



Aplicação de Redes Neurais Artificiais em Simulações Computacionais de Modelos Neutros de Biodiversidade e Biogeografia

Trabalho de Conclusão de Curso

Engenharia da Computação

Jamisson Santana de Freitas

Orientador: Prof. Mêuser Jorge Silva Valença



UNIVERSIDADE
DE PERNAMBUCO

Jamisson Santana de Freitas

**Aplicação de Redes Neurais Artificiais
em Simulações Computacionais de
Modelos Neutros de Biodiversidade e
Biogeografia**

Monografia apresentada como requisito parcial para obtenção do diploma de Bacharel em Engenharia de Computação pela Escola Politécnica de Pernambuco – Universidade de Pernambuco.

**Orientador:
Mêuser Jorge Silva Valença**

UNIVERSIDADE DE PERNAMBUCO
ESCOLA POLITÉCNICA DE PERNAMBUCO
GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE COMPUTAÇÃO

Recife - PE, Brasil
30 de novembro de 2012.

MONOGRAFIA DE FINAL DE CURSO

Avaliação Final (para o presidente da banca)*

No dia 13 de 12 de 2012, às 8:00 horas, reuniu-se para deliberar a defesa da monografia de conclusão de curso do discente JAMISSON SANTANA DE FREITAS, orientado pelo professor Mêuser Jorge Silva Valença, sob título Aplicação de redes neurais artificiais em simulações computacionais de modelos neutros de biodiversidade e bigeografia, a banca composta pelos professores:

Sérgio Galdino

Mêuser Jorge Silva Valença

Após a apresentação da monografia e discussão entre os membros da Banca, a mesma foi considerada:

Aprovada Aprovada com Restrições* Reprovada

e foi-lhe atribuída nota: 10,0 (DEZ)

*(Obrigatório o preenchimento do campo abaixo com comentários para o autor)

O discente terá 7 dias para entrega da versão final da monografia a contar da data deste documento.

SÉRGIO GALDINO

MÊUSER JORGE SILVA VALENÇA

* Este documento deverá ser encadernado juntamente com a monografia em versão final.

Dedico este trabalho à minha mãe Edjane José Santana de Freitas (in memoriam).

Agradecimentos

Sou grato à Deus acima de tudo. Nada sou sem Ele.

Agradeço ao meu pai Admilson Silva de Freitas pelo seu amor e patrocínio incondicional e ao meu irmão Janderson Santana de Freitas com quem muito tenho aprendido e ensinado.

Agradeço aos meus familiares pelo reconhecimento, incentivo e compreensão que tiveram ao longo desses últimos anos.

Agradeço a todos os amigos que conheci na graduação e que contribuíram direta e indiretamente para o meu crescimento acadêmico e profissional.

Agradeço ao Prof. Dr. Paulo Roberto de Araújo Campos, orientador na minha Iniciação Científica, que compartilhou e me ensinou boa parte do que desenvolvi neste trabalho.

Agradeço a todos que tiveram a oportunidade de serem meus professores, em especial ao meu orientador, Prof. Dr. Mêuser Jorge Silva Valença, por acreditar na minha proposta e me auxiliar no desenvolvimento desse projeto.

Jamisson Santana de Freitas

Resumo

A diversidade biológica no nosso planeta é responsável pelo equilíbrio e estabilidade dos ecossistemas e fonte de imenso potencial de uso econômico. Consiste na base das atividades agrícolas, pecuárias, pesqueiras e florestais, além da estratégica indústria da biotecnologia. Entretanto os processos que regem a geração e manutenção de espécies e padrões de biodiversidade não são ainda inteiramente compreendidos. A Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia (TNB) foi um grande passo no contexto teórico e foi proposta pelo ecologista Stephen Hubbell, que explica os padrões de abundância relativa de espécies em comunidades ecológicas. A teoria de Hubbell tem grande repercussão na literatura científica, além de citações nas mais diferentes áreas do conhecimento. Até mesmo os críticos consideram a TNB uma teoria elegante, facilmente testável e útil para o desenvolvimento teórico na ecologia. Novas áreas de pesquisa científica têm como desafio suprir a demanda por ferramentas computacionais aplicadas ao estudo da biodiversidade. Entretanto, a complexidade do problema implica em ferramentas que necessitam de um grande poder computacional para as simulações e análise desses dados. Considerando que os recursos humanos e financeiros direcionados ao meio-ambiente em geral são escassos, frente à demanda atual, ferramentas de modelagem e previsão não são suficiente se possuem um alto custo computacional. Neste contexto, este trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo computacional que simule a TNB, analisando algumas implicações desta teoria e posteriormente um estudo inicial da aplicação de Redes Neurais Artificiais na melhoria do processo de simulação.

Palavras-chave: *Biodiversidade, Modelos neutros, Redes Neurais Artificiais, Modelos de Simulação.*

Abstract

Biological diversity in our planet is responsible for the balance and stability of ecosystems, and a source of enormous economic potential. It is the base of agricultural, livestock, fishing activities and forestry, as well as strategic in biotechnology industry. However the processes governing the generation and maintenance of species and biodiversity patterns are not yet fully understood. The unified neutral theory of biodiversity and biogeography (TNB) was a big step in the theoretical context and was proposed by Stephen Hubbell, an ecologist, which explains the patterns of relative abundance of species in ecological communities. Hubbell's theory has great impact in the scientific literature and quotations in different areas of knowledge. Even critics consider the theory elegant, easily testable and useful for developing theoretical ecology. New areas of scientific research are challenged to meet the demand for computational tools applied to the study of biodiversity. However, the complexity of the problem involves tools that require massive computational power for simulations and data analysis. Whereas the human and financial resources directed towards the environment in general are scarce compared to the current demand and forecast modeling tools are not enough if you have a high computational cost. In this context, this work aims to develop a computer model that simulates TNB, analyzing some implications of this theory and subsequently an initial study of the application of Artificial Neural Networks in improving the simulation process.

Keywords: *Biodiversity, neutral Models, Artificial Neural Networks, Simulation Models.*

“la biodiversité est l'une des plus grandes richesses de la planète, et pourtant la moins reconnue comme telle”.

Edward O. Wilson, 1992

Sumário

Capítulo 1 - Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos	2
1.2.1 Objetivos Gerais	3
1.2.2 Objetivos Específicos	3
1.3 Estrutura da monografia	3
Capítulo 2 - Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia	4
2.1 A deriva ecológica	4
2.2 A comunidade ecológica	5
2.3 Parâmetros da TNB	7
2.4 Impactos na Literatura Científica, avanços e principais críticas	7
Capítulo 3 - Redes Neurais Artificiais	11
3.1 Conceito	11
3.2 O neurônio biológico	12
3.3 O neurônio artificial	13
3.4 Redes <i>Multi-Layer Perceptron</i>	15
3.4.1 O <i>Perceptron</i>	15
3.4.2 Redes MLP	17
3.4.3 Algoritmo <i>Backpropagation</i>	19
3.4.4 Validação Cruzada	22
Capítulo 4 - Metodologia	24
4.1 Modelando a TNB	24
4.1.1 Metapopulação	24
4.1.2 Migração	25

4.1.3	Seleção neutra e mutação pontual de Hubbell	29
4.1.4	Evolução da metacomunidade	30
4.1.5	O número da biodiversidade fundamental (θ)	32
4.1.6	Relação espécie-área	33
4.2	Aplicação de RNAs na previsão de biodiversidade	34
Capítulo 5 – Experimentos		36
5.1	Base de dados	36
5.2	Preprocessamento dos dados	37
5.3	Previsão da evolução temporal da diversidade	38
5.4	Resultados	39
5.5	Considerações finais sobre os experimentos	41
Capítulo 6 - Conclusão e Trabalhos Futuros		42
6.1	Observações conclusivas	42
6.2	Trabalhos Futuros	42
6.2.1	Utilização de outras arquiteturas de redes neurais	43
6.2.2	Análise de outras implicações da TNB	43
6.2.3	Desenvolvimento de algoritmos inspirados na teoria neutra	43
Bibliografia		45

Índice de Figuras

Figura 1. Número de trabalhos que citam Hubbell (2001) entre 1999 e 2007.	8
Figura 2. Os periódicos que publicaram artigos que mais citaram Hubbell (2001).....	9
Figura 3. A estrutura do neurônio biológico.....	13
Figura 4. Modelo matemático de um neurônio artificial.	14
Figura 5. Perceptron com n entradas.	16
Figura 6. Exemplo de uma rede MLP com uma camada intermediária.....	18
Figura 7. Validação cruzada.....	23
Figura 8. Exemplo de uma metapopulação.....	25
Figura 9. Exemplos de grafos aleatórios com $D = 100$ e diferentes valores de p	26
Figura 10. Distribuição de conectividade das demes para $z = 5$	27
Figura 11. Exemplo de uma rede livre de escala.	28
Figura 12. Distribuição de conectividade em uma rede livre de escala.....	29
Figura 13. Evolução do número de espécies ao longo do tempo.....	30
Figura 14. Diversidade x tamanho da população.	31
Figura 15. Resultados de simulação para diferentes valores de θ	32
Figura 16. Relação espécie-área.	34
Figura 17. Modelo de rede neural para previsão de biodiversidade.....	35
Figura 18. Fragmento da base de dados gerada.	36
Figura 19. Fragmento da base de dados normalizada.	37
Figura 20. Resultado dos testes do número de neurônios na camada escondida.	39
Figura 21. Curva de aprendizagem da rede neural.....	40
Figura 22. Desempenho da rede neural na previsão de diversidade.	41

Índice de Tabelas

Tabela 1. Principais funções de ativação utilizadas.	22
--	----

Tabela de Símbolos e Siglas

EPMA – Erro Percentual Médio Absoluto

EQM – Erro Quadrado Médio

MLP – *Multi-layer Perceptron*

RNA – Rede Neural Artificial

TNB – Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia

Capítulo 1 - Introdução

Este capítulo mostra uma breve visão da motivação que levou a escrita deste trabalho de conclusão de curso, bem como seus objetivos e como este documento foi estruturado.

1.1 Motivação

A diversidade biológica no nosso planeta é uma característica marcante que tem despertado um interesse crescente e investigações nas últimas décadas. Essa biodiversidade é responsável pelo equilíbrio e estabilidade dos ecossistemas, e fonte de imenso potencial de uso econômico. Consiste na base das atividades agrícolas, pecuárias, pesqueiras e florestais, além da estratégica indústria da biotecnologia. Entretanto os processos que regem a geração e manutenção de espécies e padrões de biodiversidade não são ainda inteiramente compreendidos. Compreender a biodiversidade e sua origem, manutenção e perda na Terra é uma questão de profundo significado para o futuro da humanidade e da vida como a conhecemos devido a seu valor intrínseco, social, científico, educacional, cultural, recreativo e estético (Convenção sobre Diversidade Biológica).

O entendimento do papel da biodiversidade em ecossistemas tem como principal objetivo prever as consequências das extinções de espécies devido às perturbações provocadas pelos seres humanos como também variações naturais. A riqueza de espécies, abundância relativa de espécies e heterogeneidade de suas distribuições espaciais ou temporais em uma dada área são temas centrais da ecologia. Ecologistas usam muito dos seus esforços e imaginação na tentativa de estabelecer e quantificar as inter-relações entre estes componentes e identificar os processos físicos e biológicos que os influenciam, tais como, extinção, imigração, colonização, segregação de nichos, competição, predação, controle do meio ambiente, perturbações externas e dinâmica histórica.

A Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia (TNB) foi um grande passo no contexto teórico e foi proposta pelo ecologista Stephen Hubbell, que explica os padrões de abundância relativa de espécies em comunidades ecológicas. Hubbell

assume em uma das suas premissas mais provocativas que os organismos de todas as espécies possuem propriedades ecológicas idênticas. Com essa ideia implica-se dizer que a diversidade surge ao acaso, chocando-se com a visão clássica de organização das comunidades por nicho ecológico e até mesmo a teoria da evolução por seleção natural. A teoria de Hubbel tem grande repercussão na literatura científica, além de citações nas mais diferentes áreas do conhecimento. Até mesmo os críticos consideram a TNB uma teoria elegante, facilmente testável e útil para o desenvolvimento teórico na ecologia. Pesquisas recentes corroboram suas predições, apresentando avanços teóricos e novas ferramentas analíticas (CASSEMIRO e PADIA, 2008).

O desenvolvimento econômico atual vem acelerado o processo de destruição de ecossistemas, desta forma, tem crescido a demanda por ferramentas de apoio à tomada de decisão no que se refere à conservação da biodiversidade. Uma área de pesquisa científica, denominada Informática para Biodiversidade (CANHOS, 2003), tem como desafio suprir esta demanda, fornecendo ferramentas computacionais aplicadas ao estudo da biodiversidade. Por outro lado, a complexidade do problema implica em ferramentas que necessitam de um grande poder computacional para as simulações e análise desses dados. Considerando que os recursos humanos e financeiros direcionados ao meio-ambiente em geral são escassos, frente à demanda atual, ferramentas de modelagem e previsão não são suficiente se possuem um alto custo computacional, é necessário que estas se utilizem de técnicas computacionais mais sofisticadas que minimizem consideravelmente estes custos e produzam resultados satisfatórios.

1.2 Objetivos

Neste trabalho analisaremos a TNB e algumas de suas implicações por meio do desenvolvimento de modelos de simulação. Em seguida faremos um estudo inicial de como a aplicação de técnicas de computação inteligente, no caso as redes neurais artificiais, podem auxiliar no processo de obtenção dos dados de simulação.

1.2.1 Objetivos Gerais

- Verificar a validação de um modelo computacional que simule a TNB e comparar com a previsão teórica.
- Definir uma arquitetura de Rede Neural que se adeque ao estudo da previsão temporal de biodiversidade em modelos neutros, verificando os impactos reais destas na previsão de tais modelos e suas contribuições para a ecologia.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Literatura científica, entendimento dos principais processos ecológicos e a interferência da topologia na diversidade e geração de diversidade.
- Testar pelo menos três arquiteturas de redes neurais para previsão da biodiversidade.
- Justificar a utilização de RNA para a minimização de custos computacionais que emergem da complexidade do problema.

1.3 Estrutura da monografia

O Capítulo 2 trata da Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia (TNB), proposta pelo ecologista Stephen Hubbell, sua fundamentação, impactos causados na literatura, algumas críticas e principais características. Em seguida, o Capítulo 3 mostra os conceitos de Redes Neurais Artificiais, sua inspiração e funcionalidade, destacando a estrutura das redes *Multi-layer Perceptron* (MLP) utilizadas neste trabalho. A seguir, o Capítulo 4 descreve a metodologia utilizada para o desenvolvimento de algoritmos para a simulação da TNB, comparando seus resultados com a previsão teórica de Hubbell. Ao fim do Capítulo 4 será mostrada a estratégia utilizada para aplicar a técnica de RNA na previsão de evolução da biodiversidade. No Capítulo 5 serão exibidos os resultados dos experimentos realizados, bem como a validade da rede neural utilizada. Por fim, no Capítulo 6 é feita uma análise de todo o trabalho, concluindo e destacando possíveis trabalhos futuros.

Capítulo 2 - Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia

O presente capítulo trata dos aspectos teóricos da Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia destacando seu impacto na literatura científica, algumas críticas e perspectivas.

2.1 A deriva ecológica

Entender as regras de assembleias ecológicas de comunidades naturais em escalas tanto locais quanto globais é uma das preocupações da ecologia. A Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia (TNB), proposta pelo ecólogo Stephen Hubbell, é um exemplo de abordagem reducionista aplicada no estudo de pequenas escalas espaciais e temporais. Sua estrutura matemática foi desenvolvida pelos esforços pioneiros de Motoo Kimura (KIMURA, 1969) (KIMURA, 1983) e King e Jukes (KING e JUKES, 1969) com o pressuposto da deriva genética aleatória, que permite previsões específicas das taxas de mudanças nas frequências alélicas dentro e entre populações finitas. Na sua teoria, Kimura demonstrou matematicamente que é possível haver evolução por deriva genética na ausência de seleção natural, mesmo em grandes populações e longas escalas de tempo. A deriva genética atuaria em pequenas populações sendo regida por processos aleatórios, enquanto que a seleção natural atuaria em populações de grandes dimensões. Numa população de tamanho efetivo elevado, a deriva ocorre muito lentamente, e a seleção atuante sobre um alelo pode acontecer de uma maneira relativamente rápida, aumentar ou diminuir a sua frequência (dependendo da viabilidade do alelo). Numa população com um tamanho efetivo reduzido, o efeito da deriva genética predomina. Neste caso, o efeito da seleção natural é menos visível pois o efeito da deriva muitas vezes se sobrepõe. Desta forma, a neutralidade das mutações estaria fortemente relacionada ao tamanho da população.

Analogamente, Hubbell supõe que a abundância das espécies de uma comunidade poderia também seguir um padrão puramente probabilístico, tomando

dois pressupostos fundamentais: O primeiro é que todos os organismos são troficamente semelhantes, ou seja, possuem propriedades ecológicas idênticas; O segundo é que cada comunidade local em uma paisagem encontra-se saturada, ou seja, não há mudanças no número de indivíduos dentro da comunidade com o tempo, o número de recursos existentes é limitado e constante. As dinâmicas das populações são governadas pelos sucessivos deslocamentos de indivíduos que morrem a cada período de tempo (HUBBELL, 2001). Pela equivalência entre as espécies, não existe nenhum privilégio de qualquer indivíduo pertencente a qualquer espécie em ter acesso aos recursos deixados pelo indivíduo morto na comunidade. A combinação destes dois processos leva ao que Hubbell chama de “deriva ecológica”, o equivalente matemático da “deriva genética” (CASSEMIRO e PADIA, 2008).

2.2 A comunidade ecológica

A teoria neutra considera que os indivíduos em uma comunidade competem potencialmente pelos mesmos ou recursos similares. Isto vai de encontro ao conceito de nicho multidimensional de Hutchinson (HUTCHINSON, 1957), que aborda um conjunto de condições e estados ambientais, no qual as espécies se adaptam (física, química e bioticamente) compondo a organização interna de uma comunidade ecológica. O processo de Hubbell modela a abundância de uma única espécie ao longo do tempo (CASSEMIRO e PADIA, 2008). Num exemplo simples, supomos que em uma dada comunidade existam recursos suficientes para suportar exatamente J indivíduos. Sendo N_i a abundância (número de indivíduos) de uma determinada espécie i , temos, portanto, $J + 1$ possíveis valores (posições) que a espécie pode ocupar na comunidade ($N_i = 0, 1, 2, \dots, J$). É com essa ideia que Hubbell define um conjunto inicial de condições que leva a um conjunto específico de equações para as probabilidades de transições de uma posição para a próxima (CASSEMIRO e PADIA, 2008).

A comunidade local sempre irá apresentar o mesmo número de indivíduos ao longo do tempo, que é uma das suposições chaves da teoria neutra: o pressuposto chamado de *sum-zero* (em português, “somatório-zero”). Em outras palavras, dentro de grupos de espécies ecologicamente semelhantes, os indivíduos tendem a ocupar

a paisagem até um ponto de saturação. Ainda segundo Hubbell, a cada execução deste processo o resultado é uma comunidade dominada por uma única espécie. A distribuição da frequência do número de vezes em que cada espécie sobrevive converge em uma distribuição uniforme, seguindo o pressuposto da equivalência ecológica entre as espécies. Em comunidades pequenas, o tempo de fixação de uma única espécie é muito curto, mas cresce com o aumento do tamanho da comunidade local. Esta última configuração não se mostra muito adequada, tendo em vista a previsão de que todas as comunidades locais seriam dominadas por uma única espécie arbitrária. Se uma espécie não tem probabilidades iguais de ser escolhida para substituir um indivíduo que morre, então a distribuição de frequência do número de vezes que cada espécie é a única sobrevivente, convergirá na distribuição relativa entre espécies (HUBBELL, 2001).

Para que a diversidade seja mantida dentro da comunidade local, deve existir um processo adicional que substitua as espécies que vão se extinguindo. Para isso, basta considerar que a comunidade local é aberta. Assim, quando um indivíduo for removido de uma comunidade local, existe uma pequena chance deste ser substituído por um indivíduo de uma comunidade local adjacente, ou seja, um imigrante pertence ao conjunto de espécies da comunidade regional. Como consequência deste processo a comunidade local torna-se apta a absorver um número indefinido de espécies. A estabilidade do número de espécies em uma população e a abundância de cada espécie estará relacionada às taxas de migração. Desta forma, quanto maior as taxas de migração, maior o número de espécies na comunidade local. Intuitivamente, a frequência relativa de cada espécie na metacomunidade será composta do somatório da frequência nas comunidades locais. Este contexto levará a um decréscimo na diversidade de espécies já que há uma probabilidade das espécies se extinguirem globalmente (CASSEMIRO e PADIA, 2008). Com isso, Hubbell reconhece que a manutenção da diversidade na metacomunidade se dá pela origem de novas espécies. Para isso uma mutação única ou pontual (*point mutation mode*). Novas espécies surgem a partir de mutações genéticas de outras espécies presentes.

2.3 Parâmetros da TNB

Uma grande vantagem da TNB é a simplicidade. Toda a teoria é baseada em três parâmetros: m , a taxa de migração; J , o tamanho da comunidade; e θ , o número fundamental da biodiversidade. O número θ equivale ao produto da taxa de especiação e o tamanho da metacomunidade:

$$\theta = 2 \cdot \rho \cdot u \cdot J \quad (2.1)$$

onde u é a taxa de especiação e ρ equivale à densidade média de indivíduos por unidade de área.

Como a TNB requer eventos de especiação para manter a diversidade local em resposta à deriva ecológica e, na maioria das comunidades, a especiação deve ocorrer através de grandes regiões do espaço geográfico (grandes metacomunidades) e em grandes períodos de tempo ecológico (CASSEMIRO e PADIA, 2008). Desta forma, duas importantes predições são feitas com a teoria neutra (CASSEMIRO e PADIA, 2008). Primeiro, ela prediz um declínio na diversidade de espécies ao longo do tempo e que a taxa deste decréscimo depende da taxa de migração de indivíduos e, raramente da taxa de especiação. Segundo, a TNB prediz que haverá um declínio (quantitativamente estimável) na similaridade da comunidade ao decorrer do espaço. Como espécies se extinguirão e podem ser substituídas por imigrantes de outras espécies a similaridade da comunidade em amostras em dois diferentes tempos decai com o tempo entre o aumento das amostras.

2.4 Impactos na Literatura Científica, avanços e principais críticas

A repercussão da TNB na comunidade científica foi muito grande, tornando o livro no qual o Hubbell apresenta formalmente esta teoria (HUBBELL, 2001) um *best seller* em ecologia (LEIGH, 2007). Uma forma que Cassemiro & Padia (CASSEMIRO e PADIA, 2008) utilizaram para justificar o impacto da teoria de Hubbell foi analisar o crescimento do número de citações do livro nos anos seguintes a publicação. Na

Figura 1 é possível ver o crescimento no número de citações nos anos seguinte a publicação da TNB.

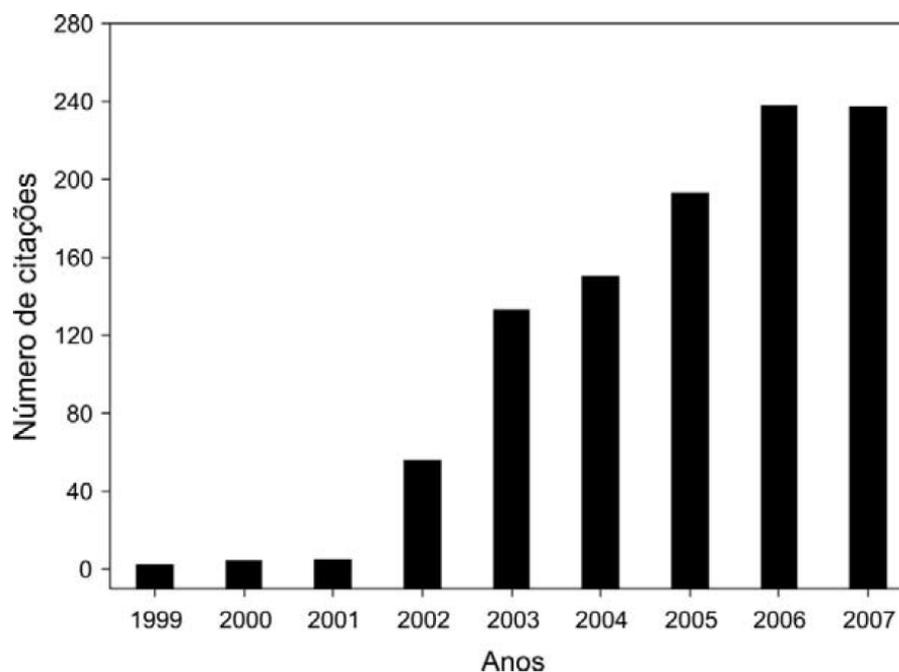


Figura 1. Número de trabalhos que citam Hubbell (2001) entre 1999 e 2007.

Outra forma utilizada para avaliar os impactos da TNB foi analisar as características dos artigos que citam o livro de Hubbell (CASSEMIRO e PADIA, 2008). Cerca de 1128 artigos até 03 de junho de 2008 foram publicados em 239 diferentes periódicos científicos, classificados em 21 categorias de assuntos diferentes (classificação segundo a *Scopus*, <http://scopus.com>). Esses resultados sugerem que os impactos da TNB ultrapassam o campo da ecologia e atingem outros campos da ciência. Na Figura 2 podemos visualizar os 15 periódicos que publicaram artigos que mais citaram Hubbell (2001). Os números acima das barras indicam os fatores de impacto dos periódicos e o (*) indica quais periódicos possuem enfoque para ecologia ou conservação da biodiversidade, os demais periódicos têm enfoque multidisciplinar (CASSEMIRO e PADIA, 2008).

Segundo Alonso *et al.* (ALONSO, ETIENNE e MCKANE, 2006) a TNB tem muitos méritos e é altamente relevante, pois significa uma tentativa de aproximação à realidade, que a partir de uma teoria básica provê o desenvolvimento de pressupostos mais complexos. Trabalhos como em (ETIENNE, 2005) apresentam

um grande avanço à TNB destacando uma nova fórmula de amostragem com limitação de dispersão. Alonso *et al.* (ALONSO, ETIENNE e MCKANE, 2006) concluem que as comunidades ecológicas se comportam de uma maneira neutra apenas em algumas escalas espaciais.

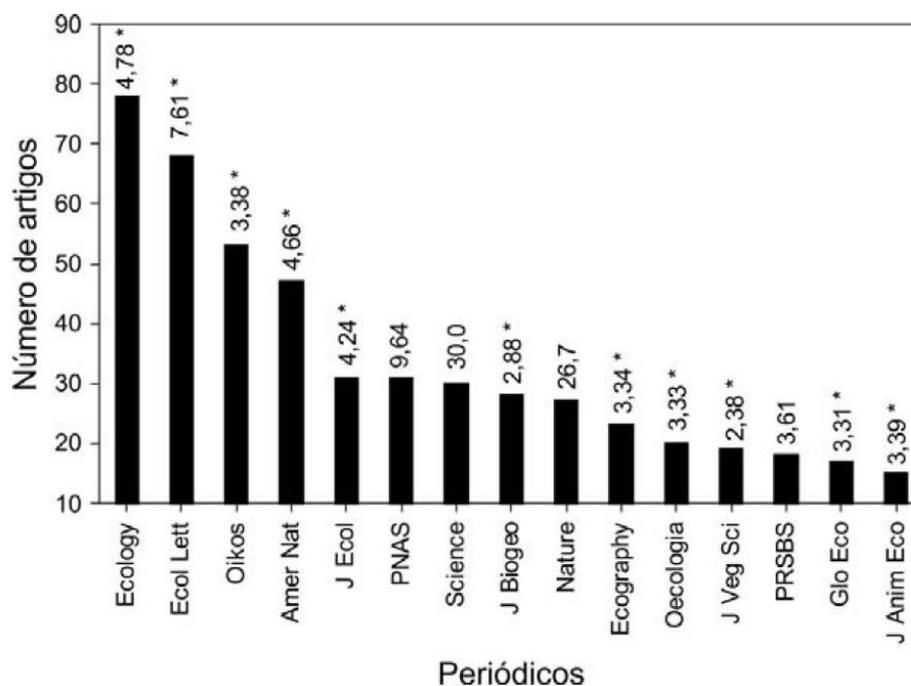


Figura 2. Os periódicos que publicaram artigos que mais citaram Hubbell (2001).

Mesmo apresentando muitos avanços, a teoria neutra gerou muita controvérsia devido sua visão muito diferenciada sobre comunidades ecológicas. O fato dos modelos neutros não se alinharem a muitos pressupostos neodarwinistas é um dos principais motivos da resistência de muitos autores. As principais críticas se concentram no seu principal axioma: as espécies são adaptativamente equivalentes, que contraria o conceito de divergência adaptativa de Darwin (LEIGH, 2007). McGill, Maurer e Weiser (MCGILL, MAURER e WEISER, 2006) dizem que a teoria neutra contradiz 100 anos de ecologia de comunidade. Do ponto de vista de Leigh (LEIGH, 2007) a promessa de uma teoria unificada neutra trouxe esperança para muitos ecólogos propondo a substituição um conjunto carente de explicações qualitativas em relação aos padrões de diversidade, as quais até o momento nenhuma tentativa pareceu ser capaz de solucionar por meio de uma teoria de predição quantitativa bem sucedida.

Outro ponto em que Hubbell tem sido criticado é por chamar prematuramente seus modelos de “teoria unificada”. Muitos ecólogos não acreditam que a complexidade vista na ecologia possa ser explicada por uma teoria unificada. McGill, Maurer e Weiser (MCGILL, MAURER e WEISER, 2006) questionam essa escolha de Hubbell (HUBBELL, 2001), pois a expressão unificada implica em uma teoria aplicável a todos os organismos e em todas as escalas.

Em meio a tantas controvérsias, Leigh (LEIGH, 2007) considera a TNB como um ponto fundamental para o surgimento de uma teoria sintética mais realista na ecologia. A teoria neutra pode facilitar o desenvolvimento de hipóteses nulas testáveis na ecologia de comunidades, biografia e biologia da conservação, em particular nas comunidades nas quais características espaciais explícitas (que consideram as distâncias entre populações ou comunidades) ou barreiras geográficas desempenham um papel importante. (HU, HE e HUBBELL, 2006). Em termos gerais, uma teoria neutra espacialmente explícita, elegante e geral, pode proporcionar uma base essencial para testes empíricos e desenvolvimento teórico na ecologia, proporcionando um melhor entendimento da conservação das dinâmicas espacial e temporal da biodiversidade (CASSEMIRO e PADIA, 2008).

Capítulo 3 - Redes Neurais Artificiais

Este capítulo trata de conceitos relacionados às Redes Neurais artificiais, destacando a arquitetura MLP utilizada ao longo deste trabalho.

3.1 Conceito

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) são técnicas computacionais representadas por um modelo matemático inspirado na estrutura existente no sistema nervoso humano, em especial o cérebro. O cérebro é o órgão mais complexo do corpo humano e é composto por algo em torno de 86 bilhões de neurônios interconectados, que formam uma verdadeira rede capaz de processar milhões de informações e realizar cerca de 60 trilhões de ligações em paralelo (ZORZETTO, 2012).

Da mesma forma que seres humanos são capazes de aprender por meio da experiência, as RNAs são fundamentadas pela capacidade de aprender através de exemplos. Os principais tipos de aprendizagem são:

- Aprendizado supervisionado – é apresentado à rede um conjunto de entradas e suas respectivas saídas, de forma que esta possa comparar as saídas obtidas com as saídas esperadas.
- Aprendizado não supervisionado – a rede aprende apenas com os dados de entrada, ou seja, o algoritmo utilizado não necessita do conhecimento das saídas.

Outra forma de descrever uma RNA é “um sistema constituído por elementos de processamento interconectados, chamados de neurônios, os quais estão dispostos em camadas [...] e são responsáveis pela não linearidade e pela memória da rede.” (VALENÇA, 2010).

A aplicação de redes neurais se tornou muito útil devido muitas características, dentre as quais se pode destacar para este trabalho (VALENÇA, 2005):

- Não linearidade: permite a resolução de problemas que não são linearmente separáveis;
- Aprendizagem: extrai o conhecimento a partir de exemplos;
- Modelagem de sistemas complexos: pode trabalhar com grande volume e diversidade de dados;
- Capacidade de generalização: para um novo conjunto de exemplos, fornece uma resposta satisfatória;
- Processamento paralelo: recebendo várias informações consegue testar todas as possibilidades ao mesmo tempo.

3.2 O neurônio biológico

O sistema nervoso humano é formado por um conjunto extremamente complexo de células chamadas de neurônios. Estas células desempenham um papel fundamental no raciocínio, comportamento e funcionamento em geral do corpo humano, sendo responsáveis pela condução, recepção e transmissão dos impulsos nervosos. Como pode ser visto na Figura 3 os neurônios possuem como estrutura básica um corpo celular, também denominado pericário, que acomoda seu núcleo e de onde partem os prolongamentos; os dendritos, prolongamentos numerosos responsáveis por receber os estímulos do ambiente, células epiteliais sensoriais ou outros neurônios; um prolongamento único condutor dos impulsos nervosos à outras células ou mesmo outros neurônios chamado de axônio.

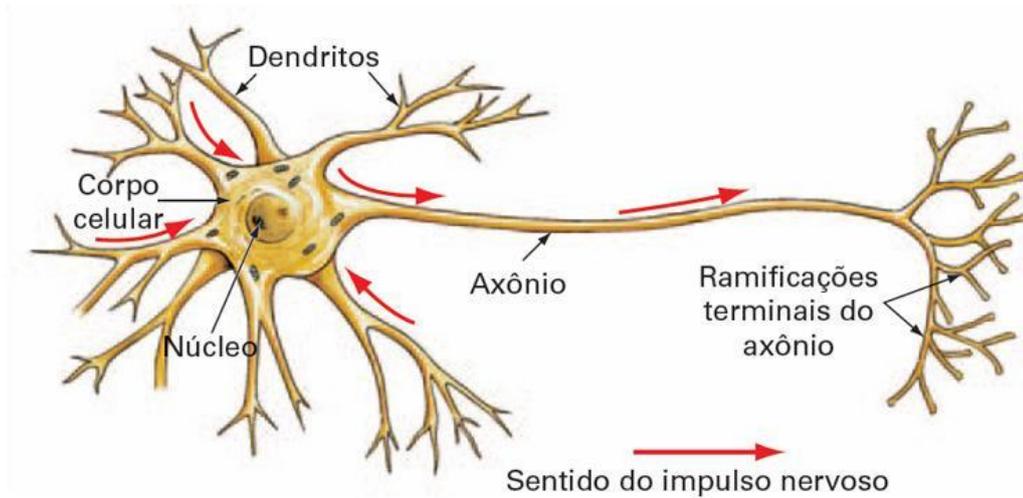


Figura 3. A estrutura do neurônio biológico.

Os neurônios recebem continuamente impulsos nas sinapses de seus dendritos originários de milhares de outras células. As sinapses nervosas são os pontos onde as extremidades de neurônios vizinhos se encontram e o estímulo passa de um neurônio para o seguinte por meio de mediadores químicos, os neurotransmissores (PURVES, 2010). Estes impulsos geram ondas de corrente elétrica (excitatória ou inibnitoria, uma com sentido diferente da outras) através do corpo da célula até uma “zona de disparo” no começo do axônio. No momento que as correntes atravessam a membrana celular para o espaço extracelular, suas intensidades são somadas e o resultado determina se o neurônio dispara ou não.

3.3 O neurônio artificial

Entender o comportamento do neurônio é o passo inicial para se compreender as redes neurais. O primeiro modelo de neurônio artificial foi proposto pelo psiquiatra e neuroanatomista McCulloch e o matemático Pitts (McCulloch & Pitts, 1943). No ano de 1943, o conhecimento sobre os neurônios biológicos era muito limitado. As bases iônicas e elétricas das atividade neural eram ainda incertas, entretanto já se tinha conhecimento da existência de potenciais de ação e da natureza da Lei do Tudo ou Nada. A Lei do Tudo ou Nada descreve que um neurônio só consegue enviar um impulso se a intensidade do impulso for acima de um determinado limiar, fazendo com que a sua membrana seja despolarizada e repolarizada. Com esse embasamento teórico da época, McCulloch e Pitts

procuram propor um modelo bastante simples de representar o neurônio biológico utilizando uma regra de propagação e uma função de ativação. A emissão de sinal por este neurônio está baseada em um limiar em analogia com a Lei do Tudo ou Nada (VALENÇA, 2010).

Considerado os números x_1, x_2, \dots, x_m , como sendo os sinais de entrada do neurônio de saída k . Cada entrada é multiplicada pelo seu respectivo peso w_{km} (nível de relevância da entrada para o neurônio). A Figura 4 mostra esta representação:

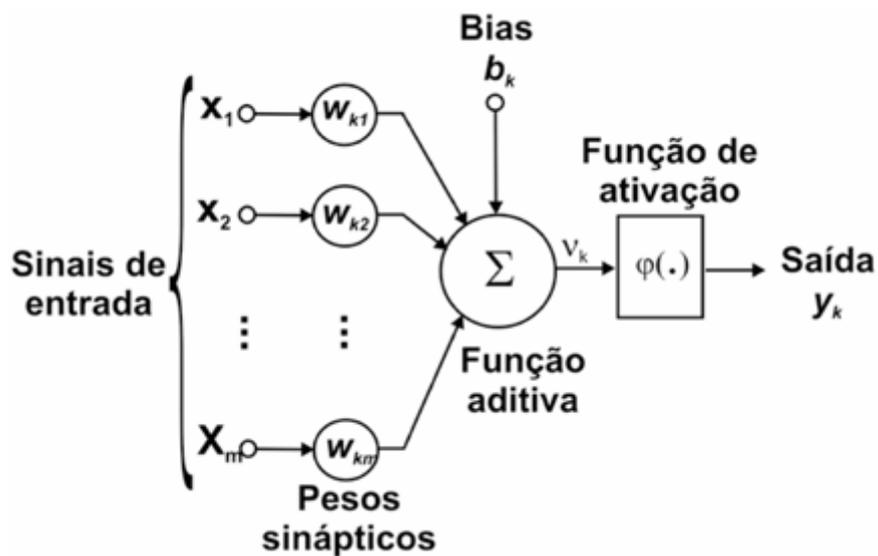


Figura 4. Modelo matemático de um neurônio artificial.

É importante destacar que o valor b_k (*bias*) é predefinido e o produto deste pelo seu respectivo peso corresponde ao limiar excitatório do neurônio (VALENÇA, 2010). Todos os produtos são somados com o objetivo de se obter a entrada líquida.

A entrada líquida net_k de um neurônio é dada pela seguinte regra de propagação:

$$net_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j - bias \quad (3.1)$$

Neste caso, a função mais elementar de ativação $f(net_k)$ é a função degrau, ou seja:

$$f(net_k) = \begin{cases} 1, \forall net_k \geq 0 \\ 0, \forall net_k < 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Esta função permite que a rede trabalhe apenas com saídas discretas, sendo usado no modelo arquitetural de redes neurais mais simples o *Perceptron* (ROSENBLATT, 1960). Para que o neurônio aprenda, uma RNA necessita de um algoritmo que seja capaz de ajustar os pesos sinápticos da rede como o passar do tempo. Existem inúmeras arquiteturas neurais, além da anteriormente citada *Perceptron*, podemos citar outras como ADALINE, a MLP (*Multi-Layer Perceptron* – em português, “Perceptron com múltiplas camadas”), as redes de Kohonen e as redes RBF (*Radial Basis Function* – em português, “Redes com funções de base radial”), entre outras, cada uma com suas características e aplicações.

3.4 Redes *Multi-Layer Perceptron*

3.4.1 O *Perceptron*

Como vimos anteriormente uma rede neural artificial pode ser definida genericamente como uma estrutura composta por um conjunto de unidades de processamento (neurônios artificiais) interconectadas, tendo cada unidade de processamento uma função de ativação específica (VALENÇA, 2010). Também vimos que o modelo mais simples de rede neural é o *Perceptron*. Como pode ser visto na Figura 5 o *Perceptron* é composto de uma camada de entrada e uma camada de saída e limiares ajustáveis (w_{10}), estando cada neurônio da camada de entrada ligado a camada de saída. Como utiliza a formulação do neurônio de McCulloch e Pitts, a saída do *Perceptron* é regida pela Lei do Tudo ou Nada, que emite o sinal 1 (neurônio ativo) ou sinal 0 (neurônio em repouso). O *Perceptron* de Rosenblatt pode ser visto como uma ferramenta para reconhecimento de padrões (VALENÇA, 2010). O reconhecimento de padrões (RP) é a área de pesquisa que

tem por objetivo a classificação de objetos (padrões) em um número de categorias ou classes (THEODORIDIS e KOUTROUMBAS, 1999). São exemplo de RP o reconhecimento de caracteres, reconhecimento de faces, reconhecimento de assinaturas (ABAS, 1994), reconhecimento de placas de automóveis (ANAGNOSTOPOULOS, E., *et al.*, 2008) entre outros. Entretanto segundo Valença (VALENÇA, 2010) o *Perceptron* apresenta duas limitações:

- a) Ao utilizar uma função de ativação do tipo degrau o *Perceptron* fornece como saída apenas um sinal discreto (0 ou 1), desta forma dificultando o trabalho com padrões ruidosos (limitação posteriormente superada como uso de uma função de ativação contínua na camada de saída em redes ADALINE).
- b) A capacidade de classificar apenas padrões linearmente separáveis.

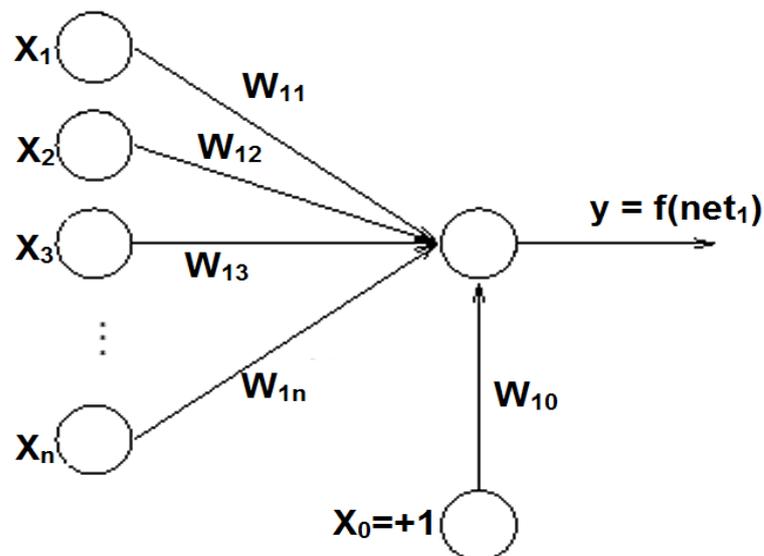


Figura 5. Perceptron com n entradas.

O treinamento do *Perceptron* pode ser resumido pelos seguintes passos (VALENÇA, 2010):

1. Inicialização dos pesos: os pesos são gerados aleatoriamente entre -1 e 1;
2. Um dado exemplo é apresentado à rede (entrada + saída);

3. Adota-se uma taxa de aprendizagem (α), calcula-se a entrada líquida net_i e o sinal de saída $y_i = f(net_i)$;
4. Calcula-se o erro ($d_i - y_i$) – Diferença entre a saída desejada (d_i) e a saída obtida (y_i);
5. Faz-se o ajuste dos pesos ($w_{ij}(novo) = w_{ij}(antigo) + \alpha(d_i - y_i) \cdot x_j$);
6. Testa-se o atendimento ao critério de parada (erro satisfatório e/ou número máximo de ciclos). Caso o critério de parada não seja atendido repete-se os passos do 2 ao 6 para todos os exemplos e por vários ciclos até encontrar uma solução satisfatória.

3.4.2 Redes MLP

Uma rede *Multi-Layer Perceptron* (MLP) é uma generalização da rede *Perceptron* elementar com a adição de pelo menos uma camada intermediária (Figura 6). Estas camadas intermediárias são responsáveis em extrair características, seus pesos sinápticos correspondem a codificação de características apresentadas nos padrões de entrada e permitem que a rede crie sua própria representação, mais rica e complexa do problema (CARVALHO, 2009). Em outras palavras, as camadas intermediárias também são responsáveis pela não linearidade da rede, permitindo que as redes MLP sejam capazes de resolver problemas não linearmente separáveis. Os neurônios desta camada possuem em geral uma função de ativação sigmoideal que pode ser a logística ou a tangente hiperbólica (VALENÇA, 2010).

Quanto ao número de camadas intermediárias em uma rede MLP, Cybenko (CYBENCO, 1989) afirma que uma camada intermediária é suficiente para aproximar qualquer função contínua e duas camadas intermediárias são suficientes para aproximar qualquer função matemática.

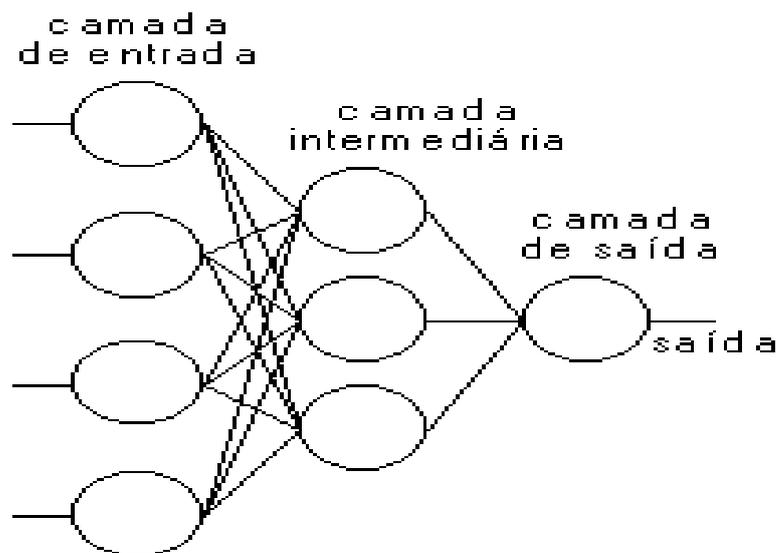


Figura 6. Exemplo de uma rede MLP com uma camada intermediária.

Para encontrar os pesos sináptico ótimos de uma rede neural é necessário treiná-la. Para treinar uma rede MLP é necessário utilizar um algoritmo que permita estabelecer esse conjunto de pesos ótimos. Entretanto a existencia de camadas intermediárias na rede aumenta consideravelmente a complexidade do treinamento.

Existem vários algoritmos para treinar redes MLP (RIEDMILLER e BRAUN, 1993) (HINTON e MCCLELLAND, 1986). Em geral estes algoritmos são de aprendizado supervisionado. O algoritmo usado tradicionalmente para treinamento das redes MLP é o *backpropagation* que consiste numa generalização da regra delta (também conhecida como técnica do gradiente descendente) utilizada por Widrow & Hoff em treinamentos de rede ADALINE (VALENÇA, 2010). A maioria dos métodos de aprendizado para RNAs do tipo MLP utiliza variações deste algoritmo. O algoritmo *backpropagation* é um algoritmo supervisionado que utiliza pares (entrada, saída desejada) para, por meio de um mecanismo de correção de erros, ajustar os pesos sinápticos da rede.

3.4.3 Algoritmo *Backpropagation*

O treinamento utilizando o algoritmo *backpropagation* ocorre em duas fases chamadas de *forward* e *backward*. A fase *forward* consiste na propagação dos sinais da camada de entrada até a camada de saída, calculando-se o sinal de saída e o erro correspondente. Na fase seguinte, de *backward*, os erros são propagados recursivamente da camada de saída para a camada de entrada através da rede e os pesos são ajustados através da regra delta. A regra delta consiste em realizar ajustes apropriados nos pesos das conexões de forma a reduzir a distância (erro) entre a saída atual e a saída desejada.

Considerando uma rede MLP semelhante a vista na Figura 6 que possui apenas uma camada escondida o algoritmo *backpropagation* consiste nos seguintes passos (VALENÇA, 2010):

1. **Inicialização:** Os pesos sinápticos das conexões da rede são inicializados aleatoriamente no intervalo de $[-1; 1]$;
2. **Apresentação dos exemplos de treinamento:** O treinamento de uma rede MLP pode ser realizado “*on line*” (exemplo a exemplo), onde os pesos serão ajustados após a apresentação de cada exemplo; ou “*batch*” (lote), onde o reajuste dos pesos só é realizado após a apresentação de todos os exemplos de treinamento que corresponde a uma época (um ciclo). Neste exemplo descrevemos o método *on line*.
3. **Fase *forward* (propagação dos sinais de entrada):** É feito o cálculo da entrada líquida (net_i^1) para os neurônios da camada intermediária:

$$net_i^1 = \sum_{j=0}^{N_{inp}} w_{ij} \cdot x_j \quad (3.3)$$

Sendo net_i^1 a entrada líquida para o neurônio “ i ” (índice inferior) da camada intermediária “1” (índice superior). Para uma camada intermediária com n neurônios, o valor de N_{inp} corresponde a $n - 1$.

4. Fase *forward* (cálculo da função de saída para os neurônios da camada escondida):

$$y_i^1 = f^1(net_i^1) \quad (3.4)$$

Sendo f^1 a função de ativação da camada “1”. Exemplos de função de ativação podem ser vistos na Tabela 1.

5. Fase *forward* (cálculo da entrada líquida para os neurônios da camada de saída):

$$net_i^2 = \sum_{j=0}^{N_{hid}} w_{ij} \cdot f^1(net_j^1) \quad (3.5)$$

Onde $f^1(net_j^1)$ são as saídas dos neurônios da camada intermediária (camada “1”) que são as entradas para os neurônios da camada de saída (camada “2”). Lembrando que para entradas com $j=0$ (no caso $f^1(net_0^1)$) correspondem ao limiar que equivale a entrada $x_0 = +1$, logo:

$$f^1(net_0^1) = x_0 = 1 \quad (3.6)$$

6. Fase *forward* (cálculo da função de saída para o neurônio da camada de saída):

$$y_i^2 = f^2(net_i^2) \quad (3.7)$$

Sendo f^2 a função de ativação da camada “2”. Exemplos de função de ativação podem ser vistos na Tabela 1.

7. Fase *forward* (cálculo dos erros dos neurônios da camada de saída):

$$e_i(n) = (d_i - y_i^2), i = 1, 2, \dots, N_{out}, n = 1, 2, \dots, N \quad (3.8)$$

Onde d_i é a saída desejada para o neurônio i e y_i^2 é a saída obtida para o neurônio i da camada escondida (que corresponde a camada “2”).

- 8. Fase *backward* (reajuste dos pesos):** Nesta fase ocorre a retro-propagação do erro para que os ajustes dos pesos possam ser realizados. Como estamos tratando de um algoritmo de aprendizado supervisionado, nosso objetivo é minimizar o valor do erro. A equação que define o reajuste dos pesos é

$$w_{ij}^m(\text{novo}) = w_{ij}^m(\text{antigo}) + \alpha \delta_i^m \cdot f^{m-1}(\text{net}_j^{m-1}) \quad (3.9)$$

onde w_{ij}^m são os pesos sinápticos que serão ajustados, α é um parâmetro conhecido com taxa de aprendizagem, $f^{m-1}(\text{net}_j^{m-1})$ são os sinais de entrada emitidos pelos neurônios da camada anterior (camada “ $m-1$ ”) e δ_i^m representa o termo conhecido como sensibilidade, que é dada por

$$\delta_j^{m-1} = f^{m-1}(\text{net}_j^{m-1}) \sum_{i=1}^{N_{\text{neurônios}}} w_{ij}^m \cdot \delta_i^m \quad (3.10)$$

onde índice “ i ” representa o número de neurônios da camada que recebe o sinal e $f^{m-1}(\text{net}_j^{m-1})$ é a derivada da função de ativação dos neurônios da camada “ $m-1$ ”, camada emissora do sinal em relação a entrada líquida, net_j^{m-1} . Desta forma a sensibilidade é sempre calculada recursivamente da última para a primeira camada (VALENÇA, 2010).

Para o cálculo da sensibilidade da camada de saída (no nosso exemplo camada “2”) temos

$$\delta_1^2 = f'^2(\text{net}_i^2) \cdot e_i(n) \quad (3.11)$$

- 9. Iteração:** repete-se os passos (do 3 ao 8) até que sejam satisfeitas as condições de treinamento, as quais podem ser:

- O erro da rede está baixo, sendo pouco alterado durante novos ciclos de treinamento;
- O erro do conjunto de validação cruzado comece a aumentar;
- O número máximo de ciclos de treinamento seja alcançado;

Tabela 1. Principais funções de ativação utilizadas.

Nome	$f(net)$	$f'(net)$
Sigmóide Logística	$\frac{1}{1 + e^{-net}}$	$f(net) \cdot (1 - f(net))$
Tangente Hiperbólica	$\frac{e^{net} - e^{-net}}{e^{net} + e^{-net}}$	$1 - [f(net)]^2$
Linear	net	1

3.4.4 Validação Cruzada

A validação cruzada é uma técnica que tem por objetivo evitar o *overfitting* (treinamento em excesso) de uma rede neural (VALENÇA, 2010). No momento que uma rede neural é treinada em excesso ela tende a memorizar os exemplos de teste, perdendo sua capacidade de generalização. Esta técnica utiliza um subconjunto diferente do conjunto de treinamento da rede (conjunto de validação cruzada), para que a cada ciclo de treino seja calculado sua taxa de erro. Como em geral acontece, as taxas de erro decrescem com o passar dos ciclos de treinamento. Portanto, durante o treinamento se calcula também a cada ciclo o erro do conjunto de validação. No momento em que a taxa de erro do conjunto de validação cruzada cresce é interrompido o treinamento para garantir, dada a configuração corrente, o poder máximo de generalização da rede neural (Figura 7).

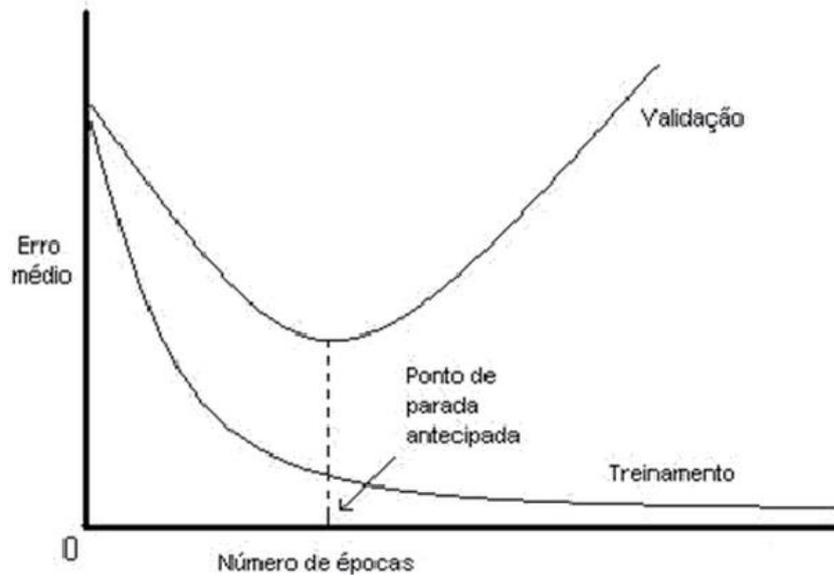


Figura 7. Validação cruzada

Capítulo 4 - Metodologia

Este capítulo mostra como foi criado e validado um modelo computacional que simule a Teoria Neutra da Biodiversidade, bem como seus resultados foram úteis para criação de uma base de dados utilizada posteriormente no treinamento da rede neural artificial.

4.1 Modelando a TNB

4.1.1 Metapopulação

O modelo computacional utilizado para simular a TNB, consiste em uma metapopulação, ou em outras palavras uma população espacialmente estruturada que represente nosso ecossistema. O termo metapopulação foi criado por Richard Levins em 1969 (Levins, 1969) para descrever um modelo de dinâmica de população da peste de insetos em campos de agricultura. A ideia foi mais amplamente aplicada dentro de habitats naturais ou artificialmente fragmentados. Essa metapopulação é subdividida em D populações locais (que também chamaremos de demes), onde cada uma possui a capacidade de armazenar N_d indivíduos. Desta forma, iremos garantir que a comunidade local sempre terá o mesmo número de indivíduos ao longo do tempo, que é o pressuposto da TNB chamado de *zero-sum assumption* (somatório-zero). Aqui consideramos que o tamanho espacial de uma população (N) é definido pela sua capacidade de armazenar indivíduos, assim:

$$N = D \cdot N_d \quad (4.1)$$

Na Figura 8, temos um exemplo de uma metapopulação onde os círculos maiores representam as demes (populações locais) e os círculos menores representam os indivíduos contidos nas respectivas demes. As linhas entre as demes ilustram a topologia da rede de migração desta metapopulação.

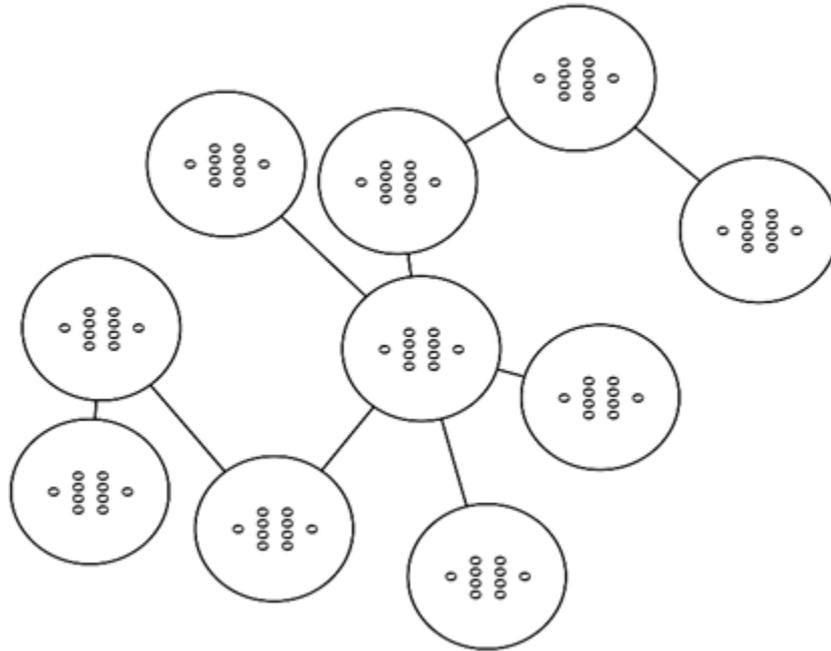


Figura 8. Exemplo de uma metapopulação.

4.1.2 Migração

Para modelarmos a rede de migração consideramos a princípio o modelo de Erdos e Rényi (ERDÖS, 1960) para a geração de grafos aleatórios. Num grafo aleatório não existe nenhum critério que privilegie alguma ligação em relação às outras. Considerando cada deme como sendo um vértice e a população total sendo o grafico completo, temos que:

1. O número total de possíveis conexões entre os demes é dado por

$$\frac{D \cdot (D - 1)}{2} \quad (4.2)$$

2. Sendo p a probabilidade de uma nova conexão existir, temos que o número de ligações entre demes numa população será dado por

$$p \cdot \frac{D \cdot (D - 1)}{2} \quad (4.3)$$

Na Figura 9 podemos visualizar algumas realizações de grafos aleatórios com diferentes valores de probabilidade p .

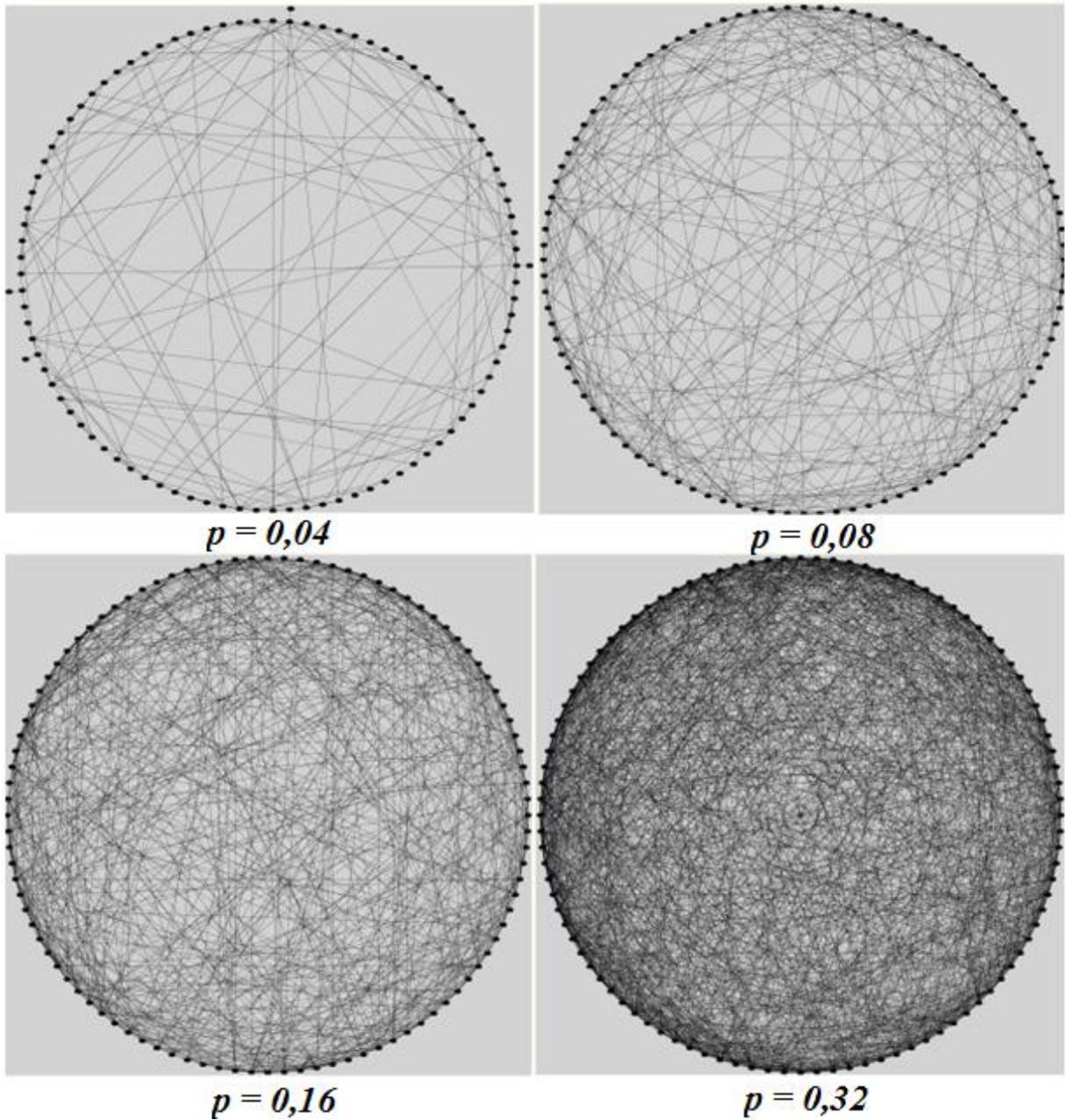


Figura 9. Exemplos de grafos aleatórios com $D = 100$ e diferentes valores de p .

Na Figura 10 observamos que a distribuição das conectividades das demes converge para uma distribuição de Poisson, de acordo com

$$P(c_j) = \frac{e^{-z} \cdot z^{c_j}}{c_j!}, \quad (4.4)$$

onde c_j é a conectividade da deme j e z é a conectividade média da rede dada pelo produto do número de vértices (no caso os demes) e a probabilidade de conexão entre os demes ($z = D \cdot p$).

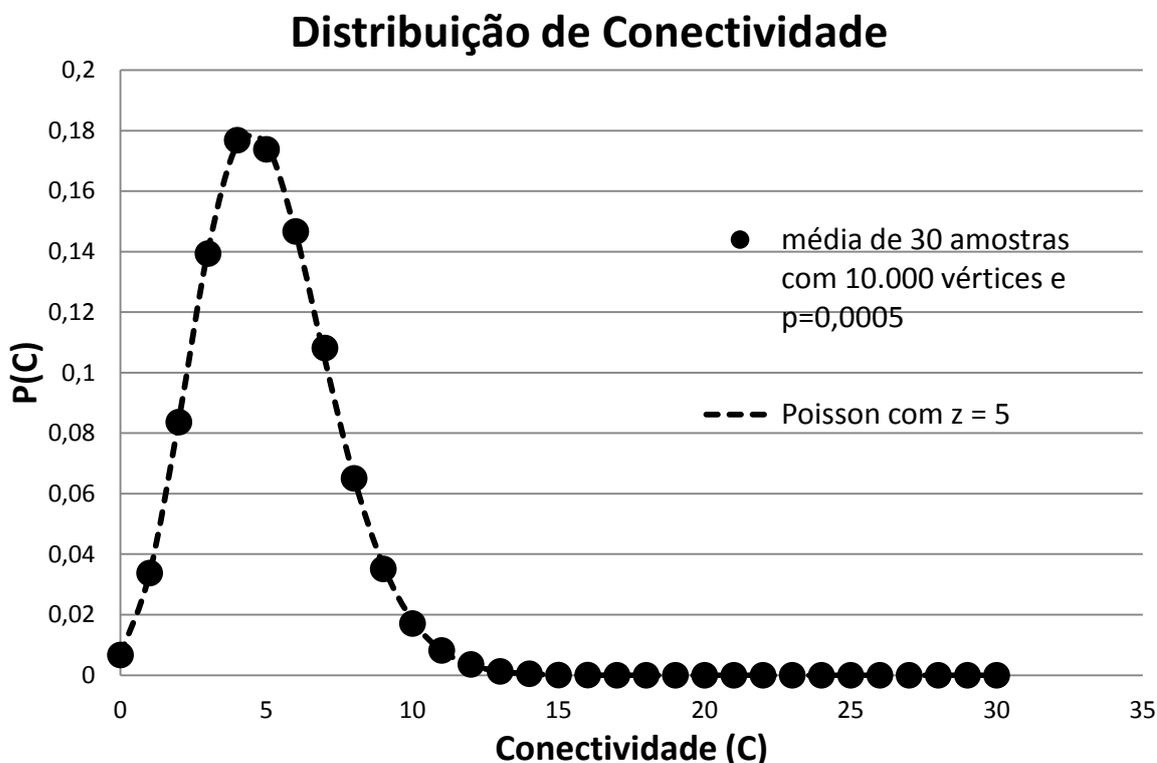


Figura 10. Distribuição de conectividade das demes para $z = 5$.

Como vimos no modelo de grafos aleatórios, a distribuição de probabilidade da conectividade dos vértices é dada por uma distribuição de Poisson com um valor médio k , em outras palavras, a maioria dos vértices possuem um grau de conectividade igual ou próximo à k . Entretanto em muitas redes reais, é possível observarmos que existem vértices com conectividade muita acima da média, os chamados *hubs*, assim como vértices com conectividade bem inferior à média. No modelo *Scale-free* (escala livre), posteriormente utilizado para modelar nossa rede de migração, a conexão de uma nova demes é dada de forma preferencial a deme de maior conectividade. Em outras palavras, quanto um novo vértice é inserido na rede ele tem maior probabilidade de se conectar com o vértice de maior grau de conectividade já existente.

Na Figura 11 podemos ver a realização de uma rede livre de escala com 100 vértices. Nesse modelo a distribuição de conectividades segue a seguinte relação:

$$P(k) \cong c \cdot k^{-\gamma}, \quad (4.5)$$

onde c é uma constante de normalização e γ é um parâmetro cujo valor normalmente situa-se no intervalo [2;3].

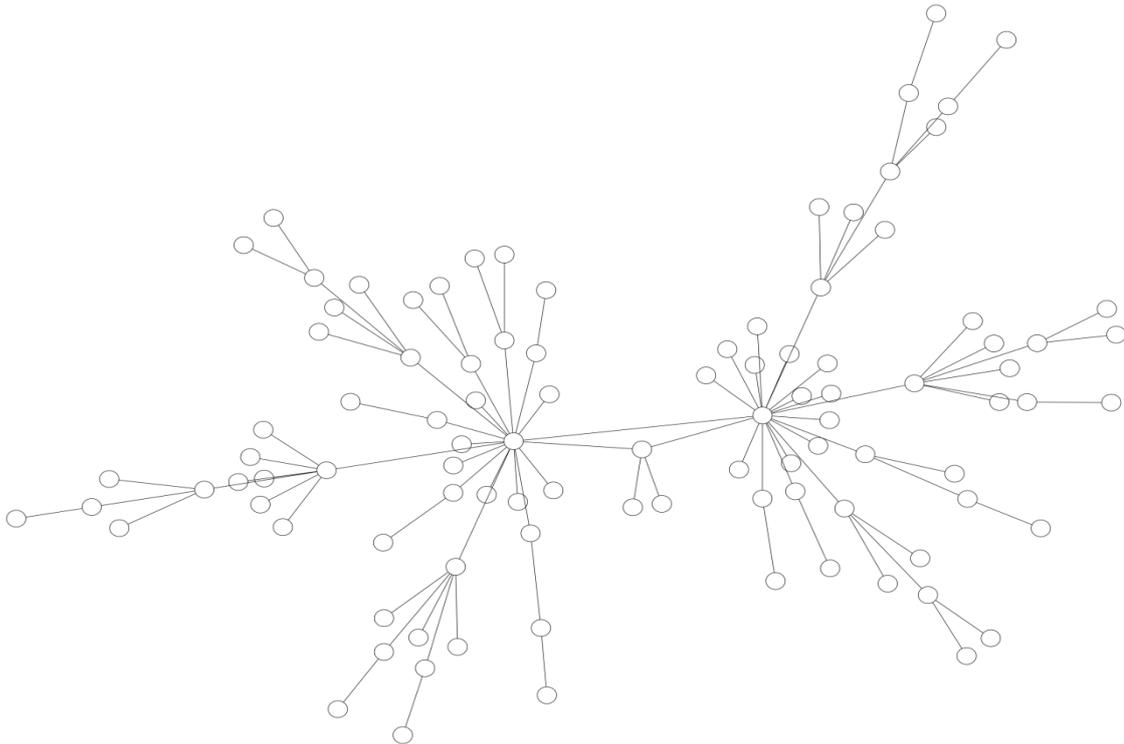


Figura 11. Exemplo de uma rede livre de escala.

Na Figura 12 temos a distribuição média de conectividade em uma rede com escala livre só que desta vez com 10.000 vértices. Neste caso o valor γ é 2,709 que pertence ao intervalo [2;3].

A cada nova geração o número de emigrantes N_e de uma dada deme j é obtido a partir de uma distribuição de Poisson de acordo com

$$P(n_e) = \frac{e^{-\varphi} \cdot \varphi^{n_e}}{n_e!}, \quad (4.6)$$

onde φ é o número médio de emigrantes ($\varphi = N_d \cdot m \cdot C_j$). Sendo m a taxa de migração de indivíduos por link e C_j o grau de conectividade da deme j (número de vizinhos da deme). Cada emigrante é escolhido aleatoriamente entre os indivíduos pertencentes à população local e é então movido para uma população adjacente, que também é escolhida aleatoriamente.

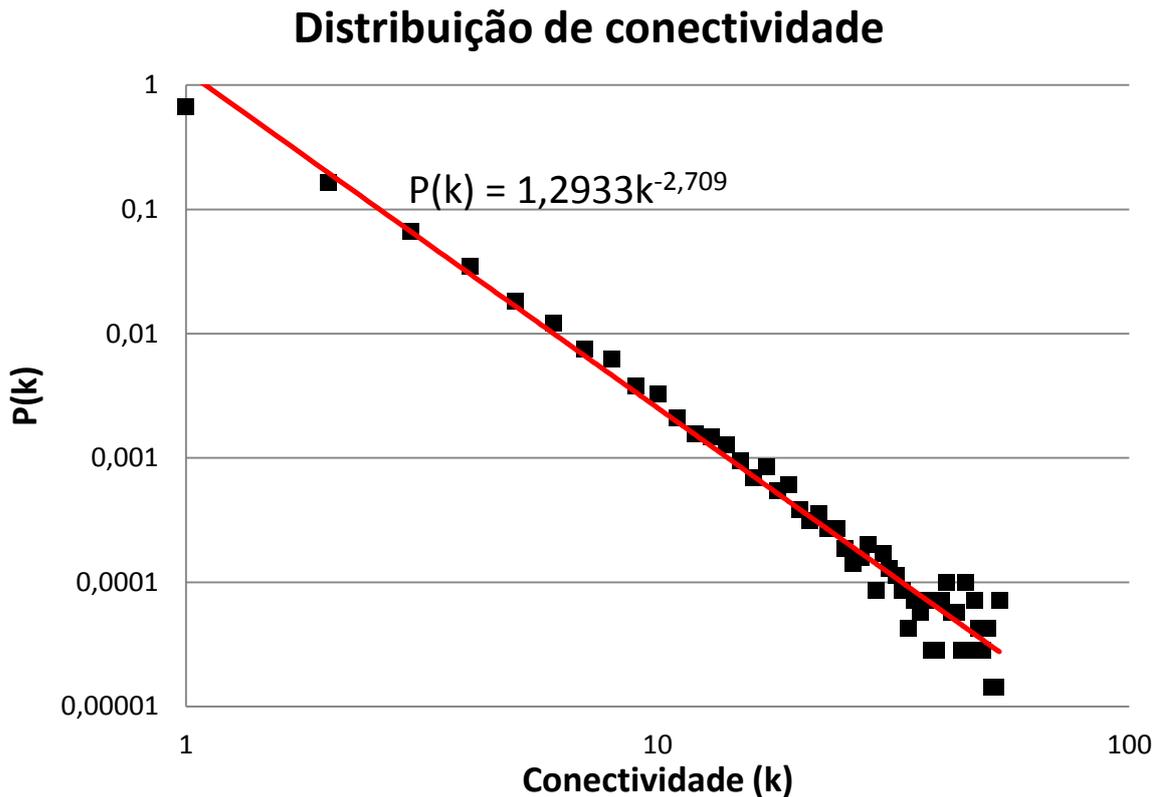


Figura 12. Distribuição de conectividade em uma rede livre de escala.

4.1.3 Seleção neutra e mutação pontual de Hubbell

Após as migrações, ocorre a seleção neutra e possíveis mutações dos indivíduos nas demes. No fim de cada geração, são sorteados os indivíduos que serão pais de indivíduos da geração seguinte. Durante este processo de reprodução, mutações podem ocorrer à taxa u . Cada mutação dá origem a uma nova espécie, suposição de mutação pontual da TNB (HUBBELL, 2001). Os indivíduos que não são selecionados nesta etapa são eliminados e não estarão presentes na geração seguinte. Após a seleção, todos os demes voltam ao seu tamanho original (N_d), pressuposto do somatório-zero (HUBBELL, 2001).

4.1.4 Evolução da metacomunidade

Na TNB, a metacomunidade é uma unidade biogeográfica evolutiva na qual indivíduos surgem, vivem e se extinguem. A relação espécie-área mostra a taxa na qual a diversidade de espécies cresce em função da área. Este tema é de grande interesse para os biólogos que trabalham com a conservação de espécies em reservas, que são projetadas e estruturadas para abrigar tantas espécies quanto possível.

Nesta primeira fase do projeto, temos como objetivo validar nosso modelo computacional. Para isso, vamos medir a diversidade de espécies em nossa metacomunidade até esta atingir seu estado de equilíbrio. Neste estado, por definição, a valor médio da diversidade de espécies não se altera.

Na Figura 13 é exibida a evolução temporal da diversidade de espécies para populações de diferentes tamanhos (quantidades de indivíduos). Em qualquer um dos casos, foi verificado que mesmo com um tempo de evolução longo, a diversidade de espécies (S) tende a atingir um estado de equilíbrio.

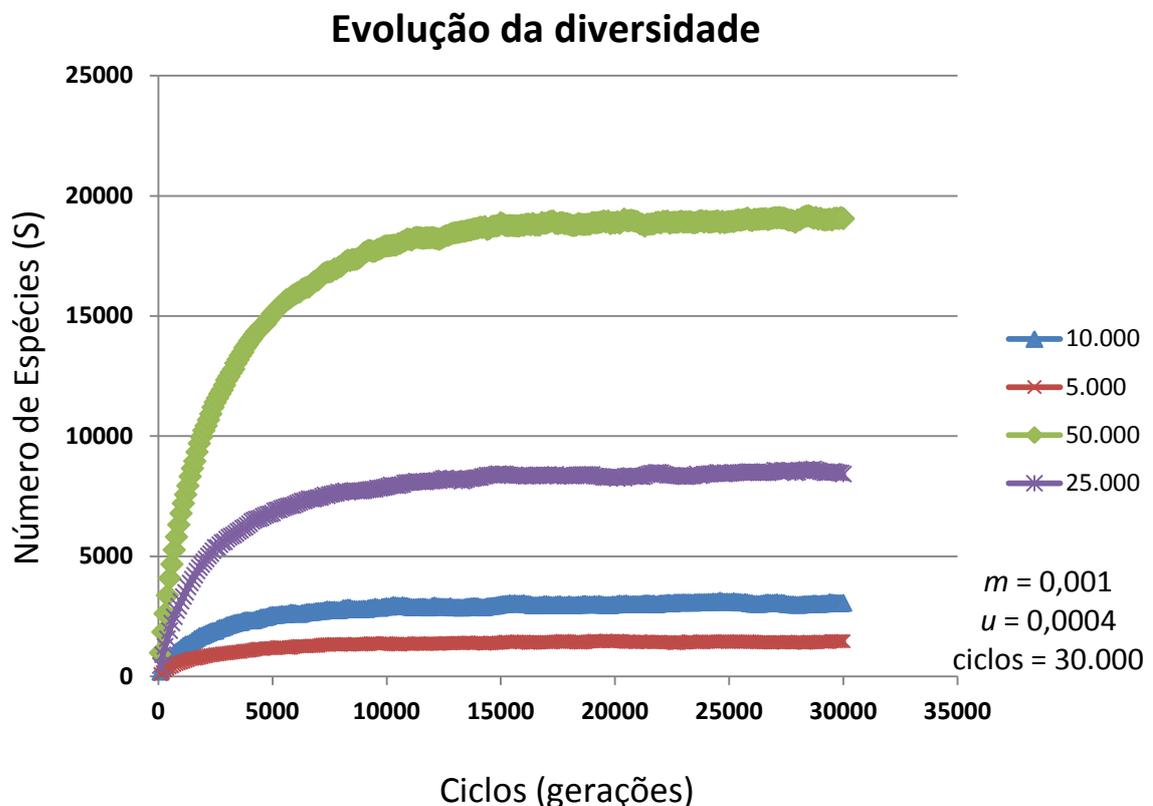


Figura 13. Evolução do número de espécies ao longo do tempo.

No processo evolutivo, espécies são extintas pelo processo de amostragem aleatória (seleção neutra), e novas espécies são inseridas no meio pelo processo de especiação (mutações). Para obtenção dos valores de estado estacionário para uma população de tamanho N , deixou-se esta evoluir por t gerações. Nos experimentos realizados o valor de t em geral situou-se no intervalo $N \leq t \leq 5 \cdot N$, sendo N o tamanho da metapopulação simulada. Por exemplo, uma população com 1000 indivíduos, atinge o estado de equilíbrio normalmente entre 1000 e 5000 gerações, dependendo também de outros parâmetros como o número da biodiversidade fundamental (θ) e a taxa de migração (m). A partir deste ponto onde a biodiversidade atinge o equilíbrio outras medições foram realizadas.

Na Figura 14, mostramos o gráfico que relaciona o número de espécies (no estado de equilíbrio) com o tamanho da população (quantidade de indivíduos). Verificamos, como esperado, que a diversidade é uma função monotonicamente crescente do tamanho da população. Entretanto, a taxa de aumento de S decai à medida que o tamanho da população (N) cresce.

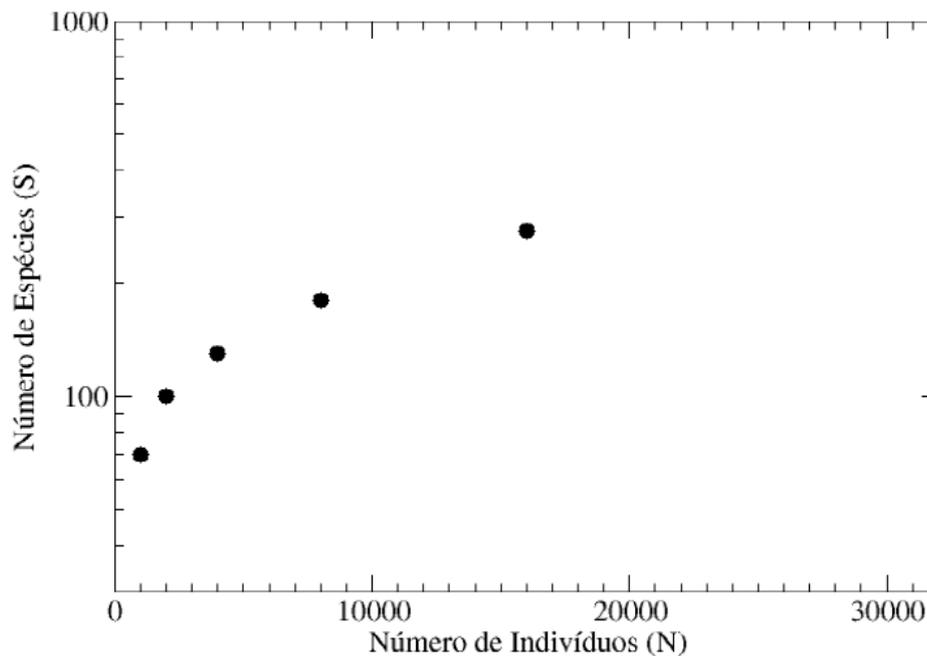


Figura 14. Diversidade x tamanho da população.

4.1.5 O número da biodiversidade fundamental (θ)

Como foi discutido no Capítulo 2, o produto da taxa de especiação u e o tamanho da metacomunidade N é uma constante que Hubbell denominou de “número da biodiversidade fundamental (θ)” ($\theta = 2 \cdot N \cdot u$). Existem expressões descrevendo o número de espécies, como também, a distribuição relativa de espécies como função deste parâmetro.

Na Figura 15, observamos como o número de espécies varia em função de diferentes valores de θ . O número θ controla a forma da curva da distribuição de abundância de espécies na metapopulação. Quando θ é pequeno, a distribuição é muito estreita. Entretanto, quando θ se torna maior, a distribuição se torna cada vez mais próxima de uma distribuição do tipo *log-normal*. A TNB também prevê uma diversidade infinita quando $\theta \rightarrow \infty$, ou seja, cada indivíduo da amostra representa uma espécie diferente, independente do tamanho da amostra colhida. Em outro extremo, quando $\theta = 0$, a distribuição colapsa para uma única espécie predominante em toda a metapopulação.

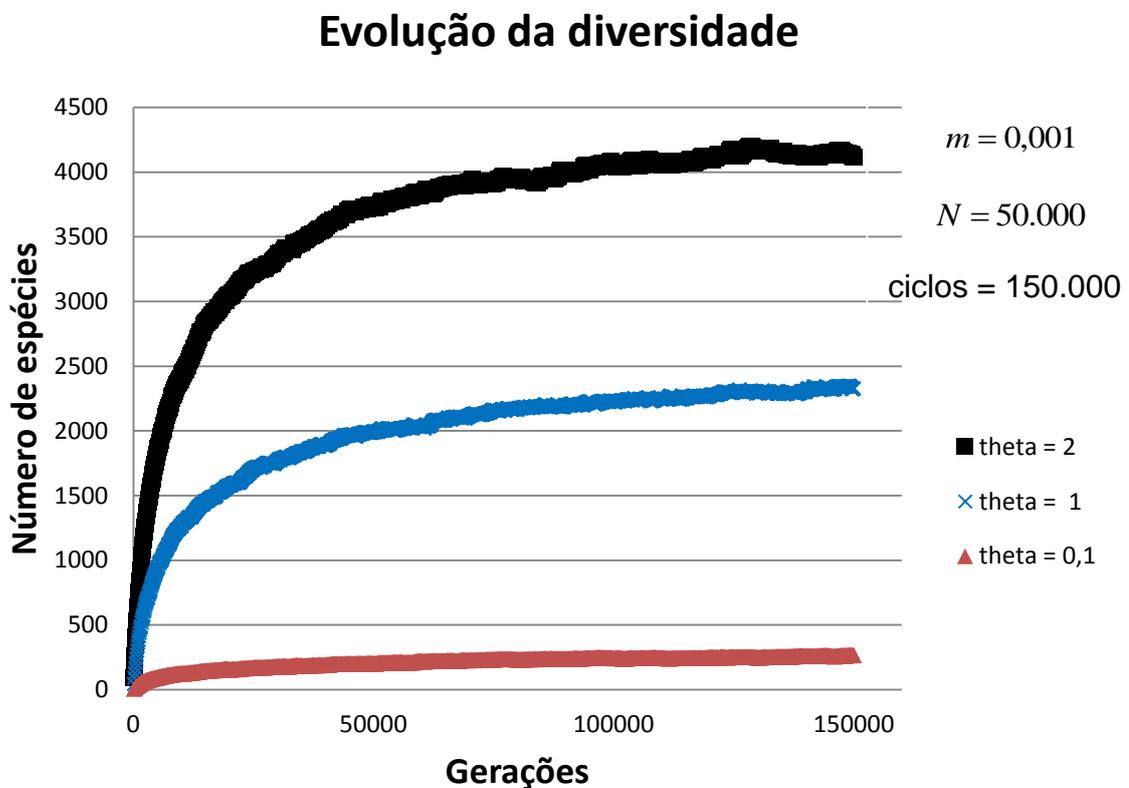


Figura 15. Resultados de simulação para diferentes valores de θ .

4.1.6 Relação espécie-área

Agora será analisada a relação do número de espécies por área amostral dentro da metapopulação. Nesta etapa, simulamos a evolução de uma população até seu estado de equilíbrio. Em seguida são realizadas amostragens desta população. O objetivo é verificar como a diversidade está relacionada com o tamanho da área amostrada. A área, neste contexto em que não existe distribuição espacial propriamente dita, corresponde ao número de indivíduos amostrados. Inicia-se o processo de amostragem a partir de um deme, aleatoriamente escolhido, e então aumenta-se a tamanho da amostragem passando para os demes vizinhos obedecendo a topologia da rede de migração. Portanto, a partir do deme (vertice do grafo) escolhido é realizada uma busca em largura até que toda a população tenha sido visitada. Desta forma é obtida a relação espécie-área.

A relação espécie-área é uma questão crucial na ecologia teórica, e é um problema que vem sendo estudado por décadas. Para escalas intermediárias de áreas, é esperado que esta relação seja dada por

$$S = c \cdot A^z, \quad (4.7)$$

onde S é o número de espécies encontradas em uma área de tamanho A e c e z são constantes de ajuste da curva.

Esta relação, tipo Lei de Potência, é conhecida como relação de Arrhenius para espécie-área (ARRHENIUS, 1921), que foi quem primeiro postulou esta dependência da diversidade de espécies com a área. O expoente z é amplamente estudado e medido em ecossistemas, e recebeu o nome de *expoente de relação espécie-área*.

Na Figura 16 pode-se visualizar os resultados da relação espécie-área em uma população com 100.000 indivíduos, $\theta = 5$ e $m = 0,001$. Numa escala *log-log* esta relação é bem aproximada por uma Lei de Potência. A inclinação da reta corresponde ao expoente z , que neste exemplo ($z = 0,4645$) encontra-se no intervalo de valores observados entre 0,1 e 0,7 para sistemas reais.

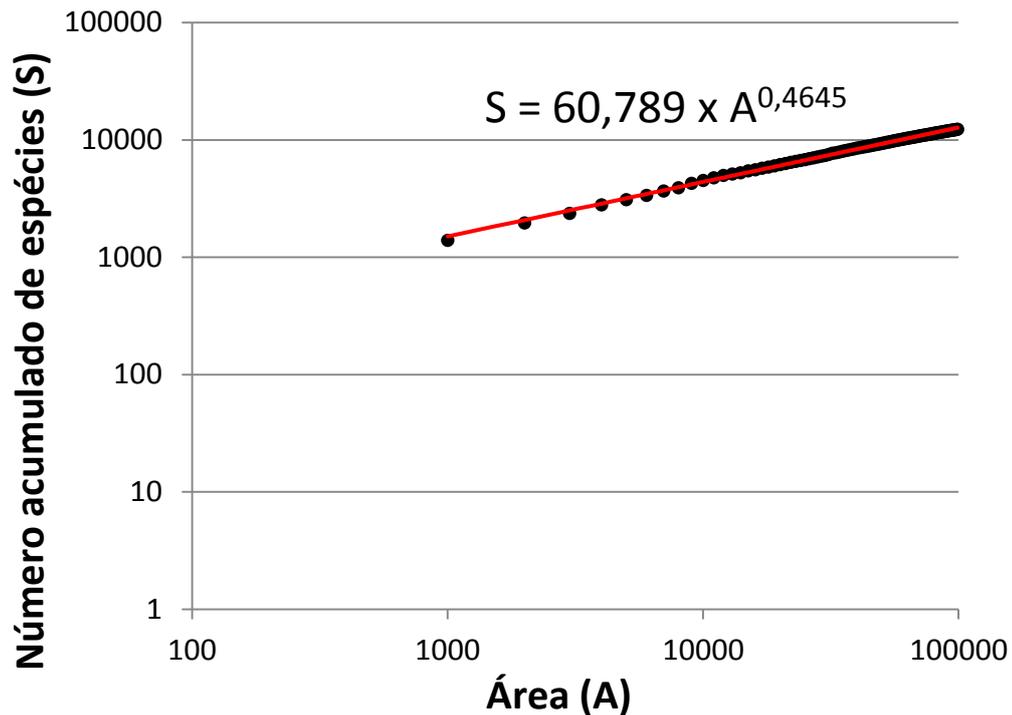


Figura 16. Relação espécie-área.

4.2 Aplicação de RNAs na previsão de biodiversidade

Depois de confirmado o modelo de simulação proposto neste trabalho em relação às previsões da TNB, o objetivo seguinte foi criar uma rede neural que funcione como um interpolador de funções, recebendo os parâmetros da simulação como entrada e gerando como saída os pontos da curva de evolução da diversidade como é demonstrado na Figura 17. Provas matemáticas que redes neurais MLPs são aproximadores universais de funções (CYBENKO, 1988) foi um argumento bastante forte para a escolha deste tipo de rede neste projeto. Outro motivo foi a utilização do algoritmo *backpropagation*, o mais popular algoritmo para treinamento de redes com camadas escondidas.

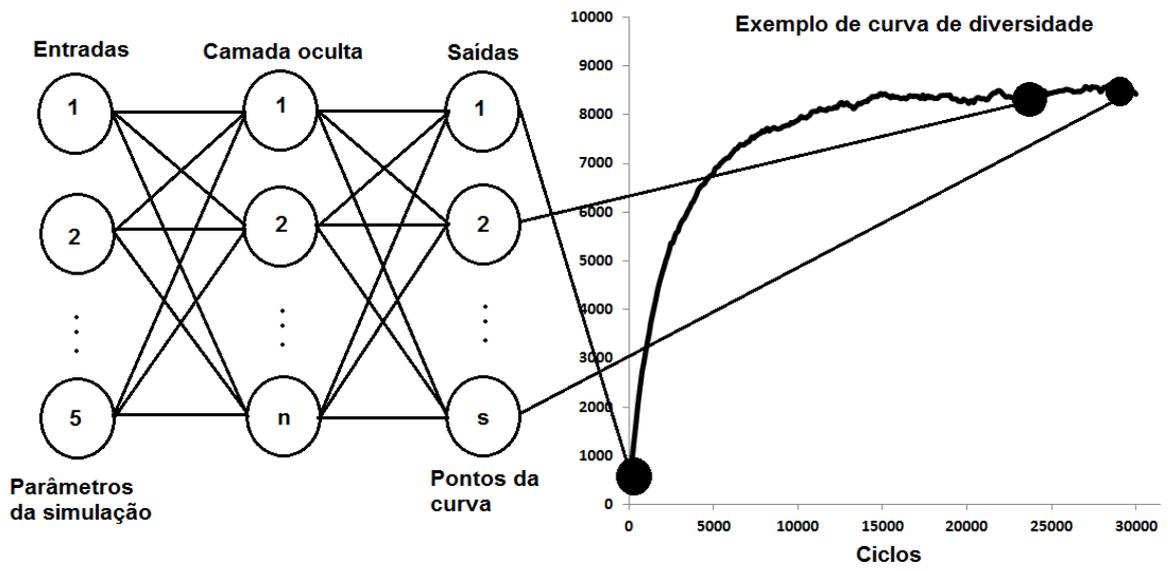


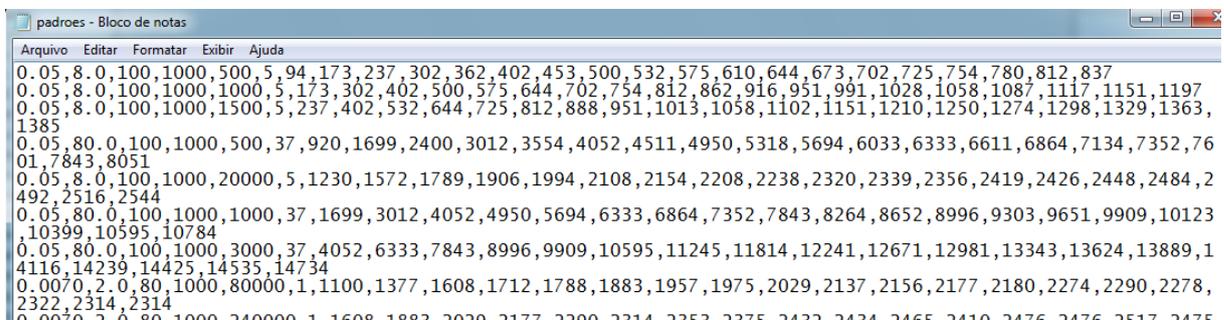
Figura 17. Modelo de rede neural para previsão de biodiversidade.

Capítulo 5 – Experimentos

Este capítulo trata dos experimentos realizados, como foi obtida a base de dados, os resultados obtidos e a análise destes por meio de testes estatísticos.

5.1 Base de dados

Para a realização dos experimentos foi utilizada uma base de dados criada a partir de alguns resultados de simulações feitas com o modelo explicado no capítulo anterior. Para cada conjunto de valores de parâmetros (foi utilizado cinco parâmetros – taxa de migração, theta, número de demes, tamanho da população local e número de ciclos evolutivos) selecionou-se 20 pontos da curva de evolução de diversidade resultante na simulação de tal forma que o intervalo entre estes pontos corresponde ao número de ciclos dividido pela quantidade de pontos (20). Com isso definiu-se as entradas (parâmetros das simulações) da rede neural e as saídas da rede como sendo esses vinte pontos da curva (Figura 18). É importante destacar que dependendo do número de ciclos na simulação, a curva de evolução da diversidade pode não alcançar seu estado de equilíbrio. Sendo assim, deverá ser possível também gerar resultados parciais das curvas de evolução de diversidade a depender do número de ciclos de entrada. Nesse primeiro momento o número de pontos foi selecionado arbitrariamente com o objetivo de se obter uma boa representação da curva resultante com um mínimo de custo computacional.



```

Arquivo Editar Formatar Exibir Ajuda
0.05,8.0,100,1000,500,5,94,173,237,302,362,402,453,500,532,575,610,644,673,702,725,754,780,812,837
0.05,8.0,100,1000,1000,5,173,302,402,500,575,644,702,754,812,862,916,951,991,1028,1058,1087,1117,1151,1197
0.05,8.0,100,1000,1500,5,237,402,532,644,725,812,888,951,1013,1058,1102,1151,1210,1250,1274,1298,1329,1363,
1385
0.05,80.0,100,1000,500,37,920,1699,2400,3012,3554,4052,4511,4950,5318,5694,6033,6333,6611,6864,7134,7352,76
01,7843,8051
0.05,8.0,100,1000,20000,5,1230,1572,1789,1906,1994,2108,2154,2208,2238,2320,2339,2356,2419,2426,2448,2484,2
492,2516,2544
0.05,80.0,100,1000,1000,37,1699,3012,4052,4950,5694,6333,6864,7352,7843,8264,8652,8996,9303,9651,9909,10123
,10399,10595,10784
0.05,80.0,100,1000,3000,37,4052,6333,7843,8996,9909,10595,11245,11814,12241,12671,12981,13343,13624,13889,1
4116,14239,14425,14535,14734
0.0070,2.0,80,1000,80000,1,1100,1377,1608,1712,1788,1883,1957,1975,2029,2137,2156,2177,2180,2274,2290,2278,
2322,2314,2314
0.0070,2.0,80,1000,240000,1,1608,1883,2029,2177,2300,2314,2353,2375,2423,2424,2465,2410,2476,2476,2517,2475

```

Figura 18. Fragmento da base de dados gerada.

5.2 Preprocessamento dos dados

Antes de ser utilizada, a base de dados em experimentos com RNAs precisa ser preprocessada, de forma a garantir o funcionamento adequado nas etapas seguintes. Como as entradas e saídas já foram definidas na criação da base de dados, a próxima etapa é a normalização dos dados. A normalização é importante para que as variáveis em intervalos diferentes tenham a mesma atenção durante o treinamento da rede e que seus valores sejam proporcionais aos limites da função de ativação utilizada nas camadas de saída da rede (VALENÇA, 2010). Neste trabalho foi utilizada a normalização por transformação linear que utiliza a seguinte fórmula:

$$y = (b - a) \frac{(x_i - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})} + a, \quad (5.1)$$

onde y é o valor normalizado; x_i é o valor original; x_{\min} é o valor mínimo da variável; x_{\max} é o valor máximo da variável; a e b são os limites inferior e superior da normalização respectivamente.

Para utilização de algoritmos de treinamento como o *backpropagation* e funções de ativação como a sigmoide logística, os dados não devem ser re-escalados nos extremos da função pois o gradiente da função de ativação em valores extremos se aproxima de zero, dificultando o treinamento (VALENÇA, 2010). Desta forma como os valores da função sigmoide logística estão limitados entre [0;1] os dados da nossa base foram normalizados no intervalo entre 0,15 (a) e 0,85 (b) (Figura 19).

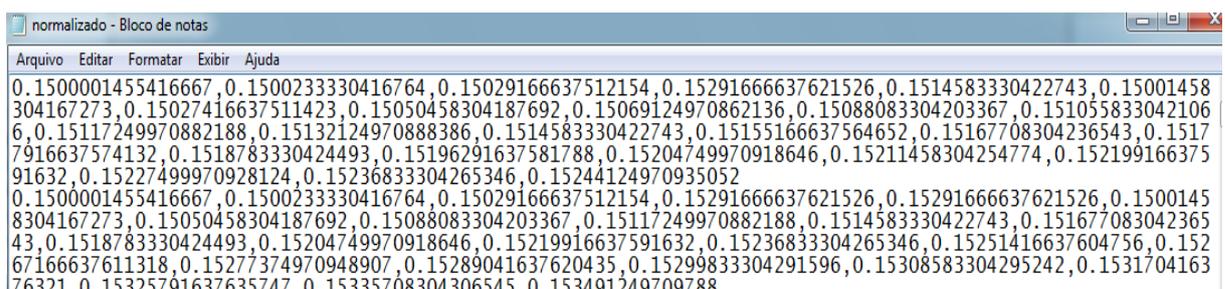


Figura 19. Fragmento da base de dados normalizada.

5.3 Previsão da evolução temporal da diversidade

Para a previsão da curva de evolução temporal da diversidade em modelos neutros com RNA foram utilizadas redes do tipo MLP em conjunto com o algoritmo de treinamento *backpropagation*.

Definições:

- A rede utilizada possui 5 entradas (correspondentes aos parâmetros de simulação da TNB) e 20 saídas (pontos da curva resultante da simulação).
- Da base de dados 50% dos exemplos foram utilizados para o treinamento da rede, 25% para a validação cruzada e os 25% restante para testes.
- O número de neurônios da camada escondida compreende a faixa de [5;150] neurônios com intervalos de 5 neurônios entre cada configuração de simulação.
- Para cada configuração de número de neurônios na camada escondida foram feitas 30 simulações.
- O treinamento em cada simulação é interrompido depois que o valor do erro médio quadrático (EMQ) do conjunto de validação cruzada, uma vez alcançado seu valor mínimo, começa a crescer ou o erro entre ciclos de treinamento fique estacionário. O EMQ é dado pela seguinte expressão:

$$EMQ = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (DP_i - DO_i)^2, \quad (5.2)$$

onde DP é o valor da diversidade calculada na previsão da rede neural; DO é o valor da diversidade ocorrida nas simulações e que se deseja prever e N é o número de exemplos utilizados da base de dados.

5.4 Resultados

Para uma correta interpretação dos dados, depois dos experimentos realizados faz-se necessário efetuarmos testes estatísticos para avaliar a validade e o desempenho da rede neural utilizada.

Nos experimentos realizados com nossa base de dados o número de neurônios na camada escondida que obteve menor EMQ nas previsões foi 10, como é visto na Figura 20.

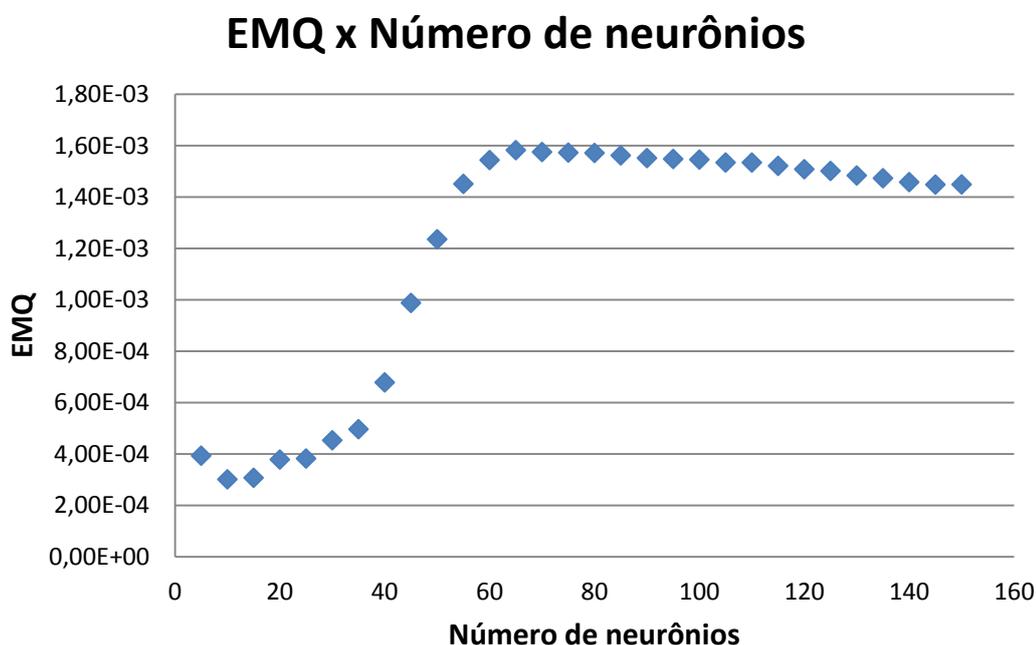


Figura 20. Resultado dos testes do número de neurônios na camada escondida.

Depois de determinado o melhor número de neurônios na camada escondida e a métrica de desempenho da rede efetuou-se 30 simulações para obter o melhor conjunto de pesos sinápticos (melhor rede neural). Na Figura 21 pode ser visualizada a curva de treinamento da melhor rede obtida utilizando o conjunto de validação cruzada como critério de parada do treinamento. Para cada simulação realizada a duração do treinamento da rede foi de poucos segundos.

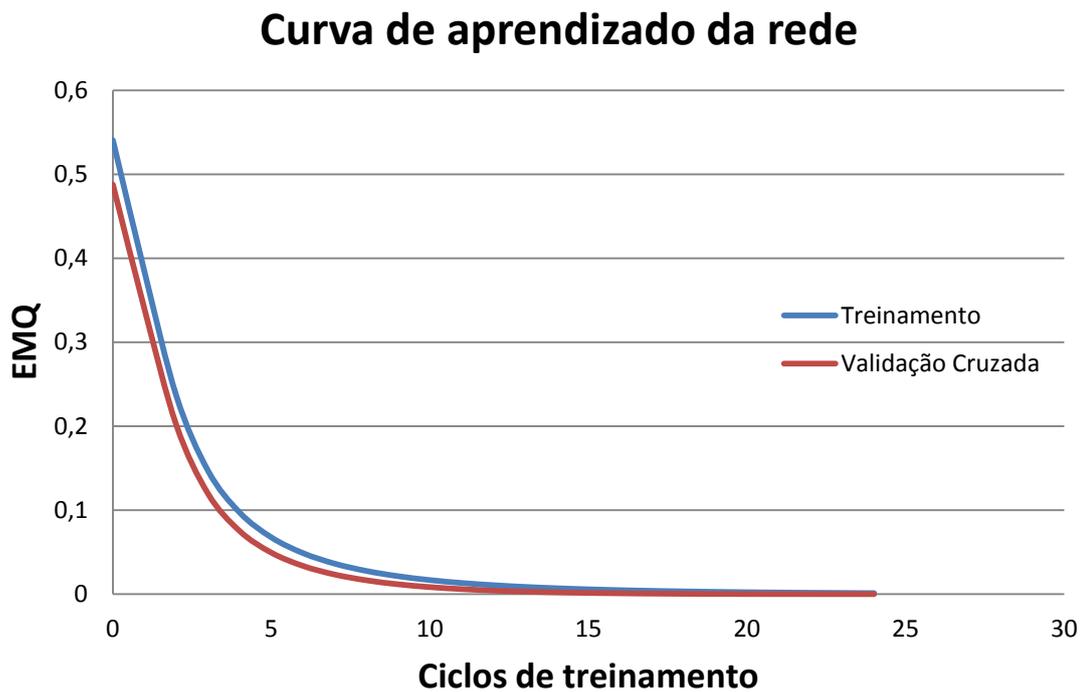


Figura 21. Curva de aprendizagem da rede neural.

Para avaliar a desempenho da rede neural a métrica utilizada foi o Erro Percentual Médio Absoluto (EPMA):

$$EPMA = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|DP_i - DO_i|}{DO_i} \times 100 \quad (5.3)$$

onde os valores da expressão corresponde aos mesmos da equação 5.2.

O EPMA é uma taxa que mede em porcentagem o quanto as previsões de diversidade se desviam dos valores reais (obtidos nas simulações da TNB); quanto menor o seu valor, melhores são as previsões. Na Figura 22 são mostrados os resultados para 30 simulações feitas com uma rede neural MLP com 10 neurônios na camada escondida apresentando um EPMA médio de 6,52%.

Desempenho da rede

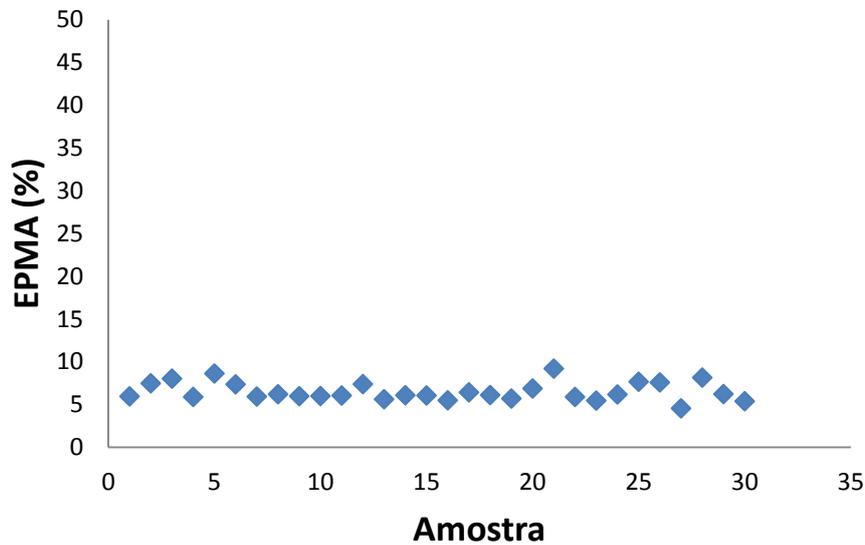


Figura 22. Desempenho da rede neural na previsão de diversidade.

5.5 Considerações finais sobre os experimentos

Como observado neste capítulo, o uso de redes neurais artificiais do tipo MLP se mostrou bastante útil na obtenção dos resultados de simulação da evolução temporal da diversidade em modelos neutros. O treinamento da rede durou em média poucos segundos e uma vez treinada os resultados fornecidos para um novo conjunto de parâmetros são dados de forma quase instantânea, evitando os custos de novas simulações.

Capítulo 6 - Conclusão e Trabalhos Futuros

Neste capítulo, são apresentadas conclusões e algumas sugestões de trabalhos futuros, em decorrência do estudo e concretização do presente trabalho.

6.1 Observações conclusivas

Com este trabalho foi possível conhecer alguns mecanismos biológicos que podem reger a dinâmica em ecossistemas e técnicas para modelar e simular tais sistemas. A TNB, proposta por Hubbell, foi inovadora tanto quanto polêmica no meio científico, tendo em vista a discordância de alguns pesquisadores com algumas das principais deduções de Hubbell. Apesar deste impacto, os resultados obtidos a partir desta teoria são muito interessantes e já foram citados inúmeras vezes, tornando o livro de Hubbell referência na literatura dentro da Ecologia. Uma das principais contribuições desta teoria foi proporcionar uma nova abordagem sobre a dinâmica da origem, geração e manutenção da diversidade de espécies no mundo.

Os resultados obtidos demonstram que a utilização de redes neurais na previsão da evolução temporal de diversidade em modelos neutros se mostrou bastante útil. Tendo em vista que as simulações para obter tais resultados apresentam um custo computacional elevado e demoram muito tempo, uma rede neural devidamente treinada pode proporcionar resultados para novos parâmetros e condições de maneira mais rápida, facilitando o processo de análise dos dados.

6.2 Trabalhos Futuros

No decorrer deste trabalho, foram identificadas algumas possibilidades de análise do modelo proposto por Hubbell (HUBBELL, 2001), bem como possíveis melhorias no modelo de simulação utilizado e na aplicação de redes neurais na previsão de biodiversidade. Nesta seção são dadas estas sugestões.

6.2.1 Utilização de outras arquiteturas de redes neurais

Um dos primeiros objetivos futuros é buscar uma melhoria no desempenho da rede neural. Outros tipos de arquiteturas neurais existentes como as redes RBF (*Radial Basis Functions* – redes com funções de ativação de base radial) serão utilizadas para comparar seus desempenhos. As redes RBF, assim como as redes MLP utilizadas neste trabalho, também são consideradas aproximadoras universais de funções (VALENÇA, 2010).

6.2.2 Análise de outras implicações da TNB

Em relação às implicações da TNB discutidas inicialmente neste trabalho, existem inúmeras outras análises que podem ser feitas, dentre as quais pode ser destacada um estudo comparativo dos impactos na geração de diversidade entre os modelos de topologia de rede de migração com *scale-free* e *random graphs*; e uma análise mais detalhada do expoente z encontrado na relação espécie-área.

6.2.3 Desenvolvimento de algoritmos inspirados na teoria neutra

Em outro ponto de vista, o estudo de fenômenos naturais, comportamentos de seres vivos e modelos teóricos de sistemas naturais como a TNB são fontes de inspiração para a criação de ferramentas computacionais bio-inspiradas. É neste contexto que estão, por exemplo, as RNAs utilizadas neste trabalho. Um ramo da ciência da computação chamado de Inteligência Artificial é destinado a estudar, compreender e aplicar padrões complexos encontrados na natureza na resolução de problemas e desenvolvimento de novas tecnologias. A TNB procura descrever como se dá o surgimento e manutenção da diversidade. Gerar diversidade sob o ponto de vista de resolução de problemas é crucial em alguns casos como (PASTI, ZUBEN e CASTRO, 2011):

- Problemas de tomada de decisão;
- Problemas de otimização dinâmica;
- Problemas de otimização multiobjetivo;
- Problemas de classificação.

Exemplos assim motivam a criação de mecanismos voltados à diversidade de soluções, pois na maioria das vezes se beneficiam com a proposição de múltiplas

alternativas de solução. Sobre estes aspectos, o estudo da TNB fornece recursos para entendimento e uma possível abordagem de novos mecanismos bio-inspirados.

Bibliografia

ABAS, R. Backpropagation Networks prototype for off-line signature verification, Melbourne, Março 1994.

ALONSO, D.; ETIENNE, R. S.; MCKANE, A. J. The merits of neural theory. **Trends in Ecology and Evolution**, n. 21, 2006. 451-457.

ANAGNOSTOPOULOS, C. N. E. et al. License Plate Recognition From Still Images and. **IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems**, 9, n. 3, Setembro 2008. 377-391.

ARRHENIUS, O. Species and area. **Journal of Ecology**, n. 9, p. 95-99, 1921.

CANHOS, V. P. Informática para biodiversidade: padrões, protocolos e ferramentas. **Ciência e Cultura**, São Paulo, v. 55, n. 2, 2003.

CARVALHO, A. P. D. L. F. Redes Neurais Artificiais, Março 2009. Disponível em: <<http://www2.icmc.usp.br/~andre/research/neural/MLP.htm>>. Acesso em: 20 Outubro 2012.

CASSEMIRO, F. A. S.; PADIA, A. A. Teoria Neutra da Biodiversidade e Biogeografia: aspectos teóricos, impactos na literatura e perspectivas. **Oecologia Brasiliensis**, 17 nov. 2008. 706-719.

CYBENCO, G. Approximation by superpositions of a sigmoid function. **Mathematics of Control, Signals and Systems**, II, 1989. 524.

CYBENKO, G. **Continuous valued neural networks with two hidden layers are sufficient**. Medford: Universidade de Tufts, 1988.

ERDÖS, P. A. A. R. On the evolution of random graphs. **Instituto de Matemática, Academia Húngara de Ciências**, n. 5, p. 17-61, 1960.

ETIENNE, R. S. A new sampling formula for neutral biodiversity. **Ecology Letters**, n. 8, 2005. 253-260.

HINTON, G. E.; MCCLELLAND, J. L. Learning representations by back-propagation errors. **Nature**, 323, 1986. 533-536.

HU, X. S.; HE, F. L.; HUBBELL, S. P. Neural theory in macroecology and population genetics. **Oikos**, 2006. 548-556.

HUBBELL, S. P. **The unified neutral theory of biodiversity and biogeography**. Princeton: Universidade de Princeton, 2001.

HUTCHINSON, G. E. Concluding remarks. **Cold Spring Harbor Symposia on Quantitative Biology**, 1957. 415-427.

KIMURA, M. The rate of molecular evolution considered from the stand-point of population genetics. **Proc. Natl. Acad. Sci.**, USA, 63, 1969. 1181-1188.

KIMURA, M. **The natural allele theory of molecular evolution**. Cambridge: Universidade de Cambridge, 1983.

KING, J. L.; JUKES, T. H. Non-Darwinian evolution. **Science**, p. 788-798, 1969.

LEIGH, E. G. Neural theory: a historical perspective. **Journal of Evolutionary Biology**, n. 20, 2007. 2075-2091. Disponível em: http://si-pddr.si.edu/jspui/bitstream/10088/6669/1/Leigh0305neutral_theory_a_historic.pdf.

LEVINS, R. Some demographic and genetic consequences of environmental heterogeneity for biological control. **Bulletin of the Entomological Society of America** 15, 1969. 237-240.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **Bulletin of Mathematical Biophysics**, n. 5, 1943. 115-133.

MCGILL, B. J.; MAURER, B. A.; WEISER, M. D. Empirical Evaluation of Neutral Theory. **Ecology**, 2006. 1411-1423.

MMA. Convenção sobre Diversidade Biológica. **Ministério do Meio Ambiente**. Disponível em: http://www.mma.gov.br/estruturas/sbf_dpg/_arquivos/cdbport.pdf. Acesso em: 20 out. 2012.

PASTI, R.; ZUBEN, F. J. V.; CASTRO, L. N. D. Introdução à Computação Biogeográfica, 2011. Disponível em: <http://www.dca.fee.unicamp.br/portugues/pesquisa/seminarios/2011/artigos/pasti.pdf>. Acesso em: 15 out. 2012.

PURVES, D. E. A. **Neurociência**. 4ª Edição. ed. Porto Alegre: Artmed, 2010.

RIEDMILLER, M.; BRAUN, H. A direct adaptive method for faster backpropagation learning: the RPROP algorithm. **IEEE International Conference on Neural Networks**, I, 1993. 586 - 591.

ROSENBLATT, F. Perceptron Simulation Experiments. **Proceedings of the IRE**, v. 48, p. 301-309, March 1960.

THEODORIDIS, S.; KOUTROUMBAS, K. **Pattern Recognition**. [S.l.]: Academic Press, USA, 1999.

VALENÇA, M. J. S. Prevendo com redes neurais artificiais: o estado da arte. **XVI Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos**, João Pessoa-PB, 2005.

VALENÇA, M. J. S. **Fundamentos das Redes Neurais**: Exemplos em java. 2ª Edição. ed. Olinda: Livro Rápido, 2010. 310 p.

ZORZETTO, R. Números em revisão. **Revista Pesquisa**, Fevereiro 2012. Disponível em: <http://revistapesquisa.fapesp.br/wp-content/uploads/2012/04/018-023_192.pdf>. Acesso em: 1 nov. 2012.