

**Universidade Federal de Itajubá**

Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação

**Determinação de Hemometabólitos a Partir de  
Sistema de Rede Neural Artificial**

**José Renato Garcia Braga**

**Itajubá**

**2012**

**Universidade Federal de Itajubá**

Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação

**Universidade Federal de Itajubá**

**Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação**

**José Renato Garcia Braga**

**Determinação de Hemometabólitos a Partir de  
Sistema de Rede Neural Artificial**

**Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia da Computação.**

**Área de Concentração: Matemática da Computação**

**Orientador: Prof. Dr. Alexandre Carlos Brandão Ramos**

**Co-orientador: Prof. Dr. Álvaro Antônio de A. Queiroz**

**Abril de 2012**

**Itajubá - MG**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –  
Bibliotecária Cristiane N. C. Carpinteiro- CRB\_6/1702

B813d

Braga, José Renato Garcia

Determinação de hemometabólitos a partir de sistema de rede neural artificial. / por José Renato Garcia Braga. -- Itajubá (MG) : [s.n.], 2012.  
82 p. : il.

Orientador : Prof. Dr. Alexandre Carlos Brandão Ramos.

Coorientador : Prof. Dr. Álvaro Antonio Alencar de Queiroz.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Redes neurais artificiais. 2. Hemometabólitos. 3. Algoritmo de retropropagação de erro. I. Ramos, Alexandre Carlos Brandão, orient. II. Queiroz, Álvaro Antonio Alencar de, coorient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

# Universidade Federal de Itajubá

Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação

## **Determinação de Hemometabólitos a Partir de Sistema de Rede Neural Artificial**

**José Renato Garcia Braga**

**Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Computação como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia da Computação.**

**Área de Concentração: Matemática da Computação**

Aprovada por:

\_\_\_\_\_ (Orientador)  
Prof. Dr. Alexandre Carlos Brandão Ramos - UNIFEI

\_\_\_\_\_ (Co- orientador)  
Prof. Dr. Álvaro Antônio Alencar de Queiroz – UNIFEI

\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. José Maria Parente de Oliveira - ITA

\_\_\_\_\_  
Prof. Dra. Tereza Gonçalves Kirner - UNIFEI

**Itajubá / MG  
2012**

# Dedicatória

*À meus pais,  
Rita de Cassia e Henrique.  
À meu irmão,  
Pedro Luiz.  
À minha namorada,  
Wanessa da Silva.*

# Agradecimentos

À Deus, por sua presença constante em minha vida e por ter me oportunizado conhecimento e experiência, que certamente me acompanharão por toda a vida.

Aos meus pais, Rita de Cassia e Henrique, por sempre estar do meu lado em minhas decisões mais difíceis e por me incentivar pela busca de realização dos meus sonhos.

Ao meu irmão, Pedro Luiz, pelo exemplo de garra e dedicação.

A minha namorada, Wanessa Da Silva, pela paciência sobre minha ausência durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof. Álvaro Antônio de Alencar Queiros, meu co-orientador, pela disponibilidade e afincamento na orientação, principalmente pela paciência e disposição durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador, Prof. Alexandre C. B. Ramos, por me conceder esta oportunidade.

# Resumo

O controle e análise de hemometabólitos, como colesterol, ureia e glicose se torna cada vez mais importante para a medicina devido ao aumento do número de pessoas que desenvolvem doenças ligadas às concentrações desses componentes sanguíneos, dessa forma, há a necessidade de se monitorar a concentração desses hemometabólitos.

Por este motivo, que neste trabalho está sendo proposto o desenvolvimento de uma rede neural artificial de múltiplas camadas, que utiliza o algoritmo de retropropagação de erro como algoritmo de aprendizagem e que será programada em um circuito eletrônico e instalada em biossensor amperométrico, para determinar a concentração dos hemometabólito analisados.

Um simulador de rede neural artificial foi desenvolvido na linguagem de programação Java para a determinação dos hemometabólitos, este simulador, antes de sua utilização, foi comparado com dois simuladores de redes neurais já consagrados, o NETS 3.0 e o MatLab R2008a, e o simulador desenvolvido se mostrou eficiente na sua determinação.

Durante a determinação dos hemometabólitos as redes neurais artificiais se mostraram eficientes e adequadas para este objetivo.

Palavras chaves: Redes neurais artificiais. Hemometabólitos. Algoritmo de retropropagação de erro.

# Abstract

The control and analysis haemometabolites such as cholesterol, glucose and urea become increasingly important in medicine due to the increase in the number of persons who develop disease related to the concentration of these blood components.

For this reason, this work proposes to develop an artificial neural network, multi-layer perceptron, using the backpropagation error algorithm to determine the concentration of haemometabolites analyzed.

An artificial neural network simulator was developed in Java programming language for the determination of haemometabolites; this simulator before its use was compared with two simulators of neural networks already established, the NETS 3.0 and MatLab R2008a, and developed simulator proved efficient in its determination.

During the determination of haemometabolites artificial neural networks were efficient and suitable for this purpose.

Keywords: Artificial neural networks. Haemometabolites. Error backpropagation algorithm.



# Sumário.

DEDICATÓRIA.....	iii
AGRADECIMENTOS .....	iv
RESUMO.....	v
ABSTRACT .....	vi
SUMÁRIO .....	vii
LISTA DE TABELAS .....	x
LISTA DE TABELAS .....	xi
LISTA DE ABREVIATURAS.....	xii
<b>CAPÍTULO 1.....</b>	<b>13</b>
<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>13</b>
1.1 Considerações Iniciais .....	13
1.2 Objetivos.....	14
1.3 Organização do Trabalho.....	14
<b>CAPÍTULO 2.....</b>	<b>15</b>
<b>BISENSORES, TEORIA E OPERAÇÃO .....</b>	<b>15</b>
2.1 Considerações Iniciais .....	15
2.2 Biossensores e Estado da Arte .....	16
2.3 A Química nos Biossensores .....	19
2.4 Mecanismos das Reações Químicas .....	21
2.5 Imobilização.....	23
2.6 Mediadores de Elétrons .....	23
2.7 Considerações Finais .....	24
<b>CAPÍTULO 3.....</b>	<b>25</b>
<b>O CÉREBRO HUMANO .....</b>	<b>25</b>
3.1 Considerações Iniciais .....	25
3.2 O Cérebro Humano .....	25
3.3 Os Neurônios .....	27
3.4 Sínapses Nervosas.....	29
3.5 Considerações Finais .....	29
<b>CAPÍTULO 4.....</b>	<b>30</b>
<b>REDES NEURAIS ARTIFICIAIS .....</b>	<b>30</b>

4.1 Considerações Iniciais .....	30
4.2 Características Gerais .....	31
4.3 O Neurônio Artificial .....	32
4.4 Função de Ativação .....	34
4.5 Arquitetura de Redes .....	35
4.5.1 Redes Alimentadas Adiante com Camada Computacional Única .....	35
4.5.2 Redes Alimentadas Adiante com Múltiplas Camadas .....	36
4.5.3 Redes Recorrentes .....	37
4.6 Treinamento .....	38
4.7 Aplicações de Redes Neurais Artificiais .....	39
4.8 Considerações Finais .....	40
<b>CAPÍTULO 5.....</b>	<b>41</b>
<b>O CÉREBRO HUMANO .....</b>	<b>41</b>
5.1 Considerações Iniciais .....	41
5.2 Perceptrons de Múltiplas Camadas.....	42
5.3 Processos de Aprendizagem.....	43
5.4 Aprendizagem por Correção de Erros .....	44
5.5 Tarefas de Aprendizagem.....	45
5.6 O Algoritmo de Retropropagação de Erro .....	47
5.6.1 Considerações Preliminares .....	47
5.6.2 Algoritmo de retropropagação de Erro .....	47
5.4 Taxa de Aprendizagem .....	53
5.7 Desenvolvimento de uma RNA .....	53
5.7.1 Coleta de Dados .....	54
5.7.2 Configuração de uma RNA.....	54
5.7.3 Treinamento de uma RNA .....	54
5.7.4 Testes .....	55
5.7.5 Integração.....	55
5.8 Considerações Finais .....	56
<b>CAPÍTULO 6.....</b>	<b>57</b>
<b>PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL E RESULTADOS .....</b>	<b>57</b>
6.1 Considerações Iniciais .....	57
6.2 Preparação das amostras para obtenção dos dados.....	58

6.3 Obtenção das Curvas .....	59
6.4 Pré-processamento dos dados .....	61
6.4 Pré-processamento dos dados .....	61
6.5 Desenvolvimento da RNA .....	64
6.4.1 Teste com a base de dados de Winsconcin .....	64
6.4.2 Teste com a base de dados de Fisher .....	65
6.6 Determinação da Estrutura da RNA .....	66
6.6.1 Separação dos Dados para a Formação dos Grupos.....	67
6.6.2 Apresentação dos Dados para RNA e Realização dos Testes.....	67
6.6.3 Primeiro Teste .....	68
6.6.4 Segundo Teste .....	70
6.6.5 Terceiro Teste.....	71
<b>CAPÍTULO 7.....</b>	<b>72</b>
<b>CONCLUSÃO .....</b>	<b>72</b>
7.1 Considerações Iniciais .....	75
7.2 Contribuições do trabalho .....	76
7.1.1 Primeiro Teste.....	76
7.1.2 Segundo Teste .....	77
7.1.3 Terceiro Teste .....	78
7.1.4 Outras Contribuições.....	79
7.3 Trabalhos Futuros .....	79
<b>REFEREÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>80</b>

# Lista de Figuras

Figura 2.1 - Representação de um biossensor: biocatalizador.....	16
Figura 2.2 - Biossensor enzimático de Clark e Lions.....	17
Figura 2.3 - Gráfico comparativo para os tipos de biossensores mais estudados.....	18
Figura 2.4 - Biossensores amperométricos comerciais utilizados em análises clínicas.....	18
Figura 2.5 - Paciente perfurando o dedo para produzir gota de sangue para a análise.....	19
Figura 2.6 - Biossensor onde ocorre a reação química.....	19
Figura 2.7 - Diagrama energético de reação catalisada e de reação não-catalisada.....	21
Figura 2.8 - Efeito da temperatura sobre a velocidade de uma reação catalisada por enzima.....	22
Figura 2.9 - Atividade enzimática versus pH (considerando-se os outros fatores constantes).....	22
Figura 2.10 - Ilustração estrutural de um dendrímero.....	23
Figura 3.1 - Representação em diagramas em blocos do sistema nervoso.....	26
Figura 3.2 - O córtex cerebral e suas divisões.....	27
Figura 3.3 - O neurônio e suas estruturas básicas.....	28
Figura 4.1 - Representação da arquitetura de uma RNA.....	32
Figura 4.2 - Representação de um neurônio artificial.....	33
Figura 4.3 - Representação de uma RNA de camada única.....	36
Figura 4.4 - Representação de uma RNA de múltiplas camadas.....	37
Figura 4.5 - Representação de uma RNA recorrente.....	38
Figura 5.1 - Representação de um perceptron múltiplas camadas.....	43
Figura 6.1 - Unidade fonte medidora Keitlhey modelo 237.....	59
Figura 6.2 - Biossensor utilizado para a reação com o heometabolito.....	60
Figura 6.3 - Resposta da corrente elétrica em função da concentração de glicose.....	60
Figura 6.4 - Gráfico original com os dados da reação de 20mM de colesterol.....	61
Figura 6.5 - Gráfico com os da reação de corrente pelo tempo da reação de 20mM de colesterol..	62
Figura 6.6 - Gráfico com os da reação de corrente pelo tempo da reação de 20mM de colesterol..	63
Figura 6.7 - O pico da curva sendo mostrado em evidencia.....	70

# Lista de Tabelas

Tabela 6.1 - Concentração dos hemometabolitos de interesse para a medicina.....	58
Tabela 6.2 - Resposta desejada para a classificação das três classes de hemometabólitos.....	63
Tabela 6.3 - Resultados do teste de Fisher .....	65
Tabela 6.4 - Resultados do teste de Winsconsin.....	66
Tabela 6.5 - Formação dos grupos teste, validação e controle.....	67
Tabela 6.6 - Resultados do primeiro teste.....	69
Tabela 6.7 - Resultados do segundo teste.....	71
Tabela 6.8 - Resultados do teste com RNA para determinação da classe da curva.....	72
Tabela 6.9 - Resultados do teste com RNA para determinação da concentração da curva....	72
Tabela 7.1 - Resposta desejada para a classificação das três classes de hemometabólitos.....	77

# Lista de Abreviaturas

RNA	<i>Rede neural artificial.</i>
RNAs	<i>Redes Neurais Artificiais.</i>

# Capítulo 1.

## Introdução.

### **1.1. Considerações Iniciais.**

No último século houve um aumento considerável da longevidade humana e isto fez com que um grande número de indivíduos viesse a atingir uma idade crítica para o desenvolvimento de inúmeras doenças. Como consequência dessa maior longevidade há o aparecimento de morbidades relacionadas ao envelhecimento, como: hipercolesterolemia, hiperglicemia e elevação nos níveis de ureia no sangue.

A hipercolesterolemia, que é o aumento da taxa de colesterol, é uma doença grave porque o colesterol tem papel importante na gênese da aterosclerose. A hiperglicemia, caracterizada pelo excesso de açúcar no sangue, é uma disfunção que pode causar diversas complicações como amputação e cegueira. Já o excesso de ureia no sangue é um indicativo forte de que o indivíduo possui doenças renais e hepáticas.

Tendo em vista estes problemas citados acima, verifica-se a importância do controle dos níveis de glicose, colesterol e ureia no fluido sanguíneo, uma vez que estes estão sujeitos a flutuações contínuas. Surge então a necessidade de se criar um dispositivo que monitore diariamente os níveis destes hemometabólitos, mas os dispositivos que estão disponíveis hoje são demasiadamente caros para a população brasileira e estes realizam a medição de um único hemometabólito.

## **1.2. Objetivos.**

A dissertação de mestrado tem como objetivo o projeto de uma rede neural artificial (RNA) que será usada em um biossensor, que será construído com tecnologia totalmente nacional para baratear os custos de produção e facilitar o acesso da população carente a esta tecnologia, para a monitoração da concentração de hemometabólitos.

## **1.3. Organização do Trabalho.**

Esta dissertação está organizada em sete capítulos. Os biossensores utilizados na monitoração de hemometabólitos, bem como natureza química do processo são apresentados no Capítulo 2. No Capítulo 3 são feitas considerações sobre o cérebro humano. No Capítulo 4, são abordados os conceitos referentes a Redes Neurais Artificiais. No Capítulo 5 são feitas as considerações sobre as redes neurais de múltiplas camadas. O Capítulo 6 apresenta a abordagem desenvolvida pelo autor para a análise e reconhecimento dos valores das concentrações dos hemometabólitos: ureia, colesterol e glicose. Finalmente no Capítulo 7 são apresentadas as conclusões deste trabalho, suas contribuições e trabalhos futuros.



# Capítulo 2.

## Biossensores, teoria e operação.

### **2.1. Considerações Iniciais.**

Os métodos de análises clínicas que são utilizados atualmente em laboratórios são de custo elevado uma vez que dependem de instrumentos de grande porte, funcionários devidamente qualificados e local apropriado dentre outros custos para a sua realização. Além disso, trazem ao paciente certo incômodo pelo fato da necessidade de uma quantidade significativa de fluido biológico para realização das análises clínicas, que normalmente é coletado com a utilização de agulha e seringa, podendo assim ser considerado um método invasivo.

Além de ser uma ferramenta pouco invasiva, os dispositivos biossensores geram no sistema de saúde uma economia considerável em relação aos exames convencionais, pois não há a necessidade de grande infraestrutura e pessoal treinado para a realização da análise. Outra vantagem do uso de biossensores para o monitoramento de hemometabólitos é a existência de pacientes que necessitam de monitoramento constante dos metabólitos sanguíneos, como por exemplo, os pacientes diabéticos, sendo assim, com a utilização dos biossensores os pacientes podem eles mesmos realizarem seus exames e o monitoramento dos níveis dos hemometabólitos.

Os biossensores surgem então como alternativa para substituírem os métodos convencionais do laboratório clínico. A análise pode ser feita pelo próprio paciente a qualquer hora do dia e local, necessitando apenas de uma única gota de sangue.

Neste capítulo é mostrada a constituição básica de um biossensor e o funcionamento de cada um de seus componentes; na Seção 2.2 estudamos os biossensores e o seu estado da arte; na Seção 2.3 estudamos sobre a química nos biossensores; na Seção 2.4 discutimos os mecanismos das reações químicas, na Seção 2.5 estudamos a imobilização de dendrímeros; na Seção 2.6

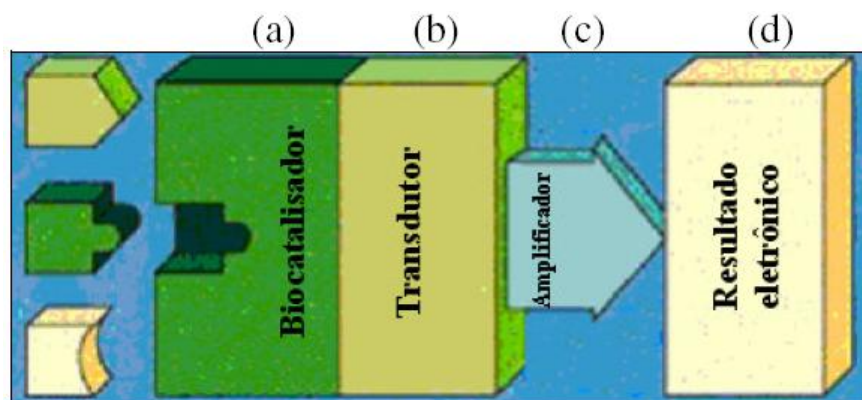
estudamos sobre mediadores de elétrons; na Seção 2.7 são feitas as considerações finais do capítulo.

## 2.2. Biossensores e Estado da Arte.

Biossensores são dispositivos eletrônicos capazes de converter uma reação biológica/bioquímica em um sinal apropriado. Este sinal pode ser:

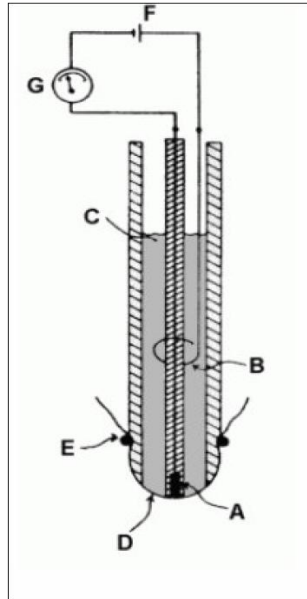
- Potenciométrico - quando o sinal obtido é fruto da análise da diferença de potencial produzida pela reação química que ocorre no biossensor.
- Amperométrico - quando o sinal obtido é fruto da análise da corrente elétrica produzida pela reação química que ocorre no biossensor.
- Óptico – quando sinal obtido é fruto da mudança de coloração que ocorre na superfície do biossensor devido à reação química.
- Entalpimétrico (calorimétrico) – quando o sinal obtido é fruto da variação de energia que ocorre devido à reação química.

A Figura 2.1 mostra os componentes básicos de um biossensor. Em (a), tem-se o biocatalisador, onde ocorre a reação bioquímica responsável pela geração do sinal; em (b) tem-se o transdutor, que é o responsável pela geração do sinal a partir da reação química ocorrida no biocatalisador; em (c) o amplificador e em (d) a apresentação do resultado.



**Figura 2.1-** Representação de um biossensor: biocatalisador<sup>1</sup>.

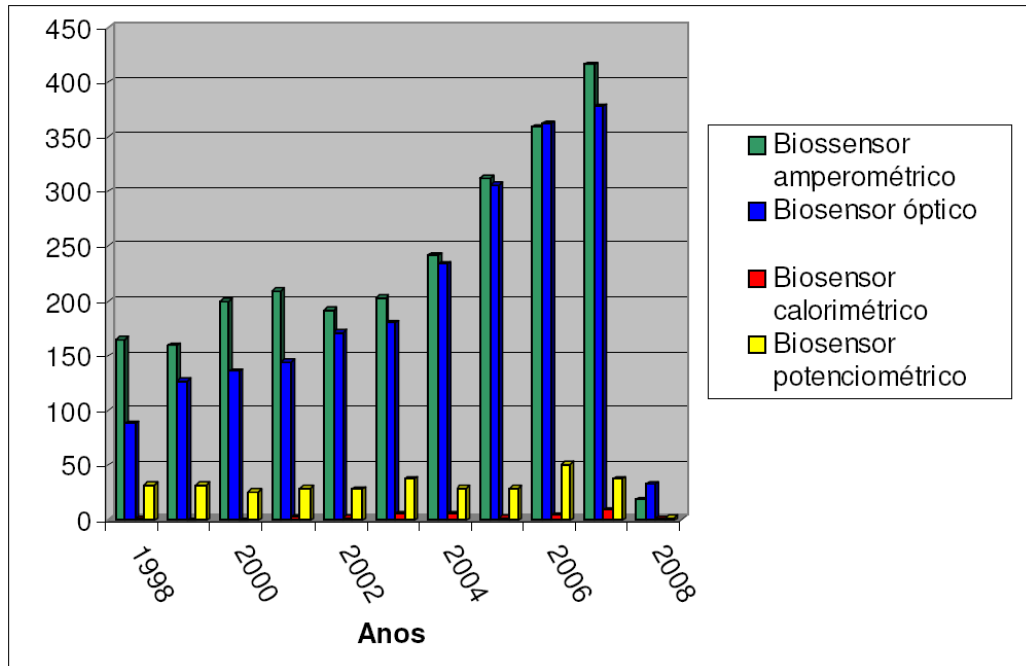
O primeiro biossensor foi desenvolvido por Clark e Lions em 1962, e este ficou conhecido como eletrodo enzimático, que está ilustrado na Figura 2.2.



**Figura 2.2**– Biossensor enzimático de Clark e Lyons<sup>1</sup>.

Os biossensores ou eletrodos enzimáticos são usados em uma série de determinações analíticas, das quais, a detecção da taxa de glicose no sangue é destaque. A partir do invento de Clark e Lyons, diversos tipos de biossensores foram desenvolvidos para os mais diversos tipos de análises clínicas, obtendo maior destaque as análises biomédicas como o monitoramento de hemometabólitos no sangue humano (como glicose, colesterol e ureia).

Os biossensores geralmente são classificados de acordo com o sinal que é gerado no transdutor. Os biossensores amperométricos são os tipos mais usados e pesquisados, como pode ser verificado na Figura 2.3. Porém, existem outros tipos de biossensores baseados em outros tipos de sinais.



**Figura 2.3**– Gráfico comparativo para os tipos de biossensores mais estudados<sup>2</sup>.

Os biossensores amperométricos fornecem a possibilidade de se captar um sinal elétrico que seja proporcional à concentração de analito (hemometabólito analisado). Eles são os mais comercializados atualmente e são mostrados na Figura 2.4.



**Figura 2.4** - Biossensores amperométricos comerciais utilizados em análises clínicas<sup>4</sup>.

## 2.3. A química nos Biossensores.

O funcionamento básico de um biossensor ocorre da seguinte forma:

- Primeiramente o paciente deve perfurar o dedo com uma agulha ou lanceta para produzir uma gota de sangue.



**Figura 2.5** – Paciente perfurando o dedo para produzir gota de sangue para a análise<sup>4</sup>.

- A gota de sangue coletada deve ser colocada no biossensor que é mostrado na figura abaixo.



**Figura 2.6** – Biossensor onde ocorre a reação química.

- No biossensor está presente o analito, que reagirá com o hemometabólito do sangue a ser analisado e um biocatalisador, uma enzima, que é responsável por catalisar a reação química entre o analito e o hemometabólito.

- O transdutor, que faz parte de um componente eletrônico, é responsável por coletar os dados produzidos pela reação química e gerar o sinal que será analisado por software que apresenta o resultado.

O componente fundamental de um biossensor são as enzimas. As enzimas são biocatalisadores que apresentam alta seletividade. São proteínas com a função específica de acelerar reações químicas que ocorrem sob condições termodinamicamente não favoráveis. Elas aceleram consideravelmente a velocidade das reações químicas em sistemas biológicos quando comparadas com as reações correspondentes não catalisadas. Consegue-se isso através do abaixamento da energia de ativação necessária para que ocorra uma reação química, resultando no aumento da velocidade da reação e possibilitando o metabolismo dos seres vivos. A capacidade catalítica das enzimas torna-as adequadas para aplicações industriais, como na indústria farmacêutica ou na alimentar.

A enzima atua sobre o substrato que se transforma em produto. Na ausência de enzima pouco produto é formado, mas em presença da mesma, a reação se processa em alta velocidade.

As enzimas são os catalisadores mais específicos que se conhece, tanto para o substrato como para o tipo de reação efetuada sobre o substrato.

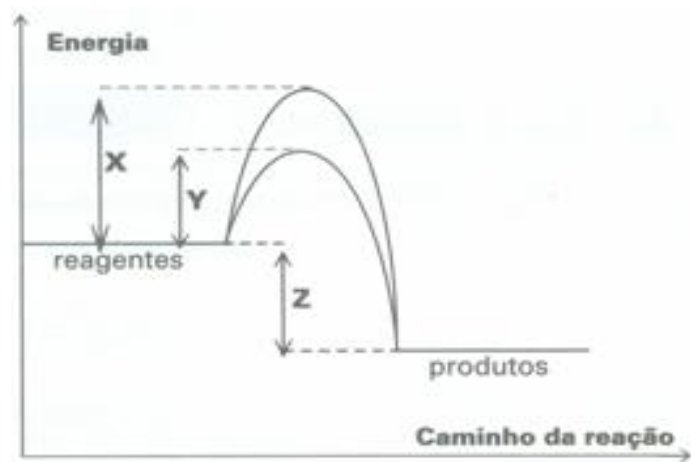
## **2.4. Mecanismos das Reações Químicas.**

Para reagirem, as moléculas presentes em uma solução devem colidir com orientação apropriada e com a quantidade de energia que lhes permitiam formar o complexo ativado, que é o estado intermediário formado entre reagentes e produtos, em cuja estrutura existem ligações enfraquecidas e formação de novas ligações.

Para atingir este estado intermediário (de transição), necessita-se de uma quantidade de energia definida como energia de ativação, que é a energia necessária para que uma reação ocorra. Sob condições fisiológicas, a velocidade das reações pode ser aumentada pela redução da energia de ativação conseguida pela ação das enzimas.

Na figura 2.7, temos duas curvas, a curva indicada pela altura X mostra uma reação química não catalisada, onde X representa sua energia de ativação. A curva indicada pela altura Y mostra uma reação química catalisada, onde Y é o valor de sua energia de ativação. Como a

altura de Y é menor que a altura de X a reação que possui a energia de ativação Y irá ocorrer com maior velocidade, pois quanto menor a energia de ativação de uma reação mais rápida ela ocorre.



**Figura 2.7-** Diagrama energético de reação catalisada e de reação não-catalisada.<sup>6</sup>

A diferença entre os valores da energia de ativação de uma reação catalisada e de uma reação não-catalisada indica a eficiência do catalisador. A velocidade de uma reação é inversamente proporcional ao valor de sua energia livre de ativação. Quanto maior o valor da energia de ativação, menor será a velocidade da reação. Os catalisadores aumentam a velocidade da reação reduzindo a energia de ativação. Três propriedades distintas das enzimas permitem que elas exerçam papel central na promoção e regulação dos processos celulares.

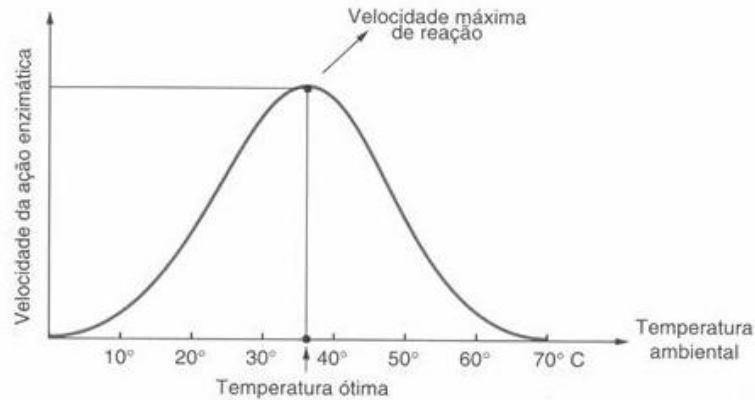
i - Elevada especificidade da reação. Como em geral, cada reação sob condições apropriadas é catalisada por uma enzima específica.

ii - Condições reacionais mais brandas. A atividade de cada enzima é dependente do pH, da temperatura e das concentrações de reagentes e produtos.

iii - Capacidade de regulação da concentração e da atividade. Permite o ajuste fino do metabolismo em diferentes condições fisiológicas.

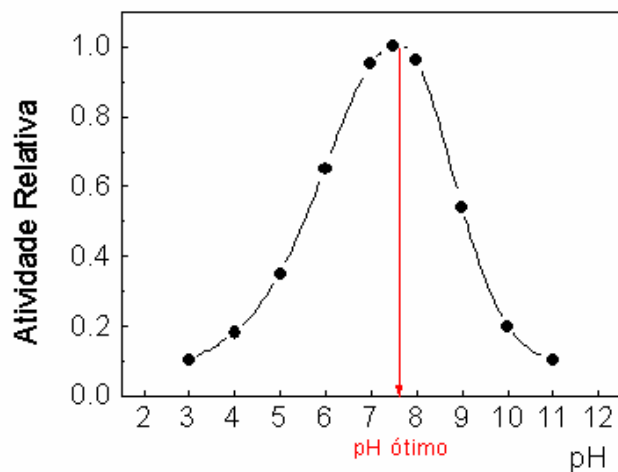
Vários fatores influenciam a atividade enzimática, incluindo a temperatura e o pH. Com relação à temperatura, as reações químicas são afetadas de acordo com a lei de Vant'Hoff. Quanto maior a temperatura, maior a velocidade da reação.

A velocidade aumenta porque mais moléculas adquirem energia suficiente para atingir o estado de transição. Em reações catalisadas por enzimas, a velocidade é acelerada pelo aumento da temperatura até atingir uma temperatura ótima na qual a enzima opera com a máxima eficiência. Como as enzimas são proteínas, os valores de temperatura ótima situam-se entre 35 a 40°C, como apresentado na Figura 2.8.



**Figura 2.8** - Efeito da temperatura sobre a velocidade de uma reação catalisada por enzima<sup>6</sup>.

A concentração de íons hidrogênio também afeta a atividade enzimática. A Figura 2.9 ilustra a atividade enzimática versus a concentração de íons de hidrogênio.



**Figura 2.9** - Atividade enzimática versus pH (considerando-se os outros fatores constantes)<sup>5</sup>.

Como catalisadores celulares, as enzimas são extremamente versáteis, acelerando a velocidade de uma reação sem, no entanto, participar dela como reagente ou produto. As enzimas atuam ainda como reguladoras de um conjunto complexo de reações, sendo, portanto, consideradas as unidades funcionais do metabolismo celular. São catalisadores biológicos extremamente eficientes.



## 2.5. Imobilização.

Em um biossensor a enzima encontra-se normalmente imobilizada na superfície do eletrodo juntamente com outro reagente que reagirá com um dos hemometabólitos. Neste estudo as enzimas se encontram imobilizadas utilizando-se dendrímeros. Dendrímeros, como apresentado na Figura 2.10, são macromoléculas monodispersas, altamente ramificadas, apresentando estruturas bem definidas e um peso molecular uniforme. Esta classe de compostos tem recebido grande atenção dos pesquisadores, pois eles possuem uniformidade molecular, superfície multifuncional e presença de cavidades internas. Essas propriedades específicas tornam os dendrímeros apropriados para a imobilização de enzimas.

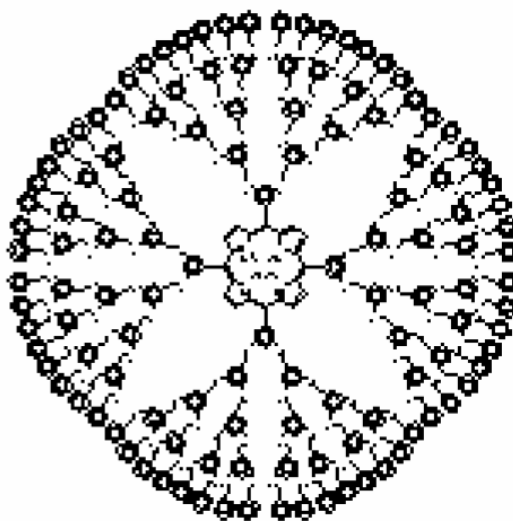


Figura 2.10- Ilustração estrutural de um dendrímero<sup>6</sup>.

## 2.6. Mediadores de Elétrons.

Durante décadas uma das principais preocupações na construção de biossensores amperométricos centralizou-se na velocidade de transferência de elétrons do sítio ativo da enzima para a superfície do eletrodo.

Nos biossensores modernos para a transferência de elétrons são usados mediadores de elétrons; esses mediadores são compostos orgânicos conhecidos como polímeros condutores, estes combinam as propriedades mecânicas e a processabilidade dos polímeros convencionais com um comportamento elétrico, ótico e/ou mecânico semelhantes ao de metais e semicondutores inorgânicos, o que possibilita que a transferência de elétrons seja realizada. Sendo assim os elétrons são conduzidos por estes mediadores, formando um fluxo ordenado de elétrons, uma corrente elétrica, o que possibilita a medição desta corrente elétrica produzida pela reação química entre o reagente do biossensor e o hemometabólito que se deseja determinar a concentração presente no fluido sanguíneo.

## **2.7. Considerações Finais.**

Neste capítulo discutimos sobre os biossensores e a química envolvida no seu funcionamento, o que é de fundamental importância para a continuidade deste trabalho, pois, somente assim, teremos condições de avaliar e levantar os dados necessários para o desenvolvimento da rede neural artificial.

# Capítulo 3.

## O Cérebro Humano.

### **3.1. Considerações Iniciais.**

Neste capítulo abordaremos o funcionamento básico do cérebro humano; este estudo é importante, pois a inspiração para o desenvolvimento das redes neurais artificiais (RNAs) advém do exame das estruturas do cérebro, principalmente do neurônio.

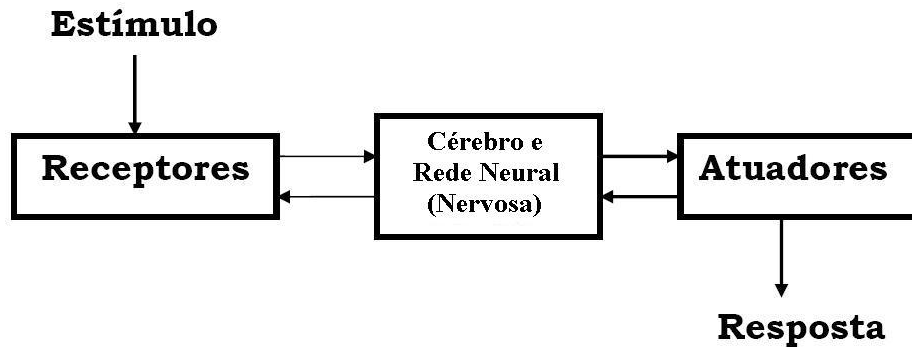
Este capítulo está organizado da seguinte forma: na Seção 3.2 é introduzido o cérebro humano, seu funcionamento básico e como é dividido; logo em seguida, na Seção 3.3 discutimos sobre o neurônio, que é o principal constituinte estrutural do cérebro e, por fim, na Seção 3.4 é estudada a sinapse nervosa, que é responsável por armazenar o conhecimento; na Seção 3.5 são feitas as considerações finais do capítulo.

### **3.2. O Cérebro Humano.**

O cérebro humano é um computador altamente complexo, não linear e paralelo. Ele possui a capacidade de organizar os neurônios, seu principal constituinte estrutural, para realizar certos processamentos, como reconhecimento de padrões e controle motor, muito mais rapidamente que o mais rápido computador digital existente no mundo. O cérebro realiza rotineiramente tarefas de alta complexidade, como o reconhecimento de um rosto familiar inserido em uma cena não-familiar, em alguns milissegundos, ao passo que um computador digital convencional pode levar dias para realizar a mesma tarefa, ou até mesmo não realizá-las.

O sistema nervoso pode ser visto como um sistema de três estágios, como mostrado no diagrama em blocos da Fig. 3.1 (Arbib 1987). O centro do sistema é o cérebro que recebe

continuamente informação, percebe-a e toma decisões apropriadas. As setas mostradas na figura que apontam da esquerda para a direita indicam a transmissão para frente do sinal portador de informação. As setas que apontam da direita para a esquerda indicam realimentação do sistema. Os receptores convertem estímulos do ambiente ou do corpo humano em impulsos elétricos que transmitem informação para o cérebro. Os atuadores convertem impulsos elétricos gerados em respostas.

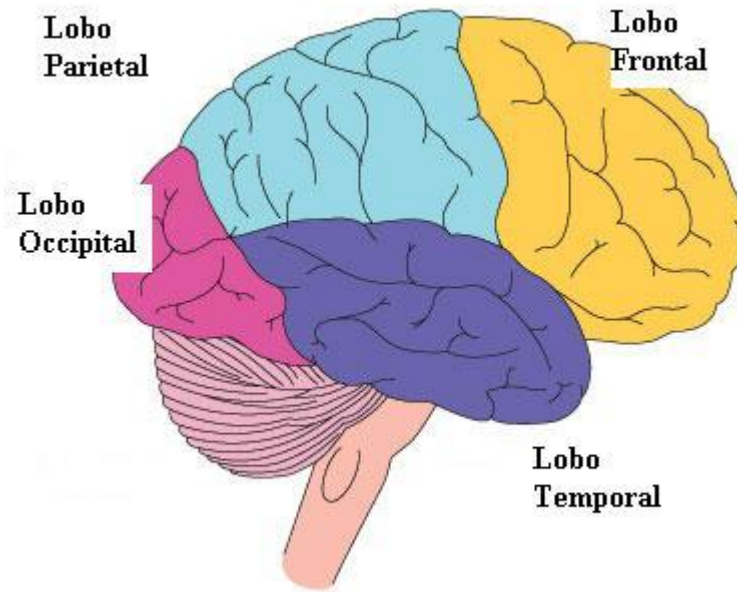


**Figura 3.1-** Representação em diagramas em blocos do sistema nervoso<sup>22</sup>.

O hemisfério cerebral dominante em 98% dos humanos é o hemisfério esquerdo, que é responsável pelo pensamento e raciocínio lógico. Enquanto o hemisfério direito é responsável pelo pensamento simbólico e criatividade.

No cérebro há uma distinção visível entre a massa cinzenta, córtex cerebral, constituída pelos corpos celulares dos neurônios, e a massa branca que é constituída pelos axônios que interligam os neurônios.

O córtex cerebral pode ser dividido em diferentes partes chamadas de lobos cerebrais, tendo cada parte uma função especializada. Os lobos cerebrais são designados pelos nomes dos ossos cranianos nas suas proximidades e que os recobrem. O lobo frontal fica na região da testa e está envolvido no planejamento de ações e movimento, assim como no pensamento abstrato. Os lobos occipitais, que se localizam na região da nuca são responsáveis pelo processamento dos estímulos visuais. Os lobos parietais, localizados na parte superior central da cabeça, são responsáveis pela recepção de sensações, como tato, dor, temperatura e também nos permitem a localização do nosso corpo no espaço. Os lobos temporais, que se localizam na região por cima das orelhas, têm como principal função processar estímulos auditivos. Na Figura 3.2 é mostrado o córtex cerebral e sua divisão.



**Figura 3.2-** O córtex cerebral e suas divisões<sup>17</sup>.

### **3.3. Os Neurônios.**

Nosso cérebro é composto aproximadamente por 10 bilhões de células especializadas chamadas de neurônios (Shepherd e Koch, 1990). Os neurônios são os principais constituintes estruturais do cérebro e possuem a capacidade de se juntar formando uma rede e transmitir sinais eletroquímicos, como se fossem entradas, saídas e fios de um computador. Eles possuem as mesmas estruturas de qualquer célula do corpo humano, mas possuem um aspecto eletroquímico diferenciado o que permite a transmissão de sinais por longas distâncias e passar mensagens de um para o outro.

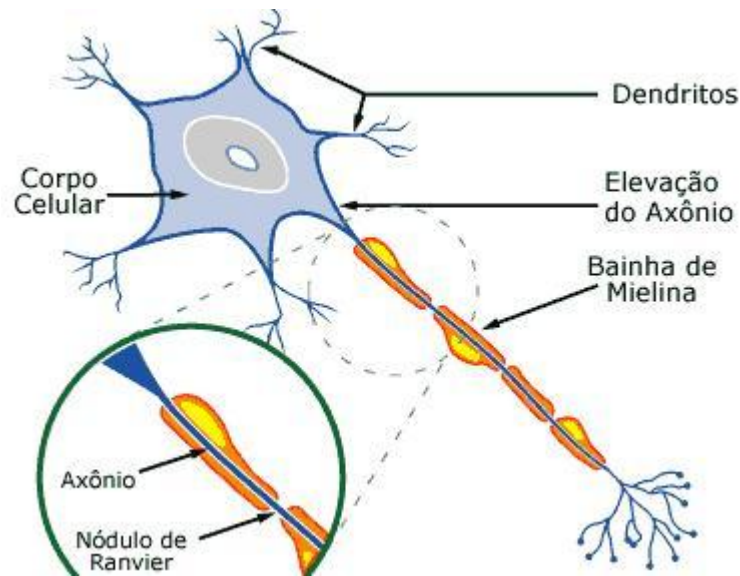
Os neurônios possuem três partes básicas:

- **Corpo celular** - essa é a parte principal, contém todos os componentes necessários da célula, como o núcleo (que contém DNA), retículo endoplasmático e ribossomos (para construir proteínas) e mitocôndria (para produzir energia). Se o corpo celular morrer, o neurônio morre.
- **Axônio** - essa projeção da célula, longa e semelhante a um cabo, transporta a mensagem eletroquímica, impulso nervoso ou potencial de ação, pela extensão da célula; podem ser cobertos por uma fina camada de mielina, como um fio elétrico

com isolamento. A mielina é feita de gordura e ajuda a acelerar a transmissão de um impulso nervoso através de um axônio longo. Os neurônios com mielina costumam ser encontrados nos nervos periféricos (neurônios sensoriais e motores), ao passo que os neurônios sem mielina são encontrados no cérebro e na medula espinhal.

- Dendritos - essas projeções pequenas e semelhantes a galhos realizam as conexões com outras células e permitem que o neurônio se comunique com outras células ou perceba o ambiente a seu redor. Os dendritos podem se localizar em uma ou nas duas terminações da célula.

Na Fig. 3.3 é mostrado um neurônio e seus componentes básicos.



**Figura 3.3** - O neurônio e suas estruturas básicas<sup>18</sup>.

### 3.4. Sinapses Nervosas.

Sinapses nervosas são os pontos onde as extremidades de neurônios vizinhos se encontram e o estímulo passa de um neurônio para o seguinte por meio de mediadores químicos, os neurotransmissores. As sinapses ocorrem no contato das terminações nervosas chamadas axônios, com os dendritos de outro neurônio. O contato físico não existe realmente, pois há um espaço entre elas, denominado de fenda sináptica, onde ocorre a ação dos neurotransmissores. Dos

axônios, são liberadas substâncias, neurotransmissores, que atravessam a fenda e estimulam os receptores pós-sinápticos; existem dois tipos de sinapses, sinapse química, a grande maioria, e as elétricas.

- Sinapse química - acontece quando o potencial de ação, ou seja, o impulso é transmitido através de um mensageiro químico, ou seja, neurotransmissores. O impulso é transmitido em uma única direção. Em comparação com as sinapses elétricas a sinapse química é muito mais lenta. Quase todas as sinapses do nosso sistema nervoso central são químicas.
- Sinapse elétrica - neste tipo de sinapse as células possuem um íntimo contato através junções que permitem o livre transito de íons de uma membrana a outra; desta maneira o potencial de ação passa de uma célula para outra muito mais rápido que na sinapse química. Este tipo de sinapse ocorre no músculo liso e cardíaco, onde a contração ocorre por um todo em todos os sentidos.

A capacidade do ser humano de adquirir conhecimento está ligada diretamente à sinapse nervosa, pois quando aprendemos algo novo pode ocorrer a criação de novas conexões sinápticas ou a modificação de sinapses existentes; isto nos mostra que o conhecimento está armazenado na sinapse nervosa.

### **3.5. Considerações Finais.**

É importante reconhecer que os níveis estruturais de organização descritos aqui são uma característica única do cérebro e não são encontradas em nenhum computador digital e a proximidade para recriá-las em redes neurais artificiais está bem longe de acontecer, mas o que é importante ressaltar é o avanço que as RNAs obtiveram nas duas últimas décadas, devido principalmente à analogia neurobiológica como fonte de inspiração.

# Capítulo 4.

## Redes Neurais Artificiais

### 4.1. Considerações Iniciais.

Em sua forma mais geral, uma rede neural artificial (RNA) é uma máquina que é projetada para modelar a maneira como o cérebro realiza uma tarefa particular ou função de interesse; a rede é normalmente implementada utilizando-se componentes eletrônicos ou é simulada por programação em um computador digital (Haykin, 2001).

Para conseguir um bom desempenho, as redes neurais artificiais (RNAs) utilizam um grande número de interligações entre células computacionais simples chamadas de “neurônios”. Dessa forma, pode-se utilizar a seguinte definição de uma RNA vista como uma máquina adaptativa.

Uma RNA é um processador maciçamente paralelamente distribuído constituído de unidades de processamento simples, que têm a propensão natural para armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para o uso. Ela se assemelha ao cérebro em dois aspectos.

1. O conhecimento é adquirido pela RNA a partir de seu ambiente através de um processo de aprendizagem.
2. Forças de conexão entre os neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar conhecimento adquirido.

O aprendizado é realizado através de um procedimento chamado de algoritmo de aprendizagem, cuja função é modificar os pesos sinápticos da rede de uma forma ordenada para aproximar a resposta da RNA do objetivo do projeto desejado. Os modelos neurais computacionais, as RNAs, procuram aproximar o processamento dos computadores ao cérebro humano.



As RNAs extraem seu poder computacional de sua estrutura maciçamente paralelamente distribuída e de sua habilidade de aprender e portanto generalizar. A generalização se refere ao fato de a RNA produzir saídas adequadas para valores que não foram apresentados anteriormente a ela. Devido a essas capacidades de processamento de informação é que as RNAs podem resolver problemas complexos que são atualmente intratáveis.

Neste capítulo estudamos as redes neurais artificiais. O capítulo está organizado da seguinte forma: na Seção 4.2 são apresentadas as características gerais das redes neurais artificiais; na Seção 4.3 é apresentado o neurônio artificial; na Seção 4.4 discutimos sobre a função de ativação que compõe o neurônio artificial; na Seção 4.5 discutimos sobre as arquiteturas de redes mais comuns; na Seção 4.6 discutimos sobre o treinamento das redes neurais artificiais; na Seção 4.7 discutimos sobre as principais aplicações das redes neurais; na Seção 4.8 são feitas as considerações finais do capítulo.

## **4.2. Características Gerais.**

As RNAs são criadas a partir de algoritmos projetados para uma determinada finalidade. Uma rede neural se assemelha ao cérebro em dois pontos; o conhecimento é obtido através de etapas de aprendizagem e pesos sinápticos são usados para armazenar o conhecimento.

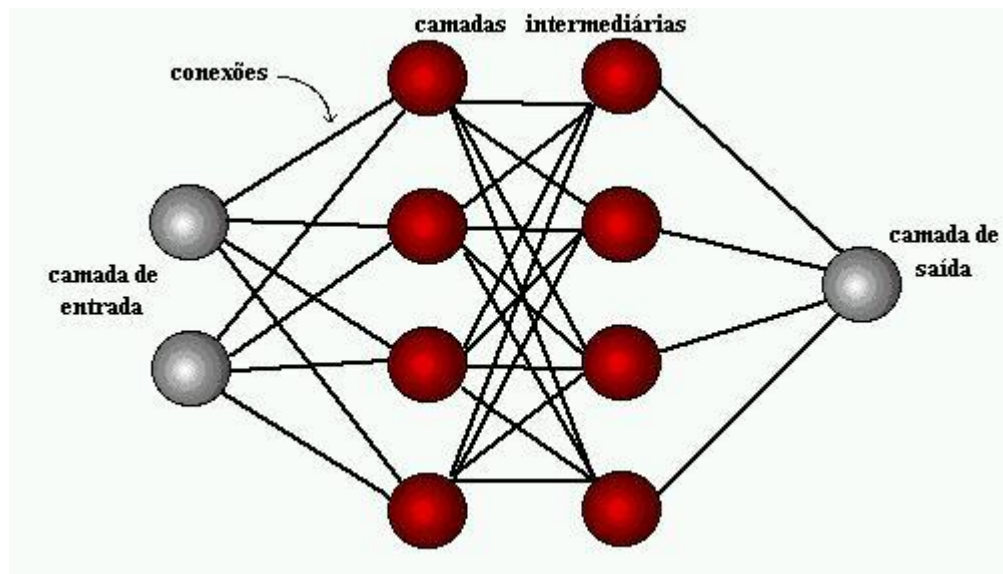
Uma sinapse é o nome dado à conexão existente entre neurônios. Nas conexões são atribuídos valores, que são chamados de pesos sinápticos. Isso deixa claro que as redes neurais artificiais têm em sua constituição uma série de neurônios artificiais que serão conectados entre si, formando uma rede de elementos de processamento.

O neurônio artificial é um dispositivo binário lógico-matemático que procura simular as funções e o comportamento de um neurônio biológico. Assim sendo, os dendritos são substituídos por entradas, onde ligações com o corpo celular artificial são realizadas através de elementos denominados pesos, que simulam as sinapses. Os estímulos captados pelas entradas são processados pela função de soma ponderada dos sinais, e o limiar de disparo do neurônio biológico foi substituído pela função de transferência.

Combinando diversos neurônios artificiais, podemos formar a chamada RNA, cujo diagrama está apresentado na Figura 4.1. A partir de uma RNA formada, uma série de valores

pode ser aplicada sobre um neurônio, sendo que este está conectado a outros pela rede. Estes valores, ou entradas, são multiplicados no neurônio pelo valor do peso de sua sinapse. Então, esses valores são somados.

Se esta soma ultrapassar um valor limite estabelecido, um sinal é propagado pela saída, axônio, deste neurônio. Em seguida, essa mesma etapa se realiza com os demais neurônios da rede. Isso quer dizer que os neurônios vão enfrentar algum tipo de ativação, dependendo das entradas e dos pesos sinápticos.

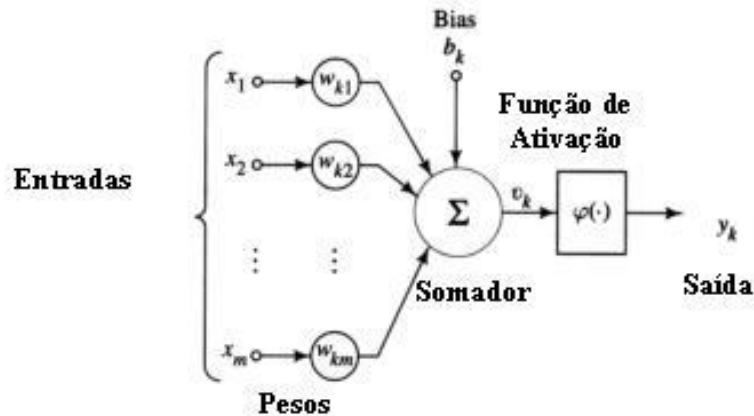


**Figura 4.1-** Representação da arquitetura de uma RNA<sup>24</sup>

Existem várias formas de se desenvolver uma rede neural. Ela deve ser montada de acordo com os problemas a serem resolvidos, para isso deve-se determinar a arquitetura da RNA. Em sua arquitetura é determinado o número de camadas usadas, as camadas são formadas por neurônios, e a quantidade de neurônios em cada camada.

### **4.3. O Neurônio Artificial.**

O neurônio artificial, ou simplesmente neurônio, é a unidade de processamento básica de informação da RNA e é fundamental para operação da mesma. Na Figura 4.2 é mostrado o modelo de um neurônio, que forma a base para o projeto das RNAs; nesta figura podemos identificar os três elementos básicos do neurônio.



**Figura 4.2-** Representação de um neurônio artificial<sup>25</sup>.

1. Conjunto de sinapses – as sinapses são o elo de conexão entre os neurônios, cada uma é caracterizada por um peso. Especificamente um sinal de entrada  $x_j$  na entrada  $j$  conectada ao neurônio  $k$  é multiplicado pelo peso sináptico  $w_{kj}$ . É de grande importância ressaltar como são escritos os índices do peso sináptico  $w_{kj}$ . O primeiro índice se refere ao neurônio em questão e o segundo se refere ao terminal de entrada da sinapse à qual o peso se refere. Há uma diferença no valor do peso sináptico do cérebro e do neurônio artificial, pois no segundo o valor pode estar em um intervalo que inclui valores negativos e positivos.
2. Somador – soma os sinais de entrada, ponderados pelas respectivas sinapses do neurônio; as operações descritas aqui constituem um combinador linear.
3. Função de ativação – A função de ativação pode ser chamada também de função restritiva já que restringe o intervalo de amplitude do sinal de saída. Normalmente, o valor normalizado da amplitude de um neurônio pode ser um valor, no intervalo fechado, entre 0 (zero) e 1 (um) ou entre -1 (negativo um) e 1 (um).

A Figura 4.2 inclui o bias, que está aplicado externamente, representado por  $b_k$ . O bias  $b_k$  tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo se ele é positivo ou negativo, respectivamente.

O neurônio pode ser descrito através das equações matemáticas que se seguem.

$$\mu_k = \sum_{j=1}^m W_{kj} \times X_j$$

$$y_k = \varphi(\mu_k + b_k)$$

Onde  $X_1, X_2, \dots, X_m$  são os sinais de entrada;  $W_{k1}, W_{k2}, \dots, W_{km}$  são os pesos sinápticos do neurônio  $k$ ;  $\mu_k$  é a saída do combinador linear devido aos sinais de entrada;  $b_k$  é o bias;  $\varphi(.)$  é a função de ativação; e  $y_k$  é o sinal de saída do neurônio.

#### 4.4. Função de Ativação.

A função de ativação  $\varphi()$  define a saída de um neurônio. Podem-se identificar três tipos básicos de funções de ativação:

1. Função de Limiar – para este tipo de função temos:

$$y_k = \begin{cases} 1 & \text{se } v_k \geq 0 \\ 0 & \text{se } v_k < 0 \end{cases}$$

onde  $v_k$  é chamado de campo local induzido e definido por:

$$v_k = \sum_{j=1}^m W_{kj} \times X_j + b_k$$

o neurônio que utiliza esta função de ativação como modelo de neurônio de McCulloch-Pitts.

2. Função Linear por Partes – para esta função temos:

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v \geq +0,5 \\ v, & +0,5 > v > -0,5 \\ 0, & v \leq -0,5 \end{cases}$$

3. Função Sigmoide – a função é a mais comum função de ativação utilizada na construção de RNAs. Ela é estritamente crescente e exibe um comportamento não

linear, o que é importante para a resolução de problemas não-lineares. A função é definida da seguinte forma:

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-av)}$$

onde  $a$  é o parâmetro de inclinação da função sigmoide.

4. Função Tangente Hiperbólica – assim como a função sigmoide é uma função com o comportamento não-linear, e é definida por:

$$\varphi(v) = \tanh(v)$$

Existem outras funções de ativação, mas estas são as mais normalmente utilizadas.

## 4.5. Arquitetura de Rede

A maneira pela qual os neurônios de uma RNA estão estruturados relaciona-se diretamente ao tipo de algoritmo de aprendizagem utilizado para treiná-la. De uma forma geral, podemos identificar três classes de arquitetura de RNAs diferentes.

### 4.5.1. Redes Alimentadas Adiante com Camada Computacional Única.

Em uma RNA em camadas, os neurônios estão organizados na forma de camadas. Na forma mais simples de se obter uma RNA em camadas, temos uma camada de entrada de dados, chamados de nós fontes ou nós sensoriais, que não realizam computação alguma sobre os dados; estes nós fontes projetam-se sobre uma camada de nós computacionais, que realizam toda a computação sobre os dados que trafegam na RNA. A camada de nós computacionais, nesta arquitetura de rede, é conhecida por camada de saída de dados. O tráfego dos dados, neste tipo de rede, sempre ocorre da camada de entrada para a camada de saída; por este motivo esta arquitetura de RNA é chamada de redes alimentadas adiante. As redes com as características citadas acima são conhecidas como redes de camada única, sendo que a designação “camada única” se refere à camada de nós computacionais. A camada de entrada não é contada, pois lá não é realizada qualquer computação. Na Figura 4.3 é mostrada uma RNA de camada única.

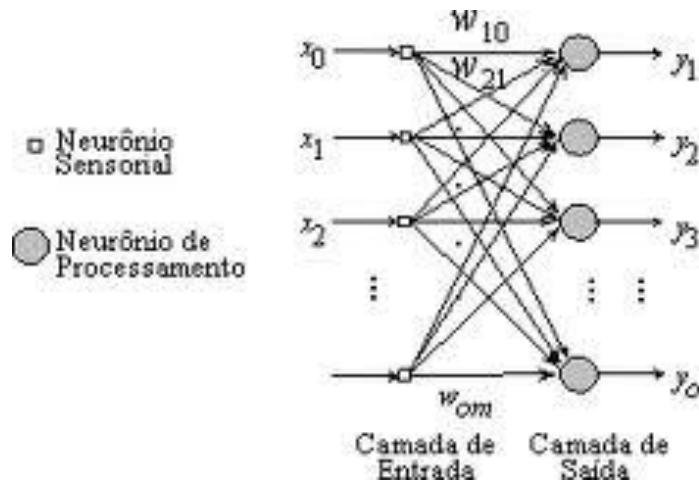


Figura 4.3- Representação de uma RNA de camada única<sup>25</sup>.

#### 4.5.2. Redes Alimentadas Adiante com Múltiplas Camadas.

Esta segunda classe de RNA alimentada adiante se distingue da primeira pela presença de uma ou mais camadas ocultas. Neste caso, a camada de entrada de dados, que nesta arquitetura também não realiza computação sobre os dados se projeta sobre uma camada de nós computacionais, chamados neurônios computacionais e esta camada oculta se projeta sobre outra camada oculta ou sobre a camada de saída de dados. A função dos neurônios ocultos é intervir entre a entrada externa e a saída da rede de maneira útil. Adicionando-se uma ou mais camadas ocultas tornamos a rede capaz de extrair estatísticas de ordem elevada (Haykin, 2001), sendo assim, esta arquitetura de rede é capaz de resolver problemas para as quais a rede de camada única não conseguiria apresentar uma solução.

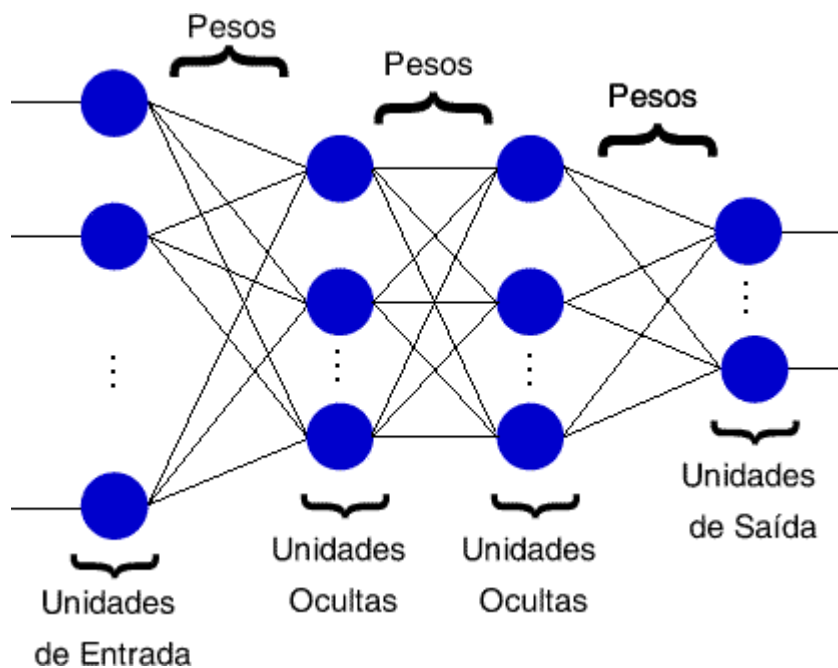
O tráfego de dados neste tipo de arquitetura de RNA ocorre da seguinte forma:

1. Os dados são apresentados à camada de entrada, que fornecem os respectivos elementos do padrão de ativação, que constituem os valores de entrada aplicados aos neurônios da primeira camada oculta.
2. Os valores são processados na primeira camada oculta e são colocados à disposição da segunda camada oculta ou da camada de saída de dados. Caso a RNA possua mais de uma camada oculta de neurônios computacionais, os dados são

apresentados uma camada após a outra, sendo que o sinal de saída de uma camada é entrada da camada posterior, até a camada de saída da RNA.

3. A camada de saída realiza computação sobre os dados que ela recebe e apresenta a resposta.

A RNA da Figura 4.4 é dita totalmente conectada, no sentido que cada um dos nós de uma camada da rede está totalmente conectada a todos os nós da camada adjacente seguinte, mas se alguma conexão entre os nós estiver faltando a RNA é chamada de parcialmente conectada.



**Figura 4.4-** Representação de uma RNA de múltiplas camadas<sup>25</sup>.

### 4.5.3. Redes Recorrentes.

Uma RNA recorrente se distingue de uma RNA alimentada adiante por ter pelo menos um laço de realimentação. Uma RNA recorrente pode possuir uma única camada de neurônios com cada saída de cada neurônio alimentado esta mesma camada. A presença de laços de realimentação tem um impacto grande na capacidade de aprendizagem da RNA e no seu desempenho. Além disso, os laços de realimentação podem ser usados em problemas onde há a

necessidade de se obter dados de um processamento anterior; o laço funciona como uma memória da rede.

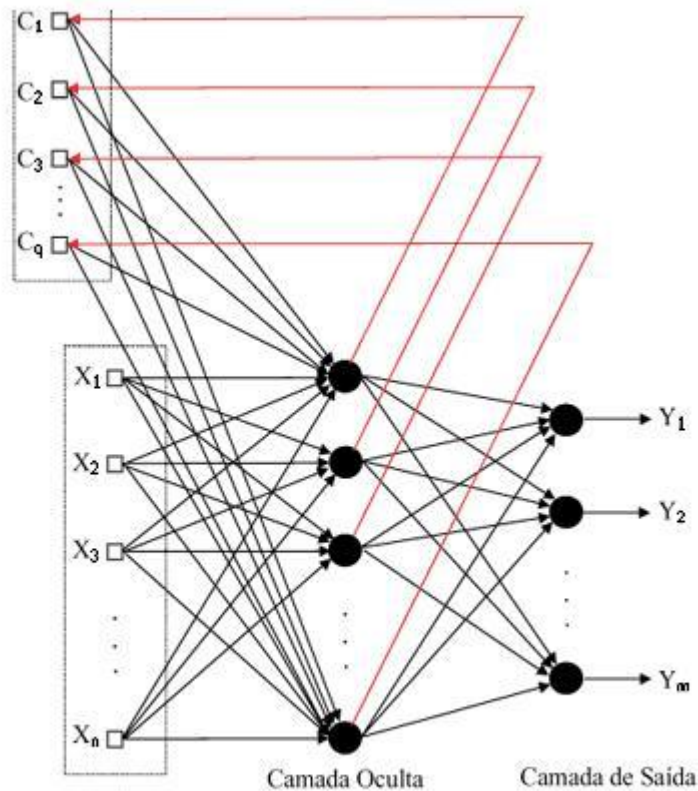


Figura 4.5- Representação de uma RNA recorrente<sup>25</sup>.

## 4.6. Treinamento

A propriedade mais importante das RNAs é a habilidade de aprender e com isso melhorar seu desempenho. Elas aprendem por memorização, contato, exemplos, por analogia, por exploração e também por descoberta. Isso é feito através de um treinamento, processo iterativo de ajustes aplicado aos pesos. O aprendizado ocorre quando a RNA atinge uma solução generalizada para uma classe de problemas.

Denomina-se algoritmo de aprendizado a um conjunto de regras bem definidas para a solução de um problema de aprendizado. Existem muitos tipos de algoritmos de aprendizado



específicos para determinados modelos de RNA; estes algoritmos diferem entre si pelo modo como os pesos são modificados.

O processo de aprendizagem das redes neurais é realizado quando ocorrem várias modificações significantes nas sinapses dos neurônios. Essas mudanças ocorrem de acordo com a ativação dos neurônios. Se determinadas conexões são mais usadas, estas são reforçadas enquanto que as demais são enfraquecidas. É por isso que, quando uma RNA é implantada para uma determinada aplicação, é necessário um tempo para que esta seja treinada. Existem, basicamente, três tipos de algoritmos de aprendizado nas redes neurais artificiais:

(i) Supervisionado; neste tipo, a rede neural recebe um conjunto de entradas padronizado e seus correspondentes padrões de saída, onde ocorrem ajustes nos pesos sinápticos até que o erro entre os padrões de saída gerados pela rede tenha um valor desejado;

(ii) Não-supervisionado; neste tipo, a rede neural trabalha os dados de forma a determinar algumas propriedades do conjunto de dados. A partir destas propriedades é que o aprendizado é constituído;

(iii) Híbrido; neste tipo ocorre uma junção dos tipos supervisionado e não supervisionado. Assim, uma camada pode trabalhar com um tipo enquanto outra camada trabalha com o outro tipo.

## **4.7. Aplicações de Redes Neurais Artificiais.**

Existem inúmeras aplicações para as redes neurais. No mercado financeiro elas são utilizadas para realizar a previsão dos valores das ações e outros prognósticos.

O reconhecimento ótico de caracteres (OCR) é outro tipo de aplicação que já existe e está crescendo, e em breve estaremos em constante contato com esse tipo de aplicação. Outras aplicações bem sucedidas das técnicas de redes neurais artificiais são: análise de pesquisa de mercado, como acima citado, controle de processos industriais, aplicações climáticas, e identificação de fraude de cartão de crédito. Estes sistemas têm a capacidade de reconhecer uso fraudulento com base nos padrões criados no passado com uma precisão melhor que em outros sistemas.

Outro exemplo da utilização de redes neurais para melhoria na tomada de decisões é no diagnóstico médico. Em seu aprendizado, são submetidos uma série de diagnósticos de pacientes, de várias características, com vários sintomas e os resultados de seus testes. Também serão fornecidos os diagnósticos médicos para cada doença. Então quando forem apresentados os dados de um novo paciente, com seus sintomas, a rede fornecerá um diagnóstico para os novos casos. É importante mencionar que com isso o que se pretende é implementar uma ferramenta de auxílio ao médico, e não um programa que o substitua.

Outras aplicações:

- Análise e processamento de sinais;
- Controle de processos;
- Robótica;
- Classificação de dados;
- Reconhecimento de padrões;
- Filtros contra ruídos eletrônicos;
- Análise de imagens e análise de voz;

## **4.8. Considerações Finais.**

As redes neurais são empregadas em várias áreas da ciência, economia e indústria o que torna seu estudo relevante. Neste capítulo foi apresentado um estudo abrangente sobre redes neurais artificiais, mostrando os principais tópicos desta matéria, o que é de fundamental importância para a continuidade do estudo aqui proposto, pois nos capítulos subsequentes abordaremos mais a fundo as redes de múltiplas camadas e a sua utilização para a determinação dos hemometabólitos.

# Capítulo 5.

## Perceptrons de Múltiplas Camadas.

### 5.1. Considerações Iniciais.

Neste capítulo vamos tratar de uma das mais utilizadas e mais importantes arquiteturas de redes neurais artificiais, o perceptron de múltiplas camadas. Este tipo de rede representa uma generalização do perceptron de camada única considerado brevemente no capítulo anterior. Tipicamente, a rede do tipo perceptron de múltiplas camadas consiste de um conjunto de nós de entrada, ou sensoriais, que forma a camada de entrada de dados da rede, uma ou mais camadas ocultas de nós computacionais e uma camada de saída de dados, também formada por nós computacionais.

O perceptron de múltiplas camadas, ou multilayer perceptron (MLP), têm sido usado com grande sucesso para resolver problemas antes considerados intratáveis, em diversas áreas do conhecimento. Por este motivo esta arquitetura de RNA foi escolhida para a determinação de hemometabólitos proposta neste trabalho. Grande parte do sucesso dessa arquitetura de RNA deve-se ao seu treinamento de forma supervisionada com um algoritmo muito popular conhecido como algoritmo de retropropagação de erro (error back-propagation).

O capítulo está organizado da seguinte forma: na Seção 5.2 discutimos o perceptron de múltiplas camadas; na Seção 5.3 estudamos sobre o processo de aprendizagem; na Seção 5.4 discutimos a aprendizagem por correção de erros; na Seção 5.5 estudamos sobre as tarefas da aprendizagem; na Seção 5.6 estudamos o algoritmo de retropropagação de erro; na Seção 5.7 estudamos sobre o desenvolvimento da RNA e finalmente na Seção 5.8 são feitas as considerações finais.

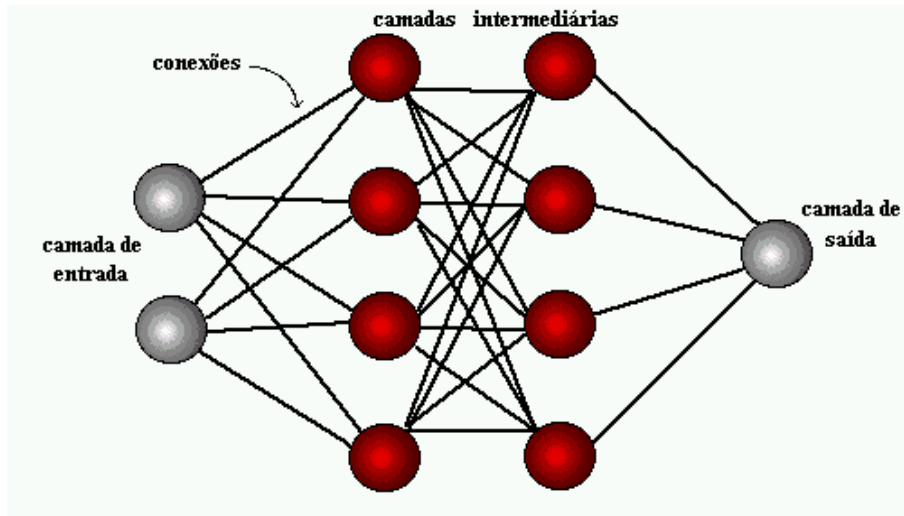
## 5.2. Perceptron de Múltiplas Camadas.

A RNA é um sistema de neurônios ligados por conexões sinápticas e divididos em neurônios de entrada, que recebem estímulos do meio externo, neurônios internos ou ocultos e neurônios de saída, que se comunicam com o exterior. A forma de arranjar os neurônios em camadas distintas é denominada perceptron multicamadas.

O perceptron múltiplas camadas foi concebido para resolver problemas mais complexos, os quais não poderiam ser resolvidos pelo modelo de básico de rede neural que apenas possui a camada de neurônios de entrada e a camada de neurônios de saída; este modelo é conhecido como perceptron de camada única. Os neurônios internos são de suma importância na rede neural, pois provou-se que sem estes torna-se impossível a resolução de problemas linearmente não separáveis.

Um perceptron de múltiplas camadas possui três características marcantes:

1. O modelo de cada neurônio da rede inclui uma função de ativação não linear, mas esta não linearidade é suave, pois a função é diferenciável em qualquer ponto. A presença de uma função não linear é um ponto importante porque do contrário a relação de entrada-saída da rede poderia ser reduzida àquele de um perceptron de camada única.
2. A rede possui uma ou mais camadas de neurônios ocultos, que não fazem parte da entrada ou da saída da rede. São os neurônios ocultos que capacitam a rede a aprender tarefas complexas extraindo progressivamente as características mais significativas dos padrões.
3. Há um alto grau de conectividade na rede determinado pelas sinapses.



**Figura 5.1** - Representação de um perceptron múltiplas camadas<sup>15</sup>.

Usualmente as camadas são classificadas em três grupos:

1. Camada de Entrada: onde os padrões são apresentados à rede;
2. Camadas Intermediárias ou Ocultas: onde é feita a maior parte do processamento, através das conexões ponderadas; podem ser consideradas como extratoras de características;
3. Camada de Saída: onde o resultado final é concluído e apresentado.

### **5.3. Processos de Aprendizagem.**

A definição para processos de aprendizagem é aprender a partir de seu ambiente e de melhorar seu desempenho através da aprendizagem. Em RNA aprendizagem é um processo iterativo de ajustes aplicados a seus pesos sinápticos e níveis de bias. A rede se torna mais instruída sobre o ambiente após cada interação.

A definição de aprendizagem depende da atividade a ela relacionada e não há uma forma precisa para a sua definição. Sendo assim usaremos a definição que é a mais utilizada em RNA.

*Aprendizagem é um processo pelo qual os parâmetros livres de uma rede neural são adaptados através de um processo de estimulação pelo ambiente no qual a rede está inserida. O*

*tipo de aprendizagem é determinado pela maneira pela qual a modificação dos parâmetros ocorre* (Mendel e McClaren, 1970). A aprendizagem segue a seguinte sequência de eventos:

- 1- A rede neural é estimulada por um ambiente.
- 2- Ocorrem mudanças nos parâmetros livres da rede como resultado da estimulação
- 3- Devido às mudanças a rede responde de uma forma ao ambiente

Mas o processo de aprendizagem não ocorre de forma desordenada, ele segue certos passos rígidos que são determinados por um algoritmo, neste caso um algoritmo de aprendizagem, que é um conjunto preestabelecido de regras bem definidas para a solução de problemas.

Há vários tipos de algoritmos de aprendizagem, onde eles se diferem pela forma como os ajustes dos pesos é feito; neste trabalho devido à utilização de redes neurais artificiais alimentadas à adiante conhecidas por MLP (perceptron de múltiplas camadas) o algoritmo de aprendizagem por correção de erros utilizados é conhecido como algoritmo retro propagação de erro.

## **5.4. Aprendizagem por Correção de Erros.**

O neurônio  $k$ , que pertence à camada de saída, é estimulado por um vetor  $x(n)$  que é produzido por uma ou mais camadas de neurônios ocultos, que são, por sua vez acionados por um vetor de entrada, aplicados aos nós fontes da RNA. O sinal de saída do neurônio  $k$  é representado por  $Y_k(n)$ , onde  $n$  é o passo do processo iterativo de ajustes de pesos. Este sinal de saída é comparado com a resposta desejada  $D_k(n)$  e, conseqüentemente, é produzido um sinal de erro  $e_k(n)$ .

$$e_k(n) = D_k(n) - Y_k(n) \quad (5.1)$$

Este sinal de erro  $e_k(n)$  é utilizado com o propósito de se aplicar uma sequência de ajustes corretivos aos pesos sinápticos. Os ajustes corretivos são projetados para aproximar passo a passo o sinal de saída da resposta desejada. Este objetivo é alcançado minimizando uma função de custo,  $\xi_k(n)$ , definido em termos do sinal de erro  $e_k(n)$  como:

$$\xi_k(n) = \frac{1}{2} e_k^2(n) \quad (5.2)$$

Os ajustes passo a passo dos pesos sinápticos do neurônio  $k$  continuam até o sistema atingir um estado estável, neste ponto o processo é encerrado.

A minimização da função de custo,  $\xi(n)$ , resulta da regra de aprendizagem normalmente referida como regra delta. A definição da regra delta é: *O ajuste feito em peso sináptico de um neurônio é proporcional ao produto do sinal de erro pelo sinal de entrada da sinapse em questão* (Haykin, 2001).

$$\Delta W_{kj}(n) = \eta e_k(n)x_j(n) \quad (5.3)$$

Onde  $\eta$  é a taxa de aprendizagem. Tendo calculado o ajuste do peso sináptico  $\Delta W_{kj}(n)$  o valor atualizado do peso sináptico é determinado por:

$$W_{(n+1)} = W_{kj}(n) + \Delta W_{kj}(n) \quad (5.4)$$

A aprendizagem por correção de erros também é conhecida por aprendizagem supervisionada.

Como uma medida de desempenho para o sistema, podemos pensar em termos do erro médio quadrado ou da soma dos erros quadrados sobre a amostra de treinamento, definida como uma função dos parâmetros livres do sistema. Esta função pode ser visualizada como uma superfície de erro, com os parâmetros livres como coordenadas. A verdadeira é obtida pela média sobre todos os exemplos possíveis de entrada-saída.

Para que o sistema melhore seu desempenho ao longo do tempo e, portanto, aprenda, o ponto de operação deve ser movido para baixo sucessivamente em direção ao ponto mínimo da superfície de erro; o ponto mínimo pode ser um mínimo local, que não representa o mínimo da superfície de erro, ou um mínimo global, que é o conjunto de pontos dos valores dos parâmetros livres da rede que geram as respostas desejáveis.

Dessa forma, dado um algoritmo para minimizar a função de custo, um conjunto adequado de exemplos de entrada-saída e tempo suficiente para realizar o treinamento, um sistema de aprendizagem supervisionado é normalmente capaz de realizar tarefas como classificação de padrões e aproximação de funções.

## **5.5. Tarefas de Aprendizagem.**

A escolha de um algoritmo de aprendizagem particular é influenciada pela tarefa de aprendizagem que a rede neural deve executar. No contexto deste trabalho, as duas principais

tarefas de aprendizagem a serem estudadas serão o reconhecimento de padrões e a aproximação de funções.

Os seres humanos são bons no reconhecimento de padrões. Diariamente somos capazes de receber estímulos do ambiente e reconhecer sem o menor esforço a fonte de dados. Podemos, por exemplo, reconhecer um rosto familiar no meio de uma multidão, ou identifica-lo após anos mesmo com seu envelhecimento. Conseguimos identificar a voz de um familiar conhecido ao telefone mesmo com a ligação com ruídos, ou distinguir um alimento bom para o consumo de um podre somente pelo seu cheiro. Os humanos realizam o reconhecimento de padrões através de um processo de aprendizagem; e assim acontece com as redes neurais.

O reconhecimento de padrões é formalmente definido como o processo pelo qual um padrão é atribuído a uma classe dentre um número pré-determinado de classes. Uma rede neural realiza o reconhecimento de padrões passando inicialmente por uma seção de treinamento, durante a qual se apresenta repetidamente à rede um conjunto de padrões de entrada junto com a categoria à qual cada padrão particular pertence. Mais tarde, apresenta-se à rede um novo padrão que não foi visto antes, mas que pertence à mesma população de padrões utilizada para treinar a rede. A rede é capaz de identificar a classe daquele padrão particular por causa da informação que ela extraiu dos dados de treinamento.

Quando falamos de aproximação de função o objetivo é projetar uma rede neural que aproxime uma função desconhecida  $f(\cdot)$  de forma que a função  $F(\cdot)$  que descreve o mapeamento de entrada-saída realmente realizado pela rede esteja suficientemente próxima a  $f(\cdot)$ , em um sentido euclidiano, sobre todas as entradas, como mostrado por:

$$||F(x) - f(x)|| < \epsilon \text{ para todo } x \quad (5.5)$$

onde  $\epsilon$  é um número positivo pequeno. Contanto que o tamanho  $N$  do conjunto de treinamento seja suficientemente grande e que a rede esteja equipada com um número adequado de parâmetros livres, então pode-se fazer o erro aproximativo  $\epsilon$  suficientemente pequeno para a tarefa.



## **5.6. O Algoritmo de Retropropagação de Erro.**

### **5.6.1. Considerações Preliminares.**

O algoritmo de aprendizagem por retropropagação de erro consiste de dois passos através das diferentes camadas da rede: um passo para frente, a propagação, e um passo para trás, a retropropagação. No passo para frente um padrão é aplicado aos nós sensoriais da rede e seu efeito se propaga através da rede, camada por camada. Durante esta fase de propagação os parâmetros livres da RNA, pesos sinápticos e valor de bias, são todos mantidos fixos. Finalmente, um conjunto de saídas é produzido como resposta real da rede. A resposta real da rede é subtraída de uma resposta desejada para produzir um sinal de erro. Este sinal é então propagado para trás através da rede, camada por camada, contra a direção das conexões sinápticas. Os pesos sinápticos são ajustados para fazer com que a resposta real da rede se mova para mais perto da resposta desejada.

O algoritmo de retropropagação de erro é de aprendizado supervisionado, isto é, ele procura achar iterativamente a menor diferença entre as saídas desejadas e as saídas obtidas pela RNA, segundo um erro mínimo. O algoritmo ajusta os pesos entre as camadas através da retropropagação do erro encontrado, isto é, propagando o erro a partir da camada de saída até a camada de entrada, em cada iteração.

### **5.6.2. Sinais que Trafegam na RNA.**

Durante a execução do processo de aprendizagem de uma RNA que utiliza o algoritmo de retropropagação de erro observamos a presença de dois tipos de sinais que trafegam pela rede.

1. Sinais Funcionais – sinal funcional é o sinal de entrada, estímulo para a rede, que incide sobre os nós sensoriais e propaga-se para frente e emerge na camada de saída da rede produzindo uma resposta. Este sinal é chamado de funcional, pois ele realiza uma função útil na rede e em cada neurônio através da rede onde o sinal funcional passa; o sinal é calculado como uma função de suas entradas e pesos

associados, aplicados àquele neurônio. O sinal de entrada é também chamado de sinal de estímulo.

2. Sinais de Erro – um sinal de erro se origina em um neurônio de saída da rede e se propaga para trás, camada por camada, através da rede. Este sinal é chamado de sinal de erro, pois sua computação por cada neurônio da rede envolve uma função dependente do erro.

A presença destes dois tipos de sinais na rede ocorre pelo fato de o neurônio artificial ser projetado para realizar dois tipos de cálculo.

1. O cálculo do sinal funcional que aparece na saída de um neurônio, que é expresso como uma função não-linear do sinal de entrada e dos pesos sinápticos associados aquele neurônio.
2. O cálculo de uma estimativa do vetor gradiente, que é necessário para a retropropagação através da rede.

### 5.6.3 Algoritmo de Retropropagação de Erro.

Considerações iniciais

- Consideramos um método simples de treinamento no qual os pesos sinápticos são atualizados a cada apresentação de um padrão até formar uma época, isto é, uma apresentação completa do conjunto treinamento inteiro. Os ajustes dos pesos são realizados de acordo com os respectivos erros calculados para cada padrão apresentado à rede.
- O neurônio  $j$  é um neurônio da camada de saída da rede.
- Na iteração  $n$  o  $n$ -ésimo padrão de treinamento é apresentado à rede.
- O símbolo  $e_j(n)$  se refere ao sinal de erro na saída do neurônio  $j$ , para a iteração  $n$ .
- O símbolo  $d_j(n)$  se refere à resposta desejada para o neurônio  $j$ .
- O símbolo  $y_j(n)$  se refere à resposta que é produzida pelo neurônio  $j$  na iteração  $n$ .
- O símbolo  $C$  é o conjunto que inclui todos os neurônios da camada de saída.
- O símbolo  $N$  representa o número total de padrões do conjunto de treinamento.
- O símbolo  $w_{ji}(n)$  representa o peso sináptico conectando a saída do neurônio  $i$  à entrada do neurônio  $j$ , na iteração  $n$ .

O sinal de erro na saída do neurônio  $j$ , na iteração  $n$  é definido por:

$$e_j(n) = dj(n) - y_j(n) \quad (5.6).$$

Definimos o valor instantâneo da energia do erro para o neurônio  $j$  como:

$$\frac{1}{2} e_j^2(n) \quad (5.7).$$

O valor instantâneo da energia total do erro que é obtido somando todos os termos  $\frac{1}{2} e_j^2(n)$  de todos os neurônios da camada de saída é definido por:

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} \sum_{j \in C} e_j^2(n) \quad (5.8).$$

A energia média do erro quadrado é obtida somando-se os  $\varepsilon(n)$  para todos os  $n$  e então normalizando em relação ao tamanho do conjunto  $N$ , como mostrado por:

$$\varepsilon_{med} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \varepsilon(n) \quad (5.9).$$

A energia média do erro  $\varepsilon_{med}$  é uma função de todos os parâmetros livres da rede, pesos sinápticos e valores de bias. Para um dado conjunto de treinamento,  $\varepsilon_{med}$  representa a função de custo como uma medida do desempenho de aprendizagem. O objetivo do processo de aprendizagem é ajustar os parâmetros livres da rede de modo a minimizar o valor da função de custo  $\varepsilon_{med}$ .

Considere que o neurônio  $j$  é alimentado por um conjunto de sinais funcionais produzidos por neurônios à sua esquerda; o campo local induzido  $v_j(n)$ , que é soma de todos os pesos multiplicados pelo valor produzido por cada neurônio ligado àquela sinapse, é obtido da seguinte forma:

$$v_j(n) = \sum_{i=0}^m w_{ji}(n) y_i(n) \quad (5.10).$$

onde  $m$  é o número total de entradas aplicadas ao neurônio  $j$ .

Assim, o sinal funcional  $y_j(n)$  que aparece na saída do neurônio  $j$  é:

$$y_j(n) = \varphi_j(v_j(n)) \quad (5.11).$$

O algoritmo de retropropagação aplica uma correção  $\Delta w_{ji}(n)$  ao peso sináptico  $w_{ji}(n)$ , que é proporcional à derivada parcial  $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)}$ . De acordo com a regra da cadeia do cálculo, podemos expressar este gradiente como:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (5.12)$$

A derivada parcial  $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)}$  representa um fator de sensibilidade, determinando a direção de busca no espaço de pesos, para o peso sináptico  $w_{ji}(n)$ .

Diferenciando ambos os lados da Eq. (5.8) em relação à  $e_j(n)$ , obtemos:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \quad (5.13)$$

Diferenciando ambos os lados da Eq. (5.6) em relação à  $y_j(n)$ , obtemos:

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \quad (5.14)$$

Diferenciando a Eq. (5.11) em relação a  $v_j(n)$ , obtemos:

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi'(v_j(n)) \quad (5.15)$$

Diferenciando a Eq. (5.10) em relação a  $w_{ji}(n)$ , obtemos:

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = y_i(n) \quad (5.16)$$

O uso das Eqs. (5.13) a (5.16) em (5.12) produz:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -e_j(n) \varphi'(v_j(n)) y_j(n) \quad (5.17)$$

A correção  $\Delta w_{ji}(n)$  aplicada a  $w_{ji}(n)$  é definida pela regra delta:

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (5.18)$$

onde  $\eta$  é o parâmetro da taxa de aprendizagem do algoritmo de retropropagação. O uso do sinal negativo na Eq. (5.18) indica a descida do gradiente no espaço de pesos, que significa uma busca

para a mudança de peso que reduza o valor de  $\varepsilon(n)$ . Correspondentemente, o uso da Eq. (5.17) em (5.18) produz:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \delta_j(n) y_i(n) \quad (5.19)$$

onde o gradiente local  $\delta_j(n)$  é definido por:

$$\begin{aligned} \delta_j(n) &= - \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial v_j(n)} \\ \delta_j(n) &= \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \\ \delta_j(n) &= e_j(n) \varphi'(v_j(n)) \quad (5.20) \end{aligned}$$

O gradiente local aponta para as modificações necessárias nos pesos sinápticos. A Eq. (5.19) mostra que a regra delta para a correção dos pesos nos neurônios da camada de saída é o produto da taxa de aprendizagem, pelo gradiente local, pelo sinal de entrada do neurônio  $j$ . O gradiente local em um neurônio da camada de saída é facilmente obtido pois seu sinal de erro é facilmente calculado porque cada nó de saída da rede é suprido com uma resposta desejada particular, ou seja, o cálculo do sinal de erro associado é direto.

Quando o neurônio  $j$  está localizado em uma camada oculta da rede, não existe uma resposta especificada para aquele neurônio; sendo assim, o sinal de erro para um neurônio oculto deve ser determinado recursivamente em termos dos sinais de erro de todos os neurônios aos quais o neurônio oculto está diretamente conectado.

A partir deste momento, vamos considerar que o neurônio  $j$  é um neurônio oculto.

A Eq. (5.20) pode ter seu gradiente local redefinido para o neurônio oculto  $j$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \delta_j(n) &= \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \\ \delta_j(n) &= \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} \varphi'(v_j(n)) \quad (5.21) \end{aligned}$$

Para calcular a derivada parcial  $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)}$  podemos proceder da seguinte maneira:

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} \sum_{k \in C} e_k^2(n) \quad (5.22).$$

A Eq. (5.22) é a Eq. (5.8), mas trocamos o índice  $j$  pelo  $k$ , neste momento o neurônio  $j$  é um neurônio oculto e o neurônio  $k$  é um neurônio da camada da saída da rede.

Diferenciando a Eq (5.22) em relação ao sinal funcional  $y_j(n)$ , obtemos:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)} \quad (5.23)$$

Utilizando a regra da cadeia na Eq. (5.23) para a derivada parcial  $\frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}$ , obtemos:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)} \quad (5.24)$$

mas como  $k$  é um neurônio de saída, podemos escrever:

$$\begin{aligned} e_k(n) &= dk(n) - y_k(n) \\ e_k(n) &= dk(n) - \varphi'(v_k(n)) \end{aligned} \quad (5.25)$$

Assim,

$$\frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} = -\varphi'(v_k(n)) \quad (5.26)$$

Como já vimos o campo local induzido para o neurônio  $k$  é calculado da seguinte forma:

$$v_k(n) = \sum_{j=0}^m w_{kj}(n) y_j(n) \quad (5.27)$$

onde  $k$  é um neurônio da camada de saída e  $j$  é um neurônio oculto da camada imediatamente anterior a camada de saída.

Diferenciando a Eq. (5.27) em relação à  $y_j(n)$  produz:

$$\frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)} = w_{kj}(n) \quad (5.28)$$

Utilizando as Eqs. (5.26) e (5.28) em (5.24) obtemos:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = - \sum_k e_k(n) \varphi'(v_k(n)) w_{kj}(n)$$

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = - \sum_k \delta k(n) w_{kj}(n) \quad (5.29)$$

Utilizando a Eq. (5.29) em (5.21), obtemos a formula da retropropagação do gradiente local para um neurônio oculto  $j$ , como descrito:

$$\delta j(n) = \varphi' j(v_j(n)) \sum_k \delta k(n) w_{kj}(n) \quad (5.30)^{22}$$

Dessa forma, utilizando a Eq. (5.19) que descreve a regra delta, que diz que o fator de correção do peso é o produto da taxa de aprendizagem, pelo gradiente local, pelo sinal de entrada do neurônio  $j$ , assim basta substituir o gradiente local calculado na Eq. (5.30) para obter a correção dos pesos de um neurônio oculto.

#### 5.6.4 Taxa de Aprendizagem.

O algoritmo de propagação de erro fornece uma aproximação para a trajetória nos espaços de pesos calculados pelo método da descida mais íngreme. Quanto menor for o parâmetro da taxa de aprendizagem  $\eta$ , menor são as variações dos pesos de uma iteração para outra, e mais suave será a trajetória nos espaços dos pesos, mas se fizermos o valor da taxa de aprendizagem  $\eta$  muito grande, para acelerar a aprendizagem da rede, as grandes modificações nos pesos podem tornar a rede instável. Um método simples de aumentar a taxa de aprendizagem, evitando o perigo da instabilidade, é modificar a regra delta incluindo o termo momento.

A incorporação do termo momento beneficia o aprendizado da rede diminuindo a instabilidade da rede quando a taxa de aprendizagem  $\eta$  tem um valor grande.

### 5.7. Desenvolvimento de uma RNA.

É muito difícil definir a arquitetura ideal das RNAs de forma que ela seja tão grande quanto o necessário para conseguir obter as representações necessárias, e ao mesmo tempo pequenas o suficiente para se ter um treinamento mais rápido. Não existem regras claras para se definir quantos neurônios artificiais deve possuir as camadas intermediárias, quantas camadas devem existir, ou como devem ser cada conexão entre as unidades.

### **5.7.1. Coleta dos Dados.**

O primeiro passo do processo de desenvolvimento de uma RNA é a coleta de dados relativos ao problema e a separação em um conjunto de treinamento e outro de testes. Esta tarefa requer uma análise cuidadosa sobre o problema para não ter ambigüidades e erros nos dados. Além disso, os dados devem ser significativos e cobrir todo o domínio do problema, não devendo cobrir apenas as operações normais ou rotineiras, mas também as exceções e as condições dos limites do domínio do problema.

Normalmente, os dados coletados são separados em duas categorias: dados de treinamento, que são utilizados para o treinamento da RNA e dados de teste, que serão utilizados para verificar o desempenho da RNA sob condições reais de utilização. Além dessa divisão, pode-se também usar uma subdivisão do conjunto de treinamento, criando um conjunto de validação, utilizado para verificar a eficiência da RNA e como critério de parada do treinamento. Depois de determinados os conjuntos, eles são colocados em ordem aleatória para prevenção de tendências associadas à ordem de apresentação dos dados. Além disso, pode ser necessário pré-processar estes dados, através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato para torná-los mais apropriados a sua utilização.

### **5.7.2. Configuração de uma RNA.**

Após coletar os dados é hora da definição da configuração da RNA, que pode ser dividida nas seguintes etapas:

- Seleção de um paradigma neural apropriado à aplicação.
- Determinação da topologia da RNA a ser utilizados (o numero de camadas, o número de neurônios artificiais em cada camada, etc.).
- Determinação de parâmetros do algoritmo de treinamento e funções de ativação. Esta etapa tem um enorme impacto no desempenho do sistema.

Normalmente estas escolhas são feitas de forma experimental. A definição da configuração de RNAs requer grande experiência dos projetistas.

### **5.7.3. Treinamento de uma RNA.**



Nesta fase, seguindo o algoritmo de treinamento escolhido, são ajustados os pesos das conexões. É importante considerar os aspectos tais como a inicialização da RNA, o modo de treinamento e o tempo gasto para treiná-la. Uma boa escolha dos valores iniciais dos pesos da RNA pode diminuir o tempo de treinamento. Normalmente, os valores iniciais dos pesos da rede são números aleatórios uniformemente distribuídos, em um intervalo definido. A escolha errada destes pesos pode levar a uma saturação prematura.

Quanto ao modo de treinamento, na prática o mais utilizado é o modo padrão devido ao menor armazenamento de dados, além de ser menos suscetível ao problema de mínimos locais. Por outro lado, no modo batch se tem uma melhor estimativa do vetor gradiente, o que torna o treinamento mais estável. A eficiência relativa dos dois modos de treinamento depende do problema que está se tratando.

Quanto ao tempo de treinamento, vários fatores podem influenciar na duração, porém sempre utiliza algum critério de parada. No algoritmo backpropagation, o critério de parada não é bem definido, e geralmente é utilizado um número máximo de ciclos. Mas, deve ser considerada a taxa de erro médio por ciclo, e a capacidade de generalização da RNA. Pode ocorrer que em um determinado instante do treinamento, a generalização comece a degenerar, ou seja, causando perda na capacidade de generalização. Assim, deve-se encontrar um ponto ótimo de parada com erro mínimo e capacidade de generalização máxima.

#### **5.7.4. Testes.**

Durante esta fase o conjunto de teste é utilizado para determinar o desempenho da RNA com dados que não foram previamente utilizados. O desempenho da RNA, nesta fase, é uma boa indicação de seu desempenho real.

Devem ser considerados ainda outros testes como análise do comportamento da RNA utilizando entradas especiais e análise dos pesos atuais da RNA, pois se existirem valores muito pequenos, as conexões associadas podem ser consideradas insignificantes e assim serem eliminadas. De modo inverso, valores que forem maiores que os outros poderiam indicar que houve uma perda na capacidade de generalização da RNA.

#### **5.7.5. Integração.**

Finalmente, com a RNA treinada e avaliada, ela pode ser integrada a um sistema do ambiente operacional de aplicação. Para maior eficiência da solução, este sistema deverá conter facilidades de utilização como interface conveniente e facilidades de aquisição de dados através de planilhas eletrônicas, interfaces com unidades de processamento de sinais, ou arquivos padronizados.

E o sistema deve ter, periodicamente, monitorado seu desempenho e deve ser feita a manutenção da rede quando for necessário ou indicar aos projetistas a necessidade de re-treinamento. Outras melhorias podem ser sugeridas quando os usuários forem se tornando mais familiares com o sistema; estas sugestões poderão ser muito úteis em novas versões ou em novos produtos.

## **5.8. Considerações Finais.**

Neste capítulo discutimos sobre as RNAs de múltiplas camadas que utilizam o algoritmo de aprendizagem de retropropagação de erros, algoritmo que emergiu como padrão para o treinamento de perceptrons de múltiplas camadas, pois resolveu de forma elegante o problema de atribuição de crédito. Hoje esta classe de redes neurais é uma das mais utilizadas para resolução de problemas complexos e por este motivo foi a classe de redes neurais escolhida para a determinação de hemometabólitos.

# Capítulo 6.

## Procedimento Experimental e Resultados.

### 6.1. Considerações Iniciais.

Este trabalho tem como objetivo determinar as concentrações de colesterol, ureia e glicose, a partir da reação química que ocorre na superfície de um biossensor amperiométrico, utilizando uma RNA. Para que esse objetivo seja alcançado com exatidão é necessária a obtenção dos dados que correspondem à reação química em questão. Dessa forma, neste capítulo estudamos o procedimento experimental do trabalho e mostrar como os dados que correspondem à reação química entre os hemometabólitos de interesse (colesterol, ureia e glicose) são obtidos e colocados à disposição da RNA.

O procedimento experimental foi dividido basicamente em três etapas. A primeira etapa consistiu da obtenção das curvas da reação dos hemometabólitos com os componentes químicos do biossensor. Na segunda etapa, os dados que representam as curvas foram normalizados e apresentados à RNA. A terceira, e última etapa, do processo experimental consistiu da comparação dos dados de resposta para a validação da RNA desenvolvida e do método de análise de curvas proposto neste trabalho.

## 6.2. Preparação das amostras para obtenção das curvas.

Em um ambiente controlado foram produzidas 181 (cento e oitenta e uma) amostras de cada hemometabólito de interesse (colesterol, ureia e glicose), totalizando 543 amostras.

A partir de uma concentração inicial de 0,2mM(mmol/L) e aumentando seu valor em 0,2mM(mmol/L) até alcançar o valor de 36,2mM(36,2mmol/L) foram preparadas as 181 amostras de cada um dos hemometabólitos; assim, para cada hemometabólito há 181 amostras com concentrações que variam de 0,2mM(mmol/L) a 36,2mM(36,2mmol/L).

Dessa forma, para os três hemometabólitos estaremos cobrindo as concentrações de interesse para a medicina, pois a concentração normal desses componentes sanguíneos é mostradas na tabela 6.1.

Hemometabolito	Concentração de problema em humanos(adultos de ambos os sexos)
<b>Glicose</b>	A concentração de 11,2 mmol/L(200mg/dl de sangue) é o valor normal da glicemia em jejum.
<b>Colesterol</b>	<200 mg/dl(5,2mmol/L) colesterol sanguíneo total normal 200–239 mg/dl(5,2 a 6,2mmol/L) limite de colesterol total >240 mg/dl(6,2 mmol/L) colesterol total alto
<b>Uréia</b>	A concentração normal de ureia no sangue é 8,3 mg/dl(1,4mmol/L)

**Tabela 6.1** – Concentração dos hemometabolitos de interesse para a medicina

Vale lembrar que:

- Uréia > 214 mg/dl (35,6 mmol/L) é um indicativo de insuficiência renal aguda.
- Glicose < 45 mg/dl(2,52 mmol/L) sintomas neurológicos de hipoglicemia, que podem estender-se desde uma diminuição da função cognitiva até a inconsciência.

Glicose > 450 mg/dl (25,2mmol/L)coma diabético devido a falta de insulina.

- Colesterol >240 mg/dl(6,2 mmol/L) risco grave de doença cardíaca.

### 6.3. Obtenção das curvas.

De posse de cada uma das amostras, estas foram colocadas para reagirem com os componentes químicos do biossensor amperiométrico. Como em toda reação química há a transferência de elétrons para a formação de produtos, foi usada uma fonte de tensão/corrente Keitlhey, modelo 237 (K237) que ordena este fluxo de elétrons e produz uma corrente elétrica; os valores dessa corrente quando ordenados em relação ao tempo que foram produzidas formam uma curva de corrente em função do tempo. Dessa forma, a fonte de tensão/corrente Keitlhey, modelo 237 (K237), produz uma resposta que é dada em forma de uma curva de tempo, no eixo das abcissas, medido em segundos, e corrente elétrica, no eixo das ordenadas, medida em amperes. Na Figura 6.1 é mostrada a fonte de tensão/corrente Keitlhey modelo 237 (K237).



**Figura 6.1** – Unidade fonte medidora Keitlhey modelo 237.

O Keitlhey K237 é uma unidade fonte medidora de alta precisão, fundamental à realização de medidas de tensão de 10V a 1100 V, e medidas de corrente de 10 fA a 100 mA, escalas estas fundamentais às medidas de baixos sinais e quaisquer outras que exijam precisão. Para o controle automatizado de aquisição de dados, este instrumento possui interface IEEE-488 padrão, o que permite a programação via computador. Com todas essas características esta unidade fonte

medidora caracteriza com exatidão o ambiente em que um paciente irá medir as concentrações de seus hemometabólitos utilizando um medidor amperométrico comum mostrado anteriormente.

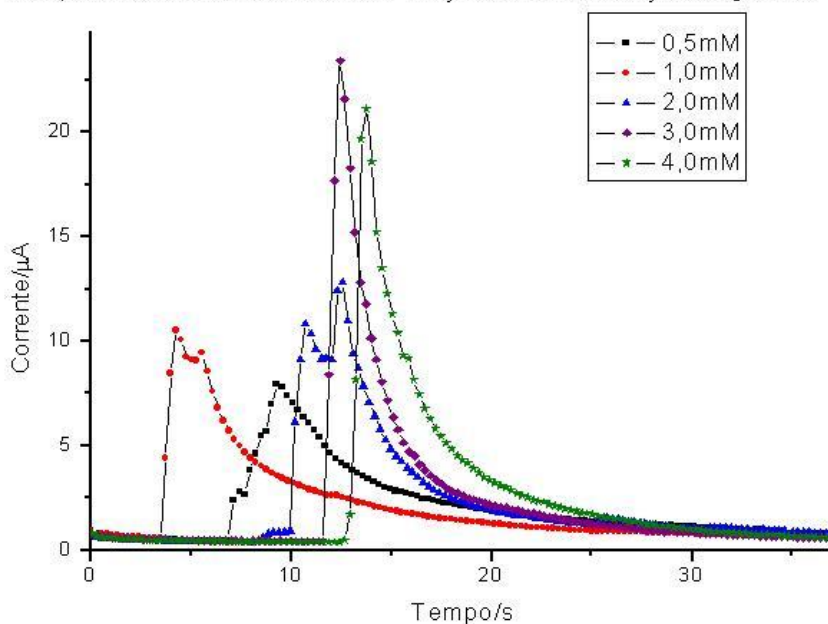
O biossensor, que participou da reação química com os hemometabólitos para a produção das curvas, é mostrado na Figura 6.2.



**Figura 6.2** – Biossensor utilizado para a reação com o heometabolito.

Na Figura 6.3 é mostrado um exemplo das curvas que são obtidas com a reação química entre o hemometabólito e os componentes químicos do biossensor.

Resposta da corrente elétrica em função da concentração de glicose



**Figura 6.3** – Resposta da corrente elétrica em função da concentração de glicose.

## 6.4. Pré-processamento dos dados.

Com a obtenção das curvas, os dados que representam essas curvas foram normalizados para serem apresentados para a RNA para seu teste e validação. Para a normalização dos dados das curvas foram usadas as seguintes técnicas:

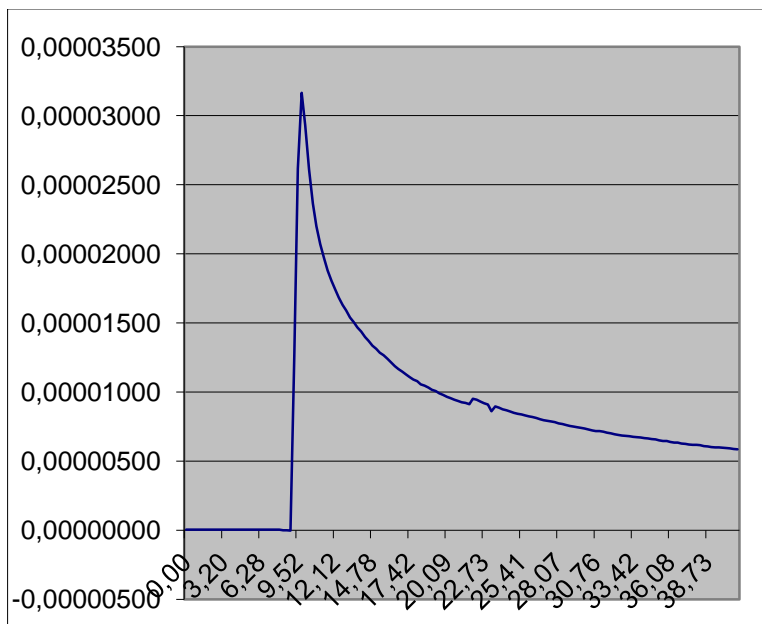
1. Normalização pela faixa de variação, onde o ponto a ser normalizado é subtraído do ponto de menor valor do conjunto, dividido pela diferença entre o maior e menor ponto do conjunto.

$$y = (x - \min) \div (\max - \min) \quad (6.1)$$

2. Normalização pelo desvio padrão, onde o ponto a ser normalizado é subtraído da média do conjunto de pontos e dividido pelo desvio padrão do conjunto de pontos.

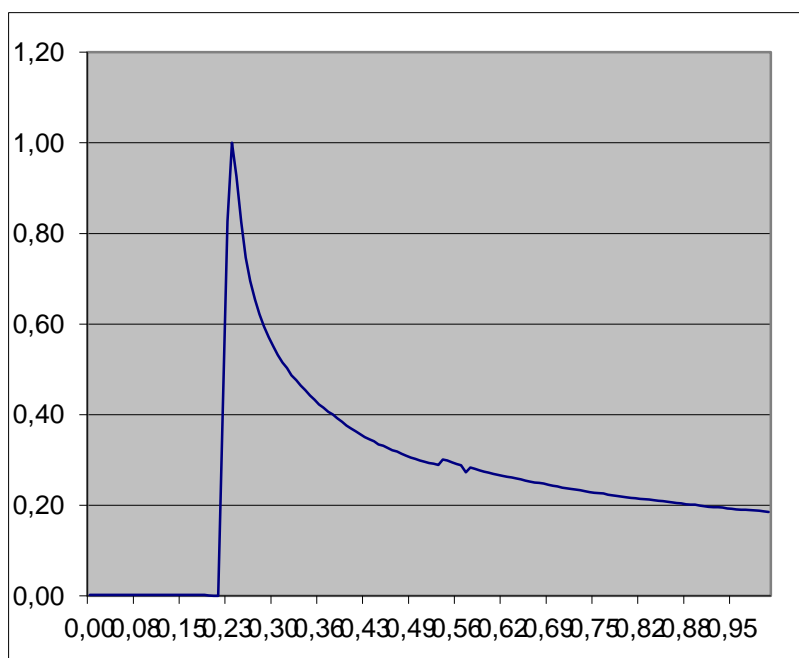
$$y = (x - \mu) \div \sigma \quad (6.2)$$

Essas normalizações foram escolhidas, pois elas mantêm as características das curvas, isto pode ser observado na Figura 6.4, Figura 6.5 e na Figura 6.6, pois mesmo depois de passar pelas transformações as curvas se mantêm com o mesmo formato e suas principais características.



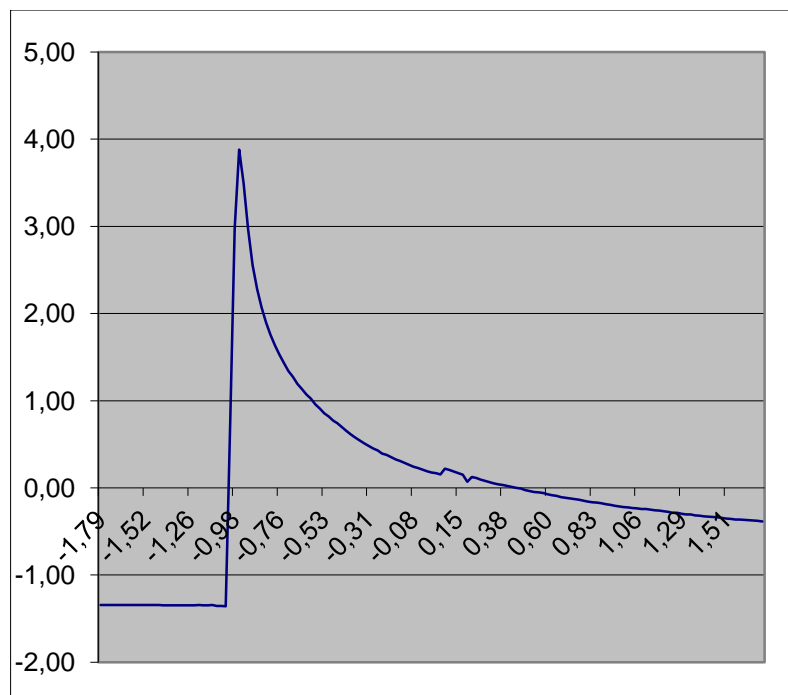
**Figura 6.4** – Gráfico original com os dados da reação de 20mM de colesterol com o reagente do biossensor, produzindo o gráfico de corrente em função do tempo.

O gráfico da Figura 6.4 mostra os valores para a reação entre 20mM de colesterol com o reagente do biossensor. No eixo das abcissas está o tempo em segundos da reação química e no eixo das ordenadas encontra-se a corrente elétrica produzida medida em uA. Os gráficos das Figuras 6.5 e 6.6 possuem os mesmos dados descritos acima, mas os seus eixos estão formatados utilizando a normalização pela faixa de variação e a normalização pelo desvio padrão respectivamente.



**Figura 6.5** – Gráfico com os da reação de corrente pelo tempo da reação de 20mM de colesterol com os eixos normalizados pela normalização pela faixa de variação





**Figura 6.6** – Gráfico com os da reação de corrente pelo tempo da reação de 20mM de colesterol com os eixos normalizados pela normalização pelo desvio padrão.

Os valores da concentração das curvas também foram normalizados utilizando as mesmas técnicas descritas acima, assim, nos testes quando foram utilizados os dados de corrente e tempo normalizados pela faixa de variação e pelo desvio padrão a concentração que representa esta curva também estava normalizado pela mesma técnica.

Os hemometabólitos também foram identificados numericamente, mas como neste caso, o trabalho de identificação da RNA é classificar a curva analisada em umas das três classes de hemometabólito, que estão sendo estudadas neste trabalho, a resposta desejada para a classificação é mostrada na tabela abaixo.

	NEURONIO 1	NEURONIO 2	NEURONIO 3
<b>COLESTEROL</b>	1	0	0
<b>UREIA</b>	0	1	0
<b>GLICOSE</b>	0	0	1

**Tabela 6.2** – Resposta desejada para a classificação das curvas nas três classes de hemometabólitos

## **6.5. Desenvolvimento da RNA.**

Com a finalidade de adquirir conhecimentos sobre redes neurais artificiais um simulador de RNA de múltiplas camadas alimentadas adiante, que utiliza o algoritmo de retropropagação de erro para ajustamento dos valores dos pesos sinápticos foi construído utilizando a linguagem de programação Java, denominado SJRNA.

Para verificar a eficiência e conseguir a validação da RNA desenvolvida foram realizados dois testes comparativos com outros dois simuladores de RNA: o Nets 3.0 e o MATLAB R2008a. Os testes realizados utilizaram bases de dados clássicas na área de redes neurais artificiais: estas bases de dados são:

1. Base de dados de Winsconsin - esta base de dados é formada por um conjunto de nove características de varias células cancerígenas e não cancerígenas. O problema que a RNA deve solucionar é classificar as células em cancerígenas e não cancerígenas utilizando como parâmetros da camada de entrada de dados os valores destas nove características.
2. Base de dados de Fisher - esta base de dados é formada por um conjunto de quatro características de três classes de flor (Setosa, Versicolor e Vigínica) diferentes. O problema que a RNA deve solucionar é classificar uma flor entre os três tipos de classes de flores diferentes.

### **6.5.1. Teste com a base de dados de Winsconsin.**

Três RNAs foram desenvolvidas, uma no MATLABR2008a, outra no Nets 3.0 e outra no simulador SJRNA, essas três RNAs possuindo as seguintes características:

1. Nove neurônios na camada de entrada de dados, estes nove neurônios vão receber as nove características de cada uma das células.
2. Sete neurônios computacionais na camada oculta utilizando a função de ativação sigmoide
3. Um neurônio computacional na camada de saída de dados utilizando a função de ativação sigmoide.

4. O modo de treinamento foi sequencial, isto quer dizer que, a cada apresentação de um conjunto de exemplo ocorria a retropropagação do erro para a correção dos pesos sinápticos.

Os resultados do treinamento são apresentados na Tabela 6.3:

<b>Simulador</b>	<b>Épocas</b>	<b>Acertos na Classificação Maligno</b>	<b>Acertos na Classificação Benigno</b>
<b>SJRNA</b>	1500	98%	97%
<b>Nets 3.0</b>	1500	99%	99%
<b>MATLAB</b>	1200	99%	99%

**Tabela 6.3**– Resultados do teste de Winsconsin

Os resultados mostrados na tabela acima deixam claro que o simulador de RNA, aqui chamado de SJRNA, desenvolvido neste trabalho mostrou-se eficiente na resolução do problema envolvendo a base de dados de Winsconsin.

### **6.5.2. Teste com a base de dados de Fisher.**

Três RNAs foram desenvolvidas, uma no MATLABR2008a, outra no Nets 3.0 e outra no simulador SJRNA com as seguintes características:

1. Quatro neurônios na camada de entrada de dados; estes quatro neurônios receberam quatro características de cada uma das flores.
2. Cinco neurônios computacionais na camada oculta utilizando a função de ativação sigmoide
3. Três neurônios computacionais na camada de saída de dados utilizando a função de ativação sigmoide.
4. O modo de treinamento foi sequencial; isto quer dizer que a cada apresentação de um conjunto de exemplo ocorria a retropropagação do erro para a correção dos pesos sinápticos.

Os resultados do treinamento são apresentados na tabela abaixo:

<b>Simulador</b>	<b>Épocas</b>	<b>Acertos na Classificação de Setosas</b>	<b>Acertos na Classificação de Versicolor</b>	<b>Acertos na Classificação Virgínica</b>
<b>SJRNA</b>	1700	97%	98%	97%
<b>Nets 3.0</b>	1300	99%	99%	98%
<b>MATLAB</b>	1250	99%	98%	99%

**Tabela 6.4** – Resultados do teste de Fisher

Os resultados mostrados na tabela acima deixam claro que o simulador de RNA, aqui chamado de SJRNA, desenvolvido neste trabalho mostrou-se eficiente na resolução do problema envolvendo a base de dados de Fisher

Com os resultados obtidos nos dois testes podemos considerar que o simulador SJRNA pode se utilizado para realizar os testes para a classificação entre as três classes de interesse dos hemometabolitos (colesterol, ureia e glicose) e determinação das concentrações das curvas dos hemometabolitos.

## **6.6. Determinação da Estrutura da RNA.**

Após os dados estarem prontos para serem apresentados aos simuladores de RNA, primeiramente era necessário determinar qual seria a estrutura da RNA a ser utilizada, quantos nós na camada de entrada, ou melhor, quantas variáveis de entrada eram necessárias para a RNA conseguir determinar com precisão qual a concentração do hemometabólito e qual é o hemometabolito que está sendo medido. É também necessário determinar a quantidade de neurônios na camada oculta da rede. E também validar o software de RNA que foi desenvolvido durante este trabalho para sua futura utilização nesta e em outras pesquisas. Para esta finalidade foi utilizado o Nets 3.0 e o MATLAB R2008a, dois programas conceituados que trabalham com redes neurais.

### 6.6.1. Separação dos Dados para a Formação dos Grupos.

Para o início dos testes, devido ao grande número de curvas que estavam disponíveis, 543 (quinhentos e quarenta e três) curvas no total, 181 (cento e oitenta e uma) para cada hemometabólito, as curvas foram divididas em três grupos. Um grupo chamado de teste, com 327 (trezentos e vinte e sete) curvas, com 109 (cento e nove) curvas de cada hemometabólito, que foi utilizado para a aprendizagem da RNA, 60% (sessenta por cento) do total de curvas. Outro grupo chamado de validação com 108 (cento e oito curvas), 20% (vinte por cento) do total de curvas, 36 (trinta e seis) curvas de cada hemometabólito, este grupo foi utilizado para verificar se os valores dos parâmetros livres da RNA, pesos sinápticos, momentum e taxa de aprendizado fazem com que a RNA determine qual hemometabólito está sendo medido e qual a sua concentração. E outro grupo chamado de controle, também com 108 (cento e oito) curvas com 36 (trinta e seis) curvas de cada hemometabólito, 20% (vinte por cento) do total de curvas, para ratificar os valores dos parâmetros livres obtidos.

	COLESTEROL	URÉIA	GLICOSE	TOTAL
<b>TESTE</b>	109	109	109	327
<b>VALIDAÇÃO</b>	36	36	36	108
<b>CONTROLE</b>	36	36	36	108
<b>TOTAL</b>	181	181	181	543

**Tabela 6.5** – Formação dos grupos teste, validação e controle.

### 6.6.2. Apresentação dos dados para a RNA e Realização dos Testes.

Os dados foram apresentados da seguinte forma para a realização dos testes:

- O modo de treinamento foi sequencial; isto quer dizer que, a cada apresentação de um conjunto de exemplo, ocorria a retropropagação do erro para a correção dos pesos sinápticos.
- Durante a fase de treinamento da RNA as curvas de colesterol, uréia e glicose eram apresentadas alternadamente para a RNA, mas respeitando uma ordem crescente do valor da concentração.

- Para a validação e controle as curvas eram apresentadas de forma aleatória para a RNA.
- Os dados utilizando as duas normalizações foram apresentados, mas nos primeiros testes as repostas utilizando a normalização pela faixa de variação mostraram-se melhores, devido esta normalização produzir resultados com valores entre 0 (zero) e 1 (um) o que facilita o processo de aprendizagem da RNA(SCHALKOFF,97), assim, os dados normalizados pelo desvio padrão não foram utilizados nos teste.

### **6.6.3. Primeiro Teste.**

Para todos os testes a RNA utilizada é o perceptron de múltiplas camadas com alimentação adiante utilizando o algoritmo de retropropagação do erro para ajuste dos pesos sinápticos. Para o primeiro teste foi utilizada a seguinte estrutura da RNA:

- Camada de entrada de dados com dois neurônios, para receber os pares ordenados (corrente elétrica, tempo).
- Uma camada oculta com 10 (dez) neurônios computacionais e com a função de ativação não linear sigmoide.
- A camada de saída com 4 (quatro) neurônios computacionais e com função de ativação não linear sigmoide.
- Taxa de aprendizagem igual a 0,6 e momentum igual a 0,3.

Foram utilizados três simuladores de redes neurais diferentes para o desenvolvimento das RNAs, uma desenvolvida utilizando o MATLAB R2008a, outra utilizando o Nets 3.0 e a terceira utilizando o software de RNA desenvolvido durante este trabalho. As RNAs desenvolvidas com o MATLAB R2008a e com o Nets 3.0 estão sendo utilizadas neste trabalho para, também, verificar o desempenho do software de RNA desenvolvido neste trabalho, este software está sendo chamado de SJRNA no texto. Os resultados obtidos no primeiro teste estão descritos na Tabela 6.6.

<b>Simulador</b>	<b>Épocas</b>	<b>Acertos da Concentração</b>	<b>Acertos do Hemometabolito</b>
<b>SJRNA</b>	3500	0%	100%
<b>Nets 3.0</b>	3500	0%	100%
<b>MATLAB</b>	3500	0%	100%

**Tabela 6.6** – Resultados do primeiro teste

O valor de 100% de acerto é considerado da seguinte forma, por exemplo:

- Considerando a concentração de 5,2 mmol e 5,4 mmol seus valores normalizados são 0,138889 e 0,144444.

- Considera-se que houve um erro quando o resultado da subtração do valor produzido pela RNA e o valor esperado for superior a 0,001, este erro é suficiente para que a RNA consiga determinar com precisão o valor da concentração, pois a menor diferença entre os valores de duas concentrações seguidas é de 0,004; e para a determinação a qual classe de hemometabolito a curva pertence este erro é bastante satisfatório, pois existem apenas três classes a serem verificadas e a pior saída produzida pela rede possuía os seguintes valores: (0,9989 / 0,00108 / 0,001783) produzida no primeiro teste.

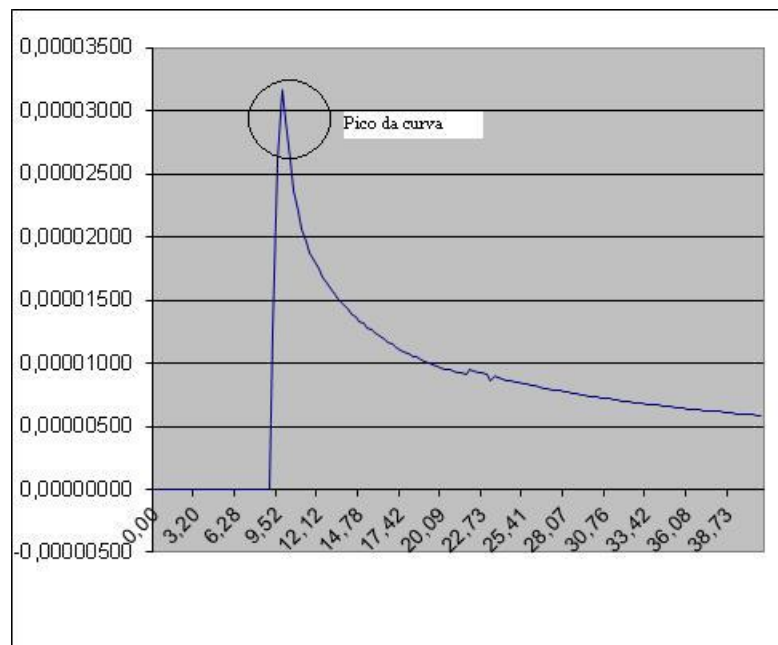
As três RNAs utilizadas no primeiro teste se mostraram muito eficientes quanto à identificação de qual hemometabólito pertenciam os pontos da curva analisadas, mas não conseguiram identificar a concentração de cada curva, isto ocorreu devido à existência de grande quantidade de pares ordenados (corrente, tempo) pertencerem a mais de uma mesma curva. Outro problema encontrado foi a demora em realizar um treinamento, pois cada curva é constituída de 140 pares ordenados (corrente, tempo), dessa forma, a necessidade de diminuir a quantidade de dados a serem apresentadas para a RNA foi observada e também a necessidade de introduzir outras variáveis para que a RNA tenha um desempenho razoável na identificação da concentração.

#### 6.6.4. Segundo Teste.

Para o segundo teste, devido as necessidades de diminuir a quantidade de pares ordenados que representam cada curva e a introdução de novas variáveis para melhorar o desempenho da RNA as seguintes mudanças no conjunto de treinamento e na estrutura da RNA foram realizadas:

- Para cada curva foram calculados a área do pico da curva e a sua altura e esses dois dados passaram a ser utilizados como parâmetros de entrada da RNA aumentando o número de entradas de dois para quatro.

- Para diminuir o número de pares ordenados que representam cada curva somente os pares ordenados do pico foram utilizados, dessa forma, cada curva passa ser representada por 40(quarenta) pares ordenados(corrente, tempo).



**Figura 6.7** – O pico da curva sendo mostrado em evidencia.

Com as mudanças a configuração das RNAs ficou da seguinte forma:

- Camada de entrada com 4 (quatro) neurônios para receber os parâmetros área do pico da curva, altura do pico da curva e os pares ordenados tempo e corrente.
- Camada oculta com 10 (dez) neurônios computacionais e com a função de ativação não linear sigmóide.



- A camada de saída com 4 (quatro) neurônios computacionais e com função de ativação não linear sigmóide.

- Taxa de aprendizagem igual a 0,6 e momentum igual a 0,3.

Os resultados, obtidos com a introdução dessas mudanças, são observados na Tabela 6.7.

<b>Simulador</b>	<b>Épocas</b>	<b>Acertos da Concentração</b>	<b>Acertos do Hemometabolito</b>
<b>SJRNA</b>	1300	97%	100%
<b>Nets 3.0</b>	1500	99%	100%
<b>MATLAB</b>	1100	99%	100%

**Tabela 6.7**– Resultados do segundo teste.

O valor de 100% de acerto é considerado da seguinte forma, por exemplo:

- Considerando a concentração de 5,2 mmol e 5,4 mmol seus valores normalizados são 0,138889 e 0,144444.

- Considera-se que houve um erro quando o resultado da subtração do valor produzido pela RNA e o valor esperado for superior a 0,001; este erro é suficiente para que a RNA consiga determinar com precisão o valor da concentração, pois a menor diferença entre os valores de duas concentrações seguidas é de 0,004; e para a determinação a qual classe de hemometabolito a curva pertence este erro é bastante satisfatório, pois existem apenas três classes a serem verificadas e a pior saída produzida pela rede possuía os seguintes valores: (0,9989 / 0,00108 / 0,001783) produzida no primeiro teste.

Os dados apresentados mostram que as mudanças que foram feitas são essenciais para a realização de determinação dos valores das concentrações das curvas, pois no pior resultado a RNA obteve um acerto de 97%.

### **6.6.5. Terceiro Teste.**

No terceiro teste todas as mudanças realizadas no segundo teste foram mantidas, mas com a diferença que foram utilizadas duas RNAs diferentes, uma para determinar a concentração e uma para determinar a qual classe de hemometabolito pertencia à curva analisada. A RNA utilizada para determinar a qual classe pertencia à curva a ser analisada é da seguinte forma:

- Camada de entrada com 4 (quatro) neurônios para receber os parâmetros área do pico da curva, altura do pico da curva e os pares ordenados tempo e corrente.
- Uma camada oculta com 10 (dez) neurônios computacionais e com a função de ativação não linear sigmóide.
- A camada de saída com 3 (três) neurônios computacionais e com função de ativação não linear sigmóide.
- Taxa de aprendizagem igual a 0,6 e momentum igual a 0,3.

Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 6.8:

Simulador	Épocas	Acertos na classificação do Hemometabolito
<b>SJRNA</b>	1500	100%
<b>Nets 3.0</b>	1300	100%
<b>MATLAB</b>	1100	100%

**Tabela 6.8** – Resultados do teste com RNA para determinação da classe da curva.

A RNA utilizada para determinar a concentração da curva analisada é da seguinte forma:

- Camada de entrada com 4 (quatro) neurônios para receber os parâmetros área do pico da curva, largura do pico da curva e os pares ordenados tempo e corrente.
- Camada oculta com 10 (dez) neurônios computacionais e com a função de ativação não linear sigmóide.
- A camada de saída com 1 (um) neurônio computacional e com função de ativação não linear sigmóide.
- Taxa de aprendizagem igual a 0,6 e momentum igual a 0,3.

Os resultados, obtidos com a introdução dessas mudanças, são observados na Tabela 6.9:

Simulador	Épocas	Acertos na determinação da concentração do Hemometabolito
<b>SJRNA</b>	1800	100%
<b>Nets 3.0</b>	1500	100%
<b>MATLAB</b>	1300	100%

**Tabela 6.9** – Resultados do teste com RNA para determinação da concentração da curva.

O valor de 100% de acerto é considerado da seguinte forma, por exemplo:

- Considerando a concentração de 5,2 mmol e 5,4 mmol seus valores normalizados são 0,138889 e 0,144444.

- Considera-se que houve um erro quando o resultado da subtração do valor produzido pela RNA e o valor esperado for superior a 0,001, este erro é suficiente para que a RNA consiga determinar com precisão o valor da concentração, pois a menor diferença entre os valores de duas concentrações seguidas é de 0,004; e para a determinação a qual classe de hemometabolito a curva pertence este erro é bastante satisfatório, pois existem apenas três classes a serem verificadas e a pior saída produzida pela rede possuía os seguintes valores: (0,9989 / 0,00108 / 0,001783) produzida no primeiro teste.

A separação em duas RNAs se mostrou eficiente, pois a partir deste momento as RNAs passaram a acertar todas as concentrações e classes de hemometabolitos das curvas analisadas. E o simulador de RNA desenvolvido neste trabalho mostrou-se eficiente o que o habilita para ser usado em outros trabalhos futuros.

# Capítulo 7

## Conclusão.

### **7.1. Considerações Iniciais.**

Neste trabalho estudamos o desenvolvimento de uma RNA para classificar os hemometabólito e determinar suas concentrações. Durante o desenvolvimento deste trabalho foram mostradas todas as etapas necessárias para a obtenção dos parâmetros que a RNA utiliza para fazer a classificação das curvas de hemometabólitos nas três classes de interesse, colesterol, ureia e glicose e também como foram obtidos os parâmetros necessários para a determinação, com precisão, da concentração de cada hemometabólito.

Neste capítulo são feitas as considerações finais do trabalho. O capítulo está organizado da seguinte forma: na Seção 7.1 falamos sobre as contribuições do trabalho e na Seção 7.2 falamos sobre as perspectivas de trabalhos futuros.

### **7.2. Contribuições do trabalho.**

A fase de aquisição e pré-processamento dos dados necessários para a resolução de nosso problema é a que requer mais tempo e conhecimento do domínio do problema, para a que a RNA produza uma resposta correta para a resolução do problema. Isso deve-se ao fato de que, frequentemente, os dados que são fornecidos para a RNA não são suficientes para que ela obtenha um treinamento adequado e forneça, ao final do treinamento, um conjunto de valores dos pesos sinápticos que façam com que a RNA convirja para um espaço de respostas que contenha valores adequados para a resolução do problema.

A fase de pré-processamento dos dados se torna mais importante pelo fato de que a RNA deste trabalho não utiliza qualquer informação externa, com exceção dos próprios dados para classificar os padrões e determinar suas concentrações. Dessa forma a qualidade dos resultados obtidos é amplamente determinada pela qualidade dos dados de entrada. Isso faz com que o pré-processamento de dados seja não somente uma fase trabalhosa, mas também uma fase que requer pesquisa e planejamento, uma vez que é uma fase crítica.

Pertence a fase de pré-processamento dos dados a normalização destes. Existem vários métodos para a normalização dos dados, mas devido à necessidade de que esta normalização não alterasse a estrutura das curvas características das concentrações dos hemometabólitos, foram escolhidas dois métodos de normalização de dados:

1. Normalização pela faixa de variação.
2. Normalização pelo desvio padrão.

Todos os dados obtidos em laboratório utilizando o método descrito no capítulo 6 foram submetidos a estes dois métodos de normalização para que a RNA produzisse um conjunto de pesos sinápticos que resolvesse o problema proposto.

### **7.2.1. Primeiro Teste.**

No primeiro teste a RNA possuía as seguintes características:

1. Dois neurônios na camada de entrada. As curvas dos hemometabólitos eram representadas por 140(cento e quarenta) pares ordenados de corrente em função do tempo, por este motivo foram utilizados dois neurônios na camada de entrada, um que recebe o valor do tempo e outro que recebe o valor da corrente elétrica produzida naquele tempo.
2. Camada oculta com 10(dez) neurônios computacionais.
3. Camada de saída com 4(quatro) neurônios computacionais.

O treinamento da RNA foi feito de maneira sequencial e depois de 3500 épocas, o limite para a convergência da RNA, os resultados obtidos para a classificação das curvas foram satisfatório, pois todas as curvas foram classificadas de forma correta nas três classes de interesse (colesterol, ureia e glicose), mas em nenhum momento a RNA conseguiu precisar com exatidão a concentração das curvas. Isto nos mostra a necessidade do retorno ao processo de pré-

processamento de dados para selecionar mais dados relevantes sobre as curvas para serem utilizados como parâmetros de entrada da RNA para que ela apresente respostas satisfatórias.

Além de não apresentar resultados satisfatórios a RNA houve uma grande demora para o término do treinamento, cerca de 300 segundos.

### **7.2.2. Segundo Teste.**

No retorno ao pré-processamento dos dados a primeira necessidade a ser observada foi a de diminuir a quantidade de pares ordenados que representam cada curva, por este motivo, que para cada curva consideramos os pontos do pico de cada curva que possuem 40(quarenta) pares ordenados de corrente em função do tempo.

A segunda necessidade observada era a de introduzir novos parâmetros para a entrada da RNA para que ela produza melhores resultados, mas como foi dito anteriormente, estes novos parâmetros devem ter sua origem nos próprios valores que deram origem as curvas, ou seja, nos pares ordenados corrente em função do tempo, por este motivo, a altura do pico e a área do pico foram introduzidas como parâmetros de entrada da RNA.

No segundo teste a RNA possuía as seguintes características:

1. Quatro neurônios na camada de entrada: dois para receberem os pares ordenados corrente em função do tempo e os outros para receberem a área do pico da curva e a altura do pico da curva.
2. Camada oculta com 10(dez) neurônios computacionais.
3. Camada de saída com 4(quatro) neurônios: um para responder sobre a concentração da curva e os outros três para responderem a classe de hemometabólito a qual a curva pertence.

O treinamento da RNA foi feito de maneira sequencial e os resultados obtidos no Capítulo 6 mostraram que a introdução de novos parâmetros na camada de entrada da RNA a tornaram eficiente para a realização da classificação e determinação a concentração de cada curva. Isto nos mostra a importância da definição dos parâmetros de entrada da RNA que é realizado durante o pré-processamento dos dados.

### 7.2.3. Terceiro Teste.

No terceiro teste os parâmetros, altura do pico e área do pico da curva, foram mantidos como parâmetros de entrada na RNA, mas neste teste ao invés de utilizar uma única RNA para determinar a concentração das curvas e classificá-las entre as classes de hemometabólitos de interesse (colesterol, ureia e glicose) foram utilizadas duas RNAs distintas: uma para classificar as concentrações e outra para classificar as curvas.

A RNA utilizada para determinar as concentrações das curvas possui a seguinte configuração:

1. Quatro neurônios na camada de entrada: dois para receberem os pares ordenados corrente em função do tempo e os outros para receberem a área do pico da curva e a altura do pico da curva.
2. Camada oculta com 10(dez) neurônios computacionais.
3. Camada de saída com 1(um) neurônio: para responder sobre a concentração da curva.

A RNA utilizada para classificar as curvas entre as classes de interesse possui a seguinte configuração:

1. Quatro neurônios na camada de entrada: dois para receberem os pares ordenados corrente em função do tempo e os outros para receberem a área do pico da curva e a altura do pico da curva.
2. Camada oculta com 10(dez) neurônios computacionais.
3. Camada de saída com 3(três) neurônios: os três neurônios são utilizados para classificar a curva segundo a tabela abaixo.

	NEURONIO 1	NEURONIO 2	NEURONIO 3
<b>COLESTEROL</b>	1	0	0
<b>UREIA</b>	0	1	0
<b>GLICOSE</b>	0	0	1

**Tabela 7.1** – Resposta desejada para a classificação das curvas nas três classes de hemometabólitos

O treinamento da RNA foi feito de maneira sequencial e os resultados obtidos no capítulo 6 mostraram que a introdução de novos parâmetros na camada de entrada das RNAs e a especialização delas fizeram com que os resultados apresentados fossem melhores que os apresentados no segundo teste.

#### **7.2.4. Outras Contribuições.**

O método aqui descrito para a determinação dos hemometabólitos pode ser utilizado para a determinação de outros componentes biológicos do sangue humano o que irá permitir a criação de outros dispositivos para a determinação de outros componentes do sangue, este método descrito também pode ser utilizado para solucionar outros problemas envolvendo curvas características que podem apenas utilizar como parâmetros de entrada da RNA dados referentes aos pontos que formam a curva.

A RNA que foi programada e desenvolvida para realizar a determinação dos hemometabólitos será colocada à disposição da comunidade científica para o seu aprimoramento e futuramente ela poderá se tornar mais um simulador de RNA disponível para estudos acadêmicos.

### **7.3. Trabalhos Futuros.**

Uma vez definida a arquitetura da RNA apropriada para a resolução do problema proposto neste trabalho e obtendo-se o conjunto de valores dos pesos sinápticos, pode-se criar um dispositivo para controle do biossensor multi-enzimático para monitoração dos hemometabólitos (colesterol, ureia e glicose). Dessa forma, foi possível a definição de um circuito semicondutor do tipo Field Programmable Gate Array – FPGA, programado com a linguagem de descrição hardware para circuito integrado de alta velocidade VHDL ("VHSIC Hardware Description Language" ou linguagem de descrição de hardware VHSIC - Very High Speed Integrated Circuits) o que permite a construção de um dispositivo de baixo custo, portátil e eficiente para a



avaliação do teor dos hemometabólitos estudados, resultando no depósito de patente de todo o processo desenvolvido.

Sistemas inteligentes para o monitoramento de hemometabólitos representam um elevado potencial de crescimento mercadológico. Os biossensores já têm sido utilizados para tal finalidade, contudo, ainda é grande o número de pessoas que ainda não têm acesso ao monitoramento dos níveis de glicose, colesterol e uréia, devido ao alto custo dos dispositivos atuais. Neste sentido, espera-se que o presente trabalho possa despertar o interesse para o desenvolvimento de biossensores nacionais.

As perspectivas de continuidade deste trabalho repousam sobre a perspectiva de desenvolvimento de um biossensor nacional pela indústria que seja mais barato e para acesso a toda população que necessite de monitoração constante.

# Referências Bibliográficas

[1] Burtis, C. A.; Ashwood, E. R. Tietz: Fundamentos de Química Clínica. 4 ed. Rio de Janeiro: Guanabara, 1998, 836 p.

[2] Wilson, G.S.; Gifford, R. Biosensor for real-time in vivo measurements. Biosensors and Bioelectronics, n. 20, p. 2388-2403, 2005.

[3] Fernandes, E.G.R. Biossensores nanoestruturados para monitoração de glicose. 2005. 175 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – Universidade Federal de Itajubá. Orientador: Prof. Dr. Álvaro A.A. de Queiroz.

[4] Stryer, L.; Berg, M.J.; Tymoczko, L.J. Bioquímica. Guanabara Koogan, 2002. Cinética enzimática. Disponível em [http://pt.wikipedia.org/wiki/Cin%C3%A9tica\\_enzim%C3%A1tica](http://pt.wikipedia.org/wiki/Cin%C3%A9tica_enzim%C3%A1tica). Acessado em 25 out. 2009.

[5] BOYER, R. Concepts in Biochemistry, 2 ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto: John Wiley & Sons, 2002, p. 137–138.

[6] FERREIRA, J. P. M. Segredos da Catalise enzimática. Boletim de Biotecnologia. Universidade Católica Portuguesa, Porto. p. 22-29.

[7] Domingos, J.B.; Longhinotti, E.; Machado, V.G.; Nome, F. A química dos ésteres de fosfato. Química Nova, São Paulo, v. 26, n. 5, Set./Out. 2003.

[8] Carrijo, R.M.C.; Romero, J.R. Oxidações catalíticas e eletrocatalíticas de substratos orgânicos. O cério como oxidante. Química Nova, v. 23, n. 3, 2000.

[9] Schmidt, H.L.; Gutberlet, F.; Schuhmann, W.; Sens. Actuators B. p. 13-14, 366 p., 1993.

[10] OKAWA, Y.; NAGANO, M.; HIROTA, S.; KOBAYASHI, H.; OHNO, T.; WATANABE, M. Bios. Bioelect. v. 14, 229 p., 1999.

[11] BERCHMANS, S.; VIJAYAVALLI, R. Surface Modification of Glassy Carbon by Riboflavin. Langmuir. n.11, p. 286-290, 1995.

[12] Sotomayor, M.D.P.T.; Kubota, L.T. Enzymeless biosensors: uma nova área para o desenvolvimento de sensores amperométricos. Química Nova, v. 25, n 1, p. 123-128, 2002.

[13] Coiera, E.W. Inteligência Artificial na Medicina Disponível em <http://dfm.ffclrp.usp.br/infobio/ceib/texto4.php> Acessado em 25 out. 2009.

[14] Gongora, A.D. O Que é Inteligência Artificial. Disponível em <http://www.pr.gov.br/batebyte/edicoes/2002/bb119/estagiario.htm>. Acessado em 25 out. 2009.

[15] Uma introdução às Redes Neurais. Disponível em <http://www.din.uem.br/ia/neurais/> Acessado em 25 out. 2009.

[16] Neural Networks. Disponível em <http://www.zsolutions.com/Neural.htm>. Acessado em 25 out. 2009.

[17] Portal da mente e do cérebro. Disponível em [http://www.encyclopedia.com.pt/articles.php?article\\_id=729](http://www.encyclopedia.com.pt/articles.php?article_id=729). Acessado em 10 fev. 2010

[18] Nosso cérebro, estrutura dos neurônios. Disponível em <http://saude.hsw.uol.com.br/cerebro1.htm>. Acessado em 10 fev 2010.

[19] Filho, Edson Costa de Barros Carvalho., Modelagem, Aplicações e Implementações de redes Neurais. Anais da IV Escola Regional de Informática da SBC Regional Sul, 21 a 27 de abril de 1996. Páginas 36 - 53.

[20] Barreto, Jorge M., Introdução às Redes Neurais Artificiais. Anais V Escola Regional de Informática da SBC Regional Sul, 5 a 10 de maio de 1997. Páginas 41 - 71.

[21] Freeman, James A./Skapura, David M., Neural Networks - Algorithms, Applications and Programming Techniques. Loral Space Information Systems and Adjunct Faculty, School of Natural and Applied Sciences University of Houston at Clear Lake.

[22] Haykin, Simon., Redes Neurais Principios e Prática. Tradução: Paulo Martins Engel, 2. Ed, Porto Alegre, Bookman, 2001.

[23] Mendel, J. M., e R. W. McLaren, 1970. "Reinforcement-learning control and pattern recognition systems" in Adaptive Learning, and Pattern Recognition: Theory and Applications, vol 66, J. M. Mendel e K. S. FU, eds., New York: Academic Press.

[24] Redes Neurais Artificiais. Disponível em <http://www.icmc.usp.br/~andre/research/neural/>  
Acessado em 10 fev. 2010.

[25] Redes Neurais Artificiais. Disponível em <http://www.natcomp.com.br/lvcon/tema?tema=2>.  
Acessado em 10 fev. 2010.