

Redes Neurais Artificiais

Referência : Latino, D. (2014), WikiCiências, 5(07):0810

Autor: Diogo Latino

Editor: Fernando Manuel Sebastião Silva Fernandes

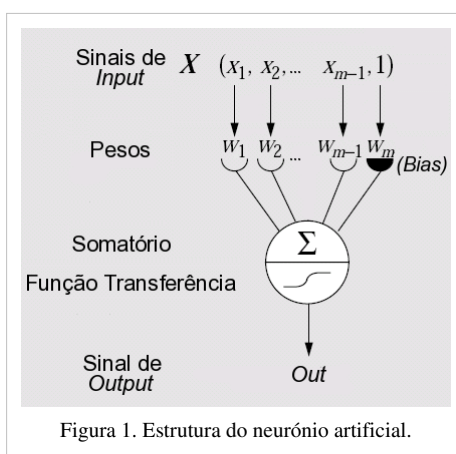
Redes Neurais Artificiais em Química

Rede Neuronal Artificial

Uma rede neuronal artificial, muitas vezes designada apenas por rede neuronal, é um modelo matemático que tem como inspiração as redes neurais biológicas.

Uma rede neuronal artificial consiste num conjunto de neurónios artificiais ligados entre si e que são capazes de processar informação. A rede recebe sinais, *inputs*, que passam pelas ligações e são distribuídos, transformados e eventualmente reunidos para produzir respostas, *outputs*.

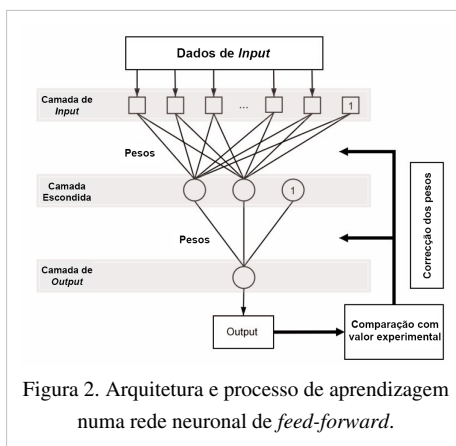
Os neurónios artificiais assim como as redes neurais tentam simular a função dos neurónios biológicos. Um neurónio artificial recebe um ou mais sinais de entrada, *inputs*, processa essa informação e produz uma resposta, *output*. Geralmente aos *inputs* é aplicado um peso, os sinais resultantes são posteriormente somados e à soma resultante é aplicada uma função não linear, chamada de função transferência, sendo assim gerado o *output*. A Figura 1 mostra a estrutura do neurónio artificial.



Resta agora responder à questão de como é feita a aprendizagem. Os avanços científicos na área da neurofisiologia permitiram uma melhor compreensão da anatomia e funcionamento do cérebro humano tendo contribuído para o desenvolvimento de modelos matemáticos e algoritmos que tentam simular a forma como o cérebro processa a informação. Apesar da dificuldade de reproduzir o comportamento do cérebro, visto que o conhecimento sobre o seu funcionamento é ainda apenas parcial, sabe-se que é a força sináptica que determina a intensidade do sinal que é transmitido entre neurónios. A adaptação da força sináptica a um problema em particular constitui a essência da aprendizagem.

Uma rede neuronal artificial tem a capacidade de aprender com a informação que lhe é fornecida e de melhorar a sua performance durante o processo de aprendizagem - aprende por um processo iterativo de ajuste das forças sinápticas (pesos). É capaz, a cada iteração do processo de aprendizagem, de aperfeiçoar a sua representação e compreensão do problema em questão, ou seja, aprende por treino e experiência segundo certas regras pré-definidas. Ao conjunto de regras pré-definidas pelo qual se faz a alteração dos pesos dá-se o nome de algoritmo de aprendizagem. Existem diversos algoritmos de aprendizagem que diferem entre si na forma como os pesos são corrigidos e da estrutura da rede. A Figura 2 mostra de uma forma geral a arquitetura de uma rede neuronal artificial e ilustra o processo de

aprendizagem (correção dos pesos) numa rede de *feed-forward*.



Uma entrada que descreva em maior detalhe a estrutura e função do neurónio artificial, estrutura da rede neuronal, vários algoritmos de aprendizagem e tipos de redes neuronais irá ser apresentada no futuro.

Redes Neurais em Química

As redes neuronais são utilizadas em química na resolução dos mais diversos problemas desde os mais simples até à modelação de relações complexas não lineares entre o *input* e o *output* podendo ser utilizadas em problemas de classificação, regressão, mapeamento e *clustering*.

Um problema relevante em Química relacionado igualmente com outras áreas diz respeito à obtenção de compostos com uma determinada propriedade ou atividade. O objectivo é estabelecer relações estrutura-propriedade ou estrutura-atividade (em inglês Structure-Property Relationships, SPR, e Structure-Activity Relationships, SAR, respectivamente) ou mesmo quantificar essas relações em relações quantitativas estrutura-atividade e relações quantitativas estrutura-propriedade (em inglês Quantitative Structure-Property Relationships, QSPR, e Quantitative Structure-Activity Relationships, QSAR).

Tais relações permitem prever determinada propriedade/atividade a partir da fórmula estrutural do composto. Para um conjunto de compostos que se saiba à partida o valor da propriedade/atividade são calculados a partir da estrutura molecular descritores moleculares do composto. O par descritores moleculares - propriedade/atividade, para cada objecto do conjunto de treino, é usado pela rede neuronal para aprender a relação. Após o processo de aprendizagem a rede é capaz de fazer previsões para compostos cuja valor da propriedade/atividade desejada é desconhecido. Tal pode ser usado para o desenho de novos fármacos com uma atividade específica.

Outro exemplo de uma aplicação relevante é o caso da elucidação estrutural - obter a estrutura molecular de um composto desconhecido a partir de informação espectroscópica (essencialmente espectroscopia de infravermelho, ressonância magnética nuclear e espectrometria de massa) e em sentido inverso a previsão de espectros a partir da estrutura molecular. O desenho de sínteses e planeamento de reações químicas é outra área onde a investigação utilizando redes neuronais tem sido capaz de dar o seu contributo na resolução dos mais variados problemas.

A classificação de reações químicas é outro campo que atraiu recentemente muita atenção devido à importância crescente das reações metabólicas, reatividade química em toxicologia e química medicinal.

Em Química Analítica as redes neuronais têm sido utilizadas nas mais variadas aplicações de classificação de amostras, desde a classificação em termos da origem geográfico da origem da amostra (azeites, vinhos, petróleos etc), a origem da produção, a qualidade da amostra etc.

Bibliografia

- [1] <http://joao.airesdesousa.com/agregacao/>
- [2] J. Zupan and J. Gasteiger. Neural Networks in Chemistry and Drug Design. Wiley- VCH, Weinheim, 1999.
- [3] Chemoinformatics in Drug Discovery. Methods and Principles in Medicinal Chemistry. T. I. Oprea (Ed.).

Wiley-VCH, Weinheim, 2005, Vol. 23.

[4] Encyclopedia of Computational Chemistry. P. R. Schleyer, N. L. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kollman, H. F. Schaefer III, and P. R. Schreiner (Eds.). John Wiley & Sons, Chichester, 1999, Vol. 1, 3 and 4.

[5] Chemoinformatics: A Textbook. J. Gasteiger and T. Engel (Eds.). Wiley-VCH, New York, 2003.

[6] Handbook of Chemoinformatics: From Data to Knowledge. J. Gasteiger and T. Engel (Eds.). Wiley-VCH, New York, 2003, Vol. 3.

[7] Cheminformatics Developments - History, Reviews and Current Research. J. H. Noordik (Ed.). IOS Press, Amsterdam, 2004, pp 83-110.

)

Criada em 21 de Julho de 2014

Revista em 21 de Julho de 2014

Aceite pelo editor em 26 de Julho de 2014

Fontes e Editores da Página

Redes Neurais Artificiais *Fonte:* <http://wikiciencias.casadasciencias.org/wiki/index.php?oldid=24707> *Contribuidores:* Admin

Fontes, Licenças e Editores da Imagem

Ficheiro:fig neuron 01.png *Fonte:* http://wikiciencias.casadasciencias.org/wiki/index.php?title=Ficheiro:fig_neuron_01.png *Licença:* desconhecido *Contribuidores:* Diogolatio

Ficheiro:fig network.png *Fonte:* http://wikiciencias.casadasciencias.org/wiki/index.php?title=Ficheiro:fig_network.png *Licença:* desconhecido *Contribuidores:* Diogolatio

Licença

Creative Commons - Atribuição - Uso Não Comercial - Partilha nos Mesmos Termos
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/>
