



DINCON' 2007

6th Brazilian Conference on Dynamics,
Control and Their Applications

IBILCE - UNESP
S. J. Rio Preto, SP
Brazil

May 22- 25, 2007

Proceedings of the 6th Brazilian Conference on
Dynamics, Control and Their Applications

ISBN: 978-85-85769-32-1



PROCESSAMENTO DE SINAIS DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR USANDO REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA CLASSIFICAÇÃO DE CARNE BOVINA

Cíntia Beatriz de Souza Silva^{1,2}, Ivan Nunes da Silva¹, Luiz Alberto Colnago²

¹ Universidade de São Paulo, Avenida Trabalhador São-Carlense 400, São Carlos, SP 13560-590, Brasil, cintiabeatriz@gmail.com

² EMBRAPA Instrumentação Agropecuária, Rua 15 de Novembro 1452, São Carlos, SP 13560-970, Brasil

Resumo: O desenvolvimento de novas técnicas para análise de alimentos visa assegurar a qualidade nutricional dos produtos. Os grupos genéticos e o sexo dos animais têm parâmetros diretamente relacionados com a qualidade da carne. Neste trabalho se utiliza uma rede neural artificial visando construir um classificador de carnes automático a partir de dados advindos de ressonância magnética nuclear.

Palavras-chave: Redes neurais artificiais, ressonância magnética nuclear, classificação de padrões.

1. INTRODUÇÃO

A espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma das mais importantes técnicas de química analítica, tendo aplicações em medicina, agricultura, alimentos, petroquímica, dentre outras. A maior parte dessas aplicações da RMN se baseia em espectrômetros de alta resolução em alto campo. Nesses equipamentos os sinais de RMN são adquiridos no domínio do tempo e processados com a transformada de Fourier para gerar os espectros no domínio da frequência.

Uma nova categoria de espectrômetros de RMN que está sendo gradualmente inserida nos laboratórios de desenvolvimento e controle de qualidade é os equipamentos de baixa resolução. Em tal equipamento, o sinal de RMN no domínio do tempo é diretamente usado na análise quantitativa ou qualitativa, onde o mesmo no domínio do tempo normalmente se caracteriza por um decaimento exponencial que é relativo aos tempos de relaxação do sistema.

As principais vantagens da RMN sobre os métodos convencionais de análise química são os seguintes: rapidez da análise (segundos), não-destruição da amostra, fácil execução, possibilidade de realizar análises em tecidos vegetais "in vivo", sendo que os resultados das análises podem ser coletados, processados e armazenados diretamente em microcomputador. Outra vantagem da RMN é que o sistema pode ser automatizado, podendo então analisar em alguns casos até 20 mil amostras por hora.

1.1. Princípios de RMN

O fenômeno de RMN é observado em todos os isótopos que contenham spin nuclear total diferente de zero. Dentre esses isótopos, destaca-se o hidrogênio (¹H) que está presente na natureza em alta quantidade e também na água,

a qual compõe a maior parte dos seres vivos. Assim, as análises por RMN de hidrogênio são as mais usadas como, por exemplo, no diagnóstico médico por imagens.

Na Fig. 1 apresenta um diagrama em blocos de um espectrômetro de RMN.

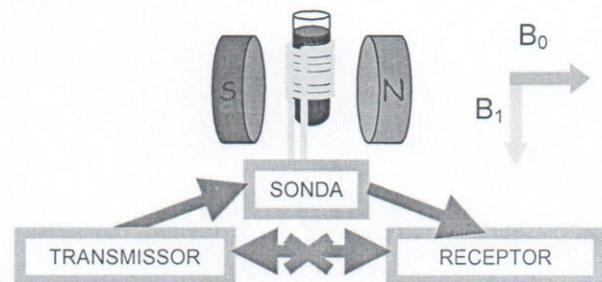


Fig. 1. Amostra inserida no ímã do equipamento de RMN.

Num experimento de RMN a amostra é colocada numa sonda (representada pela bobina solenoidal) situada no interior de um campo magnético intenso (B_0), que orienta os spins nucleares. Neste campo os spins precessionam com uma frequência característica, denominada de frequência de Larmor. Em seguida, a amostra é irradiada com um pulso de campo magnético oscilante (B_1), perpendicular a B_0 , gerado no transmissor. Esse pulso ou trem de pulsos de radiofrequência (RF), na mesma frequência de precessão, desloca a magnetização do estado de equilíbrio, excitando então os spins [1,2].

Após a excitação com RF, a amostra emite um sinal conhecido como FID ("Free Induction Decay"), que é amplificado e detectado no receptor. Esse sinal é seqüencialmente digitalizado e armazenado em um computador, onde suas intensidades, frequências e tempo de decaimento podem ser usados em análises físico-químicas [3,4]. Neste trabalho, apresenta-se o uso de redes neurais artificiais para classificar carnes bovinas a partir de seus sinais de RMN no domínio do tempo.

1.2. Qualidade da Carne Bovina

A cada ano o Brasil vem aumentando a sua produção e exportação de carne bovina. Ao mesmo tempo, os consumidores vêm cada vez mais exigindo produtos de qualidade nutricional, sanitária e que possuam rastreamento, assegurando a qualidade e procedência do produto. As características desejadas e observadas pelos consumidores,

no momento da compra, são as seguintes: a cor, a maciez, o sabor e a suculência.

De modo geral, pode-se dizer que a qualidade da carne depende da interação de fatores intrínsecos e extrínsecos. Os fatores intrínsecos mais importantes são a genética, o manejo alimentar, a idade e o sexo do animal. Dentre os fatores extrínsecos, o mais importantes são as condições de abate (desde a saída dos animais da propriedade até a entrada das carcaças nas câmaras frias), o tipo de cozimento e os métodos de conservação [5].

Para prever a qualidade da carne, novos métodos físicos de análise estão sendo desenvolvidos, permitindo fazer análises rápidas, não invasivas e também não destrutivas da qualidade da carne. Dentre essas técnicas, a RMN vem sendo avaliada principalmente para a carne suína.

A RMN tem sido usada para avaliação do pH, Capacidade de Retenção de Água (CRA), Capacidade de Ligação da Água (CLA), teor e distribuição de gordura, dentre outros parâmetros físico-químicos que estão diretamente relacionados com a qualidade nutricional e sensorial da carne [6,7]. Essas análises vêm sendo feitas com métodos de regressão linear simples, transformada inversa de Laplace e métodos de análise multivariadas, tais como análise de componentes principais, análise de clusters e mínimos quadrados parciais.

1.3. Abordagem de Redes Neurais Artificiais

Por outro lado, uma das Redes Neurais Artificiais (RNAs) potencialmente utilizada para o reconhecimento de padrões é a *Perceptron* multicamadas (MLP – *Multilayer Perceptron*). A MLP é uma rede de múltiplas camadas conectadas em um arranjo encadeado *feedforward*, ou seja, uma rede em que as camadas estão organizadas da seguinte forma: camada de entrada, camadas intermediárias e camada de saída. Cada conexão entre neurônios de camadas distintas é ponderada por um valor que corresponde ao peso da conexão. O sinal é propagado da camada de entrada até a camada de saída. Cada neurônio efetua um processamento matemático interno e disponibiliza o produto desse processamento às camadas subseqüentes.

O treinamento da MLP é geralmente realizado por um algoritmo de retropropagação de erros (*backpropagation*) [8], que basicamente corrige os pesos da rede para que se obtenha o resultado desejado na camada de saída frente ao padrão de entrada. Trata-se de um algoritmo iterativo capaz de mapear o padrão de entrada na classe de saída. Nesse contexto, uma MLP treinada pelo *backpropagation* é um modelo promissor para correlacionar as curvas de decaimento com o grupo genético e o sexo de bovinos.

O objetivo deste trabalho é a classificação de carne bovina por Redes Neurais Artificiais utilizando os dados de CPMG (*Carr-Purcell-Meiboom-Gill*) de ressonância magnética nuclear.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

2.1. Aspectos da RMN em Baixa Resolução

Os sinais de RMN de baixa resolução foram obtidos em um ímã supercondutor de 2,1 Teslas e 30 cm de “*bore*” da

Oxford. A Figura 2 ilustra o ímã de RMN que foi utilizado nas análises das amostras de carne.

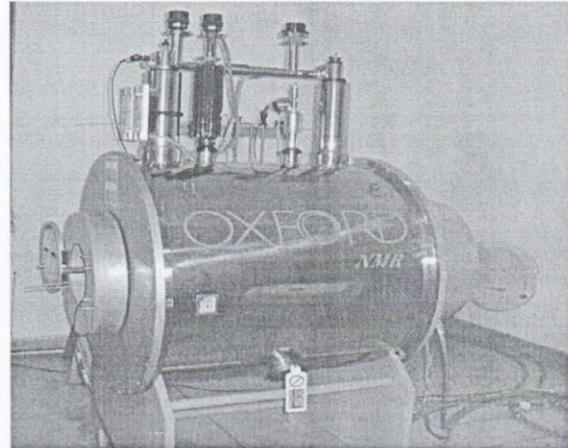


Fig. 2. Ímã do espectrômetro de RMN

As amostras de carnes bovinas analisadas foram provenientes do cruzamento entre animais de grupos genéticos distintos, onde os pais são de puro sangue e as mães com misturas de raças. Para caracterizar as raças dos animais, adotaram-se os termos AX, BX e CX para os pais e TA e TS para as mães, representando os seguintes grupos genéticos:

- AX → animais cruzados filhos de touros da raça Angus.
- BX → animais cruzados filhos de touros da raça Bonsmara.
- CX → animais cruzados filhos de touros da raça Canchim.
- TA → animais filhos de vacas cruzadas Angus x Nelore.
- TS → animais filhos de vacas cruzadas Simental x Nelore.

onde foram obtidos os cruzamentos entre os pais e mães mencionados acima, resultando nos grupos genéticos AXTA, AXTS, BXTA, BXTS, CXTA e CXTS.

Foram analisadas carnes de seis grupos genéticos em um total de 99 bovinos, sendo 21 animais AXTA, 14 animais AXTS, 20 animais BXTA, 16 animais BXTS, 15 animais CXTA e 13 animais CXTS, tendo 56 machos e 43 fêmeas.

As amostras de carne fresca foram extraídas da sexta costela e as curvas de decaimento obtidas com o referido equipamento (RMN). O sinal de CPMG gera uma curva de decaimento com 500 pontos para cada amostra de carne, ou seja, uma carne bovina é representada por 500 atributos com a respectiva classe correspondente ao sexo do animal.

2.2. Técnica CPMG

Os espectrômetros de RMN baseados em ímãs permanentes são poucos homogêneos, não sendo possível a observação do deslocamento químico. Sua principal diferenciação entre os compostos é o tempo de relaxação longitudinal (T_1) e transversal (T_2).

Os tempos de relaxação são empregados nas técnicas de CPMG (*Carr-Purcell-Meiboom-Gill*) e CWFP (*Continuous-Wave-Free-Precession*).



Dincon'2007

O sinal de CWFP é a combinação dos componentes FID e eco (T_2), sempre defasadas em 180° . E o sinal de CPMG é proveniente de uma seqüência de pulsos de 90° e 180° .

Para medir o tempo T_2 normalmente se utiliza uma técnica conhecida como eco de spin ou algumas de suas variações, tal como CPMG. Essa técnica apresenta um trem de pulso de 180° , sendo a mesma descrita da seguinte forma: $[90^\circ_x - \tau - 180^\circ_x - \tau - (\text{eco}) - \tau - 180^\circ_x - \tau - (\text{eco}) - \tau - \dots - 180^\circ_x - \tau - (\text{eco}) - D] n$; onde n representa o número de vezes que essa seqüência será repetida para que os dados sejam coletados, τ é o tempo de espera entre dois pulsos sucessivos que neste caso se assumiu $0.2 \mu\text{s}$, e D é o tempo necessário para que 99% dos spins retornem ao equilíbrio térmico (equivalente a $5T_1$).

A intensidade do sinal de RMN da seqüência CPMG (eco) apresenta como característica um decaimento exponencial em relação à constante de tempo T_2 . Na Fig. 3 são apresentadas cinco curvas de decaimento (CPMG) de amostras de carnes provenientes da sexta costela de bovinos.

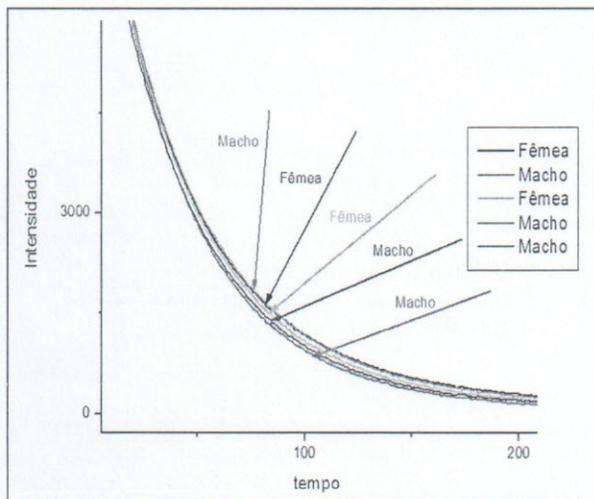


Fig. 3. Curva de decaimento das amostras de carne bovina relacionadas com o sexo dos animais.

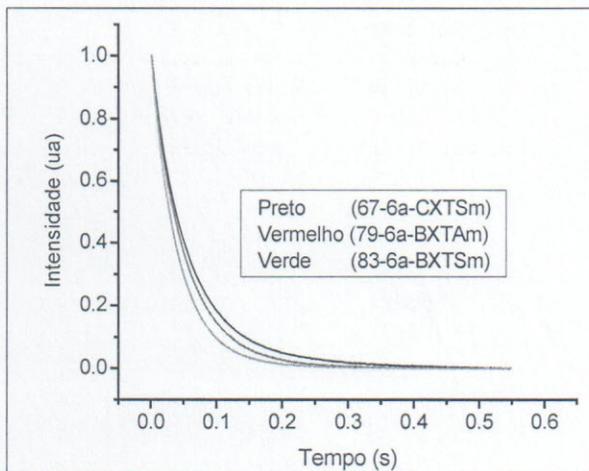


Fig. 4. Curva de decaimento das amostras de carne bovina relacionadas com o grupo genético.

Observa-se uma variação mínima entre as curvas de decaimento, tornando difícil a visualização e diferenciação entre os grupos genéticos (Fig. 4) e os sexos dos animais (Fig. 3).

2.3. Perceptron de Múltiplas Camadas

A MLP é uma RNA com arquitetura de alimentação adiante (*feedforward*) com neurônios dispostos em camadas. O sinal de entrada é propagado até a camada de saída, produzindo, assim, uma resposta ao estímulo. Os elementos de processamento estão dispostos em duas ou mais camadas. Geralmente, duas camadas de neurônios resolvem a maioria de problemas envolvendo classificação de padrões. Cada neurônio pondera as entradas pelos pesos das conexões e utiliza o valor resultante como parâmetro para uma função que determina a intensidade de ativação [9,10]. Na Fig. 4 é ilustrada uma rede MLP com duas camadas intermediárias.

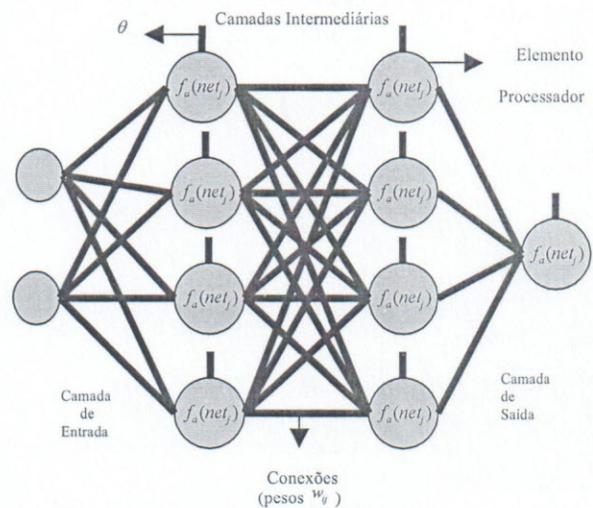


Fig. 5. MultiLayer Perceptron – MLP.

Basicamente, uma MLP é constituída pelos seguintes elementos:

- Conjunto de neurônios e suas disposições nas camadas.
- Camada de entrada: consiste em uma camada com os sinais de entrada (estímulo da rede).
- Camada intermediária: uma ou mais camadas de neurônios que se encontram entre a camada de entrada e de saída.
- Camada de saída: consiste em uma camada de neurônios que geram a saída da rede (resposta ao estímulo).
- Função de ativação $f_a(net_j)$ determina a intensidade do sinal de saída de cada neurônio. As

funções de ativação mais utilizadas são: linear, sigmóide e tangente hiperbólica; net_j é a soma ponderada do valor de entrada pelo peso do neurônio j .

- Conjunto de pesos que se conectam da saída de cada neurônio às entradas dos neurônios da próxima camada. Normalmente, o peso em uma MLP é representado por w_{ij} , onde i é o índice do neurônio e j é o índice de seu respectivo sinal de entrada.
- Conjunto de termos de polarização ou bias (θ) associados aos neurônios da camada intermediária e camada de saída.
- Algoritmo de aprendizado que toma como base um conjunto de dados de treinamento e ajusta os pesos e termos de polarização com o objetivo de encontrar a função geradora intrínseca aos dados.

2.4. Treinamento da Rede MLP

Tipicamente, o algoritmo utilizado para treinar redes do tipo MLP é o algoritmo de retropropagação ou *backpropagation*. Esse algoritmo treina uma rede basicamente em duas fases: na primeira, um padrão é apresentado às unidades da camada de entrada e o estímulo é propagado para a próxima camada (fase *forward*) e o processo ocorre sucessivamente até a camada de saída.

Como os valores de saídas desejados são conhecidos é então possível estimar os erros na camada de saída. Na segunda fase, a estimativa do erro é usada com referência para a correção dos pesos. Como nas camadas intermediárias não existem valores de saída desejados, diferentemente da camada de saída, o ajuste dos pesos é feito por meio da propagação para trás do erro da camada de saída, o que caracteriza o treinamento com o *backpropagation* (fase *backward*) [10,11].

Assim, as sucessivas repetições (épocas) das fases *forward* e *backward* provocam uma progressiva redução do erro de treinamento.

O *backpropagation* possui, basicamente, três parâmetros que determinam seu desempenho e sua capacidade de aprendizagem: taxa de aprendizagem, *momentum* e o número épocas. A taxa de aprendizagem é um elemento muito importante no processo de treinamento, pois interfere no tempo de aprendizado e na convergência da solução para um mínimo local ou global. O termo *momentum* é uma constante que determina o efeito das mudanças passadas dos pesos na direção atual do treinamento, que tem por objetivo permitir o aumento na velocidade de convergência.

Para este trabalho se adotou o sistema Weka [12], desenvolvido em JAVA, que disponibiliza funções para treinamento de redes neurais e aplicação da rede MLP.

3. RESULTADOS DA TÉCNICA PROPOSTA

Para a classificação dos grupos genéticos foram selecionados apenas 192 atributos dos 500 disponibilizados pela espectrometria de RMN, além do atributo de classe que determina os grupos genéticos, devido ao número excessivo de atributos. Foi utilizado o método aleatório para a seleção

dos atributos. Os parâmetros definidos para o algoritmo *backpropagation* e a definição da MLP são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros de treinamento da MLP (Classificação de Grupos Genéticos)

Parâmetros	Valores
Taxa de Aprendizagem (<i>Learning Rate</i>)	0.3
<i>Momentum</i>	0.2
Número de Épocas	500
Número de Camadas Intermediárias	1
Sinais da Camada de Entrada	192
Neurônios da Camada Intermediária	27
Neurônios da Camada de Saída	6
<i>Cross-validation (folds)</i>	10

Para a classificação do sexo dos animais por meio da análise das carnes foram selecionados 51 atributos dos 500 disponibilizados pela espectrometria de RMN, além do atributo de classe que representa o sexo do animal.

O método de seleção utilizado foi o primeiro atributo, o décimo atributo, o vigésimo atributo, e assim sucessivamente até o último atributo. Os parâmetros definidos para o algoritmo *backpropagation* e a definição da MLP são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Parâmetros de treinamento da MLP (Classificação de Sexo)

Parâmetros	Valores
Taxa de Aprendizagem (<i>Learning Rate</i>)	0.2
<i>Momentum</i>	0.1
Número de Épocas	1500
Número de Camadas Intermediárias	1
Sinais da Camada de Entrada	51
Neurônios da Camada Intermediária	26
Neurônios da Camada de Saída	2
<i>Cross-validation (folds)</i>	10

3.1. Avaliação de Desempenho

Uma forma de estimar o desempenho futuro de uma MLP, a partir de um conjunto de dados, é utilizar o método *10-fold stratified cross-validation*. Neste método, os exemplos do conjunto de dados são divididos aleatoriamente em 10 grupos mutuamente exclusivos (*folds*) com tamanhos e distribuição de classes aproximadamente iguais. Um *fold* é separado para teste (um conjunto de novos exemplos a serem apresentados) e os 9 *folds* restantes são utilizados para treinamento da rede. Cada par (*fold* de teste, *fold* de treinamento) constitui uma iteração para a validação do algoritmo, totalizando 10 iterações. Após o treinamento utilizando o *fold* de treinamento, o *fold* de teste é apresentado à rede em questão e o erro de classificação é calculado. Esse processo é repetido para os 9 *folds* restantes.

Em seguida, a média (*md*) e o desvio padrão (*sd*) dos erros obtidos nas 10 iterações são calculados por:

$$md(A) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r err(h_i) \quad (1)$$



$$sd(A) = \sqrt{\frac{1}{r} \left[\frac{1}{r-1} \sum_{i=1}^r (err(h_i) - md(A))^2 \right]} \quad (2)$$

onde $err(h_i)$ é a taxa de erro da MLP h_i ; $md(A)$ é a média dos erros de validação no *fold* de teste das r hipóteses (classificadores) h_i geradas; A é o algoritmo de aprendizado considerado; $sd(A)$ é o desvio padrão do algoritmo A . A estimativa de desempenho em validação cruzada fornece argumentos ($md(A) \pm sd(A)$) conclusivos sobre desempenho futuro da rede considerando um algoritmo A [7].

4. DISCUSSÃO DE RESULTADOS

Diversos experimentos preliminares foram realizados para ajustar a melhor rede e os melhores parâmetros de treinamento.

Primeiramente, realizou-se uma investigação com o objetivo de se projetar uma arquitetura de rede neural artificial que fosse capaz de classificar e separar os grupos genéticos. Porém, os dados disponibilizados apresentam características não discriminantes para os grupos genéticos, dificultando ou até mesmo impossibilitando a determinação de tais grupos por meio de redes neurais do tipo MLP.

Os resultados apresentados na Tabela 3 foram obtidos por um dos treinamentos efetuados com os parâmetros da Tabela 1, sendo que todas as demais configurações testadas também não apresentaram bons resultados.

Tabela 3. Estimativa de grupos genéticos pela MLP.

Raça	Total de Acertos
AXTA	8
AXTS	4
BXTA	5
BXTS	2
CXTA	1
CXTS	0

Com base nestes resultados obtidos pela MLP, concluiu-se que as respostas fornecidas pela mesma foram incapazes para a estimação dos grupos genéticos. Isso fez com que surgisse a pesquisa de se projetar uma arquitetura de rede neural artificial para classificar o sexo dos animais, pois é possível de se obter através do mesmo diversas informações importantes, tais como o teor de gordura. Geralmente as fêmeas possuem uma maior retenção de gordura. Devido à preocupação com a ingestão excessiva de gorduras, a fim de se evitar doenças causadas pelo colesterol e outros, os nutricionistas recomendam o consumo de carnes magras, ou seja, com um baixo teor de gordura. Portanto, torna-se de extrema importância a informação sobre o sexo do animal na avaliação da qualidade e do consumo de carnes bovinas.

Os ajustes apresentados na Tabela 2 foram os melhores assumidos pela RNA para a determinação do sexo de bovinos. Na Tabela 4 são apresentadas as estimativas de

acurácia por sexo do animal, bem como a estimativa total da MLP.

Tabela 4. Acurácia da MLP para estimativa de sexo dos animais.

Sexo	Total de Acertos	Acurácia (%)
Fêmea	34	79,07
Macho	47	83,93
Macho e Fêmea	81	81,81

A estimativa de acurácia da rede adotada neste trabalho supera as expectativas. O sistema desenvolvido é capaz de prever o sexo de bovinos a partir da curva de decaimento de CPMG (amostras de carnes) com uma precisão de aproximadamente 82%.

5. CONCLUSÃO

O treinamento de uma RNA a partir de dados das curvas de decaimento possibilitou a construção de um classificador de sexo para carnes de bovinos relativamente acurado, capaz de acertar o sexo em pouco mais de 8 em cada 10 amostras de carnes analisadas. Assim, a MLP é um classificador apropriado para aplicações direcionadas às curvas de decaimento como as obtidas por CPMG, principalmente na extração de características relacionadas ao sexo dos animais. Similarmente, a MLP e a metodologia adotada neste trabalho podem ser aplicadas em outros tipos de carnes.

Os resultados obtidos indicam que a rede é capaz de detectar a sutil diferença entre as curvas de decaimento de machos e fêmeas. Assim, é possível construir um sistema para controle de qualidade da carne bovina, sob o aspecto de identificação do sexo a partir de curvas de decaimento de RMN (CPMG), utilizando a metodologia e a rede neural artificial projetada e implementada neste trabalho.

Este trabalho, em conjunto com a aplicação de MLP em dados de curvas de decaimento de RMN (CPMG) com amostras de carnes, evidencia uma estratégia factível e promissora para a construção de equipamentos que possam auxiliar no controle de qualidade de carnes e na cadeia produtiva como um todo.

AGRADECIMENTOS

À Embrapa Pecuária Sudeste (pesquisadores Rymer R. Tullio e Geraldo M. Cruz) pelo fornecimento das amostras de carne. À pesquisadora Cátia C. Corrêa por ceder os dados de CPMG que foram utilizados para a classificação da RNA. À Embrapa Instrumentação Agropecuária e CNPq por ter proporcionado os subsídios necessários para concretização deste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] T. Venâncio, "Novas aplicações da precessão livre em ondas contínuas em ressonância magnética nuclear de baixa e alta resolução", Instituto de Química de São Carlos, USP, 2006, 152 p. Tese (Doutorado).

- [2] R. B. V. Azeredo, "Espectroscopia de RMN no estado estacionário", Instituto de Química de São Carlos, USP, 1999, 97 p. Dissertação (Mestrado).
- [3] L. A. Colnago, A. Torre Neto, J. Ferrazini, R. Oste, "Espectrômetro de RMN para análise quantitativa," INPI, MU7602306-0, 1996.
- [4] C. C. Corrêa, "Avaliação da qualidade de carne bovina por RMN em baixa resolução", Universidade de São Paulo e Embrapa Instrumentação Agropecuária, 2005.
- [5] <http://www.criareplantar.com.br/noticia/ler/?idNoticia=1012>: acessado em 11/12/2006.
- [6] A. Nordon, C. A. McGill, D. Littlejohn, "Process NMR spectrometry", Analyst, Vol. 126, No. 2, pp. 260-272, 2001.
- [7] V. M. S. Gil, C. F. G. C. Geraldês, "Ressonância Magnética Nuclear. Fundamentos, Métodos e Aplicações", Lisboa, Fundação Calouste, 1987.
- [8] A. S. Weigend, B. A. Huberman, D. E. Rumelhart, "Predicting the future: A connectionist approach", International Journal of Neural Systems, Vol. 1, pp. 193-209, 1990.
- [9] E. J. Ferreira, "Abordagem genética para seleção de um conjunto reduzido de características para construção de ensembles de redes neurais: Aplicações à língua eletrônica", Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação de São Carlos, USP, 2005. Dissertação (Mestrado).
- [10] S. Haykin, "Neural Networks: a comprehensive foundation", 2nd Edition, McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, 1999.
- [11] A. P. Braga, T. B. Ludermir, A. C. P. L. F. Carvalho, "Redes Neurais Artificiais: Teorias e aplicações", 1 Edição LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 2000.
- [12] I. H. Witten, E. Frank, "Data Mining: Practical machine learning tools and techniques", 2nd Edition, Morgan Kaufmann, San Francisco, 2005.