

REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN CONDUCCIÓN DE CALOR MULTIDIMENSIONAL TRANSITORIO

E. LILIANA ARIAS

*Escuela de Ingeniería Química
Universidad Industrial de Santander*

LENNY G. GARCÍA

*Escuela de Ingeniería Química
Universidad Industrial de Santander*

OSCAR GUALDRÓN

*Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y Telecomunicaciones
Universidad Industrial de Santander
gualdron@uis.edu.co*

RODRIGO CORREA

*Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y Telecomunicaciones
Universidad Industrial de Santander
crcorrea@uis.edu.co*

RESUMEN

Este artículo ilustra la aplicabilidad de las Redes Neuronales Artificiales en la predicción de la temperatura de algunos fenómenos de conducción de calor multidimensional transitorio. Se plantean dos casos en una dimensión con condición inicial constante y condiciones de frontera, para uno, de Dirichlet y para el otro, convectivas. Con estas mismas condiciones, se abordan geometrías en dos y tres dimensiones y se desarrollan sus soluciones analíticas para obtener los patrones de entrada y salida utilizados en el posterior entrenamiento, verificación y generalización de las redes neuronales artificiales. Para predecir la temperatura de los casos estudiados a partir de variables espaciales y temporales mediante la inteligencia artificial, Redes Neuronales Artificiales, se empleó el Perceptrón multicapa con conexiones hacia adelante, función de activación tangente hiperbólica para los nodos de la(s) capa(s) oculta(s) y lineal para el nodo de salida, algoritmo de aprendizaje Levenberg - Marquardt y raíz de la suma de los cuadrados y preprocesamiento rango como normalizaciones de las variables de entrada y salida respectivamente. Una vez determinadas las especificaciones se llevaron a cabo las etapas de desarrollo: entrenamiento, verificación y generalización de las redes de cada caso de conducción de calor considerado empleando diversas configuraciones con el fin de seleccionar la más adecuada de acuerdo a los criterios: convergencia en el entrenamiento, capacidad de generalización y simplicidad en su estructura.

PALABRAS CLAVES: Redes Neuronales

ABSTRACT

Neural networks to predict the multidimensional unsteady-state temperature profile in a solid have been used; convective and Dirichlet boundary conditions for the mathematical model were applied to solve the model. For computer simulations several neural networks following the Multilayer Perceptron architecture were trained using the Levenberg-Marquardt algorithm. Results showed an excellent agreement between numerical solutions of the mathematical model and the neural network predictions.

KEYWORD: Neuronal Network

INTRODUCCIÓN

Las Redes Neuronales Artificiales, RNAs, ganan cada vez más aceptación como una metodología para el tratamiento de información, como es el caso de los problemas de clasificación, predicción, optimización, control, diagnóstico de fallas, modelado, simulación, entre otros, convirtiéndose en otra alternativa de solución diferente a las proporcionadas por las técnicas convencionales. Este artículo muestra la implementación de las RNAs en la predicción de la temperatura de seis casos de conducción de calor. Para cada uno de ellos se plantea el modelo matemático y se presenta la curva de verificación y generalización con el fin de seleccionar la configuración más adecuada.

CASOS ESTUDIADOS

Los modelos matemáticos en coordenadas rectangulares, para dos casos de conducción de calor unidimensional donde la condición inicial es constante y las condiciones de frontera son de Dirichlet para el primero y convectivas para el segundo, además los mismos casos en dos y tres dimensiones, asumiendo que las propiedades del material son uniformes y constantes con la temperatura. Se consideran como sistemas de parámetros distribuidos, donde se tiene en cuenta el comportamiento de todos los puntos del sistema; por lo tanto el modelo puede ser más representativo del sistema físico real y su solución analítica ser más compleja comparada con la de los sistemas de parámetros concentrados [5].

La ecuación diferencial parcial de la conducción de calor en el sistema de coordenadas rectangulares para el caso general de tres dimensiones, esto es, cuando la temperatura varía en las direcciones x , y y z se expresa por la ecuación de Fourier: [7]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) + g = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

Donde:

- K , Conductividad térmica
- g , Generación de calor
- ρ , Densidad
- c_p , Capacidad calorífica

Para todos los casos, el material en consideración es cobre, metal con propiedades térmicas y físicas constantes entre 0 y 50 °C como se reportan en la Tabla 1. [6]

Las soluciones analíticas para los casos en dos y tres dimensiones en estado transitorio se pueden expresar como el producto de soluciones de casos unidimensionales. [4, 7]

Tabla 1. Propiedades del Cobre

PROPIEDADES	
Conductividad Térmica, K	380.7972 W/m°C
Densidad, ρ	8920 Kg/m ³
Capacidad Calorífica, c_p	685.3612 J/Kg°C
Difusividad Térmica, α	6.2289e-5 m ² /s
Punto de Fusión, T_f	1083 °C

A. Casos Unidimensionales

La ecuación (1) para flujo en una dimensión, en estado transitorio, con conductividad térmica uniforme y constante con la temperatura, sin generación de calor, se reduce a:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

Donde $\alpha = \frac{K}{\rho c_p}$, Difusividad Térmica

Caso 1

Región: $0 \leq x \leq L$
 Condición inicial: $T(x,0) = T_0$
 Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies
 $x=0$ $T(0,t) = T_\infty$
 $x=L$ $T(L,t) = T_\infty$

Solución Analítica:

$$T(x,t) = (T_0 - T_\infty)\varphi(x,L) + T_\infty \quad (3)$$

$$\varphi(x,L) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \text{sen} \frac{(2n+1)\pi x}{L} \exp(-\alpha(2n+1)^2 \pi^2 t/L^2) \quad (4)$$

Una placa vertical semiinfinita de 0.1m de espesor desde la condición inicial hasta el tiempo en el que se logra la estabilidad, correspondiente a 85 segundos. Inicialmente la placa está a una temperatura constante de 25°C a través de todo su cuerpo y para $t > 0$ sus superficies $x = 0$ y 0.1 m son sometidas a una temperatura constante de 10°C; el gradiente de temperatura está dirigido en dirección x , reflejando un enfriamiento más rápido en los puntos cercanos a la condición de frontera comparado con los del centro de la placa.

Caso 2

Región: $0 \leq x \leq L$
 Condición inicial: $T(x,0) = T_0$
 Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies

$$x=0, \quad -K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0$$

$$x=L, \quad K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0$$

Solución Analítica:

$$T(x,t) = (T_\infty - T_0) \gamma(x,L,h) + T_\infty$$

$$\gamma(x,L,h) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen} \lambda_n L + \frac{h}{\lambda_n} (1 - \cos \lambda_n L)}{(h^2 + \lambda_n^2) L + 2h} (\lambda_n \cos \lambda_n x + h \text{sen} \lambda_n x) \exp(-\alpha \lambda_n^2 t) \quad (5)$$

Donde H es el coeficiente convectivo de calor y $h = H/K$.

Una placa vertical semiinfinita de 0.1m de espesor en un período de 5000 segundos donde se alcanza el estado estable. Inicialmente la placa se encuentra a una temperatura constante de 25 °C y para $t > 0$ sus superficies $x=0$ y 0.1m entran en contacto con agua con coeficiente convectivo promedio de 272 W/m²°C y temperatura constante de 10 °C; reflejando en la dirección x de la placa una disminución de temperatura más lenta comparada con el caso anterior.

En convección natural, sobre una placa vertical el coeficiente convectivo de calor para el agua fue determinado por la ecuación empírica en unidades consistentes [6]:

$$Nu_{\text{promedio}} = 0.1 Ra^{1/3} \text{ para } 109 < Ra < 1012$$

Donde:

$$Nu_{\text{promedio}} = \frac{HL_c}{K}$$

$$Ra = \frac{L_c^3 g \beta \Delta T}{\nu \alpha}$$

- Lc, Longitud característica
- g, Aceleración de la gravedad
- T_s, Temperatura de la superficie
- T_∞, Temperatura del agua
- ΔT, Ts - T_∞

Las siguientes propiedades del agua se calculan a la temperatura de película,

$$T_f = \frac{\Delta T}{2}$$

- K, Conductividad térmica
- β, Dilatación térmica
- ν, Viscosidad cinemática
- α, Difusividad térmica

B. Casos Bidimensionales

La ecuación (1) para flujo en dos dimensiones, en estado transitorio, con conductividad térmica uniforme y constante con la temperatura, sin generación de calor se reduce a:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (6)$$

Caso 3

Región: $0 \leq x \leq L$
 $0 \leq y \leq B$
 Condición inicial: $T(x,y,0) = T_0$

Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies

$$x=0 \quad y=0 \quad T(0,0,t) = T_\infty$$

$$x=0 \quad y=B \quad T(0,0,t) = T_\infty$$

$$x=L \quad y=0 \quad T(L,B,t) = T_\infty$$

$$x=L \quad y=B \quad T(L,B,t) = T_\infty$$

Solución Analítica:

$$T(x,y,t) = (T_0 - T_\infty) \varphi(x,L) \varphi(y,B) + T_\infty \quad (7)$$

Un rectángulo vertical semiinfinito de 0.1m de ancho y 0.15m de alto para un lapso de 60 segundos donde se alcanza la estabilidad, se encuentra inicialmente a una temperatura constante de 25 °C; luego sus superficies ($x=0$ $x=0.1$ $y=0$ $y=0.15$) son sometidas a una temperatura de 10 °C, de manera que con el tiempo se produce un enfriamiento desde el centro del rectángulo hacia las superficies límites en las direcciones x e y hasta alcanzar la temperatura de 10 °C.

Caso 4

Región: $0 \leq x \leq L$
 $0 \leq y \leq B$
 Condición inicial: $T(x,y,0) = T_0$

Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies

$$x=0 \quad -K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0$$

$$x=L \quad K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0$$

$$y=0 \quad -K \frac{\partial T}{\partial y} + H(T - T_\infty) = 0$$

$$y=B \quad K \frac{\partial T}{\partial y} + H(T - T_\infty) = 0$$

Solución Analítica:

$$T(x, y, t) = (T_o - T_\infty)\gamma(x, L, h)\gamma(y, B, h) + T_\infty \quad (8)$$

Un rectángulo vertical semiinfinito de 0.1m de ancho y 0.15m de alto, desde la condición inicial hasta alcanzar el estado estable en 3000 segundos. Inicialmente se encuentra a una temperatura constante de 25°C y para $t > 0$ las superficies ($x=0$ $x=0.1$ $y=0$ $y=0.15$) entran en contacto con agua, con coeficiente convectivo promedio de 297 W/m²°C y temperatura constante de 10°C; mostrando un enfriamiento lento comparado con el Caso 3 ocasionado por el pequeño gradiente de temperatura dado por las condiciones de frontera convectivas y más rápido que el Caso 2, debido a un incremento del 9.2% del coeficiente convectivo gracias a un aumento de las superficies en contacto con el medio.

Sobre un rectángulo, el coeficiente convectivo de calor por convección natural para el agua, fue calculado por el promedio del coeficiente sobre una placa vertical y sobre una placa horizontal caliente con cara hacia arriba y hacia abajo haciendo uso de las ecuaciones empíricas [6]:

Placa vertical

$$Nu_{promedio} = 0.59Ra^{1/4} \quad \text{para } 104 < Ra < 109$$

Placa horizontal caliente con cara hacia arriba

$$Nu_{promedio} = 0.15 Ra^{1/3} \quad \text{para } 107 < Ra < 3 \times 10^{10}$$

Placa horizontal caliente con cara hacia abajo

$$Nu_{promedio} = 0.27 Ra^{1/4} \quad \text{para } 3 \times 10^5 < Ra < 3 \times 10^{10}$$

Donde $Nu_{promedio}$ y Ra se definen de la misma manera que en la sección 1.1.2

C. Casos Tridimensionales

La ecuación (1) para flujo en tres dimensiones, en estado transitorio, con conductividad térmica uniforme y constante con la temperatura, sin generación de calor se reduce a:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (9)$$

Caso 5

$$\begin{aligned} \text{Región: } & 0 \leq x \leq L \\ & 0 \leq y \leq B \\ & 0 \leq z \leq C \end{aligned}$$

Condición inicial: $T(x, y, z, 0) = T_o$

Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies

$$\begin{aligned} x=0 \quad y=0 \quad z=0 & \quad T(0,0,0,t) = T_\infty \\ x=L \quad y=0 \quad z=0 & \quad T(L,0,0,t) = T_\infty \\ x=0 \quad y=B \quad z=0 & \quad T(0,B,0,t) = T_\infty \\ x=L \quad y=B \quad z=0 & \quad T(L,B,0,t) = T_\infty \\ x=0 \quad y=0 \quad z=C & \quad T(0,0,C,t) = T_\infty \\ x=L \quad y=0 \quad z=C & \quad T(L,0,C,t) = T_\infty \\ x=0 \quad y=B \quad z=C & \quad T(0,B,C,t) = T_\infty \\ x=L \quad y=B \quad z=C & \quad T(L,B,C,t) = T_\infty \end{aligned}$$

Solución Analítica:

$$T(x, y, z, t) = (T_o - T_\infty)\varphi(x, L)\varphi(y, B)\varphi(z, C) + T_\infty \quad (10)$$

Este caso considera la distribución de temperatura de un paralelepípedo de 0.1m de ancho, 0.15m de alto y 0.2m de profundidad, en el transcurso de 55 segundos, considerados desde $t=0$ hasta el tiempo donde se consigue la estabilidad del sistema. Inicialmente se halla a una temperatura constante de 25 °C y luego todas sus superficies ($x=0$ $x=0.1$ $y=0$ $y=0.15$ $z=0$ $z=0.2$) son sometidas a una temperatura de 10 °C.

Caso 6

$$\begin{aligned} \text{Región: } & 0 \leq x \leq L \\ & 0 \leq y \leq B \\ & 0 \leq z \leq C \end{aligned}$$

Condición inicial: $T(x, y, z, 0) = T_o$

Condiciones de frontera: Para $t > 0$ en las superficies

$$\begin{aligned} x=0 & \quad -K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0 \\ x=L & \quad K \frac{\partial T}{\partial x} + H(T - T_\infty) = 0 \\ y=0 & \quad -K \frac{\partial T}{\partial y} + H(T - T_\infty) = 0 \\ y=B & \quad K \frac{\partial T}{\partial y} + H(T - T_\infty) = 0 \\ z=0 & \quad -K \frac{\partial T}{\partial z} + H(T - T_\infty) = 0 \\ z=C & \quad K \frac{\partial T}{\partial z} + H(T - T_\infty) = 0 \end{aligned}$$

Solución Analítica:

$$T(x, y, z, t) = (T_o - T_\infty)\gamma(x, L, h)\gamma(y, B, h)\gamma(z, C, h) + T_\infty \quad (11)$$

En este caso se considera un paralelepípedo de 0.1m de ancho, 0.15 m de alto y 0.2 m de profundidad, desde $t=0$ hasta 2200 segundos, periodo en el que se estabiliza el sistema. Inicialmente se halla a una temperatura constante de 25°C y para $t>0$ todas las superficies ($x=0$ $x=0.1$ $y=0$ $y=0.15$ $z=0$ $z=0.2$) se colocan en contacto con agua, con coeficiente convectivo promedio de 334 W/m²°C y temperatura constante de 10°C; el sistema muestra un enfriamiento lento comparado con el Caso 5, ocasionado por las condiciones de frontera convectivas que originan un gradiente de temperatura pequeño y más rápido que el Caso 4. Esto se puede explicar por el incremento del 12.45% del coeficiente convectivo, ya que todas las superficies están en contacto con el agua.

En convección natural sobre un bloque rectangular, el coeficiente convectivo de calor para el agua fue calculado por la ecuación empírica [6]:

$$Nu_{promedio} = 0.55Ra^{1/4} \quad \text{para } 104 < Ra < 109$$

Donde $Nu_{promedio}$ y Ra se definen de la misma manera que en la sección 1.1.2

$$\text{Siendo } L_c = \frac{L_H L_V}{L_H + L_V}$$

- L_{Hp} Longitud horizontal más grande
- L_v Longitud vertical

SELECCIÓN DE LAS REDES NEURONALES ARTIFICIALES

A. Especificaciones de las RNAs

El tipo, topología, variables de entrada y salida, funciones de activación, regla de aprendizaje y normalización de las variables de entrada y salida constituyen las especificaciones de las RNAs para todos los casos de conducción de calor estudiados en la sección 1.

Tipo y topología

En problemas de predicción, el tipo de red más usado y recomendado por la literatura [3], es el Perceptrón Multicapa con conexiones intercapa hacia delante.

Variables de entrada y salida

Las variables de entrada y salida se reportan en la Tabla 2, según la dimensión del caso planteado.

Tabla 2. Variables de entrada y salida

	Casos Unidimensionales	Casos Bidimensionales	Casos Tridimensionales
Variables de entrada	Posición x, [m] Tiempo t, [s]	Posición x, [m] Posición y, [m] Tiempo t, [s]	Posición x, [m] Posición y, [m] Posición z, [m] Tiempo t, [s]
Variable de salida	Temperatura T, [°C]	Temperatura T, [°C]	Temperatura T, [°C]

Funciones de activación

Se podría utilizar cualquier función de activación, pero algunos investigadores han encontrado que las funciones con forma de S, como la sigmoideal y tangente hiperbólica, que se caracterizan por ser funciones monótonas, continuas, con valor límite superior e inferior, derivables, con valor finito cuando la variable independiente tiende a más o menos infinito, son más eficientes para el entrenamiento del perceptrón multicapa [2, 3]. Se utilizó la función de activación del nodo de la capa de salida, lineal.

Regla de aprendizaje

Como prueba preliminar para la elección de la regla de aprendizaje y función de activación más adecuadas, se realizaron entrenamientos de las RNAs que predicen la temperatura de los casos estudiados, con las variables de entrada sin ninguna normalización, salida normalizada entre 0 y 1, variando el número de nodos en la capa oculta, utilizando las reglas de aprendizaje mencionadas y funciones de activación sigmoideal o tangente hiperbólica en los nodos de la capa oculta.

Se concluyó que los entrenamientos que emplearon la regla de aprendizaje Levenberg - Marquardt y función de activación tangente hiperbólica, presentan mayor convergencia en la etapa de entrenamiento comparada con aquellos entrenamientos que emplearon las otras reglas y función sigmoideal.

Los parámetros de entrenamiento de la regla de aprendizaje Levenberg - Marquardt, fueron:

Número máximo de épocas,	1000
Velocidad de aprendizaje inicial,	1e-3
Factor de incremento de la velocidad de aprendizaje,	10
Factor de decremento de la velocidad de aprendizaje,	1e-1
Velocidad de aprendizaje máxima,	1e10

Se asumió que el error de entrenamiento deseado para cada una de las redes está uniformemente distribuido, es decir, que la diferencia entre la salida de todos los ejemplos de entrenamiento y la calculada por la RNA es la misma.

Normalización de las variables de entrada y salida

Se utilizaron los siguientes tipos de normalización para las entradas:

$$\text{Estadístico} \quad x'_i = (x_i - \bar{x}) / \sigma \quad (12)$$

$$\text{Preprocesamiento} \quad x'_i = \frac{[x_i - (\max_i + \min_i) / 2]}{(\max_i - \min_i)} \quad (13)$$

$$\text{Suma a uno} \quad x'_i = \frac{x_i}{x_1 + x_2 + \dots + x_i} \quad (14)$$

$$\text{Raíz de la suma de los cuadrados} \quad x'_i = \frac{x_i}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_i^2}} \quad (15)$$

Donde	x_i	Entrada normalizada
	x_i	Entrada
	\bar{x}	Promedio de las entradas
	σ	Desviación estándar
	\max_i	Valor máximo de la entrada
	\min_i	Valor mínimo de la entrada

Para la normalización de la variable de salida se empleó el Preprocesamiento rango de la forma:

$$y'_i = \frac{y_i}{\max_i + (\max_i - \min_i) / 2} \quad (16)$$

Donde	y_i	Salida normalizada
	y_i	Salida
	\max_i	Valor máximo de la entrada
	\min_i	Valor mínimo de la entrada

IMPLEMENTACIÓN DE LAS RNAs

La implementación de una RNA requiere tres etapas, una de entrenamiento y aprendizaje, otra de verificación y una última de generalización. Se hace necesario registrar ciertos resultados así: para el entrenamiento, ejemplos, épocas, tiempo y error, calculado como la suma de las diferencias al cuadrado y denotado como, SSE; para la verificación, ejemplos y error (SSE) y para la generalización, ejemplos, error (SSE), diferencia máxima entre los resultados

deseados y los calculados por la RNA y el coeficiente de variación de dicha diferencia, con el objeto de seleccionar la configuración de la RNA más adecuada de cada caso [1]. Los criterios de selección fueron- convergencia del entrenamiento, capacidad de verificación y generalización, simplicidad de configuración.

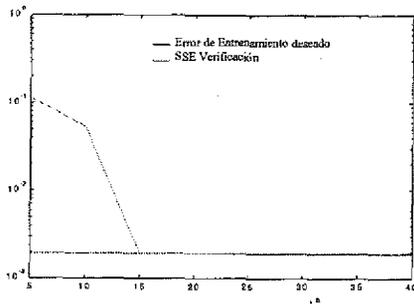
En las Figuras 1 a 8 se muestran las dos últimas etapas de desarrollo de las RNAs de cada caso estudiado con diferente número de nodos en la capa oculta. Se realizaron 5 entrenamientos para cada una de las configuraciones elegidas, con el fin de comprobar los resultados, ya que los factores de peso iniciales son aleatorios y por lo tanto no siempre conducen a los mismos valores finales para una misma configuración. Además se calculó la diferencia máxima promedio entre las salidas deseadas y las obtenidas en la generalización y su coeficiente de variación como medida de dispersión, para conocer cuál es la mayor desviación de la temperatura proporcionada por la RNA con respecto a la hallada por la solución analítica.

A. RNAs para Casos Nidimensionales

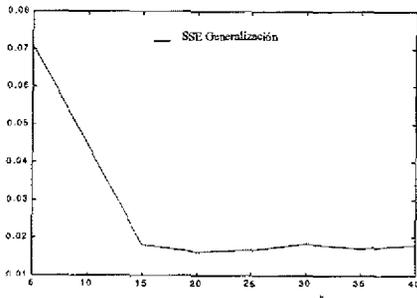
RNA del Caso 1

La Figura 1 muestra la verificación y la generalización de las redes con configuraciones 2:n:1 del Caso 1, con n desde 5 hasta 40 nodos utilizando 800 ejemplos en cada una ellas. En la Figura 1a se observa que de 5 a 15 nodos en la capa oculta, el SSE de verificación disminuye y que a partir de la configuración 2:15:1 se alcanza el error de entrenamiento deseado de 1.8935e-3. De acuerdo a la Figura 1b, las configuraciones pequeñas proporcionan deficientes capacidades de generalización que se mejoran con el aumento del número de nodos, así, los menores errores de generalización son 1.6129e-2, 1.6769e-2 y 1.7286e-2 que corresponden a las configuraciones 2:20:1, 2:25:1 y 2:35:1 respectivamente.

Se concluyó que la configuración más conveniente es la 2:20:1 ya que esta estructura tiene el menor SSE de generalización y menos nodos en la capa intermedia de las citadas anteriormente. Esta RNA proporcionó una diferencia máxima promedio en la generalización de ± 1.0041 °C con un coeficiente de variación de 0.0733.

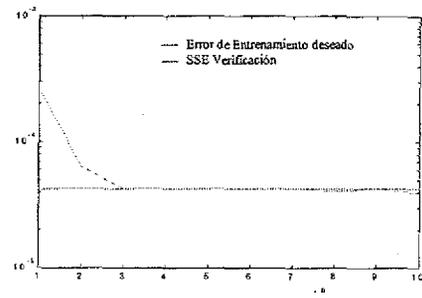


a. Curva del Error de Verificación

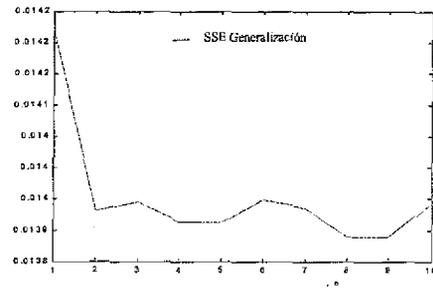


b. Curva del Error de Generalización

Figura 1. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 2:n:1 del Caso 1



a. Curva del Error de Verificación



b. Curva del Error de Generalización

Figura 2. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 2:n:1 del Caso 2

RNA del Caso 2

Las dos últimas etapas de desarrollo para las redes del Caso 2 con 450 ejemplos para cada una de ellas y con n desde 1 hasta 10 nodos, se representan en la Figura 2. En la Figura 2a se observa que desde configuraciones pequeñas, 2:3:1 en adelante, se logra el error de entrenamiento deseado de $4.2604e-5$ y en la Figura 2b que los menores SSE de generalización son alcanzados por las configuraciones 2:4:1, 2:5:1, 2:8:1 y 2:9:1 seleccionándose la primera con un SSE de generalización de $1.3914e-2$, como la más adecuada para representar el Caso 2.

El perceptrón multicapa 2:4:1 que predice la temperatura del caso unidimensional con condiciones de frontera convectivas, Caso 2, suministró una diferencia máxima en la etapa de generalización de ± 0.2918 °C con un coeficiente de variación de 0.0181.

B. RNAs para Casos Bidimensionales

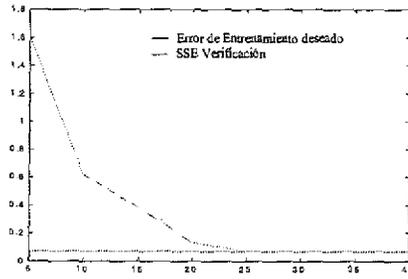
RNA del Caso 3

La verificación y generalización para las redes del Caso 3, se llevaron a cabo inicialmente con variación del número de nodos en una capa oculta, posteriormente se

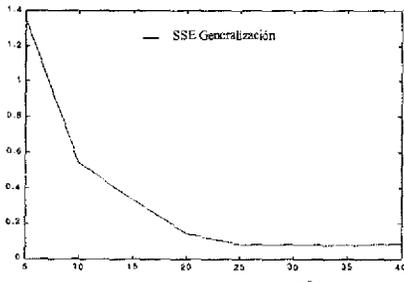
incrementó a dos capas ocultas, lográndose entrenar varias configuraciones pero sin una aceptable capacidad de generalización reflejada en altos valores de diferencia máxima. Se dividió en dos partes el Caso 3 para representar cada una de ellas en una RNA; la parte A comprende la distribución de temperatura desde la condición inicial hasta 5 segundos, donde se agrupa el cambio más fuerte de temperatura y la parte B desde éste último hasta el tiempo en el cual se alcanza la estabilidad del sistema equivalente a los 60 segundos.

Las redes que describen el Caso 3 parte A, desde la configuración 3:5:1 hasta la 3:40:1, empleando 1372 ejemplos tanto para la verificación como para la generalización, se ilustran en la Figura 3. En la Figura 3a, se observa que las redes con n desde 5 hasta 25 nodos presentan una disminución progresiva del SSE de verificación y que a partir de 25 nodos en la capa oculta, logran el error de entrenamiento deseado de $7.00e-2$. De acuerdo a la Figura 3b, el SSE de generalización empieza a disminuir a medida que se incrementa el valor de n y tiende a ser constante para las redes que entrenan; el menor SSE de generalización es de $7.9438e-2$ y lo obtiene la configuración 3:35:1, eligiéndose ésta como la más apta según los criterios de selección expuestos. La RNA 3:35:1 predice la temperatura del Caso 3 parte A, para las posiciones x y, en metros y los tiempos

desde cero hasta 5 segundos, con una diferencia máxima promedio en la generalización de ± 0.8948 °C y coeficiente de variación de 0.0494.

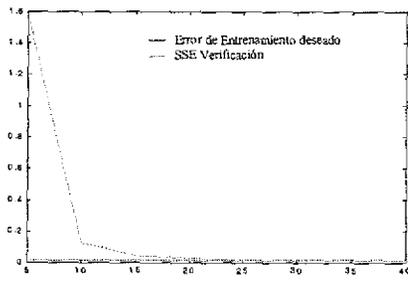


a. Curva del Error de Verificación

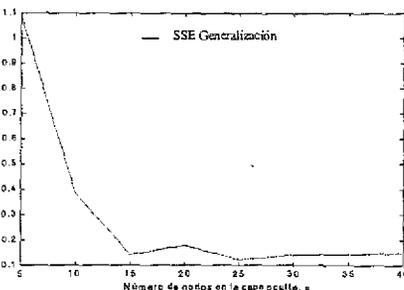


b. Curva del Error de Generalización

Figura 3. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 3:n:1 del Caso 3, parte A



a. Curva del Error de Verificación



b. Curva del Error de Generalización

Figura 4. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 3:n:1 del Caso 3, parte B

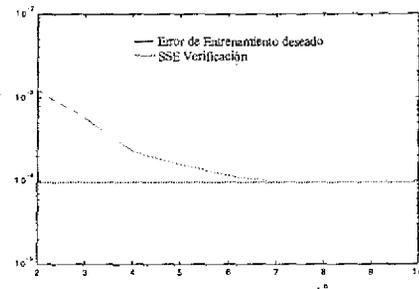
En la Figura 4 se presenta el Caso 3 parte B, para las RNAs con configuraciones desde 3:5:1 hasta 3:40:1 con 1372 ejemplos, de las cuales alcanzan el error de entrenamiento deseado de $1.5766e-2$, las redes con 25, 30,

35 y 40 nodos en la capa oculta, como se indica en la Figura 4a. De la Figura 4b, el menor valor del SSE de generalización es de $1.2279e-1$ para la configuración 3:25:1 eligiéndose ésta, como la más conveniente por cumplir los tres criterios de selección. El perceptrón multicapa 3:25:1 que predice la temperatura del Caso 3 parte B, desde 5 hasta 60 segundos proporcionó una diferencia máxima promedio en la generalización de ± 0.9531 °C con un coeficiente de variación de 0.0540.

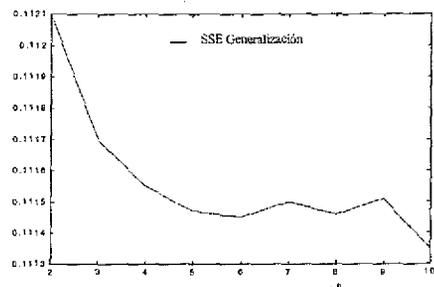
RNA del Caso 4

La etapa de verificación y generalización de las RNAs que predicen la temperatura para el caso en dos dimensiones con condiciones de frontera convectivas, Caso 4, con 1024 ejemplos y 2 a 10 nodos en la capa intermedia, se reportan en la Figura 5; en la Figura 5a, se nota que desde la configuración 3:7:1 en adelante, éstas logran el error de entrenamiento deseado de $9.6947e-5$ y en la Figura 5b, que los menores SSE de generalización, $1.1146e-1$ y $1.1135e-1$, están dados por las redes con valores para n de 8 y 10 respectivamente.

A pesar de que la 3:10:1 entrena y tiene el menor SSE de generalización, se elige la 3:8:1 por tener mayor simplicidad de configuración. La diferencia máxima promedio entre los resultados deseados y los obtenidos en la etapa de generalización de la RNA 3:8:1 seleccionada para el Caso 4, fue de ± 0.5913 °C con un coeficiente de variación de 0.0405.



a. Curva del Error de Verificación



b. Curva del Error de Generalización

Figura 5. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 3:n:1 del Caso 4

C. RNAs para Casos Tridimensionales

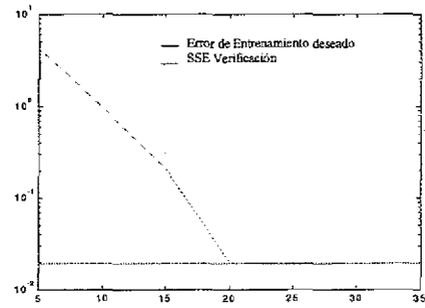
RNA del Caso 5

El estudio preliminar de las RNAs para la descripción del caso de conducción de calor en tres dimensiones, con condiciones de frontera de Dirichlet, Caso 5, se realizó de manera análoga al Caso 3; a diferencia de este último, las dos RNAs que predicen la temperatura del Caso 5 parte A y parte B, contienen una capa oculta más en su estructura.

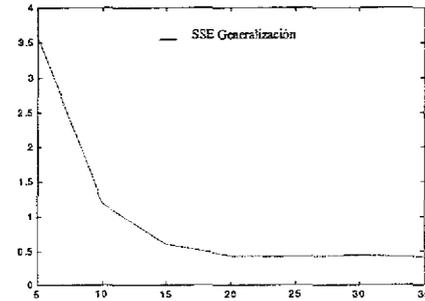
En la Figura 6 se muestra las dos últimas etapas del desarrollo de las redes de la parte A, empleando 2048 ejemplos; se consideran configuraciones con n desde 5 hasta 35 nodos en la primera capa oculta y manteniendo 5 nodos en la segunda. Como se ve en la Figura 6a, los SSE de verificación de las configuraciones 4:20:5:1 en adelante sobrepasan el error de entrenamiento deseado de 1.9389×10^{-2} . La curva del SSE de generalización en la Figura 6b, disminuye con el aumento de nodos en la primera capa oculta y sus menores valores 4.2776×10^{-1} , 4.1591×10^{-1} y 4.1352×10^{-1} corresponden a las redes con n de 20, 25 y 35, respectivamente.

Luego la configuración más conveniente es la 4:25:5:1 porque alcanza el error de entrenamiento deseado, tiene uno de los menores SSE de generalización y menor número de conexiones. La RNA 4:25:5:1, predice la temperatura del Caso 5 parte A, para las posiciones x y z, en metros y los tiempos desde cero hasta 5 segundos, con una diferencia máxima promedio en la etapa de generalización de $\pm 1.2825 \text{ }^\circ\text{C}$ y coeficiente de variación de 0.051736.

Las redes de la parte B del Caso 5 con 2048 ejemplos, se indican en la Figura 7, desde la configuración 4:5:5:1 hasta la 4:40:5:1. En la Figura 7a se observa que las redes con 25, 30, 35 y 40 nodos en la primera capa oculta y 5 en la segunda alcanzan el error de entrenamiento deseado de 5.8834×10^{-3} y en la Figura 7b las configuraciones con n de 30, 35 y 40 tienen los menores SSE de generalización de 4.4291×10^{-1} , 3.6107×10^{-1} y 3.6091×10^{-1} respectivamente; escogiéndose la estructura 4:35:5:1 como la más adecuada. En la generalización, esta configuración suministró una diferencia máxima promedio de $\pm 2.4837 \text{ }^\circ\text{C}$ con un coeficiente de variación de 0.18761.

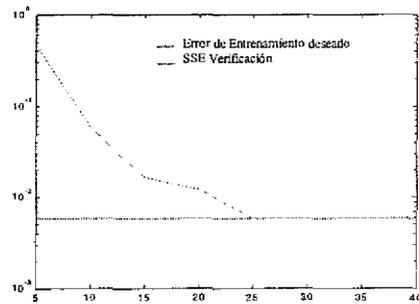


a. Curva del Error de Verificación

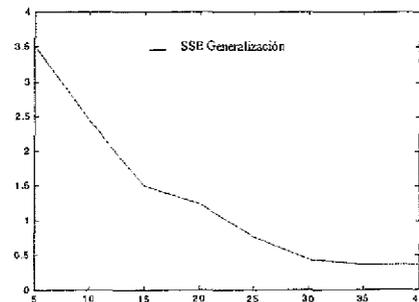


b. Curva del Error de Generalización

Figura 6. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 4:n:5:1 del Caso 5, parte A



a. Curva del Error de Verificación



b. Curva del Error de Generalización

Figura 7. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 4:n:5:1 del Caso 5, parte B

3.3.2 RNA del Caso 6

Las RNAs consideradas para la predicción de temperatura del caso en tres dimensiones con condiciones de frontera convectivas, Caso 6, utilizando 1296 ejemplos, con valores para n desde 6 hasta 15, se presentan en la Figura 8; desde la configuración 4:10:1 en adelante, el SSE de verificación logra el error de entrenamiento deseado de $1.2270e-4$ de acuerdo a la Figura 8a y de éstas, las redes con mejor capacidad de generalización son la 4:13:1, 4:14:1 y 4:15:1 con un SSE de $2.8919e-1$, $2.9315e-1$ y $2.8352e-1$ respectivamente, según la Figura 8b; se decidió entonces que la red con 13 nodos en la capa intermedia es la más apta por reunir los requisitos de selección. La diferencia máxima promedio entre los resultados deseados y los obtenidos en la etapa de generalización de la RNA 4:13:1 seleccionada para el Caso 6, fue de ± 1.0330 °C con un coeficiente de variación de 5.59%.

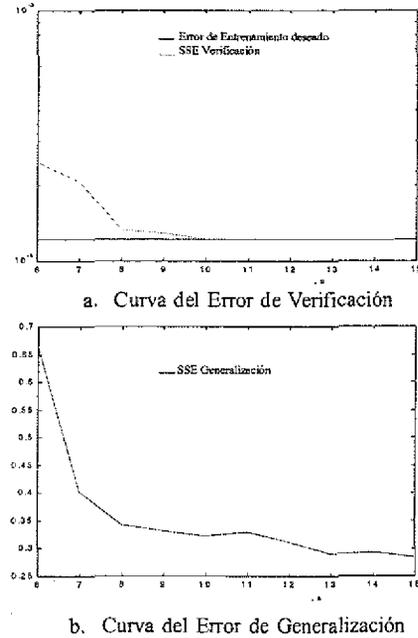


Figura 8. Desarrollo de las RNAs con configuraciones 4:n:1 del Caso 6

La Tabla 3 resume el desarrollo de todas las RNAs seleccionadas para la predicción de temperatura de los fenómenos de conducción de calor planteados.

Tabla 3. Desarrollo de las RNAs seleccionadas

	CASO 1	CASO 2	CASO 3 Parte A	Parte B	CASO 4	CASO 5 Parte A	CASO 6 Parte B	
Configuración	2:20:1	2:4:1	3:35:1	3:25:1	3:8:1	4:25:5:1	4:35:5:1	4:13:1
Entrenamiento								
Ejemplos	800	450	1372	1372	1024	2048	2048	1296
Épocas promedio	629	323	147	428	534	628	242	689
Tiempo promedio, [s]	739	28	1018	1757	196	14731	13398	686
Error deseado	$1.8935e-3$	$4.2604e-5$	$7.000e-2$	$1.5766e-2$	$9.6947e-5$	$1.9389e-2$	$5.8834e-3$	$1.2270e-4$
Verificación								
Ejemplos	800	450	1372	1372	1024	2048	2048	1296
SSE* promedio	$1.8932e-3$	$4.2550e-5$	$6.9617e-2$	$1.5752e-2$	$9.6705e-5$	$1.9346e-2$	$5.8445e-3$	$1.2241e-4$
Generalización								
Ejemplos	800	450	1372	1372	1024	2048	2048	12096
SSE promedio	$1.7989e-2$	$1.3933e-2$	$8.2635e-2$	$1.3135e-1$	$1.1039e-1$	$4.0831e-1$	1.3127	$2.9028e-1$
Diferencia Máxima								
Promedio, [°C]	± 1.0041	± 0.2918	± 0.8948	± 0.9531	± 0.5913	± 1.2825	± 2.4991	± 1.0330
Coefficiente de variación	0.0733	0.0181	0.0494	0.0540	0.0405	0.0517	0.1780	0.0559

* SSE, Error calculado como la suma de las diferencias al cuadrado

CONCLUSIONES

Problemas de predicción de temperatura con variables espaciales y temporales pueden ser descritos utilizando redes neuronales artificiales del tipo Perceptrón Multicapa con las siguientes características: conexiones

hacia adelante, variables de entrada normalizadas del tipo raíz de la suma de los cuadrados y una única variable de salida normalizada del tipo preprocesamiento, regla de aprendizaje Levenberg - Marquardt y función de activación tangente hiperbólica para los nodos que conforman la(s) capa(s) oculta(s) y lineal para el nodo de salida.

Se encontró que la estructura de las redes neuronales artificiales que predicen la temperatura de los casos con condición de frontera convectivas, señalados en los Casos 2, 4 y 6, contienen un bajo número de nodos en una sola capa oculta o intermedia, ya que la curva de distribución de temperatura de estos casos es tenue y requiere un bajo número de conexiones para aprenderla.

A diferencia de los casos anteriores, los problemas con condición inicial constante y condiciones de frontera de Dirichlet, indicados en los Casos 1, 3 y 5, requieren de perceptrones multicapa con un mayor número de nodos, pues necesitan un alto número de conexiones que puedan aprender el cambio fuerte de distribución de temperatura, originado por el paso de la condición inicial a la condición de frontera en los planos que limitan la región, según el caso. Es suficiente agrupar estos nodos en una sola capa oculta para el caso unidimensional y bidimensional, pero no para el caso tridimensional, donde fue necesario emplear dos capas ocultas en su estructura.

Se requiere utilizar dos redes neuronales artificiales para describir tanto el Caso 3 como el 5; la primera red, predice las temperaturas en los primeros tiempos donde el cambio temperatura es más drástico y la segunda, los tiempos restantes hasta alcanzar la estabilidad del sistema.

En general, se observó que al incluir una variable de entrada en la estructura de la red neuronal artificial, ésta requiere una mayor cantidad de ejemplos de entrenamiento y como consecuencia se prolongan los tiempos de entrenamiento.

Se encontró que las diferencias máximas promedio, entre los resultados obtenidos en la etapa de generalización de las redes neuronales artificiales seleccionadas y los calculados por las soluciones analíticas, tienen una relación incremental con respecto a la dimensión y grado de complejidad en que se plantea el caso de conducción de calor.

Se mostró la aplicación de las redes como alternativa para la predicción de temperatura en los casos considerados, con resultados bastante aceptables, reflejados en valores de diferencia máxima promedio alrededor de $\pm 1^\circ\text{C}$ para la mayoría de los casos en la etapa de generalización. Su aplicación resulta atractiva a la hora de utilizar el modelo neuronal en lugar del analítico especialmente en casos en donde existan unas condiciones de operación definidas tales como condiciones de estado estable de un sistema.

REFERENCIAS

- [1] ARIAS, L. Y GARCÍA, L. Redes Neuronales Artificiales en Fenómenos de Conducción de Calor Multidimensional Transitorio. Bucaramanga, 1998, 103 p. Tesis de Grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.
- [2] BAUGHMAN, D. Richard y LIU, Yin An. Neural Networks in Bioprocessing and Chemical Engineering. San Diego, California: Academic Press, 1995. p. 479
- [3] BULSARI, A. B. (editor). Neural Networks for Chemical Engineers. Amsterdam: Elsevier Science B.V., 1995. p. 252 - 258
- [4] CARSLAW, H. S. y JAEGER, J. C. Conduction of Heat in Solids. Londres: Oxford University Press, 1959. p. 510
- [5] HIMMELBLAU, D. M. y BISCHOFF, K. B. Process Analysis and Simulation: Deterministic Systems. Estados Unidos: John Wiley & Sons Inc, 1968. p. 42-47
- [6] KARLEKAR, B. V. y DESMOND, R. M. Transferencia de Calor. México: McGraw - Hill, 1994. p. 610 - 629
- [7] MYERS, G. E. Analytical Methods in Conduction Heat Transfer. Estados Unidos: McGraw - Hill, 1971. p. 493