

Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação

Extensões e Aplicações de Redes Neuro-Imunológicas

Autor: Helder Knidel

Orientador: Prof. Dr. Fernando José Von Zuben

Co-orientador: Prof. Dr. Leandro Nunes de Castro

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica. Área de concentração: **Engenharia de Computação**.

Banca Examinadora

Fernando José von Zuben, Dr. DCA/FEEC/Unicamp
Aluizio Fausto Ribeiro Araújo, Dr. UFPE
Gilmar Barreto, Dr. DMCSI/FEEC/Unicamp
Renato da Rocha Lopes, Dr. DECOM/FEEC/Unicamp

Campinas, SP

Abril/2006

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

Knidel, Helder

K74e Extensões e Aplicações de Redes Neuro-Imunológicas

Helder Knidel. – Campinas, SP:

[s.n.], 2006.

Orientadores: Fernando José Von Zuben; Leandro Nunes de Castro.

Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas,
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação.

1. Sistema Imune (Simulação por Computador).
 2. Redes Neurais Artificiais. 3. Mineração de Dados (Computação).
 4. Análise de Dados. 5. Inteligência Artificial
- I. Von Zuben, Fernando José. II. de Castro, Leandro Nunes. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação.
IV. Título

Título em Inglês: Extensions and applications of neuro-immune network

Palavras-chave em Inglês: Immune systems, Artificial neural networks, Data mining,
Data analysis, Artificial intelligence.

Área de concentração: Engenharia de Computação

Titulação: Mestre em Engenharia Elétrica

Banca examinadora: Aluizio Fausto Ribeiro Araújo, Gilmar Barreto, Renato da Rocha Lopes

Data da defesa: 10/04/2006

Programa de Pós Graduação: Engenharia Elétrica

COMISSÃO JULGADORA – DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Candidato: Helder Knidel

Data da Defesa: 10 de abril de 2006

Título da Tese: “Extensões e Aplicações de Redes Neuro-Imunológicas.”

Prof. Dr. Fernando José Von Zuben (Matr. 263958): Fernando José Von Zuben
Prof. Dr. Aluizio Fausto Ribeiro Araujo: Aluizio Fausto Ribeiro Araujo
Prof. Dr. Gilmar Barreto: Gilmar Barreto
Dr. Renato da Rocha Lopes: Renato da Rocha Lopes
Secretário(a) Edson Vicente Sanches Filho: Edson V. Sanches Filho
Coordenador de PG Prof. Dr. Michel Daoud Yacoub: Michel Daoud Yacoub

Resumo

Esta dissertação propõe a extensão e desenvolvimento de ferramentas imuno-inspiradas. As ferramentas desenvolvidas destinam-se à resolução de problemas de agrupamento e classificação de dados com atributos binários ou reais. Inspirados em idéias advindas do sistema imunológico, os algoritmos propostos apresentam robustez e soluções parcimoniosas. Uma característica comum presente nas ferramentas desenvolvidas é a definição automática do número de protótipos por meio de estágios de clonagem e poda. Baseado na projeção de protótipos, empregando uma técnica de escalonamento multidimensional, desenvolveu-se uma ferramenta de visualização de redes imunológicas com dados numéricos multivariados, com o propósito de obter uma descrição da estrutura global dos grupos, visualizar a presença e forma de grupos, descobrir protótipos pouco representativos e identificar *outliers*. Por fim, a aplicação de um algoritmo proposto em conjunto com uma heurística desenvolvida e um algoritmo de busca local iterativa solucionou de forma inovadora um problema relacionado à área de equalização de canais em telecomunicações.

Palavras-chave: Agrupamento e Classificação de Dados, Sistema Imunológico Artificial, Reconhecimento de Padrões, Compressão de Dados, Equalização de Canais.

Abstract

This thesis considers the extension and development of immune-inspired tools. The developed tools are devoted to the resolution of clustering and classification problems with binary or real-valued data attributes. Inspired by ideas of the immune system, the considered algorithms have produced robust and parsimonious solutions. A common feature in the developed tools is the automatic definition of the number of prototypes by means of cloning and pruning stages. Based on the projection of prototypes, using a technique of multidimensional scaling, a visualization tool of immune networks with multivariate numerical data was developed, making it possible to get a description of the global structure of the groups, to visualize the presence and form of groups, to discover low representative prototypes and to identify outliers. Finally, a device composed of one of the tools considered above, a dedicated heuristic and an algorithm for iterative local search was developed. The application of this device solved in an innovative way a problem related to channel equalization.

Keywords: Data Clustering, Data Classification, Artificial Immune Systems, Pattern Recognition, Data Compression, Channel Equalization.

Ao meu pai Ricardo José Knidel (in memorian), minha mãe Maria Cicilia Krohling Knidel, meu irmão Heber Knidel e minha irmã Raquel Knidel.

Agradecimentos

Este espaço é dedicado àqueles que deram a sua contribuição para que esta dissertação fosse realizada. A todos eles deixo aqui o meu agradecimento sincero.

Ao meu orientador e ao meu co-orientador, Profs. Fernando José Von Zuben e Leandro Nunes de Castro, respectivamente, sou grato pela proposição do tema de pesquisa, ensinamentos e compreensão em todos os momentos.

A toda minha família, pelo apoio irrestrito durante esta jornada.

Aos meus amigos do Laboratório de Bioinformática e Computação Bio-inspirada (LBiC), pela ótima convivência, apoio e cooperação.

Aos amigos, pela proveitosa, alegre e positiva convivência: Célio, Clodoaldo, Eurípedes, George, Guilherme, Hamilton, Leandro Loss, Marcelo, Mariana, Pablo, Renan, Renato, Tiago e Wilfredo.

Aos amigos do Laboratório de Processamento de Sinais para Comunicações (DSPCom), pela cooperação científica.

Aos demais colegas de pós-graduação, pelas críticas e sugestões.

Ao meu tio Renato Krohling, por ter me incentivado e apoiado na minha vida científica.

Aos membros da banca, pelas valiosas sugestões.

À FAPESP, pelo apoio financeiro sob processo número 03/10326 – 9.

A todos os professores e funcionários da FEEC.

Sumário

Lista de Figuras	xv
Lista de Tabelas	xix
Glossário	xxi
Lista de Acrônimos e Siglas	xxi
Lista de Símbolos	xxiii
Trabalhos Publicados Pelo Autor	xxv
1 Introdução	1
1.1 Análise de Dados	2
1.1.1 Agrupamento de Dados	4
1.1.2 Classificação de Dados	5
1.2 Objetivos e Contribuições	5
1.3 Organização do Texto	6
2 Redes Neuro-imunológicas	9
2.1 Conceitos Imunológicos Envolvidos	9
2.1.1 Espaço de Formas	9
2.1.2 Afinidade	10
2.1.3 Seleção clonal	12
2.1.4 Maturação de Afinidade	14

2.1.5	Teoria da Rede Imunológica	14
2.2	Redes Neurais Artificiais	16
2.3	Trabalhos Relacionados	16
2.3.1	Redes Auto-organizadas com Topologia Variável Aplicadas a Agrupamento .	16
2.3.2	Redes Imunológicas Aplicadas à Classificação	18
2.3.3	Ferramenta de Visualização de Redes Imunológicas	19
2.4	ABNET	20
2.5	AINET	21
2.6	Redes Imunológicas, Neurais e Neuro-Imunológicas	22
3	Extensões e Visualização de Redes Neuro-imunológicas	27
3.1	Rede de Anticorpos com Valores Reais (RABNET)	27
3.1.1	Fase de competição	28
3.1.2	Processo de crescimento	28
3.1.3	Processo de Poda	30
3.1.4	Atualização dos Anticorpos	30
3.1.5	Critério de Convergência	31
3.1.6	Determinação do Número de Grupos	31
3.1.7	Algoritmo de Adaptação	32
3.2	SRABNET: Uma Rede Neuro-imunológica Supervisionada	33
3.2.1	Fase Competitiva	34
3.2.2	Crescimento da Rede	34
3.2.3	Poda da Rede	35
3.2.4	Atualização dos Anticorpos	36
3.2.5	Critério de convergência	36
3.2.6	Algoritmo de Adaptação	38
3.3	SAINET: Uma Rede Imunológica Supervisionada	38
3.3.1	Introdução	38
3.3.2	SAINET: AINET Supervisionada	39
3.3.3	Algoritmo de Adaptação	40

3.4	Ferramenta para Visualização de Redes Imunológicas com Dados Numéricos Multi-variados	42
3.4.1	Introdução	42
3.4.2	Descrição da Ferramenta de Visualização Desenvolvida	42
4	Resultados e Discussões	47
4.1	Avaliação de Desempenho da RABNET	47
4.1.1	Conjunto de dados Animais	48
4.1.2	Conjunto de Dados Duas Espirais	52
4.1.3	Conjunto de Dados Anéis Entrelaçados	53
4.2	Análise de Sensibilidade da RABNET	55
4.3	Avaliação de Desempenho da SRABNET	56
4.3.1	Conjunto de Dados Artificiais	57
4.3.2	Conjunto de Dados Reais	59
4.3.3	Compressão de Dados	61
4.4	Avaliação de Desempenho da SAINET	62
4.5	Resultados Obtidos com a Ferramenta de Visualização	65
4.5.1	Visualização dos Grupos do Conjunto de Dados Iris	66
4.5.2	Conjunto de dados Vinho	66
5	Algoritmo de agrupamento híbrido aplicado à equalização não-supervisionada de canais	71
5.1	Sistemas de Comunicação	71
5.2	Equalização Bayesiana e Agrupamento	73
5.3	Uma Abordagem Híbrida Combinando a RABNET e o Algoritmo <i>K-means</i> com Busca Local	75
5.3.1	Estágio de Pré-agrupamento	75
5.3.2	Heurística	75
5.3.3	Algoritmo de Busca Local Iterativa (BLI)	76
5.4	Resultados e Discussão	77

6	Conclusões e Trabalhos Futuros	83
6.1	Conclusões a Respeito da RABNET	83
6.2	Conclusões a Respeito da SRABNET	84
6.3	Conclusões a Respeito da SAINET	84
6.4	Conclusões sobre a Ferramenta de Visualização	84
6.5	Trabalhos Futuros	85
	Referências Bibliográficas	86
A	Árvore Geradora Mínima	95

Lista de Figuras

1.1	Análise de dados contemplando os processos de agrupamento e classificação.	3
2.1	Reconhecimento via regiões de complementariedade: uma visão pictórica.	10
2.2	No espaço de formas S , existe uma região V na qual o anticorpo ($\bullet$) e o antígeno ($\mathbf{x}$) estão localizados. Um anticorpo é capaz de reconhecer qualquer antígeno que esteja situado em uma região V_ϵ em torno de si.	12
2.3	Princípio da seleção clonal. (Os formatos distintos dos anticorpos correspondem a representações pictóricas distintas.)	13
2.4	Identificadores moleculares e teoria da rede. (a) A porção de um antígeno que é reconhecida por um anticorpo é chamada epítopo. Enquanto os anticorpos são monoespecíficos, os antígenos podem apresentar vários epítopos distintos. (b) Molécula de anticorpo destacando paratopo e idiotopo. (c) Respostas positiva e negativa resultantes da interação de um paratopo com um idiotopo ou um epítopo.	15
2.5	Passos principais da ABNET.	21
2.6	Componentes básicos: a) Anticorpos (redes imunológicas) e b) Neurônio artificial (redes neurais artificiais).	23
3.1	Processo de crescimento da rede e rotulação da classe do novo anticorpo.	35
3.2	Uso de uma janela de convergência para avaliar o critério de parada do algoritmo. . .	36
3.3	Dinâmica da janela de convergência e atualização da rede de referência.	37
3.4	Interface da ferramenta de visualização e suas respectivas funcionalidades.	45
4.1	Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 10^{-6}$	49

4.2	Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 1$	50
4.3	Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 2$	51
4.4	(a) Conjunto de dados; e (b) distribuição espacial dos neurônios e grupos obtidos pela aplicação da RABNET aos dados das Duas Espirais.	52
4.5	Conjunto de dados Anéis Entrelaçados.	54
4.6	Resultados da aplicação da RABNET ao conjunto de dados Anéis Entrelaçados. . . .	54
4.7	Análise da influência do valor do parâmetro σ na rede, considerando $\sigma = 0, 1, \sigma = 0,5$ e $\sigma = 0,95$	56
4.8	Análise da influência do valor do parâmetro γ na rede, considerando $\gamma = 20, \gamma = 100$ e $\gamma = 200$	57
4.9	Número médio de anticorpos na camada de saída em função da taxa de aprendizagem inicial e do limiar de afinidade, para o conjunto de dados Anéis Entrelaçados.	58
4.10	Aplicação da SAINET a um conjunto de dados artificial. Evolução da rede ao longo dos processos de crescimento e atualização de pesos.	60
4.11	Desempenho de classificação de treinamento, considerando redes de diferentes tamanhos.	61
4.12	Evolução da rede. a) a d) Etapa não-supervisionada, a qual procura posicionar protótipos ao longo da distribuição dos dados. e) a h) Etapa supervisionada, a qual usa informações contida nos rótulos dos dados e dos protótipos para refinar a posição dos protótipos de cada classe.	64
4.13	Visualização dos protótipos e grupos a partir da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris.	67
4.14	Visualização da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris sem a participação do protótipo 4.	68
4.15	Visualização da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris, sem a participação do protótipo 6.	68
4.16	Visualização dos protótipos fornecidos pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Vinho.	69

4.17	Visualização somente dos protótipos considerados representativos dentre os fornecidos pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados vinho. Considerou-se protótipos representativos aqueles que mapeiam mais de 3 padrões de entrada.	70
5.1	Esquema genérico de comunicação.	72
5.2	Utilização de um equalizador num sistema de comunicação.	72
5.3	Grupos encontrados pela RABNET (estágio de pré-agrupamento) considerando os dados do canal $H1(z)$	78
5.4	Grupos encontrados pela RABNET (estágio de pré-agrupamento) considerando os dados do canal $H2(z)$	79
5.5	Estados do canal automaticamente obtidos para $H1(z)$	80
5.6	Estados do canal automaticamente obtidos para $H2(z)$	81
A.1	a) Conjunto de vértices com os pesos associados. b) Árvore Geradora Mínima relativa ao conjunto de vértices da parte (a).	96
A.2	Árvore Geradora Mínima com suas respectivas distâncias euclidianas.	97
A.3	Sub-grupos formados após a poda do único ramo considerado inconsistente.	97

Lista de Tabelas

2.1	Características das redes neurais artificiais e redes imunológicas artificiais.	24
4.1	Conjunto de dados Animais com nomes e seus respectivos atributos binários [Ritter & Kohonen, 1989].	48
4.2	Resultado de classificação para o conjunto de dados Duas Espirais (baseados em [Kasabov, 2002] e [de Castro & Von Zuben, 2001]).	52
4.3	Relação entre o número de neurônios da rede e o limiar de afinidade ϵ para o conjunto de dados Animais.	55
4.4	Características dos conjuntos de dados utilizados.	59
4.5	Resultados de Classificação dos 3 Algoritmos (AIRS1, AIRS2 e SRABNET) quando aplicados a três conjuntos de dados reais. TCC: Taxa de Classificação Correta; NA: Número de Anticorpos.	62
4.6	Valores de P e t considerando o t -test com nível de confiança igual a 0,95.	62
4.7	Porcentagem de compressão de dados para os 3 conjuntos de dados considerados. . .	63
4.8	Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Iris.	63
4.9	Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Diabetes.	63
4.10	Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Sonar.	65
4.11	Resultados de classificação dos 3 algoritmos (AIRS2, SRABNET e SAINET) quando aplicados a três conjuntos de dados reais. TCC: Taxa de Classificação Correta; NA: Número de Anticorpos na Rede.	65
4.12	Comparativo de desempenho da SAINET em relação a outros classificadores.	65
5.1	Heurística responsável pela estimativa do número de estados.	76

Lista de Acrônimos e Siglas

ABNET	- <i>AntiBody NETwork</i>
AGM	- <i>Árvore Geradora Mínima</i>
AINE	- <i>Artificial Immune NETwork</i>
AINET	- <i>Artificial Immune Network</i>
AIRS	- <i>Artificial Immune Recognition System</i>
AIVIS	- <i>Artificial Immune network VISualisation</i>
BLI	- <i>Busca Local Iterativa</i>
BRA	- <i>Bola de Reconhecimento Artificial</i>
ESOM	- <i>Evolving Self-Organizing Map</i>
GCS	- <i>Growing Cell Structures</i>
GG	- <i>Growing Grid</i>
GNG	- <i>Growing Neural Gas</i>
GWR	- <i>Growing When Required</i>
LRPNP	- <i>Limiar de Reconhecimento de Padrões Não-Próprios</i>
LVQ	- <i>Learning Vector Quantization</i>
MAP	- <i>Maximum A Posteriori Probability</i>
MDS	- <i>Multi-Dimensional Scaling</i>
MST	- <i>Minimun Spanning Tree</i>
PCA	- <i>Principal Component Analysis</i>
PSOM	- <i>Pruning Self-Organizing Map</i>
RABNET	- <i>Real Valued Antibody NETwork</i>
RNA	- <i>Rede Neural Artificial</i>
SAINET	- <i>Supervised Artificial Immune NETwork</i>
SOM	- <i>Self Organizing Map</i>
SRABNET	- <i>Supervised Real Valued Antibody NETwork</i>

Lista de Símbolos

λ	- Número de iterações entre duas etapas de crescimento da rede
S	- Espaço de formas
L	- Dimensão de um conjunto de dados
m_i	- i -ésimo atributo de um conjunto de dados
Ab_i	- i -ésimo anticorpo da rede
Ag_i	- i -ésimo antígeno do conjunto de dados
ϵ	- Limiar de afinidade entre antígeno e anticorpo
V_i	- Nível de concentração do i -ésimo anticorpo
γ	- Número de iterações a partir da qual a taxa de aprendizagem diminui
α	- Taxa de aprendizagem
σ	- Fator que multiplica a taxa de aprendizagem
p	- Número de ramos vizinhos (profundidade de análise) considerados no cálculo de ramos inconsistentes
l	- Número de redes consideradas (tamanho da janela de convergência)
k	- Índice do anticorpo mais similar
$Classe(x)$	- Classe a qual o elemento x pertence

Trabalhos Publicados pelo Autor

1. Knidel, H., de Castro, L. N., Von Zuben, F. J., *Data Clustering with a Neuro-immune Network*. Lecture Notes in Computer Science, Volume 3610, pages 1279-1288, (2005).
2. Knidel, H., de Castro, L. N., Von Zuben, F. J., *RABNET: a real-valued antibody network for data clustering*. Proceedings of the Conference on Genetic and Evolutionary Computation (GECCO), volume 1, pages 371-372, (2005).
3. da Silva, A. E. A., Villanueva, W. J. P., Knidel, H., Bonato, V., dos Reis, S. F., Von Zuben, F. J., *A multi-neighbor-joining approach for phylogenetic tree reconstruction and visualization*. Genetic and Molecular Research. 4 (3), pages 525-534 (2005).
4. Lima, C. A. M., Ferrari R., Knidel, H., Junqueira, C., Attux, R. R. F., Romano, J. M. T., Von Zuben, F. J., *Support Vector Clustering Applied to Digital Communications*. Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), pages 1642-1648 (2006).
5. Knidel, H., de Castro, L. N., Von Zuben, F. J., *A Supervised Constructive Neuro-Immune Network for Pattern Classification*. Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), pages 2083-2089 (2006).
6. Knidel, H., Ferrari, R., Duarte, L. T., Suyama, R., Attux, R. R. F., Von Zuben, F. J., Romano, J. M. T., *A Hybrid Unsupervised Clustering Algorithm for Channel Equalization*. Proceedings of IEEE Workshop on Machine Learning for Signal Processing, pages 459-464 (2006).
7. Bezerra, G. B., Barra, T. V., Ferreira, H. M., Knidel, H., de Castro, L. N., Von Zuben, F. J., *An Immunological Filter for Spam*. Proceedings of the International Conference on Artificial Immune Systems (ICARIS), pages 446-458 (2006).

Capítulo 1

Introdução

“ A natureza é o único livro que oferece um conteúdo valioso em todas as suas folhas.”

Johann Goethe

Este capítulo fornece uma introdução às principais características relacionadas à análise de dados tratadas nesta dissertação, mais especificamente: agrupamento e classificação de dados. Por fim, os objetivos, as contribuições e a estrutura da tese são partes integrantes deste capítulo.

A partir da descoberta de vários princípios e teorias sobre os sistemas naturais e o desenvolvimento de diversos modelos relacionados ao funcionamento dos mesmos, pesquisadores de áreas como engenharia e computação perceberam que era possível usar estes princípios, teorias e modelos para a implementação de sistemas computacionais com grande potencial de resolver problemas de elevada complexidade, caracterizados por um espaço de busca muito grande para a adoção de soluções com busca exaustiva, por possuírem um número elevado de variáveis e restrições, e/ou por apresentarem dependências não-lineares e multivariadas junto ao elenco de variáveis que os definem. Problemas deste tipo geralmente não admitem tratamento analítico e suas soluções advêm de métodos iterativos e aproximados.

O termo *computação natural* vem sendo empregado na literatura para descrever todos os sistemas computacionais desenvolvidos com inspiração ou utilização de algum mecanismo natural ou biológico de processamento de informação.

Dentre as sub-áreas da computação natural, uma que merece grande destaque é a *computação bio-inspirada*, a qual investiga o relacionamento entre a computação e a biologia, estudando como os

computadores podem ser utilizados para modelar fenômenos biológicos e como teorias advindas da biologia podem originar novos paradigmas de computação.

Entre os inúmeros modelos bio-inspirados, tais como *redes neurais artificiais* inspiradas no funcionamento do cérebro, *computação evolutiva* baseada nos princípios da evolução das espécies, *inteligência coletiva* que busca modelos a partir do comportamento sócio-cognitivo de insetos e humanos, encontram-se os *sistemas imunológicos artificiais*.

O sistema imunológico biológico é caracterizado principalmente por possuir processamento distribuído e por incluir alta taxa de paralelismo entre suas propriedades. Tarefas de classificação e reconhecimento de padrões são executadas pelo sistema imunológico usando conceitos como: identificação, aprendizado, comunicação, adaptação, auto-organização e memória. Tais conceitos são altamente desejáveis em sistemas de computação, sendo assim uma motivação para o desenvolvimento dos *sistemas imunológicos artificiais* e, posteriormente, a sua utilização na resolução de problemas de engenharia. Por exemplo, podem ser traçados fortes paralelos entre o reconhecimento de padrões do sistema imunológico e o reconhecimento de padrões em computação, fundamental nas tarefas de classificação e agrupamento de dados.

A quantidade crescente de dados produzida e armazenada por organizações das mais diversas áreas requer técnicas robustas, eficientes e hábeis para descobrir padrões, categorizar dados e encontrar relações entre os mesmos, uma vez que os conjuntos aos quais eles pertencem são cada vez maiores e mais complexos.

Neste sentido, esta dissertação busca a extensão e o desenvolvimento de algoritmos imuno-inspirados aplicados a tarefas de agrupamento e classificação de dados, assim como a aplicação desses algoritmos em problemas do mundo real, mais especificamente aos ligados à área de processamento de sinais. Além disso, a utilização da ferramenta de visualização desenvolvida para redes imunológicas artificiais possibilitará uma investigação mais profunda da representação e relacionamento dos dados nos conjuntos analisados.

1.1 Análise de Dados

A análise de dados é empregada na maioria das aplicações computacionais. Os procedimentos de análise de dados podem ser definidos como exploratórios ou confirmatórios, dependendo da finalidade da análise e do conjunto de atributos associados aos dados [Duda et al., 2000]. O procedimento exploratório está relacionado ao agrupamento de dados, onde o objetivo é a organização de uma coleção de dados em grupos baseado em critérios de similaridade. Os dados, ou padrões de entrada, são representados, na maioria das vezes, por vetores de atributos, ou seja, pontos em um espaço multidimensional. Intuitivamente, padrões dentro de um grupo são mais similares entre si do que em relação

a padrões pertencentes a outros grupos.

É importante destacar a diferença entre agrupamento (tratamento não-supervisionado) e classificação (tratamento supervisionado). No contexto de classificação, no qual os dados já se encontram rotulados, o problema é rotular um padrão novo, ainda sem rótulo. Neste caso, os dados rotulados são usados para o projeto do classificador, também denominado de etapa de indução do classificador. Uma vez sintetizado o classificador, este é empregado para rotular corretamente amostras ainda não rotuladas, também denominado de etapa de dedução do classificador. Para o caso de agrupamento, o problema é descobrir sub-grupos de dados não rotulados que possuam maior similaridade entre si do que a dados pertencentes a outros sub-grupos. Neste caso, os agrupamentos também são rotulados, porém, o rótulo é dado após o processo, respeitando o(s) critério(s) que a ferramenta considerou na definição dos sub-grupos.

A Figura 1.1 ilustra os processos de análise de dados: agrupamento e classificação. Em uma tarefa de análise de dados, esses processos podem ser executados em seqüência, ou seja, numa primeira fase ocorre a sintetização do processo de agrupamento a partir de um conjunto de dados. O resultado desse processo é a definição de um conjunto de grupos que, após serem rotulados, serão denominados de classes. A segunda fase está relacionada à definição de um classificador a partir de um conjunto de classes. Após sintetizado o classificador, um dado de entrada (amostra) é fornecido a esse classificador para que ele rotule essa amostra com a etiqueta da classe que possui amostras mais similares a ela. Cabe ressaltar que esses dois processos não necessitam ser executados sempre em conjunto. Se os dados já se encontrarem rotulados, não há necessidade de efetuar o processo de agrupamento.

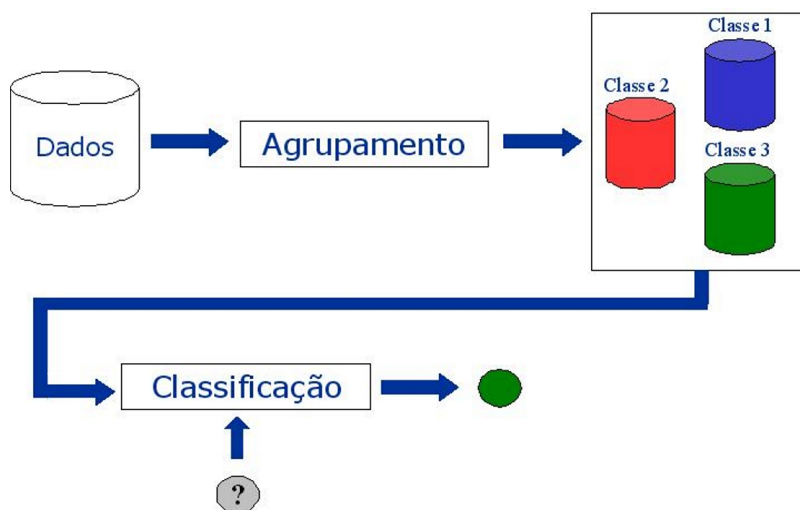


Fig. 1.1: Análise de dados contemplando os processos de agrupamento e classificação.

1.1.1 Agrupamento de Dados

A utilização de algoritmos destinados ao agrupamento de dados ocorre num cenário em que, na maioria das vezes, pouca ou nenhuma informação está disponível a respeito do conjunto de dados analisado. Raros são os casos em que se tem informação sobre a presença e número de grupos, ou sobre o formato dos grupos, até porque essas informações são a finalidade da aplicação. Diante desse cenário, umas das tarefas mais difíceis na resolução de problemas de agrupamento de dados é o desenvolvimento de algoritmos que forneçam de forma automática o número de grupos e o número de protótipos por grupo.

O agrupamento de dados é considerado uma técnica de aprendizado não-supervisionado em que são aprendidos os grupos de cada um dos elementos a partir da descrição de cada um deles como um vetor de pares $\langle \text{atributo-valor do atributo} \rangle$. Os algoritmos de agrupamento tentam particionar o conjunto de dados baseados em certas suposições e/ou critérios; conseqüentemente, as saídas do algoritmo podem ou não conduzir a interpretações significativas e úteis acerca da estrutura dos dados.

Dentre as técnicas de aprendizado não-supervisionado, destacam-se aquelas que operam com uma rede auto-organizável de protótipos. Esta será a abordagem predominante nesta dissertação.

No intuito de preencher as lacunas deixadas pelas redes estáticas, caracterizadas por uma topologia pré-definida, surge como proposta o desenvolvimento de redes com topologia variável, ou seja, que possuem a capacidade de adicionar ou eliminar nós das redes. De forma mais específica, as redes com topologia variável surgem como forma de resolver as duas principais restrições inerentes às redes estáticas: primeiro, a dimensionalidade e a estrutura da rede precisam ser definidas antes do processo de aprendizagem, restringindo o mapeamento resultante e a precisão da saída. Segundo, a capacidade da rede é pré-definida pelo número de nós da rede e pelos parâmetros de aprendizagem, tornando as redes com topologia fixa (redes estáticas) limitadas.

A maioria das abordagens de redes com topologia variável já propostas adicionam um novo nó, ou até mesmo uma camada inteira, na região que apresentar o maior erro acumulado. Este processo é executado a cada λ iterações. Essa estratégia implica num crescimento constante da rede não importando se ocorreu mudança na distribuição dos dados.

Quando se consideram as propostas neuro-inspiradas, as principais abordagens utilizam um conceito fundamentado nas redes neurais biológicas: a preservação da topologia. A motivação biológica para essa aproximação é o fato de que também no cérebro pode-se observar que estímulos sensoriais externos parecidos excitam áreas próximas. Nas redes neurais artificiais, a preservação da topologia dos dados agrupados é uma das metas do aprendizado competitivo [Martinetz, 1993] e é obtida através de atualizações de toda uma região onde o dado apresentado à rede é mapeado. Adotando o conceito de redes de protótipos, a preservação topológica é implementada por meio de um processo iterativo e auto-organizado.

1.1.2 Classificação de Dados

Um algoritmo com aprendizagem supervisionada determina os relacionamentos entre os atributos independentes e um atributo dependente denominado classe [Kohavi & Provost, 1988]. O objetivo do algoritmo é induzir um procedimento de decisão, chamado classificador, que será usado para deduzir a classe de amostras não utilizadas durante a fase de treinamento. No caso de classificadores que utilizam protótipos dos dados, o processo de classificação é baseado nas distâncias do dado que se deseja classificar aos protótipos existentes. Primeiro, computa-se as distâncias do dado a ser classificado aos protótipos rotulados. A classificação do dado em análise, ou seja, o rótulo que será fornecido ao mesmo, corresponderá ao rótulo do protótipo que possuir a menor distância ao dado a ser classificado.

A eficácia do classificador (ou a taxa de acerto) nos fornece o quão adequado o mesmo deduz a classe de amostras não vistas durante a fase de treinamento.

O uso de algoritmos clássicos com um número fixo de protótipos por classe incorre no problema da escolha do número de protótipos a serem considerados. Se a opção for por um número pequeno de protótipos, o classificador possuirá um comportamento generalista, tendendo a apresentar um alto erro de classificação. Por outro lado, a opção por um número grande de protótipos nos deixa diante dos seguintes problemas: muitos protótipos requerem uma grande massa de dados para treinamento, o que impossibilita a aplicação em casos de baixa amostragem; um conjunto de protótipos grande implica numa baixa compressão de dados e, conseqüentemente, num custo computacional maior quando o classificador for utilizado na tarefa de determinação da classe. Uma outra questão está relacionada à distribuição espacial dos dados nas classes. Na maioria das vezes, não há informação a respeito desta distribuição, significando que as classes possivelmente têm diferentes distribuições, não sendo adequado assim alocar um número igual de protótipos para cada classe e muito menos supor a priori algum tipo de distribuição.

Não serão consideradas aqui outras abordagens para a síntese de classificadores, particularmente aqueles que sintetizam relações funcionais entre os atributos de entrada e a classe, através de mapeamentos de entrada-saída responsáveis pela definição de fronteiras discriminantes entre classes.

1.2 Objetivos e Contribuições

De forma geral, o desenvolvimento desta dissertação objetivou o estudo de alguns algoritmos inspirados nos sistemas imunológicos artificiais, incluindo um modelo híbrido que envolve uma rede neural artificial e um sistema imunológico artificial, com o propósito genérico de:

- Analisar as limitações e promover extensões junto a estes algoritmos, de modo a ampliar seu

escopo de aplicação. Basicamente, as extensões estão relacionadas aos tipos de dados e à natureza da análise de dados.

- Empregar os novos algoritmos na solução de diversos problemas desafiadores para a computação, por expressarem grande parte das peculiaridades mencionadas ao longo deste capítulo.

Mais especificamente, esta dissertação propõe as seguintes extensões e/ou desenvolvimentos das ferramentas implementadas sob a forma de algoritmos:

1. RABNET (*Real valued AntiBody NETwork*): uma extensão do algoritmo ABNET [de Castro et al., 2003], que originalmente tratava problemas binários, para uma versão dedicada à resolução de problemas com dados de valores reais.
2. SRABNET (*Supervised Real valued AntiBody NETwork*): uma extensão do algoritmo RABNET, proposto originalmente como uma ferramenta de agrupamento de dados, aplicada à resolução de problemas de classificação de dados.
3. SAINET (*Supervised Artificial Immune Network*): uma versão supervisionada do algoritmo de rede imunológica, denominado AINET [de Castro & Von Zuben, 2002], que originalmente trata problemas de agrupamento de dados, para problemas de classificação de padrões.
4. Ferramenta para Visualização de Redes Imunológicas com Dados Numéricos Multivariados. O cenário de aplicação da ferramenta de visualização desenvolvida está relacionado à saída fornecida pelas redes que possuem algoritmo de aprendizado não-supervisionado.
5. Desenvolvimento de um Algoritmo Híbrido de Agrupamento Aplicado à Equalização Não-supervisionada de Canais de Comunicação: uma técnica híbrida destinada ao agrupamento de dados que se adequam às exigências dos problemas de equalização bayesiana. O algoritmo proposto combina dois métodos existentes: a RABNET (rede de anticorpos com valores reais) e o BLI (Busca Local Iterativa).

1.3 Organização do Texto

No capítulo 2, estão descritos alguns conceitos relacionados aos sistemas imunológicos e às redes neurais, assim como os algoritmos que serviram de base para as extensões propostas nessa dissertação. A metodologia utilizada no desenvolvimento dos algoritmos propostos está descrita no Capítulo 3. Detalhes de implementação, assim como o pseudo-código dos algoritmos, também são fornecidos no Capítulo 3. O Capítulo 4 fornece os resultados obtidos com a aplicação dos algoritmos propostos, juntamente com uma discussão acerca do desempenho quando considerado em relação a outras

propostas da literatura. No Capítulo 5, é descrito o desenvolvimento de um algoritmo híbrido e sua aplicação a um problema prático da área de processamento de sinais, mais especificamente em equalização de canais de comunicação. No Capítulo 6, são apresentadas as conclusões referentes a este trabalho e possíveis extensões a serem implementadas.

Capítulo 2

Redes Neuro-imunológicas

“Nunca imites ninguém. Que a tua produção seja como um novo fenómeno da natureza.”

Leonardo da Vinci

Este capítulo detalha os conceitos imunológicos que serviram de base para o desenvolvimento de ferramentas imuno-inspiradas e a relação que essas ferramentas possuem com as redes neurais artificiais. Também estão descritos neste capítulo alguns trabalhos relacionados e que possuem afinidade com as abordagens propostas. A descrição das duas ferramentas, AINET e ABNET, que serviram de base para o desenvolvimento desta dissertação, é fornecida neste capítulo.

2.1 Conceitos Imunológicos Envolvidos

2.1.1 Espaço de Formas

O espaço de formas (S) [Perelson & Oster, 1979] [Segel & Perelson, 1988] é um formalismo introduzido para descrever quantitativamente as interações de células e moléculas do sistema imune e seus respectivos modelos teóricos. Ele pode ser entendido como o espaço onde as interações de anticorpos (moléculas imunes responsáveis pelo reconhecimento de padrões) e antígenos ocorrem.

Biologicamente, características físico-químicas, tais como: forma geométrica, carga eletrostática, afinidade química, etc., são propriedades importantes dos antígenos e anticorpos que determinam as

interações dessas moléculas. Esse conjunto de características foi denominado de *forma generalizada de uma molécula* [Perelson, 1989a]. As moléculas devem possuir uma afinidade mútua mínima, representada através de acoplamentos complementares entre superfícies, como ilustrado de forma simplificada na Figura 2.1, para que uma interação seja estabelecida. Logo o espaço de formas é um espaço multidimensional onde os anticorpos e os antígenos são representados e seu grau de interação vai ser associado a alguma métrica de distância. Ele permite uma representação abstrata das características dos padrões que são necessárias ao reconhecimento e interação imunes.

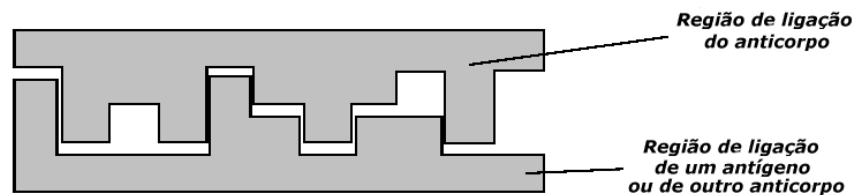


Fig. 2.1: Reconhecimento via regiões de complementariedade: uma visão pictórica.

Do ponto de vista matemático ou computacional, um antígeno e um anticorpo correspondem a pontos em um espaço de formas de dimensão L , e podem ser representados por uma cadeia de atributos ou um vetor de comprimento L , $m = \langle m_1, m_2, \dots, m_L \rangle$. Cada componente m_i do vetor m , $i = 1, \dots, L$, representa um atributo ou uma característica da molécula ou célula imune. Neste trabalho, um vetor com valores reais é utilizado para representar m , caracterizando o uso de um Espaço de Formas tal que $S \equiv R^L$.

Aqui, uma rede de anticorpos poderá ser interpretada como uma rede neural artificial competitiva, empregando para isso as seguintes características:

- Um anticorpo Ab ou uma célula imune é equivalente a um neurônio na rede neural, e o vetor real que representa a forma de um anticorpo corresponde ao vetor de pesos do neurônio;
- O antígeno Ag é equivalente ao padrão de entrada da rede neural e cada coordenada do antígeno corresponde a um atributo do padrão de entrada.

Os antígenos e os anticorpos são definidos como vetores de atributos de mesma dimensão, a qual é dependente do problema.

2.1.2 Afinidade

A afinidade entre um antígeno e um anticorpo ($Ag - Ab$) está relacionada à distância entre eles no espaço de formas S , que pode ser avaliada via qualquer medida de distância, considerando complementariedade ou similaridade entre dois vetores ou cadeias de atributos. Note que, no espaço de

formas, as representações matemáticas de anticorpos ou antígenos são dadas por vetores de atributos. Quando são utilizados vetores reais, a métrica mais utilizada é a distância euclidiana (Equação 2.1), embora outras métricas possam ser usadas, como por exemplo a distância de Manhattan, obtida pela Equação (2.2). Estas medidas de distância são utilizadas para avaliar o grau de interação das moléculas. Nas Equações (2.1) e (2.2), a variável L corresponde ao número de atributos dos dados, ou seja, a dimensão do espaço de formas S .

$$D = \sqrt{\sum_{i=1}^L (Ab_i - Ag_i)^2} \quad (2.1)$$

$$D = \sum_{i=1}^L |Ab_i - Ag_i| \quad (2.2)$$

Sendo as interações $Ag - Ab$ medidas via complementariedade, Ag e Ab também são caracterizados por formas generalizadas cujos complementos devem estar contidos dentro de uma mesma região V . Se as formas entre $Ab - Ag$ não forem exatamente complementares, estas moléculas ainda assim podem se ligar, porém com menor afinidade. Assume-se, então, que cada anticorpo interage especificamente com todos os antígenos que, no espaço de formas, têm seus complementos contidos em uma região V_ϵ , chamada *região de reconhecimento*, ao redor do anticorpo, caracterizada pelo parâmetro ϵ denominado *limiar de afinidade*. No entanto, em espaços de formas contínuos não é adotada complementariedade, uma vez que esses espaços não são finitos. Tomando um espaço de formas real, quanto mais próximo estão dois pontos, em termos de distância euclidiana, maior é sua afinidade. Sendo assim, a região de reconhecimento fica sendo uma hipersfera centrada no anticorpo. Como cada anticorpo pode reconhecer todos os antígenos dentro de uma região de reconhecimento, um número reduzido de anticorpos pode reconhecer uma quantidade significativa de pontos na região V_ϵ . A Figura 2.2 ilustra o espaço de formas S , destacando os anticorpos ($\bullet$), os antígenos ($\times$) e as regiões de reconhecimento com limiar de afinidade (ϵ).

No contexto de redes imunológicas, o limiar de afinidade ϵ controla a especificidade da rede, influenciando na quantidade de anticorpos da rede resultante. Um limiar de afinidade alto resultará em anticorpos mais específicos e, conseqüentemente, redes com um número maior de anticorpos, enquanto valores de afinidade pequenos implicam em anticorpos generalistas, resultando assim em redes com um número menor de anticorpos. Conforme pode ser observado na Figura 2.2, o limiar de afinidade ϵ é interpretado como um raio que define o espaço de atuação de cada anticorpo.

Por exemplo, suponha que um limiar de afinidade máximo é escolhido. Neste caso, os anticorpos serão idênticos aos antígenos, resultando numa rede que possui um anticorpo para representar (para reconhecer) cada antígeno. Mais uma vez vale salientar que, em espaços de formas contínuos, o reconhecimento é avaliado por similaridade e não por complementariedade, ou seja, quanto menor

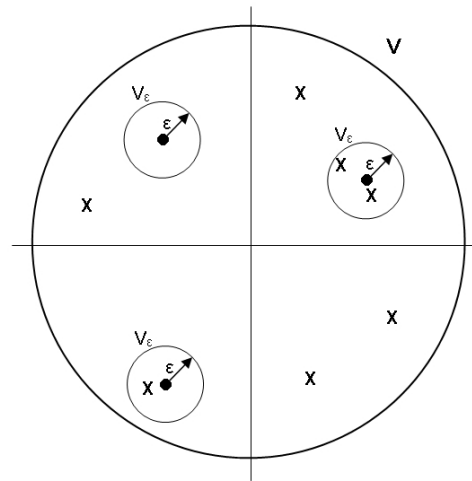


Fig. 2.2: No espaço de formas S , existe uma região V na qual o anticorpo ($\bullet$) e o antígeno (x) estão localizados. Um anticorpo é capaz de reconhecer qualquer antígeno que esteja situado em uma região V_ϵ em torno de si.

a distância entre um antígeno e um anticorpo maior a similaridade entre eles. Assim, a distância euclidiana pode ser usada para medir a afinidade entre um anticorpo e um antígeno: quanto menor a distância, maior a afinidade, e vice-versa.

Sob a perspectiva de redes neurais artificiais, o limiar de afinidade corresponde ao grau de similaridade entre um padrão de entrada e o vetor de pesos de um dado neurônio. Isto significa que, se for desejada uma alta similaridade entre os neurônios e os padrões de entrada, uma quantidade grande de neurônios será necessária para representar os padrões de entrada (baixa quantização). Por outro lado, para uma similaridade baixa, poucos neurônios serão introduzidos na rede (alta quantização).

2.1.3 Seleção clonal

A seleção clonal é a principal teoria utilizada para explicar como o sistema imune responde aos agentes causadores de doença [Burnet, 1959] [de Castro & Timmis, 2002b]. Algumas células imunes carregam receptores moleculares em sua superfície (anticorpos) que são responsáveis pelo reconhecimento de padrões presentes em agentes causadores de doença (antígenos). Os anticorpos são secretados na corrente sanguínea e linfática quando a célula é estimulada, isto é, quando um antígeno é reconhecido por um anticorpo. Após o reconhecimento, a célula imune é estimulada a sofrer clonagem (isto é, proliferar gerando cópias idênticas) e secretar anticorpos. O princípio da seleção clonal estabelece que apenas aquelas células capazes de reconhecer estímulos antigênicos irão se proliferar, sendo, portanto, selecionadas em detrimento de outras.

O processo de aumento na concentração de células que somente produzem um tipo útil do anti-

corpo é chamado expansão clonal. O número de clones produzido por uma célula imune é proporcional ao seu nível de estímulo.

Durante o processo de geração de novos anticorpos, algumas células são portadoras de receptores que se ligam a padrões moleculares do próprio organismo sendo, portanto, eliminadas, assegurando uma tolerância aos padrões moleculares próprios. Quando o antígeno interage com um anticorpo maduro, tal célula é ativada e começa a se dividir, originando clones que sofrem hipermutação em sua região receptora variável, e que irão se diferenciar em células efetoras e de memória, conforme está ilustrado na Figura 2.3.

Resumidamente, as principais características do princípio da seleção clonal são:

- Eliminação de anticorpos que reagem a padrões próprios, garantindo assim a ausência de resposta ao próprio;
- Expansão de anticorpos que reconhecem padrões não-próprios;
- Formação de padrões de memória baseados em anticorpos estimulados num período anterior;
- Variação genética nos anticorpos através de um mecanismo de hipermutação somática.

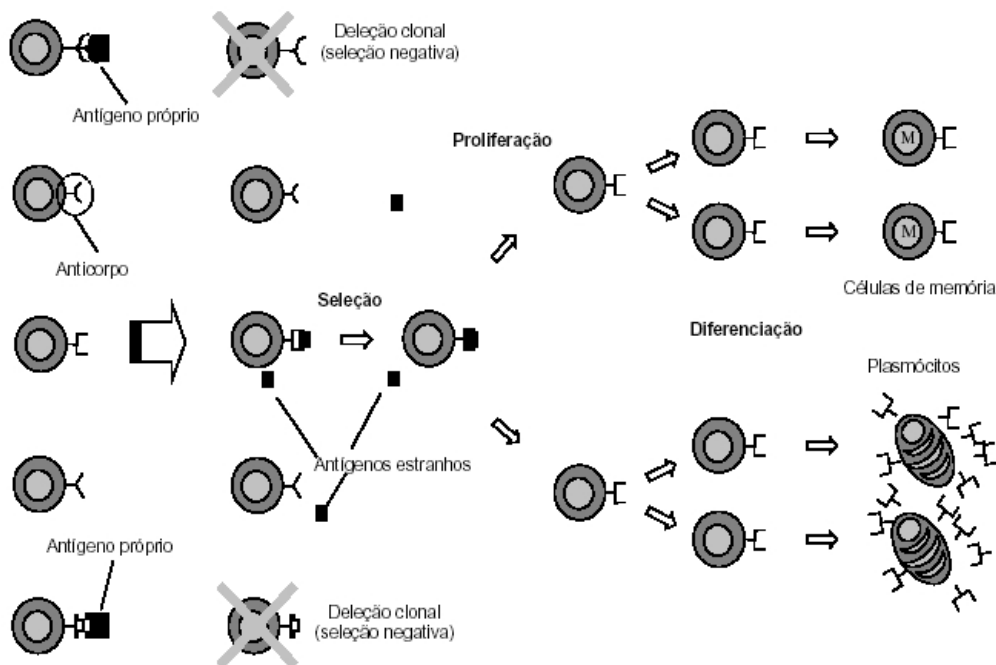


Fig. 2.3: Princípio da seleção clonal. (Os formatos distintos dos anticorpos correspondem a representações pictóricas distintas.)

2.1.4 Maturação de Afinidade

Durante a expansão clonal, os clones gerados não são cópias perfeitas de seus pais. Os clones são submetidos a um processo denominado de mutação somática, o qual origina uma população de células descendentes ligeiramente diferentes das células genitoras [Nossal, 1993]. Os descendentes mutados também podem se ligar aos antígenos se tiverem uma afinidade elevada, podendo também ser ativados e clonados. A taxa de clonagem de uma célula é proporcional à sua afinidade com o antígeno, de modo que células com alta afinidade geram um número maior de descendentes. A mutação somática introduz variabilidade no conjunto de clones, enquanto a pressão seletiva favorece os clones com afinidades elevadas ao antígeno. Visto como um todo, os processos de seleção, clonagem e mutação são denominados de maturação de afinidade, já que eles conferem às células imunes a possibilidade de melhorarem suas afinidades aos antígenos.

2.1.5 Teoria da Rede Imunológica

A teoria da rede imunológica, proposta originalmente por Jerne [Jerne, 1974], conjecturou novas idéias relacionadas ao funcionamento do sistema imunológico. Diferente dos princípios da expansão clonal e da maturação de afinidade, os quais sugerem que o sistema imunológico está em repouso e só atua quando invadido por um patógeno, a teoria da rede propõe que o sistema imunológico está em constante atividade, sendo capaz de reconhecer também nossas próprias células e moléculas. Segundo a teoria da rede imunológica, não há mais a necessidade de estímulos externos para que ocorra uma resposta imunológica.

Além de propor novas idéias sobre a produção de anticorpos, a teoria da rede imunológica discute sobre: a seleção do repertório pré-imune, a tolerância ao próprio, a discriminação próprio/não-próprio, a memória e a evolução do sistema imunológico.

Para uma definição do sistema imunológica seguindo os princípios da teoria da rede é necessário primeiro nomear alguns termos. Assim chamaremos, *idiotopo* um receptor na região-V do anticorpo e *paratopo* um marcador contido na superfície da molécula de anticorpo e que pode se ligar a um antígeno. Dessa forma, o sistema imunológico foi definido formalmente como uma rede de paratopos que reconhecem um conjunto de idiotopos, e de idiotopos que são reconhecidos por um conjunto de paratopos, ou seja, cada elemento reconhece e é reconhecido. As partes responsáveis pela interação estão destacadas nas Figuras 2.4(a) e (b). Na teoria proposta, não somente as moléculas, mas também suas interações, são relevantes na composição do sistema imunológico. As células imunes podem responder positivamente ou negativamente a um sinal do reconhecimento. Uma resposta positiva resultaria na proliferação de células, na ativação e na secreção de anticorpos, enquanto uma resposta negativa conduziria à tolerância e à supressão. A Figura 2.4(c) ilustra a idéia da rede imunológica.

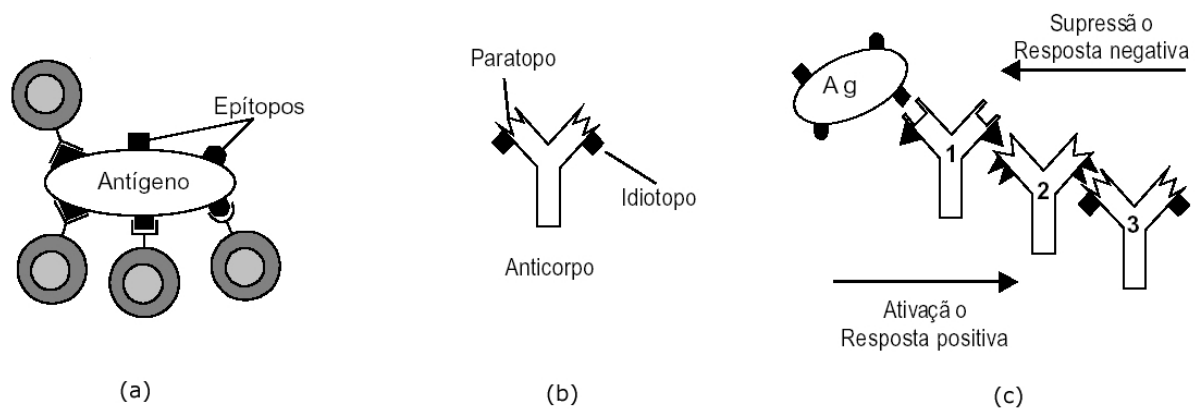


Fig. 2.4: Identificadores moleculares e teoria da rede. (a) A porção de um antígeno que é reconhecida por um anticorpo é chamada epítipo. Enquanto os anticorpos são monoespecíficos, os antígenos podem apresentar vários epítipos distintos. (b) Molécula de anticorpo destacando paratopo e idioto. (c) Respostas positiva e negativa resultantes da interação de um paratopo com um idioto ou um epítipo.

A rede imunológica atua como uma sistema auto-organizável e auto-regulatório que captura e armazena informação do antígeno, usando-a contra antígenos semelhantes em ataques futuros [Perelson, 1989b]. Baseado nessas idéias, a teoria da rede torna-se de grande interesse para o desenvolvimento de ferramentas computacionais, especialmente as aplicadas a problemas de compressão de dados e agrupamento, pois ela fornece uma medida aproximada de propriedades emergentes como aprendizagem, memória, tolerância ao próprio, tamanho e diversidade de populações.

Na teoria da rede imunológica, três características principais podem ser destacadas [Varela et al., 1988] [Varela & Coutinho, 1991]:

- Estrutura: responsável pela descrição dos padrões de conexão e interação dos componentes;
- Dinâmica: a dinâmica da rede imunológica corresponde à variação ao longo do tempo da concentração e da estrutura dos anticorpos. É consequência da interação dos anticorpos entre si e com os antígenos;
- Metadinâmica: um novo conceito presente no sistema imunológico está relacionado à contínua produção de novos anticorpos e a morte de anticorpos pouco estimulados. Existe uma constante renovação do repertório e, conseqüentemente, da estrutura da rede via o recrutamento de novos elementos e a morte de elementos não estimulados ou auto-reativos. A metadinâmica representa um dos potenciais que o sistema imunológico possui de introduzir diversidade, garantindo sua capacidade de combater novos antígenos.

2.2 Redes Neurais Artificiais

De forma similar às redes imunes artificiais, que são inspiradas no funcionamento do sistema imunológico, as redes neurais artificiais (RNAs) são desenvolvidas a partir de modelos funcionais do cérebro. Segundo [Haykin, 1994], uma rede neural artificial é um sistema de processamento paralelo, composto de unidades simples com capacidade de armazenar conhecimento e de fazê-lo disponível para uso futuro. O projeto de uma rede neural artificial requer a definição de três características: a estrutura, o algoritmo de aprendizagem e a função da ativação [Haykin, 1994]. A estrutura de uma RNA corresponde aos padrões de conectividade entre os neurônios da rede. As redes podem apresentar apenas conexões diretas (sempre no sentido da entrada para a saída da rede) ou então apresentar conexões diretas e recorrentes (responsáveis pela realimentação de informação). O algoritmo de aprendizagem é o método de determinação dos parâmetros livres da rede, tais como: pesos das conexões, função de ativação, número de camadas e número de neurônios por camada na rede. Há basicamente três paradigmas de aprendizagem: aprendizagem não-supervisionada, supervisionada e por reforço. A função de ativação representa o efeito da entrada e do estado atual de um neurônio na definição do seu próximo estado. A literatura relacionada à área de Rede Neurais Artificiais é bastante ampla, sendo que merecem destaque as seguintes referências básicas: [Haykin, 1994], [Bishop, 1995] e [Fausett, 1994].

2.3 Trabalhos Relacionados

2.3.1 Redes Auto-organizadas com Topologia Variável Aplicadas a Agrupamento

Uma das propostas pioneiras no desenvolvimento de redes neurais auto-organizadas com topologia variável é o trabalho de *Fritzke* [Fritzke, 1994], o qual dá origem às redes neurais denominadas *Growing Cell Structures* (GCS). As redes neurais GCS são uma extensão dos mapas auto-organizáveis, do inglês *Self Organizing Maps* (SOM), propostos por Kohonen [Kohonen, 2000]. As redes GCS fazem parte de um conjunto de modelos incrementais auto-organizados que possuem a capacidade de encontrar automaticamente a estrutura da rede através de um processo de crescimento. Os elementos básicos de uma rede GCS são hipertetraedros, onde os vértices são os neurônios e os ramos ou arcos denotam as relações de vizinhança. Nas redes GCS, novos neurônios são adicionados a cada λ iterações de acordo com o erro acumulado associado a cada neurônio. Durante o processo de crescimento, o novo neurônio é inserido ao lado do neurônio que possui o maior valor do erro acumulado.

Um outro trabalho proposto por *Fritzke* são as redes denominadas *Growing Neural Gas* (GNG) [Fritzke, 1995b]. As redes GNG são caracterizadas por resultarem de um algoritmo de agrupamento não-supervisionado e incremental. A partir de um conjunto de dados de entrada, é construída uma estrutura de nós que são considerados vizinhos se estiverem conectados por uma linha. Os vizinhos são mantidos através da utilização do algoritmo de aprendizado competitivo de *Hebb* [Martinetz, 1993]. Similarmente às redes GCS, novos nós são adicionados a cada λ iterações. Os nós são adicionados entre os dois nós que possuem as mais altas ativações para cada entrada. A presença ou não de um arco entre dois nós é controlada usando o conceito de idade. Arcos que são usados têm sua idade incrementada. Quando a idade de um arco excede um limiar, o arco é removido. Uma explicação detalhada sobre o GNG e suas extensões pode ser encontrada em [Holmström, 2002].

Diferentemente das redes GCS e GNG, que usam um critério de erro para adicionar novos neurônios na estrutura, as redes neurais *Growing When Required* (GWR) [Marsland et al., 2002] adicionam nós na estrutura quando não há um neurônio com pesos suficientemente similares, dado um limiar de similaridade, ao padrão de entrada apresentado. Os componentes das redes GWR são nós e arcos que podem ser criados e destruídos durante o processo de aprendizagem. De forma similar às redes GNG, cada arco tem uma idade associada ao seu tempo de vida. A função do arco é conectar nós objetivando formar uma vizinhança responsável por representar percepções similares.

O modelo conhecido como *Growing Grid* (GG), desenvolvido por *Fritzke* [Fritzke, 1995a], possui duas fases distintas: uma fase de crescimento e uma fase de ajuste fino. O modelo GG é uma rede auto-organizada, incremental e de estrutura retangular. O local de inserção do novo nó é decidido a partir de medidas estatísticas acumuladas localmente. Objetivando criar uma vizinhança, as propriedades dos novos nós são interpoladas com seus vizinhos. No modelo GG, cada nó tem associado a si uma variável de recurso utilizada como informação estatística a fim de decidir o local de inserção dos novos nós na rede.

O modelo ESOM, desenvolvido por [Deng & Kasabov, 2000], possui uma estrutura similar ao GNG. A rede ESOM começa sem nós. Utilizando uma abordagem competitiva, a inclusão de nós na rede ocorre à medida que o erro do nó que melhor representa o padrão apresentado é maior do que um limiar. O nó que foi acrescentado à rede é conectado aos seus dois vizinhos mais próximos. Quando não é necessário adicionar um novo nó à rede, os pesos do nó vencedor e dos seus vizinhos são atualizados de acordo com seus respectivos potenciais de ativação. A relação de vizinhança é determinada pela distância entre os nós conectados. Conexões fracas, associadas a distâncias grandes, são removidas originando assim os *grupos*.

Uma extensão dos Mapas Auto Organizados é o PSOM desenvolvido por [de Castro & Von Zuben, 1989], os quais aplicaram ao SOM [Kohonen, 2000] uma técnica de poda com re-início. Neste trabalho, é definida uma medida de agrupamento, útil para avaliar o

grau de representação de cada neurônio de saída. A poda de um neurônio da rede será efetivada se a medida de agrupamento desse neurônio for menor do que um limiar de poda definido pelo usuário. Após a poda de um neurônio, os valores iniciais dos parâmetros do algoritmo (taxa de aprendizagem inicial e raio de vizinhança) são restaurados, permitindo que a nova topologia represente de forma adequada o conjunto de dados. Cabe ressaltar que o PSOM foi desenvolvido para mapas auto-organizáveis unidimensionais.

2.3.2 Redes Imunológicas Aplicadas à Classificação

Um dos primeiros algoritmos inspirados em conceitos imunológicos, desenvolvido dentro do paradigma de aprendizagem supervisionada, é o Sistema de Reconhecimento Imunológico Artificial, em inglês *Artificial Recognition Immune System* (AIRS) [Watkins, 2001]. Proposto por Watkins, o AIRS, assim como a maioria dos algoritmos imuno-inspirados, emprega a distância euclidiana para medir a afinidade na ligação antígenos/anticorpos. Utilizando os conceitos de expansão clonal e maturação de afinidade, o AIRS busca formar uma população de células de memória. Essas células de memória são usadas mais tarde para a classificação. Embora o AIRS seja inspirado em conceitos advindos de redes imunes, o desenvolvimento do classificador proposto abandonou os princípios da rede em favor de um modelo populacional.

Os novos anticorpos criados estão sujeitos a um processo de mutação aleatória, com uma determinada probabilidade, e são incorporados ao repertório de células de memória se suas afinidades satisfizerem determinados critérios. Dentro do AIRS, os anticorpos competem pela sobrevivência baseados na idéia de pertencerem a um sistema com recursos limitados [Timmis & Neal, 2001]. Em um sistema com recursos limitados, quanto maior o nível de estímulo de um anticorpo, mais recursos ele pode reivindicar. Anticorpos que não são competitivos, ou seja, possuem baixos níveis de estímulos, são removidos do sistema.

Após algumas observações no funcionamento e desempenho do AIRS, Watkins & Timmis propuseram uma segunda versão para o algoritmo [Watkins & Timmis, 2002], denominada de AIRS2. As mudanças efetuadas na versão original do algoritmo são as seguintes:

1. Somente o repertório de células de memória é inicializado. Na versão original, o repertório de BRAs (Bolas de Reconhecimento Artificial) também era inicializado. As BRAs podem ser definidas como objetos que representam uma parte do conjunto de dados n-dimensionais.
2. Durante a expansão clonal, as novas BRAs criadas não podem mudar de classe.
3. Recursos são alocados somente para BRAs da mesma classe do antígeno e são alocados em proporção inversa à afinidade da BRA ao antígeno.

4. Durante a maturação de afinidade (mutação), o nível de estímulo da célula é considerado. Cada gene pode sofrer mutação dentro de um limite definido.
5. O critério de parada de treinamento não considera o valor de estímulo das BRAs em todas as classes, mas somente o valor de estímulo das BRAs de classe igual à do antígeno.

O principal ganho da nova versão do AIRS (AIRS2) está relacionado à redução no uso de recursos computacionais. O AIRS2 tende a obter uma maior compactação de dados do que a versão original.

2.3.3 Ferramenta de Visualização de Redes Imunológicas

Dentre as propostas destinadas à visualização de redes existentes na literatura, a que apresenta maior similaridade com a ferramenta de visualização a ser proposta nesta dissertação é a desenvolvida por Timmis e denominada AiVis [Timmis, 2001].

AiVis [Timmis, 2001] é uma ferramenta destinada à visualização das redes imunológicas artificiais produzidas pelo algoritmo de aprendizagem AINE. AINE [Timmis & Neal, 2001] é um algoritmo de aprendizagem não supervisionada inspirado em conceitos do sistema imunológico humano e destinado ao agrupamento de dados. O algoritmo AINE utiliza o conceito de "Bola de Reconhecimento Artificial"(BRA). O AINE é inicializado como uma rede de objetos BRAs. Ligações entre BRAs são construídas se os mesmos possuírem uma afinidade maior do que um limiar pré-definido. A afinidade é calculada utilizando a distância euclidiana. Se dois BRAs estiverem próximos no espaço euclidiano eles possuem uma alta afinidade. A rede inicial de BRAs é construída utilizando apenas uma parte do conjunto de dados, sendo o restante dos dados considerados como antígenos. Cada antígeno é comparado com todos os membros da rede de BRAs. Se o nível de estímulo de uma BRA for alto, ela é clonada proporcionalmente a este estímulo. Por outro lado, as BRAs competem por uma quantidade finita de recursos, o que causa uma eliminação das BRAs menos estimuladas. Através desse processo, consegue-se um controle populacional. A saída da AINE pode ser considerada um grafo desconectado, no qual cada sub-grafo corresponde a um grupo.

Objetivando visualizar a rede obtida, os resultados do AINE são passados para o AiVis. O AiVis aplica um algoritmo de atração-repulsão que visa definir a topologia da rede. Cada arco da rede representa a afinidade entre duas BRAs. O objetivo do AiVis é ajustar a posição de cada BRA de modo que todas as BRAs similares estejam localizadas próximas na área de visualização. A ferramenta AiVis provê ao usuário a facilidade de interagir com a solução proposta a fim de investigar os grupos e os seus componentes.

2.4 ABNET

A ABNET (*Antibody Network*) foi proposta por de Castro et al. [de Castro et al., 2003], sendo que os autores propuseram uma rede neural artificial treinada usando idéias e conceitos provenientes do sistema imune. O funcionamento da ABNET está fundamentado na existência de uma população de antígenos (*Ag*) a serem reconhecidos por um repertório de anticorpos (*Ab*). Sob a perspectiva de redes neurais, os antígenos são os padrões de entrada, enquanto os anticorpos são os vetores de pesos dos neurônios. As principais características que a ABNET possui são:

- É uma rede sem realimentação, com uma única camada de entrada e uma única camada de saída;
- Os pesos das conexões entre os neurônios podem assumir apenas valores binários, sendo portanto uma rede booleana;
- A arquitetura da rede é definida pelo algoritmo de treinamento. Neurônios podem ser incluídos ou retirados (podados) da rede durante o processo de treinamento, conferindo à rede uma definição dinâmica da sua topologia;
- O algoritmo de treinamento é do tipo competitivo e de aprendizado não-supervisionado. O seu desenvolvimento é baseado no princípio da seleção clonal e maturação de afinidade do sistema imunológico.

A Figura 2.5 apresenta o diagrama com os principais passos do processo de treinamento da ABNET. Na Figura 2.5(a), tem-se o algoritmo sob o ponto de vista imune, enquanto na Figura 2.5(b) é mostrado o algoritmo sob a perspectiva neural.

Em relação à fase competitiva do algoritmo, ela pode ser descrita pelos seguintes passos:

1. Escolha de um antígeno (padrão de entrada) de forma aleatória junto ao conjunto de dados;
2. Determinação do anticorpo que possui a maior afinidade a este antígeno;
3. Aumento do número de antígenos reconhecidos pelo anticorpo que possui a maior afinidade, ou seja, incremento de uma unidade da variável associada ao anticorpo vencedor (anticorpo que apresenta a maior afinidade ao antígeno apresentado) e que mede a concentração de antígenos reconhecidos por cada anticorpo. Inclusão do antígeno reconhecido no conjunto dos antígenos reconhecidos pelo anticorpo vencedor;
4. Atualização dos pesos do anticorpo vencedor.

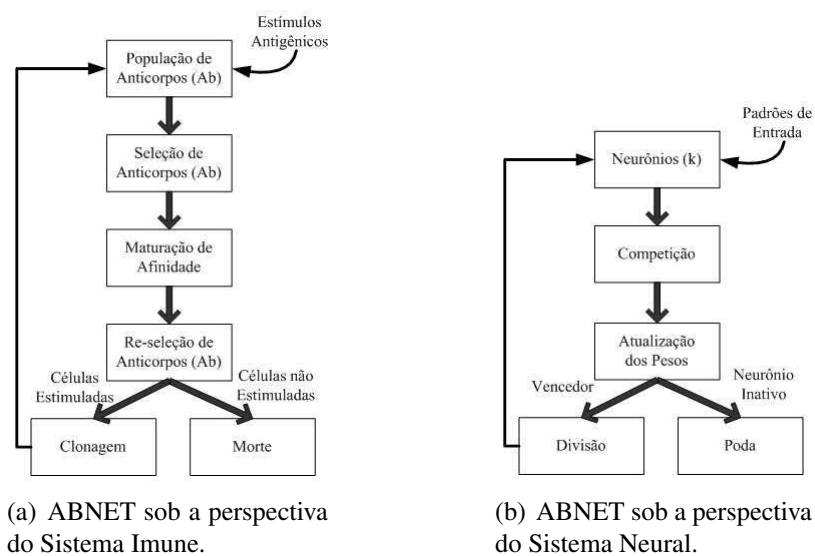


Fig. 2.5: Passos principais da ABNET.

2.5 AINET

A AINET pode ser formalmente definida como um grafo com conexões ponderadas, não necessariamente totalmente interconectado, composto por um conjunto de nós, denominados anticorpos, e conjuntos de pares de nós, chamados conexões, com um valor característico associado, chamado de peso da conexão ou simplesmente peso [de Castro & Von Zuben, 2002]. A ferramenta atua criando uma imagem interna dos dados de entrada e reduzindo os níveis de redundância no conjunto de dados. O algoritmo possui duas etapas distintas. Na primeira etapa, é feita a interação dos anticorpos da rede com antígenos a serem reconhecidos (padrões de entrada). Na segunda etapa, é quantificada a interação apenas dos anticorpos da rede. O modelo da rede imunológica pode ser resumido da seguinte forma:

1. *Inicialização*: cria-se uma população inicial aleatória de anticorpos.
2. *Apresentação dos antígenos*: para cada padrão de entrada faça:
 - 2.1 *Seleção clonal e expansão*: para cada anticorpo da rede determine sua afinidade à entrada apresentada. Selecione um número de anticorpos de alta afinidade e reproduza-os (crie um número de cópias idênticas, chamadas clones) proporcionalmente às suas afinidades;
 - 2.2 *Maturação de afinidade*: aplique em cada um dos clones uma mutação inversamente proporcional à afinidade. Re-selecione um número dos clones de maior afinidade e coloque-os num conjunto de clones de memória;
 - 2.3 *Morte dos elementos não estimulados*: elimine todos os clones de memória cuja afinidade

com o antígeno é menor que um limiar pré-definido;

2.4 *Interações clonais*: determine as interações da rede (afinidade) de todos os elementos do conjunto clonal;

2.5 *Supressão clonal*: elimine aqueles clones de memória cuja afinidade entre eles é maior que um limiar pré-definido;

2.6 *Construção da rede*: incorpore os elementos restantes do conjunto de clones de memória aos anticorpos da rede.

3. *Interações da rede*: determine a similaridade entre cada par de células da rede.
4. *Supressão da rede*: elimine todos os anticorpos cuja afinidade a um anticorpo específico é maior que um limiar pré-definido. Este anticorpo específico deve apresentar maior afinidade a antígenos que os anticorpos a serem eliminados.
5. *Introdução de novos elementos*: introduza um número fixo de novos anticorpos gerados aleatoriamente na rede.
6. *Ciclo*: repita os Passos 2 a 5 até atingir um número pré-especificado de iterações.

Os Passos 2.1 a 2.6 correspondem às etapas de seleção clonal e maturação de afinidade. Nessa fase, a cada iteração uma população de células sofre um processo de otimização local com o objetivo de aumentar a afinidade *Ag-Ab*. Cada célula dá origem a um certo número de clones proporcional à sua afinidade. Os clones são mutados, sendo que aqueles com maior afinidade sofrem menores taxas de mutação, e vice-versa. Os Passos 3 a 5 representam as etapas de interação dos elementos da rede e introdução de diversificação. As afinidades entre as células de memória são determinadas e aquelas que apresentarem um valor maior que um determinado limiar são eliminadas. O objetivo é diminuir o nível de redundância, tornando a arquitetura da rede mais parcimoniosa. Após a fase de supressão, são introduzidos novos elementos na rede, gerados aleatoriamente, aumentando assim a diversidade da população.

2.6 Redes Imunológicas, Neurais e Neuro-Imunológicas

Nesta seção, serão apresentadas algumas considerações sobre redes imunológicas e redes neurais, focando as principais similaridades e diferenças entre elas. No intuito de buscar uma definição de redes neuro-imunológicas, inicialmente pode-se traçar um paralelo entre as redes neurais e redes imunológicas. [de Castro, 2002] propõe uma comparação entre as duas abordagens envolvidas considerando: os componentes, a estrutura das redes e os processos de adaptação envolvidos.

Em relação aos componentes, nas redes imunológicas artificiais, estes são células caracterizadas por um conjunto de atributos definidos num espaço de formas representando a superfície de moléculas. Conexões ligam as células entre si formando uma rede, e um nível de estímulo está associado a cada célula. Nas redes neurais, o componente básico é o neurônio, caracterizado por um conjunto de pesos associados a uma função de ativação, usualmente uma função não-linear. Matematicamente, um neurônio artificial recebe um conjunto de estímulos de entrada e executa uma combinação linear com seu vetor de pesos, determinando a ativação do neurônio. Então, uma função de ativação, geralmente não-linear, é aplicada para determinar a saída do neurônio. A Figura 2.6(a) ilustra o componente básico das redes imunológicas, enquanto a Figura 2.6(b) ilustra o modelo matemático de um neurônio, componente básico das redes neurais.

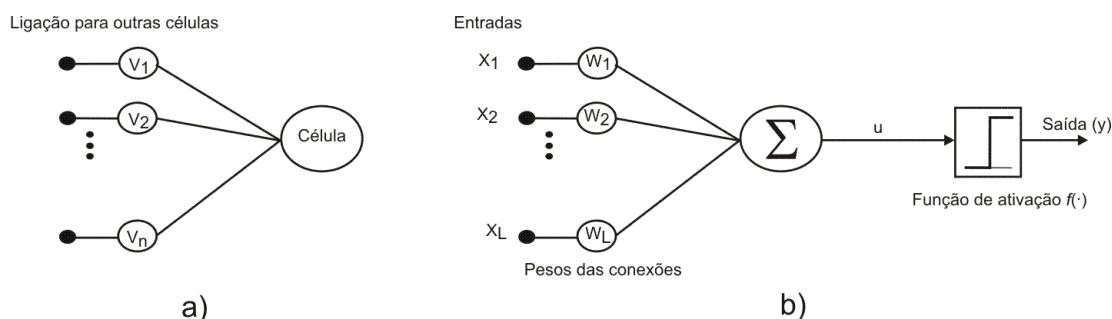


Fig. 2.6: Componentes básicos: a) Anticorpos (redes imunológicas) e b) Neurônio artificial (redes neurais artificiais).

Uma outra característica em que ambas as redes diferem consideravelmente é a estrutura. As redes neurais geralmente possuem arquiteturas pré-definidas, e mesmo quando estas são ajustadas dinamicamente, a arquitetura resultante é de um tipo especificado. Ou seja, embora o número de conexões, número de neurônios e de camadas possam ser determinados automaticamente, o tipo final de arquitetura ainda é conhecido a priori e normalmente obedece a uma organização em camadas. Nas redes imunológicas, as células imunes são organizadas na forma de um grafo totalmente conexo. A motivação para haver conexão entre todos os anticorpos reside no fato de que, ao contrário dos neurônios, as células que compõem o sistema imunológico estão em movimento e, assim, podem interagir com qualquer outra célula do sistema. No entanto, conexões podem ser extintas para simular a ausência de afinidade entre as células.

O processo de adaptação das redes imunológicas é baseado no nível do estímulo de cada célula, permitindo que se altere seus atributos e número de clones. Como resultado, novas conexões podem ser formadas na rede, enquanto outras conexões podem ser extintas. Os mecanismos de adaptação das redes neurais são relacionados principalmente a alterações nos pesos das conexões, de acordo com o estímulo da rede. Porém, é crescente o interesse por algoritmos que ajustam dinamicamente a

estrutura da rede e as funções de ativação.

A Tabela 2.1 mostra as principais características das redes neurais artificiais e das redes imunológicas artificiais.

Tab. 2.1: Características das redes neurais artificiais e redes imunológicas artificiais.

Característica	Rede Imunológica Artificial	Rede Neural Artificial
Componente básico	Célula composta de um vetor de atributos	Neurônio composto de uma função de ativação, pesos de conexões e limiar de ativação
Interação com outros componentes	As células possuem conexões que buscam modelar o grau de interação com outras células, através de pesos, os quais podem ser excitatórios ou inibitórios	O vetor de pesos assume valores positivos e negativos, caracterizando uma influência excitatória ou inibitória do sinal de entrada
Atividade	A célula possui uma imagem interna que é comparada com a imagem interna de outras células	O neurônio processa a informação recebida
Conhecimento	Armazenado na imagem interna de cada célula	Armazenado nos pesos e limiar
Aprendizado	Através da modificação da imagem interna de cada célula	Através da modificação dos pesos das conexões e limiar
Localização	As células não possuem uma posição fixa	O neurônio possui uma posição fixa na rede
Comunicação	Através de afinidade celular, representada pelo vetor de atributos ou imagem interna	Através do nível de ativação
Estado	Nível de concentração das células	Nível de ativação dos neurônios
Controle	Princípios imunológicos determinam o tipo de interação dos componentes da rede	Um algoritmo de aprendizagem determina o processo de ajuste dos pesos
Caracterização	Auto-organizada e evolutiva	Dependente do algoritmo de aprendizagem

Expostas as principais características das redes imunológicas artificiais e das redes neurais artificiais, pode-se rotular os dois algoritmos (AINET e ABNET) que serviram de base para as ferramentas propostas nesse trabalho. Dessa forma, as características da AINET, Seção 2.5, nos permite interpretá-la como sendo uma rede imunológica artificial, uma vez que suas características são inspiradas exclusivamente em conceitos advindos da imunologia. Por outro lado, uma investigação da ABNET, Seção 2.4, nos revela que ela é caracterizada como sendo uma rede neural que incorpora conceitos imunológicos para controlar os processos de crescimento e poda da rede. Sendo assim, a ABNET pode ser interpretada como uma rede neuro-imunológica.

Capítulo 3

Extensões e Visualização de Redes Neuro-imunológicas

“ A coragem é a primeira das qualidades humanas porque garante todas as outras.”

Aristóteles

Este capítulo contém detalhes sobre os algoritmos desenvolvidos nesta dissertação. A partir dos algoritmos tomados como base, foi desenvolvido um algoritmo destinado a agrupamento de dados (RABNET) e dois algoritmos propostos para resolverem problemas de classificação de dados (SRABNET e SAINET). As etapas que compõem o algoritmo de visualização de redes imunológicas, desenvolvido no decorrer do trabalho, são também descritas neste capítulo.

3.1 Rede de Anticorpos com Valores Reais (RABNET)

Inspirado em idéias da imunologia, discutidas em seções anteriores, o desenvolvimento da Rede de anticorpos com Valores Reais, em inglês, *Real-Valued Antibody Network* (RABNET) supõe uma população de antígenos (Ag) que devem ser reconhecidos por um repertório de anticorpos (Ab), modelado como uma rede neural competitiva com pesos reais. No início do processo de adaptação, a RABNET contém um único anticorpo (neurônio) na rede e cresce quando necessário. Similar ao trabalho proposto por de Castro et al. [de Castro et al., 2003], a RABNET apresenta as seguintes características principais:

- Rede competitiva com aprendizado não-supervisionado;
- Rede construtiva com fases de crescimento e poda governados por uma implementação do princípio da seleção clonal;
- Conexão com pesos reais, num espaço de formas euclidiano.

Além disso, um método baseado na teoria de grafos é apresentado como forma de determinar automaticamente o número de agrupamentos identificados pela rede.

3.1.1 Fase de competição

A fase competitiva do algoritmo envolve encontrar o anticorpo Ab_K mais similar ao antígeno Ag apresentado, isto é, encontrar o neurônio vencedor para o padrão de entrada apresentado. Este anticorpo é dito ter a maior afinidade ao antígeno.

$$K = \arg \min_k \|Ag - Ab_k\|, \forall k \quad (3.1)$$

Na implementação proposta, existe uma variável (v_i) que armazena a quantidade de antígenos mapeados por cada anticorpo, onde o índice i é o índice do anticorpo que possui a maior afinidade ao antígeno apresentado. Por exemplo, se o anticorpo com maior afinidade ao Ag_5 for o anticorpo 9 (Ab_9), então $v_9 = v_9 + 1$. A variável (v) é utilizada no cálculo do nível de concentração de cada anticorpo, o que corresponde ao número de antígenos reconhecidos por este anticorpo.

3.1.2 Processo de crescimento

O crescimento da rede é inspirado no princípio da seleção clonal, em que as células mais estimuladas são selecionadas para a clonagem. A escolha da célula mais estimulada é baseada na afinidade ao antígeno, determinado durante a fase competitiva, e também na concentração de antígenos reconhecidos por um anticorpo. O anticorpo com a maior concentração de antígenos gerará um único descendente (clone) e os dois anticorpos (o clonado e o clone) podem se tornar anticorpos de memória após a fase de maturação.

Dois parâmetros bio-inspirados controlam a dinâmica e a metadinâmica da rede: um relacionado à concentração dos antígenos reconhecidos por um dado anticorpo (v) e o outro relacionado ao limiar de afinidade (ϵ) entre um antígeno e um anticorpo. Todos os anticorpos j estimulados por mais de um antígeno ($v_j > 1$) são potenciais candidatos a serem clonados. O processo de crescimento da rede pode ser descrito pela seguinte sequência de passos, executados depois de uma sequência de λ iterações.

Se a iteração atual é múltipla de λ :

- Então o anticorpo Ab_s com maior nível de concentração v é escolhido para a clonagem. Se houver mais de um anticorpo com o nível de concentração igual ao maior nível, é escolhido um deles aleatoriamente.
- Dentre todos os antígenos reconhecidos pelo anticorpo Ab_s , o antígeno Ag_w com menor afinidade ao Ab_s é selecionado. Se a distância $\|Ab_s - Ag_w\| > \epsilon$, então o anticorpo Ab_s é clonado. Caso contrário, a estrutura da rede não muda.

O vetor de pesos do anticorpo recentemente criado recebe os atributos do antígeno (padrão de entrada) que possui a menor afinidade ao anticorpo já existente, isto é, a maior distância euclidiana ao anticorpo selecionado.

Formas Alternativas de Posicionamento do Anticorpo Incluído na Rede

Objetivando verificar a influência do posicionamento do novo anticorpo durante o processo de crescimento da rede de anticorpos, foram estudadas três novas formas de determinar o vetor de atributos do anticorpo incluído na rede.

1. Posicionamento do novo anticorpo no ponto médio entre o anticorpo pai e o pior antígeno mapeado

Buscando um posicionamento mais conservador do anticorpo adicionado à rede, utilizou-se como forma de determinar o vetor de atributos do novo anticorpo a média aritmética entre o anticorpo escolhido para ser clonado e o antígeno que possui maior distância euclidiana entre os antígenos mapeados pelo anticorpo escolhido, na forma:

$$Ab_{Novo} = \frac{Ab_{Clonado} + Ag_q}{2} \quad (3.2)$$

onde Ab_{Novo} é o vetor de atributos do anticorpo adicionado à rede; $Ab_{Clonado}$ é o vetor de atributos do anticorpo que foi clonado e Ag_q é o antígeno que possui a maior distância euclidiana entre os antígenos mapeados pelo anticorpo clonado.

2. Posicionamento do novo anticorpo usando *K-means*

Aqui, buscou-se utilizar um dos mais conhecidos algoritmos de agrupamento de dados, o *K-means* [Duda et al., 2000]. Aplicou-se o algoritmo *K-means* buscando descobrir dois grupos no sub-conjunto formado pelos dados (antígenos) mapeados pelo anticorpo a ser clonado. Após a descoberta dos atributos dos representantes dos dois grupos, substitui-se o anticorpo a ser

clonado por dois novos anticorpos cujos atributos foram determinados pelo algoritmo *K-means*. Sendo assim, o tamanho da rede aumenta de uma unidade.

3. Posicionamento do novo anticorpo usando PCA

A terceira alternativa considerada para a definição da posição do novo anticorpo na rede utiliza um método estatístico clássico denominado de Análise de Componentes Principais, em inglês, *Principal Component Analysis* (PCA) [Jolliffe, 2002]. Após a aplicação do PCA no sub-conjunto formado pelos dados (antígenos) mapeados pelo anticorpo a ser clonado, os anticorpos que substituirão o anticorpo clonado possuirão os atributos conforme as Equações 3.3 e 3.4, aumentando dessa forma o tamanho da rede em uma unidade.

$$Ab_1 = Ab_{clonado} + M * P \quad (3.3)$$

$$Ab_2 = Ab_{clonado} - M * P \quad (3.4)$$

onde $Ab_{clonado}$ é o vetor de atributos do anticorpo a ser clonado; M é a média aritmética dos vetores de atributos do sub-conjunto formado pelos dados (antígenos) mapeados pelo anticorpo a ser clonado; P é o vetor formado pelo primeiro componente da PCA, e Ab_1 e Ab_2 são os vetores de atributos dos novos anticorpos que serão adicionados à rede, em substituição a $Ab_{clonado}$.

3.1.3 Processo de Poda

A estratégia responsável pela poda da rede é baseada no nível de concentração de cada anticorpo. Se o nível de concentração de um certo anticorpo Ab_i for zero ($v_i = 0$), significa que esse anticorpo não foi estimulado por antígeno algum. Neste caso, o anticorpo i pode ser podado. O processo de poda da rede é executado em todas as iterações.

3.1.4 Atualização dos Anticorpos

A atualização dos atributos na RABNET é similar ao procedimento de atualização de pesos usado nas redes neurais competitivas com um único vencedor. A Equação 3.5 mostra a regra de atualização dos pesos, onde α é a taxa da aprendizagem e Ab_k é o anticorpo que reconhece o antígeno Ag .

$$Ab_k = Ab_k + \alpha * (Ag - Ab_k) \quad (3.5)$$

Desta forma, os anticorpos estão se movimentando constantemente na direção dos antígenos reconhecidos. Após γ iterações, a taxa α de aprendizagem é diminuída exponencialmente por um fator

σ . O valor inicial de α pertence ao intervalo $(0, 1)$.

3.1.5 Critério de Convergência

Duas características são importantes para definir um critério de convergência para a RABNET: a estabilidade da topologia da rede e a estabilidade dos vetores de atributos dos anticorpos da rede. Objetivando contemplar essas duas características, propõe-se um critério de convergência que verifica a estabilidade da topologia da rede (número de neurônios na rede) e a estabilidade dos vetores de atributos dos anticorpos (variação nos vetores de atributos). Supõe-se que a topologia da rede alcançou a estabilidade se, durante as últimas $10 * \lambda$ iterações, não houver nenhuma variação no número de anticorpos. O parâmetro λ controla o crescimento da rede. O processo de crescimento é executado a cada λ iterações. A manutenção da mesma topologia durante as últimas $10 * \lambda$ iterações significa que a estrutura da rede não se alterou durante 10 oportunidades de crescimento e $10 * \lambda$ possibilidades de poda, uma vez que o processo de poda é executado a cada iteração. Com relação aos atributos, considera-se que eles estabilizaram se a soma de seus módulos não apresentar uma variação maior do que 10^{-4} entre a iteração atual e a iteração $10 * \lambda$ passada.

3.1.6 Determinação do Número de Grupos

Um dos principais objetivos da RABNET é posicionar protótipos (anticorpos) no espaço com o objetivo de agrupar dados não rotulados. O procedimento de adaptação da RABNET constrói uma rede que associa cada elemento do conjunto de dados de entrada a um único anticorpo da rede na saída, por meio do produto interno entre a entrada atual e o vetor de atributos de cada anticorpo. Note que, como o vetor de atributos de um anticorpo corresponde ao vetor de pesos de um neurônio na rede neural, trata-se de um procedimento típico, ou seja, ponderar as entradas pelos correspondentes pesos do neurônio. Desta forma, a distribuição espacial dos padrões de entrada (antígenos) é representada pela distribuição espacial dos vetores de pesos da rede (anticorpos).

Entretanto, depois de concluído o aprendizado da rede, é necessário extrair a informação obtida, isto é, determinar automaticamente o número de agrupamentos detectados pela rede, uma vez que grupos de anticorpos conectados entre si correspondem a imagens internas de grupos de antígenos (grupos de dados). A fim de realizar esta tarefa, propõe-se o uso de uma árvore geradora mínima, em inglês, *Minimum Spanning Tree* (MST) [Zahn, 1971], uma poderosa ferramenta da teoria de grafos para agrupamento de dados. Os algoritmos de obtenção da Árvore Geradora Mínima (AGM) e do método de análise de ramos inconsistentes utilizados estão descritos em detalhes no Apêndice A.

3.1.7 Algoritmo de Adaptação

A implementação computacional do algoritmo RABNET pode ser feita usando o pseudocódigo abaixo, com os seguintes parâmetros de entrada e saída.

Parâmetros de entrada:

- Limiar de afinidade entre antígenos e anticorpos (ϵ);
- Taxa de aprendizagem inicial (α);
- Fator que controla o decréscimo da taxa de aprendizagem (σ);
- Número de iterações a partir da qual a taxa de aprendizagem diminui (γ);
- A cada λ iterações a rede tem possibilidade de crescer.

Parâmetros de saída:

- Matriz $|AB|$ correspondente ao conjunto de anticorpos (protótipos);
- Matriz $|G|$ que contém os índices dos anticorpos pertencentes a cada grupo.

Algoritmo 1 Pseudo código do algoritmo RABNET.

```

1:  $[AB, G] = \text{Função RABNET}(\text{Conjunto de Dados}, \epsilon, \lambda, \gamma, \alpha, \sigma)$ 
2: Inicialize de forma aleatória o vetor de atributos do único anticorpo presente na rede;
3: Enquanto não alcançar o critério de convergência Faça
4:   Para cada padrão de entrada (antígeno) Faça
5:     Apresente um antígeno aleatório à rede, sem repetição;
6:     Calcule a distância euclidiana entre o antígeno apresentado e todos os anticorpos da rede;
7:     Encontre o anticorpo vencedor (Equação 3.1);
8:     Aumente o nível de concentração do vencedor;
9:     Atualize o vetor de atributos do anticorpo vencedor de acordo com a Equação 3.5;
10:   Fim para
11:   Se iteração  $> \gamma$  Então
12:      $\alpha = \sigma * \alpha$ ;
13:   Fim se
14:   Se a iteração for múltiplo de  $\lambda$  Então
15:     Realize clonagem, se necessário (Seção 3.1.2);
16:   Fim se
17:   Se existir um ou mais anticorpos com nível de concentração igual a zero Então
18:     Este(s) poderá(ão) ser podado(s) da rede;
19:   Fim se
20: Fim enquanto
21: Use o critério da MST discutido para segmentar automaticamente os anticorpos na saída da rede.
22: Fim

```

3.2 SRABNET: Uma Rede Neuro-imunológica Supervisionada

No contexto do desenvolvimento de ferramentas que utilizam como inspiração o sistema imunológico, a maioria dos trabalhos se concentra em propor algoritmos com aprendizado não-supervisionado, destinados a resolver problemas de agrupamento de padrões (clusterização) [de Castro & Von Zuben, 2002], [Rojas et al., 2003], [Knidel et al., 2005a], [Timmis & Neal, 2001] e [de Castro et al., 2003] em várias sub-áreas de aplicação, dentre elas: mineração de dados, descoberta de conhecimento, segmentação de imagens e recuperação de documentos. Outra área com várias aplicações de algoritmos imuno-inspirados está relacionada à solução de problemas de otimização [de Castro & Timmis, 2002a], [Hasegawa & Iba, 2004] e [de França et al., 2005]. No que tange a utilização de algoritmos imuno-inspirados com aprendizagem supervisionada, pode-se relacionar os trabalhos desenvolvidos por Watkins e Timmis [Watkins & Timmis, 2002] e por Carter [Carter, 2000].

A junção de um paradigma de aprendizagem supervisionada a uma ferramenta inspirada no sistema imunológico é motivada pelo fato desta última possuir características tais como: maturação de afinidade, memória, diversidade, auto-regulação e metadinâmica, que são extremamente desejáveis numa ferramenta aplicada à classificação de padrões.

Inspirada em idéias provenientes das redes neurais artificiais e dos sistemas imunológicos artificiais, a SRABNET supõe uma população de antígenos (Ag) a serem reconhecidos por um repertório de anticorpos (Ab), modelado como uma rede neural supervisionada, competitiva, unidimensional e de pesos reais. No início da adaptação da rede, a SRABNET contém um único anticorpo para cada classe. Os vetores de atributos de cada anticorpo são a média aritmética dos dados que pertencem à classe a que o anticorpo é atribuído. Em resumo, as seguintes características estão presentes na SRABNET:

- Rede competitiva com aprendizado supervisionado;
- Rede construtiva com as fases de crescimento e poda controlados por uma implementação do princípio da seleção clonal;
- Vetores de atributos de conexão pertencentes ao conjunto dos números reais, num espaço de formas euclidiano [Segel & Perelson, 1988];

Dado o estado atual da rede, o critério de convergência é baseado em uma janela composta de l inserções consecutivas de anticorpos na rede atual. Se, entre as l propostas, nenhuma for capaz de superar o desempenho da rede atual, então o processo de adaptação da topologia é encerrado e a rede final será a rede atual. Caso contrário, a rede atual será aquela que apresentar o melhor desempenho.

O processo de adaptação da topologia continuará com a nova rede de referência. O procedimento completo de adaptação é descrito em detalhes a seguir.

3.2.1 Fase Competitiva

O algoritmo começa com uma fase competitiva que envolve encontrar o anticorpo Ab_k mais similar ao antígeno Ag apresentado, ou, de forma equivalente, encontrar o neurônio vencedor para um dado padrão de entrada. O anticorpo mais similar é o que apresenta a menor distância euclidiana ao antígeno apresentado, na forma:

$$K = \arg \min_k \|Ag - Ab_k\|, \forall k \quad (3.6)$$

Para calcular o nível de concentração de cada anticorpo, uma variável v_K é incrementada de uma unidade cada vez que o anticorpo Ab_K tem a maior afinidade dentre os anticorpos presentes no repertório. Por exemplo, se o anticorpo com maior afinidade ao antígeno Ag apresentado for o anticorpo 5 (Ab_5), então $v_5 = v_5 + 1$. O nível de concentração corresponde ao número de antígenos reconhecidos por cada anticorpo.

3.2.2 Crescimento da Rede

O crescimento da rede é executado a cada época. O anticorpo escolhido para ser duplicado é aquele com maior distância euclidiana máxima aos antígenos por ele reconhecidos. Em outras palavras, esse anticorpo possui a menor afinidade de reconhecimento de toda a rede, para algum antígeno. Como forma de ilustrar o processo de crescimento da rede, vamos considerar o cenário proposto na Figura 3.1(a). Inicialmente, foi definido que os dados marcados com + azul seriam mapeados por anticorpos rotulados com a etiqueta 1 (Classe 1), e que dados marcados com * vermelho seriam mapeados por anticorpos rotulados com a etiqueta 2 (Classe 2). No cenário considerado, Figura 3.1(a), será duplicado o anticorpo 1, pois ele reconhece um antígeno com menor afinidade (maior distância euclidiana). O antígeno com menor afinidade está marcado com um círculo na Figura 3.1(b). A localização do novo anticorpo dentro do espaço de forma, associado com o vetor de pesos, é definido como o ponto médio na linha que conecta o anticorpo a ser duplicado e o antígeno reconhecido com menor afinidade (Figura 3.1(b)). O novo anticorpo pertencerá à classe que possuir o máximo número de elementos (antígenos) entre os elementos que agora serão representados por esse novo anticorpo. No exemplo considerado, o novo anticorpo será rotulado como pertencente à classe 2 (marcadas com * vermelho), embora o seu antecessor seja o anticorpo 1 (Figura 3.1(c)). Caso haja mais de uma classe com o mesmo número máximo de elementos reconhecidos, a escolha da classe será aleatória

entre as classes com o maior número de elementos. Dependendo da distribuição de antígenos no espaço de formas, a classe a ser atribuída ao novo anticorpo gerado pode diferir da classe do seu antecessor, como ilustrado na Figura 3.1. O crescimento da rede é interrompido quando o critério de convergência for alcançado.

Na Figura 3.1, pode-se observar que a localização inicial dos anticorpos no espaço de formas (definição dos vetores de pesos correspondentes), como a posição média considerando todas as amostras de cada classe específica, não requer tratamento especial para evitar configurações inesperadas. De fato, conforme ilustrado na Figura 3.1(a), o anticorpo inicial para a classe 2 aparecerá onde não existem amostras da classe 2 (marcadas com * vermelho e uma alta densidade de amostras da classe 1 (marcadas com + azul). A Figura 3.1(a) mostra a inicialização dos anticorpos com seus rótulos e a Figura 3.1(b) ilustra a execução da construção da rede até o Passo 13 no Algoritmo 2. O efeito da auto-organização dos anticorpos, causado pela introdução de um terceiro anticorpo, é ilustrado na Figura 3.1(c), incluindo o evento de re-rotulagem de um anticorpo.

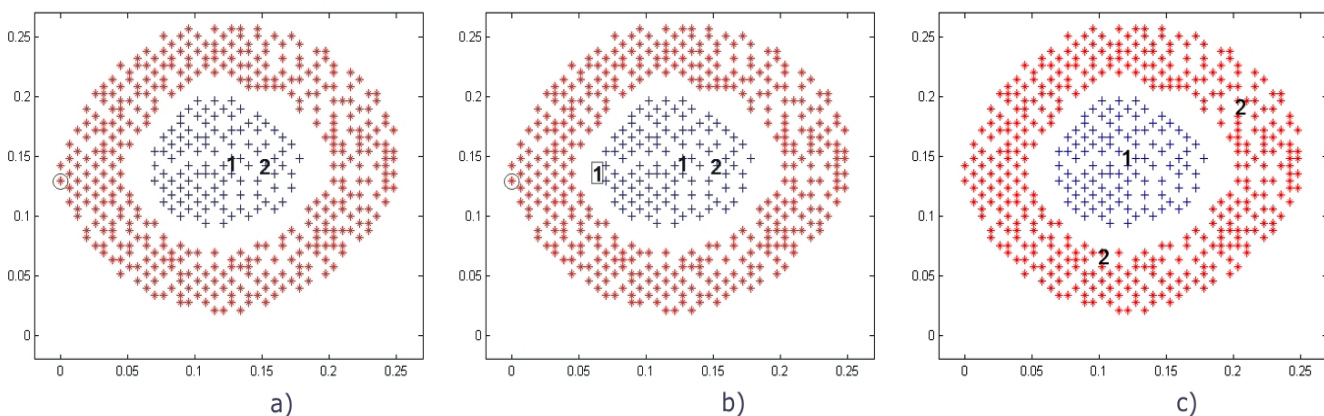


Fig. 3.1: Processo de crescimento da rede e rotulação da classe do novo anticorpo.

3.2.3 Poda da Rede

No aprendizado supervisionado, cada classe deve ter pelo menos um anticorpo representando suas amostras. Partindo desse requisito, a estratégia adotada para executar a poda da rede é baseada em dois critérios: no nível de concentração de cada anticorpo e no número de anticorpos por classe. Dessa forma, se um dado anticorpo Ab_k não for o único representante de sua classe e o seu nível de concentração (número de antígenos reconhecidos) for zero ($v_k = 0$), significa que o mesmo não foi estimulado por antígeno algum, podendo dessa forma ser eliminado. O processo que verifica a necessidade de poda na rede é executado a cada iteração.

3.2.4 Atualização dos Anticorpos

O procedimento de atualização dos vetores de atributos na SRABNET é similar ao utilizado na Aprendizagem por Quantização Vetorial, em inglês *Learning Vector Quantization* (LVQ) [Kohonen, 1989] e [Kohonen, 2000]. A Equação 3.7 mostra a regra de atualização dos pesos adotada aqui, onde α é a taxa da aprendizagem e Ab_i é o anticorpo que reconhece o antígeno Ag .

$$Ab_i(t+1) = \begin{cases} Ab_i(t) + \alpha * (Ag - Ab_i(t)), & \text{Se } Classe(Ab_i) = Classe(Ag) \\ Ab_i(t) - \alpha * (Ag - Ab_i(t)), & \text{Caso contrário.} \end{cases} \quad (3.7)$$

3.2.5 Critério de convergência

Quando o processo de aprendizagem envolve uma rede construtiva, decidir quando a rede deve parar de crescer é uma tarefa difícil. Para executar essa tarefa, desenvolveu-se uma abordagem que usa dois conceitos. O primeiro é a *rede de referência*, que significa a rede com o melhor desempenho até o momento. O outro conceito, denominado de *janela de convergência*, está relacionado ao número de redes que terão o desempenho comparado à *rede de referência*. Esses conceitos estão ilustrados na Figura 3.2. O tamanho da janela de convergência define o número de redes a serem comparadas à *rede de referência*. A avaliação de desempenho das redes nesse ponto é feita exclusivamente usando dados de treinamento.

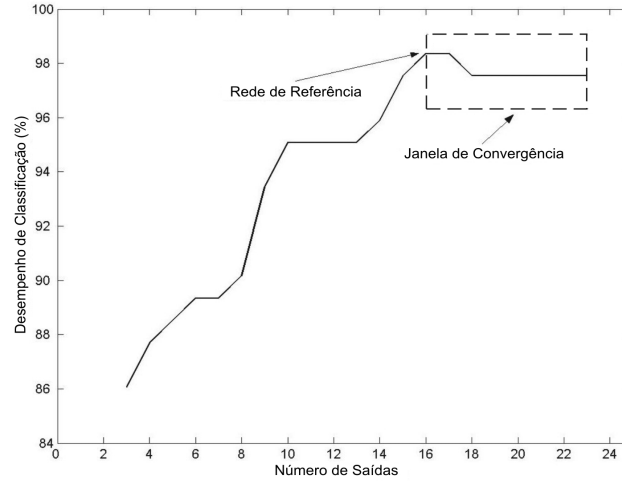


Fig. 3.2: Uso de uma janela de convergência para avaliar o critério de parada do algoritmo.

Uma vez definido o tamanho l da janela de convergência, a abordagem proposta avalia o desempenho de redes subsequentes, mas restritas à janela de convergência. Se alguma das topologias dentro da janela apresentar melhor desempenho do que a rede de referência atual, a rede de referência será

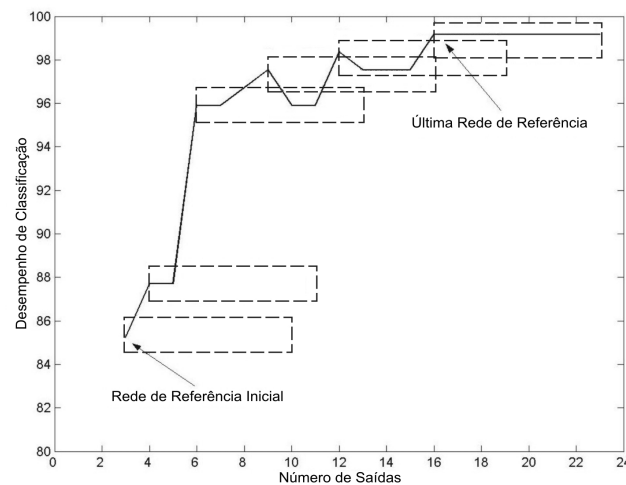


Fig. 3.3: Dinâmica da janela de convergência e atualização da rede de referência.

substituída pela rede de melhor desempenho, como pode ser visualizado na Figura 3.3. Se nenhuma das topologias dentro da janela de convergência apresentar melhor desempenho do que a rede de referência, o critério de convergência é satisfeito e o processo de aprendizado termina, finalizando a adaptação da topologia. Neste caso, a topologia resultante será a rede de referência. Como ilustração do processo, na Figura 3.3 é tomada uma janela de convergência de tamanho 7. A última rede de referência será a rede com 16 anticorpos. As redes com 17, 18, 19, 20, 21, 22 e 23 anticorpos serão avaliadas para comparação. Visto que o desempenho de classificação dessas redes é menor ou igual àquele produzido pela rede de referência, o critério de convergência foi alcançado e a topologia resultante será a rede com 16 anticorpos. O número máximo de anticorpos a ser inserido numa rede é igual a um quarto do tamanho do conjunto de dados.

3.2.6 Algoritmo de Adaptação

A implementação computacional do algoritmo SRABNET pode ser feita usando o pseudocódigo abaixo, a partir dos seguintes parâmetros de entrada e saída.

Parâmetros de entrada:

- Tamanho L da janela de convergência;
- Taxa de aprendizagem inicial (α);
- Fator que controla o decréscimo da taxa de aprendizagem (σ);

Parâmetros de saída:

- Matriz $|AB|$ correspondente ao conjunto de anticorpos (protótipos);
- Vetor $|R|$ que contém os rótulos dos anticorpos da matriz AB .

Algoritmo 2 Pseudo código do algoritmo SRABNET.

```

1:  $[AB, R] = \text{Função SRABNET}(\text{Conjunto de Dados}, L, \alpha, \sigma)$ 
2: Inicialize a rede com um anticorpo para cada classe presente nos dados de treinamento. Os vetores de atributos de cada um destes anticorpos são a média aritmética dos dados que pertencem à classe a que o anticorpo foi atribuído;
3: Enquanto não alcançar o critério de convergência Faça
4:   Para Para cada padrão de entrada (antígeno) Faça
5:     Apresente um antígeno escolhido aleatoriamente à rede, sem repetição;
6:     Calcule a distância euclidiana entre o antígeno apresentado e todos os anticorpos da rede;
7:     Aumente o nível de concentração do vencedor;
8:     Atualize os pesos do anticorpo vencedor de acordo com a Equação 3.7;
9:   Fim para
10:  Escolha o anticorpo a ser duplicado. O anticorpo a ser duplicado será o que reconhece um antígeno com a menor afinidade (maior distância euclidiana);
11:  O vetor de atributos do novo anticorpo é a média entre o anticorpo original e o antígeno mais distante;
12:  O novo anticorpo pertencerá à classe que possuir o número máximo de elementos entre os reconhecidos pelo novo anticorpo;
13:  Se o nível de concentração de um dado anticorpo for zero e ele não for o único da sua classe Então
14:    Exclua-o da rede;
15:  Fim se
16: Fim enquanto
17: Fim

```

3.3 SAINET: Uma Rede Imunológica Supervisionada

3.3.1 Introdução

A SAINET (Supervised Artificial Immune NETwork) é um algoritmo destinado à classificação de dados. O desenvolvimento da SAINET buscou explorar a utilização da AINET, um algoritmo de agru-

pamento de dados, proposto por [de Castro & Von Zuben, 2000] e [de Castro & Von Zuben, 2002], e que apresenta características importantes, como a capacidade de descrever a estrutura interna dos antígenos (dados de treinamento), seu perfil de distribuição de probabilidade e relações de vizinhança (grupos). As subseções seguintes apresentarão uma breve descrição da AINET e de como ela é utilizada dentro do novo algoritmo proposto.

3.3.2 SAINET: AINET Supervisionada

O funcionamento da SAINET compreende três fases. A primeira fase é dedicada à aplicação da AINET ao conjunto de dados analisado. Nesta fase, o objetivo é construir um conjunto de memória que reconheça e represente a organização estrutural dos dados. O tamanho do conjunto de memória (número de anticorpos) é controlado por um limiar de supressão relacionado à especificidade dos anticorpos presentes na rede. Quanto mais específicos os anticorpos, menos parcimoniosa será a rede (baixa taxa de compressão). Por se tratar de uma abordagem supervisionada, é necessário rotular os anticorpos responsáveis pela classificação dos dados. Dessa forma, utiliza-se um vetor que contém o rótulo a que cada anticorpo pertence. Quando um anticorpo é clonado, o rótulo do clone será igual ao rótulo do anticorpo do qual ele se originou.

A segunda fase está relacionada à execução de uma heurística que verificará a necessidade da duplicação de cada anticorpo, baseada nos padrões que o mesmo reconhece. Em termos imunológicos, a heurística verificará se os anticorpos reconhecem uma quantidade considerável de padrões não-próprios, ou seja, padrões pertencentes a classes diferentes daquela do anticorpo. Caso o anticorpo reconheça uma porcentagem de padrões não-próprios maior que um limiar definido pelo usuário (Limiar de Reconhecimento de Padrões Não-Próprios - LRPNP), esse anticorpo será duplicado. Os atributos do novo anticorpo são a média aritmética das amostras pertencentes à classe considerada. Suponha que um anticorpo Ab seja rotulado para reconhecer padrões da classe x e reconheça 15 padrões pertencentes à classe x , 10 padrões pertencentes à classe y e 3 padrões pertencentes à classe z . Como ilustração, vamos adotar o valor do LRPNP igual a 0,4. Desta forma, quando a razão do número de padrões reconhecidos pelo anticorpo, e pertencentes a uma classe diferente da classe do anticorpo, pelo número de padrões pertencentes à classe do anticorpo for maior do que 0,4, esse anticorpo será duplicado. Analisando primeiro em relação à classe y , nota-se que a razão entre o número de padrões reconhecidos pelo anticorpo Ab pertencentes à classe y e pertencentes a sua classe é igual a $10/15 \cong 0,66$, valor superior ao LRPNP, significando dessa forma que o anticorpo Ab deverá ser duplicado. O novo anticorpo pertencerá à classe y e terá como valor dos seus atributos a média dos pesos dos 10 padrões pertencentes à classe y . Quando consideramos a razão entre o número de padrões reconhecidos pelo anticorpo Ab pertencentes à classe z e pertencentes a sua classe, cujo valor é $3/15 = 0,2$, percebe-se que ele é inferior ao limiar LRPNP, significando que não há necessidade de

criação de um anticorpo derivado do anticorpo Ab , responsável pelos padrões da classe z . A adoção da heurística proposta vai no sentido de tornar cada anticorpo específico à sua classe.

A terceira fase envolve basicamente o processo de atualização dos pesos. É nessa fase que está presente o paradigma de aprendizagem supervisionada. A atualização dos pesos adotada é similar à utilizada na Aprendizagem por Quantização Vetorial, em inglês *Learning Vector Quantization* (LVQ) [Kohonen, 1989] e [Kohonen, 2000]. A Equação 3.8 mostra a regra de atualização dos pesos:

$$Ab_k(t+1) = \begin{cases} Ab_k(t) + \alpha * (Ag - Ab_k(t)), & \text{Se } Classe(Ab_k) == Classe(Ag) \\ Ab_k(t) - \alpha * (Ag - Ab_k(t)), & \text{Caso contrário.} \end{cases} \quad (3.8)$$

onde α é a taxa da aprendizagem e Ab_k é o anticorpo que reconhece o antígeno Ag .

3.3.3 Algoritmo de Adaptação

A implementação computacional do algoritmo SAINET pode ser associada ao pseudocódigo da página seguinte, a partir dos seguintes parâmetros de entrada e saída.

Parâmetro de entrada:

- Gen é o número de épocas considerado;
- Nc é o número de clones gerados;
- Ts é o limiar de supressão usado na eliminação de anticorpos que se auto-reconhecem;
- Tr é o limiar de reconhecimento de padrões não-próprios;
- α é a taxa de aprendizagem;
- σ é fator que controla o decaimento da taxa de aprendizagem;

Parâmetros de saída:

- Matriz $|AB|$ correspondente ao conjunto de anticorpos (protótipos);
- Vetor de Classes $|R|$ que contém os rótulos (classes) dos anticorpos da matriz AB .

Algoritmo 3 Pseudocódigo do algoritmo SAINET.

```

1:  $[AB, R] = \text{Função SAINET}(\text{Conjunto de Dados}, Gen, Nc, Ts, Tr, \alpha, \sigma)$ 
2: Inicialize a rede com um anticorpo para cada classe presente nos dados de treinamento. O vetor de atributos de cada um desses anticorpos é definido pela média aritmética dos dados que pertencem à classe a que o anticorpo foi atribuído;
3: Enquanto iteração for menor do que o número máximo de gerações ( $Gen$ ) Faça
4:   Para cada padrão de entrada (antígeno) Faça
5:     Apresente um antígeno escolhido aleatoriamente à rede, sem repetição;
6:     Calcule a distância euclidiana entre o antígeno apresentado e todos os anticorpos da rede;
7:     Clone o anticorpo vencedor (mais próximo ao antígeno apresentado) produzindo  $Nc$  clones;
8:     Atualize os atributos do anticorpo vencedor de acordo com  $Ab_K = Ab_K + \alpha * (Ag_i - Ab_K)$ , onde  $K$  é o índice do anticorpo vencedor,  $\alpha$  é a taxa de aprendizagem e  $i$  é o índice do antígeno apresentado;
9:   Fim para
10:  Atualize o fator de aprendizagem:  $\alpha = \sigma * \alpha$ ;
11:  Suprima os anticorpos que se auto-reconhecem dentro do limiar de supressão  $Ts$ ;
12: Fim enquanto
13: Para cada anticorpo Faça
14:   Para cada classe diferente da classe do anticorpo em análise Faça
15:     Se razão do número de padrões reconhecidos pelo anticorpo, e pertencentes a uma classe diferente da classe do anticorpo, pelo número de padrões pertencentes à classe do anticorpo for maior do que  $Tr$  Então
16:       Duplique o anticorpo, cujo vetor de atributos será igual à média dos dados da classe analisada
17:     Fim se
18:   Fim para
19: Fim para
20: Enquanto iteração for menor do que o número máximo de gerações ( $Gen$ ) Faça
21:   Apresente um antígeno escolhido aleatoriamente à rede, sem repetição;
22:   Encontre o anticorpo vencedor e atualize o vetor de atributos desse anticorpo de acordo com a Equação 3.8;
23: Fim enquanto
24: Fim

```

3.4 Ferramenta para Visualização de Redes Imunológicas com Dados Numéricos Multivariados

3.4.1 Introdução

Nesta seção, será apresentado o desenvolvimento de uma ferramenta para a visualização de redes, obtida por algoritmos de inspiração imunológica ou neuro-imunológica. A entrada para a ferramenta de visualização desenvolvida é a saída de redes concebidas utilizando aprendizagem não-supervisionada. O fato de ser aplicada a redes que não utilizam o conceito de vizinhança a priori, amplia o campo de aplicações da ferramenta desenvolvida. Dentre as funcionalidades da ferramenta de visualização pode-se destacar a automatização do processo de análise dos resultados fornecidos pelos algoritmos em análise. Numa visão macro, a ferramenta de visualização fornecerá ao usuário subsídios para validar os resultados alcançados pelos algoritmos em processos de agrupamento. De forma mais específica, a ferramenta de visualização permitirá obter:

- Uma descrição da estrutura global dos grupos;
- A presença e forma de grupos;
- A presença de protótipos pouco representativos;
- A presença de *outliers*, ou seja, um dado isolado dos demais e que, portanto, caracteriza um grupo ou classe com uma única amostra, ou um problema na aquisição dos dados.

3.4.2 Descrição da Ferramenta de Visualização Desenvolvida

O funcionamento da ferramenta de visualização desenvolvida pode se dividido em quatro fases. Sendo a ferramenta adequada à visualização de redes obtidas por algoritmos que não utilizam vizinhança a priori, a primeira tarefa a ser feita é determinar uma relação de vizinhança entre os protótipos. Esta relação de vizinhança é conseguida através da utilização de um algoritmo de determinação da árvore geradora mínima (AGM) entre os protótipos envolvidos. O resultado da aplicação da AGM a um conjunto de protótipos é a definição de uma relação de vizinhança a *posteriori* entre os protótipos considerados.

De posse da árvore geradora mínima construída com os protótipos da rede, a próxima etapa é determinar os grupos presentes. A determinação dos grupos é feita pela análise de cada ramo da árvore. A análise em cada ramo da árvore permitirá identificar os ramos inconsistentes e eliminá-los. Após a eliminação, os elementos que ainda possuem ramos entre si pertencerão a um mesmo grupo.

Os algoritmos de obtenção da Árvore Geradora Mínima e do método de análise de ramos inconsistentes estão descritos em detalhes no Apêndice A.

Após determinar quantos grupos existem e quais protótipos pertencem a cada grupo, a próxima etapa a ser realizada é a projeção dos grupos, juntamente com os protótipos pertencentes ao $\mathbb{R}^n$, no espaço de 2 dimensões ($\mathbb{R}^2$). A projeção do $\mathbb{R}^n$ para o $\mathbb{R}^2$ é obtida através da utilização do algoritmo de escalamento multidimensional, em inglês, *Multi-dimensional Scaling* (MDS). O propósito do algoritmo de escalamento multidimensional é encontrar um conjunto de coordenadas no $\mathbb{R}^2$ de forma que a matriz de distâncias dessas coordenadas corresponda o mais próximo possível à matriz de distâncias entre os dados no espaço original ($\mathbb{R}^n$). O problema pode ser visto como um problema de otimização em que o objetivo é minimizar a diferença entre a matriz de distâncias dos dados, no caso específico protótipos, no espaço original ($\mathbb{R}^n$) e a matriz de distâncias das coordenadas no espaço projetado ($\mathbb{R}^2$), conforme a Equação 3.9:

$$F = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} (x_{ij} - d_{ij})^2}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} d_{ij}^2}} \quad (3.9)$$

onde x_{ij} é a distância do protótipo i ao protótipo j no $\mathbb{R}^n$ e d_{ij} é a distância do protótipo i ao protótipo j no $\mathbb{R}^2$.

O algoritmo de escalamento multidimensional utilizado é baseado na decomposição em valores singulares, e o seu funcionamento pode ser dividido em dois passos. Primeiramente, a matriz de distâncias dos dados no espaço original (D) é convertida em uma nova matriz K :

$$K_{ij} = -1/2 \left(D_{ij}^2 - e_j \sum_i c_i D_{ij}^2 - e_i \sum_j c_j D_{ij}^2 + \sum_{i,j} c_i c_j D_{ij}^2 \right) \quad (3.10)$$

onde $\sum_i c_i = 1$ e e_i é um vetor cujos elementos são 1.

O segundo passo é extrair o vetor de coordenadas da matriz K através da decomposição em autovetores. Se a matriz D é simétrica, então a matriz K é simétrica e pode ser decomposta em:

$$K = Q \Lambda Q^T \quad (3.11)$$

onde Q é a matriz cujas colunas são autovetores ortonormais e Λ é a matriz diagonal formada pelos autovalores.

Objetivando minimizar a diferença entre a matriz de distâncias dos dados no espaço original (D) e a matriz de distâncias dos dados projetados na dimensão k , escolhe-se os autovetores correspondentes aos k maiores autovalores. Considerando que os autovalores estão ordenados de forma decrescente,

o j -ésimo componente do ponto i do vetor de coordenadas é dado por:

$$x_{ij} = \sqrt{\Lambda_j} Q_{ij} \quad (3.12)$$

onde Λ_j é o j -ésimo autovalor e o intervalo do índice j é de 1 até k .

A projeção no $\mathbb{R}^2$ dos protótipos e dos grupos aos quais eles pertencem corresponde à terceira etapa do algoritmo de visualização. A projeção tenta obter uma configuração no $\mathbb{R}^2$ que seja a mais próxima da configuração no $\mathbb{R}^n$, em relação às distâncias.

A quarta e última etapa do algoritmo de visualização está relacionada à incorporação de informação de frequência de reconhecimento de cada protótipo. A informação corresponde a quantos padrões de treinamento cada protótipo reconhece. O número de padrões que cada protótipo reconhece é mostrado de forma gráfica pelo desenho de um raio formando uma circunferência ao redor de cada protótipo. Quanto maior o número de padrões de entrada reconhecidos por um protótipo, maior será o raio da circunferência associada.

O funcionamento da ferramenta de visualização proposta está resumido em 4 etapas:

- Etapa 1: Obtenção da Árvore Geradora Mínima no espaço original ($\mathbb{R}^n$);
- Etapa 2: Descoberta dos grupos através da eliminação de ramos inconsistentes (veja Apêndice A;
- Etapa 3: Projeção no $\mathbb{R}^2$ dos grupos encontrados no ($\mathbb{R}^n$), usando a técnica de escalamento multidimensional;
- Etapa 4: Incorporação de informações de frequência aos protótipos.

A Figura 3.4 mostra a parte gráfica da ferramenta de visualização. Nela, pode-se observar na parte superior esquerda um menu (*Load Prototypes*) onde é feita a leitura das informações dos protótipos e de quantos padrões de treinamento cada protótipo representa. A área de visualização é onde efetivamente a rede vai ser desenhada. Na área de visualização, as seguintes informações podem ser obtidas: número de grupos que compõem o conjunto de dados analisados, número de protótipos que compõem a rede, quais protótipos pertencem a cada grupo e quantos padrões de treinamento cada protótipo representa (informação de frequência). A Figura 3.4 ilustra a visualização de três grupos. O grupo localizado na parte superior esquerda é formado por 4 protótipos que mapeiam 55 dados ($12 + 20 + 16 + 7$). No lado direito da Figura 3.4, encontra-se a área que controla a inclusão e exclusão dos protótipos na rede. Aqui, o usuário pode interagir com a ferramenta de visualização excluindo e re-incluindo protótipos à rede, avaliando desta forma a significância de cada protótipo no processo de agrupamento. Para excluir um protótipo, primeiro o usuário precisa selecionar o protótipo desejado, clicando com o *mouse* sobre o mesmo ou selecionando-o na lista de protótipos pertencentes

à rede. Tendo selecionado o protótipo a ser excluído, basta o usuário clicar no botão exclusão de protótipos. O processo de re-inclusão de um protótipo na rede é realizado de forma similar, basta o usuário selecionar, na lista de protótipos excluídos, o protótipo que será re-incluído na rede e clicar no botão de re-inclusão de protótipos.

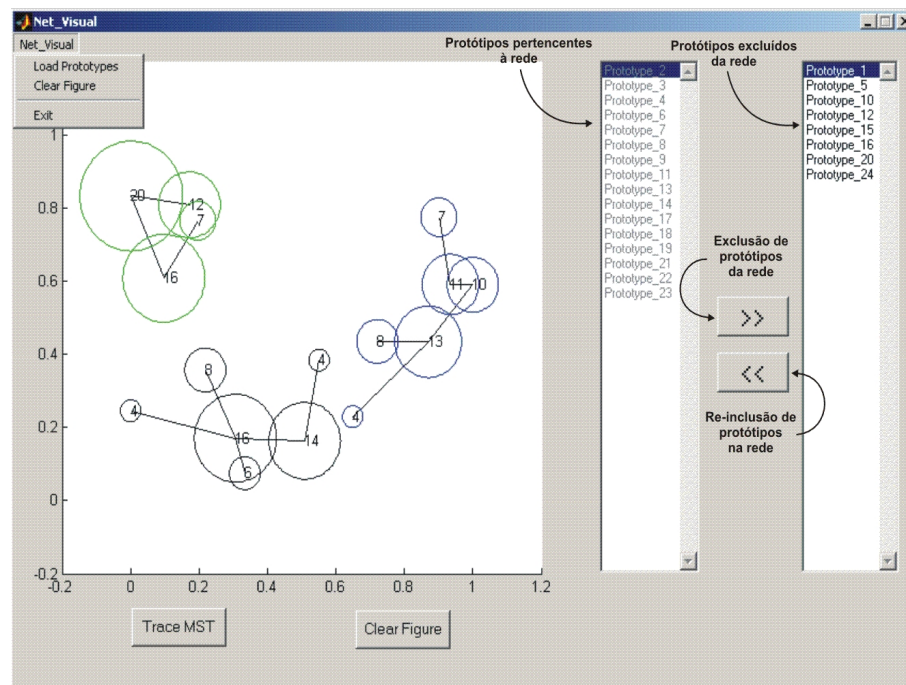


Fig. 3.4: Interface da ferramenta de visualização e suas respectivas funcionalidades.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

“ Uma vida sem desafios não vale a pena ser vivida.”

Sócrates

Neste capítulo, encontram-se os resultados obtidos com a aplicação dos algoritmos desenvolvidos em conjuntos de dados artificiais e em conjuntos de dados do mundo real. Uma análise de sensibilidade e desempenho das técnicas desenvolvidas em comparação com outras abordagens, é apresentada quando pertinente.

4.1 Avaliação de Desempenho da RABNET

A RABNET é uma ferramenta destinada a agrupamento de dados e tem como objetivo construir uma rede de anticorpos que refletirá a estrutura dos dados analisados, os quais são interpretados pela ferramenta como antígenos. Os anticorpos presentes na rede formada pela RABNET possuem papel similar aos neurônios nas redes neurais artificiais, mais especificamente aos neurônios das redes auto-organizáveis. Enquanto os neurônios são caracterizados pelo vetor de pesos associado, os anticorpos possuem uma cadeia de atributos que os caracterizam. Embora sejam comparadas nos seus elementos constituintes, as redes neurais diferem das redes formadas por anticorpos principalmente pelo fato das redes neurais manterem uma vizinhança topológica durante a fase de aprendizagem, diferentemente das redes imunológicas, que não possuem o conceito de vizinhança topológica. Nas redes imunológicas, a determinação da vizinhança entre os seus elementos constituintes é definida a posteriori, após o processo de aprendizagem.

No intuito de avaliar o desempenho da RABNET, aplicou-se o algoritmo desenvolvido a três problemas e comparou-se os resultados com a literatura, quando disponível e apropriado. Em particular, a RABNET foi aplicada ao conjunto de dados Animais [Ritter & Kohonen, 1989], ao conjunto de dados Duas Espirais [Fritzke, 1993] e ao conjunto de dados Anéis Entrelaçados [Fritzke, 1993]. Os parâmetros utilizados na RABNET em todos os experimentos relatados aqui foram: $\alpha = 0,2$, $\lambda = 2$, $\gamma = 100$ e $\sigma = 0,95$, a menos que especificado de outra maneira.

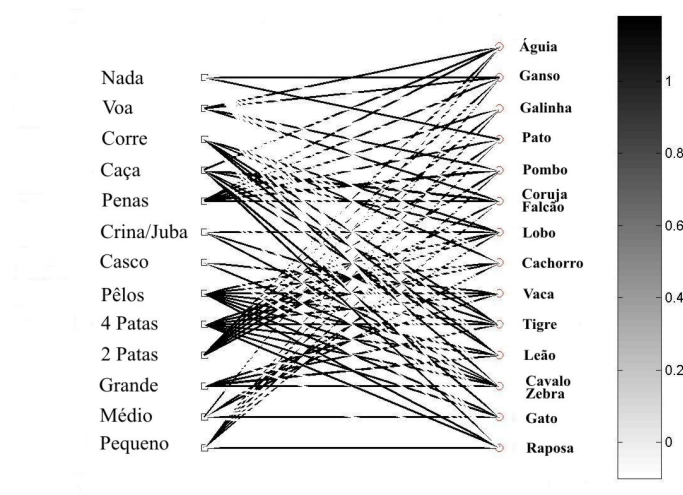
4.1.1 Conjunto de dados Animais

O conjunto de dados Animais foi introduzido originalmente por [Ritter & Kohonen, 1989] para ilustrar o uso de um mapa auto-organizável [Kohonen, 2000], objetivando agrupar dados semânticos. Ele consiste na descrição de 16 animais através de atributos binários, conforme a Tabela 4.1.

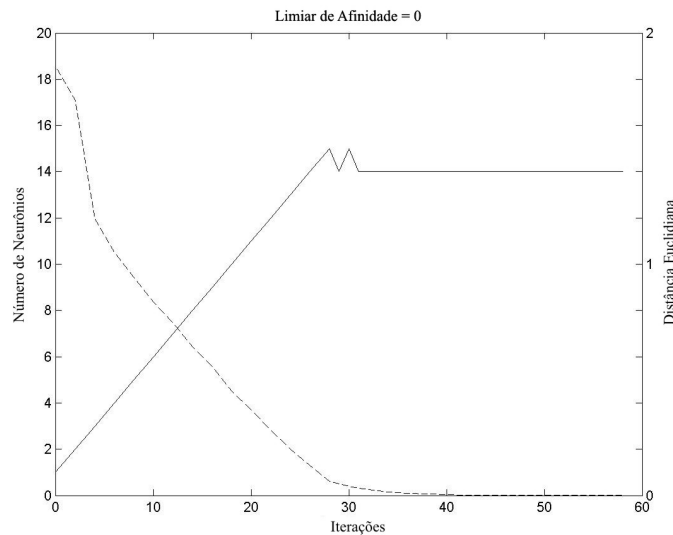
Tab. 4.1: Conjunto de dados Animais com nomes e seus respectivos atributos binários [Ritter & Kohonen, 1989].

		Pombo	Galinha	Pato	Ganso	Coruja	Falcão	Águia	Raposa	Cachorro	Lobo	Gato	Tigre	Leão	Cavalo	Zebra	Vaca
É	Pequeno	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
	Médio	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
	Grande	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1
Possui	Duas-patas	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Quatro-patas	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	Pêlos	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	Casco	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
	Crina/Juba	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0
	Penas	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Gosta de	Caçar	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0
	Correr	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1	1	1	0
	Voar	1	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Nadar	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Variando o limiar de afinidade ϵ , é possível obter redes com tamanhos diferentes, como ilustrado nas Figuras 4.1, 4.2 e 4.3. Nos itens (a) dessas figuras, a escala do lado direito representa o valor dos pesos de cada conexão, que é desenhado com o nível de cinza correspondente. As linhas mais escuras correspondem às conexões com os valores positivos maiores. Observe que valores mais elevados de ϵ resultam em redes mais generalistas, isto é, redes com um número menor de neurônios. Por exemplo,



(a) Estrutura final da rede. Quanto mais escuro o nível de cinza, mais próximo de 1 é o peso. Por outro lado, quanto mais claro o nível de cinza, mais próximo de 0 é o peso.

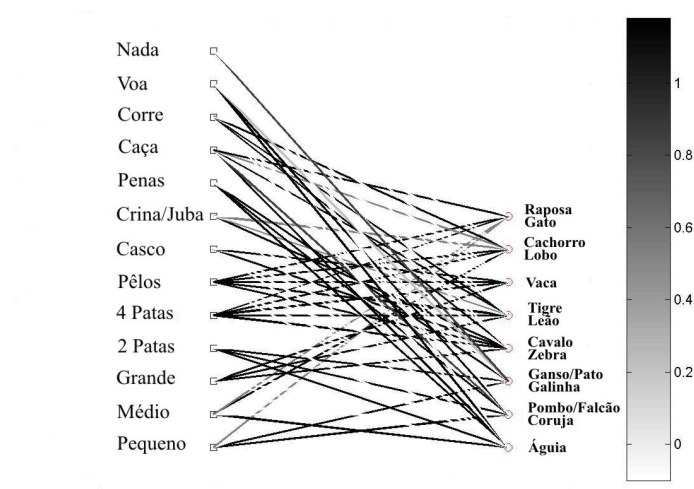


(b) Dinâmica da estrutura da rede e comportamento do Erro.

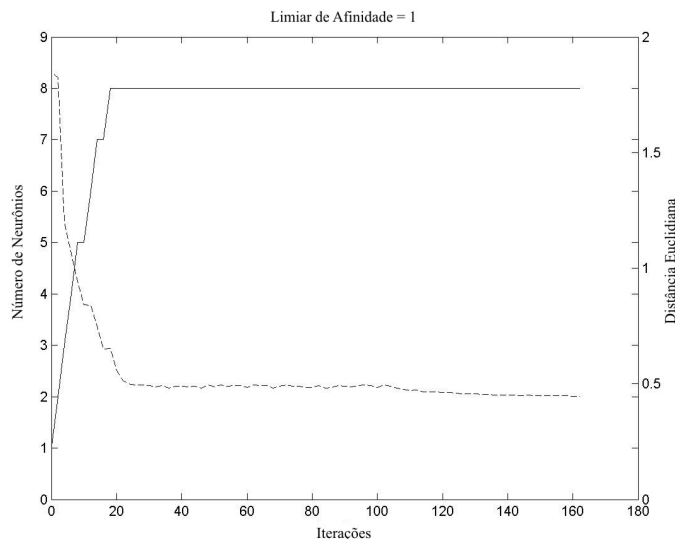
Fig. 4.1: Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 10^{-6}$.

para $\epsilon = 2$, pode-se observar que somente dois neurônios resultaram do processo de aprendizagem. Eles são responsáveis pelo mapeamento dos grupos dos pássaros e dos mamíferos, Figura 4.3(a), que são as duas maiores classes presentes nos conjuntos de dados Animais.

Com o uso de um limiar de afinidade com valor próximo de zero, por exemplo $\epsilon = 10^{-6}$, espera-se como resultado uma rede com o número de neurônios igual ao número de padrões de entrada.



(a) Estrutura final da rede. Quanto mais escuro o nível de cinza, mais próximo de 1 é o peso. Por outro lado, quanto mais claro o nível de cinza, mais próximo de 0 é o peso.

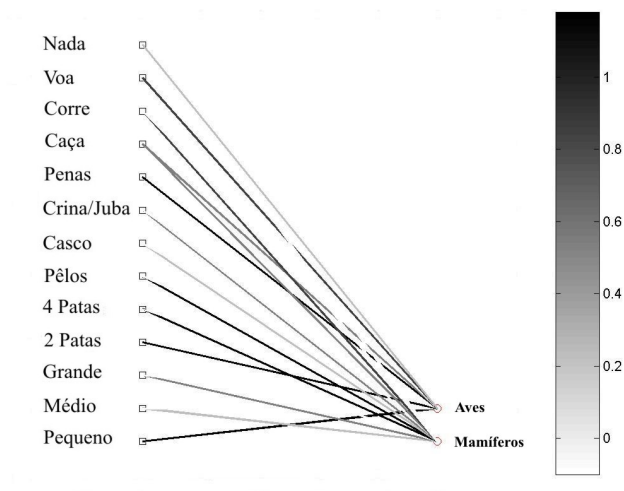


(b) Dinâmica da estrutura da rede e comportamento do Erro.

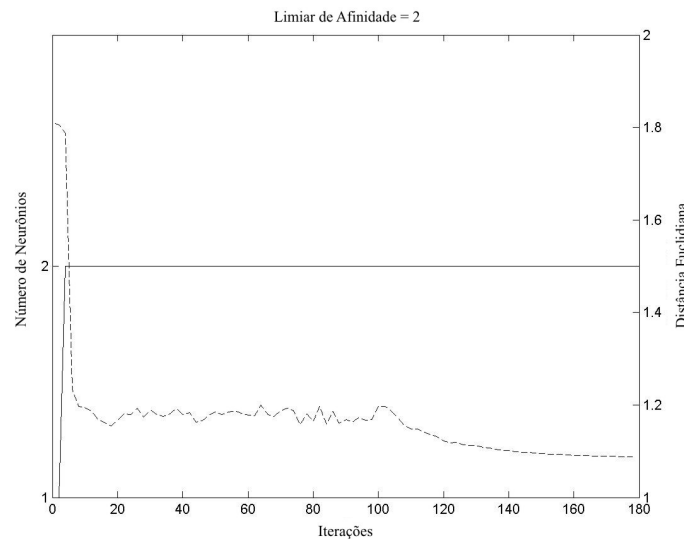
Fig. 4.2: Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 1$.

Entretanto, ao usar este valor para o conjunto de dados Animais, isto não foi verificado (veja Figura 4.1(a)). Após buscar uma possível justificativa, pode-se observar que esse comportamento é devido ao fato da coruja e do falcão possuírem exatamente os mesmos atributos, sendo assim mapeados no mesmo neurônio. O mesmo fenômeno foi observado com a zebra e o cavalo.

Na Figura 4.2(a), observou-se que a rede agrupou os animais de características similares num



(a) Estrutura final da rede. Quanto mais escuro o nível de cinza, mais próximo de 1 é o peso. Por outro lado, quanto mais claro o nível de cinza, mais próximo de 0 é o peso.



(b) Dinâmica da estrutura da rede e comportamento do Erro.

Fig. 4.3: Aplicação da RABNET ao conjunto de dados Animais, considerando $\epsilon = 2$.

mesmo grupo. Por exemplo, os grupos formados por raposa e gato, cão e lobo, tigre e leão, e assim por diante.

As Figuras 4.1(b), 4.2(b) e 4.3(b) trazem duas informações. Primeiro, em linhas tracejadas, o erro médio da rede, calculado pela distância euclidiana média entre cada neurônio e os padrões de entrada mapeados por ele. Segundo, as linhas contínuas correspondem à evolução do número de neurônios

Tab. 4.2: Resultado de classificação para o conjunto de dados Duas Espirais (baseados em [Kasabov, 2002] e [de Castro & Von Zuben, 2001]).

Algoritmo	Número de Células	Taxa de Erro(%)
GCS	145	0
DCS-GCS	135	0
LVQ	114	11,9
SOM	144	22,2
ESOM	105	0
aiNet	121	0
RABNET	100	0

na rede.

4.1.2 Conjunto de Dados Duas Espirais

O conjunto de dados Duas Espirais vem sendo utilizado para avaliar o desempenho de redes neurais construtivas não-supervisionadas [Fritzke, 1993], [de Castro et al., 2003]. O conjunto de dados usado possui 190 padrões de entrada, 95 em cada espiral, como apresentado na Figura 4.4(a). Os padrões de entrada foram ajustados dentro do intervalo $[0, 1]$, e o limiar de afinidade $\epsilon = 0,025$ foi obtido empiricamente. Comentários sobre a sensibilidade paramétrica do algoritmo serão apresentados na Seção 4.2.

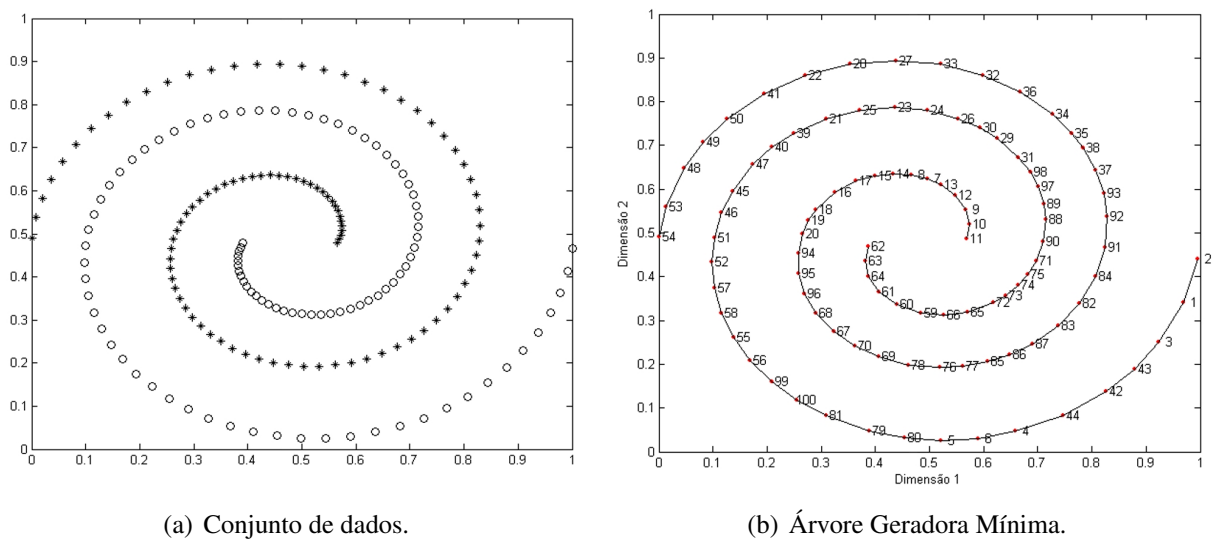


Fig. 4.4: (a) Conjunto de dados; e (b) distribuição espacial dos neurônios e grupos obtidos pela aplicação da RABNET aos dados das Duas Espirais.

Alguns resultados obtidos pela aplicação de diferentes algoritmos de aprendizagem não-supervisionada, incluindo a RABNET, são apresentados na Tabela 4.2, a qual mostra os melhores resultados de cada algoritmo. A Figura 4.4(b) descreve a posição espacial de cada neurônio na rede e o resultado da aplicação da MST à rede gerada. Antes de aplicar o procedimento de identificação de grupos, AGM (ver Apêndice A), as duas espirais na Figura 4.4(b) estavam conectadas por um ramo que foi considerado inconsistente, sendo assim, removido. Os números na Figura 4.4(b) correspondem aos índices dos neurônios presentes na rede construída pela RABNET.

Os resultados obtidos pela aplicação dos métodos chamados *Growing Cell Structures* (GCS), *Dynamic Cell Structures - Growing Cell Structures* (DCS-GCS), *Learning Vector Quantization* (LVQ), *Self Organizing Maps* (SOM), *Evolving Self Organizing Maps* (ESOM), e *Artificial Immune Network* (AINET) são relatados em [Kasabov, 2002] e [de Castro & Von Zuben, 2001].

Entre os algoritmos comparados, a RABNET forneceu a melhor taxa da compressão (47,37%) com erro de classificação igual a 0%, isto é, somente 100 neurônios foram introduzidos na rede a fim de obter 100% de sucesso na classificação.

Uma observação particularmente importante a ser feita aqui é a tendência à preservação de densidade da rede com relação aos dados originais. Nas regiões que apresentam elevada densidade de dados (centros das espirais), mais neurônios foram alocados. Por outro lado, nas regiões de baixa densidade de dados (extremidade das espirais), menos neurônios foram alocados, como pode ser visto na Figura 4.4(b).

4.1.3 Conjunto de Dados Anéis Entrelaçados

O conjunto de dados Anéis Entrelaçados [Fritzke, 1993] consiste de 1.000 padrões de entrada formando dois anéis entrelaçados numa superfície 3D, como visualizado na Figura 4.5. Os resultados apresentados pela RABNET, quando aplicados ao conjunto de dados Anéis Entrelaçados, são bastante promissores, como pode ser observado na Figura 4.6(a). Este resultado foi obtido usando um limiar de afinidade $\epsilon = 0,3$ e os outros parâmetros apresentados anteriormente. Observou-se que o algoritmo requer somente 14 protótipos para representar com 100% de exatidão os dados de entrada.

Um dos melhores resultados disponíveis na literatura para o problema de Anéis Entrelaçados foi obtido pela AINET [de Castro & Von Zuben, 2001]. Em sua configuração mínima, a AINET empregou 55 protótipos (células) para representar este conjunto de dados com 100% de acerto. A Figura 4.6(a) apresenta a distribuição espacial dos 2 conjuntos (anéis) gerados pela rede, e a Figura 4.6(b) apresenta o dendrograma correspondente. Um limiar de corte igual a 0,29 na Figura 4.6(b) resultará na definição de 2 grupos, um formado pelos protótipos $\langle 2, 3, 7, 8, 6, 5, 4 \rangle$, os quais correspondem aos protótipos que mapeiam os dados correspondentes ao anel vertical, Figura 4.6(a), e o outro formado pelos protótipos $\langle 9, 1, 13, 11, 12, 14, 10 \rangle$, os quais mapeiam os dados que formam o anel horizontal,

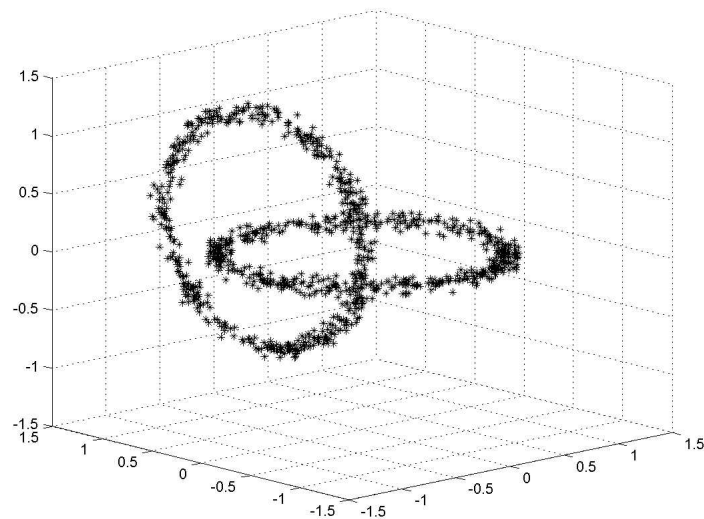
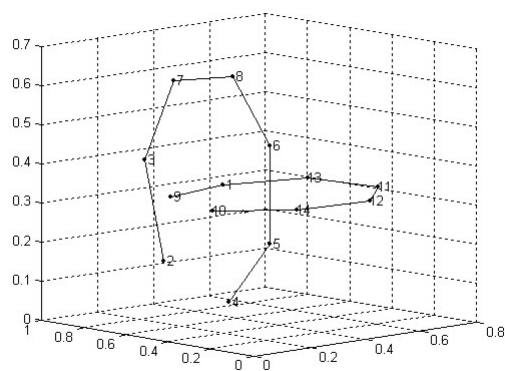
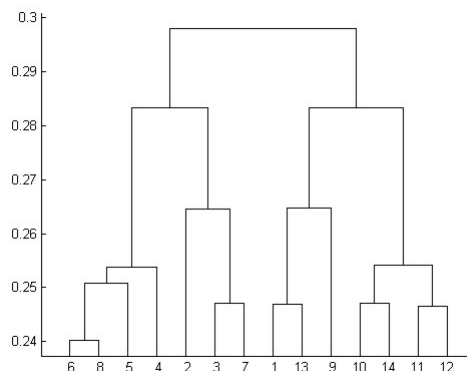


Fig. 4.5: Conjunto de dados Anéis Entrelaçados.



(a) Distribuição dos neurônios e grupos obtidos.



(b) Dendrograma dos anticorpos da RABNET.

Fig. 4.6: Resultados da aplicação da RABNET ao conjunto de dados Anéis Entrelaçados.

Figura 4.6(a). É importante observar que a AINET e a RABNET são modelos de rede diferentes. Em [de Castro & Von Zuben, 2001], encontra-se um resumo com as diferenças e similaridades entre a AINET e as redes neurais competitivas. As mesmas comparações podem ser feitas entre a RABNET e a AINET.

4.2 Análise de Sensibilidade da RABNET

A aplicação da RABNET à solução de um determinado problema requer a definição dos parâmetros α , λ , σ , γ e o limiar de afinidade ϵ . Objetivando estudar a influência desses parâmetros no comportamento e no resultado final da RABNET, uma análise parcial de sensibilidade do algoritmo foi executada com os conjuntos de dados Animais e Anéis Entrelaçados. Como discutido anteriormente, o parâmetro ϵ influencia a especificidade das células da rede e, portanto, o número final de anticorpos na rede: quanto menor o valor de ϵ maior o número de anticorpos na rede, e vice-versa. Este comportamento pode ser observado nas redes das Figuras 4.1(a), 4.2(a) e 4.3(a). A Tabela 4.3 resume o compromisso entre o número de células na rede e o limiar de afinidade ϵ , considerando o conjunto de dados Animais.

Tab. 4.3: Relação entre o número de neurônios da rede e o limiar de afinidade ϵ para o conjunto de dados Animais.

$\epsilon = 0$	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 2$
14 Células	8 Células	2 Células

Para estudar a influência de σ e γ no tamanho final da rede e no número de iterações necessárias para a convergência, 30 execuções independentes da RABNET foram feitas para o conjunto de dados Animais. Três valores diferentes para cada um desses parâmetros foram adotados: $\gamma = 20$, $\gamma = 100$ e $\gamma = 200$ e $\sigma = 0, 1$, $\sigma = 0, 5$ e $\sigma = 0, 95$. Os resultados são mostrados nas Figuras 4.7 e 4.8.

Pode-se observar nas Figuras 4.7 e 4.8 que os parâmetros σ e γ não exercem influência significativa no tamanho final da rede, mas influenciam fortemente o número de iterações para a convergência. Valores mais elevados de σ e γ resultaram em tempos mais longos de convergência.

Para avaliar a influência da taxa inicial de aprendizagem e do limiar de afinidade no tamanho final da rede, 10 execuções foram feitas com o conjunto de dados Anéis Entrelaçados. Os outros parâmetros usados nesta análise foram $\beta = 2$, $\gamma = 100$ e $\sigma = 0, 95$.

A Figura 4.9 mostra os resultados obtidos para o conjunto de dados Anéis Entrelaçados quando a taxa de aprendizagem inicial e o limiar de afinidade são variados. Na Figura 4.9, pode-se observar que, além do limiar de afinidade, a taxa de aprendizagem inicial α também influencia o número final de neurônios na rede, porém em menor grau. Para um limiar de afinidade constante, pode-se observar que, quanto menor a taxa de aprendizagem inicial, menor o número final de anticorpos na rede. Nos experimentos executados, pode-se observar também que, quando o valor inicial de α é muito pequeno, a rede não consegue alcançar uma estrutura adequada.

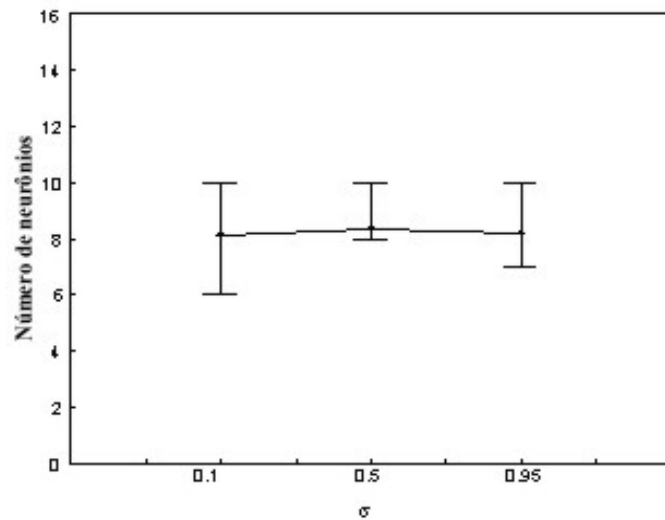
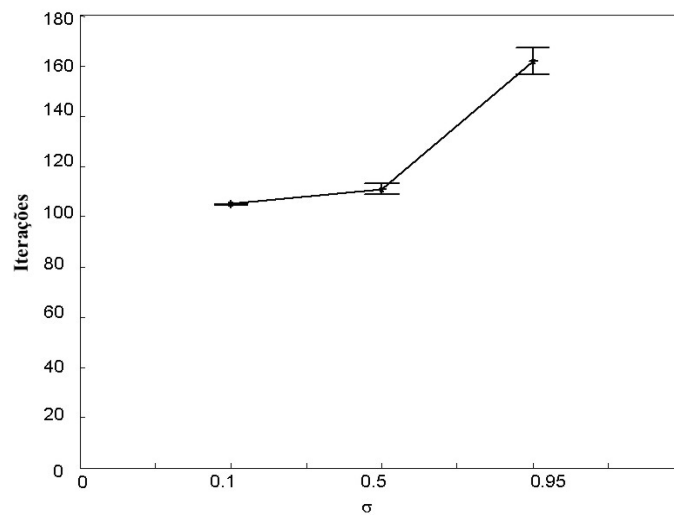
(a) Número de neurônios na rede em função de σ .(b) Número de iterações para a convergência em função de σ .

Fig. 4.7: Análise da influência do valor do parâmetro σ na rede, considerando $\sigma = 0,1$, $\sigma = 0,5$ e $\sigma = 0,95$.

4.3 Avaliação de Desempenho da SRABNET

Nesta seção, serão avaliados os resultados da aplicação da SRABNET, uma ferramenta destinada à classificação de dados. A SRABNET é uma versão supervisionada da RABNET, originalmente desenvolvida para resolver problemas de agrupamento de dados.

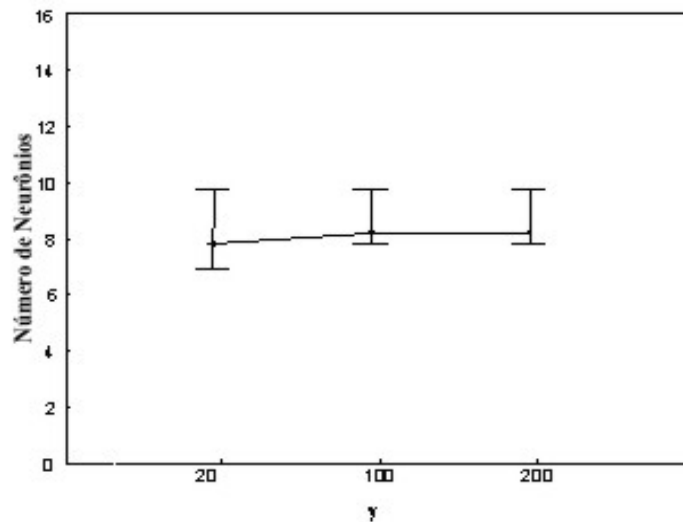
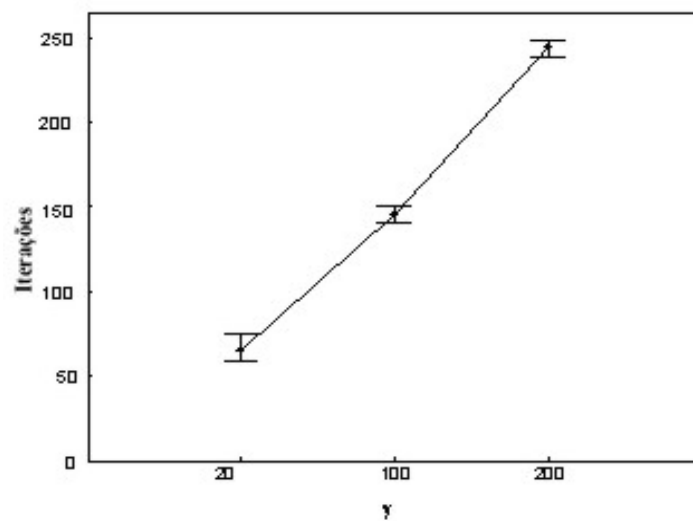
(a) Número de neurônios na rede em função de γ .(b) Número de iterações para a convergência em função de γ .

Fig. 4.8: Análise da influência do valor do parâmetro γ na rede, considerando $\gamma = 20$, $\gamma = 100$ e $\gamma = 200$.

4.3.1 Conjunto de Dados Artificiais

A aplicação do algoritmo SRABNET para resolver o problema de classificação artificial composto por 2 classes, conforme ilustrado na Figura 4.10 a), tem como propósito validar: o critério de inicialização dos pesos dos anticorpos iniciais, a técnica de clonagem de anticorpos adotada, o posicionamento do novo anticorpo, a proposta de re-rotulagem de um anticorpo e o critério de parada do

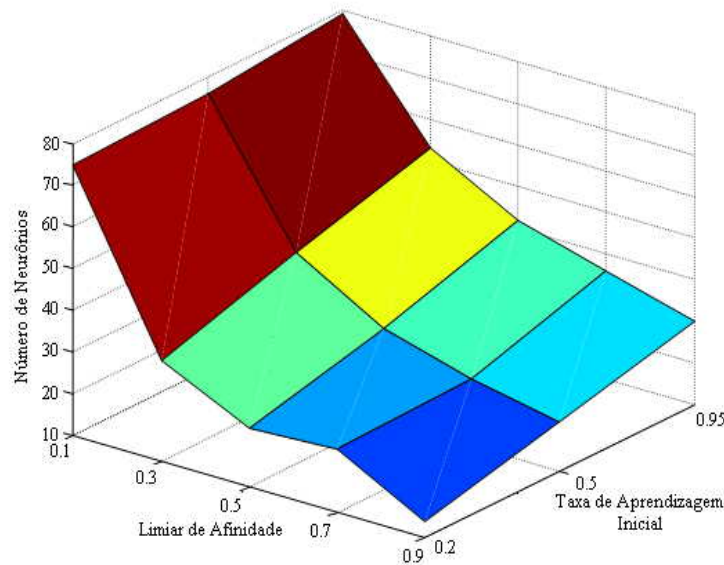


Fig. 4.9: Número médio de anticorpos na camada de saída em função da taxa de aprendizagem inicial e do limiar de afinidade, para o conjunto de dados Anéis Entrelaçados.

algoritmo.

Na Figura 4.10 (a), 1 e 2 representam os anticorpos de cada classe. 1 é o anticorpo da classe formada pelos dados marcado por + azul e 2 é o anticorpo da classe formada pelos dados marcados por * vermelho. A posição inicial dos anticorpos 1 e 2 é definida como sendo a média dos dados da classe que os mesmos representam. Na Figura 4.10 (b), o dado marcado por um círculo é o antígeno mais distante do anticorpo 2 sendo mapeado pelo anticorpo 1, o qual será clonado. O mapeamento do antígeno mais distante foi o critério adotado para a escolha do anticorpo a ser clonado. O novo anticorpo (marcado por um quadrado) será posicionado no ponto central da reta que liga o anticorpo 1 ao antígeno. Embora o novo anticorpo seja da classe 1, ele será re-rotulado, uma vez que a maioria dos dados que ele mapeia pertence à classe 2. Depois da re-rotulagem e do processo de atualização de pesos, os três anticorpos serão posicionados como mostrados na Figura 4.10 (c). As Figuras 4.10 (d) a (i) ilustram as diferentes redes ao longo dos processos de crescimento e atualização de pesos.

Os resultados ilustrados na Figura 4.10 validam as principais características da proposta. O critério utilizado para definir o peso do anticorpo inicial, como sendo a média dos pontos dos dados de cada classe, a definição do peso do novo anticorpo, como sendo a média dos pesos do antígeno mais distante e do anticorpo pai, e o processo de re-rotulagem, baseado no critério de maioria, mostraram-se robustos, não interferindo nos resultados de classificação.

Uma última observação está associada ao critério de parada, baseado na janela de convergência.

Considerado o conjunto de dados da Figura 4.10, é possível notar que o desempenho de classificação nem sempre melhora com o aumento do número de anticorpos, conforme pode ser observado na Figura 4.11. A rede com 13 anticorpos apresenta melhor ou igual desempenho de classificação quando comparada às redes que contêm mais anticorpos (redes compostas de 14 a 20 anticorpos). Este comportamento motiva e suporta o uso de uma janela de convergência para efetuar o critério de parada do algoritmo. Como uma consequência, a topologia resultante escolhida será a rede da Figura 4.10 (f) com 13 anticorpos, uma vez que ela representa o melhor desempenho na fase de treinamento.

4.3.2 Conjunto de Dados Reais

No intuito de avaliar o desempenho da SRABNET junto a conjuntos de dados reais, utilizaram-se três conjuntos de dados amplamente empregados por pesquisadores para validação de algoritmos desenvolvidos, e cujas características estão resumidas na Tabela 4.4.

Os resultados da aplicação da SRABNET aos conjuntos de dados reais estão resumidos na Tabela 4.5. Os resultados obtidos com a aplicação da SRABNET são comparados com o desempenho obtido pelo trabalho desenvolvido por Timmis: *Artificial Immune Recognition System* (AIRS) [Watkins & Timmis, 2002]. Observa-se que o desempenho da SRABNET e das duas versões do algoritmo AIRS [Watkins & Timmis, 2002], quando considera-se o sucesso na classificação, são equivalentes. Enquanto o AIRS apresenta um desempenho ligeiramente melhor do que a SRABNET nos conjuntos de dados Iris e Sonar, o desempenho apresentado pela SRABNET, quando aplicada ao conjunto de dados Diabetes, é ligeiramente superior.

Embora estas abordagens apresentem resultados similares quando se considera a taxa de classificação, o número de anticorpos da SRABNET para alcançar este desempenho é substancialmente menor (Tabela 4.5).

Objetivando comparar estatisticamente os resultados obtidos adotou-se, o *t-test*. Como pode ser visto na Tabela 4.6, os resultados do *t-test* entre as duas versões do AIRS e a SRABNET indicam que o desempenho dos algoritmos são similares, considerando um nível de confiança igual a 0,95, uma vez que, para todos os casos considerados, o valor de P é maior do que 0,05.

A divisão dos dados adotada, em conjunto de treinamento e de teste, foi proposta por Blake et al. [Hettich et al., 1998]. Os experimentos relatados por Watkins e Timmis [Watkins & Timmis, 2002]

Tab. 4.4: Características dos conjuntos de dados utilizados.

Conjunto de dados	Dimensão	Número de amostras	Número de classes
Diabetes	8	768	2
Iris	4	150	3
Sonar	60	208	2

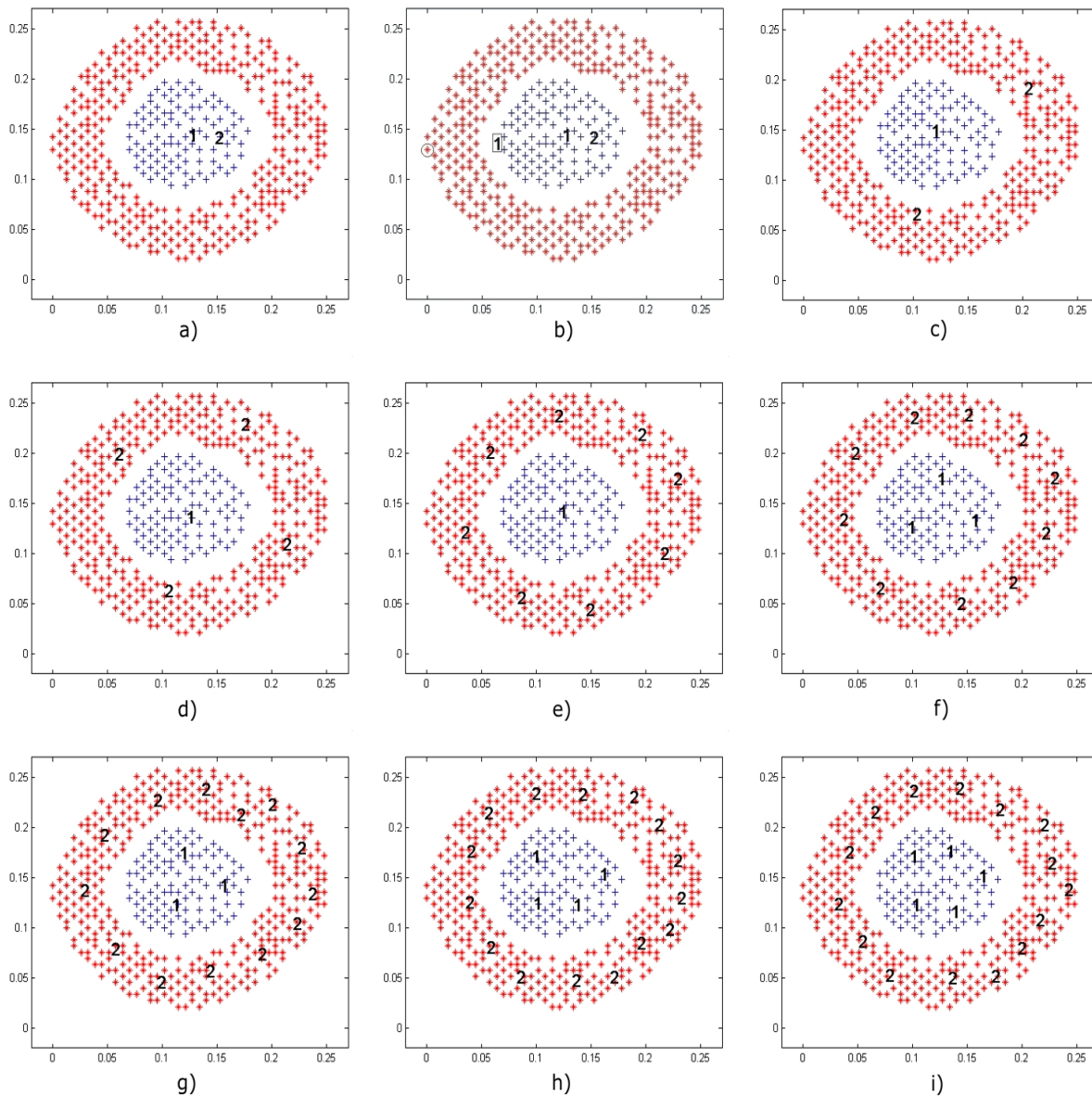


Fig. 4.10: Aplicação da SAINET a um conjunto de dados artificial. Evolução da rede ao longo dos processos de crescimento e atualização de pesos.

com a aplicação das duas versões do AIRS também usaram a divisão proposta. Os resultados obtidos são uma média de dez execuções do processo de validação cruzada. Mais especificamente, para os conjunto de dados Iris e Diabetes empregou-se a validação cruzada com 5 divisões, sendo 4 divisões para treinamento e 1 para teste. Finalmente, o conjunto de dados Sonar utilizou validação cruzada com 13 divisões, conforme sugerido na literatura [Hettich et al., 1998].

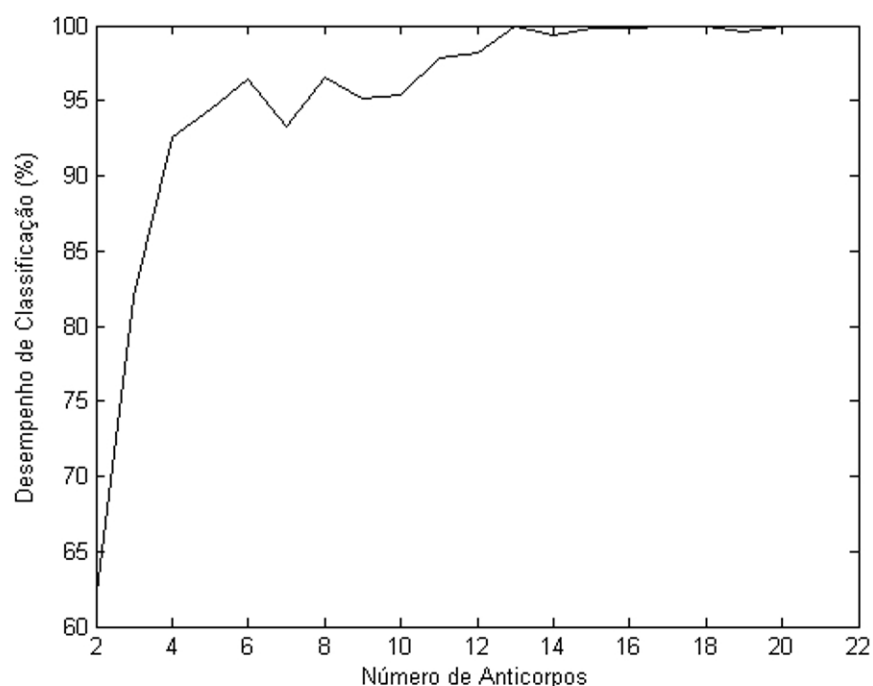


Fig. 4.11: Desempenho de classificação de treinamento, considerando redes de diferentes tamanhos.

4.3.3 Compressão de Dados

Uma das principais vantagens na aplicação de algoritmos imuno-inspirados é a sua potencialidade na compressão de dados. Esta característica pode ser observada nos trabalhos de Watkins e Timmis [Watkins & Timmis, 2002], de de Castro e Von Zuben [de Castro & Von Zuben, 2001] e de Knidel et al. [Knidel et al., 2005a]. Considerando o grande número de amostras envolvidas na maioria dos conjuntos de dados do mundo real, propor uma técnica que reduza este volume de dados e ao mesmo tempo retenha suas características relevantes é uma tarefa de grande desafio para os pesquisadores. Neste cenário, o desempenho da SRABNET no que tange à compressão de dados, como pode ser visto na Tabela 4.7, motiva aplicações a outros conjunto de dados, particularmente quando a compressão de dados é um requerimento indispensável.

A Tabela 4.7 apresenta o número médio de anticorpos, a compressão de dados em termos do tamanho da rede e porcentagem de compressão, junto com os desvios padrões, para os três conjuntos de dados considerados.

O custo computacional associado ao algoritmo é muito baixo, de forma que os resultados da Tabela 4.7 podem ser obtidos em poucos segundos de execução num computador equipado com processador Pentium de 1,8 GHz.

Tab. 4.5: Resultados de Classificação dos 3 Algoritmos (AIRS1, AIRS2 e SRABNET) quando aplicados a três conjuntos de dados reais. TCC: Taxa de Classificação Correta; NA: Número de Anticorpos.

Conjunto de dados	AIRS1		AIRS2		SRABNET	
	TCC	NA	TCC	NA	TCC	NA
Diabetes	$74,1 \pm 4,4\%$	470,4	$74,2 \pm 4,4\%$	273,4	$74,8 \pm 5,9\%$	$23,0 \pm 2,4$
Iris	$96,7 \pm 3,1\%$	42,1	$96,0 \pm 1,9\%$	30,9	$94,0 \pm 4,5\%$	$16,4 \pm 4,7$
Sonar	$84,0 \pm 9,6\%$	84,9	$84,9 \pm 9,1\%$	177,7	$84,6 \pm 9,3\%$	$28,7 \pm 11,7$

4.4 Avaliação de Desempenho da SAINET

Inspirada na AINET, uma rede imunológica concebida com o intuito de resolver problemas de agrupamento de dados, a SAINET é uma rede neuro-imunológica destinada à resolução de problemas de classificação de dados. O desempenho de classificação da SAINET é avaliado através da aplicação em um conjunto de dados artificial e três conjuntos de dados reais, amplamente utilizados na literatura. O conjunto de dados artificial é formado por cinco classes, cada uma com 300 amostras. As classes não são separadas linearmente e possuem regiões com sobreposição de dados, conforme pode ser observado na Figura 4.12 (a).

Nos experimentos com dados reais, utilizou-se o conjunto de dados Iris, o conjunto de dados Diabetes e o conjunto de dados Sonar, todos obtidos do repositório da Universidade da Califórnia em Irvine [Hettich et al., 1998]. Os resultados obtidos foram comparados com outras ferramentas imuno-inspiradas: a AIRS [Watkins & Timmis, 2002] e a SRABNET, descrita na Seção 3.2 e cujo desempenho está relatado na Seção 4.3.

A divisão dos dados em conjunto de treinamento e de teste é igual à adotada na Seção 4.3. Os resultados obtidos são uma média de dez execuções do processo de validação cruzada.

Nas Tabelas 4.8, 4.9 e 4.10, TCC = Taxa de Classificação Correta, NA = Número de Anticorpos na Rede e LRPNP = Limiar de Reconhecimento de Padrões Não-Próprios. Para cada conjunto de dados, foram utilizados 4 valores para o LRPNP e 2 valores para o limiar de supressão (ϵ). Em

Tab. 4.6: Valores de P e t considerando o t -test com nível de confiança igual a 0,95.

Data Set	P/t (AIRS1-SRABNET)	P/t (AIRS2-SRABNET)
Diabetes	0,7719	0,8037
	-0,301	-0,258
Iris	0,2997	0,4745
	1,090	0,755
Sonar	0,8886	0,9427
	-0,142	0,073

Tab. 4.7: Porcentagem de compressão de dados para os 3 conjuntos de dados considerados.

Conjunto de Dados	Tamanho do Conjunto de treinamento	Número de Anticorpos Taxa de compressão (Desvio padrão)
Diabetes	691	23,0 - 96,7% (12,4)
Iris	120	16,4 - 86,3% (4,7)
Sonar	192	28,7 - 85,1% (11,7)

todas as simulações (Tabelas 4.8 a 4.10), quanto maior o LRPNP, menor o número de anticorpos. Esse resultado era esperado, um vez que quanto maior o LRPNP menor a necessidade de duplicação, sendo assim menos específicos os anticorpos. Como observação geral, também confirmou a tendência de que quanto maior o limiar de supressão menor o número de anticorpos.

As simulações com três conjuntos de dados e uma variação dos parâmetros LRPNP e limiar de supressão nos permite observar que não existe um LRPNP que possa ser utilizado como padrão para todos os conjuntos de dados. Nos resultados obtidos, pode-se observar que, para cada conjunto de dados, existe um LRPNP mais apropriado.

Tab. 4.8: Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Iris.

LRPNP	$\epsilon = 0,15$		$\epsilon = 0,25$	
	TCC	NA	TCC	NA
0,2	94,78 $\pm$ 0,94%	16,00 $\pm$ 1,00	94,43 $\pm$ 1,82%	7,80 $\pm$ 1,30
0,4	95,41 $\pm$ 0,94%	14,00 $\pm$ 1,87	93,05 $\pm$ 1,19%	7,60 $\pm$ 1,14
0,6	95,15 $\pm$ 1,23%	14,20 $\pm$ 1,48	91,20 $\pm$ 1,69%	7,40 $\pm$ 1,34
0,8	95,85 $\pm$ 0,94%	15,00 $\pm$ 1,00	91,05 $\pm$ 1,98%	6,40 $\pm$ 0,55

Tab. 4.9: Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Diabetes.

LRPNP	$\epsilon = 0,25$		$\epsilon = 0,4$	
	TCC	NA	TCC	NA
0,2	75,13 $\pm$ 0,77%	35,00 $\pm$ 2,75	75,03 $\pm$ 1,00%	9,30 $\pm$ 1,89
0,4	75,04 $\pm$ 1,05%	33,80 $\pm$ 3,08	75,35 $\pm$ 0,97%	8,80 $\pm$ 2,10
0,6	75,09 $\pm$ 0,50%	29,20 $\pm$ 2,52	75,03 $\pm$ 1,11%	8,10 $\pm$ 2,96
0,8	75,41 $\pm$ 1,03%	26,10 $\pm$ 2,18	74,87 $\pm$ 1,06%	6,30 $\pm$ 2,81

Os melhores resultados alcançados pela aplicação da SAINET aos conjuntos de dados considerados estão resumidos na Tabela 4.11. Observe que o desempenho da SAINET é superior ao das outras ferramentas comparadas, quando consideramos os conjuntos de dados Diabetes e Sonar. No conjunto de dados Iris, o desempenho da SAINET é ligeiramente inferior ao da AIRS2, porém utiliza-se somente aproximadamente metade dos anticorpos.

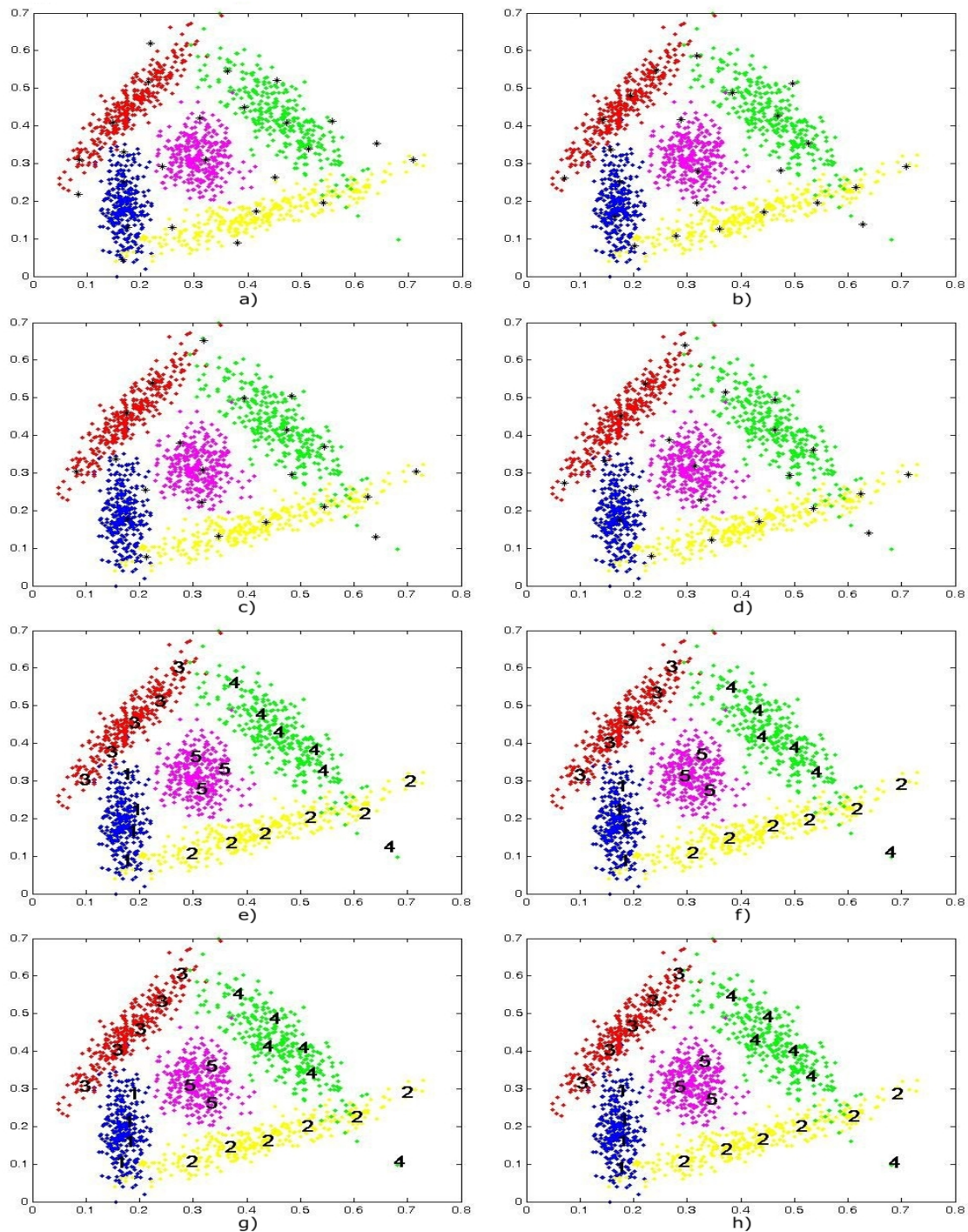


Fig. 4.12: Evolução da rede. a) a d) Etapa não-supervisionada, a qual procura posicionar protótipos ao longo da distribuição dos dados. e) a h) Etapa supervisionada, a qual usa informações contida nos rótulos dos dados e dos protótipos para refinar a posição dos protótipos de cada classe.

Tab. 4.10: Resultados da Aplicação da SAINET ao conjunto de dados Sonar.

LRPNP	$\epsilon = 0,5$		$\epsilon = 0,6$	
	TCC	NA	TCC	NA
0,2	86,74 $\pm$ 1,77%	54,92 $\pm$ 2,75	81,21 $\pm$ 1,85%	28,54 $\pm$ 2,85
0,4	85,80 $\pm$ 0,83%	54,69 $\pm$ 2,93	80,47 $\pm$ 1,62%	26,00 $\pm$ 2,68
0,6	84,99 $\pm$ 1,50%	50,62 $\pm$ 1,85	80,56 $\pm$ 2,06%	25,85 $\pm$ 1,82
0,8	83,32 $\pm$ 1,18%	49,08 $\pm$ 3,55	78,99 $\pm$ 1,70%	23,38 $\pm$ 2,47

Tab. 4.11: Resultados de classificação dos 3 algoritmos (AIRS2, SRABNET e SAINET) quando aplicados a três conjuntos de dados reais. TCC: Taxa de Classificação Correta; NA: Número de Anticorpos na Rede.

Conjunto de Dados	AIRS2		SRABNET		SAINET	
	TCC	NA	TCC	NA	TCC	NA
Diabetes	74,2 $\pm$ 4,4%	273,4	74,8 $\pm$ 5,9%	23,0 $\pm$ 2,4	75,4 $\pm$ 1,0%	26,1 $\pm$ 2,.
Iris	96,0 $\pm$ 1,9%	30,9	94,0 $\pm$ 4,5%	16,4 $\pm$ 4,7	95,9 $\pm$ 0,9%	15,0 $\pm$ 1,0
Sonar	84,9 $\pm$ 9,1%	177,7	84,6 $\pm$ 9,3%	28,7 $\pm$ 11,7	86,7 $\pm$ 1,8%	54,9 $\pm$ 2,8

Watkins e colaboradores [Watkins et al., 2004] construíram um ranking considerando o desempenho de um conjunto contendo 35 classificadores, obtidos a partir de diferentes abordagens. Na definição do ranking, o classificador que ocupa a posição 1 é o que apresenta o melhor desempenho para o conjunto de dados considerado. Na Tabela 4.12, encontra-se a posição que a SAINET ocuparia no ranking considerado, o desempenho da SAINET nos conjuntos de dados avaliados e o desempenho do melhor classificador.

Tab. 4.12: Comparativo de desempenho da SAINET em relação a outros classificadores.

Conjunto de Dados	Diabetes	Iris	Sonar
Posição no ranking	16	10	5
Desempenho SAINET	75,4%	95,9%	86,7%
Desempenho do melhor classificador	77,7%	100%	92,3%

4.5 Resultados Obtidos com a Ferramenta de Visualização

Esta seção apresenta os resultados obtidos com a ferramenta de visualização desenvolvida quando aplicada a um conjunto de protótipos resultantes do processo de agrupamento via a ferramenta RABNET [Knidel et al., 2005a] para dois conjunto de dados. Vale ressaltar que a utilização da ferramenta de visualização proposta é no sentido de tentar trazer para o $\mathbb{R}^2$ informações no espaço original que foram expressas pelos protótipos pertencentes a uma rede de anticorpos, a qual pode ser interpretada

como uma rede neural. Nos experimentos realizados, busca-se mostrar a utilidade da ferramenta de visualização, assim como suas principais características.

4.5.1 Visualização dos Grupos do Conjunto de Dados Iris

A Figura 4.13 mostra a visualização de um grupo de protótipos que representa o conjunto de dados Iris. O grupo de protótipos utilizado é resultante da aplicação da ferramenta de clusterização RABNET, Seção 3.1, ao conjunto de dados Iris [Hettich et al., 1998]. O conjunto de dados Iris é composto de 150 amostras, com 4 atributos cada, e divididas em 3 classes. Na Figura 4.13, pode-se verificar que a ferramenta de visualização obteve êxito na identificação das 3 classes existentes.

Umas das características mais importantes da ferramenta de visualização desenvolvida é a possibilidade que o usuário tem de interagir com a solução inicialmente proposta. Dessa forma, é possível simular um grande número de cenários, identificando o mais adequado ao propósito do usuário. Essa característica fica bem evidenciada nos resultados mostrados nas Figuras 4.14 e 4.15. Na Figura 4.14, pode-se observar que a retirada do protótipo 4 da rede resultou na formação de um cluster adicional. Por outro lado, observando a Figura 4.15, nota-se que a retirada do protótipo 6 provocou uma fusão de dois clusters. Através desse exercício de análise, é possível perceber o papel que cada protótipo desempenha no processo de classificação.

4.5.2 Conjunto de dados Vinho

O conjunto de dados Vinho [Hettich et al., 1998] é composto por 178 amostras, divididas em 3 classes, com 13 atributos cada. A Figura 4.16 mostra a visualização de um grupo de protótipos representando o conjunto de dados Vinho. O grupo de protótipos utilizado é resultante da aplicação da ferramenta de clusterização RABNET ao conjunto de dados Vinho. A utilização do conjunto de dados Vinho fornece subsídios para a validação da ferramenta de visualização em conjunto de dados de alta dimensão. Nesse conjunto de dados, também é possível identificar uma utilização alternativa da ferramenta de visualização: a identificação de *outliers*. Na Figura 4.16, observa-se que um protótipo encontra-se localizado distante dos clusters identificados e mapeia somente dois padrões de entrada. Esses padrões possuem uma alta probabilidade de serem *outliers*.

A Figura 4.16 mostra que, quando todos os protótipos pertencentes à rede fornecida pelo algoritmo RABNET são considerados, não é possível identificar o número correto de clusters. Aqui, torna-se visível que o algoritmo de agrupamento utilizado para fornecer a rede de protótipos não obteve um conjunto apropriado de protótipos, uma vez que o número de grupos identificados não corresponde ao número original de grupos. Esse resultado torna-se evidente quando visualizamos a rede formada sem a presença de protótipos de baixa representatividade (Figura 4.17). Por baixa representatividade,

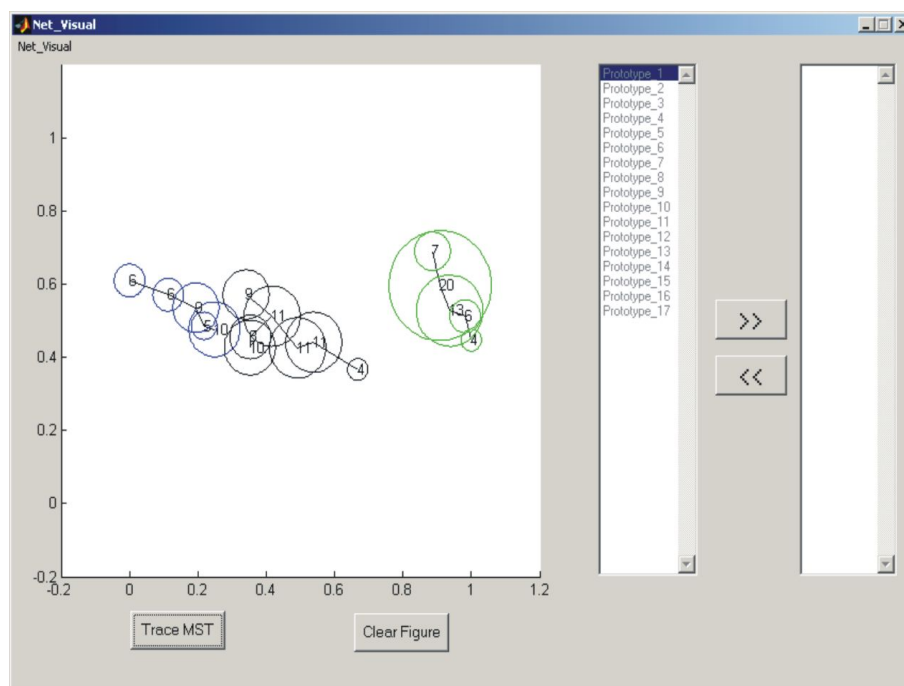


Fig. 4.13: Visualização dos protótipos e grupos a partir da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris.

considerou-se um protótipo que representasse 3 ou menos padrões de entrada. Quando os protótipos de baixa representatividade são desconsiderados, o algoritmo de visualização consegue identificar os 3 grupos existentes no conjunto de dados (Figura 4.17).

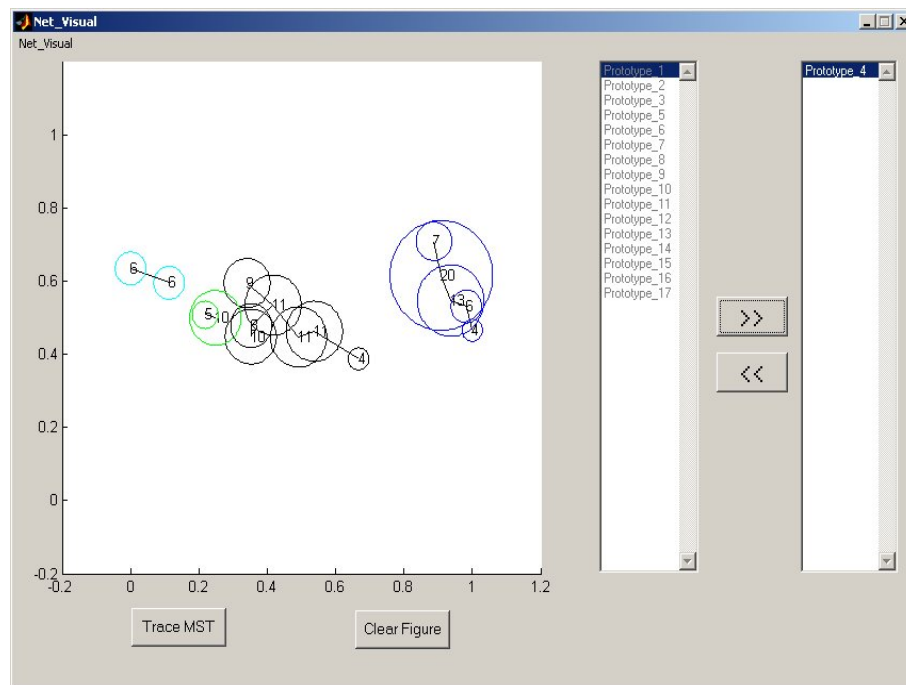


Fig. 4.14: Visualização da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris sem a participação do protótipo 4.

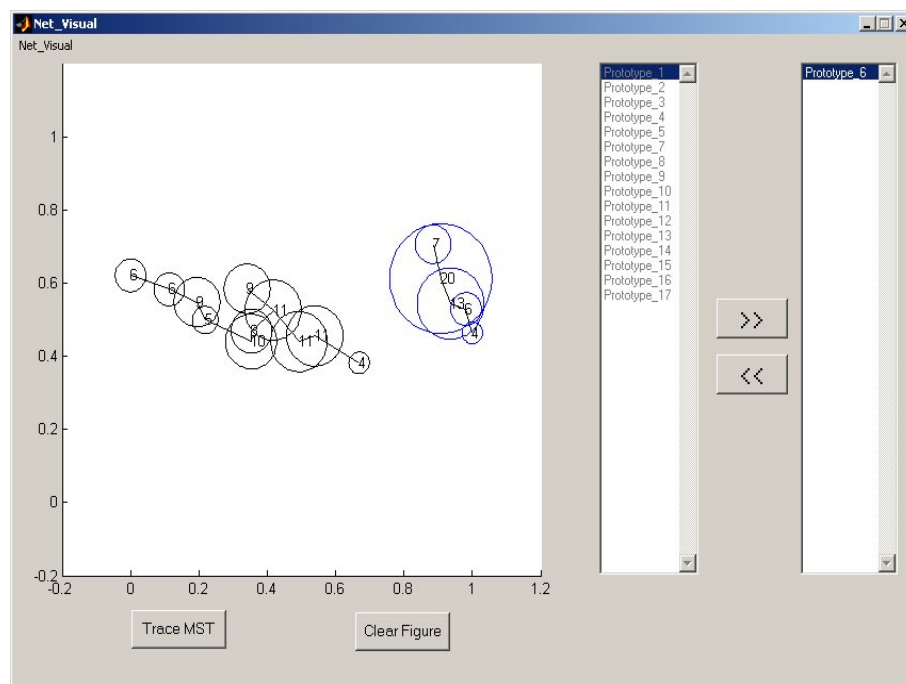


Fig. 4.15: Visualização da rede fornecida pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Iris, sem a participação do protótipo 6.

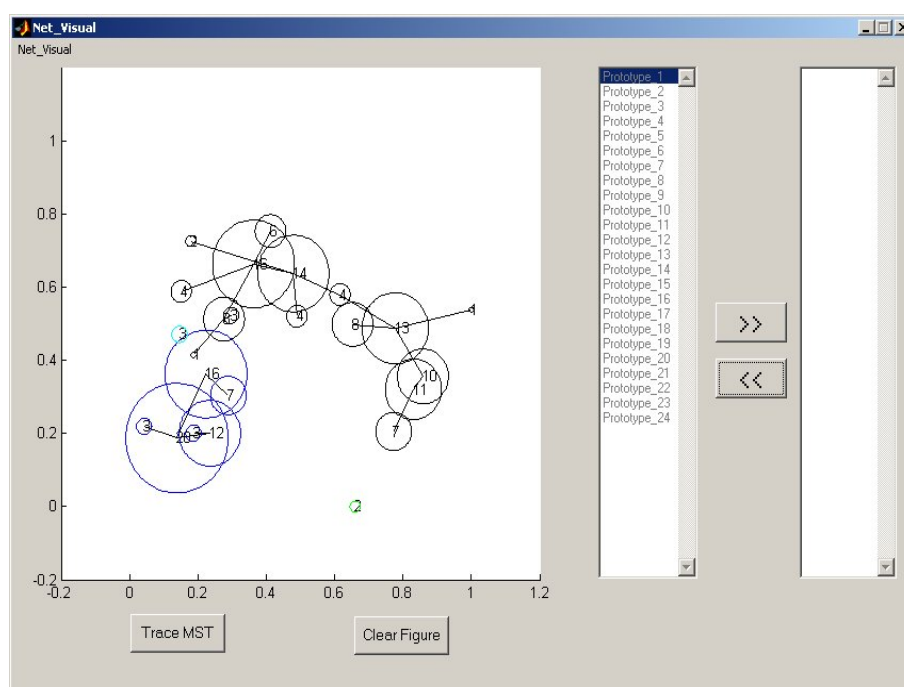


Fig. 4.16: Visualização dos protótipos fornecidos pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados Vinho.

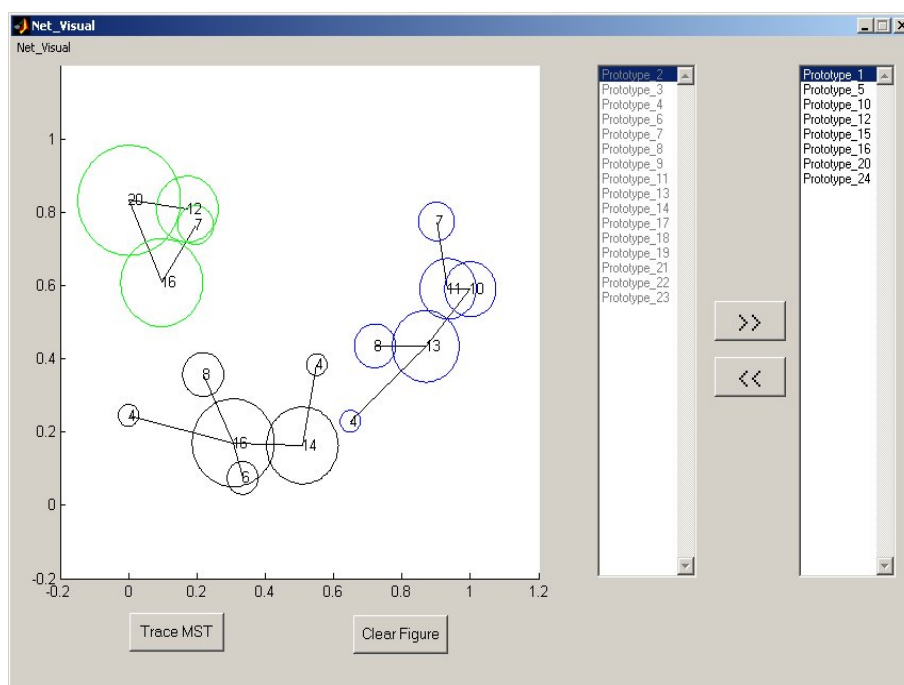


Fig. 4.17: Visualização somente dos protótipos considerados representativos dentre os fornecidos pela aplicação da RABNET ao conjunto de dados vinho. Considerou-se protótipos representativos aqueles que mapeiam mais de 3 padrões de entrada.

Capítulo 5

Algoritmo de agrupamento híbrido aplicado à equalização não-supervisionada de canais

“ Na estratégia, decisiva é a aplicação.”

Napoleão Bonaparte

Este capítulo apresenta o desenvolvimento de uma ferramenta híbrida destinada à equalização de canais de comunicação. Os componentes da ferramenta e o papel que cada um exerce são descritos em detalhes. Os resultados obtidos com a aplicação da ferramenta em um cenário real e uma análise dessa aplicação também constam nesse capítulo.

5.1 Sistemas de Comunicação

O objetivo principal de um sistema de comunicação é permitir a troca correta de informações entre um transmissor e um receptor interconectados por um canal de comunicação (Figura 5.1). Em geral, o canal de comunicação introduz distorções que, se não tratadas adequadamente, podem comprometer a qualidade da informação recebida pelo receptor. Diante deste cenário, duas alternativas são possíveis na solução ou minimização do problema:

1. Entender e modelar os efeitos causados pelo canal, abordagem conhecida como *Problema de Identificação*.

2. Criar métodos que anulem os efeitos do canal, abordagem conhecida na literatura como *Equalização*.

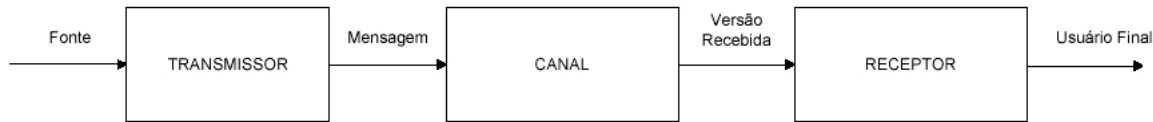


Fig. 5.1: Esquema genérico de comunicação.

No trabalho desenvolvido, optou-se pela segunda abordagem, ou seja, buscaremos utilizar um filtro, chamado equalizador, para processar os dados recebidos e minimizar ou anular os efeitos do canal. De forma simples, um equalizador pode ser descrito como um dispositivo cujas características são inversas às apresentadas pelo canal. Idealmente, após o processamento pelo equalizador, o sinal na sua saída deve ser uma versão suficientemente precisa da mensagem transmitida. A Figura 5.2 ilustra a utilização de um equalizador num sistema de comunicação.

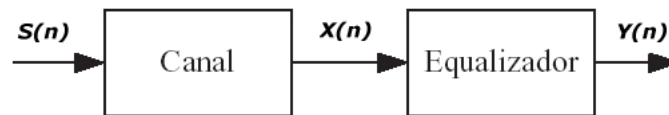


Fig. 5.2: Utilização de um equalizador num sistema de comunicação.

Existem duas possibilidades de estimação do sinal transmitido pelo equalizador: estimação de sequência ou estimação símbolo a símbolo. Na estimação de sequência, um bloco de amostras recebidas é usado para se obter os símbolos transmitidos, com base no critério de máxima verossimilhança [Forney Jr, 1972]. Os equalizadores símbolo a símbolo, também conhecidos como de memória finita, usam um número fixo de amostras recebidas para estimar um único símbolo a cada período de amostragem. Tais equalizadores permitem que seus parâmetros sejam ajustados ao longo do tempo, para se adequarem a variações no canal, ou seja, podem ser adaptativos [Haykin, 1996]. O equalizador ótimo de memória finita é dado pelo critério de Máxima Probabilidade A Posteriori (MAP - *Maximum A Posteriori Probability*) e é chamado de equalizador bayesiano, por ser calculado através do teorema de Bayes. Neste trabalho, serão utilizados somente equalizadores símbolo a símbolo.

O projeto de um equalizador pode ser conduzido sob duas abordagens, que se diferenciam pela presença ou não de um sinal para guiar o equalizador. O projeto com a presença de um sinal de

guia é denominado equalização supervisionada, e o com ausência de um sinal de guia denomina-se equalização não-supervisionada ou cega.

Na abordagem supervisionada, o equalizador bayesiano fornece a solução ótima, o que minimiza a probabilidade da ocorrência de uma decisão errada. Além disso, em [Ferrari et al., 2003], uma proposta contínua para a equalização cega foi derivada das idéias de aproximação bayesiana. Em ambas as aproximações, o projeto ótimo do equalizador depende da escolha apropriada de seus parâmetros, sendo que alguns deles podem ser determinados através de algoritmos de agrupamento.

A seguir, é apresentada uma técnica híbrida destinada ao agrupamento de dados e que se adequa às exigências dos problemas de equalização bayesiana. O algoritmo proposto combina dois métodos existentes: a RABNET (rede de anticorpos com valores reais) [Knidel et al., 2005b] e o BLI (Busca Local Iterativa) [Merz, 2003], obtendo desta forma um algoritmo de agrupamento robusto que, além de ser dotado de potencialidade global de busca, não requer conhecimento a priori do número de grupos existentes.

A robustez é uma característica muito desejável no contexto de equalização de sinais, pois, em casos bastante representativos, a tarefa de agrupamento a ser cumprida é muito complexa, devido à presença de ruídos e à proximidade dos grupos de dados adjacentes. A descoberta automática do número de grupos é outra característica de grande relevância, já que se estende o escopo da metodologia proposta aos casos em que existe pouca informação a respeito do modelo do canal.

5.2 Equalização Bayesiana e Agrupamento

No contexto de equalização bayesiana, três suposições são necessárias para o desenvolvimento da técnica proposta e não reduzirão significativamente a generalidade da técnica, são elas:

1. O sinal transmitido é composto por amostras binárias (+1 e -1);
2. O canal tem uma memória finita;
3. O ruído aditivo é gaussiano e branco.

A seguinte nomenclatura será adotada: $s(n)$ será o sinal transmitido e $x(n)$ o sinal após o canal (Figura 5.2). Considerando as hipóteses acima, segue que $x(n) = F[s(n), s(n-1), \dots, s(n-M+1)] + b(n)$, onde $F[\cdot]$ representa o mapeamento genérico de ordem M . Se nós supusermos que um equalizador de ordem N processa este sinal, é possível, de acordo com a Equação 5.1, considerar que o espaço gerado por todos os possíveis vetores de entrada, da forma $x(n) = [x(n)x(n-1)\dots x(n-N+1)]^T$, será coberto com um número de “nuvens de pontos” centradas em valores determinísticos denominados de estados do canal c_j , sendo $c_j = E[x(n)|s_j(n)]$, com $s_j \in \{-1, 1\}^{M+N-1}$ [Chen et al., 1993].

Neste contexto, é possível conceber o problema de equalização como uma tarefa de decidir se um dado vetor de entrada está associado a uma amostra transmitida no símbolo $+1$ ou -1 . Sob essas circunstâncias, o equalizador bayesiano será o filtro cujo mapeamento de entrada-saída maximiza $\text{Prob}\{s(n-d) = s|x(n)\}$, para $s \in \{+1, -1\}$.

Supondo que os símbolos $+1$ e -1 são equiprováveis, é possível mostrar que o mapeamento de entrada-saída ótimo é fornecido pela Equação 5.1:

$$G[x(n)] = \sum_{j=1}^{N_s} w_j \exp\left(\frac{-\|x(n) - c_j\|^2}{2\sigma_b^2}\right) \quad (5.1)$$

Na Equação 5.1, c_j denota o j -ésimo estado do canal, σ_b^2 é a variância do ruído, N_s é o número de estados e w_j são os pesos que devem ser escolhidos de acordo com a tarefa de maximização da Equação 5.2. Conseqüentemente, é necessário estimar três classes de parâmetros a fim de obter o equalizador ótimo:

1. Os estados do canal;
2. A variância das “nuvens de pontos”;
3. Os pesos de saída w_j .

O ponto crucial de todo o processo de treinamento é geralmente associado ao primeiro dos problemas de estimação [Chen et al., 1993], desde que o desempenho do classificador não é particularmente vulnerável a imprecisões da segunda etapa. Além disso, uma vez que os estados e as variâncias são obtidas, o problema de encontrar os pesos da saída é de natureza linear [Chen et al., 1993], significando assim que a estrutura de um filtro adaptativo clássico deve ser suficiente para resolvê-lo.

A tarefa de encontrar os estados do canal, isto é, os centros das “nuvens de pontos”, está relacionada diretamente com a noção de estabelecer regiões representativas no espaço de entrada, ou seja, a essência de um processo de agrupamento de dados. O objetivo é identificar a existência de cada “nuvem de pontos” e, além disso, escolher um centro apropriado para cada nuvem. Classicamente, este problema está resolvido quando, conhecendo-se o número de conjuntos, determinamos os centros c_j que minimizam a função de custo da Equação 5.2

$$J_{SS} = \sum_{j=1}^k \sum_{i \in C_j} \|x_i - c_j\|^2 \quad (5.2)$$

Na Equação 5.2, k é o número de conjuntos, C_j representa o conjunto de amostras da entrada x_i associadas ao j -ésimo centro c_j . O método padrão usado para minimizar o erro J_{SS} é o algoritmo conhecido por *k-means* [Duda et al., 2000], um algoritmo baseado no gradiente. Entretanto, a extensão da sua aplicabilidade é restringida por dois inconvenientes principais:

1. Em muitos contextos práticos, incluindo o cenário supervisionado de equalização, não é razoável confiar na informação a priori sobre o número de centros ou mesmo na natureza do canal de comunicação;
2. Qualquer técnica baseada em gradiente, incluindo o algoritmo *k-means*, pode convergir para soluções sub-ótimas.

O objetivo da heurística desenvolvida é propor um algoritmo de agrupamento que não requer conhecimento a priori sobre o número e localização das nuvens de dados existentes, evitando dessa forma a convergência para soluções sub-ótimas.

5.3 Uma Abordagem Híbrida Combinando a RABNET e o Algoritmo *K-means* com Busca Local

O método de agrupamento proposto possui dois objetivos principais: *i*) determinar o número de estados do canal subjacentes à mensagem recebida, e *ii*) estimar estes estados atribuindo a cada conjunto um representante adequado. A fim de cumprir esta tarefa, desenvolveu-se uma abordagem híbrida que consiste em:

1. Um estágio de pré-agrupamento;
2. A aplicação de uma heurística;
3. A aplicação do algoritmo BLI.

5.3.1 Estágio de Pré-agrupamento

O estágio de pré-agrupamento é realizado pelo algoritmo RABNET, o qual combina um procedimento de aprendizagem, desenvolvido através de uma inspiração imunológica, e uma etapa divisória, cuja essência é a utilização do algoritmo da árvore geradora mínima. Os detalhes do desenvolvimento da RABNET, assim como os passos que a compõem estão detalhados na Seção 3.1.

5.3.2 Heurística

É possível que alguns grupos encontrados no estágio precedente (estágio de Pré-agrupamento) contenham mais de um estado. Logo, é necessário desenvolver uma heurística para descobrir o número de estados contidos em cada agrupamento. Desde que, em regra geral, os estados do canal são

Tab. 5.1: Heurística responsável pela estimativa do número de estados.

1. Determine D_j , definido como o conjunto de padrões de dados associado ao j -ésimo cluster encontrado na etapa de pré-agrupamento;
2. Determine o grupo que possui a menor cardinalidade ($|D_k|$);
3. Encontre todos os grupos que contenham somente um estado do canal, isto é, os grupos com cardinalidade menor do que $1.5 * |D_k|$;
4. Calcule a cardinalidade média dos grupos encontrados nas etapas 2 e 3 (N_{AVG}), que representa uma estimativa do número de padrões de testes associados a um único estado do canal;
5. O número estimado de estados do j -ésimo grupo é dado pelo valor arredondado da relação $|D_j|/N_{AVG}$;

equiprováveis, o número de padrões de teste associados a cada estado tende a ser o mesmo. Baseado nesta característica do problema, propõe-se a heurística descrita na Tabela 5.1.

As etapas 1 – 3 estão relacionadas à busca de conjuntos formados na fase de pré-agrupamento que contenham somente um estado do canal. Esta informação é usada na etapa 4 para estimar o número médio de dados associados a um único estado do canal. Finalmente, a etapa 5 fornece uma estimativa do número de estados associados aos demais conjuntos encontrados na etapa de pré-clusterização.

É importante mencionar que há duas condições básicas a serem satisfeitas, a fim de garantir a operação apropriada da heurística:

1. Deve existir um número suficiente e representativo de dados, de modo que o número de padrões recebidos, associados a cada um dos estados, tenda a ser o mesmo;
2. Ao menos um dos conjuntos encontrados na etapa de pré-agrupamento deve conter somente um estado do canal.

5.3.3 Algoritmo de Busca Local Iterativa (BLI)

Após a aplicação da heurística, é possível que haja duas classes de conjuntos formados no estágio de pré-agrupamento: uma composta pelos conjuntos que contêm somente um estado do canal, e outra formada por conjuntos com mais de um estado. O problema restante consiste em estimar o número de estados do canal da segunda classe. Esta tarefa pode ser executada pelo algoritmo *K-means* [Duda et al., 2000]. Entretanto, apesar de sua eficácia e simplicidade em muitas aplicações, não há nenhuma garantia de que o algoritmo *K-means* encontrará sempre a solução global da função de custo. Vale recordar que o *K-means* é uma técnica baseada em gradiente, usada para otimizar uma função de custo multimodal. No projeto de equalizadores bayesianos, a convergência local da técnica de clusterização resultaria numa degradação considerável de desempenho. Conseqüentemente, é de

grande importância considerar a aplicação de técnicas de agrupamento baseadas em ferramentas de busca multimodal.

A principal idéia presente no algoritmo de Busca Local Iterativa (BLI) aplicado ao agrupamentos [Merz, 2003] é exatamente evitar a convergência para soluções sub-ótimas. O modo de operação dessa técnica é baseado na combinação de conceitos extraídos da computação evolutiva e de técnicas de buscas locais eficientes. A implementação do conceito de mutação, relacionado à computação evolutiva, ocorre através de uma ligeira modificação numa solução correspondente a um mínimo local encontrado. Depois de sofrer mutação, a nova solução é usada como inicialização de um procedimento de busca local, a fim de se obter um novo mínimo local. Se este novo mínimo local levar a um menor valor da função custo que o anterior, ele é aceito como a nova solução. Este procedimento é repetido até que se atinja um determinado critério de parada.

Pode se observar que a operação da BLI ocorre em dois diferentes níveis: um que consiste em uma busca global baseada num algoritmo evolutivo, e outro baseado em uma estratégia de busca local executada pelo algoritmo *K-means*. A junção destas características confere ao BLI um compromisso entre exploração e exploração do espaço de busca, o que constitui um elemento essencial para o sucesso da tarefa de otimização multimodal. O pseudo-código do algoritmo de busca local iterativa utilizado está ilustrado no Algoritmo 4.

Algoritmo 4 Pseudo código do algoritmo Busca Local Iterativa.

```
1: Início
2: Cria a solução inicial  $R$ ;
3:  $R = \text{Busca Local}(R)$ ;
4: Enquanto não alcançar o critério de parada Faça
5:    $R1 = \text{Mutação}(R)$ ;
6:    $R1 = \text{Busca Local}(R1)$ ;
7:   Se  $J(R1) < J(R)$  Então
8:      $R = R1$ ;
9:   Fim se
10: Fim enquanto
11: Retorna  $R$ .
12: Fim
```

Vale salientar que não há garantia de convergência para o ótimo global, mas as chances de obtê-lo aumentam significativamente com a busca local iterativa.

5.4 Resultados e Discussão

Como forma de medir o desempenho da proposta apresentada, realizaram-se simulações considerando dois diferentes cenários. No primeiro caso, foi considerada uma transmissão sobre o

canal $H1(z) = 0,5 + 0,71z^{-1} + 0,50z^{-2}$, com a Relação Sinal Ruído, em inglês, *Signal-to-Noise Ratio* (SNR) igual a $17dB$, enquanto que no segundo cenário foi adotado o canal $H2(z) = 0,214 - 0,521z^{-1} + 0,768z^{-2} + 0,304z^{-3}$ e SNR igual a $20dB$. Neste último caso, a presença de estados muito próximos adiciona grande dificuldade à tarefa de agrupamento, sendo assim bastante apropriada para avaliar a eficácia da proposta apresentada. Foram utilizadas 5.000 amostras no primeiro caso e 15.000 no segundo. As figuras 5.3 e 5.4 ilustram a definição dos grupos pela aplicação da RABNET nos dados dos canais $H1(z)$ e $H2(z)$, correspondendo ao estágio denominado de pré-agrupamento. Nas Figuras 5.5 e 5.6, os estados do canal são estimados e as saídas do canal são descritas para os cenários considerados.

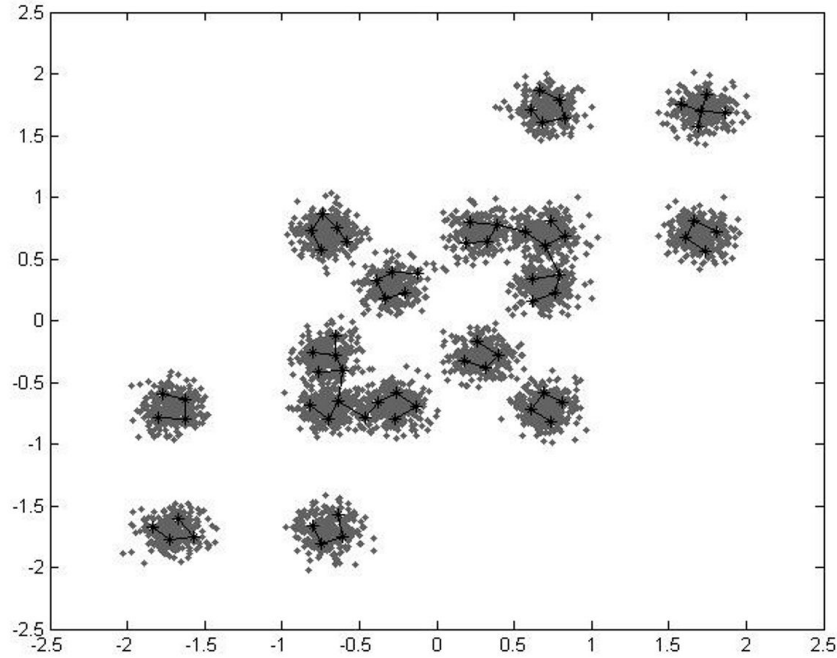


Fig. 5.3: Grupos encontrados pela RABNET (estágio de pré-agrupamento) considerando os dados do canal $H1(z)$.

Após 100 execuções para cada caso, a técnica proposta consegue estimar precisamente os estados do canal em 98% dos casos, para o primeiro cenário, e em 97% dos casos, considerando o segundo cenário. Para o primeiro canal, a média da distância entre os estados do canal e a média das estimativas calculadas em todas as execuções é igual a 0,0144, enquanto no segundo caso este valor é igual a 0,0181.

A utilização de métodos baseados em computação evolutiva, como uma técnica de busca local ite-

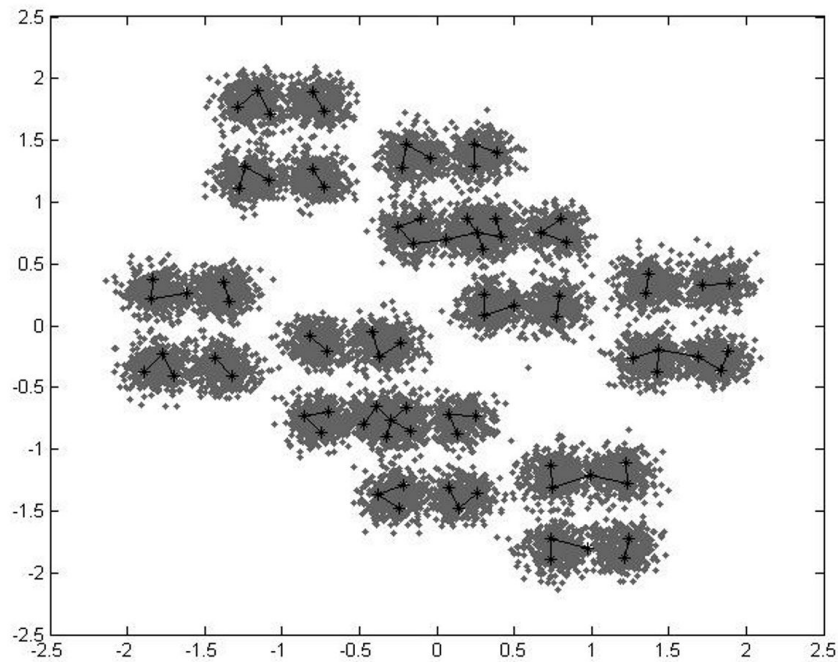


Fig. 5.4: Grupos encontrados pela RABNET (estágio de pré-agrupamento) considerando os dados do canal $H2(z)$.

rativa, em adição a uma heurística desenvolvida a partir do conhecimento do problema a ser resolvido, permitiu a obtenção de um novo método adequado ao planejamento de equalizadores bayesianos. A técnica, baseada no uso da RABNET e do algoritmo de BLI, determina o número de estados sem recorrer a informações a priori sobre o canal e, além disso, contém mecanismos que evitam a convergência local. Os dois diferentes conjuntos de simulações indicaram que a aplicação da proposta apresentada conduz a bons resultados em cenários representativos, o que nos permite concluir que a proposta se mostra como uma opção valiosa de projeto.

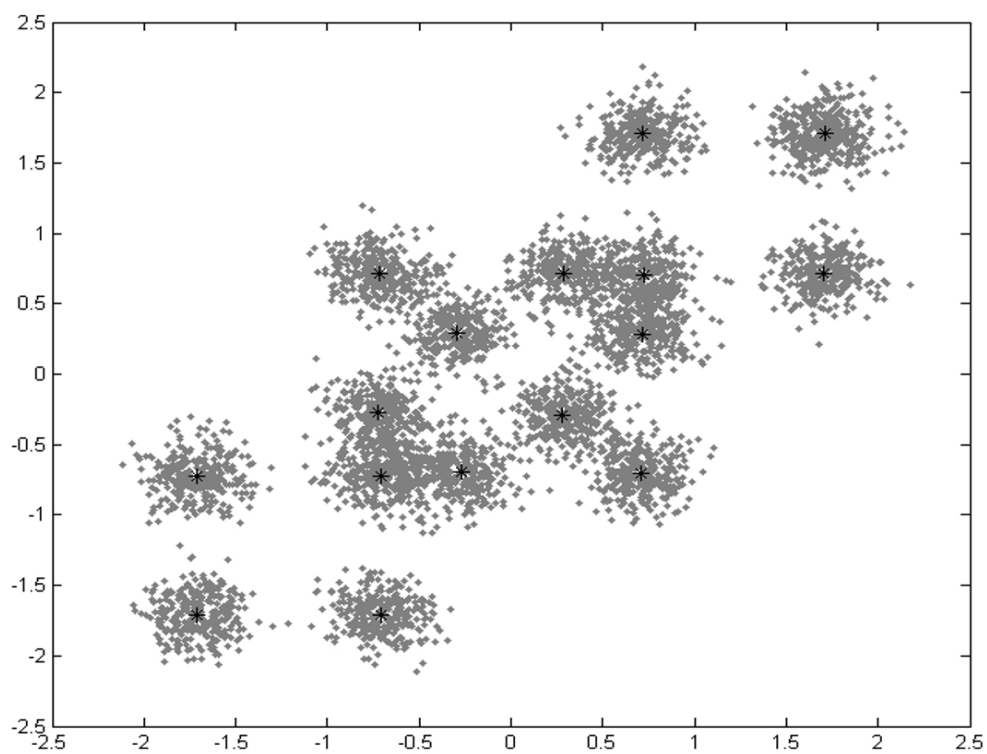


Fig. 5.5: Estados do canal automaticamente obtidos para $H1(z)$.

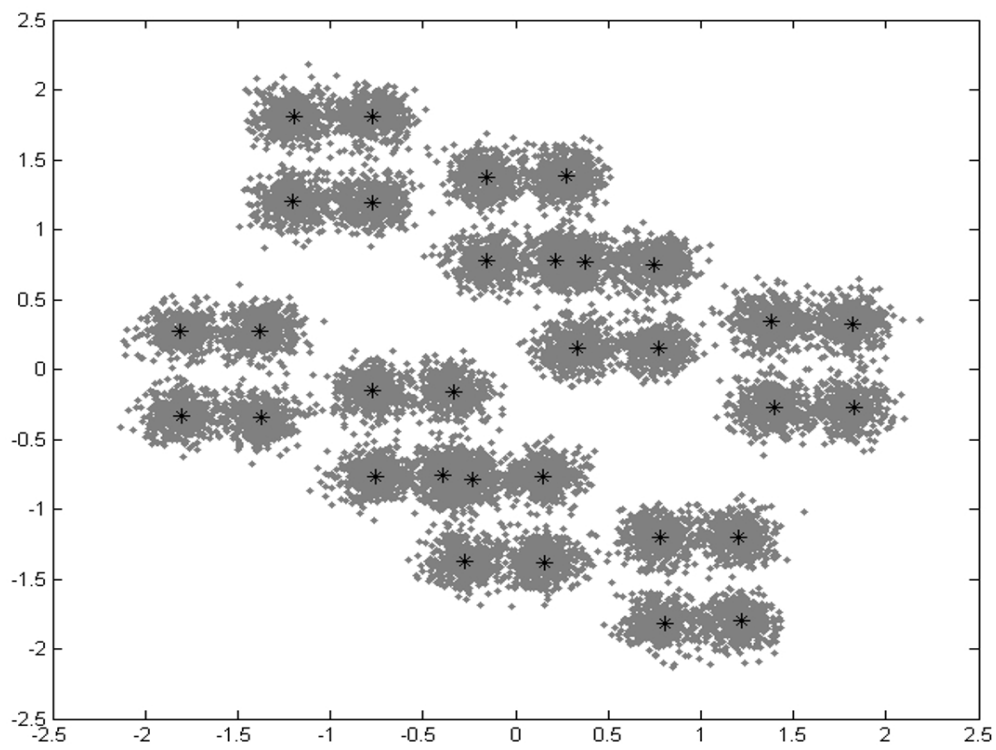


Fig. 5.6: Estados do canal automaticamente obtidos para $H2(z)$.

Capítulo 6

Conclusões e Trabalhos Futuros

“ Ninguém é tão ignorante que não tenha algo a ensinar.
Ninguém é tão sábio que não tenha algo a aprender.”

Blaise Pascal

As conclusões obtidas durante o desenvolvimento dessa dissertação encontram-se neste capítulo. Em resumo, o potencial e o cenário de aplicação das ferramentas desenvolvidas, assim como propostas de possíveis extensões deste trabalho, fazem parte deste capítulo.

6.1 Conclusões a Respeito da RABNET

Uma avaliação do desempenho obtido pela RABNET, quando aplicada aos conjuntos de dados considerados, mostra que a inspiração neuro-imunológica é adequada ao ser aplicada ao desenvolvimento de ferramentas destinadas a agrupamento de dados.

O desempenho obtido com a aplicação da RABNET, caracterizada por pesos de valores reais, a um conjunto de dados binários mostra a generalização da ferramenta desenvolvida, no sentido de que pode ser aplicada tanto a um conjunto de dados reais quanto a um conjunto de dados binários.

Os resultados observados na análise de sensibilidade, relativa aos parâmetros definidos pelo usuário, indicou que a maioria dos parâmetros influencia somente a velocidade de convergência do algoritmo, e não a qualidade final do resultado. A exceção é o limiar de afinidade, responsável pela obtenção de soluções mais ou menos parcimoniosas.

6.2 Conclusões a Respeito da SRABNET

A proposta de uma versão supervisionada da RABNET, denominada SRABNET, foi motivada pelo bom desempenho previamente obtido pela RABNET quando aplicada a problemas de agrupamento [Knidel et al., 2005a] e [Knidel et al., 2005b]. Um dos aspectos mais proeminente do algoritmo é a baixa quantidade de parâmetro a ser controlado pelo usuário. Um dos parâmetro, o tamanho da janela, foi mantido fixo em 7 durante todos os experimentos. A escolha do valor adotado para o tamanho da janela mostrou ser adequada, dado que a convergência sempre foi estabelecida pelas janelas e não pelo número máximo de protótipos (um quarto do tamanho do conjunto de dados).

Em termos de desempenho comparativo com outra abordagem de inspiração imunológica, nota-se uma grande similaridade em termos de taxa de acerto. Porém, com a SRABNET foram obtidas soluções com um número reduzido de protótipos por classe, indicando ser uma alternativa promissora quando aplicada a problemas de classificação com forte exigência de compressão de dados.

6.3 Conclusões a Respeito da SAINET

A utilização de um algoritmo de agrupamento (AINET), responsável por fazer um mapeamento inicial do conjunto de dados, de uma heurística que avalia a especificidade de cada membro da rede (anticorpos) e de um algoritmo de aprendizagem supervisionado, cuja função é refinar a atuação de cada anticorpo, permitiu obter uma ferramenta imunológica de classificação que apresentou resultados bastante promissores quando aplicada aos conjuntos de dados analisados.

Através da análise de sensibilidade efetuada, foi possível observar que o parâmetro ϵ exerce uma influência significativa no número final de anticorpos presentes na rede. A influência do parâmetro ϵ na taxa de classificação correta (TCC) é de pouca relevância. As observações a respeito do parâmetro ϵ nos permitem concluir que diminuições no valor de ϵ , com a intenção de produzir redes com um número maior de anticorpos, e dessa forma mais específicos, não será recompensada por melhorias significativas na TCC.

6.4 Conclusões sobre a Ferramenta de Visualização

A proposta de desenvolver uma ferramenta de visualização, capaz de automatizar o processo de validação de resultados obtidos por redes neurais auto-organizáveis e redes neuro-imunológicas, foi motivada pela existência de poucos trabalhos presentes na literatura que se adequam a tal propósito. A ferramenta desenvolvida mostrou-se adequada aos objetivos esperados. Atuando num cenário de dados multivariados, a ferramenta apresentou um bom desempenho quando aplicada ao conjunto de

dados estudados. A sua utilização possibilitou avaliar e validar o desempenho das soluções propostas pelas redes em questão, bem como identificou outras características presentes nas soluções. Como objetivo principal, permitiu uma avaliação do número e formato dos grupos sugeridos. De forma secundária, porém não menos importante dependendo da aplicação em questão, a ferramenta possibilitou ao usuário a identificação da relevância de cada protótipo dentro da solução. Observou-se que nem sempre a rede sugerida pela ferramenta de agrupamento é a mais adequada. Esta situação ocorre quando, na solução apresentada, se encontram protótipos pouco representativos.

6.5 Trabalhos Futuros

- Um estudo imediato que pode ser realizado junto as ferramentas desenvolvidas é a utilização de medidas de distâncias diferentes da euclidiana, assim como a utilização de pesos nos atributos.
- Avaliação do comportamento das ferramentas desenvolvidas quando aplicadas em contextos envolvendo processos de aprendizagem contínuo e aprendizagem com dados não-estacionários.
- Estudos mais detalhados das ferramentas SRABNET e SAINET precisam ser realizados, no sentido de aplicar essas ferramentas a cenários que envolvam especificamente compressão de dados. Outra aplicação a ser considerada para as abordagens supervisionadas é o problema de estimação de densidades.
- Análise do desempenho das ferramentas desenvolvidas quando aplicadas em contextos dinâmicos, caracterizados pelo surgimento e desaparecimento gradual de grupos.
- No que se refere à abordagem híbrida aplicada à equalização de canais de comunicação, os seguintes pontos devem ser considerados em trabalhos futuros: estudar a sensibilidade dos parâmetros da ferramenta de otimização, considerar outras heurísticas e estudar a eficácia da técnica para níveis elevados de ruído.
- Considerando a ferramenta de visualização, as simulações mostraram que a proposta desenvolvida pode ser utilizada no contexto de identificação de *outliers*. Uma outra extensão desse trabalho é no sentido de utilizar a ferramenta de visualização na validação de algoritmos não inspirados em abordagens neural ou neuro-imunológica. Por fim, sugere-se uma avaliação de outras ferramentas que buscam expressar, em baixa dimensão, relações mantidas pelos dados no espaço original, de alta dimensão.

Referências Bibliográficas

- [Bishop, 1995] Bishop, C. M. *Neural Networks for Pattern Recognition*. Oxford University Press, 1995.
- [Burnet, 1959] Burnet, F. M. *The clonal selection theory of acquired immunity*. Vanderbilt Univ. Press, Nashville TN, 1959.
- [Carter, 2000] Carter, J. H. The immune system as a model for pattern recognition and classification. *J Am Med Inform Assoc* 7(1), pp. 28–41, 2000.
- [Chen et al., 1993] Chen, S.; Mulgrew, B.; Grant, P. M. A clustering technique for digital communications channel equalization using radial basis function networks. *IEEE Transactions on Neural Networks* 4(4), pp. 570–579, 1993.
- [de Castro, 2002] de Castro, L. N. Comparing immune and neural networks. In *Proceedings of the VII Brazilian Symposium on Neural Networks*, pp. 250–255, Brasil, 2002.
- [de Castro & Timmis, 2002a] de Castro, L. N.; Timmis, J. An artificial immune network for multi-modal optimisation. In *2002 Congress on Evolutionary Computation. Part of the 2002 IEEE World Congress on Computational Intelligence.*, pp. 699–704, Honolulu, Hawaii, USA. IEEE, 2002.
- [de Castro & Timmis, 2002b] de Castro, L. N.; Timmis, J. *Artificial Immune Systems: A New Computational Intelligence Approach*. Springer-Verlag., 2002.
- [de Castro & Von Zuben, 1989] de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. Improving pruning technique with restart for the Kohonen self-organising feature map. In *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks*, volume 3, pp. 1916–1919, Washington, DC. IEEE, 1989.
- [de Castro & Von Zuben, 2000] de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. An evolutionary immune network for data clustering. In *Proceedings of the VI Brazilian Symposium on Neural Networks (SBRN 2000)*, p. 84, Washington, DC, USA. IEEE Computer Society, 2000.

- [de Castro & Von Zuben, 2001] de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. Immune and neural network models: Theoretical and empirical comparisons. *International Journal of Computational Intelligence and Applications* **1**(3), pp. 239–257, 2001.
- [de Castro & Von Zuben, 2002] de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. aiNet: An artificial immune network for data analysis. In Abbass, H.; Sarker, R. A.; Newton, C. S. (eds), *Data Mining: a Heuristic Approach*, pp. 231–259. Idea Group Publishing, London, 2002.
- [de Castro et al., 2003] de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J.; de Deus Jr., G. A. The construction of a boolean competitive neural network using ideas from immunology. *Neurocomputing* **50**, pp. 51–85, 2003.
- [de França et al., 2005] de França, F. O.; Von Zuben, F. J.; de Castro, L. N. An artificial immune network for multimodal function optimization on dynamic environments. In *Proceedings of the 2005 conference on Genetic and evolutionary computation*, pp. 289–296, New York, NY, USA. ACM Press, 2005.
- [Deng & Kasabov, 2000] Deng, D.; Kasabov, N. K. ESOM: An algorithm to evolve self-organizing maps from on-line data streams. In *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks*, pp. 3–8, 2000.
- [Duda et al., 2000] Duda, R. O.; Hart, P. E.; Stork, D. G. *Pattern Classification*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 2000.
- [Fausett, 1994] Fausett, L. (ed). *Fundamentals of neural networks: architectures, algorithms, and applications*. Prentice-Hall, Inc., 1994.
- [Ferrari et al., 2003] Ferrari, R.; Panazio, C.; Attux, R. R. d.; Charles; Cavalcante, C.; de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J.; Romano, J. M. Unsupervised channel equalization using fuzzy prediction-error filters. In *Proceedings of the IEEE International Workshop on Neural Networks for Signal Processing*, pp. 1680–1686, 2003.
- [Forney Jr, 1972] Forney Jr, G. D. Maximum-likelihood sequence estimation of digital sequences in the presence of intersymbol interference. *IEEE Trans. Inform. Theory* **IT-18**(3), pp. 363–378, 1972.
- [Fritzke, 1993] Fritzke, B. Growing cell structures – a self-organizing network for unsupervised and supervised learning. Relatório Técnico TR-93-026, International Computer Science Institute, 1947 Center Street, Suit 600, Berkeley, California 94704, 1993.

- [Fritzke, 1994] Fritzke, B. Growing cell structures - a self-organizing network for unsupervised and supervised learning. *Neural Network* 7(9), pp. 1441–1460, 1994.
- [Fritzke, 1995a] Fritzke, B. Growing grid – a self-organizing network with constant neighborhood range and adaptation strength. *Neural Processing Letters* 2(5), pp. 9–13, 1995.
- [Fritzke, 1995b] Fritzke, B. A growing neural gas network learns topologies. In Tesauero, G.; Touretzky, D. S.; Leen, T. K. (eds), *Advances in Neural Information Processing Systems 7*, pp. 625–632. MIT Press, Cambridge MA, 1995.
- [Hasegawa & Iba, 2004] Hasegawa, Y.; Iba, H. Multimodal search with immune based genetic programming. In *Proceedings of ICARIS-2004, 3rd International Conference on Artificial Immune Systems*, pp. 330–341, Catania, Italy, 2004.
- [Haykin, 1994] Haykin, S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall PTR, 1994.
- [Haykin, 1996] Haykin, S. *Adaptive Filter Theory*. Prentice-Hall, third edition, 1996.
- [Hettich et al., 1998] Hettich, S.; Blake, C. L.; Merz, C. J. UCI repository of machine learning databases, 1998.
- [Holmström, 2002] Holmström, J. Growing neural gas experiments with GNG, GNG with utility and supervised GNG, 2002.
- [Jerne, 1974] Jerne, N. K. Towards a network theory of the immune system. *Ann. Immunol. (Inst. Pasteur)* 125C, pp. 373–389, 1974.
- [Jolliffe, 2002] Jolliffe, I. T. *Principal Component Analysis*. Springer Verlag, New York, 2002.
- [Kasabov, 2002] Kasabov, N. K. *Evolving Connectionist Systems: Methods and Applications in Bioinformatics, Brain Study and Intelligent Machines*. Springer-Verlag New York, Inc., 2002.
- [Knidel et al., 2005a] Knidel, H.; de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. Data clustering with a neuro-immune network. In Wang, L.; Chen, K.; S. Ong, Y. (eds), *Advances in Natural Computation*, volume 3610 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 1279–1288. Springer Berlin, 2005.
- [Knidel et al., 2005b] Knidel, H.; de Castro, L. N.; Von Zuben, F. J. RABNET: a real-valued antibody network for data clustering. In *Proceedings of the 2005 conference on Genetic and evolutionary computation*, volume 1, pp. 371–372, Washington DC, USA. ACM Press, 2005.

- [Kohavi & Provost, 1988] Kohavi, R.; Provost, F. Glossary of terms. *Machine Learning* **30**(2-3), pp. 271–274, 1988.
- [Kohonen, 1989] Kohonen, T. *Self-organization and associative memory: 3rd edition*. Springer-Verlag New York, Inc., New York, NY, USA, 1989.
- [Kohonen, 2000] Kohonen, T. *Self-organizing maps*. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [Marsland et al., 2002] Marsland, S.; Shapiro, J.; Nehmzow, U. A self-organising network that grows when required. *Neural Network* **15**(8-9), pp. 1041–1058, 2002.
- [Martinetz, 1993] Martinetz, T. M. Competitive Hebbian learning rule forms perfectly topology preserving maps. In *Proceedings of the International Conference on Artificial Neural Networks*, pp. 427–434, Amsterdam. Springer, 1993.
- [Merz, 2003] Merz, P. An iterated local search approach for minimum sum-of-squares clustering. In *Advances in Intelligent Data Analysis V (IDA 2003)*, volume 2810 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 286–296. Springer, Heidelberg, 2003.
- [Nossal, 1993] Nossal, G. J. V. The molecular and cellular basis of affinity maturation in the antibody response. *Cell* **68**, pp. 1–2, 1993.
- [Perelson, 1989a] Perelson, A. S. Immune network theory. *Immunological Reviews* **10**, pp. 5–36, 1989.
- [Perelson, 1989b] Perelson, A. S. Immune networks: A topologic view. In Goldbeter, A. (ed), *Cell to Cell Signalling: From experiments to Theoretical Models*, pp. 261–272. Academic Press, London, 1989.
- [Perelson & Oster, 1979] Perelson, A. S.; Oster, G. F. Theoretical studies of clonal selection: Minimal antibody repertoire size and reliability of self-nonself discrimination. *Journal of Theoretical Biology* **81**, pp. 645–670, 1979.
- [Prim, 1957] Prim, R. C. Shortest connection networks and some generalizations. *The Bell Systems Technical Journal* **36**(6), pp. 1389–1401, 1957.
- [Ritter & Kohonen, 1989] Ritter, H.; Kohonen, T. Self-organizing semantic maps. *Biol. Cybern.* **61**, pp. 241–254, 1989.
- [Rojas et al., 2003] Rojas, C.; Cardona, C.; Dasgupta, D.; Osorio, F. A. G.; Nasraoui, O. A scalable artificial immune system model for dynamic unsupervised learning. In *Proceedings of the Genetic*

- and Evolutionary Computation Conference (GECCO)*, volume 2723 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 222–233. Springer-Verlag, 2003.
- [Segel & Perelson, 1988] Segel, L. A.; Perelson, A. S. Computations in shape space: a new approach to immune network theory. In Perelson, A. (ed), *Theoretical Immunology*, volume 2 of *SFI Series on Complexity*, pp. 321–343. Addison Wesley, New Jersey, 1988.
- [Timmis, 2001] Timmis, J. AIVIS - artificial immune network visualisation. In *EuroGraphics UK 2001 Conference Proceedings*, pp. 61–69, Univerisity College London. Eurographics, 2001.
- [Timmis & Neal, 2001] Timmis, J.; Neal, M. J. A resource limited artificial immune system for data analysis. *Knowledge Based Systems* **14**(3-4), pp. 121–130, 2001.
- [Varela & Coutinho, 1991] Varela, F. J.; Coutinho, A. Second generation immune networks. *Immunology Today* **12**, pp. 159–167, 1991.
- [Varela et al., 1988] Varela, F. J.; Dupire, B.; Coutinho, A. Cognitive networks: Immune, neural and otherwise. In Perelson, A. (ed), *Theoretical Immunology*, volume 2 of *SFI Series on Complexity*, pp. 359–375. Addison Wesley, New Jersey, 1988.
- [Watkins, 2001] Watkins, A., 2001. AIRS: A resource limited artificial immune classifier. Master's thesis, Mississippi State University.
- [Watkins & Timmis, 2002] Watkins, A.; Timmis, J. Artificial immune recognition system (AIRS): Revisions and refinements. In Timmis, J.; Bentley, P. J. (eds), *Proceedings of the 1st International Conference on Artificial Immune Systems (ICARIS)*, pp. 173–181, University of Kent at Canterbury. University of Kent at Canterbury Printing Unit, 2002.
- [Watkins et al., 2004] Watkins, A.; Timmis, J.; Boggess, L. Artificial immune recognition system (AIRS): An immune-inspired supervised machine learning algorithm. *Genetic Programming and Evolvable Machines* **5**(3), pp. 291–317, 2004.
- [Zahn, 1971] Zahn, C. T. Graph-theoretical methods for detecting and describing gestalt clusters. *IEEE Trans. on Computers* **C-20**(1), pp. 68–86, 1971.

Índice Remissivo de Autores

Attux, Romis Ribeiro de Faissol 73

Bishop, Christopher M. 16

Blake, Catherine L. 59, 60, 62, 66

Boggess, Lois 65

Burnet, Frank Macfarlane 12

Cardona, Cesar 33

Carter, Jerome H. 33

Cavalcante, Casimiro 73

Charles 73

Chen, Sheng 73, 74

Coutinho, Antônio 15

Dasgupta, Dipankar 33

de Castro, Leandro Nunes 6, 12, 17, 20, 21, 23,
27, 33, 39, 52–54, 61, 65, 73, 84

de Deus Jr., Getúlio A. 6, 20, 27, 33, 52

de França, Fabrício Olivetti 33

Deng, Da 17

Duda, Richard O. 2, 29, 74, 76

Dupire, Bruno 15

Ferrari, Rafael 73

Forney Jr, George David 72

Fritzke, Bernd 16, 17, 48, 52, 53

Grant, Peter M. 73, 74

Hart, Peter E. 2, 29, 74, 76

Hasegawa, Yoshihiko 33

Haykin, Simon 16, 72

Hettich, Seth 59, 60, 62, 66

Holmström, Jim 17

Iba, Hitoshi 33

Jerne, Niels Kaj 14

Jolliffe, Ian T. 30

Kasabov, Nikola K. 17, 53

Knidel, Helder 33, 61, 65, 73, 84

Kohavi, Ron 5

Kohonen, Teuvo 16, 17, 36, 40, 48

Marsland, Stephen 17

Martinetz, Thomas M. 4, 17

Merz, Christopher J. 59, 60, 62, 66

Merz, Peter 73, 77

Mulgrew, Bernard 73, 74

Nasraoui, Olfa 33

Neal, Mark J. 18, 19, 33

Nehmzow, Ulrich 17

Nossal, Gustav J. V. 14

Osorio, Fabio Augusto González 33

Oster, George F. 9

Panazio, Cristiano 73

Perelson, Alan S. 9, 10, 15, 33

Prim, Robert C. 95

Provost, Foster 5

Ritter, Helge 48

Rojas, Carlos 33

Romano, João Marcos 73

Segel, Lee A. 9, 33

Shapiro, Jonathan 17

Stork, David G. 2, 29, 74, 76

Timmis, Jonathan 12, 18, 19, 33, 59, 61, 62, 65

Varela, Francisco J. 15

Von Zuben, Fernando J. 6, 17, 20, 21, 27, 33, 39,
52–54, 61, 65, 73, 84

Watkins, Andrew 18, 33, 59, 61, 62, 65

Zahn, Charles T. 31

Apêndice A

Árvore Geradora Mínima

Na teoria de grafos, a Árvore Geradora Mínima (AGM ou, em inglês, *Minimum Spanning Tree*, MST) é uma "árvore", ou seja, um grafo conexo sem ciclos, que contém todos os vértices do grafo e cuja soma dos pesos dos ramos é mínima.

Uma forma de obter a AGM a partir de um conjunto de vértices é através da execução do algoritmo proposto por Prim [Prim, 1957], cujo pseudocódigo é mostrado no Algoritmo 5.

Inicialmente, considere um grafo não orientado $G = (V; E)$ onde V é o conjunto de vértices e E o conjunto de arestas. Tome $S \subseteq V$ e denote por $\bar{S}$ o conjunto $V - S$. O corte de arestas de S , denotado por δS , é o conjunto de arestas de G com um extremo em S e outro em $\bar{S}$.

Algoritmo 5 Pseudocódigo do algoritmo de Prim.

```
1: Início  
2: Escolha um vértice  $u$  qualquer de  $G$ , tome  $S = T = u$ .  
3: Para  $k$  de 1 a  $|V| - 1$  Faça  
4:   Encontre a aresta  $e$  de menor custo em  $\delta S$  e seu extremo  $v$  em  $\bar{S}$ .  
5:   Inclua  $v$  e  $e$  em  $T$  e  $v$  em  $S$ .  
6: Fim para  
7: Fim
```

Como exemplo, seja o conjunto de vértices da Figura A.1(a). Aplicando-se o Algoritmo 5 para determinar a AGM correspondente ao conjunto de vértices fornecido, teremos como resultado a árvore da Figura A.1(b).

A aplicação da AGM para segmentar automaticamente os protótipos (anticorpos) fornecidos, pelas saídas de redes imunológicas ou neuro-imunológicas, é executada conforme segue. Primeiramente, todos os protótipos da rede são ligados usando uma árvore geradora mínima. A seguir, são determinadas as ligações inconsistentes. A remoção dessas ligações inconsistentes permite caracterizar as ligações sem quebras como pertencentes ao mesmo grupo.

Uma ligação inconsistente pode ser determinada de várias maneiras. O método usado neste traba-

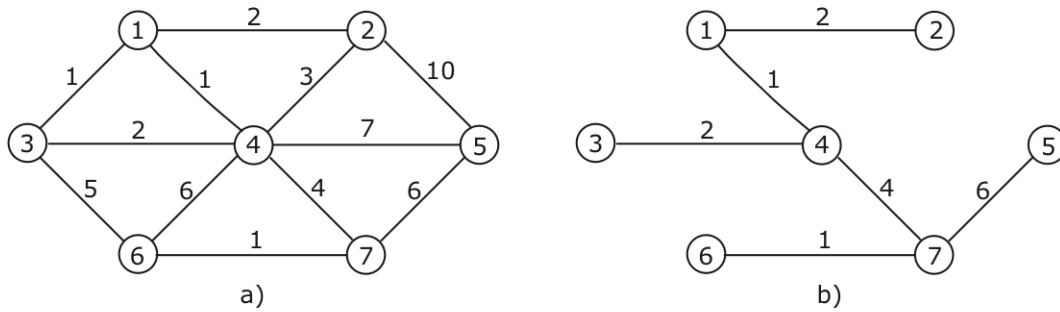


Fig. A.1: a) Conjunto de vértices com os pesos associados. b) Árvore Geradora Mínima relativa ao conjunto de vértices da parte (a).

lho opera da seguinte forma: para cada ligação da AGM construída, seus dois pontos de extremidade são analisados com uma profundidade p ; a média e desvio padrão do comprimento de todas as ligações que estão dentro de p passos, a partir de cada ponto da extremidade, são calculados; se o comprimento de uma ligação for maior do que a média mais dois desvios padrões, esta ligação é considerada inconsistente. Embora a análise de inconsistência seja realizada nas duas extremidades, basta a detecção de inconsistência em apenas uma extremidade para que o ramo considerado inconsistente seja podado.

Na Figura A.2 estão ilustradas as posições de um conjunto de protótipos no $\mathbb{R}^2$ e a MST com as respectivas distâncias euclidianas. Para exemplificar o método de poda de ramos inconsistentes, vamos considerar a profundidade $p = 2$. Dessa forma, a análise do ramo de comprimento 10 é baseada nos ramos vizinhos (ramos que possuem o comprimento marcado com um círculo). Adotaremos a notação a seguir: comprimento do ramo (l), média dos vizinhos (μ) e desvio padrão (ρ). Para o cenário considerado temos: ($l = 10$), ($\mu = 4, 5$) e $\rho = 1$. Substituindo esses valores na Inequação A.1, obtém-se um resultado verdadeiro para a mesma, significando que o ramo em análise é um ramo inconsistente, devendo, assim, ser podado.

$$\begin{aligned}
 l &> \mu + 2 * \rho \\
 10 &> 4, 5 + 2 * 1 \\
 10 &> 6, 5
 \end{aligned}$$

A poda do ramo inconsistente no exemplo considerado origina dois sub-grupos, como pode ser visualizado na Figura A.3. Cabe ressaltar que a análise de inconsistência é realizada em todos os ramos da árvore. No caso da Figura A.3, nenhum outro ramo foi considerado inconsistente.

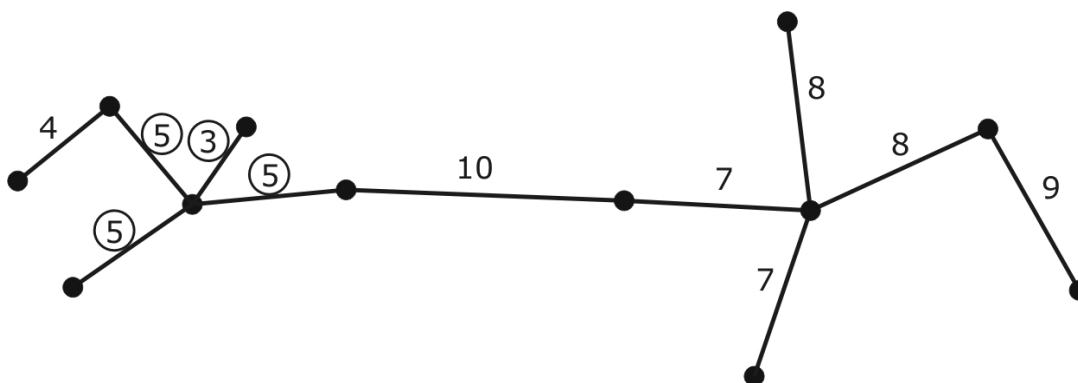


Fig. A.2: Árvore Geradora Mínima com suas respectivas distâncias euclidianas.

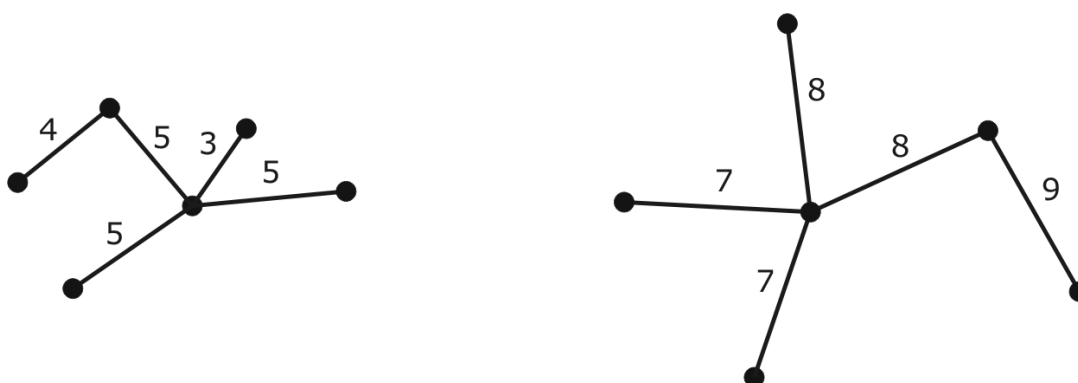


Fig. A.3: Sub-grupos formados após a poda do único ramo considerado inconsistente.