

EFFECTO DE LA TOPOLOGIA DE REDES NEURONALES DE BACKPROPAGATION EN LA OPTIMIZACION DE PROCESOS QUÍMICOS VIA MODELOS MATEMATICOS NEURONALES EMPÍRICOS.

MSc. Ing. Edwin Guido Boza Condorena
Facultad de Ingeniería Química. Universidad Nacional del Altiplano de Puno.
e-mail: ebozac2003@yahoo.es

Palabras clave: Redes Neuronales, back propagación, procesos químicos.

INTRODUCCIÓN

El propósito del presente trabajo es aplicar redes neuronales en la optimización de procesos químicos y analizar el efecto de las características topológicas (Escalado y postratamiento de datos, número de capas ocultas en la estructura de la red, número de neuronas en las capas ocultas, funciones de transferencia en las diferentes capas de neuronas), así como las variables de entrenamiento para el aprendizaje de las redes; en los valores de las respuestas.

1. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

1.1. LOS MODELOS MATEMÁTICOS .- Pueden ser clasificados como:

A) MODELOS MATEMÁTICOS TEÓRICOS

Son derivados fundamentalmente de las leyes físicas, se basan generalmente en la aplicación de balance de materia y energía, y también en otras leyes como por ejemplo la termodinámica y cinética de las reacciones químicas.

En la mayoría de los casos, tales representaciones aparecen en forma de ecuaciones diferenciales parciales, junto con las condiciones de borde o fronteras apropiadas, las cuales son resueltas por técnicas numéricas o análisis numérico.

B) MODELOS MATEMÁTICOS SEMI-EMPÍRICOS.

En esencia se basan en las leyes físicas. Al igual que los modelos teóricos se basan en las ecuaciones de balance de materia y energía y en otras leyes existentes, pero cierta cantidad de empirismo es incorporado en la representación de estos sistemas debido básicamente a dos hechos:

- a. Las ecuaciones de modelamiento, son tan complejas de resolverlas que resulta muy dificultoso, por lo que es necesario hacer algunas simplificaciones.
- b. La falta de datos.

La gran mayoría de los modelos matemáticos usados en la práctica están dentro de esta categoría.

C) MODELOS MATEMÁTICOS EMPÍRICOS.

Estos modelos no están basados en las leyes físicas. En este caso el proceso es considerado como una caja negra, donde la relación matemática que gobierna el proceso es desconocida o muy compleja depende únicamente de las variables de entrada y salida, ignorando la estructura interior o fenómeno del proceso.

La mejor manera de construir este tipo de modelos es a través de diseños Experimentales, es decir, los datos o puntos experimentales iniciales están basados en algún diseño experimental.

D) MODELOS MATEMÁTICOS NEURONALES EMPÍRICOS.

Como los anteriores tampoco están basados en las leyes físicas, el procedimiento para la determinación de la relación entre las variables de entrada y de salida, no es secuencial, sino que se obtiene por la interconexión de elementos que operan en forma paralela. Estos modelos en el presente trabajo se construyen utilizando redes neuronales de backpropagation o de propagación inversa.

1.2. LAS REDES NEURONALES

Las Redes Neuronales permiten la solución de problemas complejos, utilizando procedimientos que no se sustentan en una secuencia de pasos, sino que inspirados en el cerebro humano, utilizan una combinación de elementos simples de proceso (neuronas) interconectados, que operan en forma paralela para resolver los problemas.

El conocimiento de una red neuronal no se almacena en instrucciones, el poder de la red está en su topología y en los valores de las conexiones (pesos) entre neuronas.

Las REDES NEURONALES ARTIFICIALES son una teoría que aún esta en proceso de desarrollo, su verdadera potencialidad no se ha alcanzado todavía; aunque los investigadores han desarrollado potentes algoritmos de aprendizaje de gran valor práctico.

Desde 1985 comenzaron a consolidarse los congresos más importantes como Neuronal Networks for Computing, la Neural Information Processing Systems, entre algunas otras.

El Departamento de Defensa de los Estados Unidos, la Sociedad Europea de Redes Neuronales son algunos de los ejemplos del resurgir de la investigación sobre redes neuronales.

1.2.1. EL MODELO BIOLÓGICO

El desarrollo de nuevos sistemas de tratamiento de la información en base a redes neuronales, se basa en el estudio del procesamiento de la información por el cerebro humano; este órgano biológico tiene varias características deseables para los sistemas de procesamiento de información digitales, tales como:

1. Es robusto y tolerante a fallas, diariamente mueren neuronas sin afectar su desempeño.
2. Es flexible, se ajusta a nuevos ambientes por aprendizaje, no hay que programarlo.
3. Puede manejar información difusa, con ruido o inconsistente.
4. Es altamente paralelo
5. Es pequeño, compacto y consume poca energía.

El cerebro humano constituye un procesador de información muy notable, es capaz de interpretar información imprecisa suministrada por los sentidos a un ritmo increíblemente veloz. Logra descifrar un susurro en una sala ruidosa, identificar una persona por su voz o por una manera particular de moverse o comportarse, un rostro en un callejón mal iluminado, distinguir varios sentidos en un discurso; lo más impresionante de todo, es que el cerebro sin instrucciones explícitas de ninguna clase, aprende a crear las representaciones internas que hacen posibles estas habilidades.

Basados en la eficiencia de los procesos llevados a cabo por el cerebro, e inspirados en su funcionamiento, varios investigadores han desarrollado desde hace más de 30 años la teoría de las Redes Neuronales Artificiales (RNA).

La teoría y modelado de redes neuronales está inspirada en la estructura y funcionamiento de los sistemas nerviosos, donde la neurona es el elemento fundamental.

Las neuronas tienen tres componentes principales, **las dendritas** (ramas cortas), **el cuerpo de la célula o soma**, más o menos esférico, de 5 a 10 micras de diámetro y **el axón** (rama principal).

Una de las características de las neuronas es su **capacidad de comunicarse**. En términos generales las dendritas y el cuerpo celular reciben señales de entrada; el cuerpo celular las combina e integra y emite señales de salida. El axón transmite dichas señales a los terminales axónicos, a través de los cuales por **sinapsis** con dendritas de otras neuronas, se distribuye la información a un nuevo conjunto de neuronas, se calcula que en el cerebro humano existen del orden de 10^{15} conexiones.

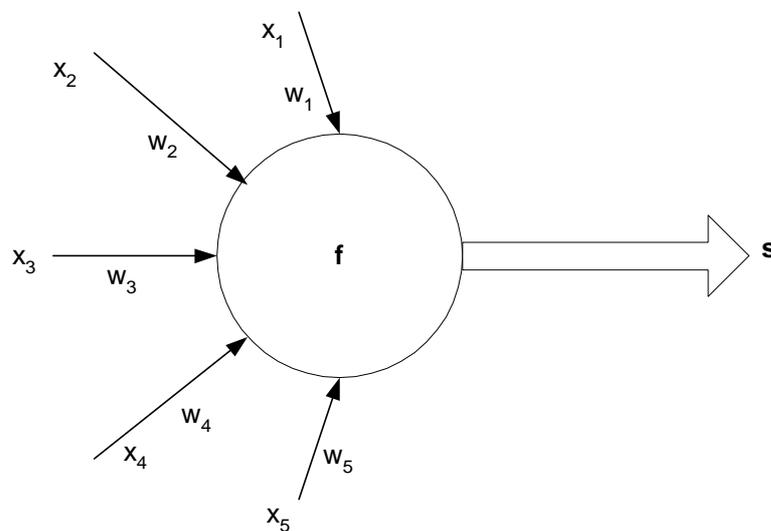
Las señales que se utilizan son de dos tipos: eléctrica y química. La señal generada por la neurona y transportada a lo largo del axón es un impulso eléctrico, mientras que la señal que se transmite entre los terminales axónicos de una neurona y las dendritas de la otra es de origen químico.

Para establecer una similitud directa entre la actividad sináptica y la analogía con las redes neuronales artificiales podemos considerar lo siguiente: las señales que llegan a la sinapsis son las entradas a la neurona; estas son ponderadas (atenuadas o simplificadas) a través de un parámetro, denominado peso asociado a la sinapsis correspondiente. Estas señales de entrada pueden excitar a la neurona (sinapsis con peso positivo) o inhibirla (peso negativo). El efecto es la suma de las

entradas ponderadas. Si la suma es igual o mayor que el umbral de la neurona, entonces la neurona se activa (da salida). Esta es una situación de todo o nada; cada neurona se activa o no se activa. La facilidad de transmisión de señales se altera mediante la actividad del sistema nervioso. Las sinapsis son susceptibles a la fatiga, deficiencia de oxígeno y la presencia de anestésicos, entre otro. Esta habilidad de ajustar señales es un mecanismo de aprendizaje.

A partir del siguiente gráfico se representan los elementos análogos del sistema artificial con los que posee el sistema biológico.

Fig. 1: DENDRITAS, SOMA Y AXÓN en una neurona del sistema artificial.



- Las entradas X_i representan las señales que provienen de otras neuronas y que son transmitidas a través de las dendritas.
- Los pesos W_i son la intensidad de la sinápsis que conecta dos neuronas; tanto X_i como W_i son valores reales.

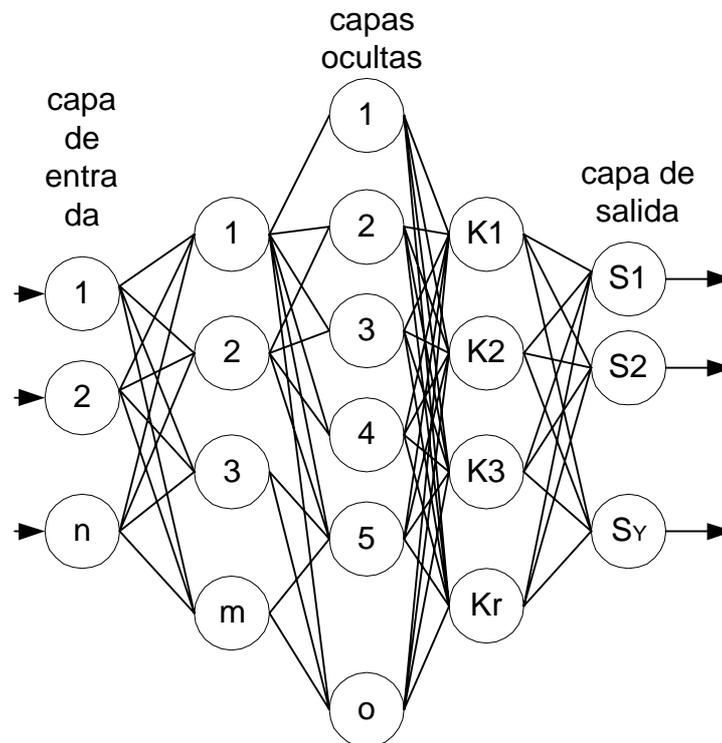
f , es la función umbral (función de transferencia) que la neurona debe superar para activarse; este proceso ocurre biológicamente en el cuerpo de la célula.

Entre las FUNCIONES DE TRANSFERENCIA utilizadas en el sistema artificial tenemos las funciones:

- hardlim
- hardlims
- poslin
- purelin
- satlin
- satlins
- logsig
- tansig

1.2.2. TOPOLOGIA DE LA RED NEURONAL

fig. N° 2 : Estructura de la Red Neuronal.



La Backpropagation, es un tipo de red neuronal, de aprendizaje supervisado, que emplea un ciclo propagación – adaptación de dos fases. Freeman y Skapura, describen su funcionamiento de la siguiente manera: una vez que se ha aplicado un patrón a la entrada de la red como estímulo, este se propaga desde la primera capa a través de las capas superiores de la red, hasta generar una salida. La señal de salida se compara con la salida deseada y se calcula una señal de error para cada una de las salidas.

Las salidas de error se propagan hacia atrás, partiendo de la capa de salida, hacia todas las neuronas de la capa oculta que contribuyen directamente a la salida. Sin embargo las neuronas de la capa oculta solo reciben una fracción de la señal total del error, basándose aproximadamente en la contribución relativa que haya aportado cada neurona a la salida original. Este proceso se repite, capa por capa, hasta que todas las neuronas de la red hayan recibido una señal de error que describa su contribución relativa al error total. Basándose en la señal de error percibida, se actualizan los pesos de conexión de cada neurona, para hacer que la red converja hacia un estado que permita clasificar correctamente todos los patrones de entrenamiento.

La importancia de este proceso consiste en que, a medida que se entrena la red, las neuronas de las capas intermedias se organizan a sí mismas de tal modo que las distintas neuronas aprenden a reconocer distintas características del espacio total de entrada. Después del entrenamiento, cuando se les presente un patrón arbitrario de entrada que contenga ruido o que esté incompleto, las neuronas de la capa oculta de la red responderán con una salida activa si la nueva entrada contiene un patrón que se asemeje a aquella característica que las neuronas individuales hayan aprendido a reconocer durante su entrenamiento. Y a la inversa, las unidades de las capas ocultas tienen una tendencia a inhibir su salida si el patrón de entrada no contiene la característica para reconocer, para la cual han sido entrenadas.

Varias investigaciones han demostrado que, durante el proceso de entrenamiento, la red Backpropagation tiende a desarrollar relaciones internas entre neuronas con el fin de organizar los datos de entrenamiento en clases. Esta tendencia se puede extrapolar, para llegar a la hipótesis consistente en que todas las unidades de la capa oculta de una Backpropagation son asociadas de alguna manera a características específicas del patrón de entrada como consecuencia del entrenamiento. Lo que sea o no exactamente la asociación puede no resultar evidente para el observador humano, lo importante es que la red ha encontrado una representación interna que le permite generar las salidas deseadas cuando se le dan las entradas, en el proceso de entrenamiento. Esta misma representación interna se puede aplicar a entradas que la red no haya visto antes, y la red clasificará estas entradas según las características que compartan con los ejemplos de entrenamiento.

Una red neuronal tipo Backpropagation, es una red de correspondencia puesto que es capaz de calcular alguna relación funcional entre su entrada y su salida. Es decir que **para un conjunto de P pares de vectores** $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_p, y_p)$, donde los elementos x_i pertenecen al vector de entrada, y los elementos y_i pertenecen al vector de salida, que poseen una correspondencia funcional $y = f(x)$ donde $x \in \mathbb{R}^N$, $y \in \mathbb{R}^M$, **con el entrenamiento la red aprenderá y proporcionará una aproximación** $\hat{y} = \hat{f}(x)$. La red permite establecer relaciones no lineales y multidimensionales.

2. PRUEBAS REALIZADAS

En el presente trabajo, las variables independientes fueron:

1. Escalado y postratamiento de datos
2. Número de capas ocultas en la estructura de la red.

3. Número de neuronas en las capas ocultas.
4. Funciones de transferencia en las diferentes capas de neuronas.
5. Las variables de entrenamiento para el aprendizaje de las redes.

Las **variables dependientes** fueron:

6. La localización del punto óptimo de los procesos.
7. La salida gráfica.
8. Estabilidad de resultados aportados por los modelos
9. Capacidad predictiva de las redes.

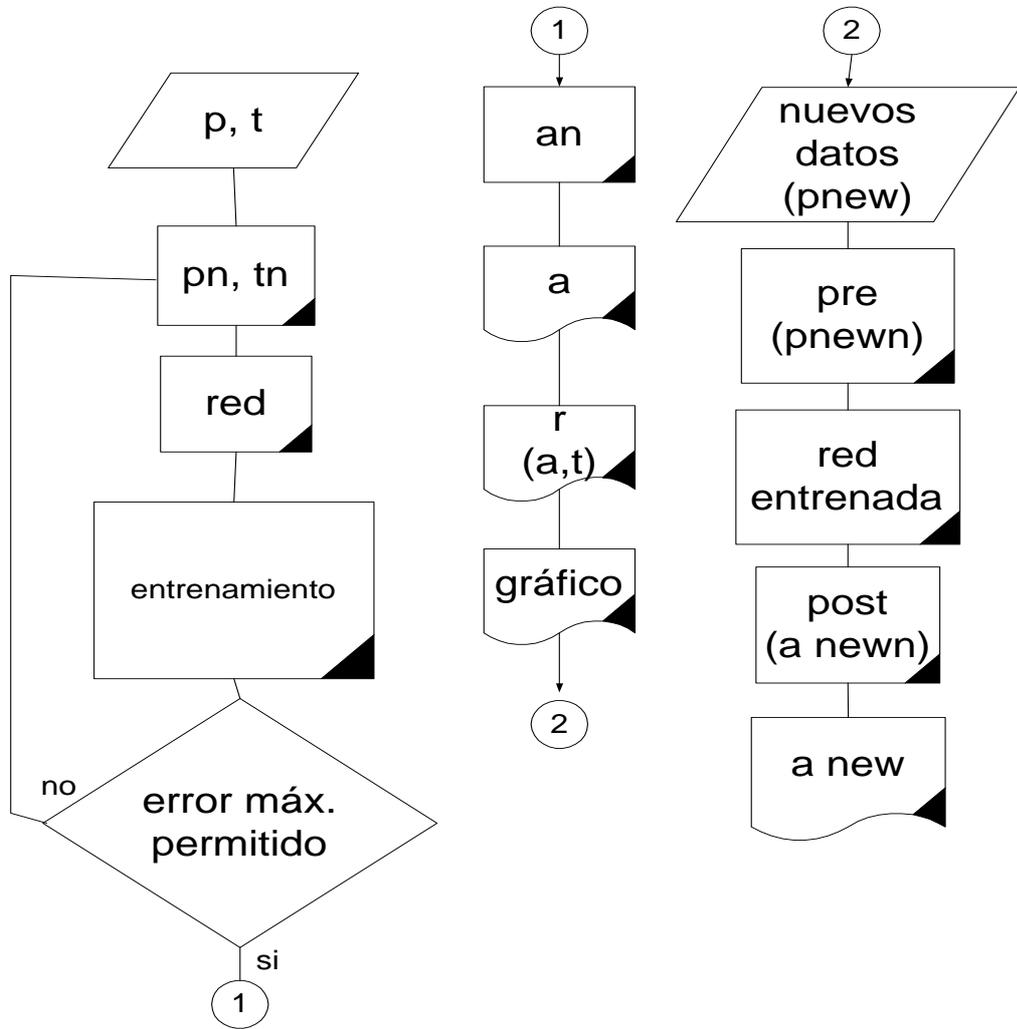
El procedimiento utilizado comprende:

- 1) La elaboración de programas utilizando el TOOL BOX de REDES NEURONALES de MATLAB.
- 2) La contrastación de resultados de optimización, con los modelos matemáticos empíricos obtenidos utilizando DISEÑOS EXPERIMENTALES ROTABLES COMPUESTOS.
- 3) La determinación de la aceptabilidad estadística de los modelos, comparando coeficientes de correlación múltiple y utilizando la prueba F con niveles de significación de 5% y 1%.
- 4) La contrastación de la capacidad predictiva con los diseños experimentales.
- 5) La contrastación de la estabilidad de los resultados obtenidos por redes neuronales con los obtenidos con diseños experimentales, frente a perturbaciones en los datos de entrada.
- 6) La aplicación de las redes neuronales y contrastación con diseños experimentales en dos trabajos de investigación:
 - a) Determinación de un procedimiento de pelambre en curtiembre alternativo al que utiliza sulfuro y cal.
 - b) Optimización de rendimiento y selectividad en el sistema de reacciones múltiples que corresponde a la cloración del propileno.

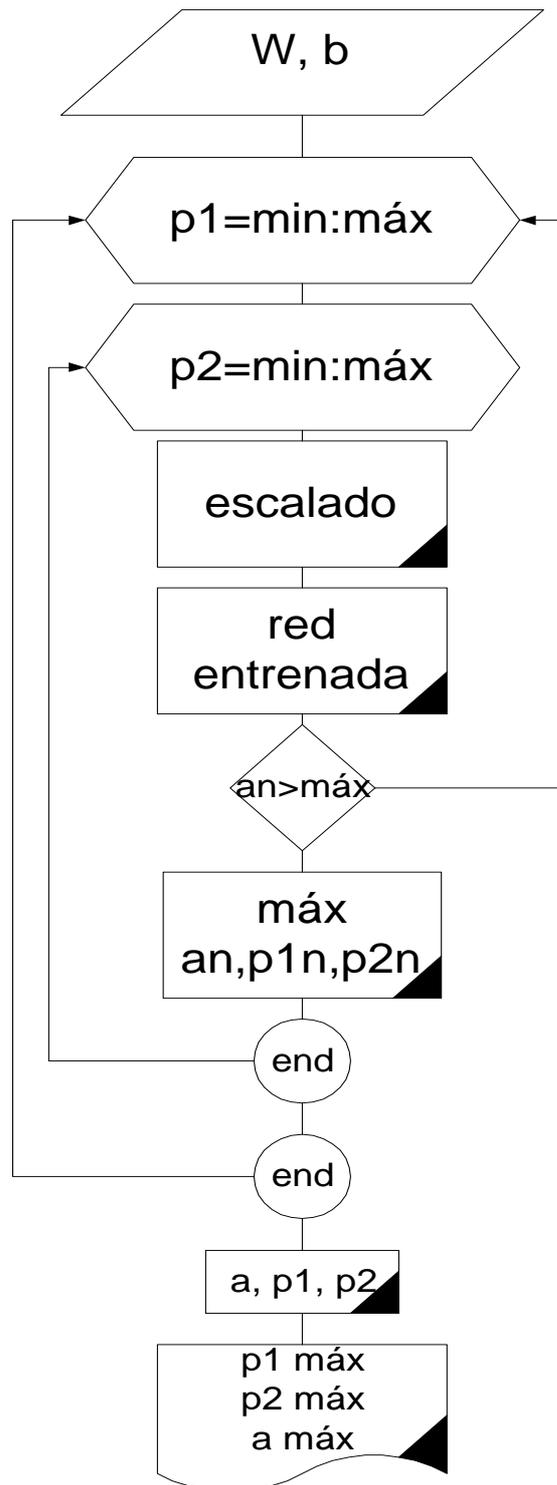
2.1. ALGORITMOS DE LOS PROGRAMAS ELABORADOS.

La estructura de los programas desarrollados para llevar a cabo las diferentes pruebas se muestra en los siguientes algoritmos:

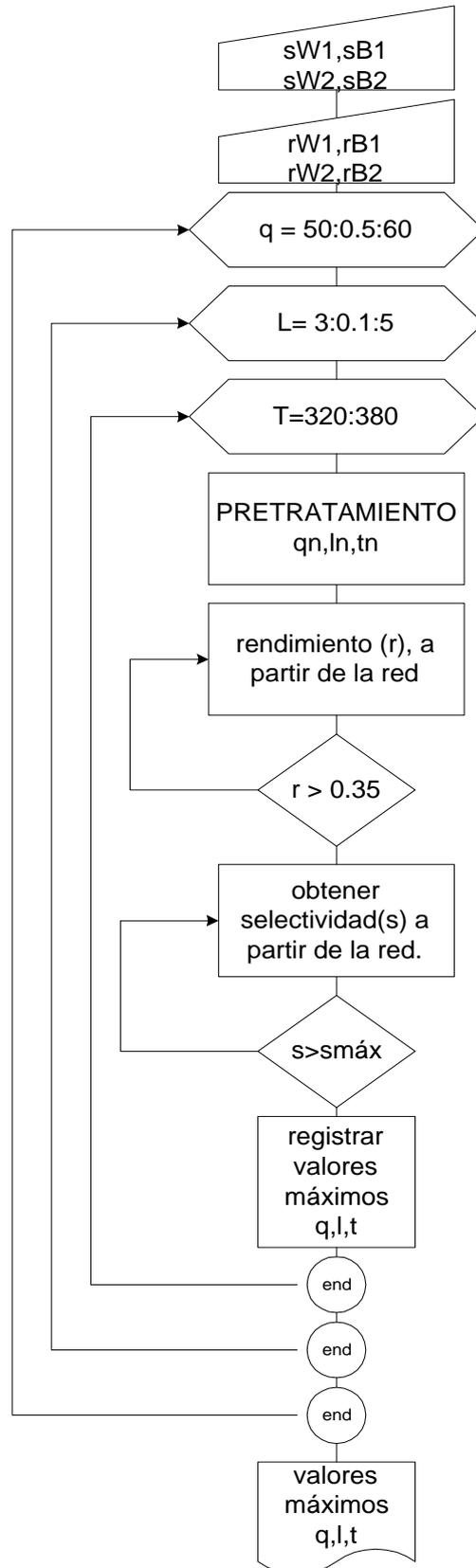
2.1.1. ALGORITMO PARA EL APRENDIZAJE DE UNA RED Y OBTENCIÓN DE RESULTADOS PARA DATOS NUEVOS. (las pruebas implican la variación de valores de las variables independientes).



2.1.2. ALGORITMO PARA DETERMINAR EL MÁXIMO CON REDES NEURONALES PARA DOS VARIABLES DE ENTRADA Y UNA RESPUESTA. (las pruebas implican la variación de valores de las variables independientes).

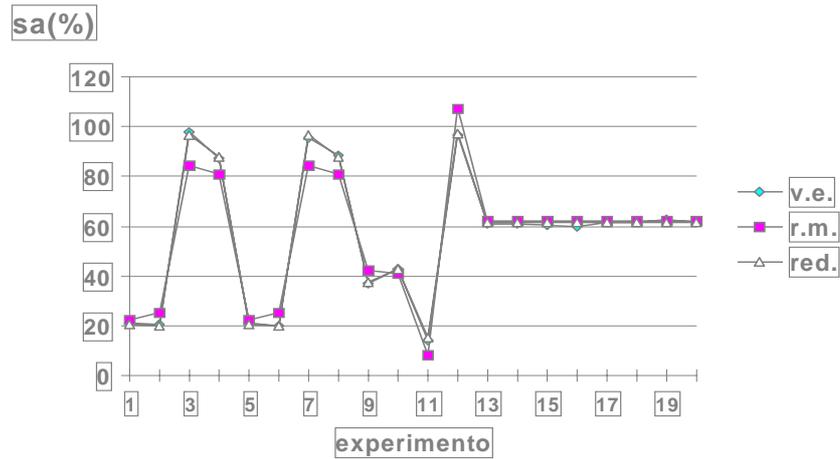


2.1.3. ALGORITMO DEL PROGRAMA PARA HALLAR VALORES MÁXIMOS, PARA TRES VARIABLES DE ENTRADA Y DOS RESPUESTAS. (las pruebas implican la variación de valores de las variables independientes).

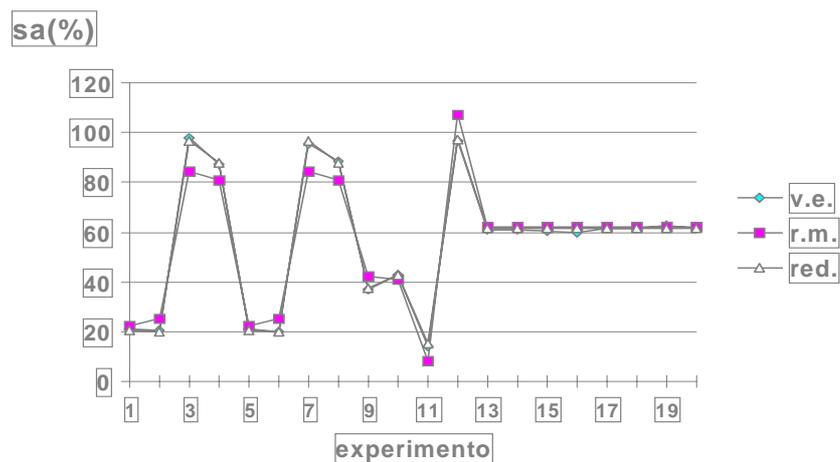


2.2. RESPUESTAS OBTENIDAS UTILIZANDO DISEÑO EXPERIMENTAL ROTABLE COMPUESTO Y REDES NEURONALES

Comparación de valores experimentales y estimados: SOLUBILIDAD ALCALINA (muestras no inmunizadas)

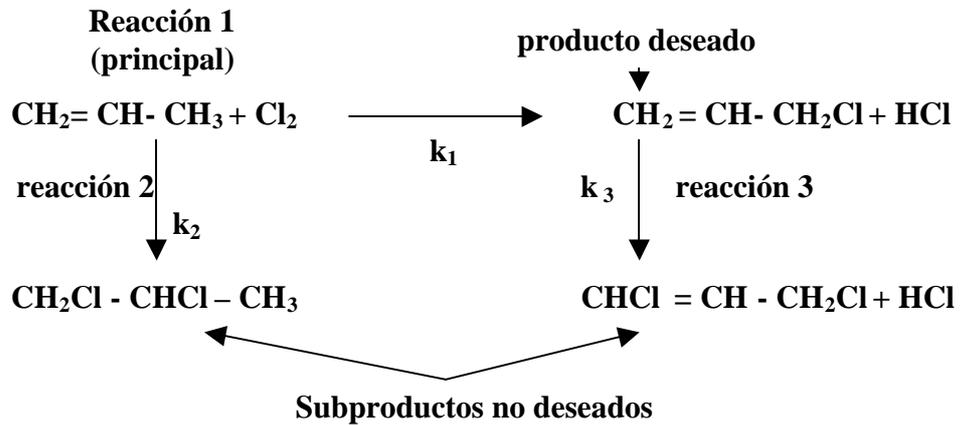


Comparación de valores experimentales y estimados: SOLUBILIDAD ALCALINA (muestras no inmunizadas)



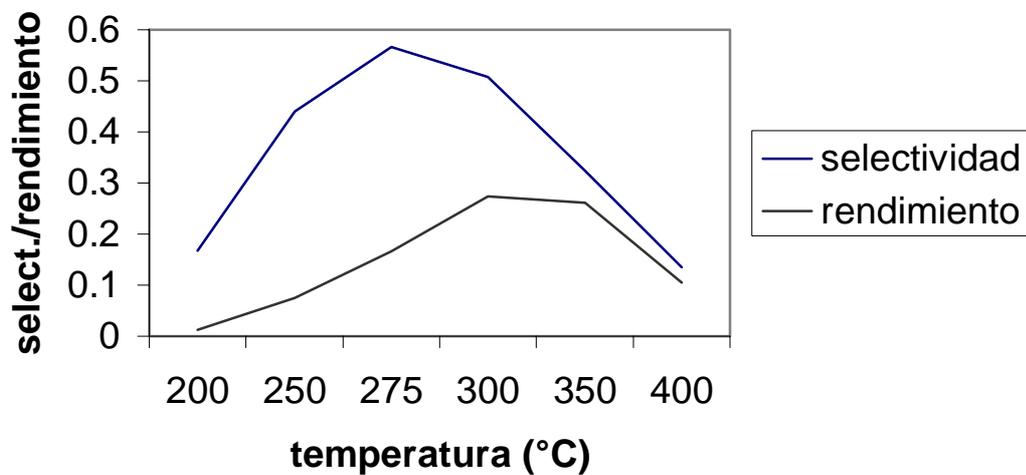
2.3. OPTIMIZACIÓN DE RENDIMIENTO Y SELECTIVIDAD EN UN SISTEMA DE REACCIONES MÚLTIPLES UTILIZANDO REDES NEURONALES.

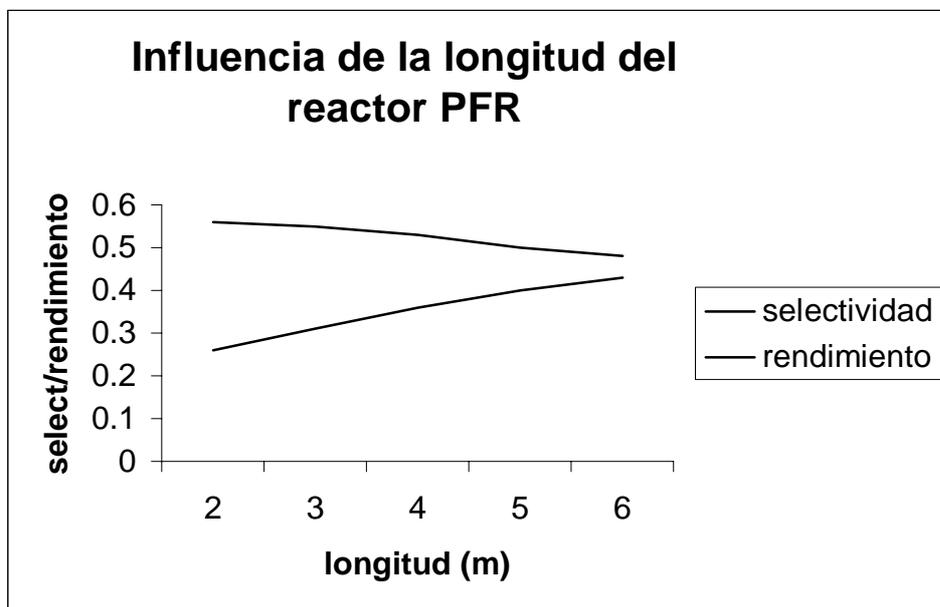
2.3.1. SISTEMA DE REACCIONES MÚLTIPLES.



2.3.2. ANÁLISIS DE MÁXIMOS EN LA OPTIMIZACIÓN DE SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTO UTILIZANDO DISEÑO EXPERIMENTAL ROTABLE COMPUESTO Y REDES NEURONALES.

Influencia de la temperatura de entrada al reactor CSTR





CONCLUSIONES

Las conclusiones más importantes son:

1. Las características topológicas de la red repercuten en el tiempo de entrenamiento para el aprendizaje y en la precisión de las respuestas.
2. Para las mismas características topológicas de la red neuronal, el tiempo de entrenamiento depende de los valores iniciales de pesos y ganancias.
3. Para una misma red neuronal aplicada a la optimización de procesos químicos, el procedimiento de pretratamiento de los datos de entrada repercute en la precisión de los resultados.
4. Es necesario elegir adecuadamente las funciones de transferencia en las capas de neuronas para obtener resultados mas precisos.
5. Los coeficientes de correlación y la prueba F, permiten afirmar que los resultados obtenidos con las redes neuronales en los casos de comportamiento no lineal, se ajustan mas a los resultados experimentales que los obtenidos utilizando diseños experimentales rotables compuestos.
6. Las redes neuronales proporcionan un procedimiento mas estable en las respuestas, que los modelos matemáticos empíricos obtenidos con la aplicación de diseños experimentales al ignorar con mayor efectividad datos irrelevantes en la entrada.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Ayala Mina Jorge y Pardo Mercado Richard (1995).OPTIMIZACIÓN POR DISEÑOS EXPERIMENTALES. CONCYTEC.Lima-Perú.
2. Hilero, José R., y Martínez Víctor J.(2000), REDES NEURONALES ARTIFICIALES.2000. Alfa omega . Madrid. España.
3. Freeman James y Skapura David (1991), REDES NEURONALES. Algoritmos, aplicaciones y técnicas de programación. Adisson-Wesley Iberoamericana S.A. U.S.A.
4. Hagan Martin, Demuth Howard y Beale Mark(1996). Neural Network Design. PWS Publishing Company. Boston U.S.A.
5. Hilera José R. y Martínez Víctor J(1995).REDES NEURONALES ARTIFICIALES. Fundamentos, modelos y aplicaciones ". Editorial Ra-ma. Madrid.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS EN INTERNET

1. <http://personal5.iddeo.es/wintrmute/ia/neuronal.htm>
2. <http://www.gc.ssr.upm.es/inves/neural/ann2/anntutorial.html>
3. <http://wwwdsa.uqac.quebec.ca/~jmtorres/investigacion/index.htm>