



André Vargas Abs da Cruz

**Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica
para Problemas com Representação Numérica**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Sistemas de Apoio à Decisão do Departamento de Engenharia Elétrica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção Do título de Doutor em Sistemas de Apoio à Decisão

Orientador : Prof. Marco Aurélio C. Pacheco

Co-Orientador: Prof. Marley M. B. R. Vellasco

Rio de Janeiro
Março de 2007



André Vargas Abs da Cruz

Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica para Problemas com Representação Numérica

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Sistemas de Apoio à Decisão do Departamento de Engenharia Elétrica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção Do título de Doutor em Sistemas de Apoio à Decisão. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Marco Aurélio C. Pacheco

Orientador

Departamento de Engenharia Elétrica — PUC-Rio

Prof. Marley M. B. R. Vellasco

Co-Orientador

Departamento de Engenharia Elétrica — PUC-Rio

Prof. Carlos Roberto Hall Barbosa

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. Karla Tereza Figueiredo Leite

Universidade Estadual do Rio de Janeiro

Prof. Leandro dos Santos Coelho

Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Prof. Renato Portugal

Laboratório Nacional de Computação Científica

Prof. Valmir C. Barbosa

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. Yvan J. Tupac Valdivia

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico —
PUC-Rio

Rio de Janeiro, 12 de Março de 2007

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

André Vargas Abs da Cruz

Graduou-se em Engenharia de Computação na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Mestrado na área de Sistemas de Apoio à Decisão no Departamento de Engenharia Elétrica da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Ficha Catalográfica

Abs da Cruz, André V.

Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica para Problemas com Representação Numérica / André Vargas Abs da Cruz; orientador: Marco Aurélio C. Pacheco; co-orientador: Marley M. B. R. Vellasco. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Engenharia Elétrica, 2007.

v., 109 f: il. ; 29,7 cm

1. Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Elétrica – Tese. 2. Computação Evolutiva. 3. Algoritmos Genéticos. 4. Algoritmos Culturais. 5. Algoritmos com Inspiração Quântica. I. Pacheco, Marco Aurélio C.. II. Vellasco, Marley M. B. R.. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

À minha esposa Luciana

Agradecimentos

Ao CNPq e à PUC-Rio pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

Aos meus orientadores Prof. Dr. Marco Aurélio C. Pacheco e Prof^a. Dr^a. Marley M. B. R. Vellasco, pelo estímulo e parceria na realização deste trabalho.

Aos meus colegas e amigos da PUC-Rio e do ICA.

Aos amigos Dilza Sczwarcman, Douglas Mota Dias, Omar Paranaíba e Wilson Freitas pela paciência ao ouvir longas conversas sobre física quântica e computação evolutiva.

Aos meus familiares e amigos que de uma forma ou de outra me estimularam e ajudaram.

Aos meus pais, pela educação, os exemplos e o apoio que me foram dados ao longo de toda a minha vida.

À minha esposa Luciana, pelo amor, carinho, generosidade e compreensão.

Resumo

Abs da Cruz, André V.; Pacheco, Marco Aurélio C.; Vellasco, Marley M. B. R.. **Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica para Problemas com Representação Numérica**. Rio de Janeiro, 2007. 109p. Tese de Doutorado — Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Desde que foram propostos como método de otimização, os algoritmos evolutivos têm sido usados com sucesso para resolver problemas complexos nas mais diversas áreas como, por exemplo, o projeto automático de circuitos e equipamentos, planejamento de tarefas, engenharia de software e mineração de dados, entre tantos outros. Este sucesso se deve, entre outras coisas, ao fato desta classe de algoritmos não necessitar de formulações matemáticas rigorosas a respeito do problema que se deseja otimizar, além de oferecer um alto grau de paralelismo no processo de busca. No entanto, alguns problemas são computacionalmente custosos no que diz respeito à avaliação das soluções durante o processo de busca, tornando a otimização por algoritmos evolutivos um processo lento para situações onde se deseja uma resposta rápida do algoritmo (como por exemplo, problemas de otimização *online*). Diversas maneiras de se contornar este problema, através da aceleração da convergência para boas soluções, foram propostas, entre as quais destacam-se os Algoritmos Culturais e os Algoritmos Co-Evolutivos. No entanto, estes algoritmos ainda têm a necessidade de avaliar muitas soluções a cada etapa do processo de otimização. Em problemas onde esta avaliação é computacionalmente custosa, a otimização pode levar um tempo proibitivo para alcançar soluções ótimas. Este trabalho propõe um novo algoritmo evolutivo para problemas de otimização numérica (Algoritmo Evolutivo com Inspiração Quântica usando Representação Real – AEIQ–R), inspirado no conceito de múltiplos universos da física quântica, que permite realizar o processo de otimização com um menor número de avaliações de soluções. O trabalho apresenta a modelagem deste algoritmo para a solução de problemas *benchmark* de otimização numérica, assim como no treinamento de redes neurais recorrentes em problemas de aprendizado supervisionado de séries temporais e em aprendizado por reforço em tarefas de controle. Os resultados obtidos demonstram a eficiência desse algoritmo na solução destes tipos de problemas.

Palavras-chave

Computação Evolutiva. Algoritmos Genéticos. Algoritmos Culturais. Algoritmos com Inspiração Quântica.

Abstract

Abs da Cruz, André V.; Pacheco, Marco Aurélio C.; Vellasco, Marley M. B. R.. **Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms for Problems based on Numerical Representation**. Rio de Janeiro, 2007. 109p. PhD Thesis — Department of Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Since they were proposed as an optimization method, the evolutionary algorithms have been successfully used for solving complex problems in several areas such as, for example, the automatic design of electronic circuits and equipments, task planning and scheduling, software engineering and data mining, among many others. This success is due, among many other things, to the fact that this class of algorithms does not need rigorous mathematical formulations regarding the problem to be optimized, and also because it offers a high degree of parallelism in the search process. However, some problems are computationally intensive when it concerns the evaluation of solutions during the search process, making the optimization by evolutionary algorithms a slow process for situations where a quick response from the algorithm is desired (for instance, in online optimization problems). Several ways to overcome this problem, by speeding up convergence time, were proposed, including Cultural Algorithms and Coevolutionary Algorithms. However, these algorithms still have the need to evaluate many solutions on each step of the optimization process. In problems where this evaluation is computationally expensive, the optimization might take a prohibitive time to reach optimal solutions. This work proposes a new evolutionary algorithm for numerical optimization problems (Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm for Problems based on Numerical Representation – QIEA–R), inspired in the concept of quantum superposition, which allows the optimization process to be carried on with a smaller number of evaluations. The work presents the modelling for this algorithm for solving benchmark numerical optimization problems, and for training recurrent neural networks in supervised learning and reinforcement learning. The results show the good performance of this algorithm in solving these kinds of problems.

Keywords

Evolutionary Computation. Genetic Algorithms. Cultural Algorithms. Quantum–Inspired Computing.

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Motivação	13
1.2	Objetivos	15
1.3	Contribuições	15
1.4	Descrição do Trabalho	16
1.5	Organização do Trabalho	18
2	Fundamentos	19
2.1	Mecânica Quântica	19
2.2	Um Exemplo de um Sistema Físico Quântico – O Modelo da Partícula na Caixa	24
2.3	Computação Quântica	26
2.4	Algoritmos com Inspiração Quântica	28
2.5	Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica – Representação Binária	31
2.6	Algoritmos Culturais	34
2.7	Neuro–Evolução	37
3	Algoritmos Evolutivos com Inspiração Quântica e Representação Real – AEIQ–R	39
3.1	O Modelo de Algoritmo Evolutivo com Inspiração Quântica e Representação Real	39
3.2	Usando o Modelo da Partícula na Caixa com o AEIQ–R	51
3.3	Analogia entre o AEIQ–R e os Algoritmos Culturais	52
3.4	Modelo Neuro-Evolutivo – Aprendizado Supervisionado	54
3.5	Modelo Neuro-Evolutivo – Aprendizado por Reforço	58
4	Estudos de Caso	60
4.1	Otimização de Funções	60
4.2	Neuro-Evolução	72
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	82
5.1	Aprendizado Online	84
5.2	Sistemas Multi-Agentes	85
	Referências Bibliográficas	87

Lista de figuras

2.1	Diagrama do sistema físico hipotético da “partícula na caixa”	24
2.2	Gráfico mostrando os níveis de energia e a forma das funções de onda para $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$.	26
2.3	Gráfico da função densidade de probabilidade para o sistema da “partícula na caixa” quando $n = 1$	27
2.4	Representação gráfica de um círculo de raio unitário com as amplitudes de probabilidade de se observar os valores 0 e 1 para um q -bit qualquer, no caso em que α e β são reais.	32
2.5	Pseudo-código do algoritmo evolutivo com inspiração quântica usando representação binária.	34
2.6	Pseudo-código do algoritmo cultural.	35
2.7	Diagrama da estrutura geral do algoritmo cultural.	36
3.1	Listagem completa do algoritmo evolutivo com inspiração quântica usando representação real.	40
3.2	Exemplo de um gene quântico do AEIQ-IR .	42
3.3	Genes de uma população quântica usando pulsos quadrados como função densidade de probabilidade.	45
3.4	Funções cumulativas de probabilidade associadas aos genes de uma população quântica.	46
3.5	Diagrama completo do Sistema Evolutivo com Inspiração Quântica	50
3.6	Diagrama de um modelo de partícula na caixa para uso no AEIQ-IR.	51
3.7	Diagrama do modelo de partícula na caixa para uso no AEIQ-IR após a atualização do gene quântico.	53
3.8	Diagrama mostrando uma rede neural recorrente. Este diagrama não mostra as ligações dos <i>bíases</i> .	55
3.9	Modelo de Aprendizado Supervisionado usando o AEIQ-IR.	56
3.10	Modelo de Aprendizado por Reforço usando o AEIQ-IR.	58
4.1	Esforço computacional para otimização da função f_{Sphere} .	67
4.2	Esforço computacional para otimização da função $f_{Griewank}$.	68
4.3	Gráfico de desempenho para uma função não separável usando taxas de atualização diferentes.	70
4.4	Gráfico de desempenho para uma função separável usando taxas de atualização diferentes.	71
4.5	Representação gráfica do problema do carro na montanha.	75
4.6	Variação da velocidade (linha vermelha) e da posição (linha azul) no problema do carro na montanha.	77
4.7	Exemplo do problema do pêndulo invertido.	77
4.8	Ângulo do pêndulo com relação ao tempo.	80
4.9	Ângulo do pêndulo e velocidade do carro com relação ao tempo.	80
5.1	Diagrama de um foguete sem estabilizadores.	84
5.2	Modelo de aprendizado multi-agentes usando o AEIQ-IR .	86

5.3	Mapa 3D da função f_1 .	91
5.4	Mapa 3D da função f_2 .	92
5.5	Mapa 3D da função f_3 .	93
5.6	Mapa 3D da função f_4 .	94
5.7	Mapa 3D da função f_5 .	95
5.8	Mapa 3D da função f_6 .	96
5.9	Mapa 3D da função f_8 .	97
5.10	Mapa 3D da função f_9 .	98
5.11	Mapa 3D da função f_{10} .	99
5.12	Mapa 3D da função f_{11} .	100
5.13	Mapa 3D da função f_{12} .	101
5.14	Mapa 3D da função f_{13} .	102
5.15	Mapa 3D da função f_{14} .	103
5.16	Mapa 3D da função f_{Sphere} .	104
5.17	Mapa 3D da função f_{Ackley} .	105
5.18	Mapa 3D da função $f_{Griewank}$.	106
5.19	Mapa 3D da função $f_{Rastrigin}$.	107
5.20	Mapa 3D da função $f_{Schwefel}$.	108
5.21	Mapa 3D da função $f_{Rosenbrock}$.	109

Lista de tabelas

2.1	Números da lista a ser ordenada distribuídos pelos múltiplos universos do modelo com inspiração quântica	30
2.2	Números da lista após uma primeira ordenação realizada em cada um dos 4 universos	30
2.3	Matriz de universos após a interferência diagonal	30
2.4	Matriz de universos após a interferência vertical	30
2.5	Probabilidades de observação de cada um dos possíveis estados do indivíduo quântico.	33
3.1	Exemplo de indivíduos que formam uma população quântica $Q(t)$ em uma geração t qualquer.	44
4.1	Configuração do AEIQ- \mathbb{R} para comparação com evolução diferencial e enxame de partículas.	62
4.2	Resultado comparativo entre o AEIQ- \mathbb{R} , o algoritmo de evolução diferencial e o de enxame de partículas com 1000 avaliações de função.	63
4.3	Resultado comparativo entre o AEIQ- \mathbb{R} , o algoritmo de evolução diferencial e o de enxame de partículas com 10000 avaliações de função.	63
4.4	Tabela que indica a melhora percentual média ao se usar o AEIQ- \mathbb{R} , comparando-o com o segundo melhor algoritmo, em relação às características das funções de teste.	63
4.5	Configuração 1 do AEIQ- \mathbb{R} para comparação com programação evolutiva clássica, programação evolutiva rápida, algoritmos genéticos convencionais e o algoritmo evolutivo com inspiração quântica usando representação binária.	65
4.6	Configuração 2 do AEIQ- \mathbb{R} para comparação com programação evolutiva clássica, programação evolutiva rápida, algoritmos genéticos convencionais e o algoritmo evolutivo com inspiração quântica usando representação binária.	65
4.7	Resultado comparativo entre o AEIQ- \mathbb{R} , o AEIQ- \mathcal{B} (QEA), programação evolutiva rápida (FEP), programação evolutiva clássica (CEP) e algoritmos genéticos convencionais (GA). Os itens com a designação "n.d." indicam que o dado não está disponível.	66
4.8	Parâmetros do AEIQ- \mathbb{R} para aprendizado supervisionado.	73
4.9	Resultados do Treinamento da Rede Neural usando <i>Backpropagation</i> .	73
4.10	Resultados do Treinamento da Rede Neural usando o AEIQ- \mathbb{R} .	74
4.11	Parâmetros do AEIQ- \mathbb{R} usados para o problema do carro na montanha.	76
4.12	Resultados para o problema do carro na montanha.	76
4.13	Parâmetros usados para o problema do pêndulo invertido.	78
4.14	Parâmetros do AEIQ- \mathbb{R} usados para o problema do pêndulo invertido.	79

4.15 Parâmetros usados para o problema do pêndulo invertido.	81
--	----