SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito: 09.11.2004

Assinatura:

Métodos auto-organizáveis para segmentação de imagens

Patrícia Rufino Oliveira

Orientadora: Profa. Dra. Roseli Aparecida Francelin Romero

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional.

**USP – São Carlos
Novembro de 2004**

Agradecimentos

A Deus por mais essa realização e por todas as oportunidades que tive até hoje.

A meus queridos pais, Antônio e Socorro Oliveira que com tanto amor me educaram e me ensinam fundamentos que levarei comigo para sempre. A eles agradeço pelos apoios morais, emocionais e financeiros incondicionais.

À minha orientadora, Roseli Aparecida Francelin Romero, por ter confiado na minha capacidade de conduzir esse e outros projetos; pela constante motivação e perseverança com que encarou os desafios deste trabalho e pelo prazer das longas conversas que tivemos ao longo desses anos.

Aos meus irmãos Gisela e Matheus Oliveira pelo carinho, apoio e compreensão, e principalmente por entenderem os momentos de minha ausência.

Ao pesquisador Dr. Aapo Hyvärinen, supervisor do meu estágio na universidade Helsinki University of Technology, Finlândia, que contribuiu com várias idéias implementadas neste trabalho, pelo conhecimento compartilhado e pela oportunidade que tive em conhecer seu centro de pesquisa.

Aos meus amigos de fé, Andréia e Isabel Rodrigues e Júlio Menochelli pela companhia fiel ao longo desta e de outras jornadas.

Aos meus avós e tios, pelo incentivo constante, e pelos momentos marcantes e felizes.

Aos amigos que conheci em São Carlos e que fizeram e fazem toda a diferença, Thais Aiza, Sandra de Góes, Sidney Oliveira, Daylton Romão, Karina Salemi, Renato Pagotto e Jaqueline Pugliesi.

A Eduardo J. Spinosa, pela valiosa ajuda na revisão de partes deste trabalho, e pela amizade.

A José Flávio Vicentini pela oportunidade de termos desenvolvido alguns trabalhos em comum, pela amizade e momentos de descontração.

A todos os colegas do Labic, em especial, a Katti Faceli, Gedson Faria, Edson Melanda, Ana Lorena, Huei Lee e Mariza Ferro pelos momentos compartilhados, dentro e fora da USP.

Aos professores Maria Carolina Monard e André de Carvalho pelo apoio recebido desde a época do meu mestrado.

A todos funcionários do ICMC-USP, em especial, à Beth (secretaria de pós-graduação), Paulinho (áudio-visual), Maria, Sandra e Rose (biblioteca) pela simpatia e compreensão com que sempre me atenderam.

A CAPES pelo apoio financeiro no Brasil e no exterior.

Resumo

Segmentação de imagens é um dos problemas mais investigados na área de computação visual. A complexidade desse problema varia de acordo com o tipo de aplicação. Em geral, o objetivo é dividir a imagem em regiões que apresentem propriedades similares. No presente trabalho, métodos auto-organizáveis para classificação não supervisionada e agrupamento de padrões são utilizados em tarefas de segmentação. O primeiro modelo refere-se à rede neural Fuzzy ART e o segundo é o Modelo de Misturas ICA (ICAMM) que faz uso da técnica ICA (Análise de Componentes Independentes) para descrever os dados em cada classe.

Além da avaliação de desempenho dos modelos auto-organizáveis utilizados, foram propostas melhorias nos resultados de segmentação por meio da incorporação de técnicas de pré-processamento de imagens, que sejam capazes de tratar questões referentes à presença de ruídos, suavização de imagens e realce de bordas, de modo que as imagens se tornem mais adequadas ao processo de segmentação, tornando-o mais eficiente. Com esse objetivo, foi proposta uma metodologia para pré-processamento de imagens, que combina o método *Sparse Code Shrinkage*, para redução de ruídos e suavização da imagem, e o detector de bordas de Sobel, que tem a função de restaurar as bordas que foram borradas pelo processo de suavização.

Outra contribuição original deste trabalho refere-se ao desenvolvimento do método EICAMM, que surgiu por meio da proposta de melhorias incorporadas ao modelo ICAMM, levando em consideração algumas limitações do método original e análises de como este poderia se tornar mais eficiente.

Finalmente, unificando as duas principais contribuições originais desta tese, o método EICAMM foi utilizado na segmentação de imagens nas suas versões originais e pré-processadas pela metodologia proposta neste trabalho, tendo apresentado resultados de segmentação satisfatórios.

Abstract

Image segmentation is one of most investigated problems in computer vision. Its complexity can vary according to the kind of application. In general, the goal is to divide an image into regions with similar properties. In this work, self-organizing methods for unsupervised classification and clustering are applied in image segmentation tasks. The first self-organizing model is the Fuzzy ART neural network and the other one is the ICA Mixture Model (ICAMM), which uses ICA method to describe data in each class.

Beside the performance evaluation regarding the considered methods, some improvements on the segmentation results obtained by these techniques were proposed by incorporating some image preprocessing methods. Such methods were able to handle some questions regarding to presence of noise, image smoothing and edge enhancement, in a way that makes an image more suited to be processed by an image segmentation technique, which can become more efficient. Aiming this, a preprocessing methodology was proposed in this work that combines Sparse Code Shrinkage method for image denoise to the Sobel Edge Detector, which is applied to recover edges that were blurred by an excessive smoothing.

Another original contribution of this work refers to the development of EICAMM, which was built by proposing some modifications on ICAMM, considering some limitations on the original method and analysis on how it should be modified to become more efficient.

Finally, unifying the two main contributions of this thesis, the EICAMM method was applied for segmenting some images in these original and preprocessed versions, obtained by the proposed preprocessing methodology. Such system has showed satisfactory image segmentation results.

Conteúdo

Conteúdo	ix
Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiv

Lista de Abreviaturas xvii

1	Introdução	1
1.1	Contexto e Motivação	1
1.2	Definição do Problema	2
1.3	Objetivos	4
1.4	Organização do Trabalho	4
2	Definições	7
2.1	Considerações Iniciais	7
2.2	Definições e Propriedades de Vetores e Matrizes	7
2.2.1	Norma, Distância Euclidiana e Ortogonalidade de Vetores	7
2.2.2	Matrizes Identidade e Diagonal	8
2.2.3	Transposição e Inversão de Matrizes	8
2.2.4	Matriz Simétrica e Ortogonal	8
2.2.5	Determinante e Cofator	8
2.2.6	Matriz Adjunta	9
2.2.7	Matrizes de Derivadas Parciais	9
2.3	Distribuições e Densidades de Probabilidade	10
2.3.1	Distribuição de uma Variável Aleatória	10
2.3.2	Distribuição de um Vetor Aleatório	11
2.3.3	Distribuições Conjunta e Marginal	11
2.4	Esperança Matemática e Momentos	12
2.4.1	Definições e Propriedades Gerais	12
2.4.2	Vetor de Média e Matriz de Correlação	13
2.4.3	Matriz de Covariância	14
2.4.4	Estimativas de Esperanças	15
2.5	Não Correlação e Branqueamento	16
2.6	Independência Estatística	17
2.7	Densidades Condicionais e Regra de Bayes	19
2.8	A Densidade Gaussiana Multivariada	20
2.8.1	Propriedades da Densidade Gaussiana	20
2.9	Outros Conceitos Importantes	21

2.10	Considerações Finais	23
3	Métodos de Análise Multivariada e Redes Neurais Artificiais	25
3.1	Considerações Iniciais	25
3.2	Métodos de Análise Multivariada	26
3.2.1	Análise de Componentes Principais (PCA)	27
3.2.2	Técnicas de Agrupamento (<i>Clustering</i>)	31
3.3	Redes Neurais Artificiais	33
3.3.1	Processo de Aprendizado para Redes Neurais	33
3.3.2	Modelos da Família ART	37
3.3.3	Rede Neural PCA Adaptativa	51
3.4	Considerações Finais	55
4	Análise de Componentes Independentes	59
4.1	Considerações Iniciais	59
4.2	Motivação	60
4.3	ICA em Algumas Aplicações Reais	62
4.4	Definição da Técnica ICA	62
4.5	Suposições e Restrições da ICA	63
4.6	Ambiguidades do Modelo ICA	65
4.7	Não Correlação, Branqueamento e Independência	66
4.8	Abordagem ICA baseada na Teoria da Informação	67
4.8.1	Formulação do Problema ICA Utilizando Conceitos de Teoria de Informação	68
4.8.2	Abordagem Infomax para ICA	69
4.8.3	Regras de Aprendizado ICA para uma Rede Neural com uma Entrada e uma Saída	72
4.8.4	Regras de Aprendizado ICA para uma Rede Neural com N Entradas e N Saídas	75
4.8.5	Equivalência entre Maximização de Informação e Estimção por Máxima Verossimilhança	77
4.9	Maximização da Negentropia	78
4.9.1	O Algoritmo FastICA	79
4.10	Considerações Finais	80
5	Pré-Processamento de Imagens	83
5.1	Considerações Iniciais	83
5.2	Método <i>Sparse Code Shrinkage</i> para Redução de Ruídos em Imagens	84
5.2.1	Redução de Ruídos em Variáveis Alcatórias Não-Gaussianas	86
5.2.2	Modelagem para Densidades Esparsas	86
5.2.3	Transformação dos Dados em Variáveis Esparsas	87
5.3	Detector de Bordas de Sobel	89
5.4	Metodologia Proposta	90
5.4.1	Exemplo de uma Aplicação da Metodologia Proposta	91
5.5	Considerações Finais	91

6	Modelo de Misturas ICA	95
6.1	Considerações Iniciais	95
6.2	Formulação do Modelo ICAMM	96
6.3	Derivação do Algoritmo ICAMM	98
6.3.1	Estimação das Matrizes de Bases	99
6.3.2	Regras de Aprendizado do Modelo ICAMM	103
6.3.3	Estimação dos Vetores de Bias	103
6.4	Problemas do ICAMM	104
6.5	Considerações Finais	105
7	Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado (EICAMM)	107
7.1	Considerações Iniciais	107
7.2	Reformulação do Modelo de Classes	107
7.3	Regra de Aprendizado para os Termos de <i>Bias</i>	108
7.4	Ortogonalização das Matrizes de Bases	109
7.5	Incorporação de Informações de Segunda Derivada	109
7.5.1	Método de Newton	110
7.5.2	Método de Levenberg-Marquardt	110
7.6	Considerações Finais	111
8	Resultados Experimentais	113
8.1	Considerações Iniciais	113
8.2	Experimentos com Dados Simulados	114
8.2.1	Descrição dos Dados Simulados	114
8.2.2	Resultados e Discussões	114
8.2.3	Análise Visual de Resultados	116
8.3	Experimentos com o Conjunto de Dados Iris	117
8.3.1	Descrição dos Dados	117
8.3.2	Resultados e Discussões	118
8.4	Experimentos com Imagens	119
8.4.1	Descrição dos Dados de Imagens	119
8.4.2	Aplicação da Metodologia de Pré-Processamento Proposta	120
8.4.3	Experimentos de Segmentação de Imagens	123
8.5	Considerações Finais	130
9	Conclusões e Trabalhos Futuros	133
9.1	Principais Considerações	133
9.2	Principais Contribuições	135
9.3	Propostas de Trabalho Futuros	136
A	Derivação das Regras de Aprendizado ICA	137
A.1	Para uma Rede Neural com uma Entrada e uma Saída	137
A.1.1	Função de Transferência Logística	137
A.2	Função de Transferência Tangente Hiperbólica	139
A.3	Para uma Rede Neural com N Entradas e N Saídas	141
	Referências	143

Lista de Figuras

2.1	Função de densidade de probabilidade de uma distribuição gaussiana com média m e desvio-padrão σ	11
3.1	Estrutura básica de uma rede ART.	41
3.2	Arquitetura da rede ART1.	44
3.3	Arquitetura da rede Fuzzy ART.	47
3.4	Rede Neural PCA Adaptativa.	52
3.5	Resultados obtidos pelas técnicas de compressão	56
4.1	Exemplo de sinais originais.	61
4.2	Exemplos de misturas de sinais observadas.	61
4.3	Estimativas dos sinais de fontes originais	61
4.4	Exemplos de funções de densidade de probabilidade supergaussianas e subgaussianas	64
4.5	A função logística e sua derivada	72
4.6	Fluxo ótimo em neurônios sigmoidais	74
5.1	Função de densidade da distribuição de Laplace	87
5.2	Máscaras de Sobel	90
5.3	Metodologia de pré-processamento proposta	91
5.4	Exemplo da aplicação da metodologia de pré-processamento	92
8.1	Exemplo de dados simulados com duas classes laplacianas.	115
8.2	Exemplo de dados simulados com duas classes laplacianas e uma classe uniforme.	115
8.3	Análise visual de resultados dos métodos EICAMM e k -médiãs	118
8.4	Imagens originais utilizadas nos experimentos	121
8.5	Resultados da aplicação da metodologia de pré-processamento proposta	122
8.6	Esquema de formatação de padrões para dados de imagens	123
8.7	Resultados de segmentação da rede neural Fuzzy ART para imagens originais $K = 2$	125
8.8	Resultados de segmentação da rede neural Fuzzy ART para imagens pré-processadas para $K = 2$	126
8.9	Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens originais para $K = 3$	127
8.10	Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens pré-processadas para $K = 3$	128
8.11	Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens pré-processadas para $K = 5$	129
8.12	Resultados de segmentação de imagens utilizando o algoritmo k -médiãs aplicado às imagens pré-processadas	130

Lista de Tabelas

3.1	Dados para uma PCA.	28
3.2	Notação utilizada no algoritmo de aprendizado da rede ART1.	45
3.3	Inicialização dos parâmetros da rede ART1.	45
3.4	Parâmetros da rede Fuzzy ART.	48
3.5	Resultados da PCA clássica para o conjunto de dados Iris.	53
3.6	Resultados da rede PCA Adaptativa para o conjunto de dados Iris.	53
3.7	Resultados de compressão para o JPEG, PCA clássica e rede PCA.	55
8.1	Resultados de classificação para dados simulados.	116
8.2	Resultados de classificação para o conjunto de dados Iris.	119
8.3	Detalhes de descrição das imagens utilizadas nos experimentos.	120

Lista de Abreviaturas

ART	Teoria da Ressonância Adaptativa – Adaptive Resonance Theory.....2
BSS	Separação Cega de Fontes– Blind Source Separation 60
EICAMM	Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado – Enhanced ICA Mixture Model..... 5
ICA	Análise de Componentes Independentes – Independent Component Analysis.2
ICAMM	Modelo de Misturas ICA – ICA Mixture Model..... 2
JPEG	Joint Photographic Expert Group 54
MLE	Estimação por Máxima Verossimilhança – Maximum Likelihood Estimation68
MLP	Perceptron Multi Camadas – Multi Layer Perceptron 35
MSE	Erro Quadrático Médio – Mean-Square Error 54
PCA	Análise de Componentes Principais – Principal Component Analysis 2
RNA	Redes Neurais Artificiais.....26
SCS	Sparse Code Shrinkage.....2
SOM	Mapas Auto-Organizáveis – Self-Organizing Maps.....37

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contexto e Motivação

O processo de segmentação é um passo importante que antecede a manipulação e análise de imagens, sendo o seu principal objetivo separar os objetos de interesse do restante da imagem, para que futuras tarefas de reconhecimento e classificação possam ser realizadas com sucesso (Russ 1992), (Pratt 2001).

Vários métodos para segmentação de imagens podem ser encontrados na literatura. Dentre as abordagens clássicas, destacam-se aquelas baseadas em medidas de descontinuidade e/ou similaridade calculadas a partir dos valores de pixels em regiões da imagem (Jain 1989), (Gonzalez & Woods 1992), (Pratt 2001). Os métodos baseados em descontinuidades tendem a particionar uma imagem por meio da detecção de pontos isolados, linhas e arestas, de acordo com mudanças abruptas dos valores de pixels. Já as abordagens baseadas em medidas de similaridade incluem as técnicas de limiarização (Sahoo, Soltani, Wong & Chen 1988), agrupamento, crescimento de regiões e divisão e fusão de regiões (Fu & Mui 1981).

Outras abordagens, consideradas inteligentes por apresentarem capacidade de aprendizado, generalização, incorporação de conhecimento prévio (*a priori*) e manipulação de incertezas, têm sido aplicadas com sucesso em tarefas de segmentação. Dentre as técnicas que se adequam a essa categoria, merecem destaque a abordagem Bayesiana (Guo & Ma 2000), (Cheng & Bouman 2001), modelos de redes neurais artificiais (Bhandarkar, Koh & Suk 1997), métodos baseados na teoria de conjuntos nebulosos (*fuzzy*) (Zhang, Hall & Goldgof 2002), (Karayiannis & Pai 1999), (Pham & Prince 1999), (Pham & Yan 1999) e técnicas que utilizam propriedades estatísticas das imagens (Tasciyan, Beckmann, Morris & Smith 2001), (Derrode, Mercier & Picczynski 2003). Alguns métodos inteligentes que apresentam capacidade de auto-organização,

denominados, portanto, auto-organizáveis, são os métodos de enfoque desta tese, podendo-se definir por auto-organização um processo por meio do qual um sistema organiza-se espontaneamente, sem que haja um controle externo exercido pelo ambiente.

Embora vários trabalhos que envolvem a utilização de métodos auto-organizáveis para segmentar imagens sejam encontrados na literatura (Pham & Prince 1999), (Lo & Pei 1999), (Yao, Mignotte, Collet, Galerne & Burel 2000), a segmentação automática de imagens ainda é considerada, na maioria das aplicações, uma tarefa difícil. No presente trabalho, modelos auto-organizáveis para classificação não supervisionada e agrupamento de padrões são considerados para utilização e análise em tarefas de segmentação. O primeiro modelo refere-se a uma rede neural baseada na Teoria da Ressonância Adaptativa (ART)¹ que utiliza fundamentos da teoria de conjuntos nebulosos, sendo, por isso, conhecida como rede neural Fuzzy ART. O segundo modelo é o Modelo de Misturas ICA (ICAMM)², que faz uso da técnica ICA para descrever os dados em cada classe.

Dentre os fatores que podem prejudicar o processo de segmentação, pode-se citar a presença frequente de algum tipo de ruído, adicionado às imagens durante o processo de aquisição e transmissão das mesmas, e a dificuldade em extrair, a partir de dados de imagens, características que os tornem mais adequados para o processamento computacional. As técnicas de Análise de Componentes Principais (PCA)³, Análise de Componentes Independentes (ICA)⁴ e o método *Sparse Code Shrinkage* (SCS) são exemplos de abordagens estatísticas que podem ser utilizadas para solucionar alguns problemas relacionados à redução de dimensionalidade, extração de características e supressão de ruídos.

Essas técnicas estatísticas e os modelos auto-organizáveis considerados serão descritos e discutidos ao longo deste trabalho, uma vez que os mesmos foram investigados e utilizados, com o intuito de melhorar o desempenho de alguns métodos auto-organizáveis para segmentação de imagens.

1.2 Definição do Problema

Segmentação de imagens é um dos problemas mais investigados na área de computação visual. A complexidade desse problema varia de acordo com o tipo de aplicação, sendo que, no caso geral, o objetivo é dividir a imagem em regiões que apresentem propriedades similares. Essas similaridades podem estar relacionadas, por exemplo, a estruturas estatísticas, propriedades

¹Do original, em inglês, Adaptive Resonance Theory.

²Do original, em inglês, ICA Mixture Model.

³Do original, em inglês, Principal Component Analysis.

⁴Do original, em inglês, Independent Component Analysis.

visuais ou geométricas, ou a medidas de distância (similaridade) previamente estabelecidas. Métodos de classificação são adequados para resolver esse tipo de problema, pois as regiões a serem detectadas no processo de segmentação podem ser vistas como classes (ou grupos) às quais os pixels de uma imagem podem ser associados. Dessa forma, pixels pertencentes a uma mesma classe podem representar uma região com propriedades consistentes.

Um problema de classificação de padrões pode ser resolvido computacionalmente por algoritmos supervisionados ou não supervisionados. Em uma classificação supervisionada, cada padrão do conjunto de dados é identificado como sendo um membro de uma classe predefinida. Já um algoritmo de classificação não supervisionada associa cada padrão a uma classe baseando-se somente em estatísticas ou em medidas de similaridade entre os padrões, sem nenhum conhecimento sobre as classes de treinamento. Neste trabalho, o problema da segmentação de imagens é visto como um problema de classificação não supervisionada.

Além da avaliação de desempenho dos modelos auto-organizáveis considerados, há ainda, neste trabalho, uma preocupação em relação a propostas de melhorias nos resultados de segmentação por meio da incorporação de técnicas de pré-processamento de imagens. Neste caso, o enfoque é dado a técnicas que são capazes de tratar questões referentes à presença de ruídos, suavização de imagens e realce de bordas, de modo que as imagens se tornem mais adequadas ao processo de segmentação, tornando-o mais eficiente.

Os problemas tratados e resolvidos neste trabalho são os seguintes:

- Uma das limitações da rede Fuzzy ART é que esta é sensível a ruídos presentes no conjunto de treinamento. Dessa forma, no caso deste modelo ser utilizado em um processo de segmentação, a presença de ruídos em imagens pode ser considerada um problema.
- O modelo ICAMM é baseado em uma técnica de otimização de gradiente. Portanto, observou-se que o desempenho dessa técnica é afetado, entre outros fatores, por algumas limitações inerentes a esse tipo de abordagem. Além disso, na tentativa de entender melhor o seu funcionamento, detectou-se que algumas melhorias poderiam ser propostas para tornar o método mais eficiente.
- Não foi encontrada na literatura uma avaliação comparativa dos modelos auto-organizáveis considerados neste trabalho, levando-se em conta a segmentação de imagens pré-processadas por uma combinação de técnicas para redução de ruídos, suavização de imagens e realce de bordas.

A idéia fundamental deste trabalho baseia-se na proposta de melhorias no desempenho

de tarefas de segmentação de imagens implementadas por modelos auto-organizáveis. Tais melhorias levam em consideração algumas limitações dos métodos e análises de como estes podem se tornar mais eficientes por meio da utilização de uma metodologia para pré-processamento de imagens.

1.3 Objetivos

Considerando os problemas abordados anteriormente, este trabalho possui como principais objetivos:

- propor uma metodologia de pré-processamento de imagens que combine técnicas para redução de ruídos, suavização de imagens e realce de bordas;
- propor melhorias a serem adicionadas ao método ICAMM, por meio da incorporação de algumas características de métodos de otimização não linear e de modificações referentes a aspectos de implementação e modelagem;
- avaliar como os desempenhos dos métodos auto-organizáveis considerados podem ser afetados pela utilização da metodologia de pré-processamento proposta; e
- realizar um estudo comparativo entre os métodos auto-organizáveis considerados, por meio da análise experimental dos desempenhos destes em tarefas de segmentação de imagens, em suas versões originais e pré-processadas.

1.4 Organização do Trabalho

Este trabalho está dividido em nove capítulos, sendo esta introdução o primeiro destes.

No Capítulo 2, são apresentados alguns conceitos e definições importantes para a compreensão deste trabalho.

No Capítulo 3, são apresentados alguns métodos clássicos de análise multivariada, tais como o método PCA e técnicas de agrupamento, e modelos de redes neurais que implementam essas técnicas. Dentre estes modelos, está a rede neural Fuzzy ART, que é utilizada nos experimentos com imagens no presente trabalho.

No Capítulo 4, o método ICA é apresentado, juntamente com as suas suposições, restrições e ambiguidades. Além disso, discute-se várias abordagens para realização da ICA e as relações entre as mesmas.

No Capítulo 5, a metodologia de pré-processamento de imagens proposta neste trabalho é apresentada.

No Capítulo 6, descreve-se o Modelo ICAMM para classificação não supervisionada.

No Capítulo 7, é proposto o Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado (EICAMM)⁵, resultante de melhorias e incorporações feitas ao modelo ICAMM.

No Capítulo 8, os resultados experimentais deste trabalho são apresentados e discutidos.

Finalmente, no Capítulo 9, são feitas algumas conclusões e considerações sobre trabalhos futuros. As contribuições deste trabalho estão concentradas nos capítulos 5 e 7.

⁵Do original, em inglês, Enhanced ICA Mixture Model.

Capítulo 2

Definições

2.1 Considerações Iniciais

Neste capítulo, é realizada uma revisão de conceitos importantes da álgebra linear, teoria da probabilidade, estatística e de redes neurais artificiais considerados de fundamental importância para o entendimento do restante desta tese. É assumido, entretanto, que o leitor possui conhecimento de conceitos básicos de teoria de probabilidade, como por exemplo, os conceitos de eventos elementares e variáveis aleatórias. Uma revisão mais extensa, variando de conceitos básicos aos mais avançados, pode ser encontrada em referências clássicas, como (Papoulis 1991), (Weiss & Kulikowski 1991), (Grossman 1986).

Deve-se chamar atenção para o fato de que, ao longo de todo este trabalho, literais minúsculas e em itálico (por exemplo, *a*) são utilizadas para denotar valores escalares, literais minúsculas e em negrito (por exemplo, **a**) são utilizadas para denotar vetores de valores escalares e literais maiúsculas e em negrito (por exemplo, **A**) são utilizadas para denotar matrizes de valores escalares.

2.2 Definições e Propriedades de Vetores e Matrizes

2.2.1 Norma, Distância Euclidiana e Ortogonalidade de Vetores

A norma, ou comprimento, de um vetor $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ de $\mathbb{R}^n$, denotada por $\|\mathbf{v}\|$, é definida como sendo a raiz quadrada de $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$:

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}. \quad (2.1)$$

Sejam $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ e $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ vetores de $\mathbb{R}^n$. A distância Euclidiana

entre $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ é definida por:

$$d(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sqrt{(u_1 - v_1)^2 + (u_2 - v_2)^2 + \dots + (u_n - v_n)^2} = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|. \quad (2.2)$$

Dois vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ de $\mathbb{R}^n$ são considerados ortogonais (ou perpendiculares) se o ângulo entre estes for igual a 90 graus.

2.2.2 Matrizes Identidade e Diagonal

A matriz identidade $\mathbf{I}$ é uma matriz $n \times n$, na qual todos elementos da diagonal principal, isto é, $i_{11}, i_{22}, \dots, i_{nn}$, são iguais a 1 e os elementos fora da diagonal principal, ou seja, $i_{jk}, j \neq k$, são iguais a 0.

Uma matriz $\mathbf{A}$ $n \times n$ é chamada de diagonal se todos os elementos fora da diagonal principal são iguais a 0, ou seja, $a_{jk} = 0$, se $j \neq k$.

2.2.3 Transposição e Inversão de Matrizes

A matriz transposta de uma matriz $\mathbf{A}$ $n \times m$, denotada por $\mathbf{A}^T$, é a matriz $m \times n$ obtida trocando-se as linhas pelas colunas de $\mathbf{A}$. Em outras palavras, a i -ésima linha de $\mathbf{A}$ é a i -ésima coluna de $\mathbf{A}^T$ e a j -ésima coluna de $\mathbf{A}$ é a j -ésima linha de $\mathbf{A}^T$.

Se para uma dada matriz $\mathbf{A}$ $n \times n$, existe uma matriz $n \times n$, denotada por $\mathbf{A}^{-1}$, tal que

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}, \quad (2.3)$$

diz-se que $\mathbf{A}^{-1}$ é a inversa de $\mathbf{A}$.

Uma matriz $\mathbf{A}$ $n \times n$ é dita inversível (ou não singular) se $\mathbf{A}^{-1}$ existe; ou não inversível (singular) se $\mathbf{A}$ não possui inversa.

2.2.4 Matriz Simétrica e Ortogonal

Uma matriz simétrica $\mathbf{A}$ é igual a sua transposta, ou seja, $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$. Em outras palavras, para cada par de índices i e j , $a_{ij} = a_{ji}$.

Uma matriz $\mathbf{A}$ é ortogonal se $\mathbf{A}$ for inversível e $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$.

2.2.5 Determinante e Cofator

Seja $\mathbf{A}$ uma matriz $n \times n$. É possível associar à $\mathbf{A}$ um escalar chamado de determinante de $\mathbf{A}$, denotado por $\det(\mathbf{A})$ e definido, recursivamente a partir de qualquer uma das i linhas da

matriz $\mathbf{A}$, como sendo a seguinte soma:

$$\det(\mathbf{A}) = a_{i1} \det(\mathbf{A}_{i1}) + a_{i2} \det(\mathbf{A}_{i2}) + \dots + a_{in} \det(\mathbf{A}_{in}), \quad (2.4)$$

ou de uma forma sintética,

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{j=1}^n a_{ij} \det(\mathbf{A}_{ij}), \quad (2.5)$$

para cada linha $i = 1, 2, \dots, n$ fixada.

Em todas as situações acima, $\mathbf{A}_{ij}$ significa a matriz de ordem $n - 1$, obtida pela exclusão da linha i e da coluna j . Uma matriz $\mathbf{A}_{ij}$ obtida dessa forma é denominada de matriz cofatora. Utilizando esse resultado, pode-se definir o cofator do elemento a_{ij} de $\mathbf{A}$ por meio da seguinte fórmula:

$$\text{cof}(a_{ij}) = (-1)^{i+j} \det(\mathbf{A}_{ij}). \quad (2.6)$$

2.2.6 Matriz Adjunta

A matriz adjunta de uma matriz quadrada $\mathbf{A}$, denotada por $\text{adj}(\mathbf{A})$, tem a propriedade que:

$$\mathbf{A} * \text{adj}(\mathbf{A}) = \text{adj}(\mathbf{A}) * \mathbf{A} = \det(\mathbf{A}) * \mathbf{I}.$$

Portanto, a inversa de $\mathbf{A}$ pode ser escrita como: $\mathbf{A}^{-1} = (1/\det(\mathbf{A})) * \text{adj}(\mathbf{A})$.

2.2.7 Matrizes de Derivadas Parciais

Matriz Jacobiana

A matriz Jacobiana é dada pela seguinte matriz de derivadas parciais:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Matriz Hessiana

A matriz Hessiana é dada pela seguinte matriz de derivadas parciais:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 y_1}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 y_1}{\partial x_n^2} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 y_n}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 y_n}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

2.3 Distribuições e Densidades de Probabilidade

2.3.1 Distribuição de uma Variável Aleatória

A função de distribuição acumulada (fda) F_x de uma variável aleatória contínua x no ponto $x = x_0$ é definida como a probabilidade de que $x \leq x_0$:

$$F_x(x_0) = P(x \leq x_0). \quad (2.9)$$

Fazendo x_0 variar no intervalo $(-\infty, \infty)$, pode-se definir a fda completa para todos os valores de x .

Para variáveis aleatórias contínuas, a fda é uma função contínua, não negativa e não decrescente, cujos valores encontram-se no intervalo $0 \leq F_x(x) \leq 1$. A partir da definição, segue que $F_x(-\infty) = 0$ e $F_x(+\infty) = 1$.

Geralmente, uma distribuição de probabilidade é mais caracterizada por sua função de densidade do que por sua fda. Formalmente, a função de densidade de probabilidade (fdp) de uma variável aleatória contínua x é obtida como a derivada da sua função de distribuição acumulada:

$$p_x(x_0) = \left. \frac{dF_x(x)}{dx} \right|_{x=x_0}. \quad (2.10)$$

Para simplificar a notação, $F_x(x)$ é quase sempre denotada por $F(x)$ e $p_x(x)$ por $p(x)$, respectivamente.

Para ilustrar esses conceitos, pode-se tomar como exemplo a distribuição de probabilidade normal (ou gaussiana), utilizada em vários modelos e aplicações. No caso desta distribuição, a função de densidade é dada por:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (2.11)$$

Aqui, o parâmetro m (média) determina o ponto de pico da função de densidade simétrica e σ (desvio-padrão) define a forma da distribuição — se esta é muito dispersa ou se a maior parte da área se concentra na proximidade do pico (ver Figura 2.1).

Figura 2.1: Função de densidade de probabilidade de uma distribuição gaussiana com média m e desvio-padrão σ .

2.3.2 Distribuição de um Vetor Aleatório

Assume-se agora que $\mathbf{x}$ é um vetor aleatório n -dimensional:

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \quad (2.12)$$

onde T denota a transposição de matriz. Neste caso, as componentes $x_1, x_2, \dots, x_n$ do vetor coluna $\mathbf{x}$ são variáveis aleatórias contínuas e o conceito de distribuição de probabilidade pode ser facilmente generalizado para vetores aleatórios. Em particular, a função de distribuição acumulada de $\mathbf{x}$ é definida por:

$$F_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0) = P(\mathbf{x} \leq \mathbf{x}_0), \quad (2.13)$$

onde $P(\cdot)$ denota a probabilidade do evento em parênteses e $\mathbf{x}_0$ é alguma instância do vetor aleatório $\mathbf{x}$. A notação $\mathbf{x} \leq \mathbf{x}_0$ significa que cada componente do vetor $\mathbf{x}$ é menor ou igual ao seu componente correspondente no vetor aleatório $\mathbf{x}_0$.

A função de densidade de probabilidade multivariada $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ de $\mathbf{x}$ é definida como a derivada da função de distribuição acumulada $F_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ com respeito a todas componentes do vetor aleatório $\mathbf{x}$:

$$p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_0) = \left. \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \dots \frac{\partial}{\partial x_n} F_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}. \quad (2.14)$$

2.3.3 Distribuições Conjunta e Marginal

Sejam $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ dois vetores aleatórios diferentes, com dimensões n e m , respectivamente. A função de distribuição conjunta de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é dada por:

$$F_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0) = P(\mathbf{x} \leq \mathbf{x}_0, \mathbf{y} \leq \mathbf{y}_0). \quad (2.15)$$

Neste caso, $\mathbf{x}_0$ e $\mathbf{y}_0$ são dois vetores constantes que possuem as mesmas dimensões de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, respectivamente, e a Equação (2.15) define a probabilidade conjunta dos eventos $\mathbf{x} \leq \mathbf{x}_0$ e $\mathbf{y} \leq \mathbf{y}_0$.

A função de densidade conjunta $p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é definida formalmente diferenciando-se a função de distribuição conjunta $F_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ com respeito a todas as componentes dos vetores aleatórios $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$. Dessa forma, a relação

$$F_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0) = \int_{-\infty}^{\mathbf{x}_0} \int_{-\infty}^{\mathbf{y}_0} p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\xi, \eta) d\eta d\xi \quad (2.16)$$

é satisfeita e o valor dessa integral é igual a 1 quando $\mathbf{x}_0 \rightarrow \infty$ e $\mathbf{y}_0 \rightarrow \infty$.

As densidades marginais $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ de $\mathbf{x}$ e $p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$ de $\mathbf{y}$ são obtidas da seguinte maneira:

$$p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \eta) d\eta \quad (2.17)$$

$$p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\xi, \mathbf{y}) d\xi. \quad (2.18)$$

2.4 Esperança Matemática e Momentos

2.4.1 Definições e Propriedades Gerais

Na prática, a função de densidade de probabilidade exata de uma variável aleatória escalar ou vetorial é quase sempre desconhecida. Todavia, pode-se usar, ao invés desta função, esperanças matemáticas de algumas funções da variável em questão para efetuar análises e processamentos. A grande vantagem das esperanças matemáticas é que estas podem ser estimadas diretamente a partir dos dados observados, apesar de serem definidas formalmente em termos da função de densidade.

Neste caso, pode-se denotar por $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ qualquer quantidade derivada a partir do vetor aleatório $\mathbf{x}$. A quantidade $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ pode ser escalar, vetorial, ou até mesmo matricial. A esperança matemática de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ é denotada por $E\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\}$ e definida por:

$$E\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{g}(\mathbf{x}) p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.19)$$

Neste caso, o operador de integral é aplicado separadamente a cada componente do vetor ou

elemento da matriz, resultando em um outro vetor ou matriz do mesmo tamanho.

2.4.2 Vetor de Média e Matriz de Correlação

Momentos de um vetor aleatório $\mathbf{x}$ são esperanças matemáticas típicas usadas para caracterizar esse vetor. Tais valores são obtidos quando $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ consiste de produtos das componentes de $\mathbf{x}$. Em particular, o primeiro momento de uma variável aleatória $\mathbf{x}$ é chamado de vetor de média $\mathbf{m}_{\mathbf{x}}$ de $\mathbf{x}$. Esse momento é definido como o valor esperado de $\mathbf{x}$, que é expressa por meio da seguinte equação:

$$\mathbf{m}_{\mathbf{x}} = E\{\mathbf{x}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{x} p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.20)$$

Cada componente m_{x_i} do vetor $\mathbf{m}_{\mathbf{x}}$ é dada por:

$$m_{x_i} = E\{x_i\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x_i p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x_i p_{x_i}(x_i) dx_i, \quad (2.21)$$

onde $p_{x_i}(x_i)$ é a densidade marginal da i -ésima componente de $\mathbf{x}$.

Outro conjunto de momentos importantes consiste nas correlações entre pares de componentes de $\mathbf{x}$. A correlação r_{ij} entre a i -ésima e a j -ésima componente de $\mathbf{x}$ é dada pelo momento de segunda ordem:

$$r_{ij} = E\{x_i x_j\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x_i x_j p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x_i x_j p_{x_i} p_{x_j}(x_i, x_j) dx_j dx_i. \quad (2.22)$$

A matriz de correlação $n \times n$:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{x}} = E\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T\} \quad (2.23)$$

do vetor $\mathbf{x}$ representa todas as correlações entre as componentes do vetor, sendo r_{ij} o elemento na linha i e coluna j da matriz $\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$.

A matriz de correlação $\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$ possui as seguintes propriedades importantes:

1. É uma matriz simétrica, ou seja, $\mathbf{R}_{\mathbf{x}} = \mathbf{R}_{\mathbf{x}}^T$.
2. É uma matriz positiva semi-definida:

$$\mathbf{a}^T \mathbf{R}_{\mathbf{x}} \mathbf{a} > 0 \quad (2.24)$$

para todos os vetores $\mathbf{a}$ n -dimensionais.

3. Todos os auto-valores de $\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$ são reais e não negativos (positivos se $\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$ for positiva definida).

2.4.3 Matriz de Covariância

A matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ de $\mathbf{x}$ é dada por:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})^T\}. \quad (2.25)$$

Os elementos

$$c_{ij} = E\{(x_i - m_i)(x_j - m_j)\} \quad (2.26)$$

da matrix $n \times n$ $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ são chamados de covariâncias, sendo estas correspondentes às correlações r_{ij} , quando o vetor aleatório $\mathbf{x}$ tiver sido subtraído do seu vetor de média correspondente.

A matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ apresenta as mesmas propriedades da matriz de correlação $\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$. Se o vetor de média $\mathbf{m}_{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$, as matrizes de covariância e de correlação são as mesmas. Se for necessário, os dados podem ser facilmente transformados de modo a possuírem um vetor de médias igual à zero, subtraindo destes o vetor de média (estimado) dos vetores de dados, em uma etapa de pré-processamento. Essa prática é considerada comum nas técnicas PCA e ICA.

Para uma variável aleatória unidimensional x , o vetor de médias fica reduzido ao valor médio $m_x = E\{x\}$, a matriz de correlação reduz-se ao segundo momento $E\{x^2\}$ e a matriz de covariância à variância de x :

$$\sigma_x^2 = E\{(x - m_x)^2\}, \quad (2.27)$$

onde σ_x corresponde ao desvio-padrão de x .

O operador de esperança pode ser estendido para funções $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ de dois vetores aleatórios $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, em termos da sua densidade conjunta:

$$E\{\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) p_{\mathbf{x}, \mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y}. \quad (2.28)$$

Neste caso, as integrais são calculadas sobre todas as componentes de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$.

Dentre os valores esperados conjuntos mais utilizados, destacam-se a matriz de correlação cruzada:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{xy}} = E\{\mathbf{xy}^T\} \quad (2.29)$$

e a matriz de covariância cruzada:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{xy}} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{y} - \mathbf{m}_{\mathbf{y}})^T\}. \quad (2.30)$$

É importante notar que as dimensões dos vetores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ podem ser diferentes. Consequentemente, as matrizes de covariância e correlação cruzadas não são necessariamente matrizes quadradas e, em geral, não são simétricas. Entretanto, a partir das definições dessas duas matrizes, segue que:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{xy}} = \mathbf{R}_{\mathbf{yx}}^T \quad (2.31)$$

$$\mathbf{C}_{\mathbf{xy}} = \mathbf{C}_{\mathbf{yx}}^T. \quad (2.32)$$

Se os vetores de médias de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ forem iguais à zero, as matrizes de correlação e covariância cruzadas são iguais. De fato, quantidades de correlação e covariância medem a dependência entre as variáveis aleatórias usando as suas estatísticas de segunda ordem.

2.4.4 Estimativas de Esperanças

Geralmente a densidade de probabilidade de um vetor aleatório $\mathbf{x}$ não é conhecida mas quase sempre existe um conjunto disponível de K amostras $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_K$ de $\mathbf{x}$. Usando essas amostras, a esperança na Equação (2.19) pode ser estimada, tomando-se a média sobre toda as amostras, usando a seguinte fórmula:

$$E\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\} \approx \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \mathbf{g}(\mathbf{x}_j). \quad (2.33)$$

Por exemplo, aplicando a Equação (2.33), obtém-se para o vetor de médias $\mathbf{m}_{\mathbf{x}}$ de $\mathbf{x}$ o seu estimador padrão, a média amostral:

$$\hat{\mathbf{m}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \mathbf{x}_j, \quad (2.34)$$

onde o símbolo chapéu sobre $\mathbf{m}$ é uma notação padrão para um estimador de uma quantidade. Ainda, para a matriz de correlação de um vetor aleatória, a estimação resulta em:

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j^T. \quad (2.35)$$

De maneira similar, ao invés da densidade conjunta $p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}$ dos vetores aleatórios $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, pode-se usar K pares amostrais $(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2), \dots, (\mathbf{x}_K, \mathbf{y}_K)$ para estimar a esperança da Equação (2.28) por meio de:

$$E\{\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\} \approx \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \mathbf{g}(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j) \quad (2.36)$$

Por exemplo, para a matriz de correlação cruzada, a estimação resulta na seguinte fórmula:

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{xy}} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \mathbf{x}_j \mathbf{y}_j^T \quad (2.37)$$

2.5 Não Correlação e Branqueamento

Dois vetores aleatórios $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ são não correlacionados se a correspondente matriz de covariância cruzada $\mathbf{C}_{\mathbf{xy}}$ for uma matriz com todos elementos iguais à zero:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{xy}} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{y} - \mathbf{m}_{\mathbf{y}})\} = \mathbf{0}. \quad (2.38)$$

Isso é equivalente à condição:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{xy}} = E\{\mathbf{xy}^T\} = \overset{E}{E\{\mathbf{x}\}\{\mathbf{y}^T\}} = \mathbf{m}_{\mathbf{x}} \mathbf{m}_{\mathbf{y}}^T. \quad (2.39)$$

Em especial, duas variáveis aleatórias unidimensionais diferentes x e y são não correlacionadas se a covariância entre estas duas variáveis c_{xy} for igual à zero:

$$c_{xy} = E\{(x - m_x)(y - m_y)\} = 0, \quad (2.40)$$

ou de forma equivalente,

$$r_{xy} = E\{xy\} = \overset{E}{E\{x\}\{y\}} = m_x m_y. \quad (2.41)$$

Assim como no caso de variáveis multivariadas com média zero, no caso univariado, covariância zero é equivalente à correlação zero.

Um outro caso especial importante diz respeito às correlações entre as componentes de um único vetor aleatório $\mathbf{x}$, dadas pela matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$, definida na Equação (2.25). Nesse caso, a condição equivalente à Equação (2.38) nunca pode ser satisfeita, uma vez que cada componente do vetor $\mathbf{x}$ é perfeitamente correlacionada com ela mesma. A maneira mais

próxima de atingir essa condição é quando as diferentes componentes de $\mathbf{x}$ são mutuamente não correlacionadas, levando à seguinte condição:

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})^T\} = \mathbf{D}. \quad (2.42)$$

Nesse caso, $\mathbf{D}$ é a matriz diagonal $n \times n$:

$$\mathbf{D} = \text{diag}(c_{11}, c_{22}, \dots, c_{nn}) = \text{diag}(\sigma_{x1}^2, \sigma_{x2}^2, \dots, \sigma_{xn}^2), \quad (2.43)$$

cujos n elementos diagonais são as variâncias $\sigma_{xi}^2 = E\{(x_i - m_{x_i})^2\} = c_{ii}$ das componentes x_i de $\mathbf{x}$.

Em particular, vetores aleatórios com média zero e matriz de covariância (e consequentemente de correlação) igual à matriz identidade, ou possivelmente multiplicada por uma variância σ^2 constante, são chamados de brancos. Esse nome deve-se à semelhança com a definição de ruídos brancos, que são variáveis aleatórias não correlacionadas, com variâncias iguais a um. Dessa forma, vetores aleatórios brancos satisfazem as seguintes condições:

$$\mathbf{m}_{\mathbf{x}} = \mathbf{0} \quad (2.44)$$

e

$$\mathbf{R}_{\mathbf{x}} = \mathbf{C}_{\mathbf{x}} = \mathbf{I}, \quad (2.45)$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade $n \times n$.

2.6 Independência Estatística

Independência estatística é um conceito importante que constitui a base para a técnica ICA. Para simplificar o entendimento deste conceito, pode-se considerar primeiramente o caso de duas variáveis escalares (unidimensionais) x e y . A variável aleatória x é independente de y se for conhecido que o valor de y não fornece nenhuma informação sobre o valor de x . Por exemplo, x e y podem ser os valores de saída de dois eventos que não têm nenhuma relação um com o outro, ou sinais aleatórios originários de dois processos físicos completamente distintos. Como exemplo dessas variáveis aleatórias, pode-se citar o valor de um dado e de uma moeda lançados, ou um sinal de fala e um ruído de fundo ocasionado por um sistema de ventilação em um determinado instante de tempo.

Matematicamente, independência estatística é definida em termos de densidades de probabilidade. As variáveis aleatórias x e y são consideradas independentes se, e somente se:

$$p_{x,y}(x, y) = p_x(x)p_y(y) \quad (2.46)$$

Colocando em palavras, a densidade conjunta $p_{x,y}(x, y)$ de x e y tem que ser fatorada no produto das suas densidades marginais $p_x(x)$ e $p_y(y)$.

Variáveis aleatórias independentes satisfazem a seguinte propriedade básica:

$$E\{g(x)h(y)\} = E\{g(x)\}E\{h(y)\}, \quad (2.47)$$

onde $g(x)$ e $h(y)$ são quaisquer funções integráveis de x e y , respectivamente. Essa propriedade revela que o conceito de independência estatística é muito mais forte do que o conceito de não correlação. A Equação (2.41), que define o conceito de não correlação, é obtida a partir da propriedade de independência da Equação (2.47) como um caso especial, quando $g(x)$ e $h(y)$ são funções lineares, e que levam em conta somente estatísticas de segunda ordem (correlações ou covariâncias). Entretanto, se as variáveis aleatórias apresentarem distribuições Gaussianas, os conceitos de independência e não correlação tornam-se equivalentes. Essa é uma propriedade muito especial das distribuições Gaussianas que será discutida na Seção (2.8).

A definição de independência na Equação (2.46) pode ser generalizada de forma natural para mais de duas variáveis ou para vetores aleatórios. Sejam $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \dots$, vetores aleatórios que podem, em geral, ter dimensões diferentes. A condição de independência para $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \dots$, é, portanto:

$$p_{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \dots}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \dots) = p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})p_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \dots \quad (2.48)$$

e a propriedade básica da Equação (2.47) pode ser generalizada para:

$$E\{\mathbf{g}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})\mathbf{g}_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})\mathbf{g}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) \dots\} = E\{\mathbf{g}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})\}E\{\mathbf{g}_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})\}E\{\mathbf{g}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})\} \dots, \quad (2.49)$$

onde $\mathbf{g}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$, $\mathbf{g}_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$ e $\mathbf{g}_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})$ são funções arbitrárias das variáveis aleatórias $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ e $\mathbf{z}$ para as quais as esperanças da Equação (2.49) existem.

A definição geral da Equação (2.48) dá origem a uma generalização da noção padrão de independência estatística. As componentes do vetor aleatório $\mathbf{x}$ são, por si só, variáveis aleatórias escalares, o mesmo acontecendo para as componentes de $\mathbf{y}$ e $\mathbf{z}$. Claramente, as componentes de $\mathbf{x}$ podem ser mutuamente dependentes, apesar de serem independentes com

respeito às componentes dos outros vetores aleatórios. Ainda nessa situação, a Equação (2.48) é satisfeita. Argumentos similares aplicam-se aos vetores $\mathbf{y}$ e $\mathbf{z}$.

2.7 Densidades Condicionais e Regra de Bayes

Além das densidades de probabilidade, densidades conjuntas e densidades marginais, uma outra classe importante de funções de densidade de probabilidade consiste nas densidades condicionais. Estas densidades surgem como resposta à seguinte questão “Qual é a densidade de probabilidade de um vetor aleatório $\mathbf{x}$ dado que um outro vetor aleatório $\mathbf{y}$ tem um valor fixo $\mathbf{y}_0$? ”

Assumindo que a densidade conjunta $p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ e as suas respectivas probabilidades marginais existem, a densidade de probabilidade condicional de $\mathbf{x}$ dado $\mathbf{y}$ é dada por:

$$p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})}. \quad (2.50)$$

Essa definição pode ser interpretada da seguinte forma: assumindo que o vetor aleatório $\mathbf{y}$ encontra-se na região $\mathbf{y}_0 < \mathbf{y} \leq \mathbf{y}_0 + \Delta\mathbf{y}$, a probabilidade de que $\mathbf{x}$ encontre-se na região $\mathbf{x}_0 < \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_0 + \Delta\mathbf{x}$ é $p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})\Delta\mathbf{x}$. Neste caso, $\mathbf{x}_0$ e $\mathbf{y}_0$ são dois vetores constantes e $\Delta\mathbf{x}$ e $\Delta\mathbf{y}$ são considerados dois vetores relativamente pequenos. De maneira similar:

$$p_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})}. \quad (2.51)$$

Se os vetores aleatórios $\mathbf{x}_0$ e $\mathbf{y}_0$ forem estatisticamente independentes, a densidade condicional $p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ é equivalente à densidade incondicional $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ de $\mathbf{x}$, uma vez que $\mathbf{x}$ não depende absolutamente de $\mathbf{y}$ e, de maneira similar, $p_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$. Dessa forma, as Equações (2.50) e (2.51) poderiam ser escritas na forma:

$$p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}), \quad (2.52)$$

que é exatamente a definição de independência para os vetores aleatórios $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$.

No caso geral, é possível escrever, a partir das Equações (2.50) e (2.51) duas expressões diferentes para a densidade conjunta de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$:

$$p_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}(\mathbf{y}|\mathbf{x})p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}). \quad (2.53)$$

A partir dessa fórmula, pode-se encontrar, por exemplo, uma solução para a densidade

de $\mathbf{y}$ condicionada à $\mathbf{x}$:

$$p_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})}{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} \quad (2.54)$$

A Equação (2.54) é chamada de Regra de Bayes. Essa regra é especialmente importante para solução de problemas de estimação estatística, nos quais $p_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ é a densidade condicional do vetor de observações $\mathbf{x}$, com $\mathbf{y}$ denotando o vetor de parâmetros aleatórios desconhecidos. A regra de Bayes da Equação (2.54) permite a computação da densidade *a posteriori* $p_{\mathbf{y}|\mathbf{x}}(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ dos parâmetros $\mathbf{y}$, dado um vetor de observações $\mathbf{x}$ específico e assumindo (ou conhecendo) a distribuição *a priori* $p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$ dos parâmetros aleatórios $\mathbf{y}$.

2.8 A Densidade Gaussiana Multivariada

A densidade normal ou gaussiana multivariada possui propriedades especiais que a tornam única entre as funções de densidade de probabilidade.

Um vetor n -dimensional $\mathbf{x}$ é dito gaussiano se a sua função de densidade de probabilidade possui a seguinte forma:

$$p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} (\det \mathbf{C}_{\mathbf{x}})^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})^T \mathbf{C}_{\mathbf{x}}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})\right), \quad (2.55)$$

lembrando que, n é a dimensão de $\mathbf{x}$, $\mathbf{m}_{\mathbf{x}}$ é a média desse vetor e $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é a matriz de covariância de $\mathbf{x}$. A notação $\det \mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é usada para representar o determinante da matriz $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$. É importante notar que a matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é assumida como sendo positiva definida, o que implica que a sua inversa existe.

Pode-se mostrar que, para a densidade da Equação (2.55):

$$E\{\mathbf{x}\} = \mathbf{m}_{\mathbf{x}} \quad (2.56)$$

$$E\{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})^T\} = \mathbf{C}_{\mathbf{x}}. \quad (2.57)$$

2.8.1 Propriedades da Densidade Gaussiana

Aqui são listadas as propriedades mais importantes da densidade Gaussiana multivariada. As provas matemáticas de tais propriedades podem ser encontradas em (Papoulis 1991).

- **Somente são necessárias estatísticas de primeira e segunda ordem.** O conhecimento do vetor de médias $\mathbf{m}_x$ e da matriz de covariância $\mathbf{C}_x$ de $\mathbf{x}$ é suficiente para definir completamente a densidade gaussiana. Uma consequência importante desse fato e da forma da densidade gaussiana é que métodos de processamento lineares baseados em informações estatísticas de primeira e segunda ordem têm geralmente um desempenho ótimo em situações que lidam com dados gaussianos.
- **Transformações lineares são gaussianas.** Seja $\mathbf{x}$ um vetor aleatório gaussiano e $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ uma transformação linear de $\mathbf{x}$. Então, $\mathbf{y}$ também é um vetor aleatório Gaussiano com vetor de médias $\mathbf{m}_y = \mathbf{A}\mathbf{m}_x$ e matriz de covariância $\mathbf{C}_y = \mathbf{A}\mathbf{C}_x\mathbf{A}^T$
- **Não correlação.** Variáveis aleatórias gaussianas não correlacionadas também são independentes.

2.9 Outros Conceitos Importantes

Nesta seção, são definidos alguns conceitos e procedimentos importantes utilizados na aplicação e avaliação de métodos auto-organizáveis.

Padronização de Dados

Antes de proceder com algumas análises, como a ICA e PCA, as variáveis u_i dos dados originais devem ser padronizadas, de modo a ficarem com média igual a zero e variância igual a um. Isso é feito de acordo com a seguinte fórmula:

$$u_i = \frac{u_i - m_{u_i}}{\sigma_{u_i}}. \quad (2.58)$$

Normalização de Vetores

Uma prática muito comum em algoritmos de aprendizagem é a normalização de vetores $\mathbf{u}$ para fazer com que seus valores fiquem no intervalo $(0, 1)$. Para isto, a seguinte equação é utilizada:

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} = \frac{\mathbf{u}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m u_i^2}}. \quad (2.59)$$

Matriz de Confusão

No processo de avaliação do desempenho de um método para classificação, a matriz de confusão é uma matriz que indica quantos elementos, de cada classe, foram agrupados corretamente nas classes formadas pelo modelo (Peper, Zhang & Noda 1993).

Ciclo de Treinamento

No processo de treinamento de uma rede neural, um ciclo significa uma apresentação completa do conjunto de padrões.

Taxa de Erro Verdadeiro

A taxa de erro verdadeiro de um classificador é estatisticamente definida como a taxa de erro do modelo de classificação em um número assintoticamente grande de novos casos que converge, no limite, para verdadeira distribuição da população (Weiss & Kulikowski 1991).

Uma taxa de erro empírica pode ser definida como a razão entre o número de erros cometido pelo modelo de classificação e o número de casos apresentados ao modelo após o treinamento, da seguinte forma:

$$\text{taxa de erro} = \frac{\text{número de erros}}{\text{número de casos}}. \quad (2.60)$$

Se um número ilimitado de casos estivesse disponível, a taxa de erro verdadeiro poderia ser diretamente calculada à medida que o tamanho da amostra aproxima-se do infinito. Entretanto, no mundo real, o tamanho da amostra de dados disponível é sempre finito, e na maioria das vezes, é relativamente pequeno. A questão, portanto, é se é possível extrapolar das taxas de erro empíricas, calculadas para resultados de uma amostra pequena, para a taxa de erro verdadeiro. Para resolver esse problema, foram desenvolvidas várias técnicas para apresentar padrões a um classificador com o objetivo de conseguir melhores estimativas para as taxas de erro verdadeiro. Dentre esses métodos, a técnica de Validação Cruzada (*Cross-Validation*) é uma das mais utilizadas para estimar o erro verdadeiro de um algoritmo de classificação e será brevemente descrita a seguir.

Validação Cruzada (*Cross-Validation*)

O método de validação cruzada consiste em dividir o conjunto de dados em k partições (*folds*) de tamanhos (aproximadamente) iguais. O método de classificação é executado (treinado) k vezes, sendo que a cada vez cada um dos subconjuntos é deixado de fora do conjunto de

treinamento, para ser utilizado como conjunto de teste, a partir do que é medido o erro de classificação para aquela execução (treinamento).

2.10 Considerações Finais

Neste capítulo, foram apresentados alguns conceitos, definições e propriedades importantes da álgebra linear, teoria da probabilidade, estatística e de redes neurais artificiais que servirão como base para compreensão dos métodos apresentados nos capítulos que seguem, assim como para o entendimento da metodologia aplicada na análise de resultados experimentais apresentada no Capítulo 8.

Capítulo 3

Métodos de Análise Multivariada e Redes Neurais Artificiais

3.1 Considerações Iniciais

Neste capítulo, são apresentadas duas técnicas estatísticas de análise multivariada consideradas importantes para compreensão de aspectos fundamentais relacionados a outros métodos e análises de resultados apresentados no decorrer desta tese. Além disso, dois modelos de redes neurais auto-organizáveis que implementam estas técnicas também são apresentados.

A primeira técnica de análise multivariada a ser descrita é a Análise de Componentes Principais (PCA), que é talvez a mais antiga e bem conhecida técnica da análise multivariada (Johnson & Wichern 1998), tendo sido descrita primeiramente por Karl Pearson em 1901 (Pearson 1901). Ele acreditava, aparentemente, que essa era a solução correta para alguns problemas de biomedicina da época, apesar de não chegar a propor um método prático para calcular a análise para mais de duas variáveis. Uma descrição de métodos computacionais veio mais tarde com Hotelling (Hotelling 1933), que utilizou a PCA em um trabalho realizado em psicometria. Mesmo assim, os cálculos eram extremamente exaustivos quando o problema envolvia muitas variáveis, já que tinham que ser feitos manualmente. Somente depois do advento dos computadores eletrônicos, essa técnica tornou-se amplamente utilizada.

O propósito da PCA é identificar a estrutura de dependência existente em um conjunto de observações multivariadas, com o objetivo de obter uma representação compacta desses dados que conserve as principais características presentes nas observações originais. O entendimento da PCA é de suma importância para o presente trabalho, uma vez que o método da Análise de Componentes Independentes (ICA) pode ser visto como uma generalização deste método.

A técnica de agrupamento (*clustering*) é o outro método de análise multivariada apresentado neste capítulo, uma vez que o método k -médias, baseado nessa técnica, é utilizado em comparações nas análises de resultados experimentais realizadas neste trabalho.

Uma outra abordagem que pode ser utilizada para implementar as técnicas de análise multivariada apresentadas é aquela que utiliza modelos de Redes Neurais Artificiais (RNA). A rede neural PCA Adaptativa é um modelo auto-organizável que implementa a técnica PCA. Este modelo é apresentado neste capítulo, juntamente com alguns resultados da aplicação do mesmo para compressão de imagens médicas.

A técnica de agrupamento pode ser implementada por um modelo neural da família ART, que combina fundamentos da teoria de conjuntos nebulosos com a teoria ART, sendo por isso, denominado de rede neural Fuzzy ART. A teoria ART é descrita neste capítulo, juntamente com o modelo neural Fuzzy ART, que é um dos métodos auto-organizáveis utilizados nos experimentos de segmentação de imagens deste trabalho.

3.2 Métodos de Análise Multivariada

Pode-se definir Análise Multivariada como o ramo da estatística responsável por examinar como variáveis dependentes relacionam-se dentro de um determinado conjunto de dados. Para isso, deve ser considerado um conjunto de n observações, cada qual contendo valores para p variáveis (Johnson & Wichern 1998).

Dentre os objetivos da análise multivariada, pode-se destacar:

- Redução de dados. Com a finalidade de tornar a interpretação dos dados mais fácil, estes são reduzidos para a forma mais simples possível, sem sacrificar informações relevantes. Isso pode ser feito, por exemplo, transformando um conjunto de variáveis interdependentes em variáveis independentes, ou reduzindo a dimensão do conjunto de dados em questão.
- Agrupamento dos dados. Grupos de variáveis ou objetos “similares” são criados, baseando-se em medidas de características.
- Investigação de dependência entre variáveis. É estabelecida a natureza do relacionamento entre as variáveis, isto é, se as variáveis são mutuamente independentes ou se existem uma ou mais variáveis que dependem de outras.
- Previsão. Os relacionamentos entre as variáveis devem ser determinados com a finalidade de prever os valores de uma ou mais variáveis de interesse.

3.2.1 Análise de Componentes Principais (PCA)

Análise de Componentes Principais é um dos métodos estatísticos multivariados mais simples, consistindo de: dadas p variáveis $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p$, deseja-se achar combinações lineares dessas, para produzir índices $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_p$, que sejam não correlacionados.

A falta de correlação é uma propriedade útil pois significa que os índices estão medindo diferentes “dimensões” dos dados. É importante ressaltar que os índices são ordenados de forma que $\mathbf{z}_1$ representa a maior quantidade de variação, $\mathbf{z}_2$ representa a segunda maior quantidade de variação, e assim por diante. Isto é,

$$\text{var}(\mathbf{z}_1) \geq \text{var}(\mathbf{z}_2) \geq \dots \geq \text{var}(\mathbf{z}_p), \quad (3.1)$$

em que $\text{var}(\mathbf{z}_i)$ denota a variância de $\mathbf{z}_i$ no conjunto de dados em questão. Os índices $\mathbf{z}_i$ são chamados de componentes principais.

Ao realizar uma análise de componentes principais, espera-se sempre que as variâncias da maioria dos índices sejam tão pequenas que possam ser desprezadas. Nesse caso, a variação do conjunto de dados pode ser descrita adequadamente pelas poucas variáveis $\mathbf{z}$ cujas variâncias são consideradas não desprezíveis. Um certo grau de economia é então atingido, já que a variação nas p variáveis originais $\mathbf{x}$ fica representada por um menor número de variáveis $\mathbf{z}$.

Procedimento para PCA

Suponha n observações representadas por p variáveis, como indicado na tabela 3.1. A primeira componente principal é, portanto, a combinação linear das variáveis $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p$, dada por:

$$\mathbf{z}_1 = a_{11}\mathbf{x}_1 + a_{12}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{1p}\mathbf{x}_p, \quad (3.2)$$

que retém a máxima variação para as n observações e é sujeita à condição:

$$a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1p}^2 = 1. \quad (3.3)$$

Portanto, a variância de $\mathbf{z}_1$, $\text{var}(\mathbf{z}_1)$, é a maior possível, considerando essa restrição para as constantes a_{1j} . A restrição é introduzida porque, caso contrário, $\text{var}(\mathbf{z}_1)$ pode aumentar simplesmente por consequência do aumento de qualquer um dos valores a_{1j} . A segunda componente principal,

$$\mathbf{z}_2 = a_{21}\mathbf{x}_1 + a_{22}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{2p}\mathbf{x}_p, \quad (3.4)$$

Tabela 3.1: Dados para uma PCA.

Observação	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	...	$\mathbf{x}_p$
1	x_{11}	x_{12}	...	x_{1p}
2	x_{21}	x_{22}	...	x_{2p}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
n	x_{n1}	x_{n2}	...	x_{np}

?

é aquela cuja variância, $\text{var}(\mathbf{z}_2)$, é a maior possível sujeita à restrição:

$$a_{21}^2 + a_{22}^2 + \cdots + a_{2p}^2 = 1 \quad (3.5)$$

e também à condição de que $\mathbf{z}_1$ e $\mathbf{z}_2$ sejam não correlacionadas. A terceira componente principal,

$$\mathbf{z}_3 = a_{31}\mathbf{x}_1 + a_{32}\mathbf{x}_2 + \cdots + a_{3p}\mathbf{x}_p, \quad (3.6)$$

é aquela cuja variância, $\text{var}(\mathbf{z}_3)$, é a maior possível sujeita à restrição:

$$a_{31}^2 + a_{32}^2 + \cdots + a_{3p}^2 = 1 \quad (3.7)$$

e também à condição de que $\mathbf{z}_3$ não é correlacionada com $\mathbf{z}_2$ e $\mathbf{z}_1$. As outras componentes principais são definidas de maneira análoga. Se existirem p variáveis originais $\mathbf{x}$, poderão ser encontradas p componentes principais.

Autoestrutura da PCA

De fato, a realização de uma PCA resume-se em encontrar os autovalores da matriz de covariância dos dados, que é simétrica e tem a forma:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{p1} & c_{p2} & \cdots & c_{pp} \end{bmatrix},$$

em que o elemento da diagonal principal c_{ii} é a variância de $\mathbf{x}_i$ e $c_{ij} (i \neq j)$ é a covariância das variáveis $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$.

É importante observar, porém, que as variáveis $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p$ devem ser padronizadas para que tenham média igual a 0 e variância igual a 1 antes de proceder com a análise, para

evitar que uma determinada variável tenha uma influência excessiva nas componentes principais. Dessa forma, após feita a codificação dos dados, a matriz de covariância $\mathbf{C}$ terá a forma:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & c_{12} & \dots & c_{1p} \\ c_{21} & 1 & \dots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

que coincide com a matriz de correlação dos dados, onde $c_{ij} = c_{ji}$ é a correlação entre $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$. Em outras palavras, a PCA é realizada sobre a matriz de correlação dos dados. Nesse caso, a soma dos elementos da diagonal principal é igual a p , ou seja, ao número de variáveis originais.

Nesse caso, o problema de autovalor, comumente referenciado em álgebra linear (Graybill 1983), resume-se em resolver a seguinte equação:

$$\mathbf{C}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda}, \quad (3.8)$$

em que $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_p]$ e $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_p]$. O problema tem soluções não triviais (isto é, $\mathbf{a}_i \neq \mathbf{0}$) somente para valores especiais de λ , os quais são chamados de autovalores da matriz de correlação $\mathbf{C}$. Os valores de $\mathbf{a}$ associados aos autovalores são chamados de autovetores. A matriz de correlação é caracterizada por autovalores reais não negativos.

Sendo $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_i \geq \dots \geq \lambda_p$ os autovalores da matriz de correlação $\mathbf{C}$ e $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p$ os autovetores associados, respectivamente, pode-se observar alguns resultados importantes obtidos a partir da autoestrutura da PCA (Manly 1986):

- As variâncias das componentes principais são iguais aos autovalores da matriz de correlação $\mathbf{C}$, em que λ_i é o autovalor relativo à i -ésima componente principal.

$$\mathbf{z}_i = a_{i1}\mathbf{x}_1 + a_{i2}\mathbf{x}_2 + \dots + a_{ip}\mathbf{x}_p. \quad (3.9)$$

Em particular, $\text{var}(\mathbf{z}_i) = \lambda_i$.

- As constantes $a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{ip}$ são os elementos do i -ésimo autovetor correspondente.

Reconstrução do Vetor de Dados Original

Para reconstruir o vetor de dados original $\mathbf{x}$, exatamente a partir das componentes principais $\mathbf{z}_i$, procede-se como segue. Primeiramente, combina-se as componentes principais

$\{\mathbf{z}_i | i = 1, 2, \dots, p\}$ em uma única matriz, como mostrado por:

$$\mathbf{Z} = [\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_p]^T = [\mathbf{x}^T \mathbf{a}_1, \mathbf{x}^T \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{x}^T \mathbf{a}_p] = \mathbf{A}^T \mathbf{x}. \quad (3.10)$$

A seguir, multiplicando ambos os lados da equação (3.10) pela matriz $\mathbf{A}$ e usando a propriedade que $\mathbf{A}$ é ortogonal, isto é, $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^{-1}$, o vetor $\mathbf{x}$ de dados originais pode ser reconstruído da seguinte forma:

$$\mathbf{x} = \mathbf{AZ} = \sum_{i=1}^p \mathbf{z}_i \mathbf{a}_i. \quad (3.11)$$

Redução de Dimensionalidade

Do ponto de vista do reconhecimento de padrões estatístico, o valor prático da técnica PCA é fornecer uma técnica efetiva para redução de dimensionalidade. Em particular, pode-se reduzir o número de características necessárias para representação efetiva dos dados, descartando-se aquelas combinações lineares com baixas variâncias e retendo-se somente aqueles termos que tiverem variâncias significativas.

Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ os m maiores autovalores da matriz de correlação $\mathbf{C}$. Pode-se aproximar o vetor de dados $\mathbf{x}$ truncando-se a expansão da equação (3.11) depois de m termos, como segue:

$$\mathbf{x}' = \sum_{i=1}^m \mathbf{z}_i \mathbf{a}_i, \quad m < p. \quad (3.12)$$

O erro que ocorre nesta aproximação é dado por:

$$\epsilon = \mathbf{x} - \mathbf{x}', \quad (3.13)$$

em que $\mathbf{x}$ é o vetor de dados originais e $\mathbf{x}'$ é o vetor de dados aproximados.

Os autovalores $\lambda_m, \dots, \lambda_p$ são os $(m - p)$ menores autovalores da matriz de correlação $\mathbf{C}$; eles correspondem aos termos descartados da expansão da equação (3.12), usada para construir o vetor aproximado $\mathbf{x}'$. Quanto mais próximos esses autovalores estiverem de zero, mais efetiva será a redução de dimensionalidade (resultante da aplicação da PCA ao vetor de dados $\mathbf{x}$) na preservação da informação contida nos dados de entrada.

A utilização da técnica PCA pode, então, ser resumida através dos seguintes passos:

1. Padronize os dados correspondentes às variáveis $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p$, para que estes tenham média igual a 0 e variância igual a 1.
2. Calcule a matriz de correlação $\mathbf{C}$.

3. Encontre os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ da matriz $\mathbf{C}$ e seus correspondentes autovetores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p$. Os coeficientes da i -ésima componente principal são dados por $\mathbf{a}_i$, enquanto λ_i é a sua variância.
4. Descarte as componentes que acumulem uma pequena proporção da variação dos dados. Por exemplo, se os dados originais tiverem 20 variáveis e as três primeiras componentes principais forem responsáveis por 90% do total da variância, as outras 17 componentes principais podem ser ignoradas.

Maiores detalhes sobre a PCA podem ser encontrados em (Kendall 1980), (Johnson & Wichern 1998), (Manly 1986) e (Oliveira 1997).

3.2.2 Técnicas de Agrupamento (*Clustering*)

Suponha uma amostra de n objetos, cada qual contendo valores para p variáveis. Técnicas de agrupamento têm como objetivo básico descobrir grupos naturais desses objetos ou variáveis tal que objetos ou variáveis “similares” estejam no mesmo grupo, sendo, para isso, necessário definir, primeiramente, uma escala quantitativa para medir a associação (similaridade) entre os objetos.

Técnicas de agrupamento podem ser consideradas técnicas de classificação não supervisionada (Diday & Simon 1980). No entanto, vale a pena ressaltar que métodos de classificação supervisionada e análise de agrupamento são técnicas completamente distintas. O objetivo da classificação supervisionada é, dadas K classes, sendo K conhecido, associar cada nova observação a uma dessas classes. Além disso, uma técnica de classificação supervisionada requer conhecimento *a priori* sobre as classes, geralmente na forma de uma amostra para cada classe. Já em técnicas de agrupamento, não é feita nenhuma suposição envolvendo o número ou a estrutura das classes. Os agrupamentos são feitos com base em similaridades ou em distâncias. As entradas requeridas para essa análise são, portanto, medidas de similaridades ou dados a partir dos quais possam ser computadas tais medidas.

Mesmo sendo difícil definir precisamente o significado de “cluster”, foram propostos vários métodos que realizam tal análise. Em (Cormack 1971) são descritos alguns dos métodos mais utilizados.

Medidas de Similaridade

Define-se uma medida de “proximidade” ou “similaridade” com o objetivo de produzir uma estrutura de grupos a partir de um conjunto de dados. A escolha de uma medida de simi-

laridade envolve considerações importantes como: a natureza das variáveis (discreta, contínua, binária) e a escala das medições.

Quando o objetivo da análise de agrupamento é agrupar objetos, a proximidade é quase sempre indicada por algum tipo de distância. Já quando a meta for agrupar variáveis, geralmente os coeficientes de correlação são levados em conta. A distância mais utilizada para a análise de cluster é a distância euclidiana entre duas observações (objetos) de mesma dimensão.

Antes do cálculo das distâncias, é usual padronizar as variáveis para que todas elas tenham importância equivalente na determinação dessas medidas. Isso pode ser feito padronizando-se as variáveis para que essas tenham média 0 e variância 1. Alternativamente, cada variável pode ser codificada para ter o mínimo de 0 e o máximo de 1.

Quando os objetos não puderem ser representados por medidas p -dimensionais significativas, as distâncias entre pares de objetos podem ser calculadas, por exemplo, com base na presença ou ausência de certas características. Obviamente, objetos similares terão mais características em comum do que os objetos não similares. A presença ou ausência de uma característica pode ser descrita matematicamente através da introdução de uma variável binária que assume valor 1, se a característica estiver presente, e valor 0, se a característica estiver ausente.

O Método k -médias

Na sua forma geral, o k -médias é um algoritmo iterativo utilizado para particionar n pontos de dados em K subconjuntos (grupos) disjuntos S_j contendo, cada um, n_j pontos de dados, de modo a minimizar a soma dos quadrados das distâncias dentro dos grupos, dada por:

$$D = \sum_{j=1}^K \sum_{i \in S_j} |\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j|^2, \quad (3.14)$$

onde $\mathbf{x}_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, é um vetor que representa o i -ésimo ponto de dados do conjunto e $\mathbf{m}_j$ é o centróide dos pontos de dados em S_j , geralmente calculado a cada iteração como o vetor de médias destes pontos. O algoritmo k -médias é apresentado a seguir.

Algoritmo 1 Algoritmo k -médias

- 1: Selecione, aleatoriamente, k pontos no espaço representado pelos objetos que serão agrupados. Esses pontos correspondem aos centróides iniciais dos grupos.
 - 2: Associe cada objeto ao grupo cujo centróide estiver mais próximo.
 - 3: Quando todos os objetos tiverem sido associados, calcule novamente as posições dos k centróides.
 - 4: Repita os passos 2 e 3 até que os centróides não se movam mais.
-

De fato, não foi realizado, neste trabalho, um estudo mais aprofundado dos fundamentos do algoritmo k -médias. Porém, alguns resultados obtidos por essa técnica também são apresentados no Capítulo 8, por se tratar de um algoritmo básico bastante utilizado em análises comparativas envolvendo métodos auto-organizáveis.

3.3 Redes Neurais Artificiais

Redes neurais artificiais (RNAs), com seu denso paralelismo, têm provado ser uma abordagem promissora em várias aplicações na área de computação visual, tendo obtido sucesso na solução de problemas para os quais as técnicas tradicionais têm falhado ou mostrado ser ineficientes. A investigação das RNAs nesse contexto tem recebido grande atenção, uma vez que esses modelos apresentam outras características adequadas ao processamento de imagens, além do paralelismo. Por exemplo, RNAs permitem a representação distribuída das informações, facilidade de aprendizagem por exemplos, alta capacidade de generalização e uma certa tolerância a falhas. Dentre as aplicações das RNAs envolvendo análise de imagens, destacam-se operações de robótica, inspeção visual, controle de veículos autônomos e muitas outras.

Modelos de redes neurais são compostos, basicamente, por processadores elementares, chamados de nós ou neurônios, altamente conectados (Hertz, Krogh & Palmer 1991), (Kosko 1991), (Kohonen 1989), (Pao 1989). A arquitetura e a dinâmica de algumas redes neurais tentam imitar o processamento das informações nos neurônios biológicos. Na maioria dos casos, a arquitetura altamente conexionista faz com que a rede neural seja robusta, enquanto que o processamento paralelo possibilita o sistema a produzir saídas em tempo real.

3.3.1 Processo de Aprendizado para Redes Neurais

A propriedade mais importante de uma rede neural é a habilidade para aprender e melhorar o seu desempenho por meio do aprendizado. Uma rede neural aprende via um processo iterativo de ajustes aplicados aos pesos sinápticos de suas conexões, tornando-se mais conhecedora de seu ambiente a cada iteração.

Existem muitas noções associadas ao conceito de aprendizado, o que torna difícil a sua definição de uma maneira precisa (Minsky 1961). Uma definição de aprendizado para redes neurais proposta por (Mendel & McLaren 1970) é apresentada a seguir:

“Aprendizado é um processo pelo qual os parâmetros livres (pesos sinápticos) de uma rede neural são adaptados por meio de um processo contínuo de estímulos dados pelo ambiente no qual a rede está incorporada. O tipo de aprendizado é determinado pelo modo que as mudanças

nos parâmetros são realizadas.” Essa definição implica nas seguintes etapas de eventos:

1. A rede neural é estimulada por um ambiente (apresentação de um exemplo de treinamento).
2. A rede neural muda como resultado desse estímulo (adaptação dos pesos sinápticos).
3. A rede neural responde de um novo modo ao ambiente, em função das mudanças que ocorreram na sua estrutura interna.

Considerando-se um par de neurônios x_k e x_j conectados por uma ligação com peso sináptico w_{kj} , e denotando-se $w_{kj}(n)$ como o valor do peso sináptico w_{kj} no tempo n e $\Delta w_{kj}(n)$ como o ajuste a ser aplicado a esse peso, tem-se:

$$w_{kj}(n+1) = w_{kj}(n) + \Delta w_{kj}(n), \quad (3.15)$$

em que $w_{kj}(n)$ e $w_{kj}(n+1)$ podem ser vistos como os valores *antigo* e *novo* do peso sináptico w_{kj} . Em particular, o ajuste $\Delta w_{kj}(n)$ é computado como resultado de um estímulo do ambiente (evento 1), e o valor atualizado $w_{kj}(n+1)$ define a mudança feita na rede devido a esse estímulo (evento 2). O evento 3 acontece quando a nova rede, operando com os pesos sinápticos atualizados, é reavaliada.

Um conjunto prescrito de regras bem definidas para a solução de um problema de aprendizado é chamado de algoritmo de aprendizado. Existem vários algoritmos de aprendizado que podem ser utilizados em projetos de redes neurais, diferindo uns dos outros, basicamente, pela maneira que são formulados os ajustes aplicados aos pesos sinápticos da rede. Um outro fator a ser considerado é o paradigma de aprendizado, ou seja, o modelo do ambiente no qual a rede neural está operando. Nesse contexto, o aprendizado pode ser supervisionado, não supervisionado ou com reforço, os quais serão descritos a seguir.

Paradigmas de Aprendizado em Redes Neurais

◇ Aprendizado Supervisionado

A disponibilidade de um *professor* externo caracteriza o aprendizado supervisionado. Em termos conceituais, pode-se dizer que o professor é aquele que tem conhecimento do ambiente, o que é representado por um conjunto de exemplos entrada-saída.

Durante o processo de aprendizado, o professor é capaz de fornecer à rede neural a resposta desejada para um determinado conjunto de treinamento. Tal resposta representa a ação ótima a ser executada pela rede.

Os parâmetros da rede são ajustados levando-se em conta, geralmente, o vetor de treinamento e o erro, sendo que o erro é dado pela diferença entre a resposta atual e a resposta desejada. Esses ajustes são realizados, quase sempre, iterativamente, passo a passo, com o objetivo de fazer com que a rede emule o professor. Em outras palavras, o conhecimento disponível ao professor é transferido para a rede neural da forma mais completa possível. Quando essa condição for atingida, pode-se dispensar o professor e deixar que a rede, completamente por si só, lide com o ambiente.

Um exemplo representativo de rede neural que utiliza o paradigma de aprendizado supervisionado é a rede Perceptron Multi-Camadas (MLP)¹ (Rumelhart, Hilton & Williams 1986).

◇ Aprendizado Não Supervisionado

No aprendizado não supervisionado (ou auto-organizável) não existe professor externo. Em outras palavras, não existem exemplos específicos da função a ser aprendida pela rede. A rede deve aprender com base em uma medida de qualidade, ou seja, os pesos sinápticos da rede devem ser ajustados de maneira a otimizar tal medida.

O paradigma de aprendizado não supervisionado apresenta, como principais sub-grupos, o aprendizado hebbiano e o aprendizado competitivo, que serão discutidos no decorrer deste capítulo.

◇ Aprendizado com Reforço

No aprendizado com reforço, a aprendizagem é realizada por meio de mapeamentos entrada-saída que caracterizam um processo de tentativa e erro projetado para maximizar um determinado critério de desempenho, chamado de sinal de reforço. Se uma ação executada pela rede neural é seguida por um estado satisfatório, então, a tendência da rede para produzir aquela ação é fortalecida ou reforçada. Caso contrário, a mesma tendência é enfraquecida (Haykin 1994).

A seguir serão apresentadas duas abordagens de aprendizado não supervisionado que são utilizadas nos modelos de redes neurais descritos neste trabalho.

Exemplos de Tipos de Aprendizado Não Supervisionado

Uma vez que o enfoque deste trabalho consiste na utilização de modelos de redes neurais auto-organizáveis, a seguir serão descritos dois tipos de aprendizado que alguns destes modelos implementam.

¹Do original, em inglês, Multi Layer Perceptron.

◇ Aprendizado Hebbiano

O postulado de Hebb (Hebb 1949) é o mais antigo entre as regras de aprendizado para redes neurais e consiste em:

“Quando um axônio da célula A está suficientemente próximo para excitar uma célula B e repetidamente tenta excitá-la, algum processo crescente ou mudanças metabólicas ocorrem em ambas as células.”

Transformando a declaração acima em duas regras (Changeux & Danchin 1976), segue que:

1. Se dois neurônios ligados por uma sinapse são ativados simultaneamente (sincronamente), a intensidade dessa sinapse (conexão) é aumentada.
2. Se dois neurônios ligados por uma sinapse são ativados assincronamente, a intensidade dessa sinapse é diminuída ou eliminada.

De acordo com Hebb, o ajuste aplicado ao peso sináptico w_{kj} no tempo n é expresso na forma:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta y_k(n) x_j(n), \quad (3.16)$$

onde η é uma constante positiva que determina a velocidade do aprendizado, $y_k(n)$ é a saída do neurônio k no tempo n e $x_j(n)$ é o j -ésimo elemento do vetor de entrada no tempo n .

Dentre as principais aplicações do aprendizado hebbiano, destacam-se a extração de características de dados e técnicas de memória associativa. Exemplos de redes neurais que implementam esse tipo de aprendizado são os modelos de Hopfield (Hopfield 1982) e redes PCA (ver seção 3.3.3).

◇ Aprendizado Competitivo

No aprendizado competitivo, os neurônios de saída de uma rede neural competem entre si para ser o neurônio que será ativado. Ao contrário de uma rede neural baseada no aprendizado de Hebb, onde vários neurônios podem ser ativados simultaneamente, no aprendizado competitivo, apenas um neurônio é ativado por vez. Tal característica torna esse tipo de aprendizado bastante adequado para realizar extração de características em um conjunto de dados com a finalidade de classificar os padrões de entrada (Haykin 1994).

Existem dois elementos básicos em uma regra de aprendizado competitivo:

- Um conjunto de neurônios que são idênticos, diferindo uns dos outros somente pelos seus pesos sinápticos distribuídos aleatoriamente. Devido a essa diferença, os neurônios da rede respondem de forma diferente a cada padrão de entrada.
- Um mecanismo que permite aos neurônios competirem para responder corretamente a um dado subconjunto de entrada, tal que somente um neurônio de saída seja ativado por vez. O neurônio que ganha a competição é chamado de neurônio vencedor.

O neurônio j . vencedor, é aquele cujo o nível de atividade v_j , para uma determinada entrada, é o maior entre todos os neurônios da rede. Neste caso, o neurônio que ganha a competição ganha também o direito de ter os seus pesos sinápticos ajustados. Em alguns modelos competitivos, além do neurônio vencedor, alguns neurônios mais próximos em sua vizinhança também têm os seus pesos atualizados. Este é caso, por exemplo, dos Mapas Auto-organizáveis (SOM)² propostos por Kohonen (Kohonen 2001).

Outros exemplos de redes neurais que implementam o aprendizado competitivo são os modelos da família ART. Aspectos importantes destes serão apresentados a seguir neste capítulo, uma vez que uma rede neural desta família foi utilizada, como uma abordagem alternativa, nos experimentos de segmentação de imagens, como será apresentado no Capítulo 8.

3.3.2 Modelos da Família ART

A Teoria da Ressonância Adaptativa (ART) foi desenvolvida por Carpenter e Grossberg (Carpenter & Grossberg 1987b). As redes neurais projetadas sob esse paradigma, denominadas de redes da Família ART, foram desenvolvidas de modo a permitir que o usuário controle o grau de similaridade entre os padrões alocados em um mesmo grupo (*cluster*).

À medida que uma rede neural é treinada para identificar agrupamentos, um mesmo padrão pode ser apresentado várias vezes. Na primeira apresentação, cada padrão é associado a uma unidade de *cluster*, inicialmente, podendo ser deslocado para outra unidade nas apresentações seguintes. Isso pode acontecer devido às mudanças aplicadas nos pesos dos *clusters* iniciais, que tiveram que se adaptar a outros padrões no decorrer do treinamento. Todavia, se um padrão oscilar, a cada apresentação, entre unidades de *cluster* diferentes, a rede pode ser considerada instável.

Algumas redes atingem estabilidade por meio da redução gradual das suas taxas de aprendizado à medida que o mesmo conjunto de padrões é apresentado várias vezes. Entretanto, esse mecanismo dificulta o aprendizado de um novo padrão que seja apresentado depois que um certo

²Do original, em inglês. Self-Organizing Maps.

número de épocas de treinamento tenha ocorrido. A habilidade de uma rede neural para responder a (aprender) um novo padrão de forma satisfatória, em qualquer estágio de treinamento, é denominada de plasticidade. Redes neurais ART foram projetadas para serem, ao mesmo tempo, estáveis e plásticas, de modo a solucionar o dilema Estabilidade - Plasticidade, que será descrito a seguir.

Dilema Estabilidade - Plasticidade

Dentre as várias habilidades inerentes à mente humana, uma das mais interessantes e fundamentais para o indivíduo é a capacidade de aprender e de continuar aprendendo coisas novas, sem esquecer o que já foi aprendido no passado. Um exemplo, bastante comum, é a capacidade de um indivíduo reconhecer seus pais, mesmo sem tê-los visto por algum tempo e, durante este período, ter conhecido uma variedade de rostos (ou pessoas) diferentes. Sistemas complexos com arquitetura paralela, tais como o cérebro, devem ter algum meio de manter a estabilidade em todos os níveis para desempenhar bem suas tarefas. Seria, portanto, de grande interesse que um sistema computacional tivesse esta característica (Freeman & Skapura 1991).

Quando se projeta um sistema computacional neural para que este desempenhe tarefas de classificação de padrões, primeiramente cria-se um conjunto de exemplos (ou padrões) para ser utilizado no treinamento do sistema. Durante o treinamento, as informações apresentadas ao sistema em questão serão incorporadas a este por meio do processo de ajuste dos pesos sinápticos associados aos neurônios da rede. Uma vez terminado o processo de treinamento, o sistema está pronto para ser colocado em prática e, a partir de então, nenhum ajuste adicional é permitido no conjunto de pesos. Este tipo de situação é aceitável em um ambiente (ou domínio de aplicação) estável, ou seja, que possui limites bem definidos. Em ambientes estáveis é possível, geralmente, definir um conjunto de treinamento adequado para qualquer que seja o problema a ser resolvido.

Infelizmente, o que acontece na maioria das situações do mundo real é que os ambientes são dinâmicos (não-estáveis) e, na maioria dos casos, os limites dos ambientes não são conhecidos. Como exemplo de ambiente dinâmico, pode-se considerar a situação em que se tenha que reconhecer silhuetas (formas) de algumas classes de aeronaves. As imagens apropriadas podem ser usadas para treinar o sistema neural, e esta tarefa, dependendo da arquitetura deste sistema, consumirá algum tempo. Após o processo de treinamento, nenhuma outra modificação nos pesos é permitida. Se em algum momento no futuro, um outro modelo de aeronave de uma mesma classe já conhecida tornar-se operacional, e se os usuários do sistema desejarem adicioná-lo ao conjunto de exemplos de treinamento que já possuem, é necessário que se faça um novo treinamento do sistema utilizando os exemplos que já foram utilizados anteriormente,

mais os exemplos do novo modelo. O novo treinamento deve ser feito desta forma, pois caso seja feito somente com o novo modelo de aeronave, o sistema neural assimilará muito bem este, mas, em contrapartida, os outros padrões que foram usados no primeiro treinamento ficarão afetados, talvez, em sua totalidade.

Esse tipo de situação acontece porque o sistema computacional neural, não possuindo nenhum conhecimento a respeito da nova entrada, e não dispondo de um mecanismo de generalização capaz de reconhecer o novo padrão de entrada, tenta ajustar-se à nova situação “esquecendo” o conhecimento previamente adquirido. Essas características podem ser observadas em alguns sistemas computacionais, tais como em redes neurais Perceptron Multi-Camadas (MLP) (Rumelhart, Hilton & Williams 1986) e Mapas Auto-Organizáveis (SOM) (Kohonen 1988).

Carpenter e Grossberg (Carpenter & Grossberg 1987b), preocupados com a estabilidade em sistemas auto-organizáveis, desenvolveram a Teoria da Ressonância Adaptativa (ART), a partir do que eles chamaram de dilema Estabilidade-Plasticidade. Esse dilema pode ser compreendido a partir de uma série de questões:

- Como um sistema (capaz de aprender) pode continuar sendo adaptativo (plástico) em resposta a uma entrada significativa (nova) e, ao mesmo tempo, manter-se estável em resposta a uma entrada irrelevante (conhecida)?
- Como o sistema será capaz de alternar entre os modos plástico e estável?
- Como o sistema poderá reter as informações aprendidas anteriormente e continuar aprendendo novas informações?

Dessa forma, quando um sistema “inteligente” aprende novas informações, sem perder aquelas previamente aprendidas, diz-se que este sistema é dotado de plasticidade, ou é plástico. Por outro lado, quando não há perdas significativas de informações, ou seja, não há diferentes interpretações para um mesmo padrão durante diferentes estágios de treinamento, diz-se que o sistema em questão é dotado de estabilidade, ou é estável. A idéia central, para resolver o dilema *estabilidade-plasticidade*, é adicionar entre a camada de saída (competitiva) do sistema computacional neural e a camada de entrada um mecanismo de retorno (*feedback*) para facilitar a adaptação a uma situação nova, sem perder o conhecimento anterior, permitindo que seja possível alternar entre os modos estável e plástico, durante a fase de treinamento.

Exemplos de Modelos ART

Desde o surgimento da teoria da ressonância adaptativa, vários modelos fundamentados nesta teoria foram desenvolvidos. O primeiro modelo da família ART foi o ART1 (Carpenter &

Grossberg 1987b), que reconhece agrupamentos (*clusters*) de padrões em seqüências arbitrárias de valores binários. A rede ART2 (Carpenter & Grossberg 1987a), foi desenvolvida com o objetivo de abranger um número maior de situações do mundo real, para isso aceitando seqüências arbitrárias de valores reais.

Tanto o modelo ART1 quanto o ART2 foram projetados para funcionar com algoritmo de aprendizado não supervisionado. Um outro modelo, também de paradigma não supervisionado, é o ART3 (Carpenter & Grossberg 1990). Este, diferente dos dois citados anteriormente, é fundamentado no processo de sinápses complexas, que inclui um modelo de neurotransmissores químicos, e fornece um mecanismo de busca paralela para reconhecimento distribuído em uma rede neural hierárquica multi-nível.

A primeira rede da família ART a implementar o aprendizado supervisionado e incremental foi a rede ARTMAP (Carpenter, Grossberg, Neurophysiol & Reynolds 1991). Esta, por sua vez, foi projetada para reconhecer agrupamentos em resposta a vetores de entrada binários. O modelo Fuzzy ART (Carpenter, Grossberg & Rosen 1991b) combina a abordagem ART com fundamentos da lógica nebulosa (*fuzzy*) (Zadeh 1994) e será abordado com mais detalhes no decorrer deste capítulo, por ter sido utilizado nos experimentos com imagens do presente trabalho. Há também o modelo Fuzzy ARTMAP (Carpenter, Grossberg, Markuzon, Reynolds & Rosen 1991), que é uma versão análoga ao ARTMAP para padrões de entrada com valores reais.

Existem, ainda, muitas outras variações importantes, tais como os modelos ART2-A (Carpenter, Grossberg & Rosen 1991a), ARTSTAR (Hussain 1993), SMART (Bartfai 1994), HART (Bartfai 1995), ART-C (He, Tan & Tan 2002), Gaussian ART (GART) (Williamson 1996), Simplified ART (Baraldi & Alpaydin 1998), Self-Organizing SART (FOSART) e Fuzzy ART simétrica (S-Fuzzy ART). Esses quatro últimos modelos foram analisados com detalhes por Baraldi e colaboradores (Baraldi & Blonda 1999), (Baraldi & Alpaydin 2002a), (Baraldi & Alpaydin 2002b).

Arquitetura básica dos modelos ART

A arquitetura das redes da família ART pode ser representada por um esquema geral (ver Figura 3.1), que envolve três grupos de neurônios:

- camada F_1 : constituída das unidades de entrada e de interface;
- camada F_2 : constituída das unidades de *cluster* representadas pelas unidades y_j ;
- unidade de *Reset*: implementa o controle do usuário sobre o grau de similaridade entre os padrões classificados em um mesmo *cluster*.

Todas as unidades da camada F_1 estão unidas, por meio de conexões *top-down* e *bottom-up*, à camada F_2 . Deve-se notar, na arquitetura apresentada, que a camada F_1 recebe como entrada um vetor s e, produz como saída, um vetor x , o que significa que poderá ocorrer algum pré-processamento nos dados de entrada. Para facilitar o entendimento, pode-se fazer uma divisão da camada F_1 em duas³ (Fausset 1994): $F_{1(a)}$, que incorpora o vetor de entrada original s_i , e $F_{1(b)}$, sub-camada interface, constituída pelas unidades x_i pré-processadas (ver Figura 3.2).

Figura 3.1: Estrutura básica de uma rede ART.

Aprendizado nos modelos ART

Os modelos ART podem implementar tanto o paradigma de aprendizado supervisionado quanto o não supervisionado. Além disso, são sistemas de aprendizado competitivo, isto é, os neurônios da camada de saída vão competir entre si pelo direito de aprender o dado de entrada submetido à rede. Outra característica é que o tipo de aprendizado implementado por esses modelos é incremental, o que significa que o sistema pode entrar no modo de treinamento a qualquer momento, possibilitando que a rede incorpore conhecimento novo, mantendo sua plasticidade e estabilidade (ver a Seção 3.3.2).

Nas redes ART, o período de ressonância corresponde a um processo adaptativo do sistema, que ocorre de duas formas. A primeira destas acontece se a rede aprendeu o suficiente para reconhecer os padrões submetidos à entrada. Neste caso, o processo de ressonância é realizado rapidamente reforçando seus pesos (ou memória da rede). A segunda maneira de o sistema

³ Isto foi feito por conveniência a partir do modelo original (Carpenter & Grossberg 1987b).

entrar no estado de ressonância ocorre quando o padrão de entrada não é imediatamente reconhecido. Neste outro caso, a rede faz uma busca dentre seus padrões armazenados, na tentativa de encontrar um equivalente; caso não seja encontrada nenhuma equivalência, o sistema entra em estado de ressonância para aprender o novo padrão.

Normalmente, há dois modos de treinamento para as redes ART, considerando um mesmo modelo: modo de treinamento rápido (*fast learning*) e modo de treinamento lento (*slow learning*). No modo de treinamento rápido, os vetores de pesos são direcionados para seus valores ótimos em poucos ciclos de treinamento, por exemplo em um ou dois ciclos. No treinamento lento, os pesos são ajustados lentamente, em vários ciclos de treinamento, por exemplo em dez ciclos.

As redes da família ART foram projetadas para permitir que o usuário tenha a possibilidade de controlar o grau de similaridade entre os padrões agrupados em um mesmo *cluster*. Esse parâmetro de similaridade, nas redes ART, é o $threshold(\rho)$, ou parâmetro de vigilância, que, por sua vez, controla a resolução do processo de agrupamento (i.e., o grau de similaridade entre os padrões colocados em um mesmo *cluster*). O parâmetro de vigilância é o mais crítico dentre os parâmetros dos modelos ART, assumindo valores entre 0 (zero) e 1 (um). Se ρ assume um valor baixo (por exemplo, $\rho < 0.3$), a resolução do processo de classificação será baixa, criando poucos *clusters*. Se, para a mesma aplicação, ρ assumir um valor alto (por exemplo, $\rho > 0.9$), uma pequena variação nos padrões de entrada pode levar à criação de novos *clusters*.

A condição de parada do treinamento nos modelos ART pode ser estabelecida de duas formas: a primeira, quando não ocorrer mudança nos pesos após um determinado número de ciclos; a segunda quando um número máximo de ciclos for atingido. Caso todos os padrões apresentados à rede não forem agrupados quando terminar os ciclos de treinamento, é preciso aumentar o número de *clusters* em F_2 , ou reduzir o valor de ρ , e reiniciar o algoritmo.

Na próxima seção, será apresentado o modelo ART1, que é de fundamental importância para o entendimento do modelo Fuzzy ART, utilizado no presente trabalho. Para facilitar a compreensão dos algoritmos de aprendizagem dos modelos, o processo de treinamento foi dividido nos seguintes estágios:

- **Inicialização:** os parâmetros e os pesos da rede são inicializados;
- **Entrada:** os padrões de treinamento são apresentados à entrada da rede;
- **Busca:** o neurônio com maior ativação é escolhido;
- **Comparação (ou Reset):** o neurônio, escolhido no estágio anterior, tem seus pesos avaliados com relação à similaridade com o padrão de entrada;

- **Adaptação:** a regra de aprendizado é aplicada (processo de ressonância).

ART1

O modelo ART1 foi projetado para agrupar vetores de entradas binários, utilizando para isto o paradigma de aprendizado não supervisionado e incremental. Além disso, o processo de treinamento não exige que os padrões de entrada possuam uma ordem fixa, ou que o número de padrões seja pré-definido para treinamento. Dessa forma, mais padrões podem ser adicionados durante o processo de treinamento.

♦ Arquitetura da rede ART1

A arquitetura da rede ART1 consiste de unidades computacionais principais, denotadas por F_1 , F_2 e *Reset*, e de unidade suplementares, denotadas por G_1 e G_2 (ver Figura 3.2). Assim como descrito anteriormente, na Seção 3.3.2, a camada de entrada F_1 pode ser dividida em duas sub-camadas: $F_{1(a)}$ e $F_{1(b)}$. A sub-camada de interface $F_{1(b)}$, constituída pelas unidades x_i , combina sinais provenientes da camada $F_{1(a)}$, constituída pelas unidades s_i , e da camada F_2 , constituída pelas unidades y_j , e isto é feito para tornar possível a comparação do sinal de entrada com a entrada ponderada (reforçada) pelo vetor de peso da unidade que foi selecionada para adaptação (aprendizado). Para comparar o grau de similaridade entre padrões, existem dois conjuntos de conexões (cada um com seus próprios pesos), conectando as unidades de interface x_i com as unidades de *clusters* y_j . As conexões que partem de $F_{1(b)}$ e vão em direção à F_2 são reforçadas pelos pesos *bottom-up* e assumem valores reais b_{ij} . As conexões que partem da camada F_2 em direção à camada $F_{1(b)}$ são reforçados pelos pesos *top-down*, que assumem valores binários t_{ji} . A camada F_2 é competitiva, ou seja, a unidade de *cluster* que possuir maior valor de ativação será escolhida para aprender o padrão de entrada.

Para cada camada dos modelos ART1, existem unidades externas de controle, que são chamadas de unidades suplementares, representadas por G_1 e G_2 . A função destas unidades é controlar o fluxo de dados através das camadas em cada fase de um ciclo de treinamento. Estas unidades também são denominadas de unidades de controle de ganho (*Gain Control Units*) e serão descritas mais adiante, juntamente com a finalidade dos sinais “+” e “-”. Entre a camada de entrada e a camada de saída há também a unidade de *Reset*, que é responsável por calcular uma medida de similaridade relativa entre o vetor de entrada e o protótipo armazenado no vetor de pesos associado ao neurônio vencedor, com o objetivo de comparar essa medida com o parâmetro de vigilância (ρ).

Uma dificuldade inerente à arquitetura do modelo ART1, é que as unidades que a compõem

Figura 3.2: Arquitetura da rede ART1.

têm que responder de forma diferente aos diversos estágios do processo neural. Por exemplo, as unidades de F_1 devem estar ativas sempre que o sinal é percebido na entrada $F_{1(a)}$ e nenhuma unidade de F_2 está ativa. As unidades de $F_{1(b)}$ devem estar ativas, se e somente se, recebem sinais de F_2 e da camada de entrada. A operação da unidade de *Reset* também possui um papel importante dentro do sistema de processamento neural, uma vez que essa unidade também deve inibir a unidade F_2 , sob certas condições, e reativá-la em uma etapa mais adiante. Estes dois problemas podem ser compreendidos e resolvidos quando são adicionadas as unidades suplementares G_1 e G_2 .

Dessa forma, as unidades suplementares são importantes sob o ponto de vista teórico, uma vez que estas fornecem um mecanismo para o qual o algoritmo apresentado na Seção (3.3.2) possa ser implementado usando princípios de redes neurais.

Na Figura (3.2), os sinais excitatórios são representados por “+”, e os sinais inibitórios são representados por “-”. Um sinal, seja este qual for, é enviado sempre que uma unidade está ativa. Cada unidade das camadas $F_{1(b)}$ e F_2 recebem três sinais que vêm de outras unidades. Por exemplo, $F_{1(b)}$ pode receber sinais de $F_{1(a)}$, F_2 (através dos pesos *top-down*) e G_2 . Da mesma forma, F_2 pode receber sinais de $F_{1(b)}$, *Reset* e G_1 (ver Figura 3.2). Cada uma das camadas $F_{1(b)}$ (através dos pesos *bottom-up*) e F_2 devem receber pelo menos dois sinais excitatórios para tornarem-se ativas, considerando três possíveis fontes de sinais. Esta situação é conhecida por “regra dos 2/3 (dois terços)”.

Variáveis	Descrição
m	dimensão do vetor de entrada
n	número máximo de <i>clusters</i> que podem ser formados
b_{ij}	pesos <i>bottom-up</i>
t_{ji}	pesos <i>top-down</i>
ρ	parâmetro de vigilância
$\mathbf{s}$	vetor de entradas binárias
$\mathbf{x}$	vetor de ativação de $F_{1(b)}$ <i>x binário</i>
$\ \mathbf{x}\ $	norma do vetor $\mathbf{x}$

Tabela 3.2: Notação utilizada no algoritmo de aprendizado da rede ART1.

◇ Algoritmo de treinamento da rede ART1

A Figura 3.2 pode ajudar a entender o algoritmo de treinamento da rede ART1. Para melhor compreensão deste algoritmo, a notação apresentada na Tabela 3.2 será usada.

◇ Parâmetros usados no algoritmo de treinamento da rede ART1

A Tabela 3.3 mostra como os parâmetros e pesos da rede podem ser pré-definidos pelo usuário e suas respectivas restrições (Carpenter & Grossberg 1987b).

Parâmetros	Restrições
L	$L > 1$
ρ	$0 < \rho \leq 1$
b_{ij}	$0 < b_{ij}(0) < \frac{L}{L-1+m}$
t_{ji}	$t_{ji}(0) = 1$

Tabela 3.3: Inicialização dos parâmetros da rede ART1.

◇ Resumo do algoritmo da rede ART1

O algoritmo de treinamento apresentado aqui é o de modo rápido.

- **Inicialização:** determine o tamanho das camadas F_1 e F_2 , e os valores para os demais parâmetros da rede, sendo que para cada vetor de entrada, é preciso ajustar toda unidade de F_2 para zero, ou seja, $y_j = 0$, para todo j ;
- **Entrada:** calcule $\|\mathbf{s}\|$ e para todos os elementos de $F_{1(b)}$ faça $x_i = s_i$.

- **Busca:** calcule a ativação de cada neurônio da camada F_2 com $y_j = \sum_i b_{ij}x_i$ e encontre o neurônio J com a maior ativação:

$$y_J = \max\{y_j, j = 1 \dots n\}. \quad (3.17)$$

Se houver mais que um y_J , então utilize o menor índice j , mantendo-se a ordem de $j = 1, 2, 3 \dots n$. Caso todos os y_j sejam iguais a -1 , significa que os neurônios estão inibidos, e aquele padrão de entrada não será aprendido durante aquele ciclo de treinamento.

- **Comparação (ou Reset):** calcule o sinal de ativação das unidades de $F_{1(b)}$ com $x_i = s_i t_{Ji}$, calcule a norma $\|\mathbf{x}\|$ e teste a unidade de *Reset* com:

$$\frac{\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{s}\|} > \rho \quad (3.18)$$

Se a desigualdade for verdadeira, então vá para o próximo estágio. Caso contrário, faça $y_J = -1$ (i.e., o neurônio ficará inibido durante a apresentação daquele padrão), sendo necessário que se repita o estágio de **Busca**;

- **Adaptação:** atualize os pesos da rede de acordo com as seguintes regras:

$$\begin{cases} b_{iJ}^{(Novo)} = \frac{Lx_i}{L-1+\|\mathbf{x}\|}, \\ t_{Ji}^{(Novo)} = x_i. \end{cases} \quad (3.19)$$

Fuzzy ART

O modelo Fuzzy ART incorpora todas as características básicas dos sistemas ART (Carpenter & Grossberg 1987b). Assim como o modelos ART1, apresentado na seção anterior, este modelo trabalha com o paradigma de aprendizado não supervisionado. Além disso, este modelo ART foi desenvolvido baseando-se no modelo ART1, mas adaptado ao tratamento de valores reais pertencentes ao intervalo $[0, 1]$ (i.e., valores *fuzzy*) (Carpenter, Grossberg & Rosen 1991b). Mais detalhes a respeito deste modelo também podem ser encontrados nos trabalhos de (Frank, Kraiss & Kuhlen 1999) e (Baraldi & Blonda 1999).

◇ Arquitetura da rede Fuzzy ART

Os componentes da arquitetura da rede Fuzzy ART são: a camada F_1 (dividida em duas sub-camadas, de entrada e de interface, respectivamente, $F_{1(a)}$ e $F_{1(b)}$); a camada F_2 (camada de *clusters*); a unidade de *Reset* e o conjunto de pesos, representado pela matriz $\mathbf{W}$, que conecta a sub-camada $F_{1(b)}$ com a camada F_2 . Entre as unidades da sub-camada $F_{1(a)}$ e as unidades da sub-camada $F_{1(b)}$ ocorre o pré-processamento dos dados de entrada. As unidades da sub-camada $F_{1(b)}$ também estão conectadas com a unidade de *Reset*. A arquitetura completa deste modelo pode ser vista na Figura 3.3.

Figura 3.3: Arquitetura da rede Fuzzy ART.

◇ Descrição do treinamento da rede Fuzzy ART

O processo de treinamento da rede Fuzzy ART pode ser descrito como segue. O sinal de entrada migra da sub-camada $F_{1(a)}$ para a sub-camada $F_{1(b)}$, após sofrer um pré-processamento. Em seguida, o sinal atinge a camada F_2 , reforçado pelo valor dos pesos contidos nas conexões, e isto determina as ativações em todas as unidades da camada F_2 . Imediatamente após o estágio de busca, determina-se o neurônio com a maior ativação. O algoritmo segue avaliando se o neurônio vencedor, em F_2 , é suficientemente similar ao padrão de entrada $\mathbf{x}$; se for verdadeiro, a rede entra em processo de atualização de pesos (ressonância).

Parâmetros	Descrição
m	Dimensão do vetor de entrada.
n	Número máximo de <i>clusters</i> que podem ser formados.
ε	Parâmetro de escolha. Nos experimentos realizados neste presente trabalho, foi utilizado um valor $\varepsilon \approx 0$.
β	Taxa de aprendizagem. Tem seus valores no intervalo $[0, 1]$. Valor 1 determina treinamento no modo rápido; valor $\beta < 1$ determina treinamento no modo intermediário.
ρ	Parâmetro de vigilância. Determina a similaridade entre padrões em um mesmo <i>cluster</i> .
$\mathbf{W}$	Representa a matriz de pesos. Neste modelo, os pesos <i>top-down</i> e <i>bottom-up</i> são iguais. Portanto, apenas um destes conjuntos é usado.

Tabela 3.4: Parâmetros da rede Fuzzy ART.

◇ Resumo do algoritmo da rede Fuzzy ART

No início do treinamento, os valores da matriz de pesos $\mathbf{W}$ são iguais a 1 e cada categoria, ou neurônio da camada F_2 , deve ser iniciado na condição de *não comprometido*. Esta situação será modificada, para *comprometido*, somente se o neurônio for selecionado para o estágio de **Adaptação**.

- **Inicialização:** determine o tamanho das camadas F_1 e F_2 , bem como os valores para os demais parâmetros da rede. Além disso, para cada vetor de entrada, é preciso ajustar todas as unidades de F_2 para *zero*, ou seja, $y_j = 0$, para todo j ;
- **Entrada:** normalize o vetor de entrada $\mathbf{s}$ para que seus valores se encontrem no intervalo $(0, 1)$. O vetor resultante dessa operação é denotado por $\boldsymbol{\nu}$.

Em seguida, transforme cada vetor resultante $\boldsymbol{\nu}$ m -dimensional em um vetor $2m$ -dimensional $(k_1, \dots, k_{2m})$. Isto é feito calculando-se o código complementar como na Equação (3.20). Este cálculo é usado para evitar perda de informação e proliferação de *clusters* em F_2 (Carpenter, Grossberg & Rosen 1991c), (Frank, Kraiss & Kuhlen 1999). Dessa forma, o vetor obtido após o estágio de pré-processamento, é dado por:

$$\mathbf{k} = (\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\nu}^c) = (\nu_1, \dots, \nu_n, 1 - \nu_n, \dots, 1 - \nu_n). \quad (3.20)$$

- **Busca:** para cada vetor de entrada, calcule sua ativação y_j com:

$$y_j = \frac{\|\mathbf{k} \wedge \mathbf{w}_j\|_2}{\varepsilon + \|\mathbf{w}_j\|_2}, \quad (3.21)$$

sendo $\|\cdot\|_2$ a norma definida por:

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \sum_{i=1}^{2n} u_i, \quad (3.22)$$

que é a soma dos componentes do vetor $\mathbf{u}$. O operador $\wedge$ é um operador fuzzy de conjunção (ou *AND*), e isto significa que:

$$a \wedge b \equiv \min(a, b), \quad (3.23)$$

ou seja, o menor valor entre a e b . Então para $\mathbf{k}$ e $\mathbf{w}_j$, tem-se que:

$$\mathbf{k} \wedge \mathbf{w}_j = (k_1 \wedge w_{j1}, \dots, k_z \wedge w_{jz}), \quad z = 2m. \quad (3.24)$$

O neurônio vencedor é indexado por J . Para encontrar este índice é necessário calcular a maior ativação de y_j em F_2 , que é o maior valor de y_j considerando a Equação (3.21), ou seja,

$$y_J = \max(y_j), \quad j = 1 \dots n. \quad (3.25)$$

Se houver mais que um y_J , então utilize o menor índice j , mantendo-se a ordem de $j = 1, 2, \dots, n$. Caso todos os y_j sejam iguais a -1 , significa que os neurônios estão inibidos, e aquele padrão de entrada não será aprendido durante aquele ciclo de treinamento.

- **Comparação:** após ter selecionado o índice do neurônio com o maior y_J , e se este estiver *comprometido*, então testa-se:

$$y_J > \rho. \quad (3.26)$$

Se a desigualdade for verdadeira, então vá para o próximo estágio. Caso contrário, faça $y_J = -1$ (i.e., o neurônio ficará inibido durante a apresentação daquele padrão), sendo necessário que se repita o estágio de **Busca**;

- **Adaptação:** atualize os pesos da rede de acordo com a seguinte regra:

$$\mathbf{w}_j^{(Novo)} = \beta(\mathbf{x} \wedge \mathbf{w}_j^{(Antigo)}) + (1 - \beta) \mathbf{w}_j^{(Antigo)}. \quad (3.27)$$

Considerações sobre Alguns Modelos ART

Em (Vicentini 2002) e (Vicentini, Oliveira & Romero 2004), foi realizada uma avaliação para encontrar qual seria, dentre os modelos ART2, ART2-A e Fuzzy ART, o mais adequado para ser combinado com a estrutura de dados métrica *Slim-Tree* (Traina Jr., J. M. Traina, Seeger & Faloutsos 2000). Nesse trabalho, foi proposto um modelo híbrido para indexação e recuperação de informações, que fosse capaz de responder a consultas por similaridade. Para realizar a análise comparativa entre os três modelos ART foi escolhida a tarefa de classificação de dados provenientes de algumas bases disponíveis no repositório UCI (Blake & Merz 1998) e do conjunto *Eigenfaces* (Wactlar, Kanade, Smith & Stevens 1996), que pertence ao projeto *Informedia*, da Universidade Carnegie Mellon, nos Estados Unidos. Como resultado desses experimentos, observou-se que os desempenhos dos modelos ART2 e ART2-A foram similares, considerando-se as matrizes de confusão obtidas pelos mesmos. Por outro lado, os resultados obtidos pela rede Fuzzy ART não conseguiram superar aqueles obtidos pelos dois outros modelos. Com base nesta avaliação, o modelo que apresentou melhores resultados foi o modelo ART2-A.

Existem ainda, na literatura, outros trabalhos dedicados ao estudo e análise de modelos ART. Mais especificamente sobre a rede Fuzzy ART, em (Frank, Kraiss & Kuhlen 1999) e (Baraldi & Blonda 1999), são apontadas algumas limitações do modelo, que podem ser resumidas nos seguintes itens:

- A rede é dependente da ordem de entrada dos padrões de treinamento;
- A rede é altamente sensível a ruídos no conjunto de dados de treinamento;
- Em experimentos com dados de alta dimensão, foi observado um certo grau de incoerência no mapeamento dos *clusters*.

Em estudos preliminares realizados no decorrer do presente trabalho, os modelos ART2-A e Fuzzy ART, implementados em (Vicentini 2002), foram aplicados para a segmentação de imagens. Neste caso, foi observado, já nos primeiros experimentos envolvendo esse tipo de aplicação, que a rede neural Fuzzy ART teve um desempenho superior ao modelo ART2-A.

Porém, com o intuito de obter resultados ainda melhores, uma vez que a rede Fuzzy ART apresenta sensibilidade a ruídos, foi proposta neste trabalho, uma metodologia para pré-

processamento de imagens que combina uma técnica baseada em ICA para redução de ruídos e o operador de Sobel para detecção de bordas, que será apresentada no Capítulo 5. A utilização desta técnica para pré-processar imagens antes de submetê-las à rede, de fato, acarretou em melhorias observadas nos resultados finais de segmentação, como pode ser visto em (Oliveira, Vicentin & Romero 2002) e no Capítulo 8 deste presente trabalho.

Aplicações das redes ART

De forma geral, os modelos ART podem ser aplicados a problemas que envolvem aprendizado, reconhecimento e previsão. Dentre as aplicações das redes ART de paradigma não supervisionado e as de paradigma supervisionado, pode-se citar: controle motor sensorial de robôs (Bachelder, Waxman & Seibert 1993); navegação de robôs (Racz & Dubrawski 1995); visão computacional (Caudell & Healy 1994); reconhecimento de objetos 3D (Seibert & Waxman 1992); reconhecimento de face (Seibert & Waxman 1993); reconhecimento de ondas de eletrocardiograma (Ham & Han 1996) (Suzuki 1995); reconhecimento automático de alvos (Bernardon & Carrick 1995) (Waxman, Seibert, Gove, Fay, Bernardon, Lazott, Steele & Cunningham 1995) (Moya, Koch & Hostetler 1993); previsão da estrutura secundária de proteínas (Mehta, Vij & Rabelo 1993); reconhecimento de caracteres chineses (Gan & Lua 1992) e segmentação de imagens (Soliz & Donohoe 1996), (Nakamura & Ogasawara 1999), (Oliveira, Vicentin & Romero 2002).

3.3.3 Rede Neural PCA Adaptativa

Nesta seção, é apresentada a rede PCA Adaptativa, uma outra rede neural auto-organizável que, por sua vez, implementa o aprendizado não supervisionado hebbiano (ver Seção (3.3.1)). Este modelo, que incorpora a técnica PCA clássica (ver Seção 3.2.1), foi proposto por (Rubner & Tavan 1989) e sua arquitetura é ilustrada pela Figura 3.4. Esta consiste de p neurônios de entrada e m neurônios de saída, em que cada unidade de entrada i está conectada a cada neurônio de saída j , com peso de conexão w_{ij} .

As unidades de saída dessa rede são organizadas de forma que o neurônio de saída i é conectado ao neurônio de saída j por meio da conexão com peso u_{ij} se, e somente se, $i < j$.

A saída $y_j(n)$ do neurônio j no tempo n , produzida em resposta ao conjunto de entradas $\{x_i(n) | i = 0, 1, \dots, p-1\}$ é dada por:

$$y_j(n) = \sum_{i=0}^{p-1} w_{ij}(n)x_i(n) + \sum_{l < j} u_{lj}(n)y_l, \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \quad (3.28)$$

Figura 3.4: Rede Neural PCA Adaptativa.

Os pesos das conexões w_{ij} entre a camada de entrada e a camada de saída são ajustados de acordo com a regra de aprendizado de Hebb, ou seja,

$$\Delta w_{ij}(n) = \eta x_i(n) y_j(n), \quad i = 0, 1, \dots, p-1; \quad j = 0, 1, \dots, m-1, \quad (3.29)$$

em que η é o parâmetro de velocidade de aprendizado.

Os pesos sinápticos laterais, por sua vez, são ajustados de acordo com a regra anti-hebbiana, isto é,

$$\Delta u_{lj}(n) = -\mu y_l(n) y_j(n), \quad l < j, \quad (3.30)$$

em que μ é outro parâmetro de aprendizagem positivo.

Devido à regra de aprendizado anti-hebbiana, a tendência dos pesos laterais é diminuir assintoticamente. Por esse motivo, quando esses pesos sinápticos tiverem atingido um valor suficientemente pequeno, a rede terá convergido para um estado no qual os m vetores de pesos associados às m unidades de saídas são os m autovetores da matriz de correlação dos dados de entrada, com autovalores $\lambda_0 > \lambda_2 > \dots > \lambda_{m-1}$.

Pode-se acelerar a convergência da rede, introduzindo um termo *momentum* β e deixando que os parâmetros de aprendizagem e o *momentum* diminuam com o tempo. Em (Mao & Jain 1995), utilizou-se:

$$\Delta w_{ij}(n+1) = \eta(n) x_i y_j + \beta(n) \Delta w_{ij}(n) \quad (3.31)$$

$$\Delta u_{lj}(n+1) = -\mu(n) y_l y_j + \beta(n) \Delta u_{lj}(n), \quad (3.32)$$

em que $\eta(n+1) = \max(\alpha \eta(n), 0.0001)$, $\mu(n+1) = \max(\alpha \mu(n), 0.0002)$, $\beta(n+1) = \max(\alpha \beta(n), 0.0001)$

e α é o fator de diminuição.

O seguinte teorema de convergência para essa rede foi proposto e provado por (Sanger 1989):

“Se a matriz de pesos sinápticos $\mathbf{W}(n)$ for associada a valores aleatórios no tempo $n = 0$, então, com probabilidade 1, a regra generalizada de Hebb irá convergir na média, e $\mathbf{W}^T(n)$, no limite, irá aproximar-se de uma matriz cujas colunas serão os primeiros m autovetores da matriz $\mathbf{C}$ de correlação dos vetores de entrada $\mathbf{x}(n)$, ordenados por ordem decrescente de autovalor.” Portanto, no limite, pode-se escrever:

$$\Delta \mathbf{w}_j(n) \rightarrow 0 \quad \text{e} \quad \mathbf{w}_j \rightarrow \mathbf{a}_j, \quad j = 0, 1, \dots, m-1, \quad (3.33)$$

tal que $\|\mathbf{w}_j(n)\| = 1$, para todo j . Os valores $\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{m-1}$ representam os autovetores normalizados associados aos m maiores autovalores da matriz $\mathbf{C}$ de correlação dos vetores de entrada $\mathbf{x}(n)$, estando esses autovalores ordenados em ordem decrescente.

As Tabelas 3.5 e 3.6 apresentam os autovetores encontrados pelas técnicas PCA clássica e rede PCA Adaptativa, para o bem conhecido conjunto de dados Iris, apresentado com mais detalhes no Capítulo 8. Pode-se notar, portanto, que de fato a rede PCA Adaptativa consegue aproximar os resultados obtidos pela técnica clássica.

Tabela 3.5: Resultados da PCA clássica para o conjunto de dados Iris.

Componente	Autovetores (coeficientes)			
	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$
1	0.522371	-0.263356	0.581254	0.565611
2	0.372320	0.925556	0.021094	0.065417
3	-0.721015	0.242033	0.140889	0.633804
4	-0.261998	0.124137	0.801155	-0.523543

Tabela 3.6: Resultados da rede PCA Adaptativa para o conjunto de dados Iris.

Componente	Autovetores (coeficientes)			
	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$
1	0.522249	-0.269216	0.580671	0.563560
2	0.383352	0.920919	0.026521	0.065160
3	-0.723120	0.238417	0.141955	0.632538
4	-0.269590	0.118567	0.800430	-0.524957

Aplicações da PCA em Análise de Imagens

A técnica PCA tem sido bastante utilizada em aplicações na área de análise de imagens, como no reconhecimento de faces humanas (Moghaddam & Pentland 1996), (Martínez 2000), reconhecimento de objetos (Murase & Nayar 1995), aplicações de robótica industrial (Nayar, Nene & Murase 1995) e robótica móvel (Weng 1996).

Em experimentos preliminares realizados neste trabalho (Oliveira, Romero, Mazucheli & Nonato 2000), foi avaliado o desempenho da rede PCA Adaptativa, apresentada na seção 3.3.3, na tarefa de compressão de um conjunto de imagens médicas composto por 208 imagens com dimensão 480x640, nas quais cada pixel é representado por 8 bits contendo o seu correspondente valor de nível de cinza. Tais imagens representam cortes de um fígado humano e foram tomadas a partir de um microscópio laser, pelo Departamento de Patologia da Fiocruz (Fundação Oswaldo Cruz - Rio de Janeiro).

Foi realizado, nesse trabalho, um estudo comparativo entre os desempenhos da Rede PCA Adaptativa, da PCA clássica e do padrão JPEG ⁴ (Nelson 1992), que é o mais utilizado para a compressão de imagens de vários tipos. Medindo-se os Erros Quadráticos Médios (MSE)⁵ entre as imagens originais e as recuperadas, para taxas de compressão de 93% e 96% (aproximadamente), pode-se notar que, de fato, os resultados obtidos pela rede PCA Adaptativa aproximam-se daqueles atingidos pela abordagem clássica, sendo, ainda, melhores do que os resultados conseguidos através da aplicação do método JPEG, como pode ser visto na Tabela 3.7.

Uma das vantagens da abordagem que utiliza a rede neural PCA é que este método não necessita calcular a matriz de covariância e seus respectivos autovalores e autovetores. Computando-se somente operações de soma e multiplicações de matrizes, consegue-se atingir resultados bem próximos dos encontrados pela PCA clássica.

Com o objetivo de comprovar a habilidade da rede neural para aprender e adaptar-se aos dados a esta apresentados, foram realizados alguns testes, considerando as imagens do conjunto como uma sequência e aproveitando o aprendizado obtido pela compressão de uma imagem para a compressão da imagem subsequente. Os resultados desse teste mostraram que, de fato, o tempo necessário para a convergência da Rede PCA Adaptativa diminui à medida que esta é inicializada com os pesos utilizados para o treinamento da imagem anterior.

Além disso, foi observado que a compressão JPEG (ver Figura 3.5 (c)) fez com que as imagens recuperadas apresentassem alguns padrões, o que dificulta a análise da imagem

⁴do original, em inglês, Joint Photographic Expert Group.

⁵do original, em inglês, Mean-Square Error.

e a visualização de pequenos objetos. Já nas imagens recuperadas pelas duas metodologias que implementam a PCA, (ver Figuras 3.5 (d) e (e)) a maioria dessas pequenas estruturas é preservada, o que é importante para análises de imagens de fígado, uma vez que a presença desses pequenos objetos pode indicar algum tipo de doença.

Tabela 3.7: Resultados de compressão para o JPEG, PCA clássica e rede PCA.

	MSE					
	JPEG		Rede PCA		PCA Clássica	
	96 %	93 %	96.875%	93.75%	96.875%	93.75%
Imagem 1	9.72	7.01	5.82	4.91	5.43	4.69
Imagem 2	9.97	7.58	6.75	5.49	6.17	5.17
Imagem 3	8.91	6.44	5.20	4.08	4.64	3.77
Imagem 4	9.30	6.72	5.80	4.36	5.18	4.07
Imagem 5	9.47	6.76	6.08	4.50	5.30	4.16
Imagem 6	8.90	6.44	5.19	4.00	4.64	3.75
Imagem 7	9.04	6.51	5.41	3.96	4.81	3.74
Imagem 8	8.99	6.48	5.39	4.06	4.79	3.81
Imagem 9	8.93	6.40	5.32	3.92	4.66	3.68
Imagem 10	9.47	6.63	5.61	4.22	5.01	3.97

3.4 Considerações Finais

Neste capítulo, foram apresentadas, primeiramente, duas técnicas de análise multivariada, denominadas PCA e técnicas de agrupamentos (*Clustering*). A compreensão da técnica PCA é de fundamental importância para o entendimento do método ICA, que será apresentado no próximo capítulo. Dessa forma, foram feitas considerações a respeito dos fundamentos e procedimentos relacionados à PCA. Além disso, foi descrito como esse método pode ser aplicado para reduzir a dimensionalidade de um conjunto de dados.

A outra técnica de análise multivariada discutida neste capítulo diz respeito a técnicas de agrupamentos (*Clustering*). O algoritmo *k*-médias implementa um método auto-organizável básico para encontrar agrupamentos em um conjunto de dados. Esse algoritmo também foi apresentado neste capítulo e será utilizado nas análises comparativas realizadas no Capítulo 8.

Além disso, foram ressaltados alguns fundamentos e paradigmas de aprendizado inerentes a modelos de redes neurais artificiais. Um enfoque especial foi dado a duas redes auto-

Figura 3.5: Resultados obtidos pelas técnicas de compressão. (a) imagem original, (b) uma região destacada da imagem original. (c) JPEG, (d) PCA clássica e (e) rede PCA.

organizáveis que implementam as técnicas PCA e de agrupamento. O primeiro modelo descrito refere-se à rede neural Fuzzy ART, que utiliza um algoritmo de aprendizado competitivo e incremental. Tal modelo integra conceitos da Teoria da Ressonância Adaptativa e fundamentos da lógica nebulosa (*fuzzy*), tendo sido aplicada nos experimentos para segmentação de imagens apresentados no Capítulo 8. Todavia, em estudos encontrados na literatura, verificou-se que este modelo de rede neural é sensível a ruídos, dentre outras limitações também apontadas neste capítulo.

Com o intuito de amenizar os efeitos causados pela presença de ruídos nos resultados de segmentação obtidos pela rede Fuzzy ART, foi proposta no presente trabalho uma metodologia de pré-processamento que será descrita no Capítulo 5 e que combina uma técnica para redução de ruídos baseada em ICA e o operador de Sobel para detecção de arestas. Os resultados da utilização dessa metodologia aplicada a tarefas de segmentação pela rede Fuzzy ART podem ser vistos no Capítulo 8.

O outro modelo de rede neural auto-organizável apresentado neste capítulo diz respeito à rede neural PCA Adaptativa. Esse modelo foi aplicado para encontrar os autovetores do conjunto de dados Iris e os resultados desses experimentos demonstraram como a rede PCA pode de fato aproximar os resultados do método estatístico clássico. Essa rede também foi utilizada em experimentos com imagens ao longo do presente trabalho. Neste caso, os resultados obtidos por essa rede na tarefa de compressão/descompressão de imagens médicas superaram os resultados obtidos pelo padrão de compressão JPEG.

Capítulo 4

Análise de Componentes Independentes

4.1 Considerações Iniciais

Nos últimos anos, a técnica da Análise de Componentes Independentes (ICA) tem sido bastante aplicada em várias áreas da ciência, devido ao fato de que esse método explora estatísticas de ordem mais altas em um conjunto de dados (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001), (Comon 1994), (Bell & Sejnowski 1995). Como será visto neste capítulo, o método ICA tem sido utilizado com sucesso na análise de dados, processamento de sinais e modelagem de funções cerebrais relacionadas à visão (Bell & Sejnowski 1997).

De fato, a técnica ICA é uma generalização da Análise de Componentes Principais (PCA), uma vez que o método ICA transforma linearmente as variáveis originais em componentes independentes, ao invés de somente não correlacionadas, como no caso da PCA.

Neste capítulo, descreve-se o método ICA, juntamente com as suas aplicações, suposições, restrições e ambiguidades. Além disso, são apresentadas várias abordagens para realização da ICA e as relações entre as mesmas.

O entendimento da ICA é de fundamental importância para a compreensão do método *Sparse Code Shrinkage* para redução de ruídos, que será apresentado no Capítulo 5 e do modelo ICAMM para classificação não supervisionada, descrito no Capítulo 6.

4.2 Motivação

Uma motivação bastante utilizada para ilustrar o funcionamento do método ICA é considerar uma situação na qual existem vários sinais emitidos por fontes ou objetos físicos diferentes (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001). Tais fontes poderiam ser, por exemplo, diferentes áreas do cérebro emitindo sinais elétricos; pessoas conversando em um ambiente e emitindo, portanto, sinais de fala; ou telefones móveis emitindo ondas de rádio. Deve-se assumir, ainda, que existem vários sensores ou receptores. Esses sensores estão em diferentes posições, de modo que cada sinal registrado é uma soma ponderada (isto é, uma combinação linear) dos diferentes sinais de fontes originais.

Como exemplo, pode-se imaginar a seguinte situação: dois interlocutores estão conversando em um ambiente no qual estão instalados dois microfones em diferentes localizações. Os microfones 1 e 2 fornecem sinais registrados em instantes de tempo e que poderiam ser denotados por $x_1(t)$ e $x_2(t)$, respectivamente. Neste caso, x_1 e x_2 são as amplitudes do sinal e t o instante de tempo. Cada um desses sinais registrados é uma soma ponderada dos sinais de fala $s_1(t)$ e $s_2(t)$ emitidos pelos dois interlocutores. Dessa forma, os sinais $x_1(t)$ e $x_2(t)$ podem ser expressos pelas seguintes equações lineares:

$$x_1(t) = a_{11}s_1(t) + a_{12}s_2(t) \quad (4.1)$$

$$x_2(t) = a_{21}s_1(t) + a_{22}s_2(t), \quad (4.2)$$

onde a_{11} , a_{12} , a_{21} e a_{22} são alguns parâmetros que dependem das distâncias entre os microfones (sensores) e os interlocutores (fontes). Assume-se que esses parâmetros são desconhecidos, uma vez que não é possível saber o valor de $a_{ij}(i, j = 1, 2)$, sem conhecer todas as propriedades do sistema físico, o que, em geral, é uma tarefa difícil. O objetivo é, nesse caso, estimar os dois sinais originais $s_1(t)$ e $s_2(t)$, usando somente os sinais registrados $x_1(t)$ e $x_2(t)$. Esse problema específico é referenciado na literatura como problema do *cocktail party*, ou, de forma mais geral, problema da separação cega de sinais de fontes (BSS)¹.

Para ilustrar esse problema, pode-se considerar as formas de ondas das Figuras 4.1 e 4.2 (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001), apesar destas não corresponderem a sinais realistas. Os sinais originais $s_1(t)$ e $s_2(t)$ poderiam se apresentar como na Figura 4.1 e os sinais misturados $x_1(t)$ e $x_2(t)$ poderiam ser como aqueles vistos na Figura 4.2. O problema resume-se, então, a recuperar os dados da Figura 4.1 usando somente os dados presentes na Figura 4.2.

¹do original, em inglês. Blind Source Separation.

Figura 4.1: Exemplo de sinais originais.

Figura 4.2: Exemplos de misturas de sinais observadas.

Uma abordagem para solucionar esse problema seria utilizar alguma informação sobre as propriedades estatísticas dos sinais $s_i(t)$ para estimar os parâmetros a_{ij} . No caso da ICA, é suficiente assumir que $s_1(t)$ e $s_2(t)$, em qualquer instante t , são estatisticamente independentes. Essa suposição não é realista em muitos casos, e não é necessário que seja exatamente verdadeira na prática (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001). A técnica ICA pode ser utilizada para estimar os parâmetros a_{ij} , baseando-se na informação de independência, o que permite separar os dois sinais de fontes originais $s_1(t)$ e $s_2(t)$ a partir de suas misturas $x_1(t)$ e $x_2(t)$. A Figura 4.3 (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001) fornece os dois sinais estimados pelo método ICA. Como pode ser visto, estes sinais estão muito próximos dos sinais de fontes originais (a inversão dos sinais não é importante nesse caso).

Figura 4.3: As estimativas dos sinais de fontes originais, calculadas usando somente os sinais observados na Figura 4.2.

4.3 ICA em Algumas Aplicações Reais

Uma aplicação real importante da ICA diz respeito à análise de registros de atividades cerebrais, como por exemplo, registros dados por eletroencefalograma (EEG) e magnetoencefalograma (MEG). Esses dados consistem em registros de potenciais elétricos ou magnéticos medidos em diferentes localizações do escalpo² ou do cérebro. Neste caso, pode-se assumir que os dados são gerados pela mistura de componentes relativas a atividades cerebrais e musculares. Essa situação é bem similar ao problema do *cocktail party*: deseja-se encontrar as componentes originais da atividade cerebral, mas somente é possível observar as misturas de componentes. A ICA pode, então, revelar informações interessantes sobre a atividade cerebral, utilizando as componentes independentes encontradas pelo método. Dentre vários trabalhos relevantes envolvendo ICA e esse tipo de aplicação, pode-se citar (Makeig, Jung, Bell, Ghahramani & Sejnowski 1997), (Vigário, Särelä, Jousmäki, Hämmäläinen & Oja 2000) e (Jung, Makeig, McKeown, Bell, Lee & Sejnowski 2001).

Também nas ciências sociais, a ICA tem sido considerada uma ferramenta importante para a descoberta de fatores independentes, por exemplo, em problemas de econometria (Back & Weigend 1997), (Oja, Kiviluoto & Mäläroui 2000).

Uma outra aplicação importante da ICA refere-se à utilização desta técnica como método para extração de características relevantes em um conjunto de dados. As características encontradas nesse tipo de aplicação da ICA podem ser usadas para representar imagens (Bell & Sejnowski 1997), (Hyvärinen, Oja, Hoyer & Hurri 1998), (Olshausen & Field 1996), dados de áudio (Bell & Sejnowski 1996) e outros tipos de dados em tarefas como compressão e supressão de ruídos.

4.4 Definição da Técnica ICA

Para definir rigorosamente a técnica ICA (Comon 1994), (Jutten & Herault 1991), pode-se utilizar o modelo estatístico de variáveis latentes, que são variáveis que não podem ser diretamente observadas. Assume-se que são observadas n variáveis aleatórias $x_1, x_2, \dots, x_n$ modeladas como combinações lineares de n variáveis aleatórias latentes $s_1, s_2, \dots, s_n$:

$$x_i = a_{i1}s_1 + a_{i2}s_2 + \dots + a_{in}s_n, \quad \text{para todo } i = 1, \dots, n, \quad (4.3)$$

onde $a_{i,j}, i, j = 1, \dots, n$ são alguns coeficientes reais. Por definição, as variáveis s_i são estatisti-

²Pele que cobre o topo da cabeça humana.

caamente mutuamente independentes.

O modelo ICA é, portanto, um modelo generativo, isto é, que descreve como os dados são gerados por um processo de mistura das variáveis s_j , denominadas de componentes independentes. Os únicos termos observáveis no modelo ICA são as variáveis aleatórias x_i , uma vez que as variáveis s_j são latentes e os coeficientes a_{ij} são desconhecidos. Portanto, tanto as componentes independentes s_j quanto os coeficientes a_{ij} devem ser estimados utilizando somente os valores observados das variáveis aleatórias x_i .

O índice relativo ao instante de tempo t foi omitido na Equação(4.3), uma vez que, no modelo ICA, assume-se que cada mistura x_i , assim como cada componente independente s_j , são variáveis aleatórias, deixando de ser consideradas como sinais em um determinado instante de tempo.

Utilizando a notação vetorial, denota-se por $\mathbf{x}$ o vetor aleatório cujos elementos são as combinações lineares $x_1, x_2, \dots, x_n$, e por $\mathbf{s}$ o vetor aleatório com os elementos $s_1, s_2, \dots, s_n$ e por $\mathbf{A}$ a matriz com os coeficientes a_{ij} . Nesse caso, convencionou-se que todos os vetores do modelo são vetores-coluna; portanto $\mathbf{x}^T$, o vetor transposto de $\mathbf{x}$, é um vetor-linha.

Dessa forma, na notação vetorial, o modelo ICA pode ser escrito como:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s} \quad (4.4)$$

ou, de forma equivalente,

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i s_i \quad (4.5)$$

onde os vetores $\mathbf{a}_i$ são as colunas da matriz $\mathbf{A}$.

No decorrer deste trabalho, assume-se que o número de vetores observados é igual ao número de sinais de fontes, embora em várias aplicações seja mais realístico assumir que esses números sejam diferentes (ver, por exemplo, (Olshausen & Field 1997), (Lewicki & Sejnowski 2000)).

4.5 Suposições e Restrições da ICA

Para assegurar que o modelo ICA básico apresentado na Seção(4.4) possa ser estimado, algumas suposições e restrições, enumeradas a seguir, são necessárias.

1. Deve-se assumir que as componentes independentes s_j são estatisticamente independentes. Esse princípio é a base da ICA.

2. As componentes independentes devem apresentar distribuições não gaussianas.

Os cumulantes de alta ordem são iguais a zero para distribuições gaussianas, porém informações de ordem mais alta são essenciais para a estimação do modelo ICA (ver seções 7.4 e 7.5 em (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001)). Portanto, o procedimento para a técnica ICA fica praticamente impossível se as variáveis observadas tiverem distribuições gaussianas.

Uma medida de não normalidade frequentemente utilizada na estimação ICA é a medida de kurtosis, dada pela seguinte equação:

$$kurt(y) = E\{y^4\} - 3, \quad (4.6)$$

onde y é uma variável aleatória. Uma variável gaussiana apresenta um valor de kurtosis igual a zero. Variáveis com kurtosis positivas possuem uma distribuição supergaussiana, como é o caso da distribuição de Laplace (ou dupla exponencial). Já um valor de kurtosis negativo implica em uma distribuição subgaussiana, como no caso da distribuição uniforme. Exemplos dessas distribuições podem ser vistos na Figura (4.4).

Figura 4.4: Exemplos de funções de densidade de probabilidade supergaussianas e subgaussianas. Linha sólida: densidade Laplaciana. Linha tracejada: densidade moderadamente supergaussiana. Linha pontilhada-tracejada: densidade fortemente supergaussiana. Linha pontilhada: densidade gaussiana.

3. Para simplificar o modelo, pode-se assumir que a matriz de coeficientes $\mathbf{A}$ é quadrada.

Em outras palavras, o número de componentes independentes é igual ao número de variáveis observadas. Embora, em alguns casos, essa suposição possa ser relaxada (ver, por exemplo, (Olshausen & Field 1997), (Lewicki & Sejnowski 2000)), é muito importante considerá-la, uma vez que a mesma simplifica bastante o modelo. Partindo dessa suposição, e

também assumindo que $\mathbf{A}$ é inversível, depois de estimar a matriz $\mathbf{A}$, é possível computar a sua inversa, $\mathbf{W}$, e obter as componentes independentes por meio de:

$$\mathbf{s} = \mathbf{W}\mathbf{x}. \quad (4.7)$$

Dessa forma, também deve-se assumir que a matriz de coeficientes $\mathbf{A}$ é inversível.

4. Sem perda de generalidade, pode-se assumir que as variáveis observadas e as componentes independentes possuem média igual a zero. Essa suposição é feita pois simplifica bastante a teoria e os algoritmos derivados da técnica ICA.

Se essa suposição não for verdadeira, pode-se proceder com uma etapa de pré-processamento para ICA, na qual as variáveis observadas são subtraídas da sua média amostral. Isso significa que as variáveis originais, denotadas aqui por $\mathbf{x}'$ podem ser pré-processadas utilizando-se a seguinte equação:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}' - E\{\mathbf{x}'\}, \quad (4.8)$$

Dessa forma, as componentes independentes também terão média zero, uma vez que:

$$E\{\mathbf{s}\} = \mathbf{A}^{-1}E\{\mathbf{x}\}. \quad (4.9)$$

4.6 Ambiguidades do Modelo ICA

Analisando o modelo ICA formulado na Equação (4.4), pode-se notar que as seguintes ambiguidades ou indeterminâncias precisam ser consideradas:

1. Não é possível determinar as variâncias das componentes independentes.

A razão para essa afirmação reside no fato que, uma vez que $\mathbf{s}$ e $\mathbf{A}$ são desconhecidos, qualquer multiplicador escalar α_i aplicado a uma das fontes s_i pode ser cancelado dividindo-se a coluna correspondente $\mathbf{a}_i$ de $\mathbf{A}$ pelo mesmo escalar:

$$\mathbf{x} = \sum_i \left(\frac{1}{\alpha_i} \mathbf{a}_i\right) (s_i \alpha_i). \quad (4.10)$$

Procedendo dessa forma, as magnitudes das componentes independentes podem ser facilmente restauradas. Felizmente, essa ambiguidade é insignificante na maioria das aplicações.

2. Não é possível determinar a ordem das componentes independentes, tal como acontece na técnica PCA, na qual as componentes estão ordenadas pelas suas variâncias.

Novamente devido ao fato de que $\mathbf{s}$ e $\mathbf{A}$ são desconhecidos, a ordem dos termos da somatória na Equação (4.5) pode mudar livremente, considerando qualquer uma das componentes independentes como sendo a primeira.

4.7 Não Correlação, Branqueamento e Independência

Dadas algumas variáveis aleatórias, é possível utilizar métodos lineares para transformá-las em variáveis não correlacionadas. Um processo utilizado para esse fim é denominado de branqueamento (*whitening*) e pode ser implementado utilizando-se a técnica PCA. No entanto, métodos de decorrelação de variáveis, como a PCA, não podem ser utilizados para encontrar as componentes independentes em um conjunto de dados, uma vez que não correlação não implica em independência, como discutido no Capítulo 2.

O processo de branqueamento corresponde a transformar linearmente o vetor de dados observados $\mathbf{x}$, multiplicando-o por alguma matriz $\mathbf{V}$:

$$\mathbf{z} = \mathbf{V}\mathbf{x}, \quad (4.11)$$

de modo a obter um novo vetor $\mathbf{z}$ que seja branco.

Uma vez que a operação de branqueamento consiste essencialmente em uma operação de decorrelação seguida de uma mudança de escala, a técnica PCA pode ser usada para esse propósito.

Seja $\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1 \dots \mathbf{e}_n)$ a matriz cujas colunas são os autovetores com norma unitária da matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = E\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T\}$. Esses autovetores podem ser computados a partir de uma amostra dos vetores $\mathbf{x}$ por meio de métodos estatísticos clássicos (ver, por exemplo, (Johnson & Wichern 1998)), ou utilizando algum algoritmo de aprendizagem para PCA (ver, por exemplo, (Diamantaras & Kung 1996) e (Oliveira 1997)).

Seja $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1 \dots d_n)$ a matriz diagonal com os autovalores de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$. Então uma transformação linear de branqueamento pode ser dada por:

$$\mathbf{V} = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{E}^T, \quad (4.12)$$

uma vez que os elementos de $\mathbf{D}$ correspondem às variâncias das componentes originais $\mathbf{x}$ e os vetores de $\mathbf{E}$ fornecem as bases para o novo subespaço no qual as componentes são não

correlacionadas.

Além do operador linear $\mathbf{V}$ da Equação(4.12), qualquer matriz $\mathbf{UV}$, com $\mathbf{U}$ sendo uma matriz ortogonal, também é uma matriz de branqueamento. Uma instância importante de $\mathbf{UV}$ é a matriz $\mathbf{ED}^{-1/2}\mathbf{E}^T$, que foi obtida multiplicando-se a matriz $\mathbf{V}$ da Equação(4.12), pela esquerda, pela matriz ortogonal $\mathbf{E}$. A matriz resultante dessa operação é a matriz inversa da raiz quadrada de $\mathbf{C}_x$, denotada por $\mathbf{C}_x^{-1/2}$, o que simplifica os cálculos envolvidos no processo de branqueamento.

4.8 Abordagem ICA baseada na Teoria da Informação

Nos trabalhos pioneiros sobre componentes independentes, o estudo da separação de sinais de fontes misturados e observados em um vetor de sinais de sensores era considerado um problema clássico de processamento de sinais de difícil solução. Num trabalho importante de separação cega de fontes (BSS), Herault e Jutten (Herault & Jutten 1986) introduziram um algoritmo adaptativo em uma arquitetura simples, com feedback, capaz de separar várias fontes independentes desconhecidas. Essa abordagem foi posteriormente pesquisada por Jutten e Herault (Jutten & Herault 1991). Karhunen e Joutsensalo (Karhunen & Joutsensalo 1994) e Cichocki et al. (Cichocki, Unbehauen & Rummert 1994). Comon (Comon 1994) introduziu o conceito de Análise de Componentes Independentes e propôs funções de custo relacionadas à aproximação da minimização da informação mútua entre os sensores.

Em paralelo aos estudos envolvendo o problema de BSS, regras de aprendizado não supervisionado baseadas na teoria da informação foram propostas por Linsker (Linsker 1992). A meta era maximizar a informação mútua entre as entradas e saídas de uma rede neural. Essa abordagem está relacionada ao princípio da redução de redundância sugerido por Barlow (Barlow 1961) como uma estratégia para codificação em neurônios. De acordo com esse princípio, cada neurônio deveria codificar características que fossem tão estatisticamente independentes dos outros neurônios quanto possível, considerando um determinado conjunto de entradas. Roth e Baram (Roth & Baram 1996) e Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) derivaram, independentemente, regras de aprendizado por gradiente estocásticas para essa maximização e aplicaram-nas, respectivamente, à previsão e análise de séries temporais e à separação cega de fontes. Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) incorporaram o problema BSS a um arcabouço de teoria da informação e demonstraram a eficiência do modelo para a separação de fontes misturadas. Seus métodos são mais plausíveis a partir de uma perspectiva de processamento neural do que as funções de custo baseadas em cumulantes proposta por Comon (Comon 1994). Um

método adaptativo para BSS, similar a esse trabalho de Comon, foi proposto por Cardoso e Laheld (Cardoso 1998).

Outros algoritmos para realizar ICA foram propostos a partir de diferentes pontos de vista. Abordagens de Estimação por Máxima Verossimilhança (MLE)³ para ICA foram inicialmente propostos por Gaeta e Lacoume (Gaeta & Lacoume 1990) e elaborados por Pearlmutter e Parra (Pearlmutter & Parra 1996). Algoritmos de PCA não linear, que foram desenvolvidos por Karhunen e Joutsensalo (Karhunen & Joutsensalo 1994), Xu (Xu 1993) e Oja (Oja 1997), também podem ser vistos a partir do princípio de maximização da informação (também chamado de *infomax*), uma vez que estes algoritmos aproximadamente minimizam a informação mútua nas saídas da rede.

A seguir, será demonstrado como uma abordagem para ICA pode ser formulada em um arcabouço para o problema de separação de fontes, baseando-se em conceitos da teoria da informação.

4.8.1 Formulação do Problema ICA Utilizando Conceitos de Teoria de Informação

Inicialmente, assume-se que existe um vetor M -dimensional com média zero $\mathbf{s}(t) = [s_1(t), \dots, s_M(t)]^T$, cujos componentes são mutuamente independentes. O vetor $\mathbf{s}(t)$ corresponde aos M sinais de fontes independentes $s_i(t)$ com valores escalares. Dessa forma, pode-se escrever a fdp multivariada do vetor $\mathbf{s}(t)$ como o produto das distribuições marginais independentes:

$$p(\mathbf{s}(t)) = \prod_{i=1}^M p_i(s_i(t)). \quad (4.13)$$

Um vetor de dados $\mathbf{x}(t) = [x_1(t), \dots, x_N(t)]^T$ é observado a cada instante de tempo t , tal que:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{A}\mathbf{s}(t), \quad (4.14)$$

onde $\mathbf{A}$ é uma matriz escalar $N \times M$. Como as componentes x_i dos vetores observados não são consideradas como sendo independentes, a fdp multivariada $p(\mathbf{x})$ não irá satisfazer a igualdade de produto na Equação (4.13). A informação mútua $I(\mathbf{x})$ do vetor observado é dada pela medida de divergência $D(\cdot, \cdot)$ de Kullback-Leibler (KL) entre a densidade multivariada $p(\mathbf{x})$ e a densidade escrita na forma de produto:

³do original, em inglês. Maximum Likelihood Estimation.

$$I(\mathbf{x}) = D\left(p(\mathbf{x}) \parallel \prod_{i=1}^N p_i(x_i)\right) = \int p(\mathbf{x}) \log \frac{p(\mathbf{x})}{\prod_{i=1}^N p_i(x_i)} d\mathbf{x}. \quad (4.15)$$

A informação mútua é sempre positiva e é igual a zero somente quando as componentes x_i são independentes (Cover & Thomas 1991). Portanto, nessa abordagem, a informação mútua dos dados observados é utilizada como uma medida de dependência a ser minimizada.

A meta da ICA é encontrar uma transformação linear $\mathbf{W}$ dos sinais de sensores dependentes $\mathbf{x}$ que torne as saídas $\mathbf{u}$ tão independentes quanto possível:

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{W}\mathbf{x}_t = \mathbf{W}\mathbf{A}\mathbf{s}_t, \quad (4.16)$$

onde $\mathbf{u}$ é uma estimativa das fontes originais. As fontes são recuperadas de forma exata quando $\mathbf{W}$ é a inversa de $\mathbf{A}$. Todavia, existem ambiguidades nesse problema (ver Seção (4.6)) e a matriz $\mathbf{A}^{-1}$ geralmente não pode ser determinada na sua forma exata. O que pode ser feito é estimar uma versão rescalonada e permutada dos M sinais de fontes, uma vez que não é possível conhecer a magnitude e a ordem desses sinais.

Para a estimação da matriz $\mathbf{W}$ pela abordagem infomax, além das suposições e restrições da ICA apresentadas na Seção(4.5), deve-se supor a ausência de ruídos de sensores, ou no máximo a existência de sinais com poucos ruídos aditivos. Essa suposição é necessária para satisfazer a condição de maximização de informação, que estabelece que a informação mútua entre as saídas somente é minimizada no caso de pouco ruído (Linsker 1992), (Nadal & Parga 1994).

4.8.2 Abordagem Infomax para ICA

Considerando um processador neural com entradas $\mathbf{x}$ e saídas $\mathbf{y}$, Nadal e Parga (Nadal & Parga 1994) mostraram que a maximização da transferência de informação em uma rede neural não linear minimiza a informação mútua entre as saídas quando a otimização é aplicada aos pesos sinápticos $\mathbf{W}$ e à função de transferência não linear $g(\mathbf{u})$. Roth e Baram (Roth & Baram 1996) e Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) derivaram, independentemente, regras de aprendizado por gradiente para resolver esse problema de maximização, e aplicaram-nas, respectivamente, para previsão e análise de séries temporais e separação cega de fontes. Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) propuseram um algoritmo de aprendizado simples para uma rede neural *feedforward* que separa cegamente misturas lineares $\mathbf{x}$ de fontes independentes $\mathbf{s}$, utilizando o princípio de maximização de informação. Eles mostraram que maximizar a entropia conjunta $H(\mathbf{y})$ da saída de um processador neural pode aproximadamente minimizar a informação mútua entre as componentes de saída $y_i = g(u_i)$, onde $g(u_i)$ é uma não linearidade

monotônica inversível, ou seja, possui uma única função inversa $g^{-1}(u_i)$, e $\mathbf{u} = \mathbf{W}\mathbf{x}$.

A entropia conjunta das saídas de uma rede neural é dada por:

$$H(y_1, \dots, y_N) = H(y_1) + \dots + H(y_N) - I(y_1, \dots, y_N), \quad (4.17)$$

onde $H(y_i)$ são as entropias marginais das saídas e $I(y_1, \dots, y_N)$ é a informação mútua dessas saídas. Maximizar $H(y_1, \dots, y_N)$ consiste, portanto, em maximizar as entropias marginais e minimizar a informação mútua $I(\mathbf{y})$.

Esse problema é, ainda, equivalente à maximizar a informação mútua $I(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ que as saídas $\mathbf{y}$ de uma rede neural possuem sobre as suas entradas $\mathbf{x}$. Essa medida pode ser definida como:

$$I(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = H(\mathbf{y}) - H(\mathbf{y}|\mathbf{x}), \quad (4.18)$$

onde $H(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ é a entropia da saída que não tenha advindo da entradas $\mathbf{x}$. No caso de ausência de ruído (ou melhor, quando não se sabe o que é ruído e o que é sinal na entrada), o mapeamento entre $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é determinístico e $H(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ possui um valor muito pequeno, podendo, portanto, ser desprezado no processo de maximização.

As saídas $\mathbf{y}$ são variáveis aleatórias de amplitude limitada e, portanto, as entropias marginais $H(y_i)$ atingem seus valores máximos quando as distribuições de y_i forem uniformes. Maximizar a entropia conjunta também irá diminuir $I(y_1, \dots, y_N)$, uma vez que a informação mútua é sempre positiva. Para $I(y_1, \dots, y_N) = 0$, a entropia conjunta é a soma das entropias marginais:

$$H(y_1, \dots, y_N) = H(y_1) + \dots + H(y_N). \quad (4.19)$$

Dessa forma, o valor máximo para $H(y_1, \dots, y_N)$ é atingido quando a informação mútua entre as variáveis aleatórias $y_1, \dots, y_N$ for igual a zero e suas distribuições marginais forem uniformes.

Nessa abordagem, os pesos sinápticos $\mathbf{W}$ são determinados maximizando-se a entropia conjunta em relação a $\mathbf{W}$. Nesse caso, a derivada da Equação (4.17) em relação a $\mathbf{W}$ pode ser escrita em termos da divergência KL entre a distribuição uniforme multivariada, denotada por $p_1(\mathbf{y})$, e a estimativa da distribuição multivariada $p(\mathbf{y})$:

$$\frac{\partial H(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{W}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} (-D(p_1(\mathbf{y})||p(\mathbf{y}))). \quad (4.20)$$

No limite, quando a função de transferência $g(u_i)$ e $\mathbf{W}$ são otimizados, a entropia conjunta $H(\mathbf{y})$ é máxima, e $p(\mathbf{y}) = p_1(\mathbf{y})$, de modo que $I(\mathbf{y}) = 0$. Se $g(u_i)$ for um mapeamento inversível de u_i para y_i , a divergência KL na Equação (4.20) é igual à divergência KL entre as estimativas da

distribuição de fontes $p(\mathbf{u})$ e da distribuição das fontes verdadeiras $p(\mathbf{s})$,

$$D(p_1(\mathbf{y})||p(\mathbf{y})) = D(p(\mathbf{s})||p(\mathbf{u})), \quad (4.21)$$

uma vez que a divergência KL é invariante para qualquer transformação inversível.

Se a informação mútua entre as saídas for igual à zero, ou seja, $I(y_1, \dots, y_N) = 0$, a informação mútua antes de aplicar a não linearidade, $I(u_1, \dots, u_N)$, também deve ser igual à zero. Isso ocorre porque a função não linear $g(u_i)$ não introduz quaisquer dependências. Um resultado fundamental encontrado na literatura estabelece que, quando $g(u_i)$ é monotonicamente crescente ou decrescente (isto é, possui uma única função inversa $g^{-1}(u_i)$), a relação entre u_i e y_i é dada por (Papoulis 1991):

$$p(y_i) = \frac{p(u_i)}{\left| \frac{\partial y_i}{\partial u_i} \right|} = \frac{p(u_i)}{\left| \frac{\partial g(u_i)}{\partial u_i} \right|}. \quad (4.22)$$

Se y_i apresentar uma distribuição uniforme, segue que:

$$p(u_i) = \left| \frac{\partial g(u_i)}{\partial u_i} \right|, \quad (4.23)$$

uma vez que, nesse caso, $p(y_i)$ atinge o seu valor máximo igual a 1.

Isso significa que u_i é uma variável independente com uma distribuição que possui aproximadamente a forma da derivada da não linearidade, g . No caso da função logística, (ver Figura(4.5a)), a fdp apropriada possui a forma apresentada na Figura(4.5b). Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) realizaram a separação de misturas de vários sinais de fala e música utilizando a abordagem infomax com função de transferência logística, também chamada de função sigmóide.

Uma arquitetura simples que pode realizar o mapeamento de $\mathbf{x}$ para $\mathbf{y}$ consiste em uma rede neural *feedforward* com uma única camada e uma função de ativação de saída não linear $y_i = g(u_i)$. A escolha dessa não linearidade é essencial para que a minimização da informação mútua realize a técnica ICA. Como proposto em (Bell & Sejnowski 1995) e apresentado a seguir, as regras de aprendizado para ICA podem ser derivadas por meio da maximização da entropia de saída $H(\mathbf{y})$ de um processador neural.

Figura 4.5: (a) A função logística ($y = 1/(1 + \exp(-x))$) e (b) sua derivada ($\frac{\partial y}{\partial x} = y(1 - y)$).

4.8.3 Regras de Aprendizado ICA para uma Rede Neural com uma Entrada e uma Saída

Quando uma única entrada x passa por uma função de transferência $g(x)$ para resultar em uma variável de saída y , a entropia da saída, $H(y)$ é maximizada, alinhando-se as partes de alta densidade da fdp de x com as partes de alta inclinação da função $g(x)$ (ver, como ilustração, a Figura(4.5)).

Adaptando a Equação(4.22) para esse caso, tem-se que:

$$p_y(y) = \frac{p_x(x)}{\left| \frac{\partial y}{\partial x} \right|}. \quad (4.24)$$

A entropia da saída é dada por:

$$H(y) = -E\{\ln p_y(y)\}. \quad (4.25)$$

Substituindo a Equação(4.24) na Equação(4.25), tem-se que:

$$H(y) = E \left\{ \ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right\} - E \{ \ln p_x(x) \}. \quad (4.26)$$

O segundo termo à direita da Equação(4.26) refere-se à entropia de x , podendo-se, portanto, considerar que o mesmo não é afetado pelas alterações no parâmetro w que determinam $g(x)$. Dessa forma, para maximizar a entropia de y , por meio de mudanças aplicadas à w , é necessário concentrar-se apenas na maximização do primeiro termo da Equação(4.26), que corresponde ao valor esperado do logaritmo do quanto a entrada x afeta a saída y . Isso pode ser realizado considerando-se um conjunto de treinamento de entradas x para aproximar a densidade $p_x(x)$, e derivando-se uma regra de aprendizado por subida de gradiente, da seguinte forma:

$$\Delta w \propto \frac{\partial H}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \left(\ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right). \quad (4.27)$$

No caso da função logística,

$$y = \frac{1}{1 + e^{-u}}, \quad u = wx + w_0 \quad (4.28)$$

$$y' = \frac{\partial y}{\partial u} = y(1 - y) \quad (4.29)$$

e as regras de aprendizado derivadas a partir da fórmula geral dada na Equação(4.27) são as seguintes:

$$\Delta w \propto \frac{1}{w} + x(1 - 2y) \quad (4.30)$$

$$\Delta w_0 \propto 1 - 2y. \quad (4.31)$$

As derivações completas para as regras nas Equações (4.30) e (4.31) podem ser encontradas no Apêndice A.

A Figura(4.6) ilustra o efeito das regras para atualização de w e w_0 . Por exemplo, se a fdp da entrada, $p_x(x)$ for gaussiana, a regra para w_0 irá alinhar a parte mais inclinada da curva sigmóide com o pico de $p_x(x)$, casando a densidade da entrada com a curva da função y . Esse método para aproximar densidades foi inicialmente proposto em (Roth & Baram 1996). A regra para w irá, dessa forma, escalonar a inclinação da curva sigmóide para estimar a variância de $p_x(x)$. Por exemplo, uma fdp apresentando uma forma estreita iria resultar em uma sigmóide de alta inclinação.

Figura 4.6: Uma entrada x com densidade $p_x(x)$, nesse caso uma densidade normal, passa por uma função não linear $g(x)$. Como resultado, a média da entrada, $\bar{x}$, deve coincidir com o termo w_0 e a variância da entrada, σ^2 , deve coincidir com a inclinação da função $g(x)$.

Para a função tangente hiperbólica,

$$y = \tanh(u), \quad u = wx + w_0 \quad (4.32)$$

$$y' = \frac{\partial y}{\partial u} = 1 - y^2. \quad (4.33)$$

obtém-se as seguintes regras de aprendizado:

$$\Delta w \propto \frac{1}{w} - 2xy \quad (4.34)$$

$$\Delta w_0 \propto -2y. \quad (4.35)$$

As derivações completas para as regras nas Equações (4.34) e (4.35) podem ser encontradas no Apêndice A.

Pode-se observar que as regras para w , apresentadas nas Equações (4.30) e (4.34), possuem um termo anti-Hebbiano, $x(1 - 2y)$ (função logística) ou $-2xy$ (função tangente hiperbólica), e um termo anti-decaimento $1/w$. Esse termo tem o papel de evitar duas situações nas quais a saída y torna-se não informativa: (i) quando os valores de y ficam saturados em 0 ou 1 e (ii) quando w é tão pequeno que o valor de y permanece por volta de 0.5.

O efeito dessas regras é produzir uma distribuição de saída $f_y(y)$ que seja próxima à distribuição uniforme, que é a distribuição com entropia máxima para uma variável limitada

entre 0 e 1.

A seguir, será mostrado como essa abordagem pode ser adequada a uma rede neural artificial com entradas e saídas multidimensionais.

4.8.4 Regras de Aprendizado ICA para uma Rede Neural com N Entradas e N Saídas

Considere uma rede neural com um vetor de entrada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, isto é, $\mathbf{x}$ é N -dimensional, uma matriz de pesos $\mathbf{W}$, um vetor de ruído $\mathbf{w}_0$ e um vetor de saídas $\mathbf{y} = g(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{w}_0) \in \mathbb{R}^N$. De maneira análoga à Equação (4.24), é possível relacionar $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ com $p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})$ pelo determinante da matriz Jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x})$, da seguinte forma (Papoulis 1991):

$$p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = \frac{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})}{|\mathbf{J}|}, \quad (4.36)$$

onde $|\mathbf{J}|$ é o valor absoluto do determinante da matriz Jacobiana.

A derivação das regras para a adaptação de $\mathbf{W}$ e $\mathbf{w}_0$, neste caso, procede como no caso para uma entrada e uma saída, visto anteriormente. No entanto, por estar considerando vetores no espaço $\mathbb{R}^N$, ao invés de maximizar $\ln |\partial y / \partial x|$, deve-se maximizar $\ln |\mathbf{J}|$. Essa quantidade representa o logaritmo do volume de espaço em $\mathbf{y}$ no qual os pontos em $\mathbf{x}$ são mapeados. Maximizando-se essa quantidade, tenta-se espalhar de forma uniforme, o conjunto de treinamento de pontos $\mathbf{x}$ em $\mathbf{y}$.

Pode-se considerar, primeiramente, o caso de uma rede neural composta por unidades com função de ativação sigmóide, $\mathbf{y} = g(\mathbf{u})$, $\mathbf{u} = \mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{w}_0$, com g sendo a função logística $g(\mathbf{u}) = (1 + e^{-\mathbf{u}})^{-1}$. As regras de aprendizado derivadas para esse caso são similares às das Equações (4.30) e (4.31):

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{W}^T]^{-1} + (\mathbf{1} - 2\mathbf{y})\mathbf{x}^T \quad (4.37)$$

$$\Delta \mathbf{w}_0 \propto \mathbf{1} - 2\mathbf{y}. \quad (4.38)$$

No entanto, agora $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{w}_0$ e $\mathbf{1}$ são vetores $\in \mathbb{R}^N$ ($\mathbf{1}$ é um vetor no qual todos os elementos são iguais a 1), $\mathbf{W}$ é uma matriz e o termo anti-Hebbiano tornou-se um produto interno entre dois vetores. O termo anti-decaimento foi generalizado para um termo anti-redundância: a inversa da transposta da matriz de pesos. Para um peso individual, w_{ij} , essa regra equivale à:

$$\Delta w_{ij} \propto \frac{\text{cof } w_{ij}}{\det \mathbf{W}} + x_j(1 - 2y_i), \quad (4.39)$$

onde $\text{cof } w_{ij}$ é o cofator de w_{ij} .

A derivação completa para a regra em (4.37) pode ser encontrada no Apêndice A. Essa regra tem o mesmo efeito da regra para w apresentada na Equação(4.30). A exceção aqui é que, ao invés do ponto instável da dinâmica da rede ser $w = 0$, qualquer matriz $\mathbf{W}$ cujo determinante seja igual zero irá resultar em uma solução degenerada. Nesse caso, para que a rede encontre uma solução estável, as diferentes unidades y_i devem aprender a representar aspectos diferentes das entradas. Portanto, quando os vetores de pesos referentes a duas unidades de saída diferentes tornam-se muito parecidos, o determinante de $\mathbf{W}$ torna-se pequeno e a dinâmica natural do aprendizado faz com que esses dois vetores de pesos diverjam entre si. Na regra apresentada na Equação(4.39), esse efeito é atenuado pelo numerador, $\text{cof } w_{ij}$. Quando esse cofator torna-se pequeno, pode haver uma indicação de que existe uma degeneração na matriz de pesos do resto dessa camada (ou seja, aqueles pesos que não estão associados com a entrada x_j ou com a saída y_i), mostrando que, nesse caso, qualquer degeneração em $\mathbf{W}$ tem pouca relação com o peso específico w_{ij} que está sendo ajustado.

Para neurônios cujas funções de transferência sejam a função tangente hiperbólica, as seguintes regras de aprendizado são derivadas:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{W}^T]^{-1} - 2\mathbf{y}\mathbf{x}^T \quad (4.40)$$

$$\Delta \mathbf{w}_0 \propto -2\mathbf{y}. \quad (4.41)$$

Generalizando as regras de aprendizado para $\mathbf{W}$, apresentadas nas Equações (4.37) e (4.40), para qualquer função de transferência ou ativação $g(\mathbf{u})$, chega-se à seguinte equação:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{W}^T]^{-1} + \left(\frac{\frac{\partial p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}}{p(\mathbf{u})} \right) \mathbf{x}^T = [\mathbf{W}^T]^{-1} - \varphi(\mathbf{u})\mathbf{x}^T, \quad (4.42)$$

que é de fundamental importância na derivação do modelo ICAMM, que será apresentado no Capítulo 6. De fato, essa mesma regra pode ser derivada a partir de outros pontos de vista teóricos, tais como por meio das abordagens MLE (Pearlmutter & Parra 1996) e maximização da negentropia (Girolami & Fyfe 1997). Uma revisão dessas técnicas e as relações entre estas podem ser encontradas em (Lee, Girolami, Bell & Sejnowski 1998).

4.8.5 Equivalência entre Maximização de Informação e Estimação por Máxima Verossimilhança

Como dito anteriormente, no modelo ICA, as observações $\mathbf{x}$ são assumidas como sendo geradas a partir de variáveis latentes $\mathbf{s}$ por meio de um mapeamento linear $\mathbf{A}$. No caso da ausência de ruído, pode-se usar um estimador paramétrico da densidade $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ para encontrar um vetor de parâmetros $\mathbf{a}$ que minimize a diferença entre o modelo generativo $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ e a distribuição observada $p(\mathbf{x})$. Os vetores $\mathbf{a}$ são considerados os vetores de bases de $\mathbf{A}$, de modo que $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ é uma estimativa da densidade $p(\mathbf{x})$ dos vetores observados. A diferença entre a estimativa da densidade e a densidade das observações pode ser medida pela divergência KL:

$$D(p(\mathbf{x})\|\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})) = \int p(\mathbf{x}) \log \frac{p(\mathbf{x})}{\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})} d\mathbf{x} = H(\mathbf{x}) - \int p(\mathbf{x}) \log \hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a}) d\mathbf{x}. \quad (4.43)$$

onde $p(\mathbf{x})$ é a fdp das observações $\mathbf{x}$ e $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ é uma estimativa paramétrica da distribuição $p(\mathbf{x})$. A divergência $D(p(\mathbf{x})\|\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a}))$ é zero somente quando a estimativa $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ for igual à densidade das observações $p(\mathbf{x})$. Pearlmutter e Parra (Pearlmutter & Parra 1996) e Cardoso (Cardoso 1998) mostraram que as abordagens infomax e MLE são equivalentes para a ICA, como será descrito brevemente aqui.

A verossimilhança de que a amostra $\mathbf{X} = \{x_1, \dots, x_T\}$ seja geradas com uma distribuição particular $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ é:

$$\hat{p}(\mathbf{X}; \mathbf{a}) = \prod_{i=1}^T \hat{p}(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}). \quad (4.44)$$

Tomando-se o logaritmo da Equação(4.44) e dividindo a mesma pelo número de observações, resulta na log-verossimilhança normalizada, dada pela seguinte equação:

$$L(\mathbf{a}) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T \log \hat{p}(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}). \quad (4.45)$$

Uma vez que essa equação corresponde à média amostral de $\log \hat{p}(\mathbf{X}; \mathbf{a})$, esta irá convergir, pela lei dos grandes números (ver, por exemplo, (DeGroot 1987)), para a sua esperança matemática:

$$L(\mathbf{a}) = \int p(\mathbf{x}) \log \hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a}) d\mathbf{x}. \quad (4.46)$$

Fazendo $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = \frac{\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})}{p(\mathbf{x})} p(\mathbf{x})$, a equação anterior pode ser reescrita da seguinte forma:

$$L(\mathbf{a}) = \int p(\mathbf{x}) \log p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int p(\mathbf{x}) \log \frac{p(\mathbf{x})}{\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})} d\mathbf{x} \quad (4.47)$$

$$= H(\mathbf{x}) - D(p(\mathbf{x}), \hat{p}(\mathbf{x}|\mathbf{a})). \quad (4.48)$$

Uma vez que $H(\mathbf{x})$ não depende de $\mathbf{W}$, maximizar a log-verossimilhança corresponde a minimizar a divergência KL entre a densidade das observações $p(\mathbf{x})$ e a densidade estimada $\hat{p}(\mathbf{x}; \mathbf{a})$,

$$\frac{\partial L(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{W}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} D(p(\mathbf{x}) \| \hat{p}(\mathbf{x}, \mathbf{a})). \quad (4.49)$$

Dado que $\mathbf{A}$ é uma matriz inversível e a divergência KL é invariante sob uma transformação inversível, minimizar a divergência KL apresentada na Equação(4.49) equivale a minimizar a divergência entre a densidade das estimativas de fontes $p(\mathbf{u})$ e a densidade das fontes verdadeiras $p(\mathbf{s})$:

$$\frac{\partial L(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{W}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} D(p(\mathbf{s}) \| \hat{p}(\mathbf{u})). \quad (4.50)$$

Dessa forma, as Equações (4.50) e (4.20) são equivalentes para o método ICA.

4.9 Maximização da Negentropia

Uma outra maneira para estimar uma transformação ICA é por meio da maximização da negentropia dos valores de u . A definição da negentropia J é dada por:

$$J(\mathbf{u}) = H(\mathbf{u}_{gauss}) - H(\mathbf{u}), \quad (4.51)$$

onde $\mathbf{u}_{gauss}$ é um vetor aleatório gaussiano que apresenta uma matriz de covariância igual à de $\mathbf{u}$. Nesse caso, a negentropia também pode ser interpretada como uma medida de não gaussianidade (Comon 1994).

O conceito de negentropia também pode ser formulado por meio da divergência KL entre $p(\mathbf{u})$ e a distribuição $p_{gauss}(\mathbf{u})$:

$$J(\mathbf{u}) = D(p(\mathbf{u}) \| p_{gauss}(\mathbf{u})) = \int p(\mathbf{u}) \log \frac{p(\mathbf{u})}{p_{gauss}(\mathbf{u})} d\mathbf{u}, \quad (4.52)$$

onde $\mathbf{u} = \mathbf{W}\mathbf{x}$ é o vetor de fontes estimadas.

Em (Lee, Girolami, Bell & Sejnowski 1998), a negentropia das estimativas u_i foi maximizada utilizando o método do gradiente ascendente, resultando na seguinte regra de aprendizado

para $\mathbf{W}$:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{W}^T]^{-1} + \left(\frac{\partial p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right) \mathbf{x}^T = [\mathbf{W}^T]^{-1} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{x}^T, \quad (4.53)$$

Pode-se notar, portanto, que essa regra de aprendizado é equivalente à regra encontrada pela abordagem infomax (ver Equação (4.42)), e consequentemente também é equivalente à regra encontrada pela estimação por máxima verossimilhança, apresentada na Seção 4.8.5.

4.9.1 O Algoritmo FastICA

O método do gradiente ascendente, utilizado para derivar a regra de aprendizado da Equação (4.53), possui algumas limitações. Por exemplo, algoritmos que apresentam regras derivadas por esse método apresentam convergência lenta e dependem de uma boa escolha para os parâmetros de aprendizagem.

O algoritmo FastICA, que utiliza um esquema de iteração de ponto fixo (Fletcher 1980), foi desenvolvido por Hyvärinen (Hyvärinen 1999) com o objetivo de tornar o processo de estimação ICA mais rápido e confiável. Para isso, foram utilizadas aproximações da medida de negentropia, desenvolvidas em (Hyvärinen 1998). No caso mais simples, essas aproximações são da forma:

$$J(u_i) \approx [E\{g(u_i)\} - E\{g(z)\}], \quad (4.54)$$

onde a função g , denominada de função de contraste, é praticamente qualquer função não quadrática e z é uma variável gaussiana de média zero e variância unitária. A aproximação dada por essa equação fornece uma função objetivo para estimar a transformação ICA no algoritmo FastICA.

No FastICA, a derivação da regra de aprendizado para $\mathbf{w}$ (considerando cada componente independente isoladamente) utiliza uma aproximação do método de Newton. Detalhes dessa derivação podem ser encontrados em (Hyvärinen 1999) e (Hyvärinen, Karhunen & Oja 2001).

Neste caso, a regra de atualização para cada $\mathbf{w}$ é dada por:

$$\Delta \mathbf{w} = E\{\mathbf{x}g(\mathbf{w}^T \mathbf{x}) - E\{g'(\mathbf{w}^T \mathbf{x})\}\mathbf{w}\}, \quad (4.55)$$

onde g e g' são, respectivamente, a função de contraste escolhida e a sua derivada.

Em (Hyvärinen 1999), são consideradas as seguintes escolhas para a função de contraste:

$$g_1(u) = \tanh(u) \quad g'_1(u) = 1 - \tanh^2(u) \quad (4.56)$$

$$g_2(u) = u \exp(-u^2/2) \quad g'_2(u) = (1 - u^2) \exp(-u^2/2) \quad (4.57)$$

$$g_3(u) = u^3 \quad g'_3(u) = 3u^2. \quad (4.58)$$

A utilização dessas funções como funções de contraste no FastICA foram analisadas em (Hyvärinen 1999) e os benefícios das mesmas podem ser resumidos nos seguintes itens:

- g_1 é uma boa função de contraste de propósito geral.
- Quando as componentes independentes forem altamente super-gaussianas, ou quando a robustez for um fator importante a ser considerado, pode ser melhor utilizar a função g_2 .
- A utilização da função g_3 é justificada para estimar componentes independentes sub-gaussianas, na ausência de ruídos (*outliers*).

Todavia, o algoritmo FastICA funciona para praticamente qualquer distribuição das componentes independentes e para qualquer escolha da função de contraste. A preocupação com tal escolha somente é fundamental quando houver interesse em otimizar o desempenho do método.

O algoritmo FastICA, cujo código em MATLAB está disponível em <http://www.cis.hut.fi/projects/ica/fastica>, foi utilizado neste presente trabalho para estimar a transformação de variáveis originais em variáveis esparsas, necessária para a realização do método *Sparse Code Shrinkage*, que será apresentado no próximo capítulo.

4.10 Considerações Finais

Neste capítulo, o método ICA foi descrito em detalhes, juntamente com suas suposições, restrições, ambiguidades e condições necessárias à sua aplicação. Além disso, foram apresentadas várias abordagens derivadas a partir de diferentes teorias para a realização desta técnica.

Foi demonstrado que a abordagem infomax e aquela que utiliza o princípio MLE para a derivação de regras de aprendizado ICA são equivalentes. Como será visto no Capítulo 6, essas duas abordagens são consideradas na derivação do modelo ICAMM, originalmente proposto por (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000) para realizar a classificação não supervisionada em um conjunto de dados.

A abordagem ICA derivada pela maximização da negentropia também foi apresentada e discutida, juntamente com o algoritmo FastICA, que utiliza esse princípio para calcular as matrizes de transformação ICA. Esse algoritmo foi utilizado, neste trabalho, para a implementação do método *Sparse Code Shrinkage*, que será apresentado no Capítulo 5. Além disso, também foi demonstrado que a abordagem por maximização da negentropia também é equivalente às abordagens infomax e MLE para estimação ICA.

Capítulo 5

Pré-Processamento de Imagens

5.1 Considerações Iniciais

Uma imagem pode estar sujeita a ruídos e interferências advindos de várias fontes, como por exemplo, sensores elétricos, lentes fotográficas e erros em canais de transmissão. Para reduzir os efeitos desses ruídos, várias técnicas lineares e não lineares foram propostas e estão disponíveis na literatura (ver, por exemplo, (Gonzalez & Woods 1992) e (Pratt 2001)).

Dentre as técnicas lineares para redução de ruídos, destaca-se, por exemplo, a técnica de filtragem no domínio de Fourier (Nathan 1970). Com o objetivo de preservar alguns detalhes de imagens perdidos pela suavização excessiva realizada pelas técnicas lineares, foram propostos, mais recentemente, métodos de redução de ruídos que utilizam operadores não lineares. Dentre as técnicas não lineares mais utilizadas, destacam-se a técnica de filtragem por mediana (Nodes & Gallagher 1982) e o método para redução de ruídos baseado em *wavelets* (Walker 1999).

Uma outra técnica não linear para redução de ruídos desenvolvida recentemente é o método *Sparse Code Shrinkage*, o qual tem sido utilizado com sucesso, estabelecendo-se como uma técnica promissora para esse tipo de aplicação (Lu & Liao 2000) (Szatmáry, Szirtes & Lörincz 2003). A principal vantagem desse método em relação a outras técnicas não lineares é que este está relacionado ao método de estimação ICA, adequado para detectar estruturas importantes em dados de imagens (Bell & Sejnowski 1997).

Além de ser aplicado para redução de ruídos, observou-se, no presente trabalho, que o método SCS, assim como outras técnicas desenvolvidas para essa finalidade, também pode funcionar como um filtro de suavização para o borramento e remoção de pequenos detalhes de uma imagem antes da extração de objetos maiores. Com isso, regiões de interesse a serem destacadas podem se tornar mais homogêneas, facilitando o processo de segmentação. No entanto, um efeito

indesejado causado por esse tipo de técnica é que, eventualmente, características importantes da imagem, como as bordas dos objetos, também podem ser borradas, prejudicando o processo de segmentação.

Neste capítulo, é proposta uma metodologia para pré-processamento de imagens, objetivando amenizar o problema da presença de ruídos e suavizar a imagem, sem comprometer, no entanto, características importantes, como os contornos dos objetos a serem destacados no processo de segmentação.

Mais precisamente, a metodologia de pré-processamento proposta neste trabalho envolve duas principais etapas. No primeiro estágio, o método SCS é aplicado para reduzir o ruído na imagem original, funcionando também como um filtro de suavização para o borramento de pequenos detalhes na imagem. Logo após, uma imagem resultante da aplicação do operador de Sobel (Gonzalez & Woods 1992) à imagem original é combinada com a imagem processada pelo método SCS. A seguir, esses dois métodos serão descritos, assim como um maior detalhamento das etapas envolvidas na aplicação da metodologia.

5.2 Método *Sparse Code Shrinkage* para Redução de Ruídos em Imagens

Sparse Coding (Barlow 1994), (Field 1994), (Olshausen & Field 1996) é um método originalmente desenvolvido para encontrar uma representação de rede neural para dados multidimensionais na qual somente poucos neurônios são significativamente ativados ao mesmo tempo. De forma equivalente, isso significa que um determinado neurônio raramente é ativado. Denota-se por $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ o vetor aleatório observado n -dimensional, que é dado como entrada para uma rede neural e por $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_n)^T$ o vetor de variáveis transformadas, que são as n saídas lineares da rede. Denotando-se ainda os vetores de pesos dos neurônios por $\mathbf{w}_i, i = 1, \dots, n$ e por $\mathbf{W} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_n)^T$ a matriz de pesos cujas colunas são os vetores de pesos, a relação linear é dada por:

$$\mathbf{s} = \mathbf{W}\mathbf{x}. \quad (5.1)$$

É assumido, nesse modelo, que o número de componentes esparsas, isto é, o número de neurônios, é igual ao número de variáveis observadas, embora isso não precise ser verdadeiro no caso geral (Olshausen & Field 1997). O método *Sparse Coding* pode, agora, ser formulado como um método de busca por uma matriz de pesos $\mathbf{W}$, tal que as componentes s_i sejam tão esparsas

quanto possível. Uma variável aleatória s_i com média zero é considerada esparsa quando esta possuir uma função densidade de probabilidade com um pico em zero e caudas pesadas, como é o caso, por exemplo, da distribuição de Laplace (ver Figura X). Em aspectos práticos, esparsidade é equivalente à supergaussianidade (Hyvärinen & Oja 1997) ou leptokurtosis (kurtosis positiva) (Kendall & Stuart 1958).

O método *Sparse Coding* está intrinsicamente relacionado ao método ICA (Hyvärinen, Hoyer & Oja 2001), que é apresentado, em detalhes, no Capítulo 4. No modelo de dados utilizado no método ICA, é postulado que $\mathbf{x}$ é uma transformação linear de componentes independentes: $\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s}$.

Invertendo-se essa relação, obtém-se a Equação (5.1), com $\mathbf{W} = \mathbf{A}^{-1}$. Além disso, foi provado que a estimação do modelo de dados ICA pode ser reduzida à busca por direções não correlacionadas nas quais as componentes são tão não gaussianas quanto possível (Comon 1994), (Hyvärinen 1999). Se as componentes independentes forem esparsas (mais precisamente, supergaussianas), o método reduz-se à busca por projeções não correlacionadas que possuam distribuições tão esparsas quanto possível. Portanto, a estimação do modelo ICA para dados esparsos é equivalente ao método *Sparse Coding*, sob a restrição de que as componentes sejam não correlacionadas. Essa conexão com o método ICA também mostra claramente que o método *Sparse Coding* pode ser considerado como um método para redução de redundância, o que, de fato, foi um dos primeiros objetivos do *Sparse Coding* (Barlow 1994), (Field 1994).

Em (Hyvärinen, Hoyer & Oja 2001), o método *Sparse Code Shrinkage* (SCS) para supressão de ruídos é apresentado e analisado. De acordo com essa abordagem, dado um sinal corrompido por ruído aditivo gaussiano, aplica-se o método para redução do ruído por meio de uma linearização (*shrinkage*) suave das componentes esparsas. Intuitivamente, uma vez que somente poucos neurônios estarão ativos (isto é, com ativação significativamente diferente de zero) simultaneamente em um código esperso, pode-se assumir que as atividades dos neurônios com pequenos valores absolutos são puramente ruído, podendo ser, portanto, colocadas em zero. Dessa forma, retém-se somente as poucas componentes com ativações significantes. O método SCS também pode ser relacionado com técnicas baseadas em *wavelets* (Donoho, Jonhstone, Kerkyacharian & Picard 1995), (Simoncelli & Adelson 1996). De fato, o *sparse coding* pode ser visto como um método adaptativo para determinar bases ortogonais semelhantes a *wavelets*, baseando-se somente nos dados (observações) disponíveis.

5.2.1 Redução de Ruídos em Variáveis Aleatórias Não-Gaussianas

O ponto de partida para a derivação do método *Sparse Code Shrinkage* é o fato de que as distribuições das componentes esparsas são não-gaussianas. Portanto, é possível desenvolver uma teoria geral que mostra como remover ruídos gaussianos de variáveis escalares não-gaussianas. O método *Sparse Code Shrinkage* é baseado na Estimação por Máxima Verossilhança (MLE) de variáveis não-gaussianas que estão corrompidas por ruído gaussiano.

No caso unidimensional, denota-se por s a variável aleatória não-gaussiana a ser estimada e por v o ruído gaussiano de média zero e variância σ^2 . Assumindo-se também que somente a variável y é observada:

$$y = s + v. \quad (5.2)$$

deseja-se estimar a variável original s . Denota-se, agora, por p a densidade de probabilidade de s e por $f = -\log p$ o negativo do logaritmo da densidade p . Em (Hyyvärinen, Hoyer & Oja 2001), utilizou-se o método MLE, juntamente com algumas aproximações para encontrar o seguinte estimador¹ para s :

$$\hat{s} = g(y) = \text{sign}(y) \max(0, |y| - \sigma^2 |f'(y)|). \quad (5.3)$$

5.2.2 Modelagem para Densidades Esparsas

Uma densidade esparsa (super-gaussiana) clássica é a distribuição de Laplace (ver Figura 5.1), também conhecida como distribuição dupla-exponencial. A modelagem do método SCS para a distribuição de Laplace é considerada importante pois esta é frequentemente encontrada em dados de imagens (Olshausen & Field 1996).

A função de densidade de probabilidade (fdp) para uma distribuição de Laplace é dada por:

$$p(s) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-\sqrt{2}|s|). \quad (5.4)$$

Para essa densidade, a não linearidade g , apresentada na Equação (5.3) assume a forma:

$$\hat{s} = g(y) = \text{sign}(y) \max(0, |y| - \sqrt{2}\sigma^2). \quad (5.5)$$

Essa função é considerada uma função de limiarização (*shrinkage*), uma vez que esta é utilizada

¹Esse estimador também pode ser chamado de Estimador Máximo a Posteriori.

Figura 5.1: Função de densidade da distribuição de Laplace, que é uma distribuição super-gaussiana clássica. Para efeito de comparação, a densidade gaussiana (normal) é dada pela curva pontilhada. A densidade laplaciana tem um pico mais agudo em zero e caudas mais pesadas do que a distribuição gaussiana.

para reduzir o valor absoluto do seu argumento, com base no nível (estimado pela variância σ^2) do ruído gaussiano. Dessa forma, argumentos com valores pequenos são colocados em zero.

Intuitivamente, a utilidade da função apresentada na Equação (5.5) pode ser explicada como segue. Uma vez que a densidade de uma variável aleatória super-gaussiana (por exemplo, uma variável com distribuição de Laplace) apresenta-se na forma de uma curva com um pico acentuado em zero (ver Figura 5.1), pode-se assumir que pequenos valores de y correspondem somente a ruídos, isto é, a $s = 0$. A limiarização desses valores para zero deve, portanto, causar a redução dos ruídos e uma suavização na imagem original.

5.2.3 Transformação dos Dados em Variáveis Esparsas

Na seção anterior, foi apresentado como reduzir ruídos gaussianos em variáveis aleatórias não gaussianas unidimensionais, por meio da abordagem MLE. Para a redução de ruídos em um vetor aleatório, a operação de *shrinkage* pode ser aplicada separadamente a cada uma das componentes do vetor em questão.

Porém antes de aplicar o operador de *shrinkage*, é desejável transformar linearmente os dados originais em variáveis esparsas para que o método para redução de ruídos seja o mais eficiente possível. Para isso, em (Hyyvärinen, Iloyer & Oja 2001), é considerada a estimação do modelo generativo de dados ICA, dado por:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s}. \quad (5.6)$$

assumindo-se que as variáveis latentes s_i são independentes e não-gaussianas e $\mathbf{A}$ é uma matriz quadrada de coeficientes escalares.

O modelo ICA, apresentado em detalhes no Capítulo 4, tem-se mostrado capaz de descrever alguns aspectos importantes de estruturas estatísticas básicas de alta ordem presentes em dados de imagens (Olshausen & Field 1996) (Olshausen & Field 1997) (Bell & Sejnowski 1997). Dessa forma, modelando os dados de imagens com o modelo ICA, é possível obter um método simples para reduzir o ruído no vetor $\mathbf{x}$ da seguinte forma: primeiro encontra-se as estimativas $\hat{s}_i$ das componentes independentes, e depois, reconstrói-se o vetor $\mathbf{x}$ como: $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{s}}$.

A estimativa $\hat{\mathbf{s}}$ pode ser obtida simplesmente aplicando-se a não linearidade de *shrinkage* apresentada na Equação (5.5) aos componentes de $\mathbf{s} = \mathbf{W}\mathbf{x}$, onde $\mathbf{W} = \hat{\mathbf{A}}^{-1}$ pode ser encontrado utilizando-se qualquer método ICA convencional (ver Capítulo 4).

A seguir é apresentado um resumo do algoritmo SCS, descrito nas seções anteriores. Nesse método, um operador para redução de ruídos é aplicado nas componentes esparsas dos dados. Dessa forma, antes de proceder com essa operação, uma transformação baseada em ICA deve ser aplicada aos dados originais para maximizar a esparsidade das componentes. Essa restrição a variáveis esparsas é justificada pelo fato de que em muitas aplicações, por exemplo em tarefas de processamento de imagens, as distribuições encontradas são esparsas.

O algoritmo SCS segue, então, os seguintes passos (Hyvärinen, Oja & Hoyer 1998):

Algoritmo 2 Algoritmo *Sparse Code Shrinkage*

- 1: Utilize algum método de estimação ICA tradicional (ver Capítulo 4) para estimar a matriz de transformação $\mathbf{W}$, de modo que as componentes $s_i = \mathbf{w}_i\mathbf{x}$ sejam tão esparsas quanto possível.
 - 2: Calcule para cada observação $\mathbf{x}(t)$ de $\mathbf{x}$ as componentes esparsas correspondentes $\mathbf{s}(t)$.
 - 3: Aplique a não linearidade g , definida na Equação (5.5), a todas componentes $s_i(t)$. Denote as componentes obtidas dessa forma por $\hat{s}_i(t)$.
 - 4: Inverta a relação apresentada na Equação(5.1) para obter as novas estimativas de $\mathbf{x}(t)$, dadas por: $\hat{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{W}\hat{\mathbf{s}}(t)$.
-

Maiores detalhes da derivação do método SCS podem ser encontrados em (Hyvärinen, Hoyer & Oja 2001), onde também são apresentados resultados experimentais com dados de imagens e conexões do SCS com outros métodos não lineares para redução de ruídos.

O método SCS foi aplicado nos experimentos de redução de ruídos em imagens realizados no decorrer do presente trabalho. Para estimação ICA das matrizes de transformação $\mathbf{W}$ foi utilizado o algoritmo FastICA (Hyvärinen 1999), que utiliza o princípio da negentropia, apresentado no Capítulo 4.

5.3 Detector de Bordas de Sobel

A detecção de bordas é a abordagem mais comum para a detecção de descontinuidades significantes nos níveis de cinza de uma imagem (Gonzalez & Woods 1992). A formulação do algoritmo de detecção de bordas de Sobel, assume que as regiões de uma imagem são suficientemente homogêneas, de maneira que a transição entre duas regiões (denominada de borda) pode ser determinada somente pela descontinuidade dos níveis de cinza. Para detectar essas descontinuidades, o detector de Sobel baseia-se no cálculo de um operador local diferencial, dado pelo vetor gradiente.

Para uma função $f(x, y)$, o vetor gradiente de f nas coordenadas (x, y) de uma imagem é definido da seguinte forma:

$$\nabla f = [G_x \quad G_y] = \left[\frac{\partial f}{\partial x} \quad \frac{\partial f}{\partial y} \right]. \quad (5.7)$$

A idéia básica por trás do método de Sobel é que a norma do vetor gradiente, geralmente chamada simplesmente de gradiente, dada por:

$$\|\nabla f\| = \left[\frac{\partial f}{\partial x}^2 + \frac{\partial f}{\partial y}^2 \right]^{1/2}, \quad (5.8)$$

pode ser usada na detecção de bordas de uma imagem.

Freqüentemente, pode-se aproximar a norma do vetor gradiente pelos valores absolutos das derivadas parciais:

$$\nabla f = |G_x| + |G_y|, \quad (5.9)$$

para simplificar a implementação do método.

Na prática, a obtenção das derivadas parciais G_x e G_y na posição de cada pixel é implementada por meio da utilização de duas máscaras, denominadas de operadores de Sobel, que podem ser vistas na Figura 5.2.

Considera-se, então, a região de uma imagem mostrada na Figura 5.2(a), onde os valores de z representam os níveis de cinza de cada ponto da imagem.

A Equação (5.9) pode ser ainda aproximada no ponto z_5 utilizando-se os seguintes cálculos para G_x e G_y :

			G_x			G_y		
z_1	z_2	z_3	-1	-2	-1	-1	0	+1
z_4	z_5	z_6	0	0	0	-2	0	+2
z_7	z_8	z_9	+1	+2	+1	-1	0	+1
(a)			(b)			(c)		

Figura 5.2: Máscaras de Sobel. (a) Região de uma imagem de tamanho 3×3 . (b) Máscara usada no cálculo de G_x no ponto central da região. (c) Máscara usada no cálculo de G_y no ponto central da região.

$$G_x(t) = (z_7 + 2z_8 + z_9) - (z_1 + 2z_2 + z_3) \quad (5.10)$$

$$G_y(t) = (z_3 + 2z_6 + z_9) - (z_1 + 2z_4 + z_7). \quad (5.11)$$

Dessa forma, a aplicação das máscaras apresentadas nas Figuras 5.2(b) e 5.2(c) a todas as posições (pixels) da imagem, resulta em uma imagem de gradiente do mesmo tamanho da imagem original.

5.4 Metodologia Proposta

Nesta seção são apresentados alguns detalhes de implementação e um exemplo da aplicação da metodologia de pré-processamento proposta no presente trabalho. Em linhas gerais, o método SCS e o detector de bordas de Sobel são combinados para construir uma imagem, a partir da imagem original, que apresente características mais adequadas para um processo de segmentação. Primeiramente, o método SCS é aplicado com as finalidades de redução de ruídos e suavização da imagem original, tornando as áreas de maior interesse mais homogêneas. Paralelamente, o detector de bordas de Sobel é aplicado à imagem original, com a finalidade de ressaltar bordas importantes. O resultado dessas duas operações são, então, combinados, para gerar a imagem pré-processada. Uma ilustração desse esquema é apresentada na Figura 5.3.

Na implementação do método SCS, foi utilizado, para estimação ICA das matrizes de transformação $\mathbf{W}$, o algoritmo FastICA (Hyvärinen 1999), que é baseado no princípio da estimação por negentropia, apresentado no Capítulo 4. O código em MATLAB do FastICA, pronto para ser aplicado a dados de imagens, está disponível no endereço <http://www.cis.hut.fi/projects/ica/imageica/>. Dessa forma, uma vez encontrada a matriz de transformação esparsa $\mathbf{W}$ para uma imagem original, esta é transformada em suas componentes esparsas, sobre

Figura 5.3: Metodologia de pré-processamento proposta. No primeiro estágio, são aplicados à imagem original, em paralelo, o método *Sparse Code Shrinkage* (SCS) e detector de bordas de Sobel. Os resultados desse estágio são combinados, gerando com a imagem pré-processada. Finalmente, um método de segmentação pode ser aplicado à imagem resultante desse processo.

as quais é aplicada a função de shrinkage apresentada na Equação (5.5).

Para a aplicação do detector de bordas de Sobel foi utilizada a função *edge*, pertencente ao pacote (*toolbox*) de processamento de imagens do MATLAB. Essa função considera uma imagem em níveis de cinza I como entrada e devolve uma imagem binária do mesmo tamanho de I , em que 1's são colocados nas posições em que a função detecta uma borda e 0's nas posições onde bordas não foram identificadas. Além do método de Sobel, a função *edge* pode implementar outros operadores para detecção de bordas, como os de Prewitt, Roberts e Canny.

5.4.1 Exemplo de uma Aplicação da Metodologia Proposta

Para ilustrar o funcionamento da metodologia proposta, pode-se tomar como exemplo o pré-processamento da imagem Lena, de domínio público, apresentada na Figura 5.4(a), na sua versão original. As imagens resultantes da aplicação do SCS e do detector de Sobel são apresentadas nas Figuras 5.4(b) e 5.4(c), respectivamente. Essas duas imagens foram então combinadas (sobrepostas) para gerar a imagem na Figura 5.4(d), que representa o resultado final obtido pela aplicação da metodologia proposta.

5.5 Considerações Finais

Neste capítulo, foi apresentada a metodologia para pré-processamento de imagens, que consiste em combinar a aplicação do método SCS e do detector de bordas de Sobel à imagem

Figura 5.4: Exemplo da aplicação da metodologia de pré-processamento. (a) Imagem original. (b) Imagem resultante da aplicação do SCS. (c) Imagem resultante da aplicação do detector de bordas de Sobel. (d) Resultado final obtido pela aplicação da metodologia proposta.

original.

O método SCS, que foi originalmente proposto para redução de ruídos, aqui é aplicado também como filtro de suavização de imagens, de modo a tornar mais homogêneas algumas

regiões de interesse, facilitando, portanto, o processo de segmentação. Já a funcionalidade do detector de bordas de Sobel é realçar os contornos de objetos borrados pela suavização da imagem, uma vez que essas características também são importantes para tarefas de segmentação.

Os dois métodos que compõem a metodologia proposta foram apresentados neste capítulo, juntamente com um exemplo da aplicação dessa metodologia, para ilustrar o funcionamento da mesma.

No Capítulo 8, serão apresentados experimentos que mostram como a utilização dessa metodologia acarretou em melhorias nos resultados de segmentação de imagens obtidos pelos métodos auto-organizáveis considerados neste trabalho.

Capítulo 6

Modelo de Misturas ICA

6.1 Considerações Iniciais

Classificação e agrupamento de padrões são problemas encontrados com frequência em vários campos da ciência, como biologia, medicina, visão computacional e inteligência artificial (Jain, Duin & Mao 2000). Um problema de classificação de padrões pode ser resolvido computacionalmente por algoritmos supervisionados ou não supervisionados (Watanabe 1985). Em uma classificação supervisionada, cada padrão do conjunto de dados é identificado como sendo um membro de uma classe predefinida. Já um algoritmo de classificação não supervisionado associa cada padrão a uma classe baseando-se somente em estatísticas, sem nenhum conhecimento sobre as classes de treinamento.

Uma abordagem para classificação não supervisionada é baseada em modelos de misturas (ver, por exemplo, (Duda & Hart 1973; Bishop 1994)), nos quais a distribuição dos dados é modelada como uma soma ponderada de densidades condicionais. Por exemplo, no caso de um modelo de misturas Gaussianas (também chamadas de normais), assume-se que os dados em cada classe têm uma distribuição Gaussiana multivariada. Entretanto, essa suposição implica que o modelo de misturas Gaussianas explora somente estatísticas de segunda ordem (médias e covariâncias) dos dados observados para estimar as densidades *a posteriori*.

O Modelo de Misturas ICA (ICAMM)¹ foi proposto por Lee e colaboradores em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), com o objetivo de superar uma limitação da técnica ICA, que consiste na suposição de que as fontes geradoras dos dados são independentes. Em tal abordagem, essa suposição foi relaxada utilizando-se o conceito de modelo de misturas.

Cada classe no ICAMM é descrita por uma combinação linear de fontes independentes com

¹do original, em inglês, ICA Mixture Model.

densidades não Gaussianas. O algoritmo encontra as componentes independentes e a matriz de bases para cada classe utilizando o algoritmo de aprendizagem infomax estendido (Lee, Girolami & Sejnowski 1999) e também calcula a probabilidade de pertinência de classe para cada padrão do conjunto de dados. As regras de aprendizado para o ICAMM foram derivadas utilizando o método de otimização do gradiente ascendente para maximizar a função de log-verossimilhança dos dados.

6.2 Formulação do Modelo ICAMM

No decorrer deste capítulo, assume-se que os dados N -dimensionais $\mathbf{X} = \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T$ são gerados independentemente por um modelo de misturas de densidades (Duda & Hart 1973). A verossimilhança dos dados é dada pela densidade conjunta:

$$p(\mathbf{X}|\Theta) = \prod_{t=1}^T p(\mathbf{x}_t|\Theta), \quad (6.1)$$

sendo a log-verossimilhança, portanto, dada pela seguinte equação:

$$L = \sum_{t=1}^T \log p(\mathbf{x}_t|\Theta). \quad (6.2)$$

A densidade das misturas é dada por:

$$p(\mathbf{x}_t|\Theta) = \sum_{k=1}^K p(\mathbf{x}_t|C_k, \theta_k) p(C_k), \quad (6.3)$$

onde $\Theta = (\theta_1, \dots, \theta_K)$ são os parâmetros desconhecidos para cada $p(\mathbf{x}|C_k, \theta_k)$, chamadas de densidades das componentes da mistura. Nesse caso, C_k denota a classe k e assume-se que o número de classes, K , é conhecido de antemão. Assume-se, ainda que as densidades das componentes são não gaussianas e que os dados em cada classe são descritos por:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{A}_k \mathbf{s}_k + \mathbf{b}_k, \quad (6.4)$$

onde $\mathbf{A}_k$ é uma matriz escalar $N \times N^2$ e $\mathbf{b}_k$ é o vetor de ruído para a classe k . O vetor $\mathbf{s}_k$ é chamado de vetor de fontes para classe k .

A meta do ICAMM é classificar um conjunto de dados não rotulados e determinar os parâmetros para cada classe ($\mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k$) e as probabilidades condicionais $p(C_k|\mathbf{x}_t, \Theta)$ para todos

²Neste caso, o número de fontes é igual ao número de sensores.

os dados do conjunto.

O algoritmo iterativo que realiza a subida do gradiente da função de log-verossimilhança dos dados (ver Equação 6.2) possui os seguintes passos:

- Compute a log-verossimilhança dos dados para cada classe:

$$\log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k) = \log p(\mathbf{s}_k) - \log(|\det(\mathbf{A}_k)|), \quad (6.5)$$

onde $\theta_k = \{\mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k\}$. Nesse caso, $\mathbf{s}_k = \mathbf{A}_k^{-1}(\mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k)$ é implicitamente modelado para a adaptação de $\mathbf{A}_k$:

- Compute a probabilidade para cada classe, dado o vetor de dados $\mathbf{x}_t$:

$$p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) = \frac{p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k) p(C_k)}{\sum_k p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k) p(C_k)}; \quad (6.6)$$

- Adapte as matrizes $\mathbf{A}_k$ e os vetores de bias $\mathbf{b}_k$ para cada classe, utilizando as seguintes regras:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto -p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \mathbf{A}_k [\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T] \quad (6.7)$$

e

$$\mathbf{b}_k = \frac{\sum_t \mathbf{x}_t p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta)}{\sum_t p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta)}, \quad (6.8)$$

em que $t = 1, \dots, T$ e $\mathbf{K}$ é uma matriz diagonal N -dimensional cujos elementos $k_{k,i}$ são adaptados da seguinte forma:

$$k_{k,i} = \text{sign}\left(E\{\text{sech}^2(s_{k,i,t})\}E\{s_{k,i,t}^2\} - E\{[\tanh(s_{k,i,t})]s_{k,i,t}\}\right). \quad (6.9)$$

A distribuição é considerada supergaussiana quando $k_{k,i} = 1$ e subgaussiana quando $k_{k,i} = -1$ (Girolami 1998).

Como discutido no Capítulo 4, existem vários métodos para adaptar as matrizes $\mathbf{A}_k$ no modelo ICA. O algoritmo ICAMM é baseado na regra de aprendizado ICA infomax estendida (Lee, Girolami & Sejnowski 1999), que possibilita separar fontes desconhecidas com distribuições sub e super-gaussianas. Essa separação é atingida por meio de um tipo simples de regra de aprendizado que foi primeiramente derivada por Girolami (Girolami 1998). A regra de aprendizado

em (Lee, Girolami & Sejnowski 1999) utiliza a análise de estabilidade de (Cardoso 1998) para alternar entre regimes sub e super-gaussianos.

Para a estimação da função log-verossimilhança da Equação (6.5), o termo $\log p(\mathbf{s}_k)$ é modelado como segue:

$$\log p(\mathbf{s}_{k,t}) \propto - \sum_{i=1}^N \left(k_{k,i} \log(\cosh s_{k,i,t}) - \frac{s_{k,i,t}^2}{2} \right). \quad (6.10)$$

6.3 Derivação do Algoritmo ICAMM

Para a derivação do algoritmo ICAMM, assume-se que $p(\mathbf{X}|\Theta)$, como dado na Equação (6.1) é uma função diferenciável de Θ . Lembrando que a log-verossimilhança L dos dados é dada por:

$$L = \sum_{t=1}^T \log p(\mathbf{x}_t|\Theta) \quad (6.11)$$

e, usando a Equação (6.3), o gradiente para os parâmetros de cada classe k é:

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_k} L &= \sum_{t=1}^T \frac{1}{p(\mathbf{x}_t|\Theta)} \nabla_{\theta_k} p(\mathbf{x}_t|\Theta) \\ &= \sum_{t=1}^T \frac{\nabla_{\theta_k} [\sum_{k=1}^K p(\mathbf{x}_t|C_k, \theta_k) p(C_k)]}{p(\mathbf{x}_t|\Theta)} \\ &= \sum_{t=1}^T \frac{\nabla_{\theta_k} p(\mathbf{x}_t|C_k, \theta_k) p(C_k)}{p(\mathbf{x}_t|\Theta)}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Usando a regra de Bayes (ver. por exemplo (Papoulis 1991)) a probabilidade de classe para um vetor de dados $\mathbf{x}_t$ é:

$$p(C_k|\mathbf{x}_t, \Theta) = \frac{p(\mathbf{x}_t|\theta_k, C_k) p(C_k)}{\sum_k p(\mathbf{x}_t|\theta_k, C_k) p(C_k)}. \quad (6.13)$$

Substituindo a Equação (6.13) na Equação (6.12), tem-se:

$$\begin{aligned}
\nabla_{\theta_k} L &= \sum_{t=1}^T p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \frac{\nabla_{\theta_k} p(\mathbf{x}_t | \theta_k, C_k) p(C_k)}{p(\mathbf{x}_t | \theta_k, C_k) p(C_k)} \\
&= \sum_{t=1}^T p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\theta_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k).
\end{aligned} \tag{6.14}$$

A função de log-verossimilhança na Equação (6.14) representa a log-verossimilhança para cada classe. No modelo ICAMM, a log-verossimilhança de classe é dada pela log-verossimilhança para o modelo ICA padrão:

$$\begin{aligned}
\log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k) &= \log \frac{p(\mathbf{s}_k)}{|\det \mathbf{A}_k|} \\
&= \log p(\mathbf{A}_k^{-1}(\mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k)) - \log |\det \mathbf{A}_k|.
\end{aligned} \tag{6.15}$$

Em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), o método do gradiente ascendente é utilizado para estimar os parâmetros que maximizam a função de log-verossimilhança. Os parâmetros do gradiente para cada classe são o gradiente da matriz de bases $\mathbf{A}_k$ e o gradiente do vetor de ruído $\mathbf{b}_k$, $\nabla_{\theta_k} L = \{\nabla_{\mathbf{A}_k} L, \nabla_{\mathbf{b}_k} L\}$, os quais serão considerados, um por vez, a seguir.

6.3.1 Estimação das Matrizes de Bases

As matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ para cada classe podem ser atualizadas utilizando a Equação (6.14).

$$\nabla_{\mathbf{A}_k} L = \sum_{t=1}^T p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{A}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k). \tag{6.16}$$

A atualização (adaptação) é realizada utilizando o método do gradiente ascendente do gradiente da densidade de componentes em relação às matrizes de base, resultando em:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{A}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k). \tag{6.17}$$

Pode-se notar que na adaptação das matrizes de bases, o gradiente da densidade de componentes com respeito às matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ é ponderado por $p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta)$.

A computação de $\nabla_{\mathbf{A}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k)$ pode ser realizada por meio da técnica de ICA. A regra de aprendizagem para as matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ pode ser derivada a partir de vários pontos de vista teóricos, tais como por meio das abordagens MLE (Pearlmutter & Parra 1996), infomax

(Bell & Sejnowski 1995) e maximização da negentropia (Girolami & Fyfe 1997).

O algoritmo de aprendizado para o ICAMM é derivado em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000) utilizando a Estimação por Máxima Verossimilhança (MLE)³. A abordagem MLE para separação cega de fontes foi primeiramente proposta por Gatta e Lacoume (Gaeta & Lacoume 1990) e Pham e Garrat (Pham & Garrat 1997), sendo mais recentemente pesquisada por Peraltmutter and Parra (Pearlmutter & Parra 1996) e Cardoso (Cardoso 1997). A função densidade de probabilidade das observações $\mathbf{x}$ pode ser expressa como (Papoulis 1991) (Amari & Cardoso 1997):

$$p(\mathbf{x}) = |\det \mathbf{W}| p(\mathbf{u}), \quad (6.18)$$

em que $p(\mathbf{u}) = \prod_{i=1}^N p_i(u_i)$ é a suposta distribuição de $p(\mathbf{s})$. A log-verossimilhança da Equação (6.18) é:

$$L(\mathbf{u}, \mathbf{W}) = \log |\det \mathbf{W}| + \sum_{i=1}^N \log p_i(u_i). \quad (6.19)$$

Como $\det \mathbf{W} = \sum_j w_{ij} \text{cof}(w_{ij})$ para algum j , onde $\text{cof}^T(\mathbf{W})$ denota a transposta de $\text{cof}(\mathbf{W})$ e $\mathbf{W}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{W}} \text{cof}^T(\mathbf{W})$, tem-se que, para o primeiro termo da Equação (6.19):

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \log |\det \mathbf{W}| = \frac{1}{\det \mathbf{W}} \text{cof}(\mathbf{W}) = (\mathbf{W}^T)^{-1}. \quad (6.20)$$

Por sua vez, o segundo termo da Equação (6.19) é derivado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \sum_{i=1}^N \log p_i(u_i) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \log p_1(u_1) + \dots + \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \log p_N(u_N) = \\ &= \left[\frac{\frac{\partial p_1(u_1)}{\partial u_1} \frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{W}}}{p_1(u_1)} + \dots + \frac{\frac{\partial p_N(u_N)}{\partial u_N} \frac{\partial u_N}{\partial \mathbf{W}}}{p_N(u_N)} \right] = \\ &= \left[\frac{\frac{\partial p_1(u_1)}{\partial u_1}}{p_1(u_1)}, \dots, \frac{\frac{\partial p_N(u_N)}{\partial u_N}}{p_N(u_N)} \right]^T [x_1 x_2 \dots x_N]. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Denominando:

$$\varphi(\mathbf{u}) = -\frac{\partial p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = \left[-\frac{\frac{\partial p(u_1)}{\partial u_1}}{p(u_1)}, \dots, -\frac{\frac{\partial p(u_N)}{\partial u_N}}{p(u_N)} \right]^T, \quad (6.22)$$

³do original, em inglês, Maximum-Likelihood Estimation.

maximizar a log-verossimilhança com respeito à $\mathbf{W}$, resulta na seguinte regra de aprendizado para $\mathbf{W}$:

$$\Delta \mathbf{W} \propto \left[(\mathbf{W}^T)^{-1} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{x}^T \right], \quad (6.23)$$

que é, por sua vez, idêntica à Equação (4.42), derivada por meio da abordagem infomax (Bell & Sejnowski 1995).

Uma maneira ainda mais eficiente para maximizar a log-verossimilhança é seguir o gradiente “natural” (Amari, Cichocki & Yang 1996), obtido multiplicando-se o gradiente calculado no ponto $\mathbf{W}$, pela direita, pela matriz $\mathbf{W}^T \mathbf{W}$. O gradiente natural é utilizado neste caso pois simplifica a regra de aprendizado da Equação (6.23) e acelera a convergência do modelo (Amari 1998). A aplicação do termo de gradiente natural resulta, portanto, na seguinte regra de gradiente descendente para função de log-verossimilhança dos dados:

$$\Delta \mathbf{W} \propto \frac{\partial L(\mathbf{u}, \mathbf{W})}{\partial \mathbf{W}} \mathbf{W}^T \mathbf{W}. \quad (6.24)$$

Utilizando o fato de que $\mathbf{x}^T = \mathbf{u}^T (\mathbf{W}^T)^{-1}$ a Equação (6.23) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\Delta \mathbf{W} \propto \left[(\mathbf{W}^T)^{-1} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T (\mathbf{W}^T)^{-1} \right]. \quad (6.25)$$

Colocando o termo $(\mathbf{W}^T)^{-1}$ em evidência, tem-se que:

$$\Delta \mathbf{W} \propto \left[\mathbf{I} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T \right] (\mathbf{W}^T)^{-1}. \quad (6.26)$$

Por fim, multiplicando a Equação (6.26), pela direita, pelo termo $\mathbf{W}^T \mathbf{W}$ do gradiente natural, obtém-se:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{W} &\propto \left[\mathbf{I} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T \right] (\mathbf{W}^T)^{-1} \mathbf{W}^T \mathbf{W} = \\ \Delta \mathbf{W} &\propto \left[\mathbf{I} - \varphi(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T \right] \mathbf{W}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

A estimativa de densidade paramétrica $p_i(u_i)$ desempenha um papel essencial para o sucesso da regra de aprendizado da Equação (6.28). A convergência local é assegurada se $p_i(u_i)$ for uma estimativa da verdadeira densidade das fontes (Pham & Garrat 1997). Por exemplo, a função sigmóide usada no algoritmo de Bell e Sejnowski (Bell & Sejnowski 1995) é adequada para separar fontes supergaussianas, isto é, fdp's com caudas mais pesadas do que a distribuição

gaussiana.

Uma maneira de generalizar a regra de aprendizado para fontes com distribuições subgaussianas ou supergaussianas é derivar regras de aprendizado separadas para componentes subgaussianas e supergaussianas. Para isso é necessário adequar, para cada caso, o termo não linear $\varphi(u)$, que é dependente da fdp das estimativas de fontes. No modelo infomax (Bell & Sejnowski 1995), apresentado na Seção (4.8.2), os termos não lineares $\varphi(u)$ foram derivados somente para distribuições de fontes supergaussianas. Dessa forma, a abordagem infomax original apresenta a limitação de não separar fontes que possuem densidades subgaussianas. O algoritmo proposto em (Girolami 1998) apresenta derivações para termos não lineares $\varphi(u)$ que permitem realizar a separação estável de fontes supergaussianas e subgaussianas.

Uma densidade simétrica estritamente subgaussiana pode ser modelada utilizando-se uma forma simétrica do modelo de misturas de Pearson (Pearson 1894), como segue (Girolami 1998):

$$p(u) = \frac{1}{2} (N(\mu, \sigma^2) + N(-\mu, \sigma^2)), \quad (6.28)$$

em que $N(\mu, \sigma^2)$ é a densidade normal com média μ e variância σ^2 . Fazendo $\mu = 1$ e $\sigma^2 = 1$, a Equação (6.22) fica reduzida a:

$$\varphi(u) = -\frac{\frac{\partial p(u)}{\partial u}}{p(u)} = u - \tanh(u). \quad (6.29)$$

Para fontes com densidades supergaussianas, pode-se adotar a seguinte densidade:

$$p(u) \propto N(u) \operatorname{sech}^2(u), \quad (6.30)$$

em que $N(u)$ é uma densidade normal com média zero com variância unitária. A não linearidade $\varphi(u)$ é, agora:

$$\varphi(u) = -\frac{\frac{\partial p(u)}{\partial u}}{p(u)} = u + \tanh(u). \quad (6.31)$$

As Equações (6.29) e (6.31) podem ser combinadas como:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T] \mathbf{W}$$

$$\begin{cases} k_i = 1 & \text{supergaussiana} \\ k_i = -1 & \text{subgaussiana,} \end{cases} \quad (6.32)$$

em que k_i são os elementos da matriz diagonal N -dimensional $\mathbf{K}$. Os elementos k_i 's foram derivados a partir de uma análise formulada em (Cardoso 1998). A utilização dessa abordagem resultou na seguinte escolha para feita os k_i 's, feita em (Lee, Girolami & Sejnowski 1999):

$$k_i = \text{sign}\left(E\{\text{sech}^2(s_{i,t})\}E\{s_{i,t}^2\} - E\{[\tanh(s_{i,t})]s_{i,t}\}\right). \quad (6.33)$$

o que assegura a estabilidade da regra de aprendizado.

6.3.2 Regras de Aprendizado do Modelo ICAMM

Pode-se escrever as Equações (6.32) e (6.36) em termos das matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ para cada classe:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto -p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \mathbf{A}_k [\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T], \quad (6.34)$$

em que:

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{A}_k^{-1}(\mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k), \quad (6.35)$$

e

$$k_i = \text{sign}\left(E\{\text{sech}^2(s_{i,t})\}E\{s_{i,t}^2\} - E\{[\tanh(s_{i,t})]s_{i,t}\}\right). \quad (6.36)$$

A distribuição da fonte é supergaussiana quando $k_{k,i} = 1$ e subgaussiana quando $k_{k,i} = -1$. A adaptação do logaritmo da probabilidade *a priori* $\log p(\mathbf{s}_k)$ pode ser aproximada da seguinte forma:

$$\log p(\mathbf{s}_k) \propto - \sum_{i=1}^N \left(k_{k,i} \log(\cosh s_{k,i,t}) - \frac{s_{k,i,t}^2}{2} \right). \quad (6.37)$$

6.3.3 Estimação dos Vetores de Bias

A Equação (6.14) pode ser utilizada para adaptar os vetores de bias $\mathbf{b}_k$ para cada classe, da seguinte forma:

$$\nabla_{\mathbf{b}_k} L = \sum_{t=1}^T p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{b}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k). \quad (6.38)$$

A adaptação é realizada utilizando-se a subida do gradiente da densidade das componentes com respeito ao vetor de bias $\mathbf{b}_k$, resultando em:

$$\Delta \mathbf{b}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{b}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k). \quad (6.39)$$

Utilizando a Equação (6.15) na Equação (6.39), é possível adaptar $\mathbf{b}_k$ como segue:

$$\Delta \mathbf{b}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{b}_k} [\log p(\mathbf{A}_k^{-1}(\mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k)) - \log |\det \mathbf{A}_k|]. \quad (6.40)$$

Entretanto, ao invés de utilizar a informação de gradiente, em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), foi utilizada uma fórmula aproximada para a adaptação do vetor de bias. Nessa aproximação, foi assumido que:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{b}_k} L &= 0 \\ \sum_{t=1}^T p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta) \nabla_{\mathbf{b}_k} \log p(\mathbf{x}_t | C_k, \theta_k) &= 0 \end{aligned} \quad (6.41)$$

A substituição da Equação (6.15) na Equação (6.41) mostra que o gradiente do primeiro termo da Equação (6.15) tem que ser igual a zero. A partir dessa conclusão, segue que:

$$\nabla_{\mathbf{b}_k} \log p(\mathbf{A}_k^{-1}(\mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k)) = 0. \quad (6.42)$$

Na derivação apresentada em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), assume-se ainda se que um grande volume de dados $\mathbf{x}_t$ estiver disponível e a fdp $p(\mathbf{s}_t)$ for simétrica e diferenciável, então $\log p(\mathbf{s}_t)$ também será simétrico e o vetor de bias pode ser, portanto, aproximado pela média ponderada das observações:

$$\mathbf{b}_k = \frac{\sum_t \mathbf{x}_t p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta)}{\sum_t p(C_k | \mathbf{x}_t, \Theta)}. \quad (6.43)$$

6.4 Problemas do ICAMM

Apesar de algumas características promissoras do ICAMM terem sido reportadas em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), no presente trabalho, apesar das inúmeras tentativas, não foi obtido sucesso na reprodução dos resultados experimentais obtidos por Lee e colaboradores. Ao invés do bom desempenho de classificação do método, relatado no trabalho original, foram observados em experimentos com dados simulados e com o conjunto de dados de flores Iris, uma convergência muito lenta e resultados de classificação insatisfatórios. Em dois artigos encontrados na literatura (Ridder, Kittler & Duin 2000), (Shah, Arora, Robila & Varshney

2002), o ICAMM também foi aplicado sem resultados expressivos. Em (Ridder, Kittler & Duin 2000), o ICAMM teve um bom desempenho para dados 2-D simulados, porém a vantagem de utilizar o método para segmentar imagens não foi provada conclusivamente. Em (Shah, Arora, Robila & Varshney 2002), algumas técnicas de extração de características foram consideradas como etapas de pré-processamento para reduzir a dimensionalidade dos dados, na tentativa de aumentar a eficiência do ICAMM. Apesar das precisões médias de classificação obtidas por essa abordagem terem sido maiores do que aquelas obtidas pelo método k -médias (MacQueen 1967), os autores encontraram algumas limitações e suposições que comprometem o uso do ICAMM em classificação de dados de sensoriamento remoto.

Um dos problemas associados ao ICAMM está relacionado ao fato que o seu algoritmo de aprendizagem é baseado em uma técnica de otimização de gradiente. Portanto, foi observado que o desempenho do método é afetado, entre outros fatores, por algumas limitações conhecidas associadas a esse tipo de abordagem. Além, disso, na tentativa de entender melhor o seu funcionamento, foram detectados, neste trabalho, alguns aspectos relativos a sua formulação e implementação que poderiam ser melhorados para tornar o método mais eficiente. Tais propostas de melhorias deram origem ao modelo EICAMM, que será apresentado no próximo capítulo.

6.5 Considerações Finais

Neste capítulo, foi apresentado, em detalhes, o Modelo ICAMM, inicialmente proposto para realizar classificação não supervisionada em um conjunto de dados. Porém algumas limitações que comprometem a utilização ICAMM foram observadas no decorrer do presente trabalho, como será demonstrado no Capítulo 8.

No próximo capítulo, é apresentado o Modelo EICAMM, proposto neste trabalho com o objetivo de melhorar o desempenho do ICAMM, por meio da incorporação de técnicas de otimização não lineares e modificações envolvendo aspectos de modelagem e implementação.

Capítulo 7

Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado (EICAMM)

7.1 Considerações Iniciais

Com o objetivo de melhorar o desempenho do ICAMM, este capítulo apresenta o Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado (EICAMM), que implementa algumas modificações no ICAMM originalmente proposto. Assim como no ICAMM original, algumas modificações também são baseadas na abordagem de maximização de informação para separação cega de fontes e deconvolução cega de fontes, proposta por Bell e Sejnowski em (Bell & Sejnowski 1995).

O desenvolvimento do modelo EICAMM baseia-se, de fato, em algumas melhorias que foram adicionadas ao ICAMM original por meio da incorporação de algumas características de métodos de otimização não linear. Nesse sentido, o método de Levenberg-Marquardt (ver, por exemplo, (Masters 1995)) foi incorporado ao algoritmo de aprendizagem para garantir e melhorar a convergência do modelo. Além disso, foram também considerados aspectos de modelagem e implementação. Essas modificações, que deram origem ao modelo auto-organizável proposto neste trabalho, são apresentadas a seguir.

7.2 Reformulação do Modelo de Classes

Ao invés de considerar o termo de *bias* adicionado aos dados depois que estes foram gerados por um modelo ICA (ver Equação (6.4)), no EICAMM, os vetores de *bias* são adicionados aos sinais das fontes geradoras. A partir dessa modificação, origina-se uma outra equação, diferente daquela correspondente no ICAMM, para descrever os dados em cada classe, dada por:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{A}_k(\mathbf{s}_k + \mathbf{b}_k). \quad (7.1)$$

A justificativa para essa modificação reside no fato que, na abordagem infomax, supõe-se a ausência de ruídos nos sensores $\mathbf{x}$, ou no máximo a existência de sinais com poucos ruídos aditivos. Portanto, com o objetivo de garantir a ausência de ruídos adicionados aos sensores, estes ruídos são considerados como adicionados às fontes $\mathbf{s}$, antes do processo de mistura de acordo com o modelo generativo ICA apresentado na Equação (4.3).

7.3 Regra de Aprendizado para os Termos de *Bias*

Com o objetivo de formular uma regra de aprendizado mais informativa para os termos de *bias* $\mathbf{b}_k$, no EICAMM, uma nova regra de aprendizado é derivada utilizando a abordagem proposta em (Bell & Sejnowski 1995) para maximizar a informação mútua que a saída Y de um processador de rede neural possui sobre a sua entrada X . De acordo com essa idéia, quando uma única entrada x passa através de uma função de transferência não linear $g(x)$, resulta numa variável de saída y , de modo que a informação mútua entre essas duas variáveis é maximizada. Por meio dessa transformação, as partes de alta densidade da fdp de x alinha-se com as partes de alta inclinação da função $g(x)$, como apresentado na Figura (4.5).

Dessa forma, as regras de aprendizado para pesos e *bias*es em uma rede neural, de acordo com a abordagem em (Bell & Sejnowski 1995), são formuladas utilizando alguma função de transferência não linear. Na formulação do EICAMM, uma nova regra de aprendizado para os termos de *bias* $\mathbf{b}_k$ para cada classe é proposta, considerando-se, aqui, a função de transferência como sendo a tangente hiperbólica:

$$\Delta \mathbf{b}_k = -2 \tanh(\mathbf{s}_k). \quad (7.2)$$

As vantagens dessa nova regra para atualização dos vetores de *bias* em relação à regra correspondente no ICAMM são:

- A regra do EICAMM é adaptativa, ao contrário da regra correspondente no ICAMM, no sentido que esta leva em conta, na iteração corrente, os resultados obtidos nas iterações anteriores. Essa vantagem pode ser verificada comparando-se as Equações (6.43) e (7.2) para atualização dos termos de *bias* nos modelos ICAMM e EICAMM, respectivamente.
- Essa nova regra é formulada de acordo com a teoria de maximização de informação formalmente proposta em (Bell & Sejnowski 1995), o que leva ao relaxamento da suposição na

que se baseia a regra para a adaptação dos termos de *bias* do ICAMM, de que um grande volume de dados de entrada esteja disponível.

7.4 Ortogonalização das Matrizes de Bases

Na derivação do modelo ICAMM, considera-se que $\mathbf{W}_k = \mathbf{A}^{-1}$. Dessa forma, a Equação(6.32), derivada em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000) para a adaptação das matrizes de bases pode ser reescrita como:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u})\mathbf{u}^T - \mathbf{u}\mathbf{u}^T]\mathbf{A}^{-1}. \quad (7.3)$$

Entretanto, para que a passagem na derivação feita em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000) da Equação(6.32) para a Equação(6.34) possa ser realizada, deve-se considerar que as matrizes de bases estimadas pelo modelo sejam ortogonais.

Dessa forma, uma outra modificação no ICAMM foi incorporada ao modelo EICAMM por meio da suposição de que as matrizes $\mathbf{A}_k$ são ortogonais, de modo que $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$.

Portanto, a regra de adaptação para as matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ no EICAMM é dada por:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \theta) \mathbf{A}_k (\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T)^T, \quad (7.4)$$

onde $\mathbf{s}_k = \mathbf{A}_k^T \mathbf{x}_t - \mathbf{b}_k$, considerando o modelo para os dados de classe utilizado no EICAMM e formalizado na Equação(7.1). Aqui, nota-se que o operador de transposição é utilizado, ao invés da matriz inversa $\mathbf{A}_k^{-1}$ para a modelagem implícita dos vetores de fontes $\mathbf{s}_k$, o que implica em uma vantagem computacional do EICAMM, em relação ao ICAMM originalmente proposto.

Consequentemente, no modelo EICAMM, as matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ são ortogonalizadas em cada iteração, utilizando a seguinte equação:

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{A}_k (\mathbf{A}_k^T \mathbf{A}_k)^{1/2}. \quad (7.5)$$

7.5 Incorporação de Informações de Segunda Derivada

Quando a segunda derivada da função objetivo é relativamente fácil de calcular, pode-se incorporar essa informação para acelerar a convergência do algoritmo e garantir a aproximação do mínimo local da função (Masters 1995). Com base nessa motivação, uma modificação na regra de atualização para as matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ foi proposta neste trabalho por meio da incorporação da segunda derivada da função de log-verossimilhança dos dados. A seguir, será

apresentado como os métodos de Newton e Levenberg-Marquardt podem ser formalizados para serem utilizados no EICAMM.

7.5.1 Método de Newton

Para modelar o método de Newton para o EICAMM, as segundas derivadas da função de log-verossimilhança, dadas pela matriz Hessiana, devem ser incorporadas à regra de aprendizado da Equação (7.4). Consequentemente, a nova regra de atualização para as matrizes de bases $\mathbf{A}_k$ é dada por:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \boldsymbol{\theta}) \mathbf{H}^{-1} \mathbf{A}_k (\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T)^T, \quad (7.6)$$

tendo sido calculada, neste trabalho, por meio das seguintes derivações:

$$\Delta \mathbf{W} \propto [\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T] \mathbf{W} \quad (7.7)$$

Calculando a segunda derivada em relação à $\mathbf{W}$ na Equação (7.7), obtém-se:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T) + \frac{\partial (\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T)}{\partial \mathbf{W}} \mathbf{W} = \quad (7.8)$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T) + (-\mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{s}^T \mathbf{A}^T - \mathbf{K} \text{sech}^2(\mathbf{u}) \mathbf{A} \mathbf{s} \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{W}} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{W}} \mathbf{u}^T) \mathbf{W} = \quad (7.9)$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T) - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{K} \text{sech}^2(\mathbf{u}) \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{A} \mathbf{s}_t \mathbf{W} - \mathbf{A} \mathbf{s}_t \mathbf{u}^T \mathbf{W}. \quad (7.10)$$

Usando o resultado $\mathbf{u}_t = \mathbf{W} \mathbf{x}_t = \mathbf{W} \mathbf{A} \mathbf{s}_t$ e substituindo-o na Equação (X), obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - - \mathbf{K} \text{sech}^2(\mathbf{u}) \mathbf{u} \mathbf{u}^T - 3 \mathbf{u} \mathbf{u}^T = \\ \mathbf{I} - 2 \mathbf{K} \tanh(\mathbf{u}) \mathbf{u}^T - \mathbf{K} \text{sech}^2(\mathbf{u}) \mathbf{u} \mathbf{u}^T - 3 \mathbf{u} \mathbf{u}^T. \end{aligned} \quad (7.11)$$

7.5.2 Método de Levenberg-Marquardt

Por meio da incorporação do método de Levenberg-Marquardt à regra para atualização para as matrizes $\mathbf{A}_k$, uma outra modificação também foi proposta, no modelo EICAMM, para garantir que a matriz Hessiana $\mathbf{H}$ seja positiva definida, uma vez que essa é uma condição necessária para que $\mathbf{H}$ seja inversível (Bazaraa 1979). Essa modificação é formulada como:

$$\Delta \mathbf{A}_k \propto p(C_k | \mathbf{x}_t, \boldsymbol{\theta}) (\mathbf{H} + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}_k (\mathbf{I} - \mathbf{K} \tanh(\mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T - \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T)^T, \quad (7.12)$$

onde μ é uma pequena constante no intervalo $(0, 1)$.

Nos experimentos deste trabalho, o modelo EICAMM utiliza o método de Levenberg-Marquardt em sua regra de aprendizado para as matrizes $\mathbf{A}_k$, como formalizado na Equação (7.12).

7.6 Considerações Finais

Neste capítulo, foi proposto o Modelo EICAMM, método auto-organizável derivado a partir de modificações incorporadas ao modelo ICAMM, apresentado no Capítulo 6.

Em experimentos apresentados no Capítulo 8, é demonstrado como o modelo proposto pode ser aplicado com sucesso para classificação não supervisionada de conjuntos de dados simulados e o conjunto Iris.

Como o enfoque deste trabalho consiste na aplicação de modelos auto-organizáveis para segmentação de imagens, o EICAMM é aplicado em experimentos para segmentar imagens em suas versões originais e em versões pré-processadas pela metodologia proposta no Capítulo 5.

Capítulo 8

Resultados Experimentais

8.1 Considerações Iniciais

Neste capítulo, são apresentados e analisados os resultados experimentais realizados no decorrer deste trabalho.

Inicialmente, o desempenho do método EICAMM, proposto no presente trabalho, é avaliado em tarefas de classificação não supervisionada de dados simulados com distribuições não gaussianas para diferentes dimensões e número de classes, assim como na classificação do bem conhecido conjunto de dados Iris. Objetivando ainda uma discussão mais abrangente, os resultados obtidos pelo método proposto é comparado com outros obtidos pelo método ICAMM na sua forma original e pelo método k -médias, para a classificação dos mesmos conjuntos de dados. Alguns resultados obtidos por essa técnica também são apresentados por se tratar de um algoritmo clássico bastante utilizado em análises comparativas envolvendo métodos auto-organizáveis.

Após essa análise preliminar, são apresentados uma série de resultados e discussões envolvendo aplicações para dados de imagens, uma vez que estes são os dados de interesse neste trabalho. Neste sentido, primeiramente a metodologia de pré-processamento proposta no Capítulo 5 é avaliada quanto aos benefícios que esta pode gerar quando aplicada para pré-processar imagens a serem submetidas à rede neural Fuzzy ART para tarefas de segmentação. Finalmente, unificando as duas principais contribuições originais desta tese, o método EICAMM é utilizado na segmentação de imagens originais e das mesmas imagens pré-processadas pela metodologia proposta neste trabalho.

8.2 Experimentos com Dados Simulados

Nesta seção, são apresentados alguns resultados experimentais obtidos pelos métodos EICAMM, ICAMM e k -médias para a classificação não supervisionada de dados simulados, ou seja, gerados artificialmente.

8.2.1 Descrição dos Dados Simulados

O ICAMM e, consequentemente o EICAMM, foram teoricamente formulados para realizar a classificação de dados com distribuições não gaussianas. Dessa forma, com o objetivo de realizar uma avaliação inicial do desempenho desses métodos, foram gerados artificialmente alguns conjuntos formados por classes de dados com distribuições uniforme (sub-gaussiana) e laplaciana (super-gaussiana).

Dessa forma, foram gerados, inicialmente 6 (seis) conjuntos de dados simulados com $N = 2$, $N = 3$ e $N = 5$ dimensões e $K = 2$ classes laplacianas (super-gaussianas), como pode ser visto na Figura 8.1 para o caso bidimensional. Para testar o caso no qual $K = 3$, foi adicionada aos conjuntos de dados previamente gerados mais uma classe, desta vez com distribuição uniforme (sub-gaussiana), como pode ser visto na Figura 8.2 para o caso bidimensional. As setas apresentadas nas Figuras 8.1 e 8.2 representam os vetores-coluna das matrizes de bases A_k para cada classe. Nesses experimentos com dados simulados, foram gerados 1000 pontos de dados para cada classe, embora somente 100 tenham sido utilizados para gerar as Figuras 8.1 e 8.2.

Uma vez que, neste caso dos dados simulados, os verdadeiros rótulos dos padrões no conjunto estão disponíveis, estes podem ser comparados com aqueles estimados pelos métodos, com o objetivo de realizar uma estimativa do erro de classificação cometido por cada modelo. Deve-se ressaltar, no entanto, que esse tipo de avaliação supervisionada foi feita apenas para se ter uma idéia inicial do desempenho do modelo EICAMM em comparação aos outros dois métodos, uma vez que o real interesse deste trabalho está relacionado ao caráter auto-organizável dos modelos aplicados.

8.2.2 Resultados e Discussões

O método de validação cruzada com 10 partições (*10-fold*) foi aplicado para estimar os erros verdadeiros obtidos pelos métodos EICAMM, ICAMM e k -médias na classificação dos dados simulados para $K = 2$ e $K = 3$ classes, apresentados na Seção 8.2.1. Esses resultados podem ser vistos na Tabela 8.1.

Em primeiro lugar, analisando o desempenho dos dois modelos de misturas ICA, pode-se

Figura 8.1: Exemplo de dados simulados com duas classes laplacianas.

Figura 8.2: Exemplo de dados simulados com duas classes laplacianas e uma classe uniforme.

Tabela 8.1: Resultados de classificação para dados simulados.

Número de Dimensões	Número de Classes	EICAMM	ICAMM	<i>k</i> -médias
		Erro Estimado (%) média $\pm$ desvio-padrão	Erro Estimado (%) média $\pm$ desvio-padrão	Erro Estimado (%) média $\pm$ desvio-padrão
2	2	8.85 $\pm$ 2.64	48.20 $\pm$ 1.34	4.75 $\pm$ 2.50
2	3	15.52 $\pm$ 3.68	66.47 $\pm$ 1.84	28.10 $\pm$ 2.21
3	2	7.92 $\pm$ 2.52	48.00 $\pm$ 1.00	5.75 $\pm$ 1.82
3	3	20.40 $\pm$ 6.56	65.80 $\pm$ 1.89	33.26 $\pm$ 9.21
5	2	8.75 $\pm$ 3.40	46.60 $\pm$ 2.12	2.55 $\pm$ 1.21
5	3	32.95 $\pm$ 3.07	65.99 $\pm$ 1.04	49.80 $\pm$ 2.31

notar que os resultados de classificação obtidos pelo EICAMM superaram, de forma significativa, aqueles obtidos pelo método ICAMM, que por sua vez mostrou-se ineficiente em todos os experimentos com dados simulados realizados neste trabalho. Como observado no decorrer dos experimentos, essa ineficiência deve-se ao fato de que a tendência do método ICAMM é associar a uma só classe praticamente todos os dados do conjunto, mesmo que vários esquemas para definição de taxas de aprendizado tenham sido testados.

Já em comparação ao *k*-médias, o EICAMM obteve resultados superiores em todos os casos em que o número de classes é igual a 3. Entretanto, o seu desempenho foi inferior ao *k*-médias nos experimentos envolvendo dados com duas classes. Isto não significa necessariamente (a depender, por exemplo, da complexidade dos dados e da aplicação) que o EICAMM não possa ser considerado um bom classificador, uma vez que o erro verdadeiro estimado fica abaixo dos 10% nesses casos. Inclusive, considerando o desempenho do EICAMM isoladamente, para duas classes o erro foi menor do que para três classes, como pode ser visto na Tabela 8.1. Para duas classes existem bons classificadores descritos na literatura. O maior problema em termos de classificação ocorre para mais do que duas classes. Desta forma, nos experimentos de imagens deste trabalho buscou-se por resultados com número de classes maior do que 2.

Para analisar visualmente como o modelo EICAMM e o algoritmo *k*-médias podem se auto-organizar para detectar agrupamentos em um conjunto de dados, a seguir são considerados outros resultados envolvendo 2 classes de dados super-gaussianos geradas artificialmente.

8.2.3 Análise Visual de Resultados

O comportamento auto-organizável dos métodos EICAMM e *k*-médias para dados super-gaussianos simulados foi avaliado neste trabalho por meio da análise visual envolvendo os rótulos verdadeiros dos dados de um conjunto e aqueles encontrados pelas duas abordagens. Para isso foi gerado um outro conjunto com duas classes laplacianas. A escolha desse tipo de distribuição

nesses experimentos deve-se ao fato de que essa distribuição é frequentemente adequada para descrever dados de imagens (ver Capítulos 4 e 5), que são os dados de maior interesse para o presente trabalho.

Para proceder a esse experimento, foram gerados 1000 exemplos para cada classe, totalizando 2000 pontos de dados no conjunto. Os dados foram aleatoriamente divididos em um conjunto de treinamento, contendo 90% dos dados e outro de teste, composto pelos 10% dos dados restantes. Os dados desse conjunto de teste foram rotulados com as suas verdadeiras classes e podem ser vistos na Figura 8.3(a). Os dados rotulados com as classes encontradas pelo EICAMM e pelo k -médias são apresentados nas Figuras 8.3(b) e 8.3(c), respectivamente. A inversão dos rótulos encontrados pelos dois métodos deve-se, nesse caso, à natureza auto-organizável das duas técnicas, que não utilizam em seus algoritmos informações sobre as classes verdadeiras.

Pode-se observar que os dois métodos conseguiram se auto-organizar para detectar corretamente os rótulos da grande maioria dos pontos de dados. Entretanto, ambas as técnicas falharam na classificação de dados localizados em áreas de sobreposição e em coordenadas afastadas dos pontos de maior concentração das classes.

8.3 Experimentos com o Conjunto de Dados Iris

O objetivo dos experimentos descritos nesta seção é avaliar o desempenho do modelo EICAMM, em comparação com o modelo ICAMM e o algoritmo k -médias, na classificação de conjuntos de dados para os quais não se conhece de antemão as distribuições de probabilidade das classes. Para isso, resolveu-se utilizar o já bem conhecido conjunto de dados Iris, que será brevemente descrito a seguir.

8.3.1 Descrição dos Dados

O conjunto de dados Iris (ver, por exemplo, (Duda & Hart 1973)) contém três classes que representam tipos de flores, com 50 exemplos em cada uma, e quatro atributos numéricos. Uma das classes é linearmente separável das outras duas, as quais não são linearmente separáveis entre si. Para maiores detalhes, esse conjunto de dados encontra-se disponível no repositório UCI (Blake & Merz 1998).

Figura 8.3: Análise visual de resultados dos métodos EICAMM e k -médias. (a) Visualização de dados simulados com duas classes laplacianas. Neste caso, os dados estão rotulados com as suas verdadeiras classes; (b) Visualização de resultados obtidos pelo EICAMM. Neste caso, os dados estão rotulados com as classes estimadas pelo modelo; (c) Visualização de resultados obtidos pelo k -médias. Neste caso, os dados estão rotulados com as classes estimadas pelo método.

8.3.2 Resultados e Discussões

O método de validação cruzada com 10 partições (10 -fold) foi aplicado para estimar os erros verdadeiros obtidos pelos métodos EICAMM, ICAMM e k -médias na classificação dos

dados Iris. Esses resultados podem ser vistos na Tabela 8.2.

Tabela 8.2: Resultados de classificação para o conjunto de dados Iris.

EICAMM	ICAMM	k-médias
Erro Estimado (%)	Erro Estimado (%)	Erro Estimado (%)
média $\pm$ desvio-padrão	média $\pm$ desvio-padrão	média $\pm$ desvio-padrão
30.42 $\pm$ 3.58	61.99 $\pm$ 10.90	36.66 $\pm$ 7.97

Pode-se notar que os modelos utilizados apresentaram desempenhos semelhantes aos observados na classificação dos dados simulados, para o caso de $K = 3$ classes. Novamente, os resultados obtidos pelo EICAMM superaram significativamente aqueles obtidos pelo ICAMM, sendo também superiores aos alcançados pelo algoritmo k -médias. Entretanto, para os dados simulados e conjunto Iris, existem algumas limitações relativas à aplicação do EICAMM. A primeira delas é que o método, embora apresente uma convergência mais rápida do que a apresentada pelo ICAMM (que não convergiu antes de 10000 iterações em nenhum caso), necessita ainda de um grande número de iterações, que para esses conjuntos de dados ficaram em torno de 2000 iterações, para cada partição (*fold*) analisada. Além disso, a cada novo conjunto apresentado ao modelo a taxa de aprendizado deve ser ajustada empiricamente. Para esses experimentos, os valores para esses parâmetros variaram entre 0.00001 e 0.001.

Em (Oliveira & Romero 2004a), uma comparação entre os resultados obtidos pelo EICAMM e pelo ICAMM para a classificação não supervisionada dos dados Iris e de dados simulados, semelhantes aos apresentados anteriormente neste capítulo, serviram como base para a validação do modelo EICAMM, proposto neste trabalho.

8.4 Experimentos com Imagens

Nesta seção, os experimentos com imagens realizados no presente trabalho são descritos e discutidos. Os principais resultados avaliados aqui dizem respeito à utilização da metodologia proposta para pré-processamento de imagens, descrita no Capítulo 5 e a aplicação de métodos auto-organizáveis, descritos nos Capítulos 3 e 7, para segmentação de algumas imagens de diferentes domínios, descritas logo a seguir.

8.4.1 Descrição dos Dados de Imagens

Foram utilizadas nos experimentos desta seção quatro imagens de diferentes domínios, das quais alguns detalhes envolvendo suas descrições são apresentados na Tabela 8.3.

Tabela 8.3: Detalhes de descrição das imagens utilizadas nos experimentos.

Imagem	Número de Linhas	Número de Colunas	Fonte
I1	256	512	http://www.cis.hut.fi/projects/ica/data/image
I2	512	768	ftp://ipl.rpi.edu/pub/image/still/Kodakimages/
I3	512	512	http://vision.ece.ucsb.edu/data_hiding/ETlena.html
I4	512	640	Departamento de Fitossanidade - UNESP - Jaboticabal

A imagem denotada aqui por I1 faz parte de um conjunto de imagens de cena natural (ver Figura 8.4(a)); a imagem I2 faz parte de um conjunto de imagens demonstrativas do sistema PhotoCD da Kodak (ver Figura 8.4(b)); a imagem I3 é uma imagem conhecida como Lena, amplamente utilizada na literatura de processamento de imagens, por ser de domínio público há vários anos (ver Figura 8.4(c)); e a imagem I4 foi cedida para os experimentos deste trabalho pelo Departamento de Fitossanidade - UNESP - Jaboticabal. Tal imagem foi obtida por microscopia realizada em plantas para detecção de esporos, denominados de ascóporos.

É importante observar que, apesar das imagens terem sido processadas nos experimentos em seus tamanhos originais, aqui foi feita uma padronização das suas dimensões (número de linhas $\times$ número de colunas) para facilitar a visualização dos resultados e disposição das mesmas ao longo do texto.

8.4.2 Aplicação da Metodologia de Pré-Processamento Proposta

Os experimentos descritos nesta subseção dizem respeito à aplicação da metodologia de pré-processamento de imagens, proposta no Capítulo 5, às imagens originais apresentadas na Figura 8.4. Nessa abordagem, o método SCS e o detector de bordas de Sobel são combinados para construir uma imagem que apresente características mais adequadas para um processo de segmentação. Primeiramente, o método SCS é aplicado com as finalidades de redução de ruídos e suavização da imagem original, tornando as áreas de maior interesse mais homogêneas. O resultado desse primeiro estágio é, então, combinado com a imagem resultante da aplicação do detector de bordas de Sobel à imagem original, com a finalidade de ressaltar bordas importantes.

Os resultados desses experimentos para pré-processamento podem ser visualizados na Figura 8.5. Se comparadas com as imagens originais apresentadas na Figura 8.4, é possível notar que as imagens pré-processadas apresentam uma maior homogeneidade nas regiões que definem os mesmos objetos ou texturas, como é o caso, por exemplo, das folhagens na imagem I1, portas e janelas na imagem I2, regiões de textura de pele na imagem I3 e estruturas microscópicas na imagem I4. Além disso, em todos os resultados, observa-se a redução do brilho presente nas

Figura 8.4: Imagens originais utilizadas nos experimentos. (a) Imagem I1; (b) Imagem I2; (c) Imagem I3; (d) Imagem I4.

imagens originais. A redução desse fator também é importante, uma vez que a presença de brilho excessivo em uma imagem pode prejudicar o resultado de segmentação da mesma.

Em todos esses experimentos, o nível (variância) do ruído estimado foi fixado em 0.1. Observou-se que o valor desse nível é diretamente proporcional ao fator de suavização aplicado à imagem original. Dessa forma, quanto maior o nível do ruído estimado (definido pelo usuário) maior será a suavização aplicada à imagem.

É importante ressaltar que não foi considerado nos experimentos deste trabalho a adição proposital de ruídos nas imagens, nem a necessidade em se conhecer de antemão se uma determinada imagem apresenta ou não ruído. Dessa forma, o termo ruído aqui é considerado

Figura 8.5: Imagens resultantes da aplicação do método de pré-processamento proposto, que combina o método SCS e o detector de arestas de Sobel

como qualquer pequeno objeto ou variações irrelevantes que possam prejudicar o resultado de segmentação de uma imagem.

O detector de arestas de Sobel também possui um papel importante na abordagem de pré-processamento, uma vez que este é utilizado para auxiliar na recomposição das bordas borradas no processo de suavização, podendo restaurar, então, alguns limites entre os objetos de interesse em uma imagem.

Como será visto a seguir, a aplicação dessa metodologia de pré-processamento proposta de fato acarretou em melhorias nos resultados de segmentação obtidos pelos modelos auto-organizáveis apresentados neste trabalho.

8.4.3 Experimentos de Segmentação de Imagens

Nesta subseção, os modelos auto-organizáveis Fuzzy ART, EICAMM e o algoritmo k -médias são avaliados quanto aos seus desempenhos no processo de segmentação das imagens escolhidas para análise.

Primeiramente, é necessário explicar como os dados de imagens foram formatados a fim de serem processados pelos métodos avaliados. Nessa etapa, procedeu-se da seguinte forma: para cada pixel da imagem foi construído um vetor de níveis de cinza, composto pelo valor desse pixel, como elemento central, e dos seus oito vizinhos mais próximos em uma vizinhança quadrada. Para ilustrar esse esquema, o padrão de entrada relativo ao pixel x_5 apresentado na Figura 8.6 é composto como o vetor de 9 dimensões $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9)$, onde os valores de x assumem os valores dos níveis de cinza daqueles pixels. Para tornar esse esquema viável, os pixels das bordas das imagens foram descartados.

x_1	x_2	x_3
x_4	x_5	x_6
x_7	x_8	x_9

Figura 8.6: Esquema de formatação de padrões para dados de imagens. Para cada pixel da imagem é construído um vetor de níveis de cinza, composto pelo valor desse pixel, como elemento central, e dos seus oito vizinhos mais próximos em uma vizinhança quadrada.

Como resultado do processo de segmentação, o pixel central de cada padrão é rotulado com um nível de cinza que identifica a classe a que este foi associado. Por exemplo, os níveis de cinza 0 (preto) e 255 (branco) podem servir como rótulos em um esquema de segmentação envolvendo duas classes.

Experimentos com a Rede Neural Fuzzy ART

O primeiro modelo auto-organizável a ser aplicado à segmentação de imagens neste trabalho foi a rede neural Fuzzy ART, apresentada no Capítulo 3. De fato, essa rede foi escolhida para testar o desempenho da metodologia de pré-processamento proposta. Essa escolha deveu-se ao fato de que este modelo já havia sido implementado e analisado em (Vicentini 2002) e (Vicentini, Oliveira & Romero 2004), onde foi feita uma avaliação para encontrar qual seria, dentre os modelos ART2, ART2-A e Fuzzy ART, o mais adequado para ser combinado com a estrutura de dados métrica *Slim-Tree* (Traina Jr., J. M. Traina, Seeger & Faloutsos 2000).

O objetivo final desses trabalhos foi a obtenção de um modelo híbrido para indexação e recuperação de informações, capaz de responder a consultas por similaridade. Para essa aplicação, os modelos ART2 e ART2-A mostraram um desempenho superior em relação ao apresentado pela rede Fuzzy ART.

No entanto, em experimentos preliminares com imagens realizados no presente trabalho, o modelo ART que apresentou resultados melhores foi o modelo Fuzzy ART. Esse modelo foi aplicado com sucesso, em combinação com o método *Sparse Code Shrinkage*, para segmentação de imagens obtidas por um robô móvel (Oliveira, Vicentin & Romero 2002).

Considerando as imagens analisadas neste capítulo, os resultados de segmentação obtidos pela rede Fuzzy ART, para as versões originais e pré-processadas são os apresentados na Figuras 8.7 e 8.8, respectivamente. Nesse caso, o número máximo de agrupamentos foi estipulado em $K = 2$. Além disso, os parâmetros da rede foram: $\alpha = 0.0008$, $\beta = 0.01$ e $\rho = 0.80$, lembrando que esse último parâmetro determina o grau de similaridade mínimo entre os padrões alocados em um mesmo cluster.

Comparando-se os resultados de segmentação obtidos pela rede Fuzzy ART para as imagens originais e pré-processadas, pode-se notar que, de fato, a metodologia de pré-processamento proposta neste trabalho leva a uma melhoria nos resultados finais do processo.

Entretanto, também foi observado que a segmentação realizada pela rede Fuzzy ART, neste caso, detectou, basicamente, apenas os contornos dos objetos presentes nas imagens, não sendo capaz de definir algumas regiões de interesse. Como um número de agrupamentos $K = 2$ pode ser considerado pequeno para a detecção de estruturas básicas em imagens com relativa complexidade, como é o caso das imagens analisadas neste trabalho, outros experimentos foram realizados para um número máximo maior de clusters e valores menores para o parâmetro de vigilância ρ . Ainda assim o número de clusters detectados pelo modelo não passou de 2 e resultados melhores do que os apresentados na Figura 8.8 não foram obtidos.

Experimentos com o Modelo EICAMM

Para avaliar a unificação das propostas originais deste trabalho, o método EICAMM foi aplicado para segmentação das imagens originais e pré-processadas, apresentadas nas Figuras 8.4 e 8.5. Neste caso, considerou-se um número $K = 3$ de agrupamentos. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 8.9, para as imagens originais e na Figura 8.10, para as imagens pré-processadas pela metodologia proposta.

O primeiro ponto a ser ressaltado na análise desses experimentos é que o modelo EICAMM, proposto neste trabalho, de fato é adequado para classificação de dados de imagem,

Figura 8.7: Resultados de segmentação utilizando a rede neural Fuzzy ART aplicada às imagens originais. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4.

tendo obtidos resultados significativamente melhores do que aqueles obtidos pela rede neural Fuzzy ART, como pode ser observado nas imagens das Figuras 8.8 e 8.10. Pode-se notar, que ao contrário do modelo neural, o ELCAMM conseguiu detectar regiões homogêneas que representam estruturas (objetos) importantes presentes nas imagens. Além disso, assim como nos experimentos com a rede Fuzzy ART, é possível observar como a utilização da metodologia de pré-processamento proposta levou a resultados de segmentação significativamente melhores do que aqueles obtidos quando a técnica é aplicada às imagens originais.

Em outros experimentos, o número de classes estimadas foi elevado para $K = 5$. Es-

Figura 8.8: Resultados de segmentação utilizando a rede neural Fuzzy ART aplicada às imagens pré-processadas. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4

ses resultados são apresentados na Figura 8.11. Novamente, o EICAMM conseguiu realizar a segmentação das imagem pré-processadas, porém o aumento do número de classes não levou a resultados melhores do que no caso para $K = 3$, como pode ser observado comparando-se as imagens das Figuras 8.10 e 8.11. Ao contrário, para algumas imagens, como a imagem I3 e imagem I4, os resultados foram piores do que os obtidos para $K = 3$.

Um outro aspecto importante observado nos experimentos envolvendo a aplicação do EICAMM em dados de imagens é que, ao contrário do que foi notado nos experimentos com dados simulados e o conjunto Iris, o EICAMM apresentou uma convergência relativamente

Figura 8.9: Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens originais. Todas imagens foram segmentadas pelo modelo EICAMM para $k = 3$ classes. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4.

rápida, com um número de iterações abaixo de 100. Além disso, a taxa de aprendizado foi fixada em 0.000001 para todas as imagens, sem necessidade de ajustes. Esses pontos positivos da aplicação do EICAMM a dados de imagens vêm comprovar que de fato o método é adequado para o processamento desse tipo de dado.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 8.10: Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens pré-processadas. Todas imagens foram pré-processadas pela metodologia proposta e segmentadas pelo modelo EICAMM para $k = 3$ classes. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4.

Experimentos com o Método k -médias

Para efeitos comparativos, alguns resultados obtidos pelo método k -médias para segmentação das imagens consideradas neste trabalho são apresentados a seguir.

Uma vez que a metodologia de pré-processamento foi validada nos experimentos com a rede Fuzzy ART e o modelo EICAMM, as imagens pré-processadas foram dadas como entrada para o algoritmo k -médias em experimentos de segmentação para $K = 3$ classes. Esses resultados podem ser vistos na Figura 8.12.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 8.11: Resultados de segmentação de imagens utilizando o modelo EICAMM aplicado às imagens pré-processadas. Todas imagens foram pré-processadas pela metodologia proposta e segmentadas pelo modelo EICAMM para $k = 5$ classes. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4.

É possível notar, com exceção do resultado para a imagem I2, que o algoritmo k -médias não obteve resultados satisfatórios de segmentação, detectando algumas regiões nitidamente homogêneas como se fossem regiões distintas. Essa observação leva a crer que o método k -médias não é tão adequado quanto o modelo EICAMM para classificação de dados de imagens. Isto pode ser observado comparando-se as imagens da Figura 8.10 com as da Figura 8.12. Esse fato, na verdade, pode estar associado a uma limitação do k -médias em relação a modelos baseados em ICA, que são capazes de detectar estruturas estatísticas importantes em dados de imagens.

Figura 8.12: Resultados de segmentação de imagens utilizando o algoritmo k -médias aplicado às imagens pré-processadas. Todas imagens foram pré-processadas pela metodologia proposta e segmentadas pelo algoritmo k -médias para $k = 3$ classes. (a) resultado para imagem I1; (b) resultado para imagem I2; (c) resultado para imagem I3; (d) resultado para imagem I4.

8.5 Considerações Finais

Neste capítulo, foram apresentados e discutidos os resultados experimentais envolvendo os modelos auto-organizáveis considerados neste trabalho e a metodologia proposta para segmentação de imagens.

Primeiramente, para avaliar o desempenho do modelo EICAMM, proposto neste trabalho, foram realizadas análises comparativas com o método ICAMM e o algoritmo k -médias, para conjuntos de dados simulados e o conjunto Iris. Dessas análises, observou-se que o EICAMM

obteve resultados melhores que o k -médias, para todos os experimentos com mais de duas classes e o modelo ICAMM apresentou uma convergência muito lenta, com resultados de classificação insatisfatórios.

Nos experimentos para segmentação de imagens, a eficiência da metodologia de pré-processamento proposta foi avaliada em resultados obtidos pela rede neural Fuzzy ART e o modelo EICAMM, tendo levado a resultados melhores do que os resultados obtidos com as imagens originais, em todos os casos.

Os melhores resultados de segmentação obtidos neste trabalho referem-se à utilização do modelo EICAMM, aplicado às imagens pré-processadas pela metodologia proposta, o que vem a demonstrar a eficiência da unificação das duas principais contribuições originais desta tese.

Capítulo 9

Conclusões e Trabalhos Futuros

9.1 Principais Considerações

A segmentação automática de imagens ainda é considerada, em muitas aplicações, uma tarefa difícil, embora vários métodos para esse propósito tenham sido desenvolvidos. Dentre as várias abordagens consideradas para a segmentação de imagens, aquelas que utilizam técnicas inteligentes possuem algumas vantagens em relação aos métodos clássicos, sendo capazes de tratar as incertezas inerentes às informações contidas em imagens, ou de aprender a partir dos dados existentes e da combinação destes com algum conhecimento *a priori*. Alguns métodos inteligentes apresentam, além destas características, a capacidade de auto-organização, ou seja, são modelos capazes de aprender sem que haja um controle externo exercido pelo ambiente.

Modelos de redes neurais artificiais possuem propriedades que os tornam adequados para a aplicação em processamento de imagens. Dentre estas, destacam-se o processamento adaptativo e a capacidade de auto-organização e generalização. No Capítulo 3, foram apresentadas as técnicas de análise multivariada PCA e técnicas de agrupamento, juntamente com modelos de redes neurais auto-organizáveis que implementam essas técnicas. A rede neural PCA Adaptativa foi utilizada em experimentos preliminares no presente trabalho para compressão de imagens médicas, tendo obtido êxito em aproximar os resultados obtidos pela técnica clássica e superar aqueles obtidos pela técnica JPEG. O modelo neural Fuzzy ART implementa uma técnica de análise de agrupamento baseada na teoria de conjuntos nebulosos, tendo sido utilizado nos experimentos de segmentação de imagens deste trabalho.

Um dos problemas abordados nesta tese refere-se à sensibilidade que a rede Fuzzy ART apresenta no processamento de dados com ruídos. Portanto, quando este modelo é aplicado a tarefas de segmentação, é interessante considerar métodos de pré-processamento que pos-

sam, dentre outras funcionalidades, reduzir os ruídos presentes nas imagens a serem processadas pelo modelo. Com esse objetivo, foi proposta, no Capítulo 5, uma metodologia para pré-processamento de imagens, que combina o método *Sparse Code Shrinkage* para redução de ruídos e suavização da imagem e o detector de bordas de Sobel, que tem a função de restaurar as bordas que foram borradas pelo processo de suavização. Nos experimentos apresentados na Seção 8.4.3 pode-se observar que, de fato, a metodologia de pré-processamento proposta levou a uma melhoria nos resultados de segmentação obtidos pela rede Fuzzy ART.

O outro modelo auto-organizável considerado neste trabalho foi o modelo ICAMM, originalmente proposto para a classificação não supervisionada de um conjunto de dados, nos quais a modelagem das classes baseia-se no método ICA, considerado como uma generalização da técnica PCA. Para que este modelo pudesse ser compreendido em detalhes, definições e fundamentos do método ICA, juntamente com as principais abordagens ICA desenvolvidas, foram apresentados no Capítulo 4. Este capítulo também é importante para o entendimento do método *Sparse Code Shrinkage*, uma vez que este também relaciona-se com a técnica ICA.

Apesar de algumas características promissoras do ICAMM terem sido reportadas no seu trabalho original, no presente trabalho, apesar das inúmeras tentativas, não foi obtido sucesso na reprodução dos resultados experimentais obtidos pelos seus autores. Como pode ser observado nos experimentos com dados simulados e com o conjunto de dados de flores Iris, apresentados nas Seções 8.2 e 8.3, o ICAMM apresentou uma convergência muito lenta e resultados de classificação insatisfatórios.

Com o objetivo de melhorar o desempenho do ICAMM, no presente trabalho foi proposto o modelo EICAMM, derivado a partir de algumas modificações realizadas no ICAMM, considerando-se aspectos de modelagem e implementação. Uma das contribuições mais importantes é a incorporação do método de otimização de Levenberg-Marquardt ao algoritmo de aprendizagem, para garantir e melhorar a convergência do modelo.

Para avaliar o desempenho do EICAMM, este foi aplicado a tarefas de classificação não supervisionada de dados simulados com distribuições não gaussianas para diferentes dimensões e número de classes, assim como na classificação do bem conhecido conjunto de dados Iris. Objetivando ainda uma discussão mais abrangente, os resultados obtidos pelo método proposto foram comparados com outros obtidos pelo método ICAMM na sua forma original e pelo método k -médias, para a classificação dos mesmos conjuntos de dados. Essas análises comparativas iniciais, apresentadas nas Seções 8.2 e 8.3, mostraram que o método EICAMM supera o k -médias nos experimentos com mais de duas classes para dados simulados. Assim, o método pode ser considerado um bom classificador, o que pode ser comprovado pela análise visual dos resultados,

em que se avaliou o comportamento auto-organizável do método EICAMM, comparado ao do k -médias.

Finalmente, unificando as duas principais contribuições originais desta tese, na Seção 8.4.3, o método EICAMM é utilizado na segmentação de imagens originais e das mesmas imagens pré-processadas pela metodologia proposta neste trabalho. Um dos pontos ressaltados na análise desses experimentos é que o modelo EICAMM de fato é adequado para classificação de dados de imagem, tendo obtidos resultados significativamente melhores do que aqueles obtidos pela rede neural Fuzzy ART. Pode-se notar que, ao contrário do modelo neural, o EICAMM conseguiu detectar regiões homogêneas que representam estruturas (objetos) importantes presentes nas imagens. Além disso, assim como nos experimentos com a rede Fuzzy ART, foi possível observar como a utilização da metodologia de pré-processamento proposta levou a resultados de segmentação significativamente melhores do que aqueles obtidos quando a técnica é aplicada às imagens originais.

9.2 Principais Contribuições

Os resultados desta tese representam contribuições em duas linhas de pesquisa: modelos auto-organizáveis e técnicas de segmentação de imagens. As principais contribuições são:

- A demonstração de que o método *Sparse Code Shrinkage*, proposto originalmente para redução de ruídos, também pode ser utilizado como um filtro de suavização de imagens, fazendo com que as regiões de interesse fiquem mais homogêneas.
- O desenvolvimento de uma metodologia para pré-processamento de imagens, que combina o método *Sparse Code Shrinkage*, para redução de ruídos e suavização da imagem, e o detector de bordas de Sobel, que tem a função de restaurar as bordas que foram borradas pelo processo de suavização.
- A demonstração de que os resultados apresentados em (Lee, Lewicki & Sejnowski 2000), trabalho que introduziu o ICAMM, não podem ser reproduzidos utilizando o algoritmo de aprendizado original.
- O desenvolvimento de um modelo auto-organizável para classificação não supervisionada e segmentação de imagens, que, por ser baseado na técnica ICA, é capaz de detectar estruturas estatísticas importantes em dados de imagens.

- O desenvolvimento de um sistema que unifica as propostas de metodologia para pré-processamento de imagens e o modelo auto-organizável proposto para segmentação.

Os resultados obtidos nesta tese geraram publicações em relatório técnico (Oliveira & Romero 2004c), artigos em congresso nacional (Oliveira, Romero, Mazucheli & Nonato 2000), internacional (Oliveira, Vicentini & Romero 2002) (Oliveira & Romero 2004a), (Oliveira & Romero 2004b) e um artigo submetido à revista internacional (Vicentini, Oliveira & Romero 2004).

9.3 Propostas de Trabalho Futuros

Uma vez que o modelo ICAMM, na sua forma original, é baseado em uma abordagem neural, uma extensão natural do modelo EICAMM é a construção de uma rede neural que incorpore esse método. Nessa proposta, a rede neural a ser construída receberia, como entrada, os dados a serem classificados, retornando, como saída, valores que indiquem a classe a que cada padrão foi associado, de acordo com as probabilidades condicionais calculadas pelo método. As regras para atualização dos pesos da rede seriam portanto baseadas de alguma forma no algoritmo de aprendizado derivado para o EICAMM.

Outras funções de ativação não lineares também podem ser avaliadas para serem incorporadas ao método EICAMM, no lugar da função tangente hiperbólica, considerada neste trabalho.

Na tentativa de acelerar ainda mais a convergência do modelo EICAMM, o método FastICA, que apresenta a propriedade de rápida convergência, pode ser utilizado para a estimação das matrizes de base do modelo, ao invés da abordagem infomax.

Para uma avaliação mais profunda do método EICAMM na classificação não supervisionada de dados simulados e outros conjuntos numéricos, variando o número de classes e as dimensões dos dados, propõe-se a utilização de técnicas de validação de agrupamentos (Jain & Dubes 1988). A justificativa para essa proposta é que estas técnicas devem ser mais adequadas para avaliar o desempenho de modelos auto-organizáveis do que o método de validação cruzada, que requer um monitoramento dos rótulos ao longo do processo de classificação, além do conhecimento prévio do número de classes e dos rótulos verdadeiros dos dados.

Outra idéia interessante é avaliar a utilização de outros tipos de funções objetivo a serem otimizadas na derivação do método EICAMM. Algumas sugestões podem estar relacionadas a funções baseadas na teoria de conjuntos nebulosos ou na estatística bayesiana.

Apêndice A

Derivação das Regras de Aprendizado ICA

A.1 Para uma Rede Neural com uma Entrada e uma Saída

A.1.1 Função de Transferência Logística

A função de transferência logística é dada pela seguinte equação não linear:

$$y = \frac{1}{1 + e^{-u}}, \quad u = wx + w_0. \quad (\text{A.1})$$

A derivada parcial de y em relação à u é calculada da seguinte forma:

$$\begin{aligned} y' = \frac{\partial y}{\partial u} &= \frac{1}{(1 + e^{-u})^2} e^{-u} = \frac{1}{(1 + e^{-u})} \left(\frac{e^{-u}}{1 + e^{-u}} \right) = \\ &= \frac{1}{(1 + e^{-u})} \left(1 - \frac{1}{(1 + e^{-u})} \right) = y(1 - y). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Para a derivação da regra de aprendizado para w , a seguinte equação diferencial deve ser resolvida:

$$\Delta w \propto \frac{\partial H}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \left(\ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right), \quad (\text{A.3})$$

sendo que, neste caso, y é a função logística, apresentada na Equação (A.1).

Tem-se que:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} = y(1-y)w = wy(1-y), \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial y}{\partial w} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial w} = y(1-y)x = yx(1-y), \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (y(1-y)) &= \frac{\partial y}{\partial x}(1-y) + y \left(\frac{-\partial y}{\partial x} \right) = \\ &= wy(1-y)(1-y) - ywy(1-y) \quad (\text{usando (A.4)}) = \\ &= wy(1-y)(1-y-y) = \\ &= wy(1-y)(1-2y). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Logo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial y}{\partial w} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (yx(1-y)) \quad (\text{usando (A.5)}) = \\ &= y(1-y) + x \frac{\partial}{\partial x} (y(1-y)) = \\ &= y(1-y) + xwy(1-y)(1-2y) \quad (\text{usando (A.6)}) = \\ &= y(1-y)(1+wx(1-2y)). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Dividindo a Equação (A.7) pela Equação (A.4), obtém-se:

$$\Delta w = \frac{1}{w} + x(1-2y) \quad (\text{A.8})$$

Para a derivação da regra de aprendizado para w_0 , a seguinte equação diferencial deve ser resolvida:

$$\Delta w_0 \propto \frac{\partial H}{\partial w_0} = \frac{\partial}{\partial w_0} \left(\ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial w_0} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right), \quad (\text{A.9})$$

sendo que, neste caso, y é a função logística, apresentada na Equação (A.1).

Tem-se que:

$$\frac{\partial y}{\partial w_0} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial w_0} = y(1-y). \quad (\text{A.10})$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial w_0} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial y}{\partial w_0} \right) = \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left(y(1-y) \right) \quad (\text{usando (A.10)}) = \\
 &= \frac{\partial y}{\partial x} (1-y) + y \left(\frac{-\partial y}{\partial x} \right) = \\
 &= wy(1-y)(1-2y).
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Dividindo a Equação (A.11) pela Equação (A.4), obtém-se:

$$\Delta w_0 = 1 - 2y. \tag{A.12}$$

A.2 Função de Transferência Tangente Hiperbólica

A função de transferência tangente hiperbólica é dada pela seguinte equação não linear:

$$y = \tanh(u), \quad u = wx + w_0 \tag{A.13}$$

A derivada parcial de y em relação à u é calculada da seguinte forma:

$$y' = \frac{\partial y}{\partial u} = \text{sech}^2(u) = 1 - \tanh^2(u) = 1 - y^2. \tag{A.14}$$

Para a derivação da regra de aprendizado para w , a seguinte equação diferencial deve ser resolvida:

$$\Delta w \propto \frac{\partial H}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \left(\ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right), \tag{A.15}$$

sendo que, neste caso, y é a função tangente hiperbólica, apresentada na Equação (A.13).

Tem-se que:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} = (1 - y^2)w \quad (\text{usando (A.14)}) \tag{A.16}$$

$$\frac{\partial y}{\partial w} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial w} = (1 - y^2)x \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial y}{\partial w} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \left((1 - y^2)x \right) \quad (\text{usando (A.17)}) = \\
&= (1 - y^2) + x \frac{\partial}{\partial x} \left((1 - y^2) \right) \quad (\text{usando a regra do produto para derivada}) = \\
&= (1 - y^2) + x(-2y) \frac{\partial y}{\partial x} = \\
&= (1 - y^2) - 2xy(1 - y^2)w = \\
&= (1 - y^2)(1 - 2xyw). \tag{A.18}
\end{aligned}$$

Dividindo a Equação (A.18) pela Equação (A.16), obtém-se:

$$\Delta w = \frac{1}{w} - 2xy. \tag{A.19}$$

Para a derivação da regra de aprendizado para w_0 , a seguinte equação diferencial deve ser resolvida:

$$\Delta w_0 \propto \frac{\partial H}{\partial w_0} = \frac{\partial}{\partial w_0} \left(\ln \left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \right) = \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial w_0} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right), \tag{A.20}$$

sendo que, neste caso, y é a função tangente hiperbólica, apresentada na Equação (A.13).

Tem-se que:

$$\frac{\partial y}{\partial w_0} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial w_0} = (1 - y^2). \tag{A.21}$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial w_0} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial y}{\partial w_0} \right) = \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \left(1 - y^2 \right) \quad (\text{usando (A.21)}) = \\
&= -2y \frac{\partial y}{\partial x} = \\
&= -2y(1 - y^2)w. \tag{A.22}
\end{aligned}$$

Dividindo a Equação (A.22) pela Equação (A.16), obtém-se:

$$\Delta w_0 = -2y. \quad (\text{A.23})$$

A.3 Para uma Rede Neural com N Entradas e N Saídas

Como $\mathbf{W}$ é uma matriz quadrada e g é uma função inversível, a fdp multivariada de $\mathbf{y}$ pode ser escrita como (Papoulis 1991):

$$p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = \frac{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})}{|\mathbf{J}|}, \quad (\text{A.24})$$

onde $|\mathbf{J}|$ é o valor absoluto da matriz Jacobiana de derivadas parciais (ver Equação (2.7)). Esse valor pode ser simplificado pelo produto entre o determinante da matriz de pesos e as derivadas, y'_i , das saídas, y_i , em relação às entradas da rede:

$$\mathbf{J} = (\det \mathbf{W}) \prod_{i=1}^N y'_i. \quad (\text{A.25})$$

Por exemplo, no caso da função sigmóide logística:

$$y_i = \frac{1}{1 + e^{-u_i}}, \quad (\text{A.26})$$

$$y'_i = y_i(1 - y_i). \quad (\text{A.27})$$

A função a ser maximizada, no caso da abordagem infomax, refere-se à entropia conjunta da saída, dada por:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{y}) &= -E[\ln p_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})] = \\ &= E[\ln |\mathbf{J}|] - E[\ln p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})] \quad (\text{usando a relação em (A.24)}) \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Aqui, os pesos devem ser ajustados para maximizar $H(\mathbf{y})$. Nesse caso, as mudanças aplicadas aos pesos em $\mathbf{W}$ só irão afetar o termo $E[\ln |\mathbf{J}|]$ na Equação (A.28). Portanto, substituindo a Equação (A.25) na Equação (A.28), resulta em:

$$\Delta \mathbf{W} \propto \frac{\partial H}{\partial \mathbf{W}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \ln |\mathbf{J}| = \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \ln |\det \mathbf{W}| + \frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \ln \prod_i y'_i. \quad (\text{A.29})$$

Uma vez que $\det \mathbf{W} = \sum_j w_{ij} \text{cof } w_{ij}$, para qualquer linha i , tem-se, para um único peso w_{ij} :

$$\frac{\partial}{\partial w_{ij}} \ln |\det \mathbf{W}| = \frac{\text{cof } w_{ij}}{\det \mathbf{W}}. \quad (\text{A.30})$$

Para a derivada em relação à matriz completa $\mathbf{W}$, utiliza-se a definição de uma matriz inversa e o fato que a matriz adjunta, $\text{adj } \mathbf{W}$, é a transposta da matriz de cofatores. Isso resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{W}} \ln |\det \mathbf{W}| = \frac{(\text{adj } \mathbf{W})^T}{\det \mathbf{W}} = [\mathbf{W}^T]^{-1}. \quad (\text{A.31})$$

Para o segundo termo na Equação (A.29), nota-se que o produto, $\ln \prod_i |y'_i|$, divide-se em uma somatória de termos logarítmicos, sendo que somente um desses termos depende de um particular w_{ij} . O cálculo da derivada correspondente a esse termo depende da função não linear utilizada para a transferência de informação e procede de maneira análoga ao caso de uma rede neural com uma unidade.

Referências

- Amari, S. & Cardoso, J.-F. (1997). Blind source separation – semiparametric statistical approach. *IEEE Transactions on Signal Processing* 45(11), 2692–2700.
- Amari, S., Cichocki, A. & Yang, H. (1996). A new learning algorithm for blind signal separation. *Advances in Neural Information Processing Systems* 8, 757–763.
- Amari, S. (1998). Natural gradient works efficiently in learning. *Neural Computation* 10(2), 251–276.
- Bachelder, I., Waxman, A. & Seibert, M. (1993). A neural system for mobile robot visual place learning and recognition. In *In Proceedings of the World Congress on Neural Networks*, Volume I. Hillsdale, pp. 512–517. NJ: Erlbaum Associates.
- Back, A. D. & Weigend, A. S. (1997). A first application of independent component analysis to extracting structure from stock returns. *International Journal of Neural Systems* 8, 473–484.
- Baraldi, A. & Alpaydin, E. (1998). Simplified ART: A new class of ART algorithms. Technical Report TR-98-004. International Computer Science Institute, Berkeley, CA.
- Baraldi, A. & Alpaydin, E. (2002a). Constructive feedforward ART clustering networks - part I. *IEEE Transaction on Neural Networks* 13(3), 645–661.
- Baraldi, A. & Alpaydin, E. (2002b). Constructive feedforward art clustering networks - part II. *IEEE Transaction on Neural Networks* 13(3), 662–677.
- Baraldi, A. & Blonda, P. (1999). A survey of fuzzy clustering algorithms for pattern recognition. II. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, Part B (Cybernetics)* 29, 786–801.
- Barlow, H. B. (1961). Possible principles underlying the transformation of sensory messages. In W. A. Rosenblith (Ed.), *Sensory Communication*. MIT Press.

- Barlow, H. B. (1994). What is the computation goal of the neocortex? In C. Koch & J. L. Davis (Eds.), *Large-scale neuronal theories of the brain*. Cambridge, MA: MIT Press.
- Bartfai, G. (1994). Hierarchical clustering with ART neural networks. In *IEEE International Conference on Neural Networks*, Volume 2, pp. 940–944. IEEE Press.
- Bartfai, G. (1995). An ART-based modular architecture for learning hierarchical clusterings. *TR CS-TR-95/3*.
- Bazaraa, M. S. (1979). *Nonlinear Programming*. John Wiley & Sons.
- Bell, A. J. & Sejnowski, T. J. (1995). An information-maximization approach to blind separation and blind deconvolution. *Neural Computation* 7(6), 1129–1159.
- Bell, A. J. & Sejnowski, T. J. (1997). The 'independent components' of natural scenes are edge filters. *Vision Research* 37, 3327–3338.
- Bell, A. & Sejnowski, T. (1996). Learning higher-order structure of a natural sound. *Network: Computation in Neural Systems* 7, 261–266.
- Bernardon, A. M. & Carrick, J. E. (1995). A neural system for automatic target learning and recognition applied to bare and camouflaged sar target. *Neural Networks* 8, 1103–1108.
- Bhandarkar, S., Koh, J. & Suk, M. (1997). Multi-scale image segmentation using a hierarchical self-organizing feature map. *Neurocomputing* 14(3), 241–272.
- Bishop, C. M. (1994). Mixture density networks. Neural Computing Research Group Report NCRG/94/004. Aston University.
- Blake, C. L. & Merz, C. J. (1998). UCI repository of machine learning databases. University of California, Irvine, Dept. of Information and Computer Sciences. <http://www.ics.uci.edu/~mllearn/MLRepository.html>.
- Cardoso, J.-F. (1997). Infomax and maximum likelihood for blind source separation. *IEEE Signal Processing Letters* 4(4), 112–114.
- Cardoso, J.-F. (1998). Blind signal separation: Statistical principles. *Proceedings of IEEE* 86(10), 2009–2025.
- Carpenter, A. & Grossberg, S. (1990). Art 3 hierarchical search: Chemical transmitter in selforganizing pattern recognition architectures. *Neural Networks* 3, 129–152.
- Carpenter, G. A., Grossberg, S., Markuzon, N., Reynolds, J. H. & Rosen, D. B. (1991). Fuzzy ARTMAP: A neural network architecture for incremental supervised learning of analog multidimensional maps. *Technical report*, Boston University.

- Carpenter, G. A., Grossberg, S. & Rosen, D. B. (1991a). ART2-A: An adaptive resonance algorithm for rapid category learning and recognition. *Neural Networks* 4, 493–504.
- Carpenter, G. A., Grossberg, S. & Rosen, D. B. (1991b). Fuzzy ART: fast stable learning and categorization of analog patterns by an adaptive resonance system. *Neural Networks* 4, 759–771.
- Carpenter, G. A., Grossberg, S. & Rosen, D. B. (1991c). Fuzzy ART: Fast stable learning and categorization of analog patterns by an adaptive resonance system. *Neural Networks* 4, 759–771.
- Carpenter, G. A. & Grossberg, S. (1987a). Art2: self-organization of stable category recognition codes for analog input patterns. *Applied Optics* 26(23), 4919–4930.
- Carpenter, G. A. & Grossberg, S. (1987b). A massively parallel architecture for a self-organizing neural pattern recognition machine. *Computer Vision, Graphics and Image Processing* 37, 54–115.
- Carpenter, G., Grossberg, S., Neurophysiol, C. & Reynolds, S. (1991). Artmap: Supervised real-time learning and classification of nonstationary data by a self-organizing neural network. *Neural Networks* 4, 565–588.
- Caudell, T. P. & Healy, M. J. (1994). Adaptive resonance theory networks in the encephalon autonomous vision system. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*, Orlando, Florida, pp. 1235–1240. IEEE.
- Changeux, J. P. & Danchin, A. (1976). Selective stabilization of developing sinapses as a mechanism for the specification of neural networks. *Nature* 264, 705–712.
- Cheng, H. & Bouman, C. A. (2001). Multiscale Bayesian segmentation using a trainable context model. *IEEE Transaction on Image Processing* 10(4), 511–525.
- Cichocki, A., Unbehauen, R. & Rummert, E. (1994). Robust learning algorithm for blind separation of signals. *Electronics Letters* 30(17), 1386–1387.
- Comon, P. (1994). Independent component analysis—a new concept ? *Signal Process* 36, 287–314.
- Cormack, R. M. (1971). A review of classification. *Journal of the Royal Statistical Society* 134(3), 321–367.
- Cover, T. M. & Thomas, J. A. (1991). *Elements of information theory*. New York: Wiley.
- DeGroot, M. H. (1987). *Probability and statistics*, 2nd. Edition. Oxford: Addison-Wesley, Reading.

- Derrode, S., Mercier, G. & Pieczynski, W. (2003). Unsupervised multicomponent image segmentation combining a vectorial IIMC model and ICA. In *Proceedings of 2003 International Conference on Image Processing (ICIP 2003)*, Barcelona, pp. 14–17.
- Diamantaras, K. I. & Kung, S. (1996). *Principal Component Neural Networks: Theory and Applications*. New York: Wiley.
- Diday, E. & Simon, J. (1980). Clustering analysis. In *Digital Pattern Recognition, K.S. Fu (Editor)*, 47–94.
- Donoho, D. L., Jonhstone, I. M., Kerkyacharian, G. & Picard, D. (1995). Wavelet shrinkage: asymptopia? *Journal of the Royal Statistical Society* 57, 301–337.
- Duda, R. & Hart, P. (1973). *Pattern classification and scene analysis*. New York: Wiley.
- Fausset, L. (1994). *Fundamental of Neural Networks: Architectures, Algorithms, and Applications*. Prentice Hall.
- Field, D. J. (1994). What is the goal of sensory coding? *Neural Computation* 6, 559–601.
- Fletcher, R. (1980). *Practical Methods of Optimization*. John Wiley & Sons.
- Frank, T., Kraiss, K. & Kuhlen, T. (1999). Comparative analysis of fuzzy ART and ART-2A network clustering performance. *IEEE Transactions on Neural Networks* 9(3), 544–559.
- Freeman, J. A. & Skapura, D. M. (1991). *Neural Networks - Algorithms, Applications, and Programing Techniques*. New York: Addison-Wesley.
- Fu, K. & Mui, J. (1981). A survey on image segmentation. *Pattern Recognition* 13, 3–16.
- Gaeta, M. & Lacoume, J. (1990). Sources separation without *a priori* knowledge: The maximum likelihood solution. *Proceedings of Eusipco 90*, 621–624.
- Gan, K. & Lua, K. (1992). Chinese character classification using an adaptive resonance network. *Pattern Recognition* 25, 877–888.
- Girolami, M. & Fyfe, C. (1997). Generalized independent component analysis through unsupervised learning with emergent Bussgang properties. *Proceedings of International Conference on Neural Networks* 3, 1788–1791.
- Girolami, M. (1998). An alternative perspective on adaptive independent component analysis algorithms. *Neural Computation* 10(8), 2103–2114.
- Gonzalez, R. C. & Woods, R. E. (1992). *Digital image processing*. Reading, MA, USA: Addison-Wesley.
- Graybill, F. A. (1983). *Matrices with applications in statistics, 2nd edition*. Belmont.

- Grossman, S. I. (1986). *Multivariate Calculus, Linear Algebra and Differential Equations*. Academic Press.
- Guo, G. & Ma, S. (2000). Bayesian learning, global competition and unsupervised image segmentation. *Pattern Recognition Letters* 21, 107–116.
- Ham, F. & Han, S. (1996). Classification of cardiac arrhythmias using fuzzy artmap. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering* 43(4), 425–430.
- Haykin, S. (1994). *Neural networks - A comprehensive foundation*. New Jersey: Macmillan College Publishing Company.
- Hebb, D. O. (1949). *The organization of behavior: A neuropsychological theory*. New York: Wiley.
- Herault, J. & Jutten, C. (1986). Space or time adaptive signal processing by neural network models. *Neural Networks for Computing: AIP Conference Proceedings*, 206–211.
- Hertz, J., Krogh, A. & Palmer, R. (1991). *Introduction to the theory of neural computation*. Redwood City, CA: Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- He, J., Tan, A.-H. & Tan, C.-L. (2002). Art-c : A neural architecture for self-organization under constraints. In *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, Hawaii, USA. pp. 2550–2555.
- Hopfield, J. J. (1982). Neural networks and systems with emergent selective computational abilities. In *National Academy of Sciences of the USA*, Volume 79, pp. 3088–3082.
- Hotelling, H. (1933). Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal of Educational Psychology* 24, 498–520.
- Hussain, T. S. (1993). ARTSTAR: A supervised modular adaptive resonance network classifier. Master's thesis, Queen's University, Kingston, Ontario - Canada.
- Hyvärinen, A., Hoyer, P. & Oja, E. (2001). Image denoising by sparse code shrinkage. In S. Haykin & B. Kosko (Eds.), *Intelligent Signal Processing*. IEEE Press.
- Hyvärinen, A., Karhunen, J. & Oja, E. (2001). *Independent component analysis*. John Wiley & Sons.
- Hyvärinen, A., Oja, E., Hoyer, P. & Hurri, J. (1998). Image feature extraction by sparse coding and independent component analysis. *Proceedings of International Conference on Pattern Recognition (ICPR'98)*, 1268–1273.

- Hyvärinen, A., Oja, E. & Hoyer, P. (1998). Sparse code shrinkage for image denoising. In *Proc. IEEE Int. Joint Conf. on Neural Networks*, pp. 859 – 864.
- Hyvärinen, A. & Oja, E. (1997). A fast fixed-point algorithms for independent component analysis. *Neural Computation* 9(7), 1483–1492.
- Hyvärinen, A. (1998). New approximations of differential entropy for independent component analysis and projection pursuit. In *Advances in Neural information processing systems*, Volume 10. Cambridge, MA: MIT Press.
- Hyvärinen, A. (1999). Fast and robust fixed-point algorithms for independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks* 10(3), 626–634.
- Jain, A. K., Duin, R. P. W. & Mao, J. (2000). Statistical pattern recognition: A review. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 22(1), 4–37.
- Jain, A. & Dubes, R. (1988). *Algorithms for Clustering Data*. Prentice Hall.
- Jain, A. (1989). *Fundamentals of Digital Image Processing*. Prentice Hall.
- Johnson, R. A. & Wichern, D. W. (1998). *Applied multivariate statistical analysis*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, Inc.
- Jung, T.-P., Makeig, S., McKeown, M. J., Bell, A., Lee, T.-W. & Sejnowski, T. J. (2001). Imaging brain dynamics using independent component analysis. *Proceedings of the IEEE* 89(7), 1107–1122.
- Jutten, C. & Herault, J. (1991). Blind separation of sources, part I: An adaptive algorithm based on neuromimetic architecture. *Signal Processing* 24, 1–10.
- Karayianmis, N. B. & Pai, P. (1999). Segmentation of magnetic resonance images using fuzzy algorithms for learning vector quantization. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 18(2), 172–180.
- Karhunen, J. & Joutsensalo, J. (1994). Representation and separation of signals using nonlinear PCA type learning. *Neural Networks* 7, 113–127.
- Kendall, M. & Stuart, A. (1958). *The advanced theory of statistics*. Charles Griffin & Company.
- Kendall, M. (1980). *Multivariate analysis, 2nd edition*. London: Griffin.
- Kohonen, T. (1988). *Self-organization and associative memory, 3rd edition*. New York: Springer-Verlag.
- Kohonen, T. (1989). *Self-organization and associative memory*. New York: SpringerVerlag.
- Kohonen, T. (2001). *Self-Organizing Maps, 3rd edition*. Springer.

- Kosko, B. (1991). *Neural networks and fuzzy systems: A dynamical approach to machine intelligence*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall.
- Lee, T.-W., Girolami, M., Bell, A. J. & Sejnowski, T. J. (1998). A unifying information-theoretic framework for independent component analysis. *International Journal of Mathematical and Computer Modelling* 39, 1–21.
- Lee, T., Girolami, M. & Sejnowski, T. J. (1999). Independent component analysis using an extended infomax algorithm for mixed sub-gaussian and super-gaussian sources. *Neural Computation* 11(2), 409–433.
- Lee, T., Lewicki, M. S. & Sejnowski, T. J. (2000). ICA mixture models for unsupervised classification of non-gaussian classes and automatic context switching in blind signal separation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 22(10), 1078–1089.
- Lewicki, M. & Sejnowski, T. J. (2000). Learning overcomplete representations. *Neural Computation* 12, 337–365.
- Linsker, R. (1992). Local synaptic learning rules suffice to maximize mutual information in a linear network. *Neural Computation* 4, 691–702.
- Lo, Y. S. & Pei, S. C. (1999). Color image segmentation using local histogram and self-organization Kohonen map. *Proceedings of IEEE International Conference on Image Processing*, Kobe, Japan, 232–235.
- Lu, C. & Liao, H. (2000). Oblivious cocktail watermarking by sparse code shrinkage: A regional- and global-based scheme. In *IEEE International Conference on Image Processing*, Volume 3, Vancouver, Canada, pp. 13–16.
- MacQueen, J. (1967). Some methods for classification and analysis of multivariate observations. *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical statistics and probability* 1, 281–297.
- Makeig, S., Jung, T.-P., Bell, A. J., Ghahramani, D. & Sejnowski, T. (1997). Blind separation of auditory event-related brain responses into independent components. *Proceedings of National Academy of Sciences (USA)* 94, 10979–10984.
- Manly, B. (1986). *Multivariate statistical methods: A primer*. London: Chapman and Hall.
- Mao, J. & Jain, A. (1995). Artificial neural networks for feature extraction and multivariate data projection. *IEEE Transactions on Neural Networks* 6(2), 296–317.
- Martínez, A. M. (2000). Recognition of partially occluded and/or imprecisely localized faces using a probabilistic approach. *Computer Vision and Pattern Recognition* 1, 712–717.

- Masters, T. (1995). *Advanced algorithms for neural networks*. New York: Wiley.
- Mehta, B., Vij, L. & Rabelo, L. (1993). Prediction of secondary structures of proteins using fuzzy artmap. In *World Congress on Neural Networks - WCNN'93*, Portland, OR, pp. 228–232.
- Mendel, J. M. & McLaren, R. W. (1970). Reinforcement-learning control and pattern recognition systems. *Adaptive, Learning, and Pattern Recognition Systems: Theory and Applications*. Academic Press, New York, 287–318.
- Minsky, M. L. (1961). Steps towards artificial intelligence. *Proceedings of the Institute of Radio Engineers* 49, 8–30.
- Moghaddam, B. & Pentland, A. (1996). Probabilistic visual learning for object representation. *Early Visual Learning*, S. Nayar and T. Poggio (eds.), Oxford University Press, 99–130.
- Moya, M., Koch, M. & Hostetler, L. (1993). One-class classifier networks for target recognition applications. In *World Congress on neural networks - WCNN'93*, Portland, OR, pp. 797–801.
- Murase, H. & Nayar, S. (1995). Visual learning and recognition of 3d objects from appearance. *International Journal of Computer Vision* 14, 5–24.
- Nadal, J. P. & Parga, N. (1994). Non-linear neurons in the low-noise limit: A factorial code maximizes information transfer. *Network* 4, 295–312.
- Nakamura, T. & Ogasawara, T. (1999). On-line visual learning method for color image segmentation and object tracking. In *International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS' 99)*, pp. 222–228. IEEE.
- Nathan, R. (1970). Spatial frequency filtering. In B. S. Lipkin & A. Rosenfeld (Eds.), *Picture Processing and Psychopictorics*, pp. 151–164. New York: Academic Press.
- Nayar, S., Nene, S. & Murase, H. (1995). Subspace methods for robot vision. *IEEE Transactions on Robotics and Automation* 12(5), 750–758.
- Nelson, M. (1992). *The data compression book*. New York: M & T Books.
- Nodes, T. A. & Gallagher, N. C. (1982). Median filters: some manipulations and their properties. *IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing* 30(5), 739–746.
- Oja, E., Kiviluoto, K. & Mäläroiu, S. (2000). Independent component analysis for financial time series. *Proceedings of IEEE Symposium on Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control (AS-SPCC'00)*, 111–116.

- Oja, E. (1997). The nonlinear PCA learning rule in independent component analysis. *Neurocomputing* 17, 25-45.
- Oliveira, P. R. & Romero, R. A. F. (2004b). Enhanced ICA mixture model for image segmentation. *International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA '2004)*, Louisville, USA.
- Oliveira, P. R. & Romero, R. A. F. (2004a). Enhanced ICA mixture model for unsupervised classification. In *IX Ibero-American Conference on Artificial Intelligence (IBERAMIA '2004)*, Mexico. pp. 205-214.
- Oliveira, P. R. & Romero, R. A. F. (2004c). *Modelo de Misturas ICA Aperfeiçoado para Classificação Não Supervisionada*. NOTAS ICMC-USP- 82, São Carlos, SP.
- Oliveira, P. R.; Romero, R. F.; Mazucheli, J. & Nonato, L. G. (2000). Techniques for image compression: A comparative analysis. *Proceedings of the 6th Brazilian Symposium on Neural Networks*. Rio de Janeiro, Brazil, 249-254.
- Oliveira, P. R., Vicentin, J. F. & Romero, R. A. F. (2002). Combining fuzzy art network clustering and sparse code shrinkage for image segmentation. *Proceedings of 9th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP'2002)* 5, 2435-2439. Singapore.
- Oliveira, P. R. (1997). *Redes neurais artificiais para extração de características*. ICMC-Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, Brasil: Dissertação de Mestrado.
- Olshausen, B. A. & Field, D. J. (1996). Emergence of simple-cell receptive field properties by learning a sparse code for natural images. *Nature* 381, 607-609.
- Olshausen, B. A. & Field, D. J. (1997). Sparse coding with an overcomplete basis set: A strategy employed by V1? *Vision Research* 37, 3311-3325.
- Pao, Y. H. (1989). *Adaptive pattern recognition and neural networks*. New York: Addison Wesley.
- Papoulis, A. (1991). *Probability, random variables and stochastic processes*. New York: McGraw-Hill.
- Pearlmutter, B. & Parra, L. (1996). A context-sensitive generalization of ICA. *Proceedings of ICONIP'96*, 151-157.
- Pearson, K. (1894). Contributions to the mathematical theory of evolution. *Philosophical Transactions of the Royal Society A* 185(71), 71-110.
- Pearson, K. (1901). On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine* 2, 559-572.

- Peper, F., Zhang, B. & Noda, H. (1993). A comparative study of ART2-A and the self-Organizing feature map. In *Proceedings of 1993 International Joint Conference on Neural networks (IJCNN'93)*, Volume 2, Nagoya, pp. 1425–1429.
- Pham, D. L. & Prince, J. L. (1999). Adaptive fuzzy segmentation of magnetic resonance images. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 18(9), 737–752.
- Pham, D. T. & Garrat, P. (1997). Blind separation of mixture of independent sources through a quasi-maximum likelihood approach. *IEEE Transactions on Signal Processing* 45(7), 1712–1725.
- Pham, T. D. & Yan, H. (1999). Color image segmentation using fuzzy integral and mountain clustering. *Fuzzy Sets and Systems* 107(2), 121–130.
- Pratt, W. K. (2001). *Digital image processing, 3rd edition*. New York: John Wiley and Sons.
- Racz, J. & Dubrawski, A. (1995). Artificial neural network for mobile robot topological localization. *Robotics and Autonomous Systems* 16, 73–80.
- Ridder, D. D., Kittler, J. & Duin, R. (2000). Probabilistic PCA and ICA subspace mixture models for image segmentation. In M. Mirnezhdi & B. Thomas (Eds.), *Proceedings of British Machine Vision Conference 2000 (BMVC 2000)*, Bristol, UK, pp. 112–121.
- Roth, Z. & Baram, Y. (1996). Multidimensional density shaping by sigmoids. *IEEE Transactions on Neural Networks* 7(5), 1291–1298.
- Rubner, J. & Tavan, P. (1989). A self-organizing network for principal-component analysis. *Europhysics Letters* 10, 693–698.
- Rumelhart, D., Hilton, G. E. & Williams, R. J. (1986). Learning internal representations by error propagation. In *Parallel Distributed Processing, Volume 1: Foundations*, Cambridge. MIT Press.
- Russ, J. C. (1992). *The image processing handbook*. Boca Raton, FL: CRC Press.
- Sahoo, P., Soltani, S., Wong, A. & Chen, Y. (1988). A survey of thresholding techniques. *Vision Graphics Image Processing* 41, 233–260.
- Sanger, T. (1989). Optimal unsupervised learning in a single layer feedforward network. *Neural Networks* 12, 459–473.
- Seibert, M. & Waxman, A. M. (1992). Adaptive 3-d object recognition from multiple views. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 14(2), 107–124.

- Seibert, M. & Waxman, A. (1993). An approach to face recognition using saliency maps and caricatures. In *Proceedings of the World Congress on Neural Networks (WCNN-93)*, Volume III. Hillsdale, pp. 661- 664. NJ:Earlbaum.
- Shah, C. A., Arora, M. K., Robila, S. A. & Varshney, P. K. (2002). ICA mixture model based unsupervised classification of hyperspectral imagery. *Proceedings of 31st Applied Imagery Pattern Recognition Workshop*. Washington, EUA, 112-121.
- Simoncelli, E. P. & Adelson, E. H. (1996). Noise removal via bayesian wavelet coring. In *Third IEEE International Conference on Image Processing*, Lausanne, Switzerland.
- Soliz, P. & Donohoe, G. W. (1996). Adaptive resonance theory neural network for fundus image segmentation. In NJ:Earlbaum (Ed.), *In Proceedings of the World Congress on Neural Networks WCNN'96*. Hillsdale, pp. 1180-1183.
- Suzuki, Y. (1995). Self-organizing QRS-wave recognition in ECG using neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks* 6(6), 1469-1477.
- Szatmáry, B., Szirtes, G. & Lörincz, A. (2003). Robust hierarchical image representation using non-negative matrix factorisation with sparse code shrinkage preprocessing. *Pattern Analysis and Applications* 6(3), 194-200.
- Tasciyan, T. A., Beckmann, C. F., Morris, E. D. & Smith, S. M. (2001). ICA-based segmentation of the brain on perfusion data. In *In Proceedings of 23rd Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, pp. 126-130.
- Traina Jr., C., J. M. Traina, A., Seeger, B. & Faloutsos, C. (2000). Slim-trees: High performance metric trees minimizing overlap between nodes. In *Proceedings of 7th International Conference on Extending Database Technology - EDBT*, Konstanz, Germany, pp. 51-65.
- Vicentini, J. F., Oliveira, P. R. & Romero, R. A. F. (2004). Investigating the potential of ART neural network models for indexing and information retrieval (*submetido*). *International Journal of Intelligent Systems*, 19 páginas.
- Vicentini, J. F. (2002). *Indexação e Recuperação de Informações Utilizando Redes Neurais da Família ART*. ICMC - Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, Brasil: Dissertação de Mestrado.
- Vigário, R., Särelä, J., Jousmäki, V., Hämmäläinen, M. & Oja, E. (2000). Independent component approach to the analysis of EEG and MEG recordings. *IEEE transactions on biomedical engineering* 47(5), 589-593.

- Wactlar, H., Kanade, T., Smith, M. & Stevens, S. (1996). Intelligent access to digital video: Infomedia project. *IEEE Computer* 29(3), 46-52.
- Walker, J. S. (1999). *A primer on wavelets and their scientific applications*. Chapman and Hall.
- Watanabe, S. (1985). *Pattern recognition: human and mechanical*. New York: Wiley.
- Waxman, A. M., Seibert, M. C., Gove, A., Fay, D. A., Bernardon, A. M., Lazott, C., Steele, W. R. & Cunningham, R. K. (1995). Neural processing of targets in visible, multispectral IR and SAR imagery. *Neural Networks* 8(7-8), 1029-1051.
- Weiss, S. & Kulikowski, C. A. (1991). *Computer Systems That Learn*. Morgan Kaufmann.
- Weng, J. J. (1996). Cresceptron and shoslif: Toward comprehensive visual learning. *Early Visual Learning*. S. K. Nayar and T. Poggio (eds.), Oxford University Press, 183- 214.
- Williamson, J. R. (1996). Gaussian artmap: A neural network for fast incremental learning of noisy multidimensional maps. *Neural Networks* 9(5), 881-897.
- Xu, L. (1993). Least MSE reconstruction: A principle for self-organizing nets,. *Neural Networks* 6. 627-648.
- Yao, K. C., Mignotte, M., Collet, C., Galerne, P. & Burel, G. (2000). Unsupervised segmentation using a self-organizing map and a noise estimation in sonar imagery. *Pattern Recognition* 33. 1575- 1584.
- Zadeh, L. A. (1994). Fuzzy logic, neural networks, and soft computing. *Communications of the ACM* 37(3), 77- 84.
- Zhang, M., Hall, L. O. & Goldgof, D. B. (2002). A generic knowledge-guided image segmentation and labeling system using fuzzy clustering algorithms. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B* 2(5), 571- 582.