

1. Introdução

1.1. Motivação

Duas grandes áreas têm merecido destaque na aplicação de algoritmos de mineração de dados com estratégias evolutivas (ou algoritmos evolutivos, AE). A primeira trata do estudo de algoritmos evolutivos com inspiração na física quântica. A segunda, da aplicação de algoritmos evolutivos para evolução de redes neurais artificiais.

Sobre a primeira pode-se destacar: Jang et al em [1] com um algoritmo que combinava a técnica de principais componentes e algoritmos evolutivos com inspiração quântica PCA-QEA em problema de detecção de faces, tipicamente de classificação de padrões; Abs da Cruz em [2] com o algoritmo AEIQ-R em problemas para otimização numérica; Kim et al em [3] com o algoritmo QMEA para otimização combinatorial na resolução do problema *Knapsack*, também conhecido como o problema da mochila; Han e Kin em [4] com o algoritmo QEA para otimização também de problemas combinatoriais; Li et al em [5] com o algoritmo QMOEA e mais uma aplicação no problema da mochila em otimização combinatorial; Talbi et al em [6] com o algoritmo MOQEA para um problema de segmentação de imagens; Mahdabi et al em [7] com o algoritmo MSQIEA para diversos problemas combinatoriais; Han e Kin em [8] com o algoritmo GQA também para o problema da mochila; e Arpaia et al em [9] com o algoritmo QIC para diversos problemas de classificação de padrões.

Sobre a segunda área para aplicação de algoritmos de mineração de dados com estratégias evolutivas, encontram-se exemplos de aplicação em: Lacerda et al em [10] com a evolução de redes do tipo radial e problemas de classificação; Zhan et al em [11], Pedrajas et al em [12], [13] e [14], e Abraham em [15], todos com a evolução de redes do tipo Perceptron em problemas de classificação; Gomez et al em [16], Blanco et al em [17], e Delgado e Pegalajar em [18] com redes Hopfield e problemas de controle; Paz e Kamath em [19] para problemas de classificação e Abs da Cruz em [2] para previsão e controle, ambos com redes do tipo Hopfield; e ainda, Capi e Doya em [20], Kim e Cho em [21], e Pedrajas e Boyer em [22] com hibridização de técnicas e aplicações em problemas de classificação e controle.

Algoritmos evolutivos com inspiração quântica (AEIQ) representam um dos mais recentes avanços na área de computação evolutiva [2]. AEIQ são baseados em princípios da física quântica como conceito de q-bit e superposição de estados [8]. O principal objetivo em se buscar inspiração na física quântica é utilizar conceitos de múltiplos universos para melhoria do desempenho dos algoritmos genéticos (AG) tradicionais.

Diversos exemplos podem ser encontrados na literatura e o que se conclui é que AEIQ apresentam desempenhos superiores em termos de tempo de convergência, com resultados de funções objetivos semelhantes ou superiores com relação a outros algoritmos, ver Abs da Cruz [2] e Han e Kin [4]. Estes mesmos autores concluem também que AEIQ são mais eficientes em termos de exploração e aproveitamento do espaço de busca em comparação com AG tradicionais.

AEIQ foram aplicados com sucesso por Kin, Kim e Han em [3], [4] e [8] para otimização de *problemas combinatórios*, com o algoritmo evolutivo com inspiração na física quântica e representação binária, o **AEIQ-B**. Sua eficácia com relação aos AGs tem sido comprovada, e conclui-se que AEIQ-B é um excelente otimizador global, devido à representação probabilística do espaço de busca, através de cada indivíduo da população.

Abs da Cruz [2] reconhecendo uma necessidade latente em se ter um otimizador inspirado na física quântica, mas com representação real, desenvolveu o algoritmo **AEIQ-R** para otimização de *problemas numéricos*, e operadores genéticos e representação populacional mais apropriado foram também desenvolvidos.

O termo “R” no algoritmo AEIQ-R refere-se ao conjunto dos números reais, numa referência a uma representação de um cromossomo mais apropriado para problemas numéricos. Segundo Abs da Cruz *apud* Michalewicz, o uso de genes com codificação real, produz resultados superiores, mais consistentes, e com maior precisão numérica, especialmente onde a codificação binária requer uma representação proibitivamente longa ou inviável computacionalmente.

Atualmente, nenhum algoritmo utilizado na otimização de problemas combinatórios e numéricos, simultaneamente, foi desenvolvido por outros autores no âmbito de AEIQs. Problemas no mundo real muitas vezes não podem ser resolvidos unicamente por decisões numéricas, ou por decisões combinatórias, e sendo assim, a utilização de um algoritmo com representação mista passa a ser extremamente atrativa.

Por exemplo, cita-se o processo de modelagem de uma rede neural do tipo Perceptron de múltiplas camadas para problemas de classificação. Neste processo, encontram-se decisões combinatórias, como quais variáveis selecionar para a camada de entrada, ou ainda, quantos neurônios utilizarem na camada intermediária. E também, simultaneamente, decisões numéricas como pesos ótimos dos neurônios.

Percebe-se então que na prática, lidamos conjuntamente com problemas cuja natureza é combinatória e numérica simultaneamente, e, sendo assim, é latente a demanda por técnicas e algoritmos de resolução apropriados. Por estes motivos, o que se propõe é a criação de um algoritmo com inspiração quântica e representação binário-real denominado **AEIQ-BR**, para otimização simultânea de problemas combinatórios e numéricos, ou seja, de natureza mista. Não obstante a contribuição para o avanço da área de AEIQ, este estudo também é motivado pelo campo de algoritmos evolutivos (AE) utilizados na evolução de redes neurais artificiais (RNA).

Quando se trata de AE, diversos tipos podem ser encontrados na literatura, conforme Abs da Cruz [2]. São eles:

- Algoritmos Genéticos;
- Programação Genética;
- Evolução Diferencial;
- Algoritmos Culturais;
- Programação Evolutiva.

AE são frequentemente utilizados para evolução de RNAs, pois prometem pôr fim a alguns problemas encontrados na modelagem manual através de algoritmos tradicionais. Isto acontece porque em AE não existe uma regra de aprendizado da rede neural explicitamente, mas sim um processo evolutivo de adaptação ao problema. Problemas de supertreinamento ocasionados pela elevada duração das épocas de treinamento e/ou elevado número de neurônios na camada escondida, ou ainda, problemas de convergência prematura a um mínimo local, são constantemente encontrados na modelagem de redes neurais pelo método do gradiente decrescente e retro propagação do erro.

Especificamente sobre algoritmos evolutivos aplicados no treinamento de redes neurais artificiais, o que se encontra é uma grande preferência por algoritmos genéticos no geral. AEIQ é de um tipo especial de algoritmos genéticos, onde operadores genéticos e representação de indivíduos tem inspiração na física quântica. Desde já, o uso de algoritmos genéticos em redes neurais artificiais aponta em nossas pesquisas bibliográficas para a resolução de alguns tipos de problemas como:

- Otimização da topologia das camadas escondidas e de entrada;
- Seleção dos padrões de entrada;
- Obtenção dos pesos dos neurônios;
- Seleção de funções de avaliação;
- Na ativação do neurônio, selecionando funções e otimizando parâmetros;
- No aprendizado da rede, otimizando regras e parâmetros.

Esta aplicação de AE na modelagem de RNA recebe o nome de algoritmos neuroevolutivos ou neuroevolucionários, e será aqui denominado pela sigla NE. Os problemas encontrados em modelos NE podem ser tanto de natureza combinatória, como de natureza numérica. Assim sendo, a utilização do algoritmo a ser proposto, o **AEIQ-BR**, passa a ser atrativa, pois permitirá ambos os tipos de representações e resoluções de um problema misto combinatório e numérico.

Abs da Cruz foi pioneiro em utilizar o AEIQ-R em algoritmos NE, para otimização dos pesos de uma RNA, em seu algoritmo denominado “neuroevolutivos com inspiração na física quântica e representação real”, ou **NEIQ-R**. Neste trabalho de dissertação, desenvolver-se-á um novo algoritmo neuroevolutivo com inspiração na física quântica e representação binário-real, denominado **NEIQ-BR**, para resolução de problemas combinatórios e numéricos encontrados na modelagem de redes neurais artificiais.

É provado por Platel, Schliebs e Kasabov em [23] que AEIQ pertencem à classe de algoritmos evolutivos com distribuição de probabilidade (ou em *inglês*, a sigla EDA de “*estimation of distribution algorithms*”). Neste mesmo artigo pode-se verificar a eficácia de EDA em termos de diversidade na representação de soluções, escalabilidade, qualidade das soluções e robustez na otimização. Sendo assim, os algoritmos AEIQ-BR e NEIQ-BR a serem desenvolvidos nesta dissertação também pertencerão a classe de EDAs.

1.2. Objetivos

Em suma, o que se propõe nesta dissertação será:

(1) unificar a forma de representação e tratamento de dois tipos de algoritmos genéticos com inspiração na física quântica, o AEIQ-B e o AEIQ-R, em um único algoritmo denominado **AEIQ-BR**. Com isto, obter-se-á uma nova metodologia de algoritmos evolutivos para o tratamento de problemas de natureza combinatorial-numérica;

(2) utilizar o novo algoritmo, o AEIQ-BR, na evolução de redes neurais artificiais, criando assim um algoritmo neuroevolutivo com inspiração quântica e representação binário-real, o **NEIQ-BR**. Sendo assim, diversas decisões combinatoriais e numéricas comumente encontradas na modelagem manual de redes neurais artificiais poderão ser otimizadas através do novo algoritmo, o NEIQ-BR.

Na prática o que se faz é aplicar o AEIQ-BR em problemas combinatoriais e numéricos como o da modelagem de redes neurais para classificação de padrões em múltiplas classes. Desta forma, o modelo proposto permitirá a evolução de soluções para os seguintes problemas encontrados na modelagem de redes neurais:

- a) Quais variáveis preditoras selecionar para a camada de entrada?
- b) Quantos neurônios na camada escondida utilizar?
- d) Como obter os pesos da camada de entrada?
- e) Como obter os pesos da camada intermediária?
- c) Que tipo de função de ativação utilizar em cada neurônio da camada intermediária e de saída?

Algoritmos NE têm sido utilizados frequentemente para resolução de problemas de classificação, controle, e previsão em áreas como finanças, medicina, robótica, física, entre outros.

Nesta dissertação, o modelo NEIQ-BR será utilizado na resolução de problemas *benchmark* em diversos campos da ciência, e posterior comparação com resultados obtidos por outros autores. Nesta parte, o que se pretende é pôr fim a algumas críticas recebidas sobre a aplicação de novos AE para a modelagem de RNAs, tais como: aplicação de metodologias em poucos casos *benchmark* e/ou

reais, não garantindo que qualquer eficácia comprovada seja replicável a uma gama maior de problemas; aplicação em problemas com baixo nível de dificuldade para otimização; pobre detalhamento técnico na explicação de resultados obtidos tendo em vista a separação ou não de grupos de teste e treinamento; e, sobretudo a não comparação com outros autores através de testes estatísticos que comprovem diferenças estatisticamente significantes.

Sendo assim, nossos resultados serão orientados por:

- Teste em casos benchmark e reais com diferentes níveis de dificuldade.
- Avaliação dos resultados através de medidas de desempenho consagradas.
- Separação do banco de dados entre grupo de teste e treinamento.
- Comparação com resultados obtidos por outros pesquisadores.
- Apresentação de testes estatísticos para evidenciar eficácia de um modelo.

1.3. Estruturação

No capítulo 2 serão apresentados os precursores do AEIQ-BR. O então, AEIQ-B de Jang, Han e Kin, e o AEIQ-R de Abs da Cruz, algoritmos estes necessários para compreensão do estado da arte de algoritmos evolutivos com inspiração quântica. Serão apresentados também um estado da arte para algoritmos neuroevolutivos, necessários para o entendimento do algoritmo NEIQ-BR a ser propostos nesta dissertação.

No capítulo 3, serão apresentadas detalhadamente todas as funcionalidades e características dos novos algoritmos, o AEIQ-BR, e o NEIQ-BR. No AEIQ-BR, desde o pseudocódigo, passando pelos operadores quânticos, e quando na aplicação na otimização de RNAs, o NEIQ-BR.

No capítulo 4, serão apresentados os resultados obtidos com o algoritmo NEIQ-BR. Casos benchmark e reais serão apresentados, os experimentos a serem executados serão descritos em detalhes, e resultados e comparações com outros autores serão expostos. Neste capítulo, testes e procedimentos estatísticos serão efetuados para evidenciar uma significância na diferença entre médias e percentuais apresentados.

E por fim, conclusões gerais e trabalhos futuros serão sugeridos no capítulo 5.