

Desenvolvimento de redes neurais no MATLAB com base em testes em *Artemia sp.*

Development of neural networks in MATLAB based on tests in *Artemia sp.*

RESUMO

José Vitor Rocha Custódio
jose.rocha.custodio@escola.pr.gov.br
Colégio Estadual Professor João
Ricardo von Borell du Vernay, Ponta
Grossa, Paraná, Brasil

Elis Regina Duarte
elisdu@yahoo.com.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Ponta Grossa, Paraná,
Brasil

Alessandra Cristine Novak
Sydney
alessandrac@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Ponta Grossa, Paraná,
Brasil

Rede neural artificial (RNA) é uma representação do neurônio biológico feita através de modelos matemáticos. Sua arquitetura é muito flexível, tendo muitas aplicações em diversas áreas. O foco desta pesquisa foi analisar a capacidade de uma RNA representar os dados referentes a um teste de toxicidade de um Extrato, realizado no microcrustáceo *Artemia sp.* Para isso, foram testadas diferentes arquiteturas de redes neurais, nas quais foram modificados o número de neurônios na camada oculta e número de camadas ocultas, sendo o algoritmo de aprendizagem utilizado o *Backpropagation*. Estas redes foram alimentadas com a concentração de Extrato em *log* como entrada e a média de mortalidade em *probit* como saída. A partir da observação do erro quadrático médio foi escolhida a melhor rede neural para representar a toxicidade.

PALAVRAS-CHAVE: Toxicidade. *Deep learning*. *Backpropagation*.

ABSTRACT

Artificial neural network (ANN) is a representation of the biological neuron using mathematical models. Its architecture is very flexible, having many applications in several areas. The focus of this research was to analyze the ability of an ANN to represent the data referring to an Extract toxicity test, performed on the *Artemia sp* microcrustacean. For this, different architectures of neural networks were tested, in which the number of neurons in the hidden layer was modified, using the Backpropagation learning algorithm. These networks were fed with the Extract concentration in log as input and the average mortality in probit as output. From the observation of the mean square error, the best neural network was chosen to represent toxicity.

KEYWORDS: Toxicity. *Deep learning*. *Backpropagation*.

Recebido: 19 ago. 2020.

Aprovado: 01 out. 2020.

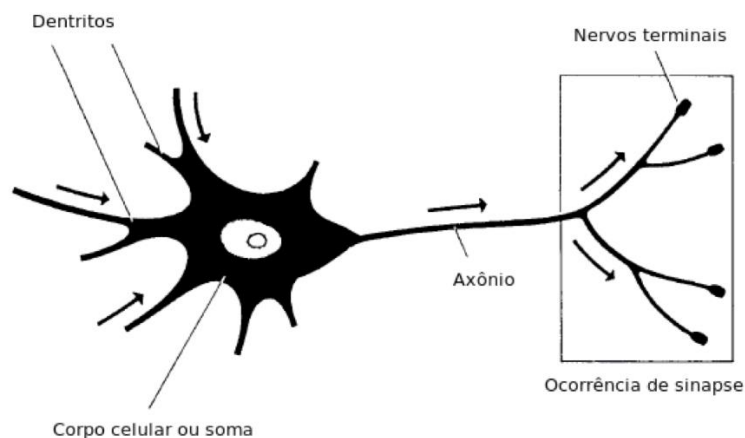
Direito autoral: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



INTRODUÇÃO

Uma das grandes ambições dos pesquisadores é conseguir representar fielmente o cérebro humano, sendo a rede neural artificial uma tentativa dessas reproduções. Sua estrutura é baseada em modelos matemáticos dos neurônios biológicos, cuja função é compartilhar informações através de impulsos elétricos. Um neurônio possui três partes principais: a soma ou corpo celular, que possui ramificações pequenas, os dentritos, e uma ramificação maior, chamada de axônio, que transmite informações para outros neurônios a partir de terminações nervosas, no processo de sinapse (ARBIB, 2002 apud GONÇALVES, [ca 2008]). O modelo básico de neurônio é presente na Figura 1.

Figura 1: Modelo Abstrato de Neurônio Biológico



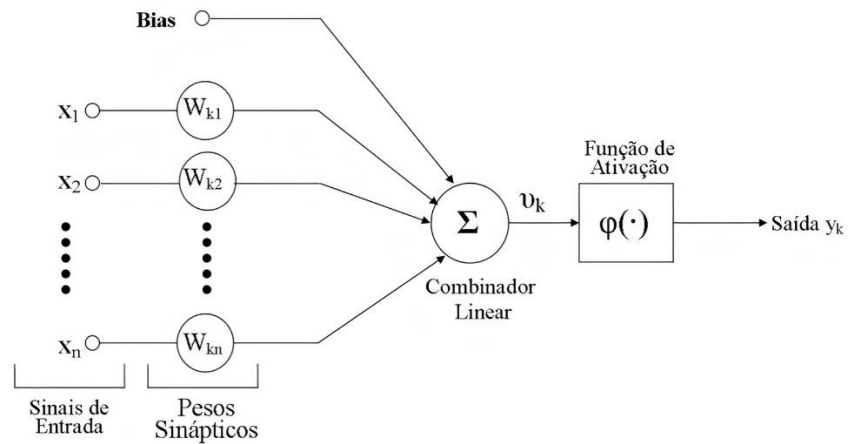
Fonte: Arbib et.al. (2002)

O que torna este modelo tão especial é o fato do neurônio possuir grande capacidade de aprendizagem, conseguindo aprender informações as quais nunca teve contato e usá-las na resolução de problemas e situações estranhas, obtendo resultados precisos e com baixa taxa de erro.

A maioria dos modelos matemáticos que representam os neurônios são baseados no *Perceptron*, modelo desenvolvido por McCulloch e Pitts (1943). Os dois propuseram que os impulsos elétricos que vêm de outros neurônios são os chamados *sinais de entrada* (x). Alguns destes estímulos excitarão mais ou menos os neurônios receptores, o que foi representado através dos chamados *pesos sinápticos* (w_k – sendo ‘ k ’ o neurônio em questão). Quanto maior o valor do peso, o estímulo é maior (MCCULLOCH; PITTS, 1943 apud GONÇALVES, [ca 2008]).

O corpo celular é representado em dois módulos. O primeiro soma os valores de entrada e os multiplica pelos pesos, enviando o valor obtido para o segundo módulo, uma função de ativação. Ela define com base nos dados fornecidos qual será a saída do neurônio (y_k – que representa o axônio). O modelo pode ser observado na Figura 2.

Figura 2: Modelo de neurônio artificial proposto por McCulloch e Pitts

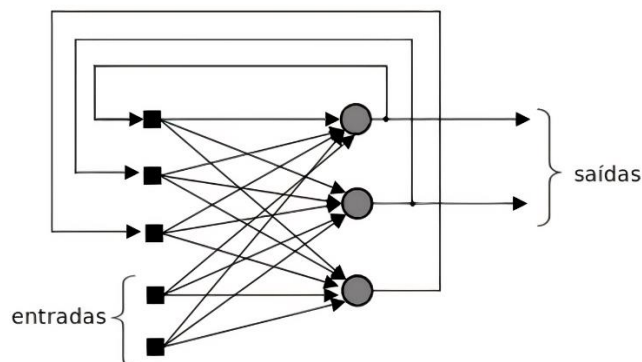


Fonte: Gonçalves (ano desconhecido).

Segundo Arbib et.al. (2002), existem 3 tipos fundamentais de arquiteturas de redes neurais, cuja funcionalidade depende do problema a qual irá abordar. O primeiro tipo são as redes *Feed-forward*, cujo fluxo de informações vai da camada de entrada até a camada de saída, podendo ter camadas intermediárias.

O segundo tipo são as redes *Feed-backward*, que possuem a realimentação de neurônios, ou seja, a saída do neurônio é aplicada como sua entrada ou de neurônios anteriores, em um ciclo. Este tipo é representado na Figura 3.

Figura 3: Exemplo de uma rede neural com realimentação



Fonte: Gonçalves (ano desconhecido)

O terceiro tipo é chamado de rede competitiva. Nas redes competitivas os neurônios estão divididos em duas camadas, a camada de entrada e a camada de saída, conhecida como grade. Os neurônios contidos na grade competem entre si, com base no nível de similaridade entre o padrão de entrada e a grade de neurônios. Apenas o vencedor é ativado a cada interação.

Um elemento muito importante de uma rede neural é o seu método de aprendizado. O aprendizado de uma RNA vem da necessidade da mesma em reagir a estímulos externos, gerando outro aprendizado que é usado em outros estímulos, conforme afirma Rauber (2014). O método de aprendizado mais comumente utilizado é o *Backpropagation*, que funciona a partir da correção de erro.

Segundo Leite (2018), o processo de *Backpropagation* se constitui da adição de valores aleatórios e pequenos em todos os pesos da rede, quando ela é iniciada. Após a rede produzir os dados de saída ocorre o cálculo da função de erro, que compara com o valor de saída esperado pelo usuário.

Para diminuir o valor desta função, são atualizados os pesos de modo iterativo, com base no cálculo de seus respectivos gradientes, para que indiquem o maior decréscimo da função de erro. As ações se repetem até que a rede atinja o menor erro possível.

O teste de toxicidade no microcrustáceo *Artemia* sp. é muito conhecido por seus resultados proporcionais a valores testados em humanos e seu fácil manuseio e criação. Outros fatores atrativos para seu uso na pesquisa é seu custo muito baixo e seu fácil acesso, sendo muito econômico e eficaz.

Por ser encontrado na forma de cistos, é necessário o preparo de um ambiente propício para sua eclosão e desenvolvimento dos náuplios, o estágio de vida onde os microcrustáceos são testados. Veiga & Vital (2002) explicam que os cistos devem ser hidratados em água e desinfetados com água sanitária. Após isso eles são colocados em solução de água e cloreto de sódio, com contato direto com uma fonte de luz.

A intenção deste experimento é, com os dados recolhidos nos testes laboratoriais com as Artemias, desenvolver uma rede neural que seja capaz de assimilar estes valores, confirmando se existe a possibilidade de uma RNA prever a média de mortalidade, com base na concentração utilizada de um Extrato.

MATERIAIS E MÉTODOS

Os cistos das artemias foram eclodidos em um aquário contendo uma solução de água e sal de cozinha (NaCl). Uma luminária foi utilizada como fonte de iluminação durante o período de eclosão, que levou cerca de 24-48 horas. Após a eclosão os náuplios formados foram desinfetados com água sanitária, para a realização dos testes.

Os experimentos laboratoriais foram realizados com o contato dos náuplios de *Artemia* sp. às seguintes concentrações de Extrato, representadas em µg/mL: 10; 100; 250; 500; 750; e 1000. Elas foram expostas por um período de 24 horas, sendo observado o número de seres mortos a partir de cada concentração utilizada.

A partir da plataforma NNTool, do programa MATLAB, foram testadas 3 redes neurais do tipo *Feed-forward* com uso do algoritmo de aprendizado *Backpropagation*. As únicas distinções entre elas são o número de neurônios e de camadas ocultas.

A primeira rede neural conta com apenas uma camada oculta com 20 neurônios, enquanto a segunda conta com duas camadas ocultas de 10 e 5 neurônios respectivamente. A terceira possui três camadas ocultas, contendo 20 neurônios na primeira camada, 10 na segunda e 5 na terceira camada.

Nas três redes a função de performance que foi utilizada no NNTool foi o MSE (*Mean Squared Error*, ou Erro Quadrático Médio). Esta função compara a diferença entre *Targets* e *Outputs*, indicando o erro obtido pela rede ao processar os dados de entrada. Um valor mais próximo de 0 indica um erro baixo.

A Regressão (R) é um valor entre 0 e 1 que indica a relação entre *Targets* e *Outputs*, sendo 0 uma relação aleatória e 1 uma relação linear.

Por padrão, os dados inseridos são divididos em três partes, sendo 70% designados para treino, 15% para validação e 15% para teste. Nesta etapa é observada a taxa de erro e a performance da rede, bem como sua capacidade de prever novos valores.

RESULTADOS

A alimentação das redes usou os valores de concentração do Extrato (convertidos em log) como *Inputs* (entradas) e como *Targets* (alvos) foram utilizados os valores de mortalidade com base no método de *probit*. Estes valores são determinados a partir da Tabela de Finney, que converte a porcentagem de mortalidade para *probits*, conforme apresentado na Tabela 1.

Tabela 1: Transformação de porcentagens para probits

%	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	-	2,67	2,95	3,12	3,25	3,36	3,45	3,52	3,59	3,66
10	3,72	3,77	3,82	3,87	3,92	3,96	4,01	4,05	4,08	4,12
20	4,16	4,19	4,23	4,26	4,29	4,33	4,36	4,39	4,42	4,45
30	4,48	4,50	4,53	4,56	4,59	4,61	4,64	4,67	4,69	4,72
40	4,75	4,77	4,80	4,82	4,85	4,87	4,90	4,92	4,95	4,97
50	5,00	5,03	5,05	5,08	5,10	5,13	5,15	5,18	5,20	5,23
60	5,25	5,28	5,31	5,33	5,36	5,39	5,41	5,44	5,47	5,50
70	5,52	5,55	5,58	5,61	5,64	5,67	5,71	5,74	5,77	5,81
80	5,84	5,88	5,92	5,95	5,99	6,04	6,08	6,13	6,18	6,23
90	6,28	6,34	6,41	6,48	6,55	6,64	6,75	6,88	7,05	7,33
-	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
99	7,33	7,37	7,41	7,46	7,51	7,58	7,65	7,75	7,88	8,09

Fonte: Finney (1952).

A Tabela 2 apresenta os dados que foram inseridos na rede, considerando a concentração como entrada e o probit como saída.

Tabela 2 – Concentração e probit de morte

Concentração (log)	Probit de morte
0	0
0,5	0
1	0
1,2	0,51068
1,5	1,505
1,7	2,165
2,0	3,1622
2,2	3,82508
2,5	4,8194
2,7	5,48228
3,0	6,2772

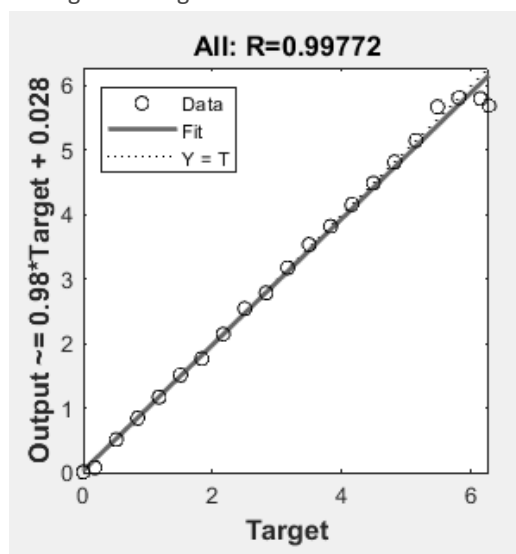
Fonte: Autoria própria (2020).

Com as redes já montadas, são realizados os testes, considerando a divisão dos dados em 70% para treino, 15% para validação e 15% para teste.

Na primeira rede o valor de MSE foi de 0,83125, o que indica uma diferença relativamente grande entre os dados fornecidos e os obtidos pela rede, visto que os valores utilizados são pequenos.

A segunda rede teve um erro mínimo de 0,11707, apresentando um melhor processamento dos dados, o que pode ser justificado por sua arquitetura mais robusta que a anterior. Seu valor de R foi de 0,99772, o que aponta uma grande linearidade entre os dados vindos do usuário e os encontrados pelo sistema, conforme apresentado na Figura 4.

Figura 4: Regressão linear da rede 2



Fonte: Autoria própria (2020).

O maior valor de erro obtido foi encontrado na terceira rede, tendo o MSE de 4,7606, muito maior que os observados nas redes anteriores. Portanto, tendo o pior desempenho entre as 3 redes. Seu valor de regressão linear foi muito menor que o anterior, sendo de 0,39531, muito baixo, o que pode indicar uma base de dados muito pequena para o tamanho da rede.

Considerando as redes testadas, a rede 2 foi a que apresentou melhor funcionamento e que conseguiu assimilar os dados da melhor forma possível. A Tabela 3 apresenta os dados de saída fornecidos pelo usuário (alvos) e os obtidos pela rede 2 (saídas), bem como o valor de erro. Nota-se que o programa arredonda automaticamente valores com muitas casas decimais.

Tabela 3: Dados de saída e erro

Alvos	Saídas	Erro
0	0,0075427	-0,0075427
0	0,0048835	-0,0048835
0	0,0065658	-0,0065658
0,51068	0,51022	0,00045961
1,505	1,5124	-0,0073616
2,165	2,1457	0,019281
3,1622	3,1761	-0,013938
3,82508	3,8198	0,0053097
4,8194	4,819	0,00042318
5,48228	5,6744	-0,19216
6,2772	5,6902	0,58701

Fonte: Autoria própria (2020).

CONCLUSÕES

As RNA's são ferramentas com diversas aplicações, conseguindo abordar uma gama de problemas, se treinada corretamente. As suas características, baseadas no cérebro humano, as tornam muito flexíveis e rápidas para assimilar novas situações, gerando assim uma grande adaptabilidade a situações estranhas. Sua aplicação na toxicologia é muito útil por diminuir o tempo realizado nos testes, além de possuir um custo muito baixo e diminuir muito o uso de cobaias vivas.

Entre as 3 redes testadas, apenas a rede nº 2 conseguiu apresentar resultados satisfatórios, conseguindo compreender e gerar saídas muito próximas dos valores esperados, confirmando a possibilidade da rede em prever a média de mortalidade, a partir da concentração de extrato utilizada.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq, pela bolsa ofertada.

À minha mãe, meus professores e colegas pelo apoio e incentivo durante o desenvolvimento do trabalho.

REFERÊNCIAS

GONÇALVES, A. R. **Redes Neurais Artificiais** (p. 3-9). Disponível em: https://andreric.github.io/files/pdfs/redes_neurais.pdf. Acesso em 3 de agosto de 2020.

FINNEY, D. J., Ed. **Probit Analysis**. Universidade de Cambridge. Cambridge, Inglaterra, 1952.

LEITE, Thiago M. **Redes Neurais, Perceptron Multicamadas e o Algoritmo Backpropagation**; Medium. Disponível em: <https://medium.com/ensina-ai/redes-neurais-perceptron-multicamadas-e-o-algoritmo-backpropagation-eaf89778f5b8>

RAUBER, Thomas W. **Redes Neurais Artificiais** (p. 10); ResearchGate. Disponível em https://www.researchgate.net/profile/Thomas_Rauber/publication/228686464_Redes_neurais_artificiais/links/02e7e521381602f2bd000000/Redes-neurais-artificiais.pdf. Acesso em 3 de agosto de 2020.

VEIGA, L. F.; VITAL, N. Teste de toxicidade aguda com o microcrustáceo *Artemia* sp. 2002. In: NASCIMENTO, I. A.; SOUZA, E. C. P. M.; NIPPER M. G. (ed.), **Métodos em ecotoxicologia marinha. Aplicações no Brasil**. Artes Gráficas e Indústria, São Paulo, 2002, p.111-122.