



Anderson Guimarães de Pinho

**Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica
e Representação Mista Aplicado a Neuroevolução**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientadora: Prof.^a Marley Maria Bernardes Rebuszi Vellasco

Rio de Janeiro
Outubro de 2010



Anderson Guimarães de Pinho

**Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica
e Representação Mista Aplicado a Neuroevolução**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Profa. Marley Maria Bernardes Rebuszi Vellasco
Orientadora
Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof. André Vargas Abs da Cruz
Co-Orientador
Pesquisador do ICA/DEE/PUC-Rio

Profa. Karla Tereza Figueiredo Leite
Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof. Gerson Zaverucha
COPPE/UFRJ

Prof. Jorge Luís Machado do Amaral
UERJ

Prof. José Eugenio Leal
Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico

Rio de Janeiro, 01 de Outubro de 2010.

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

Anderson Guimarães de Pinho

Graduou-se como Bacharel em Ciências Estatísticas na Escola Nacional de Ciências Estatísticas em 2006.

Ficha Catalográfica

Pinho, Anderson Guimarães de

Algoritmo evolucionário com inspiração quântica e representação mista aplicado a neuroevolução / Anderson Guimarães de Pinho ; orientadora: Marley Maria Bernardes Rebuszi Vellasco ; co-orientador: André Vargas Abs da Cruz. – 2010.
148 f. : il. (color.) ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica, 2010.

Inclui bibliografia

1. Engenharia elétrica – Teses. 2. Algoritmos genéticos. 3. Algoritmos com inspiração quântica. 4. Neuroevolução. 5. Classificação de padrões. 6. Computação evolutiva. 7. Redes neurais artificiais. I. Vellasco, Marley Maria Bernardes Rebuszi. II. Cruz, André Vargas Abs da. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

CDD: 621.3

À minha, com probabilidade igual a 1,
futura esposa Anaschara.

Agradecimentos

À minha namorada Anaschara pelas horas que teve que abdicar da minha companhia.

À PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

À professora Marley e ao professor André, sou grato a todos os ensinamentos, e mais ainda pela confiança depositada em mim.

Aos meus pais e familiares, com todo carinho, mesmo que este mundo inteligente e estatístico possa parecer incompreensível.

Aos meus amigos Bernardo e Tarsila por todo o carinho, atenção, interesse e, sobretudo, entusiasmo por meus estudos.

A todos os demais professores que tive contato, me sinto honrado por ter presenciado um esboço de seus conhecimentos.

Ao meu gerente e diretor, respectivamente, Rodrigo e Bernardo, os quais foram em todo momento compreensivos com meus interesses.

A todos os demais amigos que me acompanharam nesta jornada. Tenho certeza que ao lerem isto reconhecerão, mesmo que implicitamente, seus nomes.

Resumo

Pinho, Anderson Guimarães; Abs da Cruz, André V.; Vellasco, Marley M. B. R.. **Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica e Representação Mista Aplicado a Neuroevolução**. Rio de Janeiro, 2010. 148p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Esta dissertação objetivará a unificação de duas metodologias de algoritmos evolutivos consagradas para tratamento de problemas ou do tipo combinatórios, ou do tipo numéricos, num único algoritmo com representação mista. Trata-se de um algoritmo evolutivo inspirado na física quântica com representação mista binário-real do espaço de soluções, o AEIQ-BR. Este algoritmo trata-se de uma extensão do modelo com representação binária de Jang, Han e Kin, o AEIQ-B para otimizações combinatoriais, e o de representação real de Abs da Cruz, o AEIQ-R para otimizações numéricas. Com fins de exemplificação do novo algoritmo proposto, o discutiremos no contexto de neuroevolução, com o propósito de configurar completamente uma rede neural com alimentação adiante em termos: seleção de variáveis de entrada; números de neurônios na camada escondida; todos os pesos existentes; e tipos de funções de ativação de cada neurônio. Esta finalidade em se aplicar o algoritmo AEIQ-BR à neuroevolução – e também, numa analogia ao modelo NEIQ-R de Abs da Cruz – receberá a denominação NEIQ-BR. N de neuroevolução, E de evolutivo, IQ de inspiração quântica, e BR de binário-real. Para avaliar o desempenho do NEIQ-BR, utilizar-se-á um total de seis casos benchmark de classificação, e outros dois casos reais, em campos da ciência como: finanças, biologia e química. Resultados serão comparados com algoritmos de outros pesquisadores e a modelagem manual de redes neurais, através de medidas de desempenho. Através de testes estatísticos concluiremos que o algoritmo NEIQ-BR apresentará um desempenho significativo na obtenção de previsões de classificação por neuroevolução.

Palavras-Chave

Algoritmos genéticos; algoritmos com inspiração quântica; neuroevolução; classificação de padrões; computação evolutiva; redes neurais artificiais.

Abstract

Pinho, Anderson Guimarães; Abs da Cruz, André V.; Vellasco, Marley M. B. R. (Advisor); **Quantum-inspired evolutionary algorithm with mixed representation applied to neuro-evolution.** Rio de Janeiro, 2010. 148p. MSc. Dissertation – Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This work aimed to unify two methodologies of evolutionary algorithms to treat problems with or combinatorial characteristics, or numeric, on a unique algorithm with mix representation. It is an evolutionary algorithm inspired in quantum physics with mixed representation of the solutions space, called QIEA-BR. This algorithm is an extension of the model with binary representation of the chromosome from Jang, Han e Kin, the QIEA-B for combinatorial optimization, and numeric representation from Abs da Cruz, the QIEA-R for numerical optimizations. For purposes of exemplification of the new algorithm, we will introduce the algorithm in the context of neuro-evolution, in order to completely configure a feed forward neural network in terms of: selection of input variables; numbers of neurons in the hidden layer; all existing synaptic weights; and types of activation functions of each neuron. This purpose when applying the algorithm QIEA-BR to neuro-evolution receive the designation of QIEN-BR. QI for quantum-inspired, E for evolutive, N for neuro-evolution, and BR for binary-real representation. To evaluate the performance of QIEN-BR, we will use a total of six benchmark cases of classification, and two real cases in fields of science such as finance, biology and chemistry. Results will be compared with algorithms of other researchers and manual modeling of neural networks through performance measures. Statistical tests will be provided to elucidate the significance of results, and what we can conclude is that the algorithm QIEN-BR better performance others researchers in terms of classification prediction.

Keywords

Genetic algorithms; quantum-inspired algorithms; neuro-evolution; pattern classification; evolutive computation; artificial neural networks.

Sumário

1.	Introdução	18
1.1.	Motivação	18
1.2.	Objetivos	22
1.3.	Estruturação	23
2.	Estado da Arte	24
2.1.	Computação Quântica	24
2.2.	Algoritmos com Inspiração Quântica	28
2.2.1.	O Algoritmo AEIQ-B	31
2.2.2.	O Algoritmo AEIQ-R	37
2.3.	Modelos Neuroevolutivos	42
3.	Algoritmo AEIQ-BR	48
3.1.	Pseudocódigo	48
3.2.	Representação do Indivíduo Quântico	49
3.3.	Observação do Indivíduo Quântico	54
3.4.	Atualização do Indivíduo Quântico	59
3.5.	Cruzamento de Indivíduos Clássicos	65
3.6.	Esquema Gráfico e Resumo	68
3.7.	Algoritmo NEIQ-BR	71
3.7.1.	Perceptrons de Múltiplas Camadas	72
3.7.2.	Parâmetros de Configuração	76
3.7.3.	Funções de Avaliação ou Aptidão	79
4.	Resultados Modelo NEIQ-BR	85
4.1.	Casos para Avaliação	85
4.1.1.	Problemas Benchmark	85
4.1.2.	Problemas Reais	86
4.1.3.	Pré-processamento	91
4.2.	Descrição dos Experimentos	92
4.3.	Resultados Obtidos NEIQ-BR	98

4.4.	Comparação com Outros Autores	108
5.	Conclusões	121
5.1.	Trabalhos Futuros	122
	Referências Bibliográficas	126
	Anexos	133
	Apêndices	142

Lista de tabelas

Tabela 2.1 – Matriz de elementos ordenados por universo.	29
Tabela 2.2 – Matriz de elementos ordenados por universo após interferência diagonal.	30
Tabela 2.3 – Matriz de elementos ordenados por universo após interferência vertical.	30
Tabela 2.4 – Exemplo de obtenção das probabilidades de um q-bit.	33
Tabela 2.5 – Resumo da literatura de neuroevolução.	44
Tabela 3.1 – Exemplo de obtenção das probabilidades de um indivíduo quântico.	57
Tabela 3.2 – Exemplo de atualização de uma população quântica $Q(t)$.	63
Tabela 3.3 – População quântica atualizada.	64
Tabela 3.4 – Geração de um filho clássico.	68
Tabela 3.5 – Principais características dos algoritmos AEIQ-B, AEIQ-R e AEIQ-BR.	70
Tabela 3.6 – Parâmetros de ajuste do algoritmo NEIQ-BR.	79
Tabela 3.7 – Matriz de confusão para um problema de classes dicotômicas.	80
Tabela 3.8 – Matriz de confusão para um problema de n classes.	80
Tabela 4.1 – Resumo casos benchmark.	87
Tabela 4.2 – Variáveis para os casos da cooperativa de crédito.	90
Tabela 4.3 – Resumo descrição dos bancos de dados.	91
Tabela 4.4 – Estratégias evolutivas analisadas.	93
Tabela 4.5 – Média percentual total de padrões classificados erroneamente através de processo validação cruzada em 3.	100
Tabela 4.6 – Desvio padrão do percentual total de padrões classificados erroneamente através de processo validação cruzada em 3.	100

Tabela 4.7 – Percentual de acerto obtida dos melhores indivíduos, das melhores estratégias, por problema, por partição de validação cruzada, e por classe.	106
Tabela 4.8 – Topologia obtida dos melhores indivíduos, das melhores estratégias, por problema, por partição de validação cruzada.	107
Tabela 4.9 – Média e desvio padrão percentual do total de padrões classificados erroneamente para outros autores de casos benchmark e modelagem manual de casos reais.	110
Tabela 4.10 – Comparação de melhores médias MPPCE entre outros autores e NEIQ-BR.	112
Tabela 4.11 – Comparação de melhores médias MPPCE entre outros autores contra todas estratégias NEIQ-BR.	114
Tabela 4.12 – Comparação de médias MPPCE entre outros autores e estratégias NEIQ-BR através do teste de Wilcoxon.	115
Tabela 4.13 – Número de avaliações necessárias por cada experimento.	116
Tabela 4.14 – Tempo aproximado gasto para processar cada problema benchmark por estratégia, em horas.	117
Tabela 4.15 – Resultados de outros autores com algoritmos neuroevolutivos para os problemas estudados nesta dissertação.	119
Tabela 5.1 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema Australian Credit.	138
Tabela 5.2 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema Iris Data.	139
Tabela 5.3 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema German Credit.	140
Tabela 5.4 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema Diagnostic Breast Cancer.	140
Tabela 5.5 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema Prognostic Breast Cancer.	141
Tabela 5.6 – Melhores resultados por algoritmo e por autor para o problema Wine Data.	141

Tabela 5.7 – Teste Kolmogorov-Smirnov para distribuição de MPPCE por variação de parâmetros nas estratégias do NEIQ-BR.	142
Tabela 5.8 – Estatísticas descritivas por variação de estratégias.	143
Tabela 5.9 – P-valor do teste F por variação de estratégias.	143
Tabela 5.10 – P-valor do teste t por variação de estratégias.	143
Tabela 5.11 – Estatísticas descritivas por variação de neurônios na camada escondida.	144
Tabela 5.12 – P-valor do teste de variância e média por neurônios na camada escondida.	144
Tabela 5.13 – Estatísticas descritivas por indivíduos quânticos.	144
Tabela 5.14 – P-valor do teste de variância e média por indivíduos quânticos.	144
Tabela 5.15 – Estatísticas descritivas por taxa de cruzamento quântico.	144
Tabela 5.16 – P-valor do teste de variância e média por taxa de cruzamento quântico.	144
Tabela 5.17 – Estatísticas descritivas por indivíduos clássicos.	145
Tabela 5.18 – P-valor do teste de variância e média por indivíduos clássicos.	145
Tabela 5.19 – Estatísticas descritivas por taxa de cruzamento clássico real.	145
Tabela 5.20 – P-valor do teste de variância e média por taxa de cruzamento clássico real.	145
Tabela 5.21 – Estatísticas descritivas por taxa de cruzamento clássico binária.	145
Tabela 5.22 – P-valor do teste de variância e média por taxa de cruzamento clássico binária.	146
Tabela 5.23 – Estatísticas descritivas por velocidade de atualização θ .	146
Tabela 5.24 – P-valor do teste de variância e média por velocidade de atualização θ .	146
Tabela 5.25 – MPPCE por variação de neurônios na camada escondida, problema crédito de limite especial.	146

Tabela 5.26 – DPPCE por variação de neurônios na camada escondida, problema crédito de limite especial.	147
Tabela 5.27 – MPPCE por variação de fase de treinamento, problema crédito de limite especial.	147
Tabela 5.28 – DPPCE por variação de fase de treinamento, problema crédito de limite especial.	147
Tabela 5.29 – MPPCE por variação de neurônios na camada escondida, problema empréstimos financeiros.	147
Tabela 5.30 – DPPCE por variação de neurônios na camada escondida, problema empréstimos financeiros.	148
Tabela 5.31 – MPPCE por variação de fase de treinamento, problema empréstimos financeiros.	148
Tabela 5.32 – DPPCE por variação de fase de treinamento, problema empréstimos financeiros.	148

Lista de figuras

Figura 2.1 – 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.	27
Figura 2.2 – Esfera de Bloch.	27
Figura 2.3 – Pseudocódigo do algoritmo evolutivo com inspiração quântica e representação binária.	33
Figura 2.4 – Porta quântica U controlada.	34
Figura 2.5 – Pseudocódigo do algoritmo evolutivo com inspiração quântica e representação real.	39
Figura 2.6 – Exemplo de um gene quântico do AEIQ-R.	41
Figura 3.1 – Pseudocódigo do algoritmo AEIQ-BR.	49
Figura 3.2 – Representação da FDP uniforme no intervalo de a_{ij}^t até b_{ij}^t .	51
Figura 3.3 – Representação do processo de observação de um q-bit $(g_{ij}^t)_b$.	54
Figura 3.4 – Pseudocódigo da observação da parte binária de um indivíduo quântico.	55
Figura 3.5 – Pseudocódigo da observação da parte real de um indivíduo quântico.	56
Figura 3.6 – Exemplo de decaimento do parâmetro σ de um indivíduo quântico.	62
Figura 3.7 – Pseudocódigo da atualização de um indivíduo quântico.	63
Figura 3.8 – Representação do espaço de soluções, e representação do espaço para um indivíduo q_{ij}^t e q_{ij}^{t+1} .	65
Figura 3.9 – Pseudocódigo do cruzamento de indivíduos clássicos em $P(t)$ com $B(t)$.	67
Figura 3.10 – Resumo do algoritmo AEIQ-BR.	69
Figura 3.11 – Resumo da representação das populações $Q(t)$ e $P(t)$.	70
Figura 3.12 – Rede neural do tipo alimentação à frente.	73

Figura 3.13 – Resumo de informação codificada para o modelo NEIQ-BR.	75
Figura 3.14 – Curva ROC.	83
Figura 4.1 – Extração dos dados de empréstimos financeiros.	88
Figura 4.2 – Extração dos dados de limite especial	89
Figura 4.3 – Evolução de populações por melhores estratégias, por problema, por partição de validação cruzada.	101
Figura 4.4 – Evolução de populações por melhores estratégias, por problema, por partição de validação cruzada, para as 70 primeiras gerações.	102
Figura 4.5 – Raciocínio analítico para comparação de duas médias quaisquer.	103
Figura 4.6 – Comparação de melhores estratégias contra melhores algoritmos para um problema qualquer.	111
Figura 4.7 – Comparação de todas as estratégias contra melhores algoritmos para um problema qualquer.	113
Figura 4.8 – Comparação de todas as estratégias contra todos melhores algoritmos para um problema qualquer.	115

Lista de acrônimos

AE – Algoritmo evolutivo.

AEIQ – Algoritmo evolutivo com inspiração quântica.

AEIQ-R – Algoritmo evolutivo com inspiração quântica e representação real.

AEIQ-B – Algoritmo evolutivo com inspiração quântica e representação binária.

AEIQ-BR – Algoritmo evolutivo com inspiração quântica e representação binário-real.

AG – Algoritmo genético.

FFP – Fração de padrões falsos positivos.

FVP – Fração de padrões verdadeiramente positivos.

MPPCE – Média percentual de padrões classificados erroneamente.

DPPCE – Desvio padrão percentual de padrões classificados erroneamente.

NE – Neuroevolução.

NEIQ-BR – Neuroevolução inspirada na física quântica com representação binário-real.

NEIQ-R – Neuroevolução inspirada na física quântica com representação real.

PE – Programação evolucionária.

RNA – Redes neurais artificiais.

ROC – *Receiver Operating Characteristic*.

É mais pela educação que pela instrução que se transformará a humanidade.

Alan Kardec