

Aprendizado de Máquina em Redes Complexas

Fabricao Breve

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC)
Universidade de São Paulo (USP)
São Carlos, SP, Brasil

Resumo—Redes complexas é um campo de pesquisa científica recente e ativo que estuda redes de larga escala com estruturas topológicas não triviais, tais como redes de computadores, redes de telecomunicações, redes de transporte, redes sociais e redes biológicas. Muitas destas redes são naturalmente divididas em comunidades ou módulos e, portanto, descobrir a estrutura dessas comunidades é um dos principais problemas abordados no estudo de redes complexas. Tal problema está relacionado com o campo de aprendizado de máquina, que tem como interesse projetar e desenvolver algoritmos e técnicas que permitem aos computadores “aprender”, ou melhorar seu desempenho através da experiência. Alguns dos problemas identificados nas técnicas tradicionais de aprendizado incluem: dificuldades em identificar formas irregulares no espaço de atributos; descobrir estruturas sobrepostas de grupos ou classes, que ocorre quando elementos pertencem a mais de um grupo ou classe; e a alta complexidade computacional de alguns modelos, que impedem sua aplicação em bases de dados maiores. Na tese correspondente a este resumo tais problemas são tratados através do desenvolvimento de novos modelos de aprendizado de máquina utilizando redes complexas e dinâmica espaço-temporal, com capacidade para tratar grupos e classes sobrepostas, além de fornecer graus de pertinência para cada elemento da rede com relação a cada cluster ou classe. Os modelos desenvolvidos tem desempenho similar aos algoritmos do estado da arte, ao mesmo tempo em que apresentam baixa ordem de complexidade computacional.

I. INTRODUÇÃO

Esta é um resumo da tese de doutorado intitulada *Aprendizado de máquina em redes complexas*, de autoria de Fabricao Aparecido Breve, sob orientação do Prof. Dr. Zhao Liang. A tese foi defendida e aprovada em 23 de agosto de 2010, no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação da Universidade de São Paulo - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências - Ciências de Computação e Matemática Computacional.¹

Durante o desenvolvimento desta tese, o autor produziu vários artigos, como autor ou co-autor, incluindo quatro artigos publicados em periódicos internacionais [1]–[4], sendo um no periódico *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering* [4], um no periódico *Neural Networks*, e dois no periódico *Neurocomputing*, todos classificados no nível A1 do Qualis-CAPES. Além disso, 10 artigos foram publicados em conferências nacionais e internacionais [5]–[14].

No desenvolvimento da tese, foram estudadas diversas formas de aprendizado de máquina, com foco nas categorias de aprendizado não supervisionado e semi-supervisionado, com o objetivo de criar novas técnicas que pudessem ser aplicadas em redes complexas, e que pudessem contornar algumas limitações dos modelos existentes, como a detecção de classes ou grupos de formas irregulares, e a detecção de classes ou grupos sobrepostos. Modelos físicos e biológicos foram utilizados como inspiração para os modelos gerados e bons resultados foram obtidos.

¹Fabricao Breve atualmente trabalha no Instituto de Geociências e Ciências Exatas (IGCE), Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (UNESP) - E-mail: fabricao@rc.unesp.br

Nas próximas seções são apresentadas breves descrições dos modelos desenvolvidos e suas correspondentes publicações. Na seção IV são apresentadas as principais conclusões e contribuições obtidas com esta tese.

II. MODELOS BASEADOS EM REDES DE OSCILADORES ACOPLADOS

O desenvolvimento da tese se iniciou com um estudo do modelo dinâmico de agrupamento de dados proposto em [15], que utiliza sincronização completa entre osciladores acoplados. Com base em tal estudo, construímos um modelo de segmentação de imagens [3] utilizando sincronização completa entre osciladores Wilson-Cowan acoplados e dispostos em uma grade bi-dimensional, cada oscilador representando um pixel da imagem. Este modelo foi posteriormente estendido para realizar tarefas de atenção visual [13], [14], que é parte essencial de muitos sistemas de visão computacional. O modelo desenvolvido tem capacidade de selecionar um de vários objetos de interesse em uma imagem de entrada e de trocar o foco de um objeto para outro. Ele se utiliza das propriedades do caos e da sincronização caótica para separar os objetos que compõe a cena de entrada, e também inclui um mecanismo de inibição responsável por destacar o objeto mais saliente. Outra característica interessante deste modelo é a mudança de comportamento quando o objeto recebe o foco de atenção. Neste caso, o comportamento previamente caótico dá lugar a uma trajetória com fase fixa, que já foi observada em experimentos de reconhecimento de padrões feitos com coelhos [16]. Simulações computacionais foram realizadas para checar a viabilidade do mecanismo de seleção e mostraram que este é um mecanismo promissor para sistemas de atenção visual.

O próximo passo foi substituir a sincronização completa pela sincronização por fase, que é mais robusta e requer uma força de acoplamento menor. Para isso estudamos os osciladores de Rössler [17] e suas condições de sincronização. Além disso, tal substituição é particularmente interessante porque vários modelos de atenção visual já foram propostos utilizando sincronização completa entre osciladores para representar objetos [18]–[20], mas o fenômeno de sincronização observado em experimentos reais raramente representa uma sincronização completa, pois esta só é possível entre subsistemas idênticos, o que não acontece na natureza. Por outro lado, a sincronização por fase pode ser observada entre subsistemas não idênticos, e acredita-se que ela possa ser o mecanismo chave para integração de neurônios no cérebro [21]. Tal estudo resultou em um modelo (apresentado na Seção 3.2 da tese) que utiliza uma grade de osciladores Rössler acoplados, cada um representando um pixel da imagem. Os osciladores estão inicialmente em regime caótico, sendo que osciladores pertencendo ao mesmo objeto sincronizam por fase entre si, podendo manter amplitudes não correlacionadas, ao mesmo tempo em que osciladores de objetos diferentes diferem em fase. A atenção é caracterizada por uma mudança de comportamento nos osciladores correspondentes ao objeto selecionado, passando do

regime caótico para um regime periódico, ao mesmo tempo em que a frequência é aumentada. Este modelo tem como vantagem requerer uma força de acoplamento menor, sem risco de divergência para o infinito que ocorre quando uma força de acoplamento muito alta é usada.

A continuidade deste desenvolvimento com a introdução de diversas melhores, resultou em um novo modelo [1], [9] em que a segmentação ocorre em paralelo com o processo de atenção visual. Do ponto de vista biológico, este modelo é mais plausível, pois apenas o objeto que recebe atenção terá seus correspondentes osciladores sincronizados, enquanto que os demais objetos terão seus correspondentes osciladores dessincronizados. Além disso, o objeto considerado saliente é aquele que tem maior contraste de cores e intensidade com relação a outras partes da imagem, ao contrário dos modelos anteriores que utilizavam apenas a intensidade absoluta. Esta melhoria tem suporte direto de experimentos biológicos que mostram que o contraste entre atributos é mais importante que o valor absoluto dos mesmos quando tarefas de busca visual são realizadas em sistemas visuais biológicos [22], [23].

Este modelo e seus antecessores são pioneiros na utilização de sincronização por fase entre osciladores caóticos acoplados para tarefas de atenção visual, aproveitando a característica de requerer uma menor força de acoplamento para obter a sincronização, tornando possível a sincronização de uma maior quantidade de osciladores sem que o sistema diverja para o infinito. Destaca-se também a possibilidade de sincronizar osciladores não-idênticos, como acontece em sistemas biológicos. Estas características permitem lidar com imagens do mundo real relativamente complexas. Outra contribuição importante é a combinação do sistema de segmentação das imagens e do sistema de atenção visual em um único sistema, diferentemente do que ocorre em vários outros modelos de atenção visual, onde as etapas são separadas.

III. MODELOS BASEADOS EM MOVIMENTAÇÃO DE PARTÍCULAS EM REDES COMPLEXAS

Durante o desenvolvimento deste projeto, uma nova abordagem de detecção de comunidades foi proposta por integrantes do mesmo grupo de pesquisa [24]. Neste modelo, partículas caminham em uma rede competindo entre si pela posse dos vértices, e evitando a invasão de outras partículas nos vértices que já foram possuídos. Após um número de iterações é possível separar os grupos através da informação de posse de cada vértice. Tal abordagem pareceu bastante promissora, pois poderia ser utilizada em outros tipos de modelos que são o objetivo deste trabalho, como a detecção de comunidades sobrepostas, não apenas no âmbito do aprendizado não supervisionado, onde o modelo original foi proposto, como também no âmbito do aprendizado semi-supervisionado. Consequentemente, optou-se por fazer um estudo mais aprofundado dessa abordagem com o objetivo de criar novos modelos.

A partir de estudos da abordagem utilizada no modelo original [24], foram criados novos modelos baseados em movimentação de partículas. Inicialmente foi criada uma nova técnica de agrupamento de dados [11], apresentada na Seção 4.1 da tese, combinando caminhada determinística e aleatória e competição entre partículas, onde cada partícula corresponde a uma classe do problema. O algoritmo fornece como saída não apenas rótulos com valores absolutos, mas também valores nebulosos para cada nó da rede, que correspondem aos níveis de pertinência daquele nó com relação a cada comunidade

da rede. Para tanto foram utilizados mecanismos que medem o potencial dos vértices de maneira independente para cada partícula, e foram utilizadas informações extraídas da dinâmica temporal do modelo para compor as saídas do algoritmo. Simulações computacionais foram realizadas em dados sintéticos e reais, e os resultados mostram que este modelo é um mecanismo bastante promissor para descobrir a estrutura sobreposta de comunidades em redes complexas.

Em seguida, o modelo anterior foi modificado para permitir sua utilização no âmbito do aprendizado semi-supervisionado [8], onde apresentou bons resultados, comparáveis aos de métodos tradicionais, ao mesmo tempo em que apresentava um tempo de execução mais baixo. No segundo semestre de 2009, foi realizado um estágio de doutorado no exterior, junto ao *Department of Electrical and Computer Engineering* da *University of Alberta*, Edmonton, AB, Canadá, sob supervisão do Prof. Dr. Witold Pedrycz. Com a colaboração do Dr. Pedrycz, o modelo foi modificado incluindo não apenas competição entre partículas, mas também a cooperação. Além disso, o novo modelo incluiu a possibilidade de obter saídas contínuas, revelando a estrutura de sobreposição das classes. Na Seção 4.2 da tese é apresentado este novo método de classificação, que utiliza cooperação e competição entre partículas de forma combinada [4]. Foi utilizado um conceito de caminhada aleatório-gulosa de partículas, onde cada uma delas corresponde a um ponto de dado rotulado. Iniciando em um pequeno território que corresponde aos poucos nós rotulados, estas partículas expandem seu domínio caminhando na rede, colaborando com outras partículas da mesma classe, e competindo com partículas de outras classes para evitar que elas invadam seu território. Devido ao mecanismo de competição, há um efeito de dividir-e-conquistar embutido no método proposto. Desta forma, evita-se que partículas visitem uma quantidade considerável de nós que definitivamente pertencem a outros times de partículas. Em outras palavras, modelos de aprendizado semi-supervisionado baseados em grafos tradicionais espalham seus rótulos de uma maneira global, enquanto que o modelo proposto espalha seus rótulos de maneira local. Consequentemente, o método proposto tem uma complexidade de tempo menor que outros modelos baseados em grafos. Foi realizada uma análise, e o modelo proposto tem ordem de complexidade de no máximo $O(n^2)$, enquanto a maioria dos métodos baseados em grafos tem ordem de complexidade cúbica ($O(n^3)$) [25]. Portanto, o método proposto pode ser usado para classificar bases de dados maiores, sendo mais adequado ao estudo de redes complexas.

Simulações computacionais mostram que o método proposto é promissor para o aprendizado semi-supervisionado, resultando em boa taxa de classificação tanto para dados sintéticos quanto para dados do mundo real, especialmente em casos onde poucos dados estão disponíveis. Como citado, assim como no modelo de agrupamento, o modelo semi-supervisionado também pode gerar uma saída nebulosa para cada nó na rede. A saída nebulosa corresponde ao nível de pertinência de cada nó da rede com relação a cada classe. Uma medida de sobreposição é derivada dessa saída e pode ser considerada como um grau de confiança no rótulo fornecido. Este mecanismo também permite detectar *outliers* na base de dados. A saída nebulosa e a detecção de *outliers* realizadas pelo algoritmo proposto fornecem mecanismos para ajudar a impedir a propagação de erros durante o processo de aprendizado semi-supervisionado, evitando o risco da propagação de rótulos em um certo nível.

IV. CONCLUSÕES

A combinação de dinâmica e estrutura topológica se mostrou uma abordagem adequada para tratamento dos problemas computacionais abordados. Consequentemente, a continuidade deste estudo poderá trazer novas soluções para outros problemas computacionais e outros problemas relacionados com sistemas complexos.

Nos modelos baseados em osciladores, o uso da sincronização por fase - mais robusta - além de biologicamente plausível, pode oferecer uma boa contribuição em sistemas de análise de dados (padrões) baseados em sincronização de sistemas caóticos acoplados. Além disso, a abordagem inédita de construção de um sistema que combina tarefas de segmentação e atenção visual em um único passo, tem importância teórica e prática, pois oferece um novo caminho no desenvolvimento de sistemas de visão computacional.

O mecanismo de competição e cooperação entre partículas em redes complexas oferece um caminho alternativo para o desenvolvimento de redes neurais artificiais, que considera a estrutura dos dados de entrada, diminuindo o efeito de “caixa preta”. Tal abordagem se mostrou eficaz na detecção de nós sobrepostos, oferecendo novas formas de tratamento de dados que apresentem tais estruturas. A estratégia de competição e cooperação entre partículas é diferente das técnicas tradicionais de aprendizado semi-supervisionado, apresentando bom desempenho de classificação (comparável ao estado da arte), baixa complexidade computacional (menor do que muitos algoritmos da mesma categoria), e possibilidade de detectar *outliers* e evitar a propagação de erros vinda dos mesmos, mostrando ser uma abordagem de aprendizado promissora, e abrindo caminho para o desenvolvimento de outras técnicas inspiradas pela natureza.

Com base no desenvolvimento realizado e descrito acima, podemos destacar como principais contribuições deste projeto o desenvolvimento de: novos modelos de atenção visual, utilizando pela primeira vez a sincronização por fase entre sistemas caóticos; novos modelos de atenção visual que realizam a segmentação de um objeto ao mesmo tempo em que direcionam a ele o foco de atenção; nova técnica de agrupamento de dados, com capacidade de detectar sobreposição entre grupos e fornecer graus de pertinência à cada grupo por cada elemento; nova técnica de aprendizado semi-supervisionado, com desempenho comparável ao de técnicas do estado da arte, além de complexidade computacional inferior a de muitos outros modelos baseados em grafos, e abordagem fundamentalmente diferente das demais; e nova técnica de aprendizado semi-supervisionado capaz de detectar sobreposição entre classes e minimizar a propagação de erros provenientes de *outliers*.

REFERÊNCIAS

- [1] F. A. Breve, L. Zhao, M. G. Quiles, and E. E. N. Macau, “Chaotic phase synchronization and desynchronization in an oscillator network for object selection,” *Neural Networks*, vol. 22, no. 5-6, pp. 728–737, 2009.
- [2] M. G. Quiles, L. Zhao, F. A. Breve, and R. A. Romero, “A network of integrate and fire neurons for visual selection,” *Neurocomputing*, vol. 72, no. 10-12, pp. 2198 – 2208, 2009.
- [3] L. Zhao and F. A. Breve, “Chaotic synchronization in 2d lattice for scene segmentation,” *Neurocomputing*, vol. 71, no. 13-15, pp. 2761–2771, 2008.
- [4] F. Breve, L. Zhao, M. Quiles, W. Pedrycz, and J. Liu, “Particle competition and cooperation in networks for semi-supervised learning,” *Knowledge and Data Engineering, IEEE Transactions on*, vol. 24, no. 9, pp. 1686 –1698, sept. 2012.
- [5] F. Breve, L. Zhao, and M. Quiles, “Semi-supervised learning from imperfect data through particle cooperation and competition,” in *Neural Networks (IJCNN), The 2010 International Joint Conference on*, 2010, pp. 1–8.
- [6] M. Quiles, L. Zhao, F. Breve, and A. Rocha, “Label propagation through neuronal synchrony,” in *Neural Networks (IJCNN), The 2010 International Joint Conference on*, 2010, pp. 1–8.
- [7] M. Quiles, L. Zhao, and F. Breve, “A network of integrate and fire neurons for community detection in complex networks,” in *DINCON 2010*, jun 2010.
- [8] F. A. Breve, L. Zhao, and M. G. Quiles, “Particle competition in complex networks for semi-supervised classification,” in *Complex (1)*, ser. LNCS, Social Informatics and Telecom. Engineering, J. Zhou, Ed., vol. 4. Springer, 2009, pp. 163–174.
- [9] F. A. Breve, L. Zhao, M. G. Quiles, and E. E. N. Macau, “Chaotic phase synchronization for visual selection,” *International Joint Conference on Neural Networks*, pp. 383–390, 2009.
- [10] M. G. Quiles, L. Zhao, F. A. Breve, and R. A. F. Romero, “Detecção de comunidades em redes complexas: um modelo de correlação oscilatória,” in *VII Encontro Nacional de Inteligência Artificial (ENIA), Anais do XXIX Congresso da Sociedade Brasileira de Computação*, Bento Gonçalves, RS, 2009, pp. 889–898.
- [11] F. A. Breve, L. Zhao, and M. G. Quiles, “Uncovering overlap community structure in complex networks using particle competition,” in *Int. Conf. on Artificial Intelligence and Computational Intelligence (AICI’09)*, vol. 5855, 2009, pp. 619–628.
- [12] M. G. Quiles, F. Breve, R. A. F. Romero, and L. Zhao, “Visual selection with feature contrast-based inhibition in a network of integrate and fire neurons,” *Int. Conf. on Natural Computation*, vol. 3, pp. 601–605, 2008.
- [13] L. Zhao, F. A. Breve, M. G. Quiles, and R. A. Romero, “Visual selection and shifting mechanisms based on a network of chaotic wilson-cowan oscillators,” in *ICNC 2007: Third Int. Conf. on Natural Computation*, vol. 5, 2007, pp. 754–762.
- [14] M. Quiles, F. Breve, L. Zhao, and R. Romero, “A visual selection mechanism based on network of chaotic wilson-cowan oscillators,” in *ISDA ’07: Proceedings of the Seventh Int. Conf. on Intelligent Systems Design and Applications*. Washington, DC, USA: IEEE Computer Society, 2007, pp. 919–924.
- [15] L. Zhao, A. de Carvalho, and Z. Li, “Pixel clustering by adaptive moving and chaotic synchronization,” *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 15, no. 5, pp. 1176–1185, Sep 2004.
- [16] C. A. Skarda and W. J. Freeman, “How brain make chaos in order to make sense of the world,” *Behavioral and Brain Sciences*, vol. 10, pp. 161–195, 1987.
- [17] O. E. Rössler, “An equation for continuous chaos,” *Physics Letters A*, vol. 57, no. 5, pp. 397–398, Jul 1976.
- [18] D. L. Wang, “Object selection based on oscillatory correlation,” *Neural Networks*, vol. 12, pp. 579–592, 1999.
- [19] Y. Kazanovich and R. Borisyuk, “Object selection by an oscillatory neural network,” *Biosystems*, vol. 67, pp. 103–111, 2002.
- [20] M. G. Quiles, L. Zhao, and R. Romero, “A selection mechanism based on a pulse-coupled neural network,” in *The 20th International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, Orlando-US, 2007, pp. 1–6.
- [21] F. Varela, J.-P. Lachaux, E. Rodriguez, and J. Martinerie, “The brainweb: Phase synchronization and large-scale integration,” *Nature Reviews Neuroscience*, vol. 2, pp. 229–239, April 2001.
- [22] J. M. Wolfe and T. S. Horowitz, “What attributes guide the deployment of visual attention and how do they do it?” *Nature Reviews Neuroscience*, vol. 5, no. 6, pp. 495–501, June 2004.
- [23] S. Yantis, “How visual salience wins the battle for awareness,” *Nature Neuroscience*, vol. 8, no. 8, pp. 975–977, 2005.
- [24] M. G. Quiles, L. Zhao, R. L. Alonso, and R. A. F. Romero, “Particle competition for complex network community detection,” *Chaos*, vol. 18, no. 3, pp. 033 107 (1–10), 2008.
- [25] X. Zhu, “Semi-supervised learning literature survey,” Computer Sciences, University of Wisconsin-Madison, Tech. Rep. 1530, 2005.