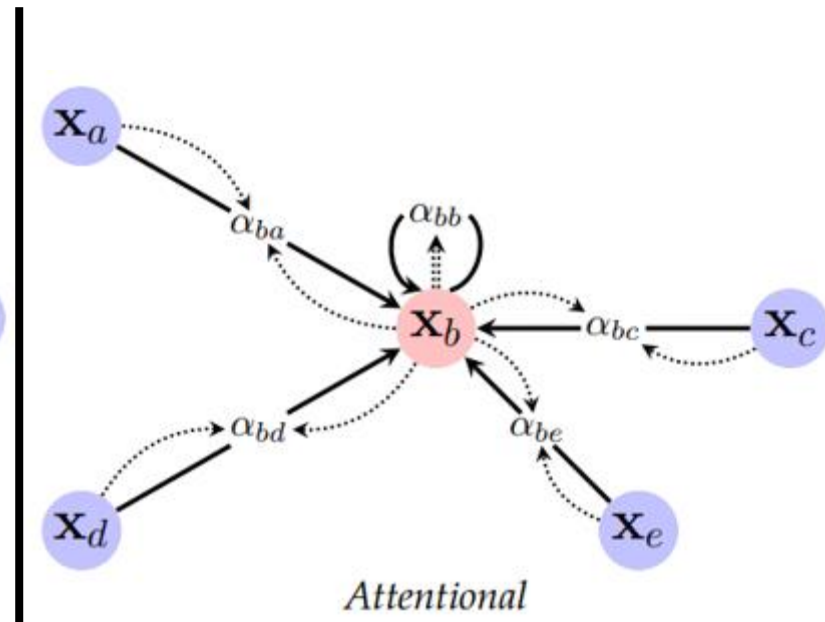
<https://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks/>

Gráf neurális hálók típusai

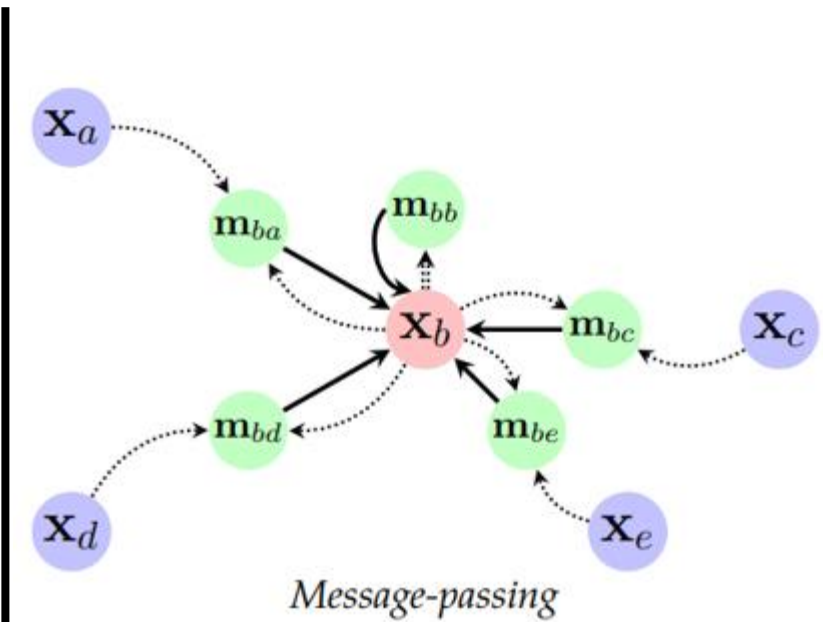
Bronstein, M. M., Bruna, J., Cohen, T., & Veličković, P. (2021). Geometric deep learning: Grids, groups, graphs, geodesics, and gauges. *arXiv preprint arXiv:2104.13478*.



$$\mathbf{h}_u = \phi \left(\mathbf{x}_u, \bigoplus_{v \in \mathcal{N}_u} c_{uv} \psi(\mathbf{x}_v) \right)$$

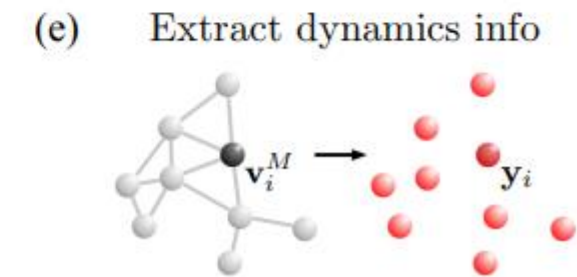
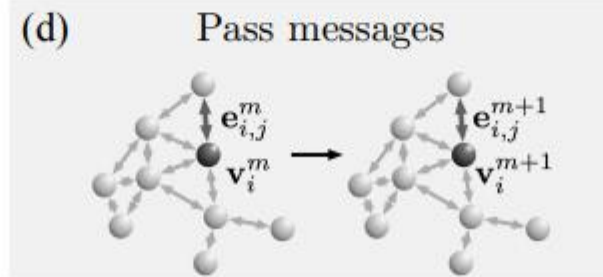
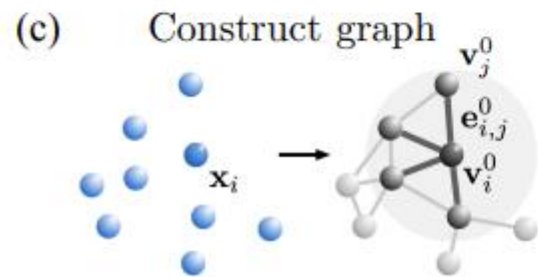
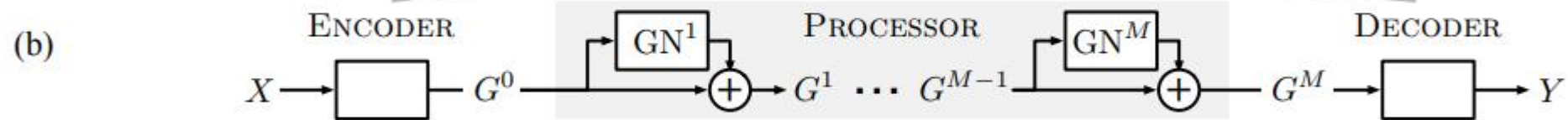
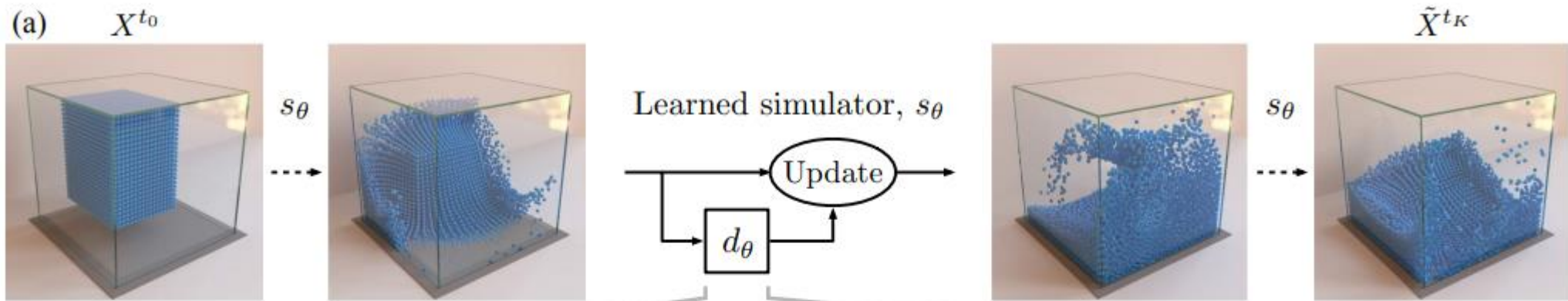


$$\mathbf{h}_u = \phi \left(\mathbf{x}_u, \bigoplus_{v \in \mathcal{N}_u} a(\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_v) \psi(\mathbf{x}_v) \right)$$



$$\mathbf{h}_u = \phi \left(\mathbf{x}_u, \bigoplus_{v \in \mathcal{N}_u} \psi(\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_v) \right)$$

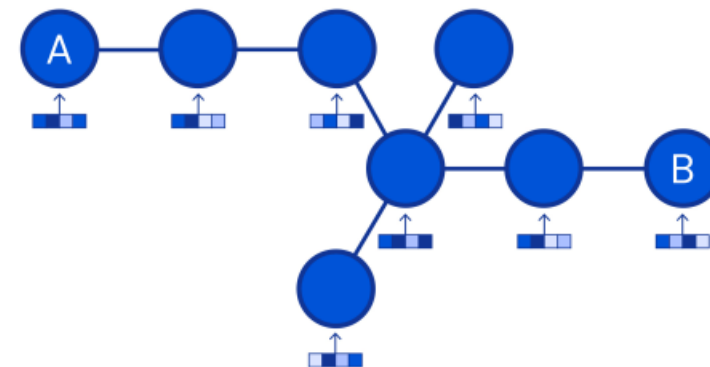
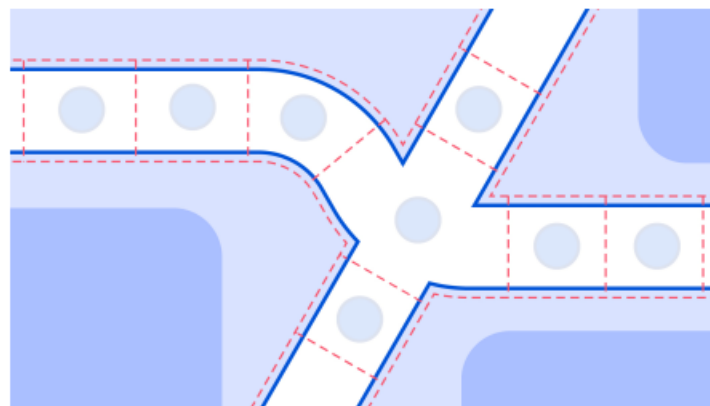
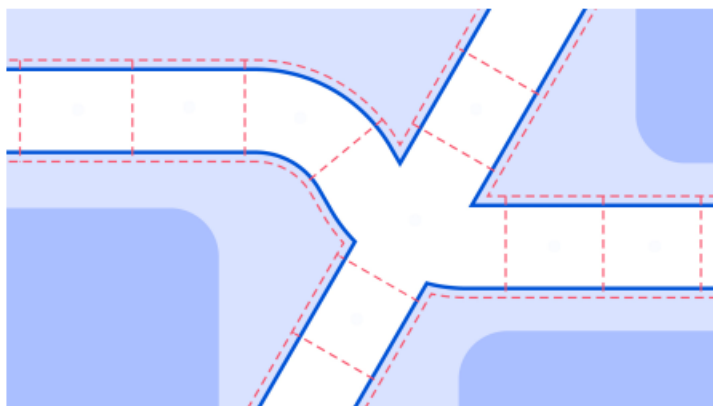
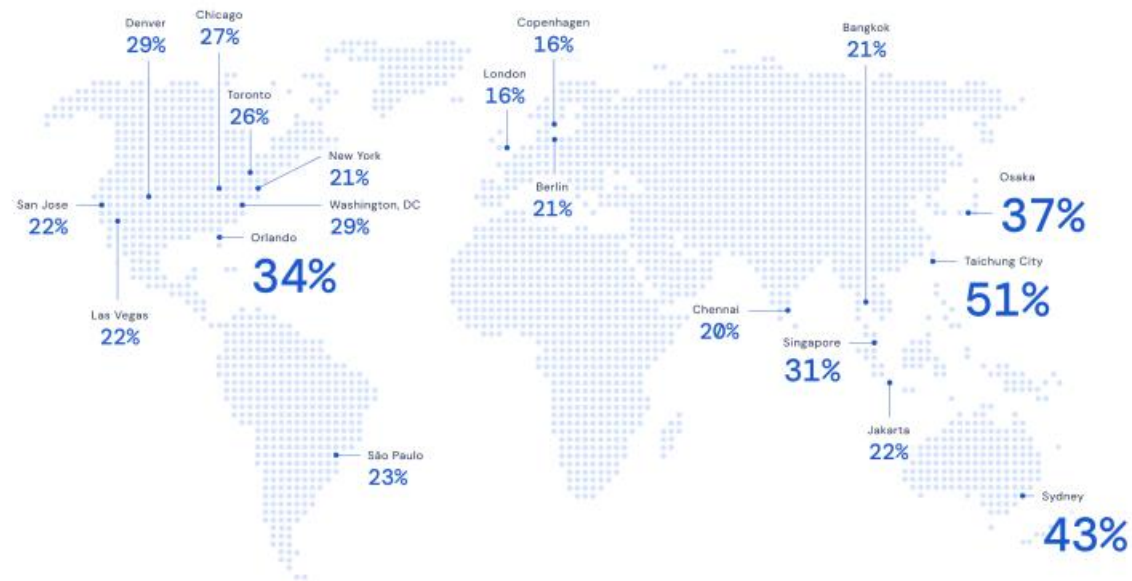
Érdekes alkalmazások: fizikai szimulációk



Sanchez-Gonzalez, A., Godwin, J., Pfaff, T., Ying, R., Leskovec, J., & Battaglia, P. (2020, November). Learning to simulate complex physics with graph networks. In *International conference on machine learning* (pp. 8459-8468). PMLR.

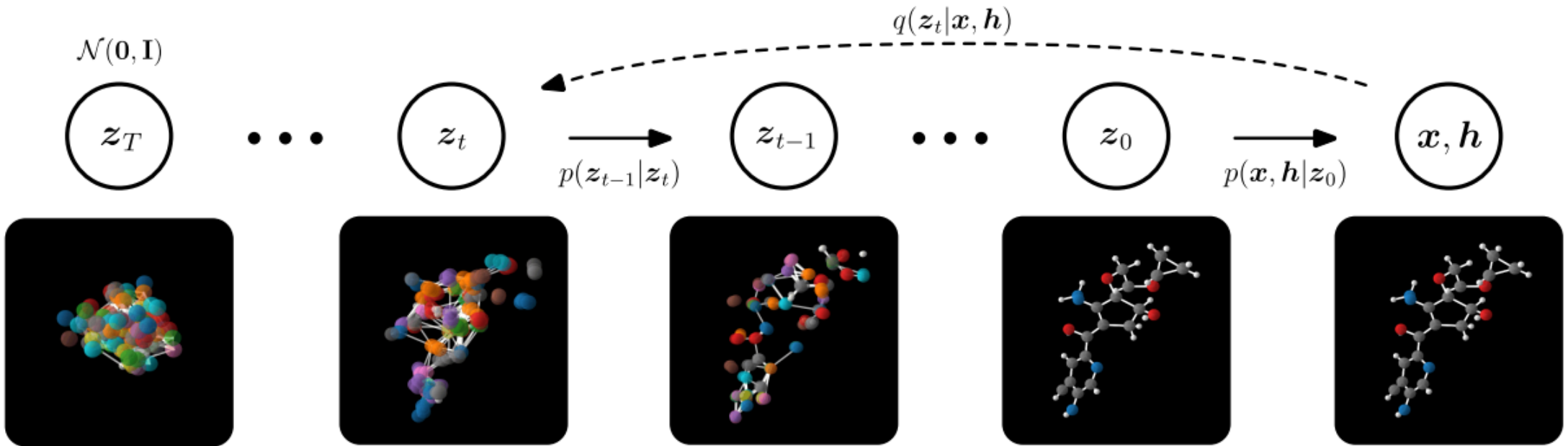
Érdekes alkalmazások:

ETA predikció



Derrow-Pinion, A., She, J., Wong, D., Lange, O., Hester, T., Perez, L., ... & Velickovic, P. (2021, October). Eta prediction with graph neural networks in google maps. In *Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management* (pp. 3767-3776).

Érdekes alkalmazások: molekula generálás



Hoogeboom, E., Satorras, V. G., Vignac, C., & Welling, M. (2022, June). Equivariant diffusion for molecule generation in 3d. In *International Conference on Machine Learning* (pp. 8867-8887). PMLR.

Explainability: a gráf melyik részei “fontosak”?

- 1) van egy vagy több biológiai hálózatunk
- 2) tanítunk rajta egy gráf neurális hálót (GNN)
- 3) megmérjük, milyen pontos a GNN a teszt adatokon
- 4) ha jónak ítéljük a pontosságot, akkor megnézzük, hogy a GNN a hálózat mely részei alapján hoz döntést:
explainability módszerek, pl. INVASE
- 5) új tudományos eredmények, publikáció 😊

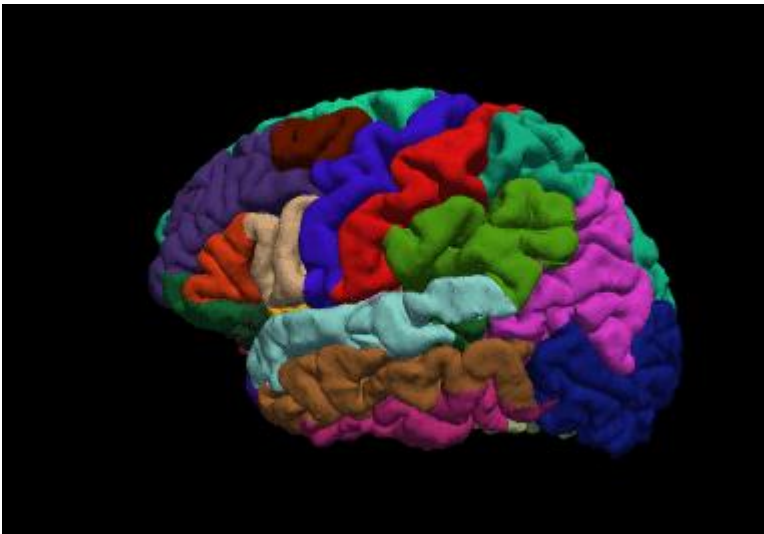
Yoon, J., Jordon, J., & van der Schaar, M. (2019, May). INVASE: Instance-wise variable selection using neural networks. In *International Conference on Learning Representations*.



HUMÁN KONNEKTOM PROJEKT

Human Connectome Project

“The Human Connectome Project (HCP) has tackled one of the great scientific challenges of the 21st century: mapping the human brain, aiming to connect its structure to function and behavior.”



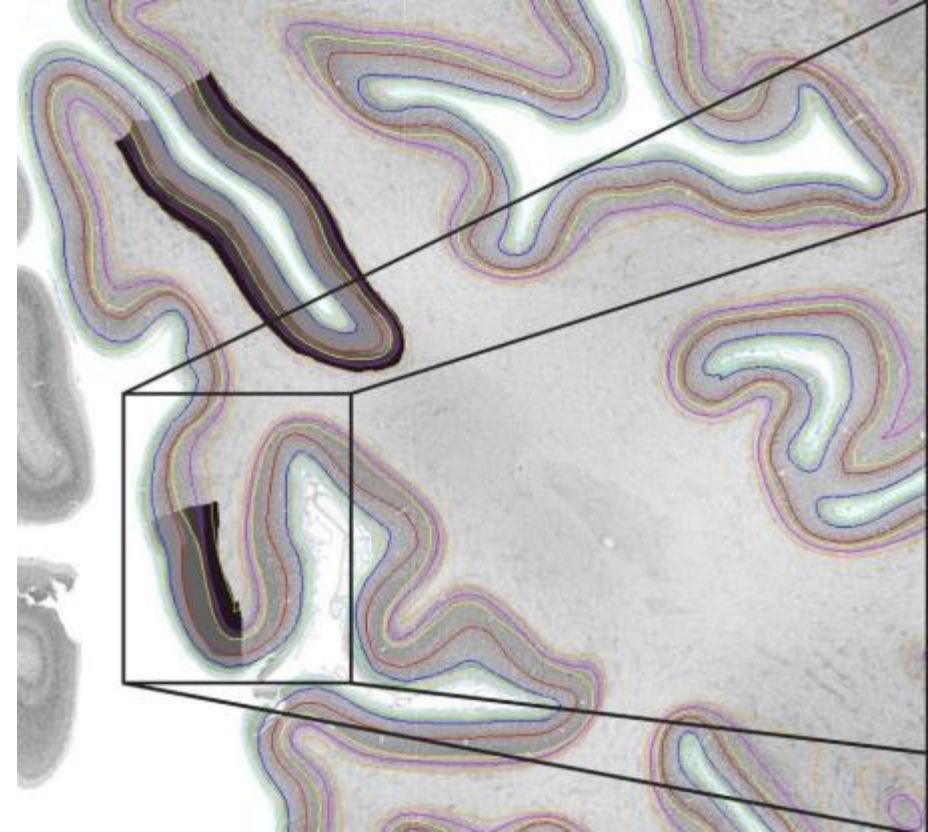
HCP Young Adult: 1200 alany, 22-35 éves kor között

developing HCP: 1500 alany, 20-44 hetes kor között,
a fogantatást követően

strukturális, funkcionális, és diffúziós MRI mérések,
további modalitások: MEG, viselkedés, genotípus...

Agykéreg

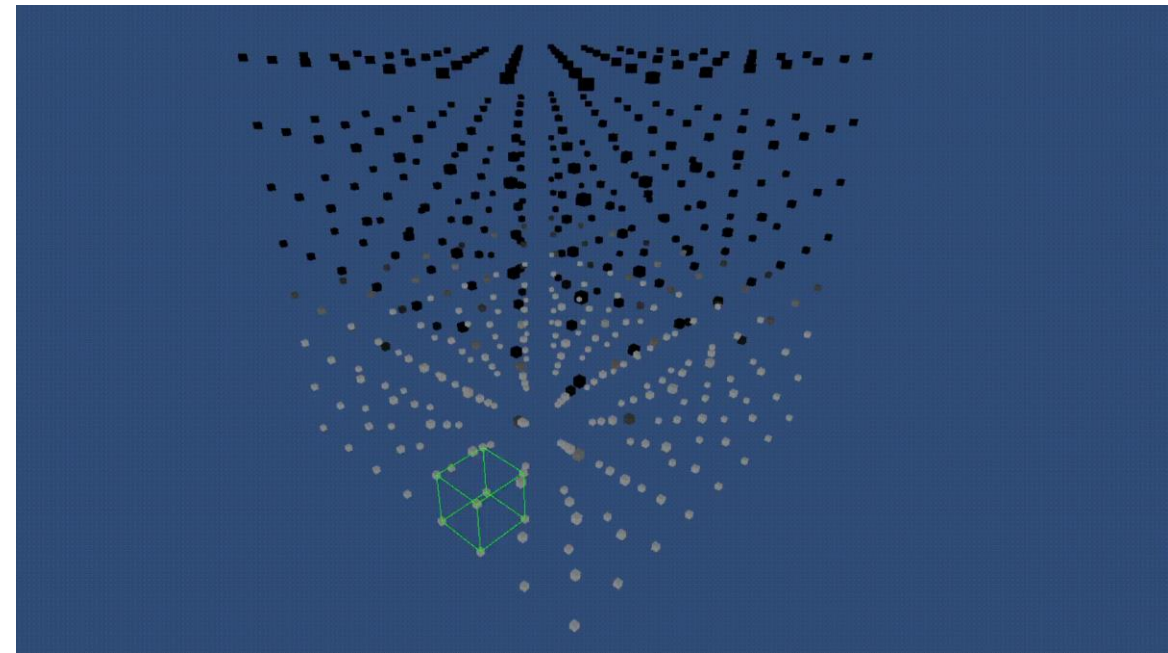
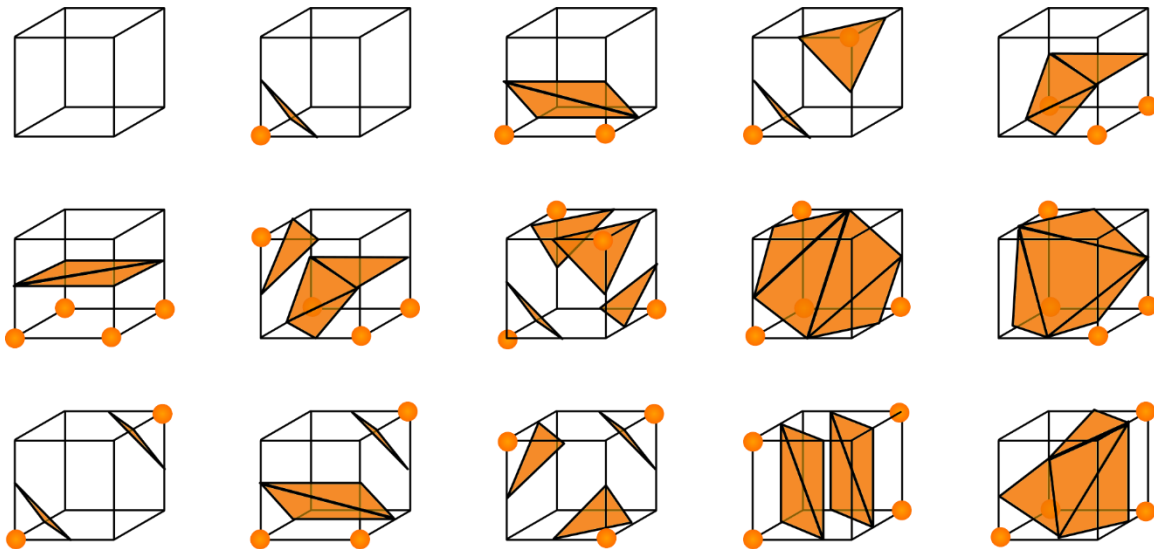
- a nagyagy külső rétege
- tekervények és barázdák alkotják
- 14-16 milliárd neuron
- tömege összefügg az intelligenciával:
emberben a teljes agy tömegének a fele
- struktúra/funkció térképek pl. Brodmann-területek
- érzékelés: látás, hallás, szomatoszenzoros
- mozgás: szomatomotoros
- alvás-ébrenlét, öntudat, beszéd-nyelv, gondolkodás,
tanulás, emlékezet, motiváció, viselkedés, érzelmek



Wagstyl, K., Larocque, S., Cucurull, G., Lepage, C., Cohen, J. P., Bludau, S., ... & Evans, A. C. (2020). Automated segmentation of cortical layers in BigBrain reveals divergent cortical and laminar thickness gradients in sensory and motor cortices. *PLOS BIOLOGY*, 18(4), e3000678.

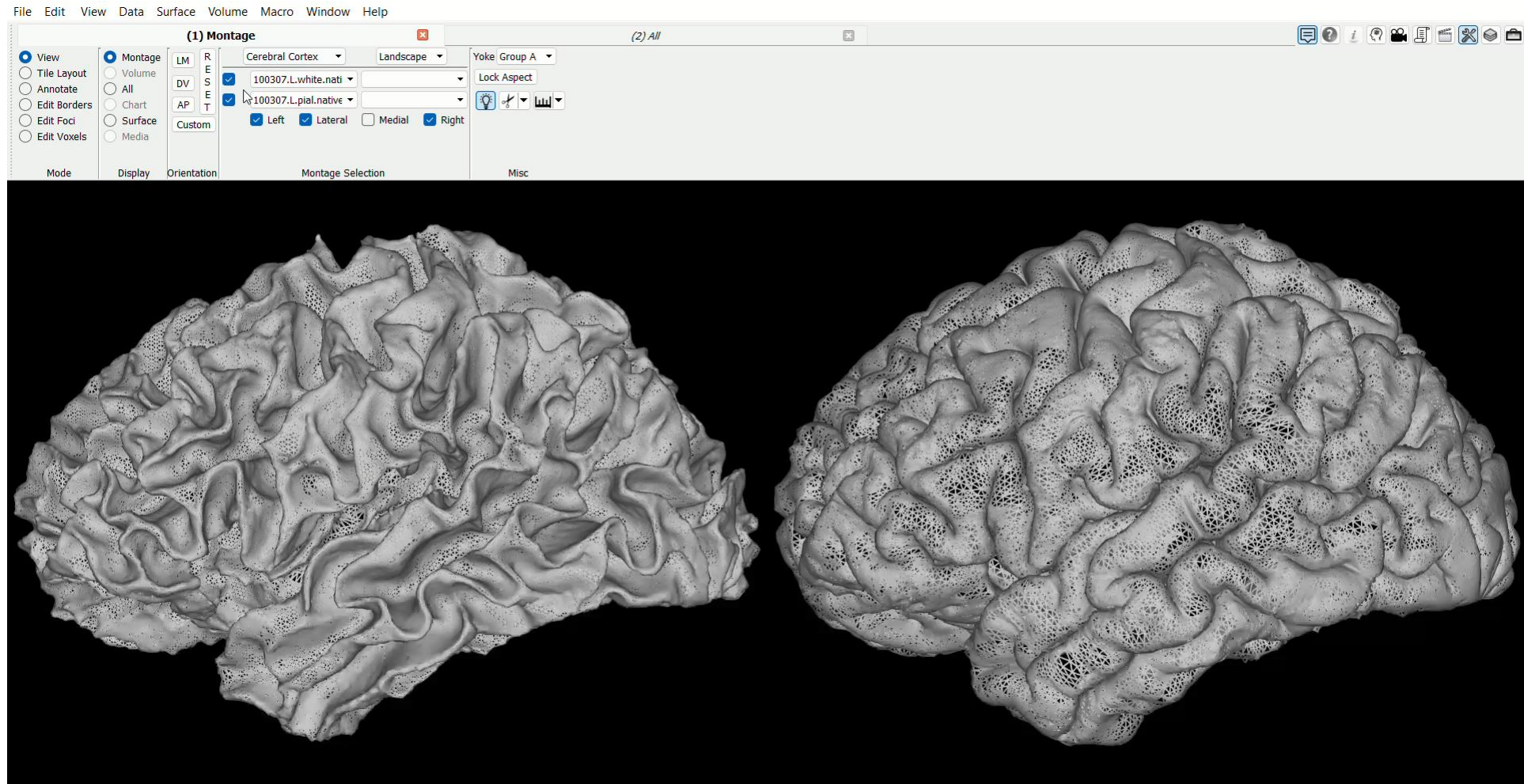
Agykéreg rekonstrukció (1)

Masírozó kockák: voxeltömb/skalármező \rightarrow háromszög mesh (geometria)



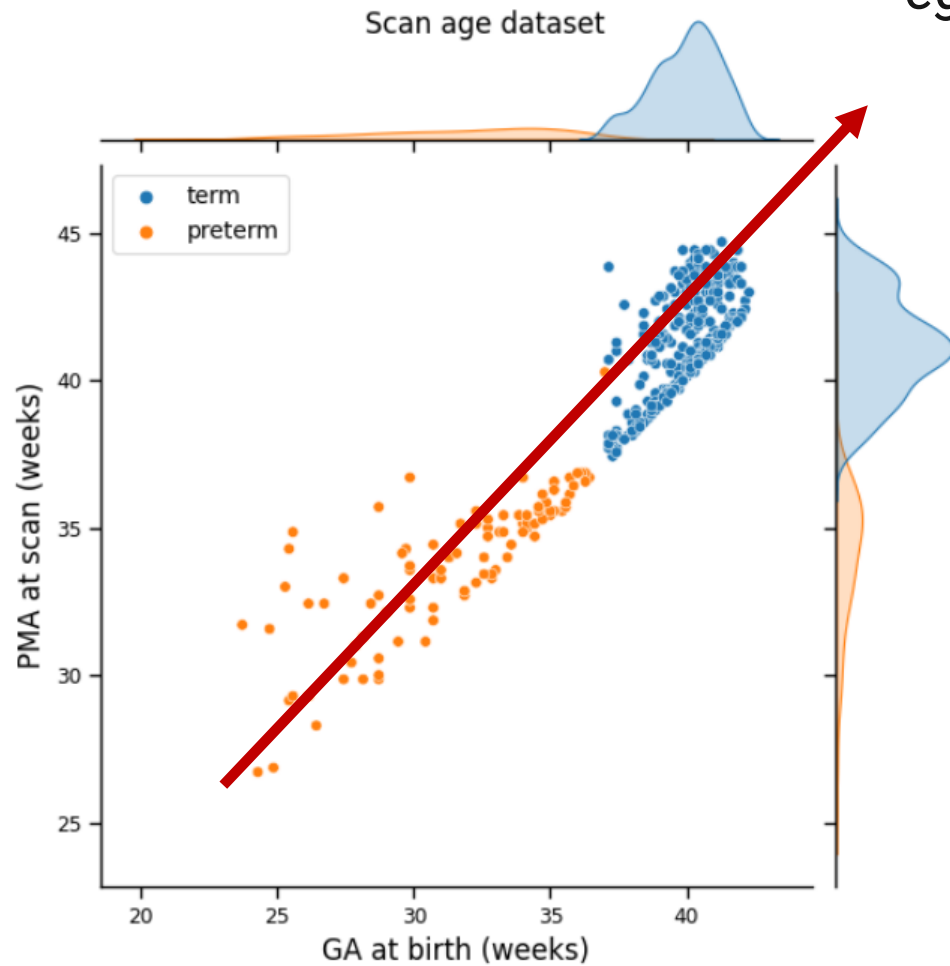
Lorensen, W. E., & Cline, H. E. (1987). Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm. *ACM siggraph computer graphics*, 21(4), 163-169.

Agykéreg rekonstrukció (2)

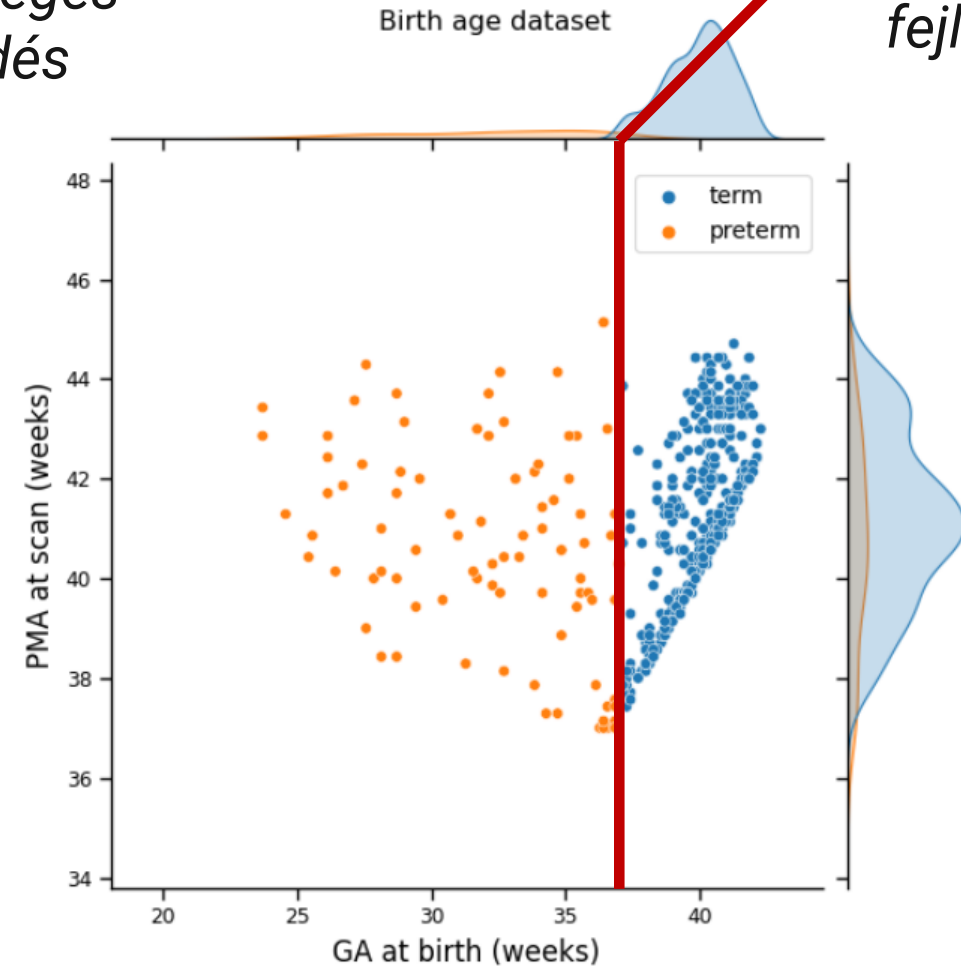


SAJÁT EREDMÉNYEK

Developing Human Connectome Project



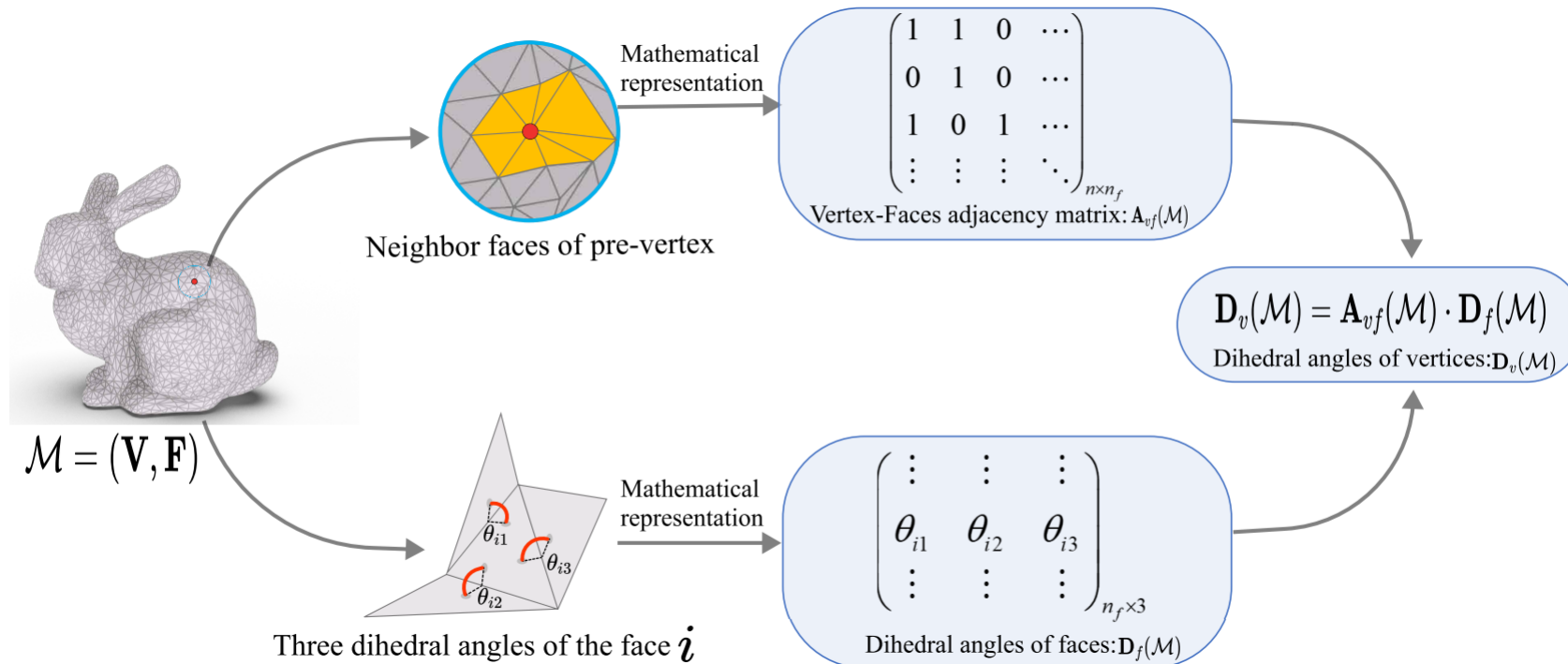
*egészséges
fejlődés*



*koraszülöttek
eltérő
fejlődése*

Shape descriptors

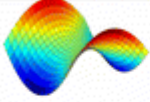
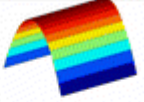
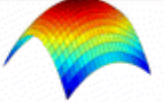
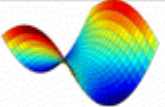

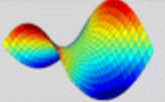

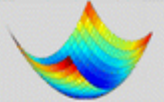
pozícióvektorok (dim=3), normálvektorok (dim=3), dihedrális szögek (dim=3)



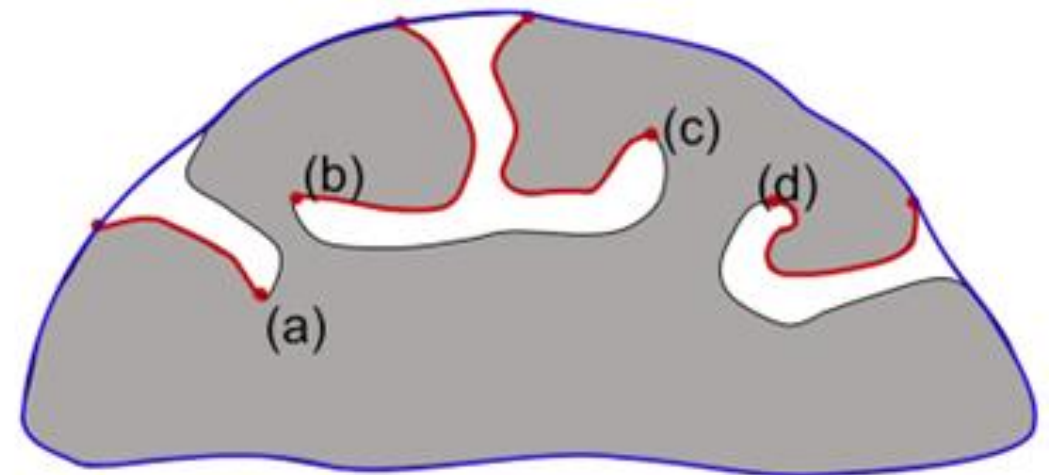
Dong, Q., Wang, Z., Li, M., Gao, J., Chen, S., Shu, Z., ... & Wang, W. (2023). Laplacian2mesh: Laplacian-based mesh understanding. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*.

Shape descriptors

- pozícióvektorok (dim=3)
- normálvektorok (dim=3)
- dihedrális szögek (dim=3)
- T1/T2 arány (dim=1)
- agykéreg vastagsága (dim=1)
- sulcus mélysége (dim=1)
- átlagos görbület (dim=1)
- Gauss görbület (dim=1)
- heat kernel signature (dim=9)

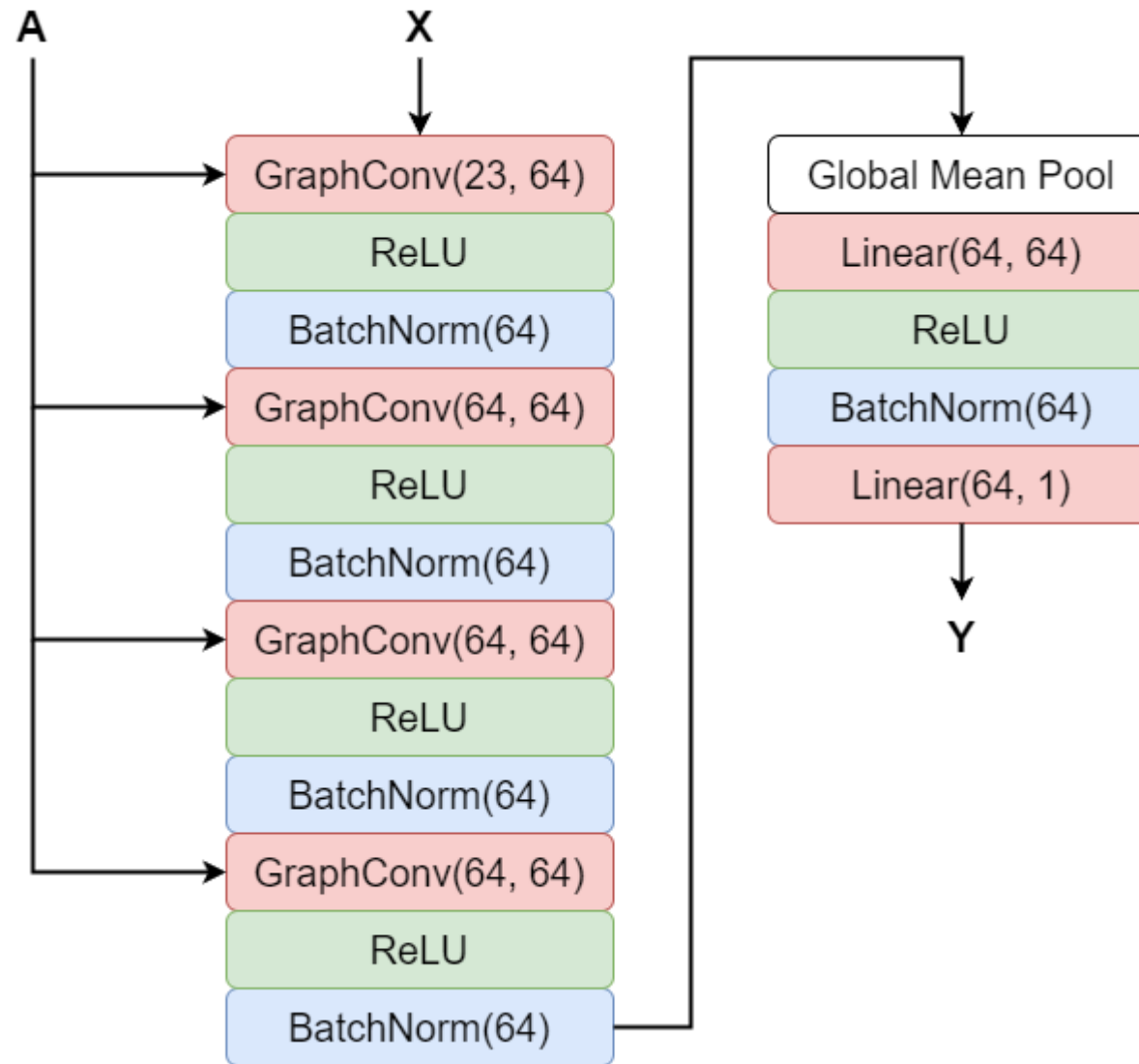
	$K < 0$	$K = 0$	$K > 0$
$H < 0$	<i>Saddle ridge</i> 	<i>Ridge</i> 	<i>Peak</i> 
$H = 0$	<i>Minimal surface</i> 	<i>Plane</i> 	<i>Not possible</i>
$H > 0$	<i>Saddle valley</i> 	<i>Valley</i> 	<i>Pit</i> 

Iouchoux, C., Kudelski, D., Gholipour, A., Warfield, S. K., Viseur, S., Bouyssi-Kobar, M., ... & Limperopoulos, C. (2012). Quantitative in vivo MRI measurement of cortical development in the fetus. *Brain Structure and Function*, 217, 127-139.

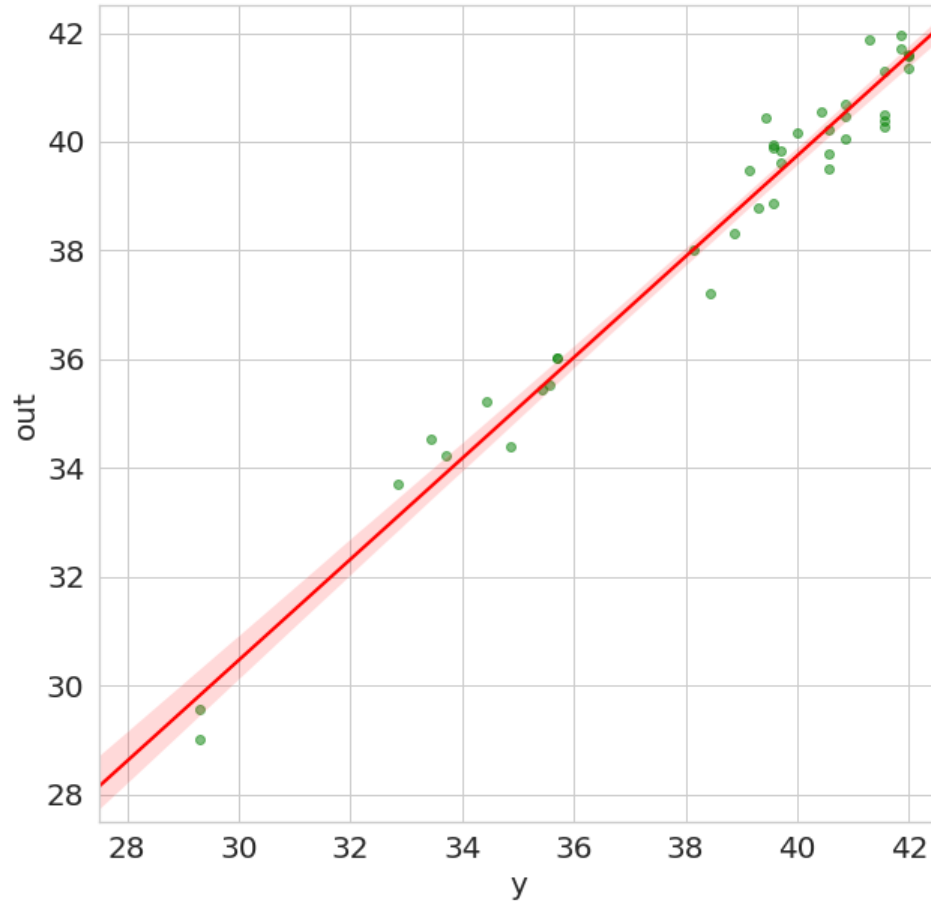


Yun, H. J., Im, K., Yang, J. J., Yoon, U., & Lee, J. M. (2013). Automated sulcal depth measurement on cortical surface reflecting geometrical properties of sulci. *PLoS one*, 8(2), e55977.

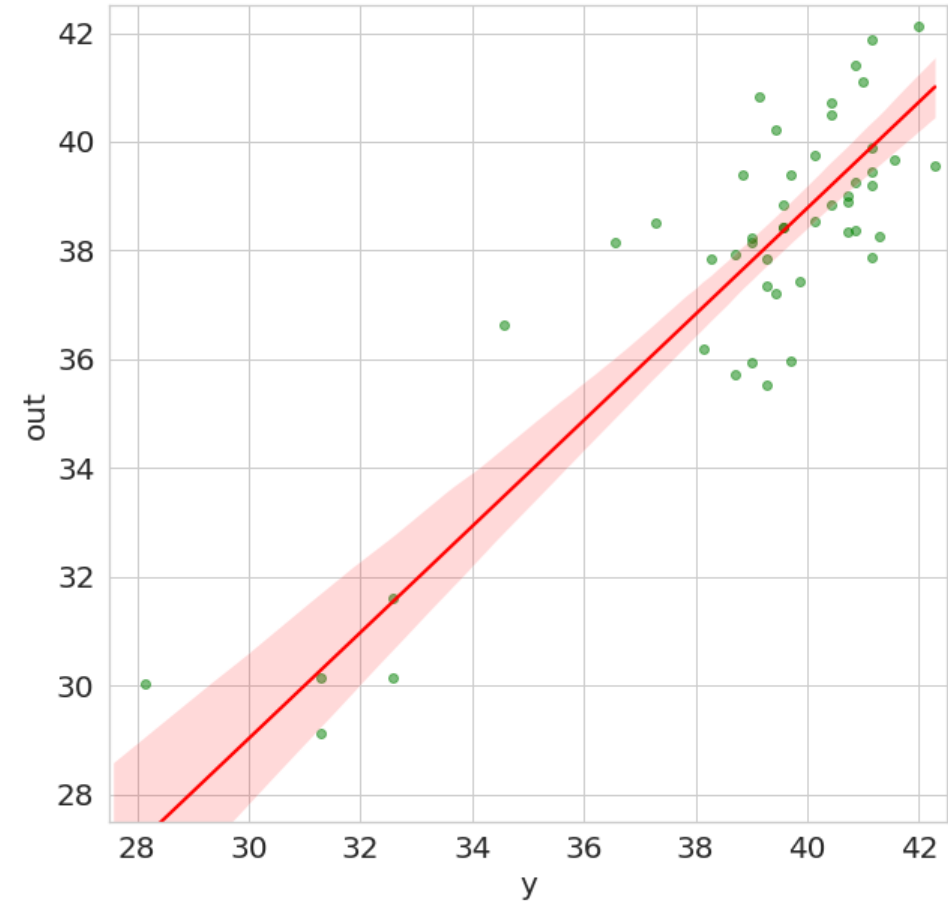
Modell: GNN



Eredmények: gráf neurális háló

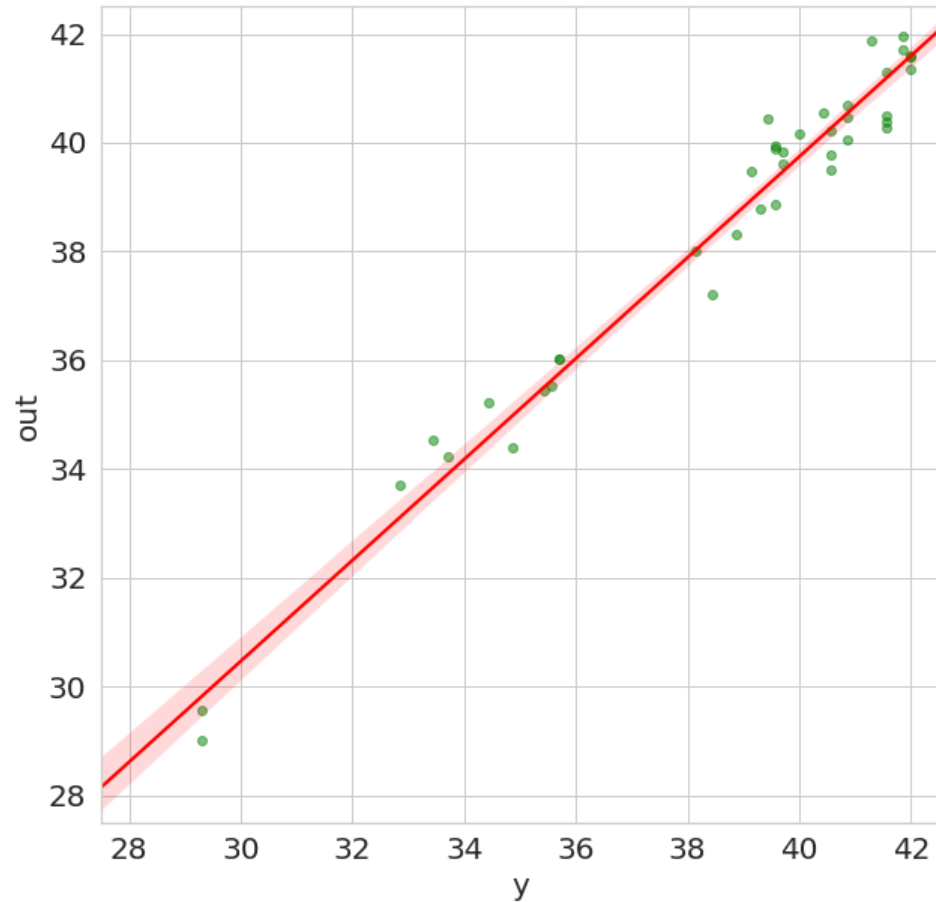


scan age regression MAE = 0.547 weeks

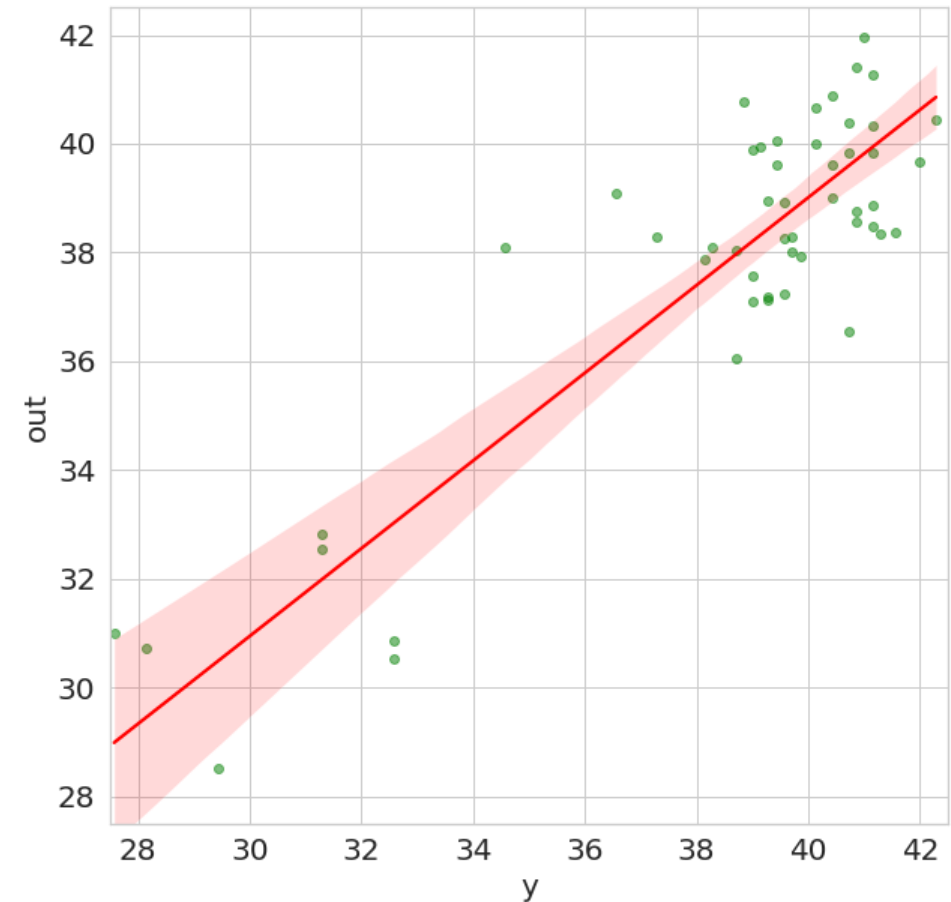


birth age regression MAE = 1.668 weeks

Eredmények: gráf neurális háló + confound

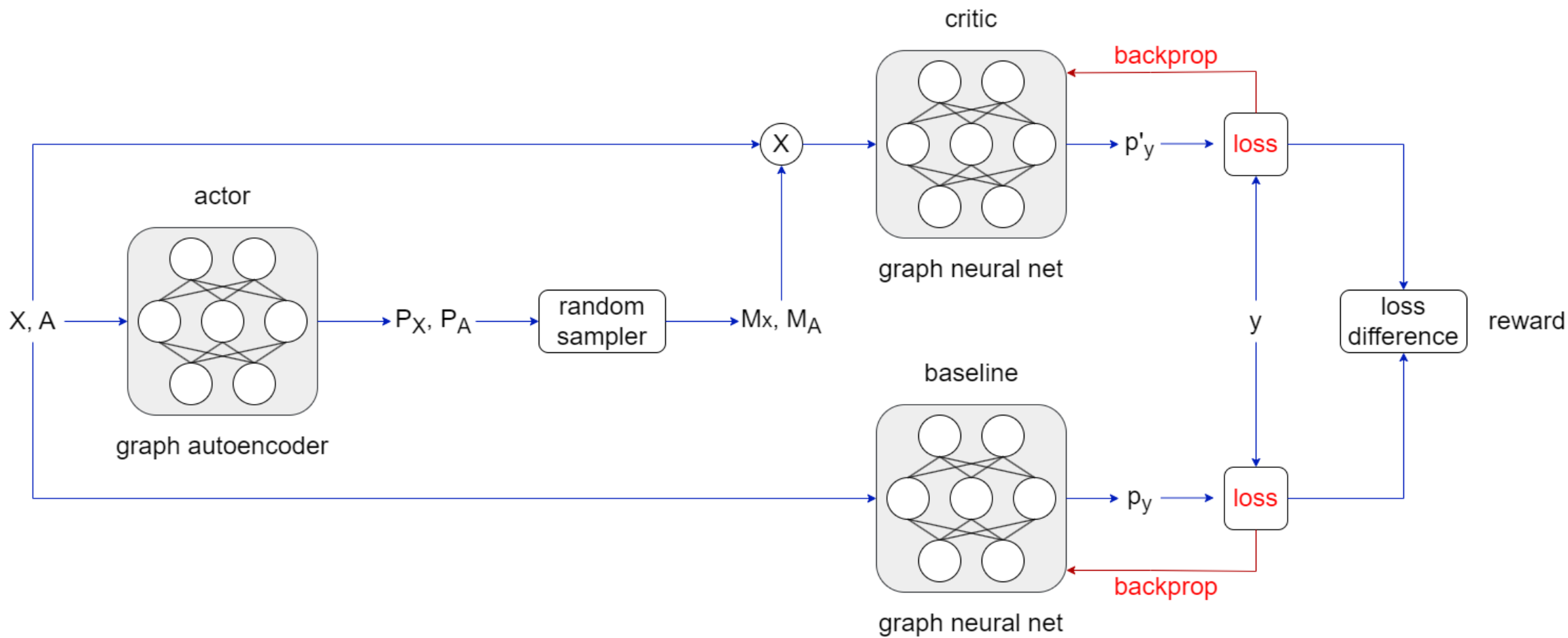


scan age regression MAE = 0.547 weeks



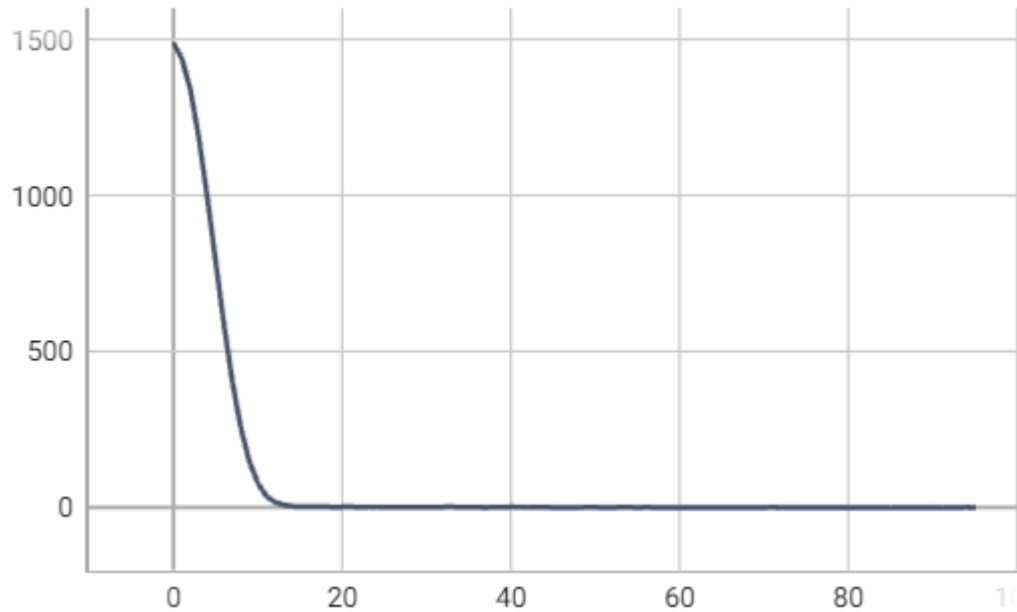
birth age regression MAE = 1.586 weeks

Modell: INVASE

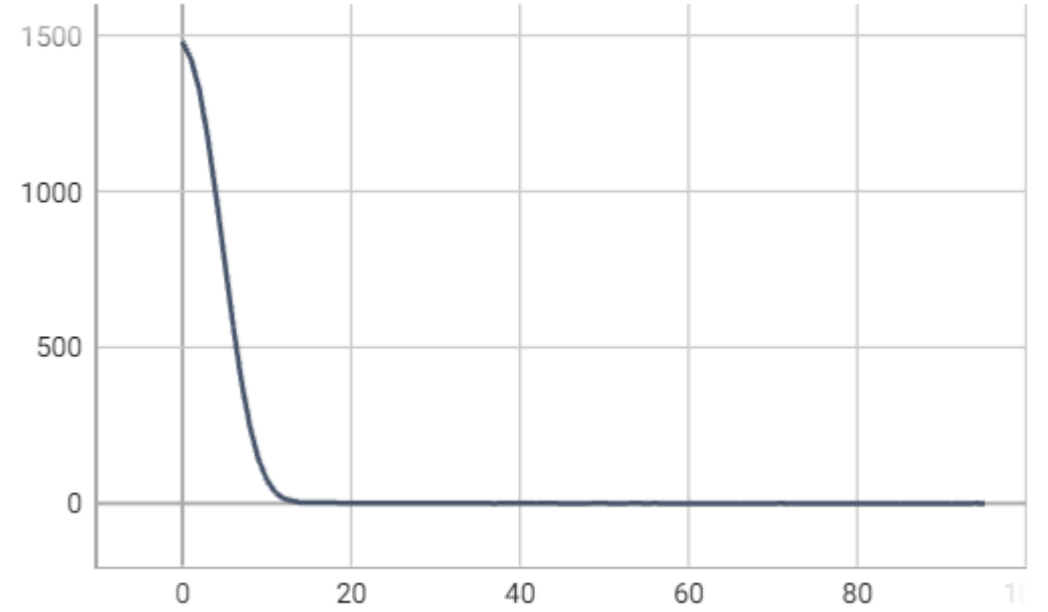


Eredmények: INVASE baseline/critic tanulási görbék

MSE/baseline_train

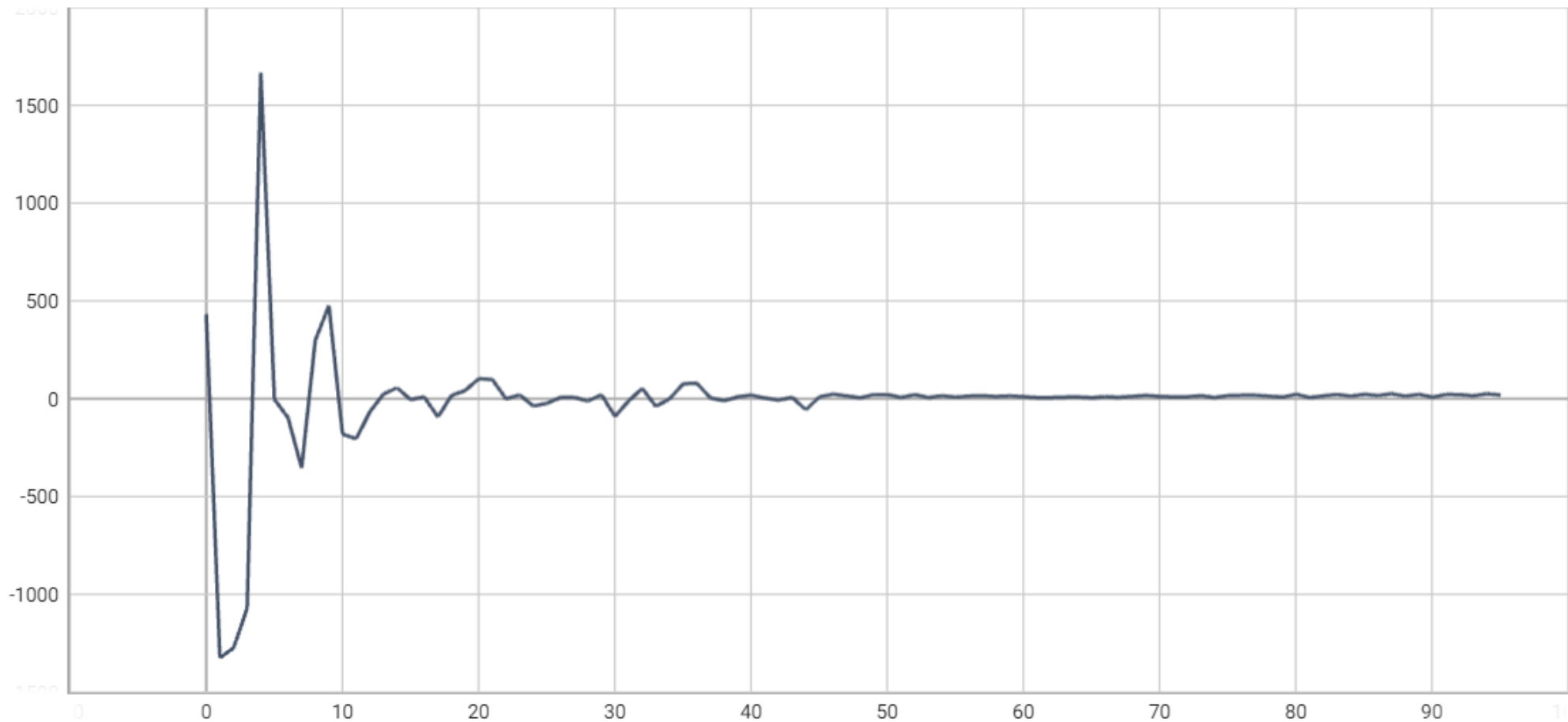


MSE/critic_train

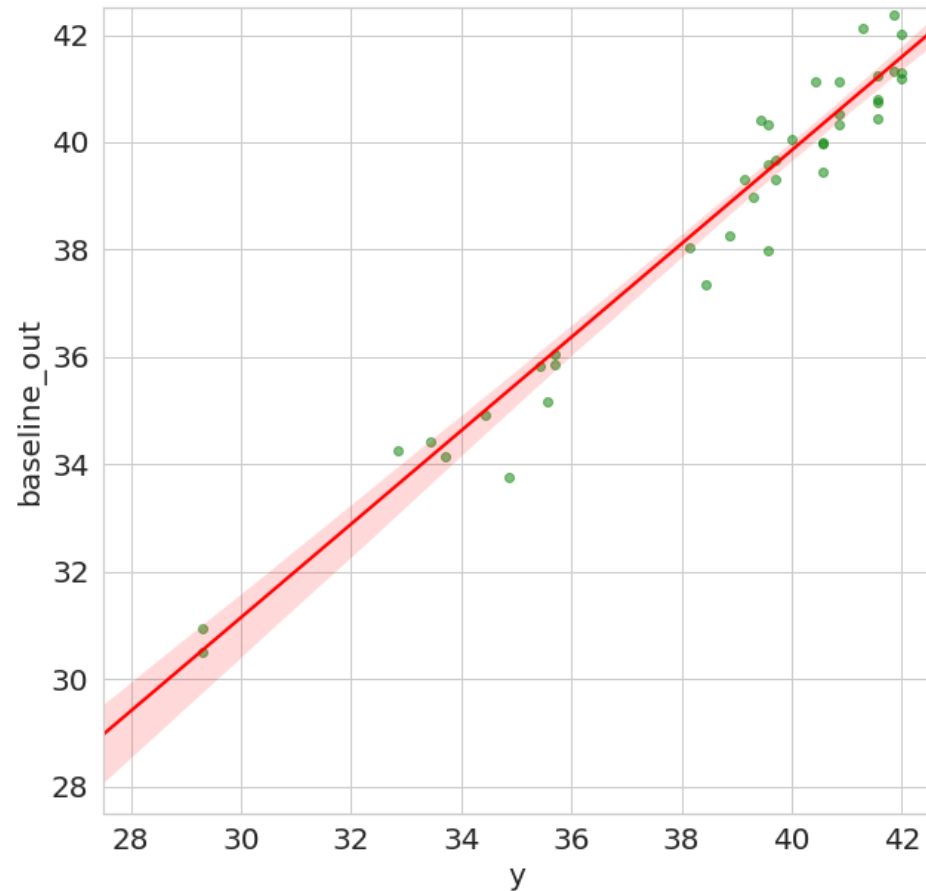


Eredmények: INVASE actor tanulási görbe

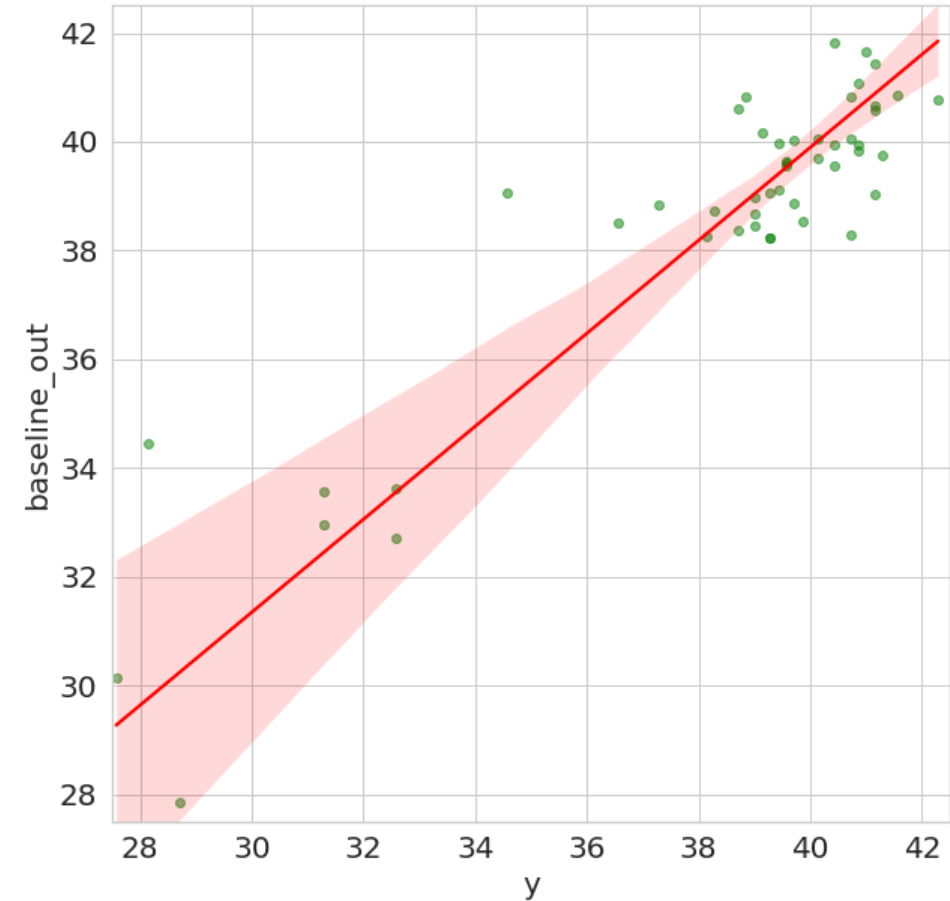
MSE/actor_train



Eredmények: INVASE-baseline

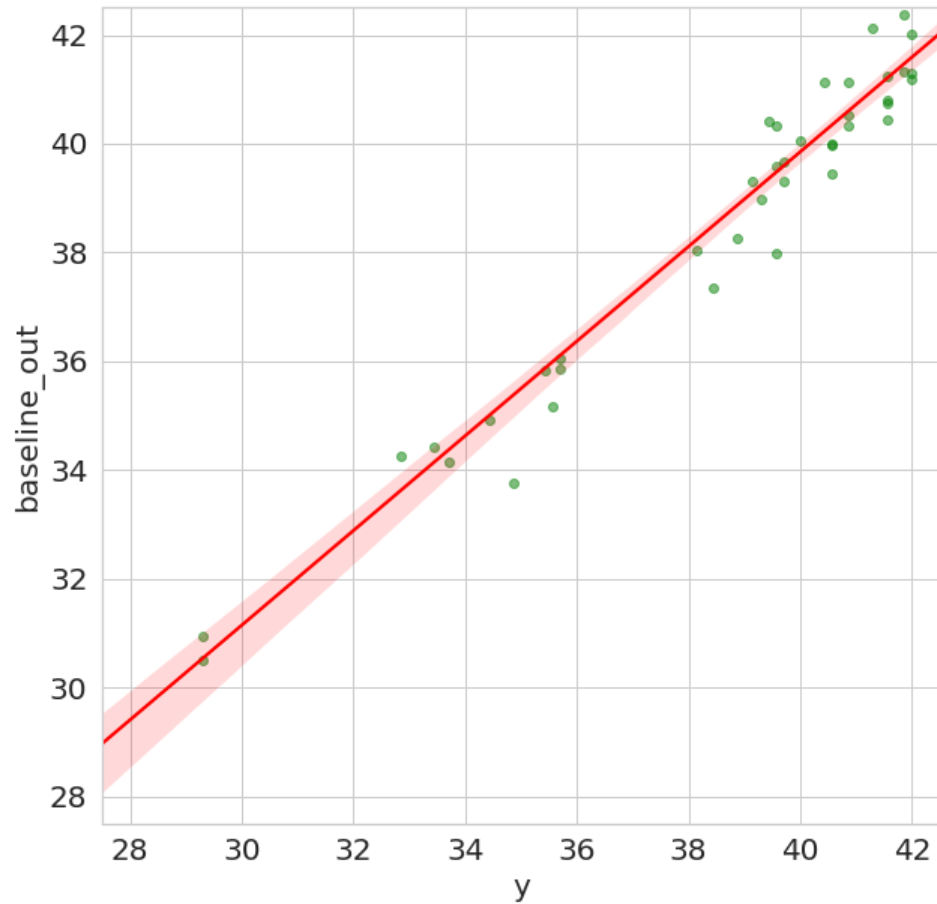


scan age regression MAE = 0.484 weeks

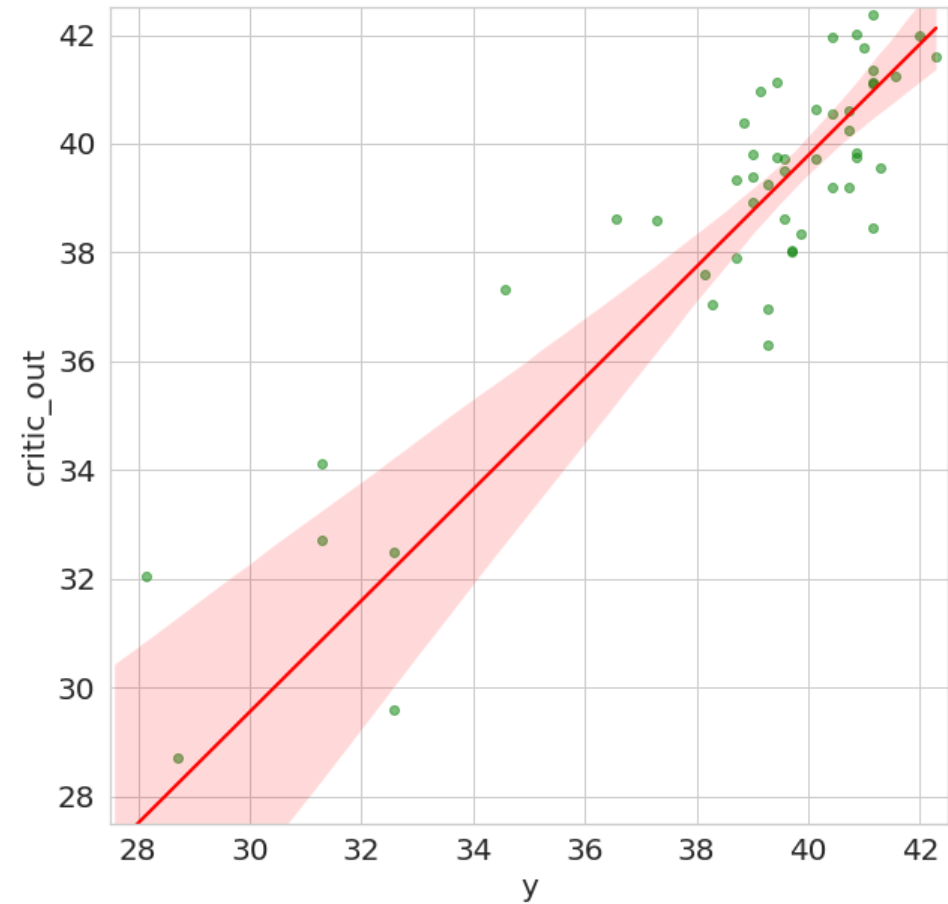


birth age regression MAE = 0.561 weeks

Eredmények: INVASE-critic

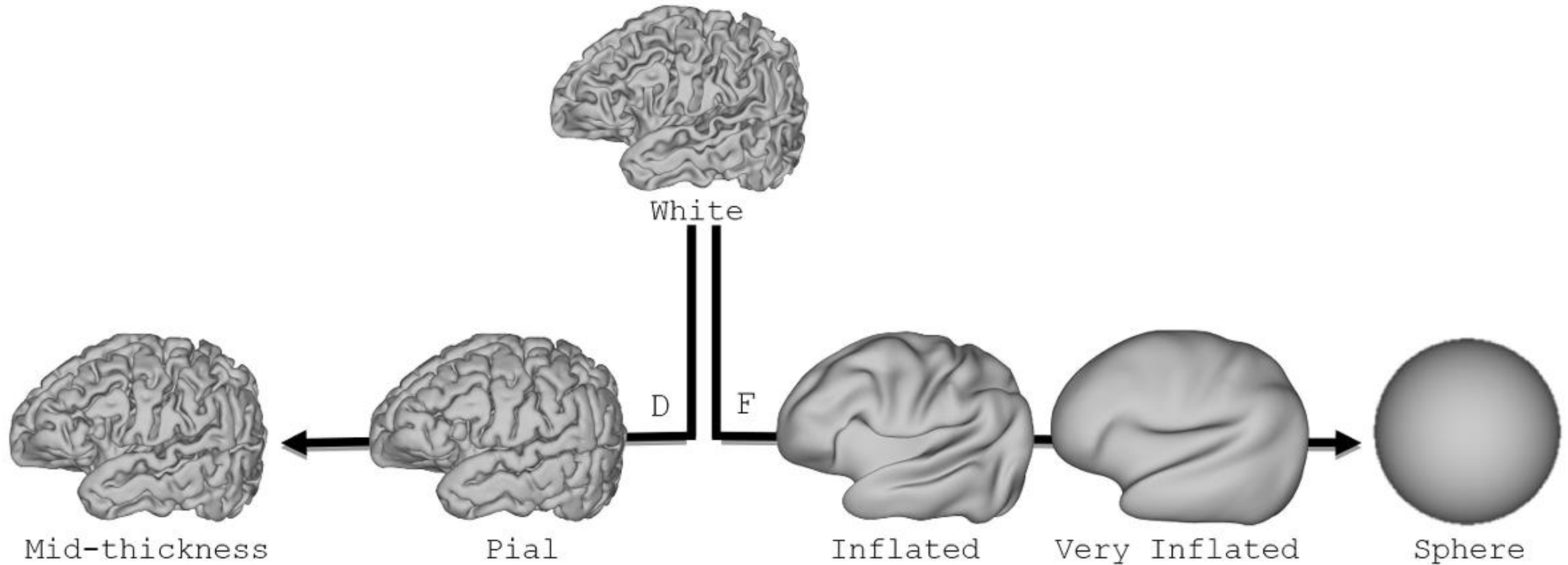


scan age regression MAE = 0.545 ± 0.047 weeks



birth age regression MAE = 0.746 ± 0.054 weeks

dHCP csoport eredményei



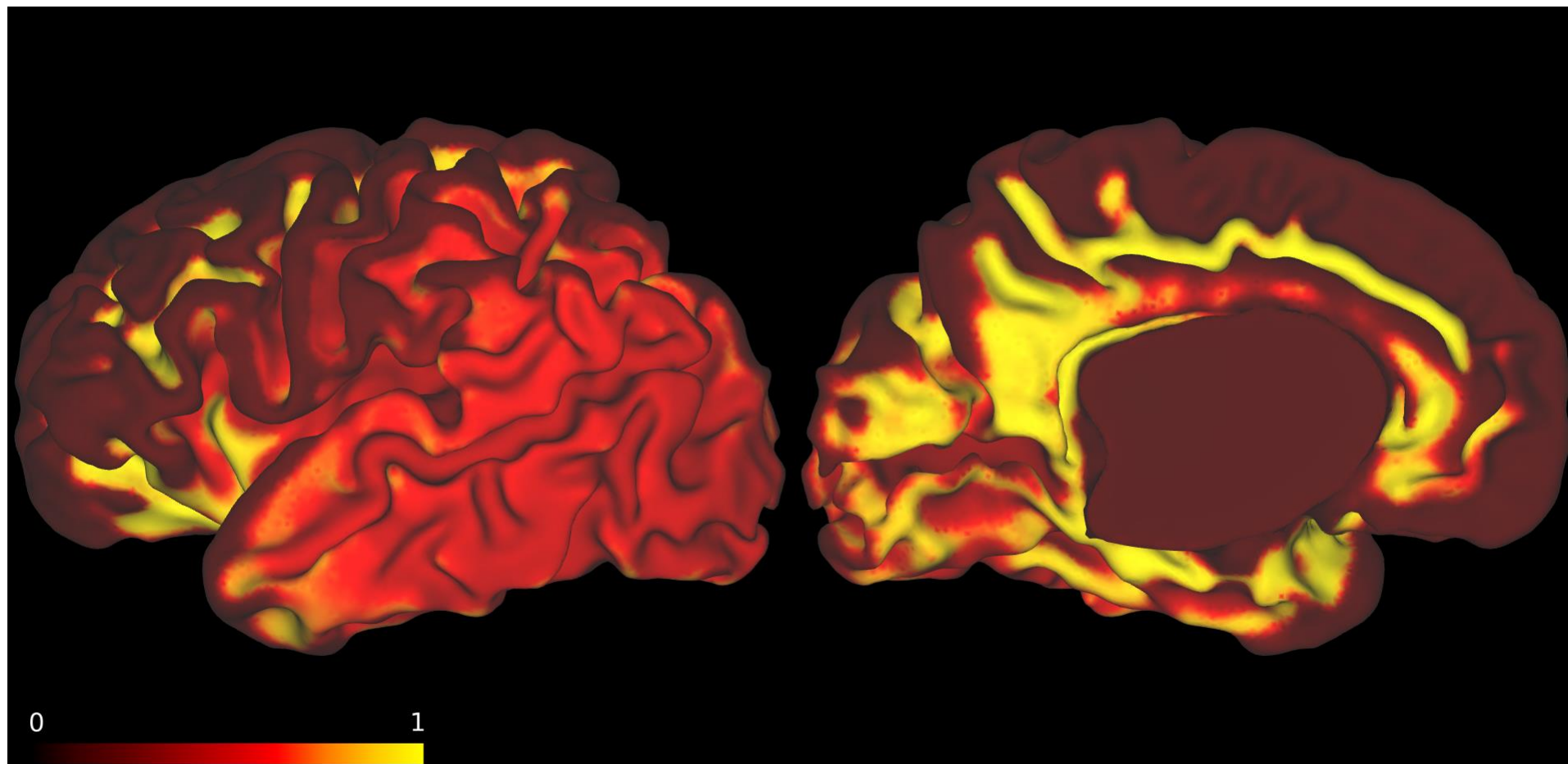
dHCP csoport eredményei

Multiscale Surface Vision Transformer

Model	Aug.	Shifted Attention	PMA Template	PMA Native	GA Template	GA Native
SUNet [32]	✓	n/a	0.75±0.18	1.63±0.51	1.14±0.17	2.41±0.68
MoNet [24]	✓	n/a	0.61±0.04	0.63±0.05	1.50±0.08	1.68±0.06
SiT-T (ico2)	✓	n/a	0.58±0.02	0.66±0.01	1.04±0.04	1.28±0.06
SiT-T (ico3)	✓	n/a	0.54±0.05	0.68±0.01	1.03±0.06	1.27±0.05
SiT-T (ico4)	✓	n/a	0.57±0.03	0.83±0.04	1.41±0.09	1.49±0.10
MS-SiT	✓	✗	0.49±0.01	0.59±0.01	1.00±0.04	1.17±0.04
MS-SiT	✓	✓	0.49±0.01	0.59±0.01	0.88±0.02	0.93±0.05

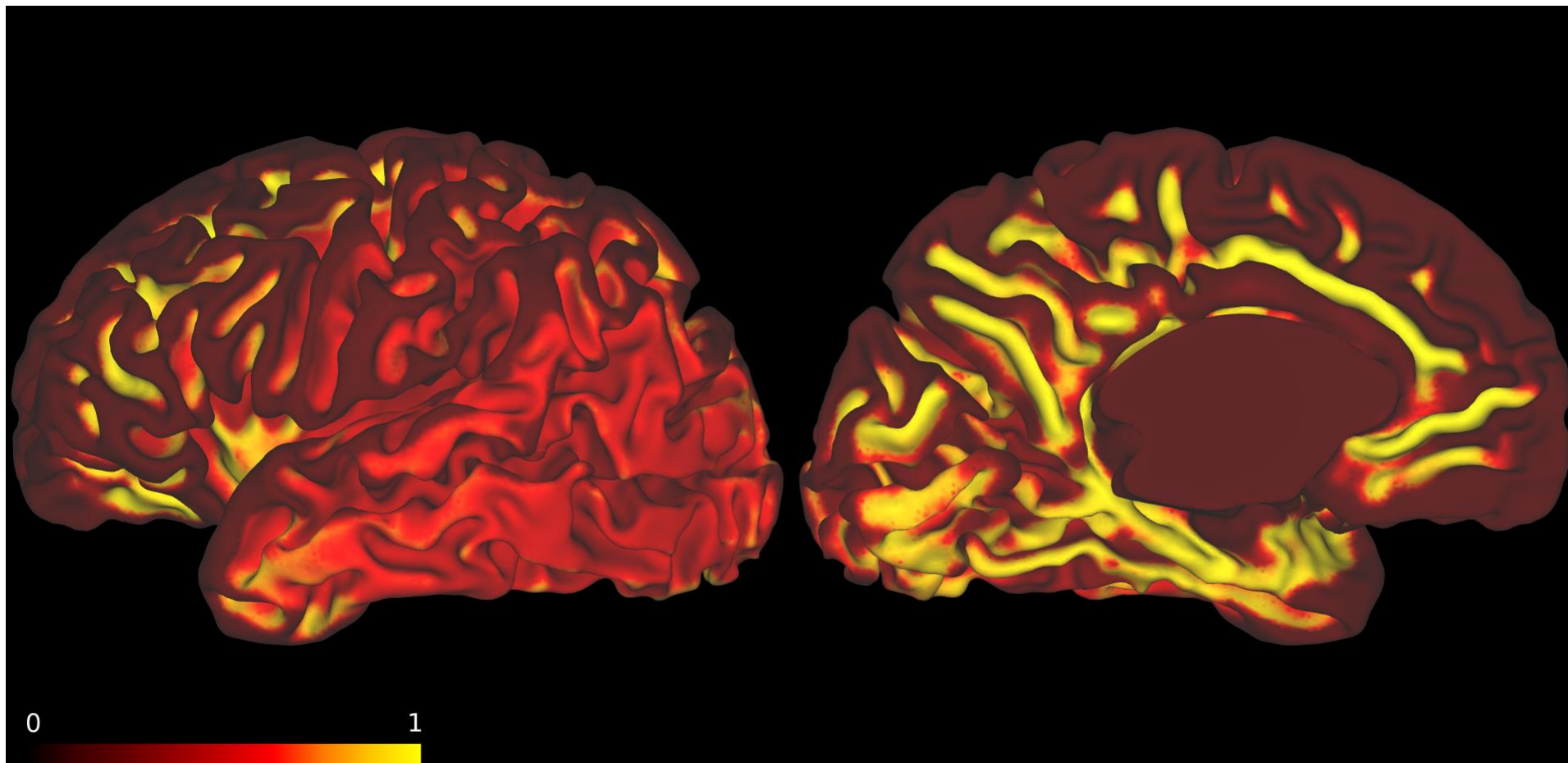
Dahan, S., Fawaz, A., Suliman, M. A., da Silva, M., Williams, L. Z., Rueckert, D., & Robinson, E. C. (2023). The Multiscale Surface Vision Transformer. *arXiv preprint arXiv:2303.11909*.

Az egészséges fejlődés biomarkerei (1)



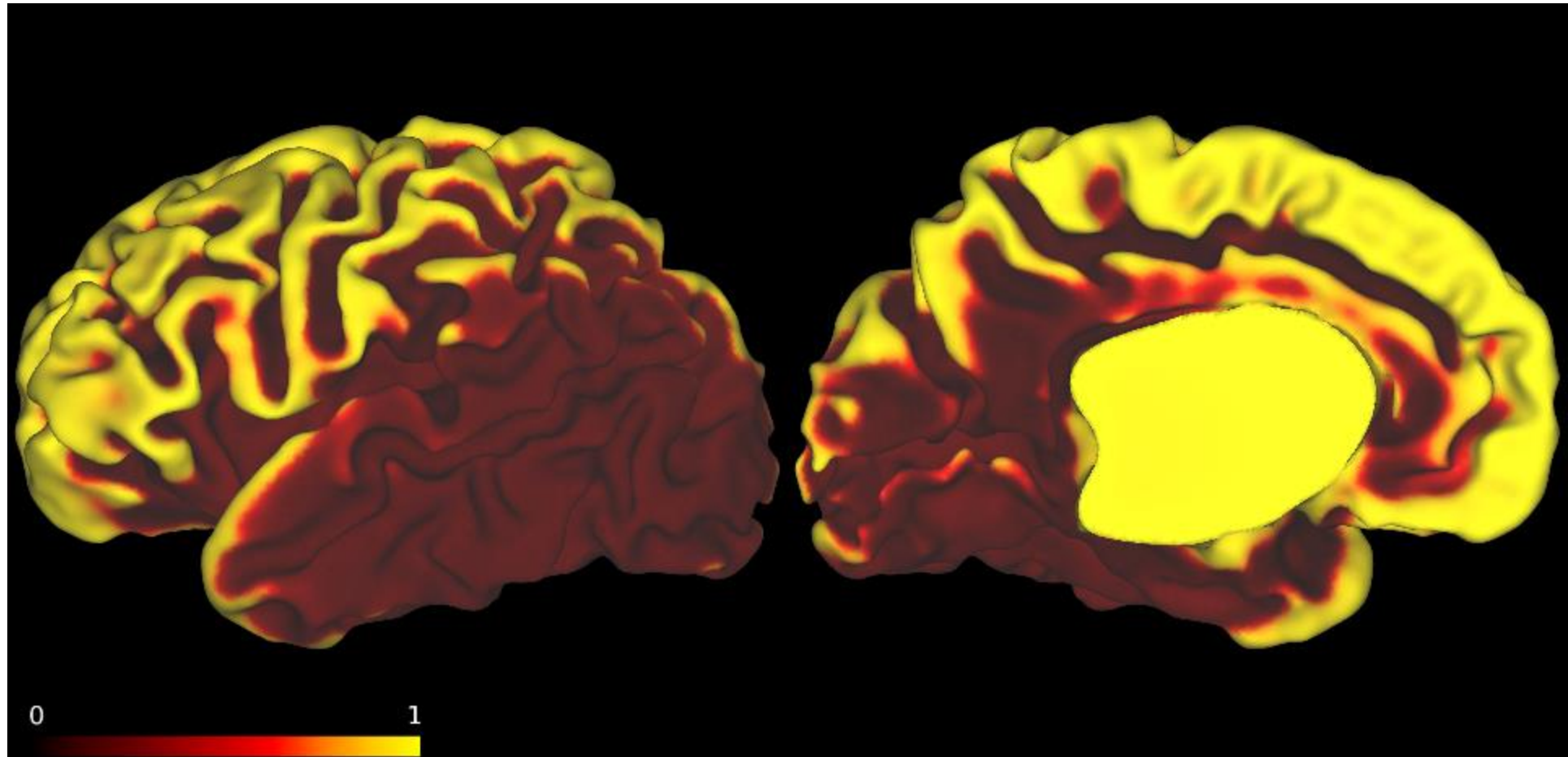
sub-CC00686XX19, született 32.5 hetesen, T1/T2 arány

Az egészséges fejlődés biomarkerei (1)



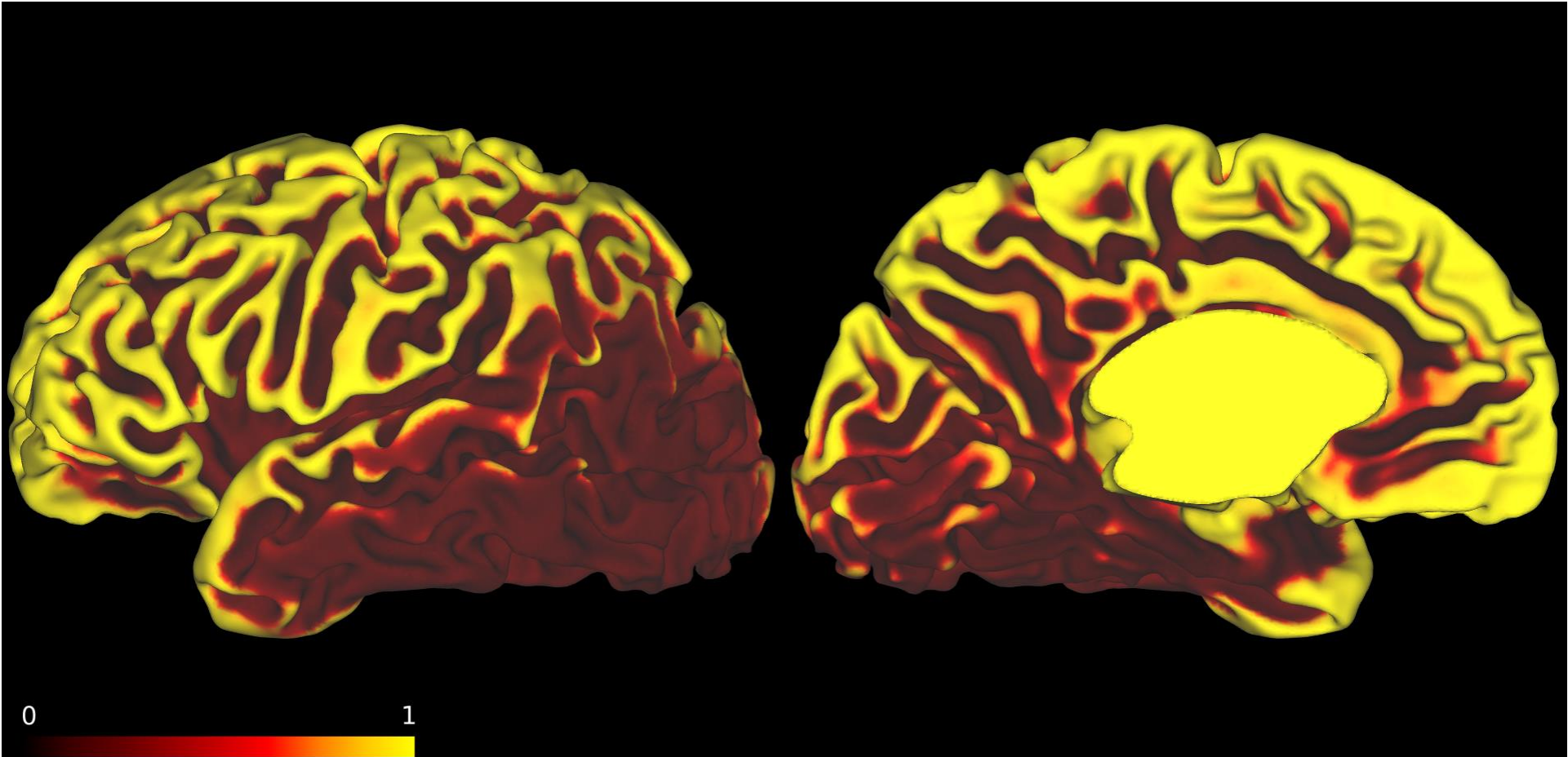
sub-CC00594XX18, született 40 hetesen, T1/T2 arány

Az egészséges fejlődés biomarkerei (2)



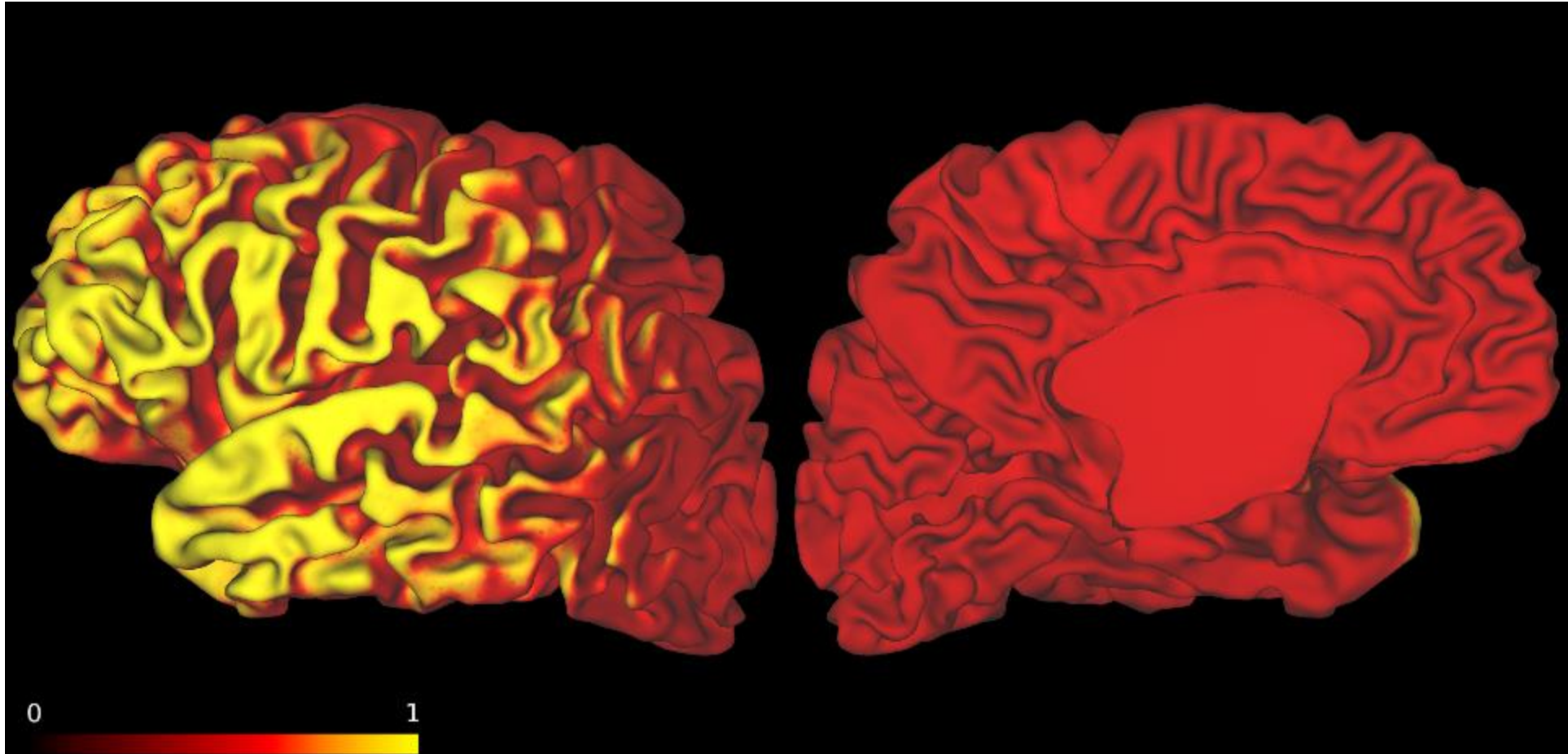
sub-CC00686XX19, született 32.5 hetesen, agykéreg vastagsága

Az egészséges fejlődés biomarkerei (2)



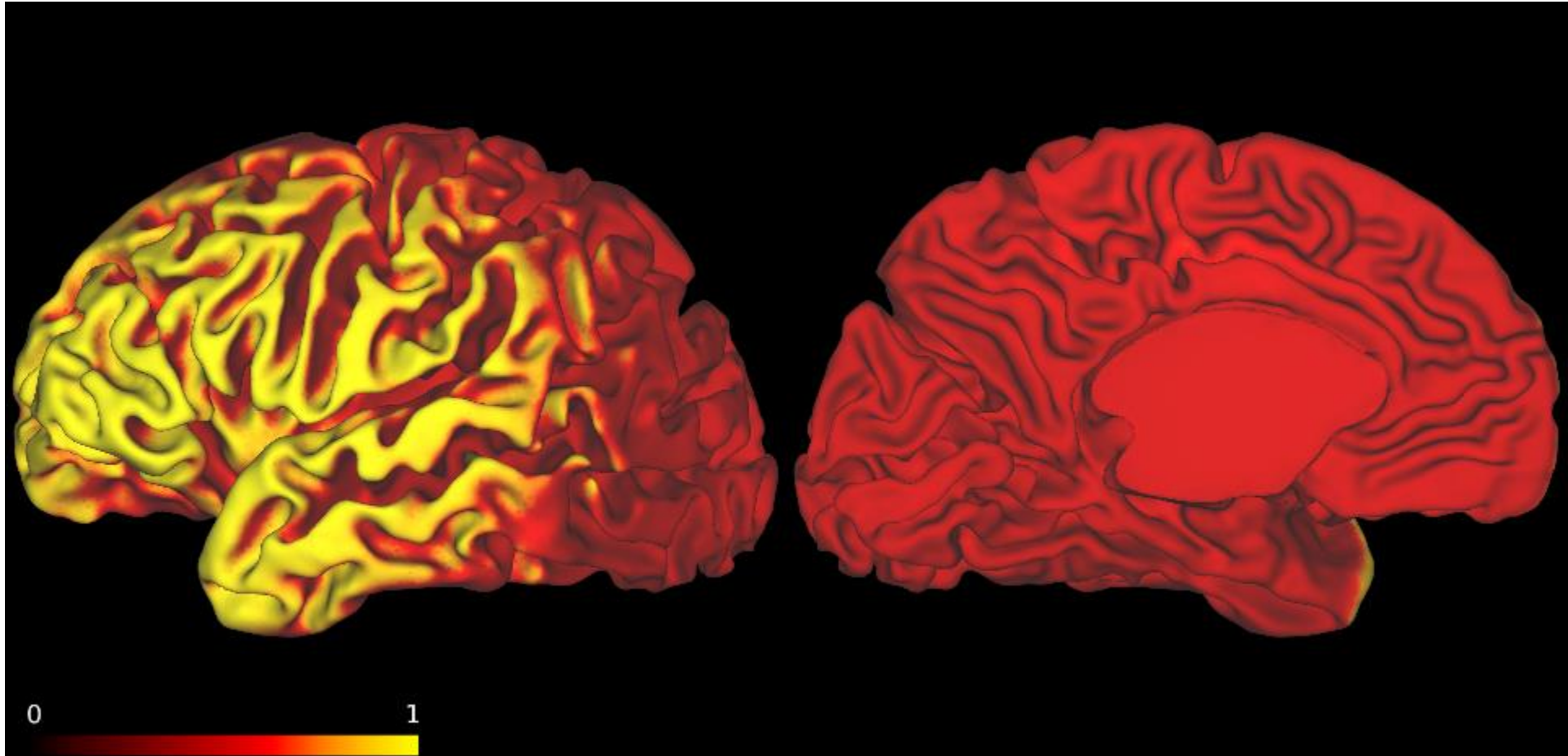
sub-CC00594XX18, született 40 hetesen, agykéreg vastagsága

A koraszülöttek eltérő fejlődésének biomarkerei



sub-CC00686XX19, született 32.5 hetesen, T1/T2 arány

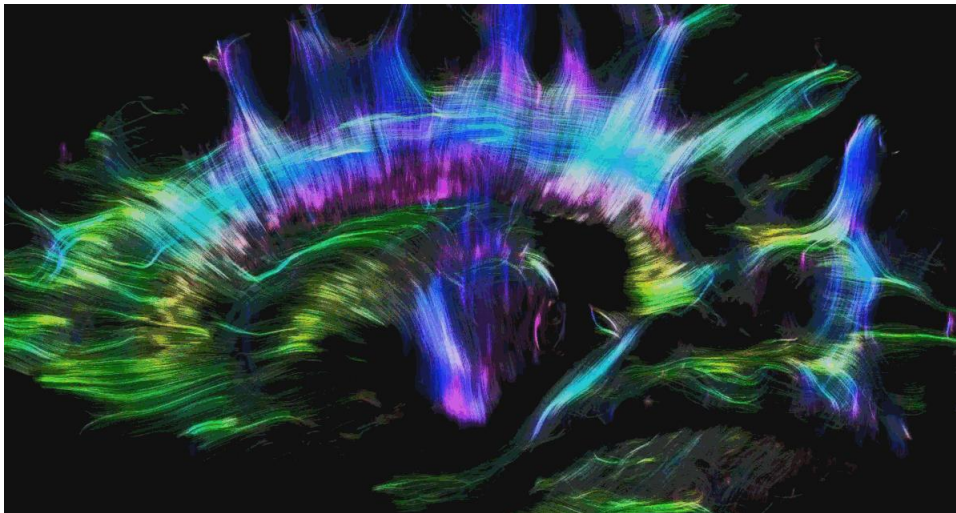
A koraszülöttek eltérő fejlődésének biomarkerei



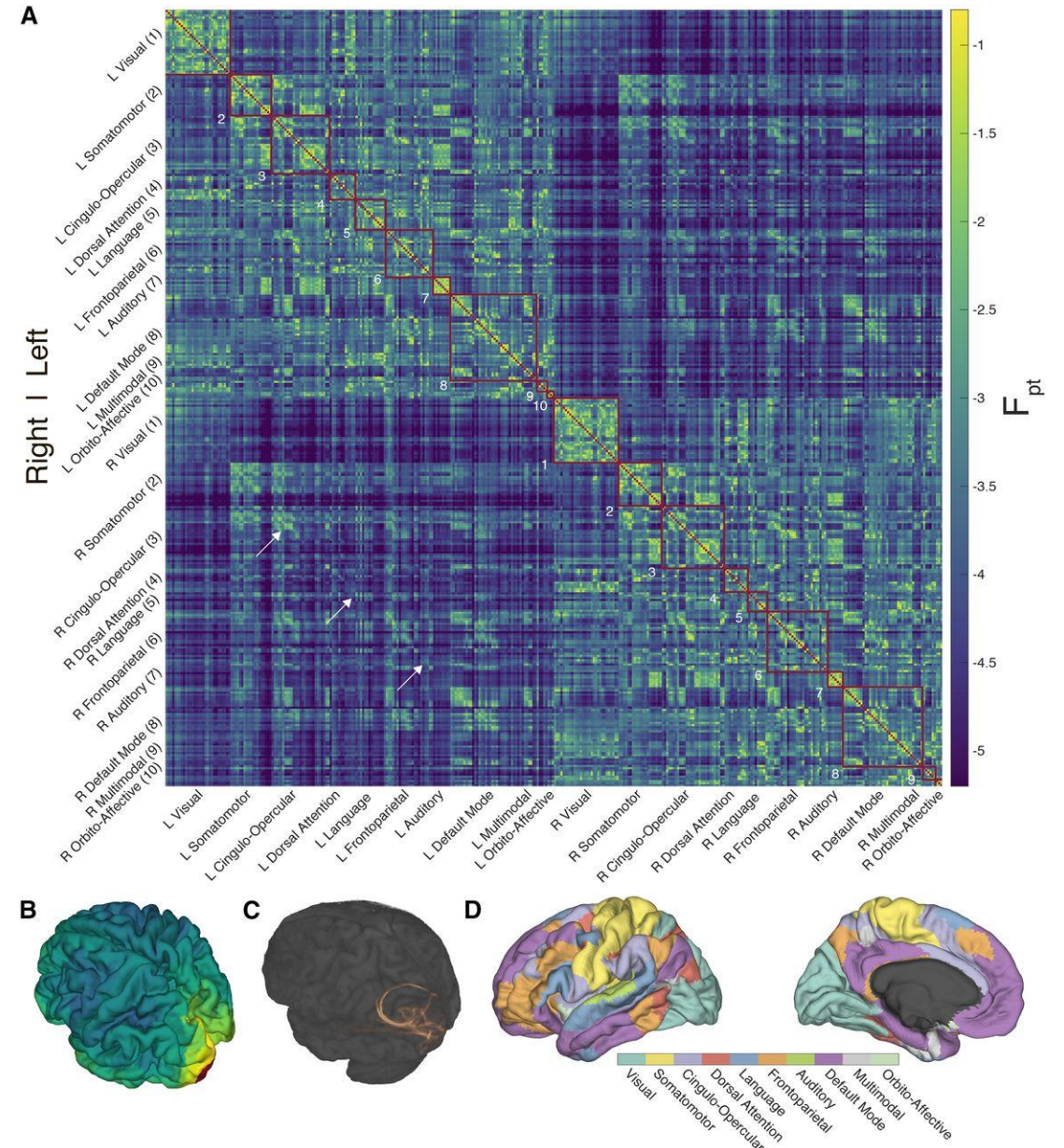
sub-CC00594XX18, született 40 hetesen , T1/T2 arány

További tervek

- Jobb féltekék: kb. azonos eredmények
- Piális felületek
- Diffúziós MRI mérések → konnektom



Rosen, B. Q., & Halgren, E. (2021). A whole-cortex probabilistic diffusion tractography connectome. *Neuro*, 8(1).





KÖSZÖNÖM A FIGYELMET!