

# Redes Neuronais Artificiais

## CITAÇÃO

Leal, J. (2015)  
Redes Neuronais Artificiais,  
*Rev. Ciência Elem.*, V3(01):084.  
[doi.org/10.24927/rce2015.084](https://doi.org/10.24927/rce2015.084)

## EDITOR

José Ferreira Gomes,  
Universidade do Porto

## RECEBIDO EM

21 de julho de 2014

## ACEITE EM

26 de julho de 2014

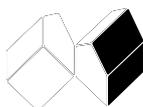
## PUBLICADO EM

31 de março de 2015

## COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2015.  
Este artigo é de acesso livre,  
distribuído sob licença Creative  
Commons com a designação  
[CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite  
a utilização e a partilha para fins  
não comerciais, desde que citado  
o autor e a fonte original do artigo.

[rce.casadasciencias.org](http://rce.casadasciencias.org)



Diogo Latino  
Universidade de Lisboa

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

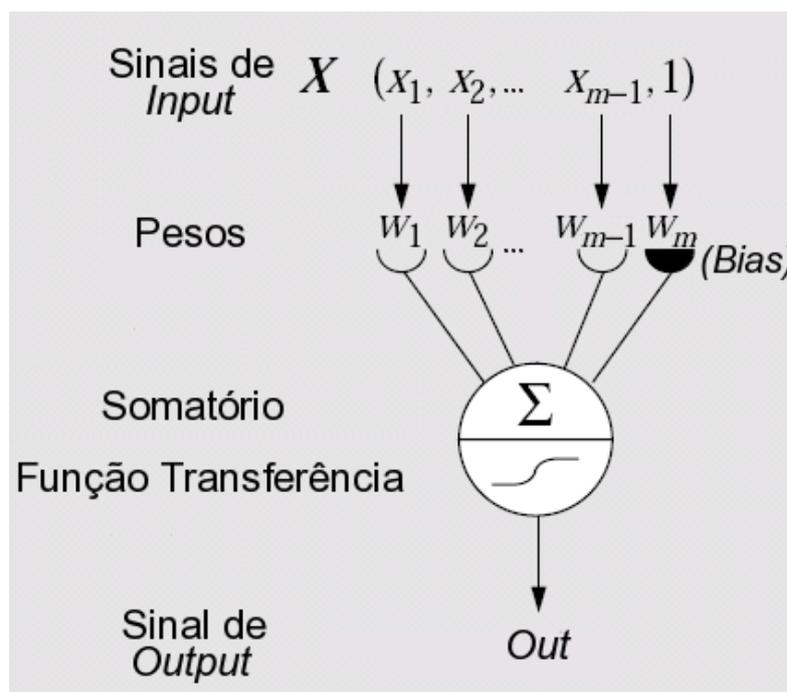


Figura 1. Estrutura do neurónio artificial.

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.

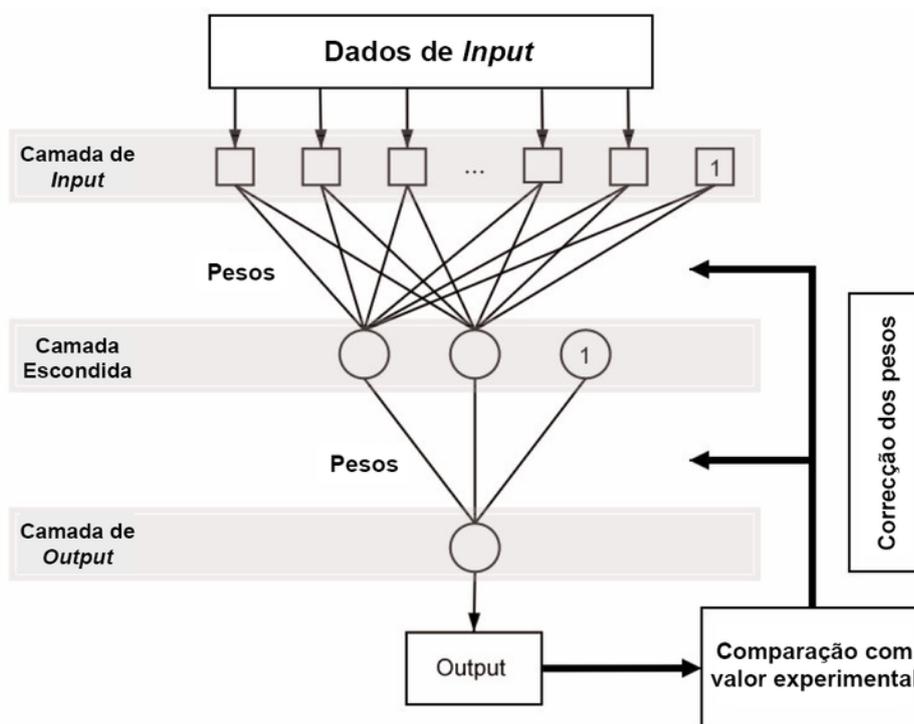


Figura 2. Arquitetura e processo de aprendizagem numa rede neuronal de feed-forward.

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 neurais 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 objetivo é estabelecer relações estrutura-propriedade ou estrutura-atividade (em inglês Structure-Property Relationships, SPR, e Structure-Activity Relationships, SAR, respetivamente) 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 objeto 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 neurais 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 neurais têm sido utilizadas nas mais variadas aplicações de classificação de amostras, desde a classificação em termos da origem geográfica da origem da amostra (azeites, vinhos, petróleos etc), a origem da produção, a qualidade da amostra etc.