PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE GOIÁS ESCOLA DE CIÊNCIAS EXATAS E DA COMPUTAÇÃO GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DA COMPUTAÇÃO



CLASSIFICAÇÃO DE BACTÉRIAS USANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS E REDES NEURAIS CONVOLUCIONAIS

VINÍCIUS MORAES DE SOUSA

GOIÂNIA 2021

VINÍCIUS MORAES DE SOUSA

CLASSIFICAÇÃO DE BACTÉRIAS USANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS E REDES NEURAIS CONVOLUCIONAIS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Bacharel em Engenharia da Computação.

Orientador(a): Prof. Dr. Clarimar José Coelho Coorientador(a): Arthur Ricardo de Sousa Vitória

VINÍCIUS MORAES DE SOUSA

CLASSIFICAÇÃO DE BACTÉRIAS USANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS E REDES NEURAIS CONVOLUCIONAIS

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia da Computação e aprovado em sua forma final pela Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, em 09 de dezembro de 2021.

> Prof. Me. Ludmilla Reis Pinheiro dos Santos Coordenadora de Trabalho de Conclusão de Curso

Banca examinadora:

Orientador(a): Prof. Dr. Clarimar José Coelho

Engenheiro Arthur Ricardo de Sousa Vitória

Engenheiro Douglas Vieira do Nascimento

GOIÂNIA

2021

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer o Prof. Dr. Arlindo Galvão Filho que me ajudou a traçar o percurso acadêmico, seja no auxílio de dúvidas ou no suporte ao tema do qual venho tratando, o que facilitou nesse processo de construção. Também gostaria de agradecer ao Prof. Dr. Clarimar José Coelho pela orientação e ao coorientador Arthur Ricardo de Sousa Vitória pelo auxílio e apoio durante todo o processo de construção do trabalho aqui presente. Destaco também os agradecimentos a Coordenação do curso de Engenharia de Computação, Escola de Ciências Exatas e da Computação, demais instuições da PUC Goiás, instituições de ensino e pesquisa e/ou campos de estágio externos a PUC Goiás, instituições de fomento vestibular social, que foi crucial para minha permanência no curso e desenvolvimento da pesquisa. Agradeço também ao Instituto de Patologia Tropical de Saúde Pública da Universidade Federal de Goiás por fornecer as amostras de bactérias para a construção do trabalho.

Por último, mas não menos importante, agradeço a minha mãe, Renata Gabriel Moraes, minha avó, Luzia Gabriel Moraes, pelo apoio, carinho e amor depositados em mim durante o percurso e caminhada até aqui.

RESUMO

Aprendizagem profunda de acordo com Bezerra (2016) seria uma subárea para a instrução no Aprendizagem de Máquina que analisa e pesquisa processos e métodos para se assemelhar a ações do cérebro humano em funções como reconhecimento de fala, ou o processo de linguagem corporal e reconhecimento visual, esse tem se mostrado eficaz no reconhecimento de padrões e classificação de imagens hiperespectrais. Com este estudo, tem-se por objetivo aplicar o aprendizado profundo com redes neurais convolucionais no reconhecimento de imagens hiperespectrais de bactérias com o intuito de acelerar o processo de identificação das mesmas, diminuindo o custo para a classificação e aumentando a eficácia do tratamento. Beekmann et al. (2003) apresenta como décima causa de morte nos Estados Unidos as infecções da corrente sanguínea (BSIs), sendo também associadas a maior taxa de hospitalização, onde a "[...] taxa de letalidade no hospital variou de 4,2% com "bacteremia"e 6.9% com septicemia por E. coli a 22.2% com 'septicemia devido a organismo Gramnegativo, não especificado' e 26,8% com 'septicemia não especificada''' (BAINE; YU; SUMME, 2001). Houve também um maior tempo de internação, onde Pittet, Tarara e Wenzel (1994) cita que durante o período de estudo o tempo de internação extra hospitalar e na SICU (Surgical Intensive Care Unit) atribuível à infecção da corrente sanguínea foi de 24 e 8 dias, respectivamente. Os custos extras atribuíveis à infecção foram em média \$40.000 dólares por sobrevivente. Assim, segundo Beekmann et al. (2003) a identificação precoce sobre o BSI possibilita uma otimização imediata da terapia antimicrobiana e diminui a necessidade de estudos diagnósticos adicionais, que podem servir para haver uma diminuição do tempo de internação e sobre esses custos. Tem-se por objetivo treinar uma rede que seja capaz de classificar bactérias por imagens hiperespectrais, de forma a diminuir o custo de estadia do paciente no hospital e eficácia no combate do micróbio presente no organismo, visto que a identificação tardia é maléfica ao mesmo. O método para o préprocessamento das imagens foi por meio de pesquisa bibliográfica com a finalidade de aperfeiçoamento e atualização do conhecimento através de uma investigação científica de obras já publicadas, juntamente com uma combinação de empirísmo e artigos para compor a arquitetura da rede.

Palavras-chave: Imagens Hiperespectrais. Aprendizado Profundo. Bactérias.

ABSTRACT

Deep learning according to Bezerra (2016) would be a sub-area for instruction in Machine Learning that analyzes and researches processes and methods to resemble human brain actions in functions such as speech recognition, or the process of body language and recognition visual, this has been sufficiently effective in pattern recognition and classification of hyperspectral images. With this study, the objective is to apply deep learning with convolutional neural networks in the recognition of hyperspectral images of bacteria in order to accelerate the sample identification process, reducing the cost of classification and increasing the effectiveness of the treatment. Beekmann et al. (2003) has bloodstream alterations (BSIs) as the tenth leading cause of death in the United States, and is also associated with a higher rate of hospitalization, where the "[...] hospital fatality rate ranged from 4.2% with 'bacteremia' and 6.9% with E. coli septicemia at 22.2% with 'septicemia due to a Gram-negative, unspecified organism' and 26.8% with 'inexact septicemia' " (BAINE; YU; SUMME, 2001). There was also a longer length of stay, where Pittet, Tarara e Wenzel (1994) cites during the study period the length of stay outside the hospital and in the SICU attributable to bloodstream infection of 24 and 8 days, respectively. The extra costs attributable to the infection averaged \$40,000 dollars per survivor. Thus, according to Beekmann et al. (2003), the early identification of BSI enables an immediate optimization of antimicrobial therapy and the need for additional diagnostic studies, which can serve to reduce the length of hospital stay and these costs. The objective is to train a network capable of classifying bacteria by hyperspectral images, in order to reduce the cost of the patient's stay in the hospital and efficiency in combating the microbe present in the body, since late identification is harmful to it. The method for the pre-processing of the images was through bibliographical research with the updating of improvement and updating of knowledge through a scientific investigation of works already published, together with a combination of empiricism and articles to compose the network's architecture. **Keywords**: Hyperspectral images. Deep Learning. Bacteria.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Aplicação do k-means em dois clusters	3
Figura 2 – Aplicação do filtro SNV $\ldots \ldots 14$	4
Figura 3 – Representação do filtro Savitzky-Golay	5
Figura 4 – Representação de uma imagem HSI 10	б
Figura 5 – Representação das áreas ligadas à IA 10	б
Figura 6 – Representação de um neurônio $\ldots \ldots $ 1'	7
Figura 7 – Representação de uma rede neural $\ldots \ldots $	8
Figura 8 – Scan de linha	0
Figura 9 – Sequência de algoritmos aplicados à HSI $\hfill \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 2$	1
Figura 10 – Aplicação do passo para remoção do fundo	2
Figura 11 – Média dos espectros em cada passo	2
Figura 12 – Desdobramento do hipercubo 23	3
Figura 13 – Concatenação dos hipercubos	3
Figura 14 – Época x Loss durante o treinamento	5
Figura 15 – Matriz de confusão da CNN aplicada ao conjunto de teste $\ldots \ldots \ldots 20$	δ

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Identificação das bactérias .	•	•	•	•	 •	•		•	•	•		 •	•	•	21
Tabela 2 –	Configuração da rede CNN		•				•			•	•			•	•	24

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- PDI Processamento Digital de Imagens
- MSC Multiplicative Signal Correction
- SNV Standard Normal Variate
- ML Machine Learning
- HSI Hyperspectral Imaging
- MSI Multispectral Imaging
- IA Inteligência artificial
- DL Deep Learning
- MLP Multilayer Perceptron
- PCA Principal component analysis
- SWIR Short-wave InfraRed
- nm Nanômetro

SUMÁRIO

1	Intr	odução	10
2	Mat	eriais e métodos	12
	2.1	PCA	12
	2.2	Clusterização k-means	13
	2.3	Filtro SNV	14
	2.4	Filtro Savitzky-Golay	14
	2.5	Imagens Hiperespectrais	15
	2.6	Redes Neurais Artificiais	15
	2.7	Redes Neurais Convolucionais	18
3	Res	ultados e discussões	20
	3.1	Aquisição de dados	20
	3.2	Pré-processamento	20
	3.3	Arquitetura da rede	23
	3.4	Análise dos resultados	24
4	Con	clusão	27

REFERÊNCIAS	••	•	•	•	•	•	•	•	•	•		•	•				•	•	•	•	•	•	•	•	•		•	•	•			•	•	•	•	•	•		2	8
-------------	----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	--	---	---	--	--	--	---	---	---	---	---	---	---	---	---	--	---	---	---	--	--	---	---	---	---	---	---	--	---	---

1 Introdução

Segundo Prakash et al. (2007), o método mais popular para a classificação de bactérias se dá por meio de uma análise multifásica envolvendo o estudo bioquímico, morfológico e fisiológico para a determinação do gênero e espécie do micróbio. Assim, imagem hiperespectral é um método não invasivo, que provê informações espaciais assim como os outros sistemas de imagem, juntamente com uma informação espectral em cada ponto para a espectroscopia, que mede a absorção de radiação infravermelho nos ligamentos químicos do objeto (BARBIN et al., 2012; NG; SIMMONS, 1999). O aprendizado profundo apresenta um desempenho elevado em classificações como reconhecimento de fala e digitos escritos a mão, entre outros, enquanto é quase impossível escrever um algoritmo que consiga realizar essas operações, se destacando também nas áreas de visão computacional (LAUZON, 2012; O'SHEA; HOYDIS, 2017). A classificação célere desses microorganismos ajudam a prevenção e o combate de patógenos, com aplicações no ramo alimentício, ambiental ou industrial (ASSIS; JULIANO; JULIANO, 2011).

Também é importante salientar a identificação prematura de infecções sanguíneas (bacteremia), que com o monitoramento contínuo acelera o método manual de reconhecimento através de cultura sanguínea em 1 a 1,5 dias. Quanto mais precoce a análise e classificação da infecção, melhor, pois reduz o tempo de estadia no hospital e custo para o paciente, que chega a \$40 mil dólares por paciente em casos atribuíveis à infecção da corrente sanguínea (BEEKMANN et al., 2003; PITTET; TARARA; WENZEL, 1994).

Utilizando redes neurais convolucionais, o presente trabalho visa a classificação por gênero e espécie das amostras trabalhadas, quanto a sua reflectância, capturadas por uma câmera hiperespectral que opera na região SWIR (short wave infrared region). Esse trabalho tem por objetivo a aplicação do método de aprendizado profundo por meio do reconhecimento de imagens para acelerar no processo de classificação de bactérias, reduzir o custo para o laboratório e o tratamento do paciente e aumentar a efetividadade do tratamento.

De acordo com Kelley (2017), a identificação tardia para o tratamento o tempo de resposta é crítico, onde o tratamentos de infecções de urina, sangue e carne são beneficiadas por meio do rapido. Entre o diagnóstico de infecções bacterianas do sangue que podem levar à sepse é particularmente sensível ao tempo, diminui a expectativa de sobrevivência do paciente em 7.6%. A maioria dos testes dos testes de doenças infecciosas é realizada atraves de técnicas microbiológicas convencionais que variam de acordo com a cultura de amostras clínicas e sequente a teste de susceptibilidade antimicrobiana. Assim a bactérias devem ser cultivadas para haver assim um aumento sobre sua numeração para níveis perceptiveis ao um "métodos baseados em densidade óptica, reculturadas como isolados puros, e então analisado quanto à resistência aos antibióticos"(KELLEY, 2017). Existem metodos para diluição em caldo ou em gradiente antimicrobiano que concedem o "cálculo das aglutinações inibitórias mínimas da terapêutica e a identificação de fenótipos resistentes" (KELLEY, 2017). E mesmo sendo métodos manuais, os sistemas para teste automatizados são também utilizados em laboratórios de testes clínicos permitindo testes com padronizações elevadas. Porem, a duração para o resultado do teste geralmente e longa, podendo durar 72 horas ou mais, requerendo um tratamento para as infeções graves sem um resultado, podendo haver assim uma propagação sobre a doença ou a progressão de complicações (KELLEY, 2017).

Como mencionado por Arrigoni, Turra e Signoroni (2017), um grande número de pequenas aplicações em pequena escala de imagem hiperespectral tem voltado suas atenções para o campo da HSI, que tende a crescer, devido ao baixo custo dos dispositivos de aquisição HSI. Assim, a HSI seja uma realidade estabelecida e efetivamente estudada, é também uma modalidade de imagem avançada cada vez mais utilizada em uma variedade de setores de execuções complementares, como em controle de qualidade e segurança alimentar e várias aplicações biomédicas. Assim, o campos de aplicação para HSI em Microbiologia Clínica (CM)e um do mais novos e promissores. Arrigoni, Turra e Signoroni (2017) explica que Laboratórios de bacteriologia em todo o mundo estariam atualmente empenhados sobre as tendências tecnológicas referentes a automação de laboratório e digitalização. Havendo assim grandes expectativas dentro da comunidade científica na exploração de tecnologias de imagem para haver uma aceleração para haver a identificação de patógenos, visto que existe uma emergência mundial de bactérias resistentes a medicamentos.

Atualmente, as imagens hiperespectrais, que segundo Gowen et al. (2015), seriam o metodo mais assertivas em relação ao método tradicional que envolvem amostragem e análises microbiológicas clássicas, que são trabalhosas e demoradas consumindo, e não fornecendo um resultado em um tempo menor. Como mencionado por Gu et al. (2020), já existem avanços usando modelos otimizados de SVM, chegando a 98.73% de acurácia para a predição removendo algumas bandas do espectro completo e 98.82% utilizando todas as bandas.

Assim, no primeiro capítulo, é discorrido sobre os métodos utilizados para o préprocessamento das imagens bem como uma introdução às imagens hiperespectrais e redes convolucionais. No segundo capítulo, é apresentado o resultado da arquitetura de redes neurais aplicadas ao problema. E no ultimo capítulo, o estudo do uso do método de redes neurais para a classificação das bactérias quanto ao seu gênero e espécie.

2 Materiais e métodos

2.1 PCA

Em um conjunto volumoso, com várias amostras e diferentes valores, fica difícil a análise assertiva da estrutura desse conjunto, onde diminuir as variáveis com a mínima perda, seria essencial para a interpretação do mesmo. Como o exemplo citado por Jolliffe (1990), tem-se um conjunto com medições de temperatura de 50 estações diferentes com 365 observações. O conjunto apresenta então 50 variáveis (estações) que estão altamente correlacionados dificultando a análise. Reduzir o conjunto de forma assertiva afin de correlacionar as estações que mantém a informação de temperatura mais relevante é o preceito da PCA.

Provavelmente a técnica mais usada para reduzir a quantidade de variáveis de um conjunto mantendo a informação relevante. Isso é possível para o PCA, que localiza combinações lineares dentro de um conjunto x com p variáveis, onde se tem a máxima variância não relacionado ao componente anterior. Apesar de simples, a técnica é muito útil e utilizada, com seu conceito introduzido por Pearson (1901) e apresentado em Hotelling (1933), tem livros e artigos englobando a técnica comumente chamada de PCA (JOLLIFFE, 2005).

PCA é a transformação de bases ortogonais de modo a manter os componentes que contem a maior variância dentro do conjunto. Primeiramente, calcula-se a matriz de covariância e seus autovalores e autovetores. Então é selecionado alguns autovetores com o propósito de reduzir a dimensão da matriz original (NAIK, 2017).

Como elucidado por Naik (2017), dado um conjunto **X** com **N** amostras, onde $x_i \in \Re^D, i = 1, 2, ...N$ corresponde a amostra com *D* bandas e os dados centrados na média $(x_i = x_i - Ex_i)$, o autovalor é dado por:

$$\lambda V = \Sigma_x V \tag{1}$$

onde λ é o autovalor, V o autovetor, e Σ_x é a matrix de covariância dada por:

$$\Sigma_x = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^N x_i x_i^T \tag{2}$$

onde x_i^T é a matriz tranposta de x_i . Por fim, o componente principal é definido por:

 $y_i = W^T x_i \tag{3}$

onde W^T é a matriz transposta dos primeiros d autovetores normalizados dos maiores autovalores da matriz de covariância Σ_x .

2.2 Clusterização k-means

O processo de agrupamento dos dados com similaridades facilita o processamento e o k-means é um dos mais populares algoritmos para a tarefa, apesar da definição da quantidade de clusters ser empírica e difícil levando em conta a quantidade "correta" e o desempenho do algoritmo (PHAM; DIMOV; NGUYEN, 2005). É um problema recorrente em áreas como aprendizado de máquina, reconhecimento de padrões, processamento de imagens e estatística, pois precisa-se definir regiões onde a quantidade de objetos seja maior que em outras (LIKAS; VLASSIS; VERBEEK, 2003).





Fonte: adaptada de CHEUNG (2003).

O critério de agrupamento mais simples calcula o quadrado da distância dos pontos à uma centroide, e soma todas as distâncias. K-means é um algoritmo que minimiza localmente essa soma, mas que como todos os procedimentos locais, depende muito das condições iniciais. Apesar de se ter estudos com outros métodos estocásticos para otimização do k-means (e.g, algoritmos genéticos) a ideia mais aceita são vários reinícios com diferentes pontos iniciais (LIKAS; VLASSIS; VERBEEK, 2003). Na Figura 11 podemos ver os resultados do k-means em um conjunto com 2 *clusters*, onde * são as centróides finais encontradas pelo algoritmo. A forma mais utilizada de agrupamento é dada por:

$$E(m_1, ..., m_m) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{M} I(x_i \in C_k) \|x_i - m_k\|^2, \qquad (4)$$

onde $X = \{x_1, ..., x_N\}, x_n \in \mathbb{R}^d$. Separa-se o conjunto M em subsets $C = \{C_1, ..., C_M\}$ para otimizar a busca global da solução, calculando a distância Euclidiana dos pontos x_i até a centroide C_k (LIKAS; VLASSIS; VERBEEK, 2003).

2.3 Filtro SNV

O pré-processamento tem por objetivo reduzir a interferência física da máquina, que normalmente é custosa e complexa a ponto da quantidade fornecida de amostras ser limitada. Assim como o MSC, o SNV tem a competência de reduzir efeitos aditivos e multiplicativos da imagem sendo centrada no desvio padrão (BI et al., 2016). O filtro é definido por:

$$z = (x - mean(x))/std(x)$$
(5)

onde z é o espectro transformado, x é o vetor/matriz de valores, mean é a media dos valores e std é o desvio padrao do conjunto.



Figura 2 – Aplicação do filtro SNV

Fonte: adaptada de GUO; WU; MASSART (1999).

A transformação atua em todo o conjunto x de forma individual e (GUO; WU; MASSART, 1999). Como descrito por BARNES; DHANOA; LISTER (1989), a transformação também é efetiva quanto a variância dentro de uma mesma classe. Na figura 2 temos os espectros de duas classes definidas por -.- e __.

2.4 Filtro Savitzky-Golay

Usado em várias áreas como química e processamento de imagens para suavização e diferenciação, o filtro (SAVITZKY; GOLAY, 1964) tem por premissa ajustar 2m+1subconjuntos em um polinômio de grau p ($p \ll 2m$) com a estratégia de mínimos quadrados. A diferenciação ($0 \ll d \ll p$) é aplicada no polinômio ajustado e não na entrada de dados, e por fim, aplica-se uma convolução da entrada com o filtro 2m+1 criado, onde o grau do polinômio e a ordem de derivação não tem restrições, a quantidade de janelas é sempre ímpar. (LUO; YING; BAI, 2005) Essa convolução pode ser interpretada como um filtro de média com os pesos definidos pelo polinômio, que quando aplicados aos dados, atenuam os ruídos preservando os pontos de interesse e podem ser aplicados a dados contínuos e suaves (CHEN et al., 2004).

Figura 3 – Representação do filtro aplicado para suavização com 7 pontos



Fonte: adaptada de SAVITZKY; GOLAY (1964).

2.5 Imagens Hiperespectrais

São imagens com dezenas ou centenas de espectros em uma banda enquanto as imagens multiespectrais contém poucas, geralmente menos que dez (QIN et al., 2013). Podemos aplicar HSI para estimar biomas e biodiversidades no ramo da ecologia, propriedades físico-químicas de minerais na geologia, qualidade da água no ramo da hidrologia entre outros (FAUVEL et al., 2012).

2.6 Redes Neurais Artificiais

A inspiração para esse modelo computacional vem do sistema nervoso dos seres vivos, "[...]podem ser definidas como um conjunto de unidades de processamento, caracterizadas por neurônios artificiais, que são interligados por um grande número de interconexões (sinapses artificiais), sendo representados aqui por vetores/matrizes de pesos sinápticos."(SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010). Das Características, temos que as RNA aprendem por experiência, tem capacidade de abstração, flexibilidade a falhas e são fáceis de modelar a arquitetura (dependendo da aplicação) (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Baseando-se no cérebro humano, Fitch (1944) desenvolveu um modelo para RNA, onde temos o sinal de entrada $\{x1, x2...\}$, os pesos sinápticos w1, w2..., um combinador linear \sum , o limiar de ativação θ , o potencial de ativação u, a função de ativação g e o sinal de saída y (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010), como mostrado na figura 6.

Figura 4 – Representação de uma imagem HSI



Fonte: autoria própria.

Figura 5 – Representação das áreas ligadas à IA



Fonte: autoria própria

As duas equações a seguir, segundo Fitch (1944) compilam a ideia da figura 6.

$$u = \sum (w_i * x_i - \theta) \tag{6}$$

$$y = g(u) \tag{7}$$

O arranjo, ou distribuição, de diversos neurônios definem uma topologia de uma rede neural, podemos variar a quantidade de neurônios ou até a função de ativação dentro de uma mesma arquitetura. De forma geral, a RNA é dividida em três partes: camada de entrada, camada(s) escondida(s) e camada de saída. As arquiteturas mais importantes, considerando a disposição dos neurônios, são: redes feedforward de camada simples, feedforward de camada múltipla e rede reticulada (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010).





Fonte: autoria própria

O perceptron é um tipo de rede neural para classificação e tem dois modelos: O perceptron de Rosenblatt e o multilayer perceptron (ZHANG; ZHANG; KHELIFI, 2018). O modelo de camada única de Rosenblatt advém de uma disposição dos neurônios, com o propósito de criar um modelo computacional da retina para identificar padrões geométricos. (Ivan Nunes). O perceptron de multicamada por outro lado é bem diferente do de camada única, "[...]consiste em uma camada de entrada de m nós de origem, i camadas ocultas hi de neurônios e uma camada de saída de n neurônios." (ZHANG; ZHANG; KHELIFI, 2018). A arquitetura de uma fully connected de perceptrons de múltiplas camadas, consiste em um neurônio de qualquer camada ser conectado com todos os neurônios da camada anterior e o fluxo de dados é da esquerda para a direita (ZHANG; ZHANG; KHELIFI, 2018). Devido às camadas escondidas, a arquitetura de múltiplas camadas pode resolver problemas não linearmente separáveis, como o caso do problema XOR. onde não existe possibilidade de um perceptron de camada simples resolver (ZHANG; ZHANG; KHELIFI, 2018).

Esse processo de aprendizado com múltiplas camadas pode ser dividido em duas fases. A primeira, chamada de "propagação adiante" (forward), os valores são propagados de camada em camada, considerando os pesos sinápticos. Na sequência, compara-se as saídas da rede com a resposta esperada e começa a segunda fase chamada de "propagação reversa", backward. Nessa fase, é ajustada todos os pesos sinápticos de forma a reduzir os erros gerados pela rede de forma gradativa (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010). Para o ajuste, é necessário saber qual o desvio que cada neurônio contribui para a saída atual de forma a ajustar e conseguir a saída desejada. Para tal, emprega-se a definição do gradiente Figura 7 – Representação de uma rede neural



Fonte: autoria própria

como segue na fórmula:

$$\nabla E^{(k)} = \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(k)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(k)}} \cdot \frac{\partial Y_j^{(k)}}{\partial I_j^{(k)}} \cdot \frac{\partial I_j^{(k)}}{\partial W_{ji}^{(k)}}, \tag{8}$$

onde $W^{(k)}$ é a matriz de pesos sinápticos da camada (k), $I^{(k)}$ é a combinação linear aplicada à camada (k), $Y^{(k)}$ é a função de ativação aplicada à combinação linear I e $E^{(k)}$ é o erro quadrático médio representado na fórmula 11.

$$E_M = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^{p} E_k,$$
(9)

onde p é a quantidade de amostras e E_k é calculado como mostrado na equação .

$$E_{(k)} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} (d_j(k) - Y_j^{(t)}(k))^2,$$
(10)

onde $E_{(k)}$ é o cálculo do erro da k-ésima amostra de treinamento, $Y_j^{(t)}(k)$ é o valor da saída do j-ésimo neurônio da rede, $d_j(k)$ o valor desejado e t a última camada da topologia em questão.

2.7 Redes Neurais Convolucionais

Uma área inovadora para o campo de reconhecimento de padrões (ex: voz e imagem), com o benefício de reduzir a quantidade de parâmetros a serem treinados comparado a uma RNA clássica. Outro aspecto importante é a extração de características para completar uma tarefa ignorando o resto, como reconhecer uma face ignorando a paisagem. O nome vem da operação matricial matemática e possui camadas de convolução, camadas não lineares, camadas de pooling e camadas fully connected. A ideia é a abstração das primeiras camadas e propagação dessas abstrações, como detecção de bordas (ALBAWI; MOHAMMED; AL-ZAWI, 2017). Das camadas temos:

- Convolucional: Extração de características, gerando novas imagens chamadas de mapas de ativação. Ao contrário das redes convencionais, com combinações lineares e pesos, na convolucional temos filtros convolucionais. Os filtros são matrizes bidimensionais e são os pesos treináveis da rede convolucional (KIM, 2017).
- Pooling: Técnica comum em processamento de imagens para reduzir o tamanho, combinando valores vizinhos na matriz. A estratégia selecionada consiste em, geralmente, matrizes bidimensionais quadradas onde novo valor será a combinação de toda a matriz, geralmente a média ou máxima dos valores. A redução da imagem é importante para o gasto computacional e prevenir o overfitting (KIM, 2017).
- Hidden: Após o processo de extração de características, a saída dessas camadas se tornam a entrada de uma RNA de classificação, onde todos os métodos discutidos se aplicam, com a vantagem que agora operam em características para gerar a saída(KIM, 2017).

Em suma, o processo é extração de características e classificação, onde o processo de extração é composto por camadas convolucionais e camadas de pooling pareadas, e o processo de classificação geralmente é uma RNA multiclasse(KIM, 2017).

3 Resultados e discussões

3.1 Aquisição de dados

O laboratório Instituto de Patologia Tropical e Saúde Pública da Universidade Federal de Goiás (IPTESP-UFG) forneceu as placas de petri, e utilizando a câmera sisu-Chema, cedida ao Laboratório de Computação Científica (LCC) da Pontifícia Universidade Católica de Goiás (PUC-GO), conseguimos as amostras de imagem hiperespectral na faixa 900-2514 nm. A câmera consegue uma taxa de leitura de 400 linhas por segundo, 320 *pixels* espaciais e 256 espectros de banda, representado pela figura 8.



Figura 8 – Scan de linha

Fonte: adaptada de GIANNONI; LANGE; TACHTSIDIS (2018).

Foram disponibilizadas para o trabalho um conjunto com 16 pares de amostras com as bactérias listadas na Tabela 1.

3.2 Pré-processamento

A câmera, além da amostra hiperespectral, também produz duas referências hiperespectrais de preto (0% reflectância) e branco (100% reflectância) da amostra. Com o objetivo de reduzir efeitos adversos advindos da própria máquina, realiza-se uma calibração usando as imagens de referência de preto e branco, aplicadas na amostra, pixel a pixel, em todos os espectros (KAMMIES et al., 2016). Para tal, utiliza-se a fórmula a seguir:

$$I_{x,y,\gamma} = -\log_{10}\left[\frac{I_{x,y,\gamma} - D_{y,\gamma}}{W_{y,\gamma} - D_{y,\gamma}}\right],\tag{11}$$

onde Io cubo hiperespectral da amostra, Da referência de preto eWa referência de branco.

Como mencionado por Vidal e Amigo (2012), Kammies et al. (2016), os filtros SNV e Savitzky-Golay são excelentes para correção do espalhamento de luz, o que gera picos no gráfico de espectros e suavização. Os ajustes dos parâmetros do filtro Savitzky-Golay foram adaptados dos mostrado por Kammies et al. (2016), de forma a se adequar melhor ao conjunto e o propósito final. Segundo Vidal e Amigo (2012), a interpolação dos

$\rm N^{\underline{0}}$ de acesso da linhagem	Bactéria (ANVISA Manual)
ATCC 14579	Bacillus cereus
ATCC 6633	Bacillus subtilis
ATCC 13032	Corynebacterium glutamine
ATCC 29212	Enterococcus faecalis
ATCC 9341	Micrococcus luteus
ATCC 6538	Staphylococcus aureus
ATCC 25923	Staphylococcus aureus
ATCC 12228	Staphylococcus epidermidis
ATCC 13048	Enterobacter aerogenes
HMF FTA	Enterobacter cloacae
ATCC 25922	Escherichia coli
ATCC 700603	Klebsiella pneumoniae
NWP 9433	Proteus mirabilis
ATCC 9027	Pseudomonas aeruginosa
ATCC 10708	Salmonella enterica
ATCC 14765	Serratia marcescens

Tabela 1 – Identificação das bactérias de acordo com o número de acesso

Fonte: Laboratório de Computação Ciêntifica da PUC-GO

pixels vizinhos e aplicação do PCA, são técnicas para remoção do fundo, onde também foi aplicado o algoritmo de *k-means*. Para o PCA, forma utilizadas duas componentes principais, *onde o k-means*, com k = 2, os separa em dois grupos (amostra e fundo). Na figura 9, é mostrada a sequência de passos aplicados na mesma imagem.





Fonte: autoria própria

Como ilustrado na figura 10, que representa uma das bandas da bactéria Bacillus

cereus ATCC 14579¹, após a calibração e os filtros mencionados, os algoritmos do PCA e k-means se tornam mais efetivos, pois conseguimos dois grupos distintos (amostra e fundo). Escolhendo a imagem que contém a amostra (fundo preto), segue-se o para o processo de desdobramento.





Fonte: autoria própria





O processo de desdobramento, descrito por Amigo, Martí e Gowen (2013), tem como intuito modificar a estrutura de hipercubo em matrizes bidimensionais, que se

¹ A American Type Culture Collection, é uma empresa privada, sem fins lucrativos dedicada à aquisição, preservação, autenticação e distribuição - as atividades 'APAD' - de diversos materiais biológicos. ATCC foi fundada por cientístas em 1925 e serve como um repositório nacional e um centro de distribuição de culturas de microorganismos (MANNING et al., 1996).

encaixam na estrutura suportada por algoritmos clássicos como a PCA. Um Hipercubo representado por $D(X, Y, \lambda)$, ao se desdobrar, se torna uma matriz de $D(X.Y, \lambda)$ onde cada linha representa um pixel e cada coluna representa os diferentes bandas do mesmo pixel.

Figura 12 – Desdobramento do hipercubo



Fonte: autoria própria

O processo de desdobramento ocorre para cada uma das 32 amostras, onde é criado uma matriz com todos os hipercubos concatenados. Para garantir o treinamento imparcial, permuta-se as linhas conforme é mostrado na figura 13.

Figura 13 – Concatenação dos hipercubos



Fonte: autoria própria

3.3 Arquitetura da rede

Das 32 amostras totais, foram selecionados 50% de cada amostra e separado em um subconjunto A para treinamento e os outros 50% em um subconjunto B para teste, ambas

aplicadas o desdobramento descrito na seção 3.2. No subconjunto A, separou-se 70% do total de *pixels* para treinamento e 30% para validação, enquanto o subconjunto B foi destinado inteiramente para teste. Para ambos os subconjuntos foi removido uma parte das primeiras e últimas bandas de espectros para evitar ruídos e classificações indesejadas, recomendado pelo próprio fabricante, onde das 256 bandas disponíveis inicialmente, restaram 170 (41 bandas removidas do início e 46 do final).

A configuração da CNN que fora mais adequada de forma empírica ao problema está especificada na tabela 2, com duas camadas convolucionais de 128 filtros cada e kernel com tamanho 3 e função de ativação ReLU. Foi usada a função de MaxPooling com tamanho 2 no final das duas camadas convolucionais a fim de reduzir as características para a próxima camada. Após a extração dos atributos, duas camadas Fully Connected com 128 neurônios e ativação ReLU foram inseridas, atuando como uma MLP, e por fim, uma camada classificadora com 16 neurônios e ativação softmax para as 16 diferentes classes.

Nome func	Config	Config	Config
Conv1D	filtro=128	kernel=3	act=ReLU
MaxPool	size= 2		
Conv1D	filtro=128	kernel=3	act=ReLU
MaxPool	size= 2		
Dense	size=128		act=ReLU
Dense	size=128		act=ReLU
Dense	size=16		act=Softmax

Tabela 2 – Configuração da rede CNN

Fonte: Autoria própria

3.4 Análise dos resultados

O treinamento da CNN se deu por 133 épocas (ciclo de treinamento) usando técnicas para evitar o *overfitting*² causado pelo treinamento excessivo. Como pode ser visualizado na figura 14 que mostra como o modelo se comporta ao longo do treinamento e seus respectivos valores de perda no conjunto de validação.

Na figura 15 pode-se notar que o modelo tem uma capacidade eficiente de generalização denotado pela diagonal principal da matriz mostrada. Seja X a matriz de confusão, $X_{1,1}$ é o valor da acurácia do modelo ao classificar a bactéria *Bacillus cereus ATCC 14579* onde o valor máximo é 1, os elementos restantes na coluna, ou seja, $X_{1,2}, X_{1,3}, ... X_{1,16}$ contém os falsos positivos para a bactéria mencionada. Falsos positivos são os pixels que o

² Overfitting é um conceito em ciência de dados, que ocorre quando um modelo estatístico se ajusta exatamente aos dados de treinamento. Quando isso acontece, o algoritmo infelizmente não pode funcionar com precisão contra dados invisíveis, frustrando seu propósito (EDUCATION, 2021).



Fonte: autoria própria

modelo incorretamente classificou como outras bactérias que não a *Bacillus cereus ATCC* 14579. Na linha, ou seja, $X_{2,1}, X_{3,1}, ... X_{16,1}$ temos os falsos negativos, que são os pixels que o modelo rejeitou incorretamente ao não classificar como *Bacillus cereus ATCC* 14579. O mesmo raciocínio se aplica a todas as outras bactérias mostradas na figura 15.

	Precisão	Recall	F1-score	n^{O} amostras
Bacillusscereus	0.98458	0.97139	0.97794	40023
Bacillussubtilis	0.97061	0.98469	0.97760	41415
Coryniumbacteriumlutaminum	0.89510	0.93535	0.91478	41935
Enterobactearerogenes	0.91428	0.89459	0.90432	40953
Enterobactercloacal	0.92243	0.92332	0.92288	43390
Enterococcusfaecalis	0.97041	0.95442	0.96235	40064
Escheriachiacoli	0.96069	0.98141	0.97094	42830
Klesbsialapneumonial	0.93532	0.88729	0.91067	41654
Micrococcusluteus	0.96941	0.90575	0.93650	42400
Proteusmirabilis	0.90070	0.89745	0.89907	42612
Pseudomonasaeoruginosas	0.94543	0.96549	0.95536	40108
Salmonellaspp	0.91770	0.90464	0.91112	41487
Serratiamarcences	0.89301	0.89041	0.89171	41554
Staphylococcusaureus 6538	0.85786	0.72852	0.78792	42906
Staphylococcusaureus 25923	0.77745	0.94787	0.85425	43261
Staphylococcusepidemides	0.92383	0.93564	0.92970	42839

Tabela 3 – Métricas do modelo CNN

Fonte: autoria própria

Pode-se notar na tabela 3, as métricas avançadas do modelo comprovando a acurácia total de 91,88% para um total de 669.431 amostras de pixels com um tempo de treinamento de apenas 16 minutos. Redes com um maior número de camadas e filtros não apresentou nenhuma melhora na acurácia.



Figura 15 – Matriz de confusão da CNN aplicada ao conjunto de teste

Fonte: autoria própria

4 Conclusão

O presente estudo se propõe a classificar 16 bactérias quanto ao seu genêro e espécie. O modelo se mostrou eficaz, porém não mais que classificadores lineares (SVM, PLSDA...) ou redes MLP. Com as imagens hiperespectrais e suas referências de preto e branco, o processo de préprocessamento se deu calibrando as imagens com suas referências juntamente com a aplicação dos filtros SNV e Savitzky–Golay. Em seguida, para a remoção do fundo, aplicou-se PCA e *k-means* a fim de obter dois grupos distintos. O processo de desdobramento fora necessário para para que a rede conseguisse reconhecer padrões nos valores dos pixels e suas respectivas reflectâncias para a classificação assertiva.

O estudo sugere que o modelo de classificação usando redes neurais convolucionais tem pouca melhora na classificação dessas 16 tipos de amostras quanto ao seu genêro e espécie comparados a outros classificadores já citados. CNN é um poderoso recurso da computação para classificação de problemas complexos envolvendo imagens que surpreendentemente não teve resultados melhores que outros classificadores neste estudo, vide outros classificadores com um menor custo computacional se equiparando ou até tendo melhores resultados. A complexidade da CNN também não influenciou nos resultados finais, modificando a quantidade de camadas ou filtros. É possível que com uma gama maior de espécies e amostras, o modelo se torne relevante perante classificadores mais simples. Um novo estudo pode ser voltado quanto à classificação de bactérias conforme a sua resistência a antibióticos utilizando também imagens hiperespectrais, ou até mesmo a classificação de mais genêros e espécies com uma gama maior de dados.

REFERÊNCIAS

ALBAWI, S.; MOHAMMED, T. A.; AL-ZAWI, S. Understanding of a convolutional neural network. In: IEEE. 2017 International Conference on Engineering and Technology (ICET). [S.1.], 2017. p. 1–6.

AMIGO, J. M.; MARTÍ, I.; GOWEN, A. Hyperspectral imaging and chemometrics: a perfect combination for the analysis of food structure, composition and quality. In: **Data handling in science and technology**. [S.l.]: Elsevier, 2013. v. 28, p. 343–370.

ARRIGONI, S.; TURRA, G.; SIGNORONI, A. Hyperspectral image analysis for rapid and accurate discrimination of bacterial infections: A benchmark study. **Computers in biology and medicine**, Elsevier, v. 88, p. 60–71, 2017.

ASSIS, D. M.; JULIANO, L.; JULIANO, M. A. A espectrometria de massas aplicada na classificação e identificação de microorganismos. **Revista da Universidade Vale do Rio** Verde, Universidade Vale do Rio Verde, v. 9, n. 2, p. 344–355, 2011.

BAINE, W. B.; YU, W.; SUMME, J. P. The epidemiology of hospitalization of elderly americans for septicemia or bacteremia in 1991–1998: Application of medicare claims data. **Annals of epidemiology**, Elsevier, v. 11, n. 2, p. 118–126, 2001.

BARBIN, D.; ELMASRY, G.; SUN, D.-W.; ALLEN, P. Near-infrared hyperspectral imaging for grading and classification of pork. **Meat Science**, Elsevier, v. 90, n. 1, p. 259–268, 2012.

BARNES, R.; DHANOA, M. S.; LISTER, S. J. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. **Applied spectroscopy**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 43, n. 5, p. 772–777, 1989.

BEEKMANN, S.; DIEKEMA, D.; CHAPIN, K.; DOERN, G. Effects of rapid detection of bloodstream infections on length of hospitalization and hospital charges. Journal of clinical microbiology, Am Soc Microbiol, v. 41, n. 7, p. 3119–3125, 2003.

BEZERRA, E. Introdução à aprendizagem profunda. Artigo-31º Simpósio Brasileiro de Banco de Dados-SBBD2016-Salvador, 2016.

BI, Y.; YUAN, K.; XIAO, W.; WU, J.; SHI, C.; XIA, J.; CHU, G.; ZHANG, G.; ZHOU, G. A local pre-processing method for near-infrared spectra, combined with spectral segmentation and standard normal variate transformation. **Analytica chimica acta**, Elsevier, v. 909, p. 30–40, 2016.

CHEN, J.; JÖNSSON, P.; TAMURA, M.; GU, Z.; MATSUSHITA, B.; EKLUNDH, L. A simple method for reconstructing a high-quality ndvi time-series data set based on the savitzky–golay filter. **Remote sensing of Environment**, Elsevier, v. 91, n. 3-4, p. 332–344, 2004.

CHEUNG, Y.-M. k-means: A new generalized k-means clustering algorithm. **Pattern** Recognition Letters, Elsevier, v. 24, n. 15, p. 2883–2893, 2003.

EDUCATION, I. C. Overfitting. 2021. < https://www.ibm.com/cloud/learn/overfitting>.

FAUVEL, M.; TARABALKA, Y.; BENEDIKTSSON, J. A.; CHANUSSOT, J.; TILTON, J. C. Advances in spectral-spatial classification of hyperspectral images. **Proceedings of the IEEE**, IEEE, v. 101, n. 3, p. 652–675, 2012.

FITCH, F. B. Mcculloch warren s. and pitts walter. a logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. bulletin of mathematical biophysics, vol. 5, pp. 115–133. Journal of Symbolic Logic, v. 9, n. 2, 1944.

GIANNONI, L.; LANGE, F.; TACHTSIDIS, I. Hyperspectral imaging solutions for brain tissue metabolic and hemodynamic monitoring: past, current and future developments. **Journal of Optics**, IOP Publishing, v. 20, n. 4, p. 044009, 2018.

GOWEN, A. A.; FENG, Y.; GASTON, E.; VALDRAMIDIS, V. Recent applications of hyperspectral imaging in microbiology. **Talanta**, Elsevier, v. 137, p. 43–54, 2015.

GU, P.; FENG, Y.-Z.; ZHU, L.; KONG, L.-Q.; ZHANG, X.-l.; ZHANG, S.; LI, S.-W.; JIA, G.-F. Unified classification of bacterial colonies on different agar media based on hyperspectral imaging and machine learning. **Molecules**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 25, n. 8, p. 1797, 2020.

GUO, Q.; WU, W.; MASSART, D. The robust normal variate transform for pattern recognition with near-infrared data. **Analytica chimica acta**, Elsevier, v. 382, n. 1-2, p. 87–103, 1999.

HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. Journal of educational psychology, Warwick & York, v. 24, n. 6, p. 417, 1933.

JOLLIFFE, I. Principal component analysis. **Encyclopedia of statistics in behavioral science**, Wiley Online Library, 2005.

JOLLIFFE, I. T. Principal component analysis: a beginner's guide—i. introduction and application. **Weather**, Wiley Online Library, v. 45, n. 10, p. 375–382, 1990.

KAMMIES, T.-L.; MANLEY, M.; GOUWS, P. A.; WILLIAMS, P. J. Differentiation of foodborne bacteria using nir hyperspectral imaging and multivariate data analysis. **Applied microbiology and biotechnology**, Springer, v. 100, n. 21, p. 9305–9320, 2016.

KELLEY, S. O. New technologies for rapid bacterial identification and antibiotic resistance profiling. **SLAS TECHNOLOGY: Translating Life Sciences Innovation**, SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, CA, v. 22, n. 2, p. 113–121, 2017.

KIM, P. Convolutional neural network. In: **MATLAB deep learning**. [S.l.]: Springer, 2017. p. 121–147.

LAUZON, F. Q. An introduction to deep learning. In: IEEE. **2012 11th International Conference on Information Science, Signal Processing and their Applications (ISSPA)**. [S.l.], 2012. p. 1438–1439.

LIKAS, A.; VLASSIS, N.; VERBEEK, J. J. The global k-means clustering algorithm. **Pattern recognition**, Elsevier, v. 36, n. 2, p. 451–461, 2003.

LUO, J.; YING, K.; BAI, J. Savitzky–golay smoothing and differentiation filter for even number data. **Signal processing**, Elsevier, v. 85, n. 7, p. 1429–1434, 2005.

MANNING, F. J.; BOND, E. C.; BERNS, K. I. et al. Resource sharing in biomedical research. National Academies Press, 1996.

NAIK, G. R. Advances in Principal Component Analysis: Research and Development. [S.l.]: Springer, 2017.

NG, L. M.; SIMMONS, R. Infrared spectroscopy. **Analytical chemistry**, ACS Publications, v. 71, n. 12, p. 343–350, 1999.

O'SHEA, T.; HOYDIS, J. An introduction to deep learning for the physical layer. **IEEE Transactions on Cognitive Communications and Networking**, IEEE, v. 3, n. 4, p. 563–575, 2017.

PEARSON, K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. **The London**, **Edinburgh, and Dublin philosophical magazine and journal of science**, Taylor & Francis, v. 2, n. 11, p. 559–572, 1901.

PHAM, D. T.; DIMOV, S. S.; NGUYEN, C. D. Selection of k in k-means clustering. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 219, n. 1, p. 103–119, 2005.

PITTET, D.; TARARA, D.; WENZEL, R. P. Nosocomial bloodstream infection in critically iii patients: Excess length of stay, extra costs, and attributable mortality. **Jama**, American Medical Association, v. 271, n. 20, p. 1598–1601, 1994.

PRAKASH, O.; VERMA, M.; SHARMA, P.; KUMAR, M.; KUMARI, K.; SINGH, A.; KUMARI, H.; JIT, S.; GUPTA, S.; KHANNA, M. et al. Polyphasic approach of bacterial classification—an overview of recent advances. **Indian Journal of Microbiology**, Springer, v. 47, n. 2, p. 98–108, 2007.

QIN, J.; CHAO, K.; KIM, M. S.; LU, R.; BURKS, T. F. Hyperspectral and multispectral imaging for evaluating food safety and quality. **Journal of Food Engineering**, Elsevier, v. 118, n. 2, p. 157–171, 2013.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M. J. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. **Analytical chemistry**, ACS Publications, v. 36, n. 8, p. 1627–1639, 1964.

SILVA, I. N. D.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas-curso prático. São Paulo: Artliber, 2010.

VIDAL, M.; AMIGO, J. M. Pre-processing of hyperspectral images. essential steps before image analysis. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Elsevier, v. 117, p. 138–148, 2012.

ZHANG, Z.; ZHANG, K.; KHELIFI, A. Multivariate time series analysis in climate and environmental research. [S.l.]: Springer, 2018.