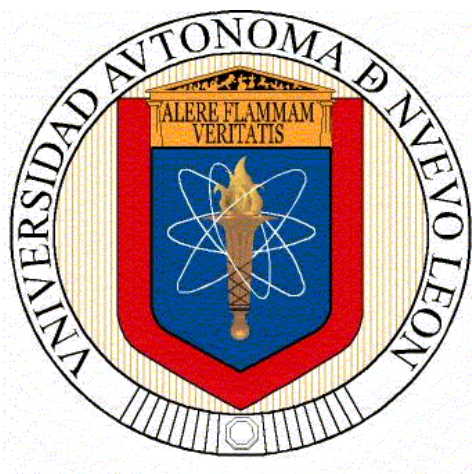


**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA**



TESIS

**APLICACIÓN DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA LA
SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE SÍNTESIS DE
 γ -Bi₂MoO₆ COMO FOTOCATALIZADOR**

**PRESENTA:
GUILLERMO GONZÁLEZ CAMPOS**

**EN OPCIÓN PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN
INGENIERÍA DE LA INFORMACIÓN CON ORIENTACIÓN EN
INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

FEBRERO 2013

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO**



TESIS

**APLICACIÓN DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA LA
SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE SÍNTESIS DE
 γ -Bi₂MoO₆ COMO FOTOCATALIZADOR**

PRESENTA:

ING. GUILLERMO GONZÁLEZ CAMPOS

**EN OPCION PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN
INGENIERÍA DE LA INFORMACIÓN CON ORIENTACIÓN EN
INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

SAN NICOLÁS DE LOS GARZA, NUEVO LEÓN,

FEBRERO 2013

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO

Los miembros del comité de tesis recomendamos que la tesis “**Aplicación de una red neuronal artificial para la simulación y optimización del proceso de síntesis de γ -Bi₂MoO₆ como fotocatalizador**”, realizada por el alumno GUILLERMO GONZALEZ CAMPOS, matrícula 1306412, sea aceptada para su defensa como opción al grado de Maestro en Ingeniería de la Información con orientación en Inteligencia Artificial.

El Comité de Tesis

Dr. Luis Martin Torres Treviño

Director de Tesis

Dr. Francisco Torres Guerrero

Revisor

Dr. Cesar Guerra Torres

Revisor

Vo. Bo.

Dr. Moisés Hinojosa Rivera

Subdirector de Estudios de Posgrado

Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L. Febrero 2013

DEDICATORIA

*A mi compañera de vida y amada esposa **Edith Luévano Hipólito** y mi hija **Luna González Luévano** por su paciencia, apoyo, cariño, y amor incondicional.
Gracias por compartirme tantas alegrías*

*A mi papá **Arturo González Rodríguez** por siempre brindarme su apoyo y enseñarme a recorrer las sendas del estudio, honestidad y felicidad ante la vida*

*A mis hermanos **Aarón y Adrian** por cuidarme, apoyarme y darme un buen ejemplo de vida*

*A mi mamá: **Luz Elena Campos Terrazas (†)**
(18 de abril 1955 - 8 de noviembre 2008)*

AGRADECIMIENTOS

A **Dios** por darme la oportunidad de vivir.

Al **Dr. Luis Martin Torres Treviño** por brindarme sus enseñanzas, apoyo, asesoría y paciencia a lo largo de la maestría y en este trabajo.

A los **M.C. Humberto Figueroa Martinez, M.C. Aida Lucina González Lara Dr. Moisés Hinojosa Rivera** y al **M.C. Esteban Báez Villarreal** por su gran apoyo a través de la FIME para terminar la maestría.

A la **M.C. Edith Luévano Hipólito** por otorgarme los datos experimentales, información del proceso, asesoría y apoyo en la investigación.

Sea el estudio nuestra única esperanza;
Amemos la virtud, niños queridos,
Que con ciencia y virtud el hombre alcanza
Años preciosos de ventura henchidos

Al estudio, delicia de los sabios,
Consagrad lo mejor de vuestra vida,
Y acercará la ciencia a vuestros labios
La copa del placer apetecida

La ciencia, niños, nos dará renombre;
Miremos el estudio con cariño,
Porque la ciencia al niño vuelve hombre,
Y la ignorancia al hombre vuelve niño.

Fragmento de "Virtud y ciencia" de Antonio Plaza

ÍNDICE GENERAL

Resumen	1
Capítulo 1.	
Introducción	3
1.1. Antecedentes	3
1.2. Inteligencia Artificial	5
1.2.1. Redes Neuronales Artificiales (RNA)	7
1.3. Fotocatálisis Heterogénea	9
1.4. Hipótesis	10
1.5. Objetivos	11
1.5.1. Objetivo general	11
1.5.2. Objetivos particulares	11
Capítulo 2.	
Metodología	12
2.1. Funcionamiento de la RNA	12
2.2. Recolección de datos experimentales de la síntesis de $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$	17
2.3. Proceso de entrenamiento	20
2.4. Proceso de generación de superficies de respuesta	21
Capítulo 3.	
Experimentación	24
3.1. Modelos de respuesta y configuración	24
3.2. Entrenamiento	26
3.3. Pruebas y análisis del modelo	30
Capítulo 4.	
Resultados	36
4.1. Generación de las superficies de respuesta	36
4.1.1. Superficie de respuesta para muestras irradiadas con 60 minutos de ultrasonido	37
4.1.2. Superficie de respuesta para muestras irradiadas con 120 minutos de ultrasonido	38
4.1.3. Superficie de respuesta para muestras irradiadas con 180 minutos de ultrasonido	39
4.2. Utilización de las superficies de respuesta	40

Capítulo 5.	
Conclusiones	41
Referencias	44
Apéndice A	48

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.	Grupo de datos experimentales.	24
Tabla 2.	Matriz de configuración de parámetros	27
Tabla 3.	Parámetros de optimización de la RNA.	28
Tabla 4.	Comparación de datos reales contra simulados.	31
Tabla 5.	Conjunto de datos modelados con 60 minutos de exposición ultrasónica.	33
Tabla 6.	Conjunto de datos modelados con 60 minutos de exposición ultrasónica.	34
Tabla 7.	Conjunto de datos modelados con 60 minutos de exposición ultrasónica.	35

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.	Enfoques de la Inteligencia Artificial.	5
Figura 2.	Las neuronas en un área pequeña de tejido cerebral, se revela a través de un proceso conocido como Tinción de Golgi, en el que un subconjunto aleatorio de neuronas se vuelven de color oscuro.	13
Figura 3.	Dibujo de una neurona, se observa el núcleo celular, las dendritas y axones. Entre las dendritas existen las sinapsis entre otras neuronas. El axón es el proceso de salida principal y puede extenderse a cierta distancia antes de hacer contacto con otras neuronas.	13
Figura 4.	Neurona artificial	14
Figura 5.	Modelo icónico de la solución obtenida para obtener γ - Bi_2MoO_6	17
Figura 6.	Modelo icónico del baño de ultrasonido convencional.	18
Figura 7.	Equipo utilizado para el tratamiento térmico.	19
Figura 8.	Diagrama de pasos para la síntesis del oxido semiconductor	19
Figura 9.	Reactor fotocatalítico para evaluar el oxido γ - Bi_2MoO_6 en la degradación de Rodamina B.	20
Figura 10.	Opciones del método de interpolación en Minitab® 16	23
Figura 11.	Ventana de Minitab® 16	23
Figura 12.	Arquitectura de la RNA para modelar el tiempo de vida media	25
Figura 13.	Curva de entrenamiento	29
Figura 14.	Respuesta de entrenamiento y validación	29
Figura 15.	Grafica de error cuadrático medio	30

Figura 16. Superficie de respuesta a 60 minutos de radiación ultrasónica	37
Figura 17. Superficie de respuesta a 120 minutos de radiación ultrasónica	38
Figura 18. Superficie de respuesta a 180 minutos de radiación ultrasónica	39

RESUMEN

En el presente trabajo se ha utilizado una de las herramientas de las ciencias computacionales, la Red Neuronal Artificial (RNA) con el objetivo de optimizar y estudiar el comportamiento del proceso de síntesis del óxido $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$, este compuesto es reconocido como un eficiente fotocatalizador para la degradación de contaminantes orgánicos presentes en el medio acuoso.

Para la optimización y simulación de la síntesis de $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador se consideraron 3 variables las cuales corresponden a los 3 datos de entrada para la red neuronal artificial; la exposición a la irradiación ultrasónica, tiempo de calcinación y la temperatura de calcinación. Para evaluar los resultados de la síntesis y la eficiencia del fotocatalizador, se utilizó el tiempo en el que la concentración del contaminante utilizado (Rodamina B) se reduce a la mitad de la concentración inicial, llamado tiempo de vida media, este dato corresponde a la salida en la red neuronal artificial.

Un grupo de datos experimentales fueron introducidos a esta red de tipo perceptrón multicapa con una regla de retro propagación y una función de activación sigmoideal para simular los resultados y evaluar la eficiencia de la red y aprender el proceso. Al momento de evaluar los resultados se utilizó un porcentaje de error y se evaluó como eficiente, dependiendo del resultado al obtener la media de los porcentajes de error.

Se modificaron diferentes parámetros de la RNA como el número de neuronas, épocas, momento y constante de aprendizaje para obtener los resultados óptimos con el menor promedio de porcentaje de error.

Posteriormente se tomó una variable principal como referencia para realizar las gráficas de superficie de respuesta como medio de optimización. Se modificó una variable de entrada llamada tiempo de exposición a la irradiación ultrasónica y se mantuvo constante su valor en el grupo de datos experimentales para 3 tablas diferentes, por último se volvió a utilizar la red neuronal artificial ya entrenada para simular los datos necesarios para graficar las superficies de respuesta, con el objetivo de estudiar un poco más el comportamiento de la variable principal y optimizar el proceso sin tener que realizar los experimentos.

1.INTRODUCCIÓN

1.1 ANTECEDENTES

Actualmente la humanidad ha desarrollado y descubierto nuevas metodologías para resolver problemas con el objetivo de adquirir un estilo de vida más sencillo y práctico, en aras de aprovechar las nuevas tecnologías de las ciencias computacionales, el hombre fue resolviendo problemas más rápidamente cuando anteriormente le costaba más tiempo en encontrar una solución, desde problemas para el análisis de datos e información, reconocimiento de patrones o predicción de eventos, hasta su aplicación en áreas como la logística, procesos químicos e inclusive comportamientos sociales. Algunas de de estas nuevas técnicas de resolución de problemas tienen como característica seguir el modelo de los procesos biológicos de los seres vivos, particular y especialmente los que ocurren en el ser humano.

A partir de los años 50's fue naciendo una nuevo concepto de inteligencia que no precisamente provenía de un ser humano, y esto fue gracias a Alan Turing quien se preguntó si una máquina o computadora podía pensar y si era capaz de resolver problemas de tipo matemático con cierto grado de complejidad alto. Partiendo de esta idea Alan Turing se preguntó si una computadora pudiera pasar sin ser distinguida como tal y confundirse como un humano, entonces la computadora podía ser considerada como una máquina pensante y el resultado de esta prueba fue llamada la prueba de Turing [1]. Naciendo de esta manera las primeras bases de lo que hoy en día es llamada la Inteligencia Artificial (IA) la cual es una rama de las ciencias computacionales

cuyos fundamentos se basan en diversas áreas de estudio como la psicología, ingeniería, filosofía, matemáticas, por mencionar algunas. Las redes neuronales artificiales (RNA) son una de las diferentes herramientas de la inteligencia artificial que tiene como objetivo estructurar un nuevo sistema de aprendizaje gracias a la información adquirida constantemente durante el proceso de solución del problema y simulando el proceso de aprendizaje que existe en las neuronas del ser humano. Algunas otras de las herramientas de la IA son los algoritmos evolutivos, la lógica difusa, redes Bayesianas, regresión simbólica, entre otras.

En los últimos años se han hecho cada vez mas estudios científicos donde se utiliza la IA para resolver problemas en el campo de la industria, artes o medicina, y poco a poco las universidades y centros de investigación han ido implementando en sus programas de estudio temas de IA para así obtener una herramienta más a considerar en la resolución de problemas. En la industria y muy especialmente en la investigación es importante estar seguros de los resultados obtenidos en la experimentación para comprobar el trabajo realizado, por ejemplo se han reportado estudios donde se optimiza cierto proceso de soldadura utilizando una RNA [2], además es utilizada en el reconocimiento de patrones para el procesamiento de imágenes [3] y también ha sido utilizada para predecir la eficiencia de descontaminación en los procesos de tratamientos de aguas residuales [4]. Otras aplicaciones relacionadas con mejorar la calidad del medio ambiente han sido reportadas por Suman Dutta et al, donde han desarrollado un modelo gracias a una RNA para la absorción y reactividad fotocatalítica al utilizar el compuesto TiO_2 [5], también se ha medido la actividad fotocatalítica de la síntesis de partículas de TiO_2 utilizando una red neuronal artificial [6]. Filofteria Laura-Toma utilizaron redes neuronales artificiales para medir la eficiencia del proceso fotocatalítico del TiO_2 para la remoción de gases contaminantes de tipo NO_x en el aire [7].

1.2 INTELIGENCIA ARTIFICIAL

La inteligencia artificial se fragmenta en 4 enfoques diferentes, como se muestra en la figura 1.

Pensamiento humano	Pensamiento racional
Comportamiento humano	Comportamiento racional

Figura 1. Enfoques de la Inteligencia Artificial [8].

Los enfoques racionales están en función de su conocimiento, por lo tanto implica una combinación de las matemáticas y de la ingeniería mientras que el enfoque centrado en el comportamiento humano no debe de ser una ciencia empírica [8].

Como se menciona anteriormente, un punto de inflexión en la IA, es la proposición de Alan Turing en su histórico artículo de 1950 donde se cuestiona la habilidad de una máquina para poder pensar, el cual su objetivo es imitar el comportamiento humano y para comprobar su eficiencia tiene que ser probado por otro humano, si este mismo no es capaz de diferenciar si las respuestas de las preguntas planteadas son por un humano o una máquina, se considera esta prueba como satisfactoria. En la actualidad se sigue utilizando esta técnica para calificar si los sistemas son suficientemente inteligentes y uno ejemplo donde el enfoque del comportamiento racional ha conseguido un mejor resultado en

comparación de imitar el comportamiento humano es cuando los hermanos Orville y Wilbur Wright en el año de 1903 dejaron de imitar a las aves para poder volar y comprendieron los principios de la aerodinámica, en otras palabras dejaron de crear maquinas que parecían aves y empezaron a desafiar las leyes de la gravedad mediante la aeronáutica.

Los enfoques del comportamiento y pensamiento humano en la IA son estudiados por las ciencias cognitivas, como la lingüística o la filosofía. Históricamente las bases de la IA han tenido virtuosos descubridores donde es importante mencionar la filosofía y el silogismo de Aristóteles (384-322 a.C), las matemáticas y la lógica proposicional de George Boole (1815-1864) o el análisis Bayesiano de Thoma Bayes(1702-1761), en la economía sobresale la investigación operativa surgida de la Segunda Guerra Mundial que trajo como resultados los procesos de decisión de Markov por Richard Bellman (1957), la neurociencia donde en 1873 Camillo Golgi (1852-1934) desarrolló una técnica para observar las neuronas individualmente en el cerebro, en la psicología el físico alemán Hermann von Helmholtz (1821-1894) aplicó el método científico al estudio de la vista humana. Dentro de la ingeniería computacional existen trabajos como el diseño de la primera calculadora mecánica de Leonardo da Vinci (1452-1519) hasta la primera computadora de Alan Turing en 1940 con el propósito de descifrar mensajes alemanes en la Segunda Guerra Mundial, además, la teoría de control de James Watt (1736-1819) donde utiliza la retroalimentación para el control del motor de vapor el cual es otro de los fundamentos de la IA y por último la lingüística que en conjunto con la IA, se ha formado un campo llamado lingüística computacional [8]. Todos estos fundamentos de la IA han hecho crecer y consolidarse como un campo de estudio para comprender lo que los humano llamamos Inteligencia Artificial.

1.2.1 REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)

Desde su descubrimiento hasta la actualidad, la confiabilidad del uso de las redes neuronales artificiales ha pasado por momentos buenos y malos. En 1957 es un año que se considera un punto de inflexión para las RNA donde Frank Rosenblatt presentó el modelo perceptrón, el cual se sigue utilizando actualmente con algunas variantes

Una red neuronal artificial es una técnica inspirada por el procesamiento biológico de una neurona. Tiene una gran aplicación en muchas ciencias, con aplicaciones para predicción, reconocimiento de patrones y control de procesos por mencionar algunas. El entrenamiento de las redes neuronales es sensitivo al número de neuronas en la capa intermedia. Un desempeño mejor de una red neuronal en el ajuste datos puede ser alcanzado cuando se involucra un gran número de neuronas, sin embargo muchas neuronas en la capa intermedia pueden provocar una sobre ajuste. Encontrar el número óptimo de neuronas en la capa intermedia es un trabajo crucial durante el diseño de la red [5].

Las redes neuronales artificiales tienen algunas características deseables como robustez y precisión en la aproximación. La regresión lineal es ideal para explicar la relación entre variables (redes neuronales son cajas negras); sin embargo la precisión de la regresión es más baja que las redes neuronales en algunos casos [2]. Como se menciona anteriormente, en el trabajo de G. Fatemeh et al. [6] utilizaron una red neuronal para la optimización de síntesis del compuesto TiO_2 , otro eficiente fotocatalizador. Recientemente Filofteia-Laura

Toma et al. [7] han reportado el uso de una red neuronal para medir la eficiencia del fotocatalizador TiO_2 en relación con la eliminación de contaminantes en el aire como los NO_x , el cual confirma que una red neuronal artificial es una herramienta que predice la eliminación de estos contaminantes. En otros trabajos, algunos autores reportan el uso de una RNA para estudiar el proceso de purificación de agua por fotocatálisis homogénea y heterogénea [4], mostrando una efectiva y simple aproximación que describe el comportamiento de este tipo de procesos de descontaminación. Más recientemente A. R. Soleymani, et al. [9] reporta el uso de una RNA con un algoritmo de aprendizaje de retro propagación usando una función de activación de tipo “tansig” y “pureline” en la capa intermedia y de salida respectivamente, obteniendo resultados confiables para reproducir los datos experimentales y predecir el comportamiento del proceso de decoloración por fotocatálisis, un proceso similar al que se estudia en este trabajo, agregando la primicia de un nuevo tipo de método de síntesis de este compuesto poco estudiado en la actualidad como fotocatalizador.

La experimentación de nuevos procesos para la síntesis de compuestos químicos puede tener distintos objetivos; aminorar costos de producción, obtener una mejor eficiencia en la producción del compuesto, detectar errores de producción, etc. Al intentar una nueva metodología de síntesis no se conoce en su totalidad el resultado al modificar ciertas variables que afectan directamente al proceso. Este tipo de proceso no se considera lineal, sin embargo se puede aprender y conocer su comportamiento mediante herramientas estadísticas y computacionales. Tratando de obtener los mejores resultados se utilizan muchos recursos económicos y de tiempo, los cuales pueden ser aprovechados para nuevas investigaciones, experimentos o comprobaciones. Al utilizar una Red Neuronal Artificial para simular el proceso de síntesis del compuesto $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador, se está empleando una nueva metodología para modelar y simular resultados sin tener que recrear el experimento.

1.3 FOTOCATALISIS HETEROGENEA

Del griego φως (phōs, luz), κατά (katá, en todas sus partes) y λύσις (lýsis, disolución) se compone la palabra fotocátalisis y según el diccionario de la lengua española de la Real Academia Española, define la fotocátalisis como aumento de la velocidad de una reacción química por efecto de la luz o de otras formas de energía radiante. Mientras heterogénea se define como un compuesto de partes de diferente naturaleza.

Durante la última década, la fotocátalisis heterogénea se ha posicionado como una tecnología emergente para solucionar los problemas ambientales [14, 15]. Algunas de las ventajas más notables de la fotocátalisis heterogénea es que es una tecnología favorable al medio ambiente debido al uso de fotocatalizadores inertes e inoocuos (típicamente óxidos cerámicos), y la facilidad de la energía solar para activar el proceso fotocatalítico. De la misma manera, la fotocátalisis heterogénea es capaz de disminuir la concentración de contaminantes hasta niveles de concentración donde otras tecnologías fallan. Por estas razones, el uso de la fotocátalisis heterogénea se ha aplicado a la purificación de agua y aire. La alta actividad fotocatalítica del TiO_2 , bajo costo, y estabilidad química, ha posicionado a este material como un excelente fotocatalizador para aplicaciones comerciales. Sin embargo, su banda de energía prohibida (E_g) de 3.2 eV limita las aplicaciones adicionales del material en la región de luz visible ($\lambda > 390 \text{ nm}$). En la búsqueda de materiales semiconductores con actividad fotocatalítica bajo irradiación de luz visible, se han llevado a cabo esfuerzos importantes en la última década. Por ejemplo, el polimorfo del TiO_2 en fase anatasa se ha dopado con nitrógeno a fin de aumentar su absorción en el rango visible [16]. En otro enfoque, varios autores han propuesto alternativas óxidos de TiO_2 tradicional con alta actividad

fotocatalítica bajo irradiación de luz visible, tales como: $\text{In}_{1-x}\text{Ni}_x\text{TaO}_4$, CaIn_2O_4 , InVO_4 , BiVO_4 y $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ [17-22].

La eficiencia de proceso fotocatalítico depende de varios parámetros tales como el tiempo de vida media, cristalinidad, tamaño de partícula y área superficial. Estos parámetros pueden ser modificados dependiendo de las condiciones experimentales de síntesis para obtener el óxido semiconductor.

El beneficio de realizar la síntesis por ultrasonido es que es un método que se espera obtener el óxido a bajas temperaturas, respecto a los métodos tradicionales

En este trabajo el colorante orgánico rodamina B, fue seleccionado como un contaminante para estudiar la eficiencia del compuesto $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador. El parámetro utilizado para medir la eficiencia del proceso fotocatalítico fue el tiempo de vida media del colorante orgánico, que consiste en el tiempo en que la concentración del contaminante se reduce a la mitad.

1.4 HIPOTESIS

Un modelo del proceso de síntesis del compuesto $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador se puede crear utilizando una red neuronal artificial, y para modelar el proceso es necesario un grupo de datos experimentales obtenidos de este proceso químico. Una superficie de respuesta del proceso químico de síntesis se puede crear a partir del modelo representado con la red neuronal artificial y puede utilizarse como guía para optimizar la respuesta o salida del proceso de síntesis del óxido $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador.

1.5 OBJETIVOS

1.5.1 Objetivo General

Aplicar una red neuronal artificial para simular y optimizar el proceso de síntesis del compuesto $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador, estudiando el comportamiento de las variables de entrada.

1.5.2 Objetivos Particulares

- Entrenar la red neuronal artificial con los datos suficientes para que pueda aprender el proceso
- Evaluar los resultados de la red neuronal artificial mediante comparación de resultados reales utilizando métodos cuantitativos
- Simular y optimizar el proceso de síntesis de $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ proponiendo nuevos datos de experimentación
- Estudiar y evaluar el comportamiento de los resultados propuestos utilizando la metodología de la superficie de respuesta
- Comprobar que una red neuronal artificial es capaz de aprender el proceso de síntesis de un compuesto utilizado como fotocatalizador

2. METODOLOGÍA

2.1 FUNCIONAMIENTO DE LA RNA

Una RNA de tipo perceptrón multicapa con una regla de retro propagación se utiliza en este trabajo. Esta estructura consiste en un grupo de capas compuestas por una neurona. Cada neurona ejecuta un solo grupo de operaciones para emular las funciones de una neurona natural de una manera simple. La integración de las señales de entrada capturada por las dendritas es hecha por el núcleo de la neurona. La neurona artificial consiste en la suma de las señales de entrada representada por los elementos de un vector. El peso que regula cada señal de entrada emula la función de la sinapsis en las neuronas naturales. Cuando la señal de entrada es superior al nivel de umbral, una señal de excitación de salida es generada y dispersada a través de las otras neuronas por el axón. Por otro lado la señal de salida es inhibida. Esta operación está representada por una función de activación no lineal (por ejemplo la sigmoidea). Los pesos representan la sinapsis y determinan el desempeño de la red neuronal. La regla de aprendizaje es utilizada para actualizar estos pesos y muchas reglas de aprendizaje pueden ser consideradas; sin embargo, la regla de aprendizaje de retro propagación con momento es la comúnmente usada [10, 11]. En las siguientes figuras 2 y 3 se puede observar la estructura de una neurona natural

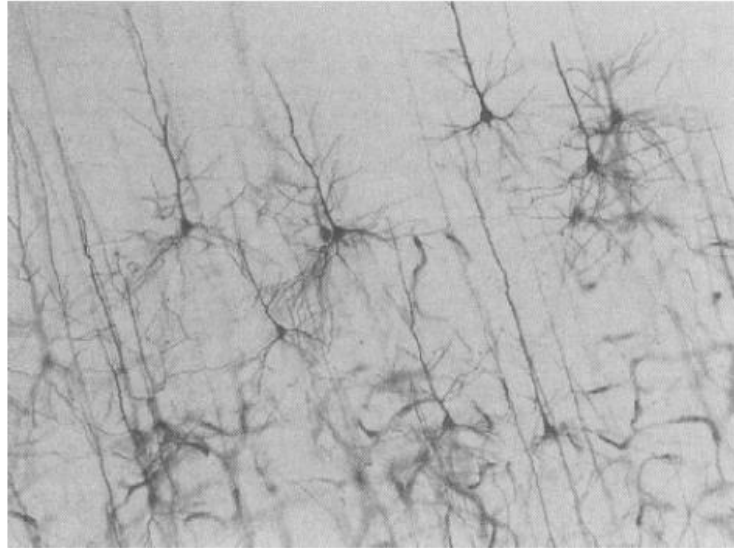


Figura 2. Las neuronas en un área pequeña de tejido cerebral, se revela a través de un proceso conocido como Tinción de Golgi, en el que un subconjunto aleatorio de neuronas se vuelven de color oscuro [12].

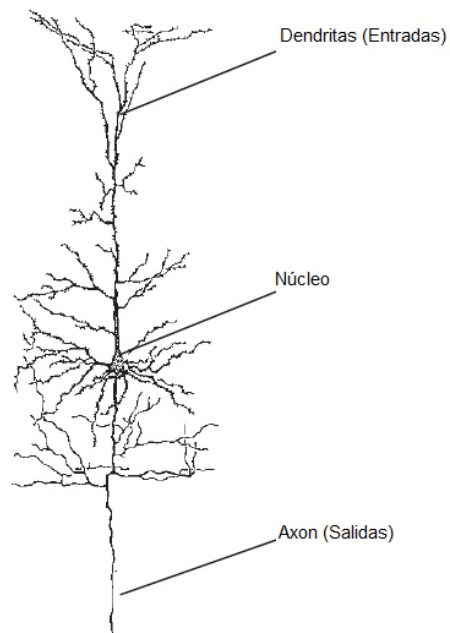


Figura 3. Dibujo de una neurona, se observa el núcleo celular, las dendritas y axones. Entre las dendritas existen las sinapsis entre otras neuronas. El axón es el proceso de salida principal y puede extenderse a cierta distancia antes de hacer contacto con otras neuronas [13].

El funcionamiento de la neuronal artificial en este trabajo consiste en utilizar la función de activación de tipo sigmoideal, donde las entradas del proceso con su respectivo peso, se unen en una sumatoria para después ser activadas por la función de activación, en la figura 4 se observa el modelo de una neuronal artificial, donde $Y = f_a (X_1W_1+ X_2W_2+ X_3W_3)$.

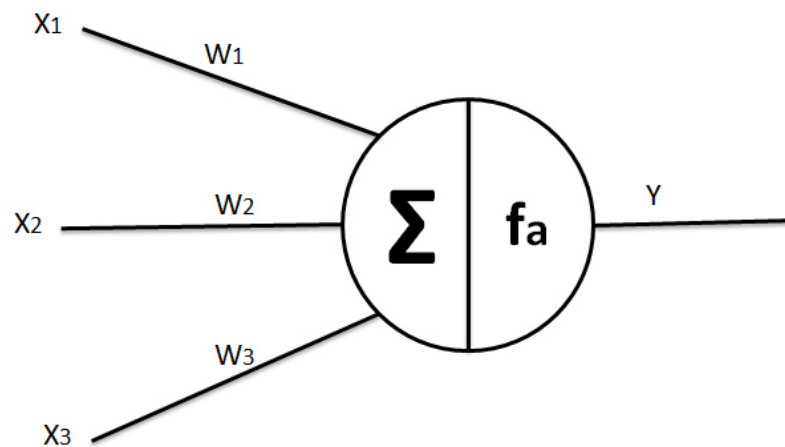


Figura 4. Neurona artificial

En las siguientes ecuaciones se ilustra la implementación de la regla de aprendizaje de retro propagación considerando solo un perceptron multicapa con entradas I , neuronas M en la capa intermedia y una salida Y_N . La función de activación usada es una sigmoideal, mostrada en la ecuación 1.

$$f_a(x) = 1/(1 + e^{-x}) \quad (\text{Ecuación 1})$$

Dos operaciones están definidas, la activación y entrenamiento de la red neuronal. El objetivo es el ajuste de los pesos en cada capa (Matrices WM y WO) para minimizar el error entre la respuesta deseada (representada en el

vector Y_D) y la respuesta de la red neuronal (Y_N) considerando el mismo vector de entrada (X). El primer paso es la activación de las neuronas intermedias que está hecho usando la ecuación 2 y 3.

$$N_M(m) = \sum_{i=1}^I W_M(m, i)X(i) \quad (\text{Ecuación 2})$$

$$R_M(m) = f_a(N_M(m)) \quad (\text{Ecuación 3})$$

N_M es el total de las neuronas en la capa intermedia, donde m es igual a $1:M$ y M es el numero de neuronas en la capa intermedia. I es igual $1:I$ donde I es el número de entradas de la red neuronal. Hay una sola salida Y_N por lo tanto la activación de una sola neurona es requerida (ecuación 4 y 5).

$$N_O = \sum_{m=1}^M W_o(m)R_M(m) \quad (\text{Ecuación 4})$$

$$Y_N = f_a(N_O) \quad (\text{Ecuación 5})$$

R_M es un vector que representa la salida de cada neurona en la capa intermedia. El entrenamiento de una red neuronal esta hecho por el ajuste de la capa intermedia (WM) y las capas de salida (WO). Primero, el error entre la salida deseada Y_D y la salida del a red neuronal Y_N es calculada en la ecuación 6. El ajuste del peso esta hecho en la ecuación 7. El cálculo del momento requiere los valores de los pesos antes del ajuste, entonces esta mostrado en la ecuación 8.

$$\delta_o = (Y_{Dp} - Y_{Np}) f'_a(N_o) \quad (\text{Ecuación 6})$$

$$W_o(m) \leftarrow W_o(m) + \eta \delta_o N_M(m) + \alpha W_{oA}(m) \quad (\text{Ecuación 7})$$

$$W_{oA}(m) = \eta \delta_o N_M m \quad (\text{Ecuación 8})$$

Los pesos internos requieren de una señal de error calculada usando la ecuación 9. Este cálculo necesita la derivada de la función de activación (ecuación 10). Los pesos intermedios son actualizados utilizando la ecuación 11 y los pesos antes del ajuste requerido usando al ecuación 12.

$$\delta_m(m) = f'_a(Nm(m)) \delta_o W_o(m) \quad (\text{Ecuación 9})$$

$$f'_a(x) = f_a(x)(1 - f_a(x)) \quad (\text{Ecuación 10})$$

$$W_M(m, i) \leftarrow W_M(m, i) + \eta \delta_m(m) X(i) + \alpha W_{MA}(m, i) \quad (\text{Ecuación 11})$$

$$W_{MA}(m) = \eta \delta_m(m) X(i) \quad (\text{Ecuación 12})$$

2.2 RECOLECCIÓN DE DATOS EXPERIMENTALES DE LA SÍNTESIS DE γ - Bi_2MoO_6

Para la recolección de datos experimentales que se necesitan para entrenar la red neuronal artificial, se sintetiza el fotocatalizador γ - Bi_2MoO_6 por coprecipitación asistida con irradiación ultrasónica, este es nuevo método de síntesis desarrollado con el objetivo de sintetizar de manera sencilla y económica este compuesto para degradar colorantes orgánicos en medio acuoso a baja temperatura y que además tenga alta cristalinidad, menor tamaño de partícula y área superficial relativamente grande en comparación con otros métodos de síntesis, esta propiedad en conjunto con el tiempo de vida media son útiles para determinar la eficiencia de un fotocatalizador.

Para este propósito dos soluciones acuosas son preparadas. En la primera se utiliza 9.1508 g de $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ [Aldrich 99.99%] disueltos en 100 mL de una solución acuosa de HNO_3 . La segunda solución es preparada disolviendo 1.7359 g de $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24}$ [Aldrich 99.99%] en 100 mL de agua destilada. La solución de nitrato de bismuto es agregada gota a gota a la solución con agitación vigorosa produciendo una suspensión amarilla (Figura 5). Durante la preparación, el pH de la solución resultante es ajustado a 3.0.

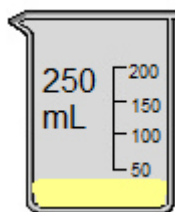


Figura 5. Modelo icónico de la solución obtenida para obtener γ - Bi_2MoO_6

Posteriormente, la solución se expone a radiación ultrasónica (70W, 40 kHz) en un baño de ultrasonido convencional por tiempos de 60, 120 y 180 minutos (Figura 6).

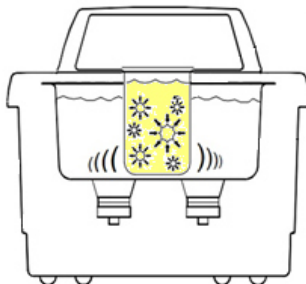


Figura 6. Modelo icónico del baño de ultrasonido convencional.

Terminado el tratamiento ultrasónico, la mezcla resultante es calentada a 100°C en una plancha eléctrica favoreciendo la lenta evaporación del solvente, hasta la formación de un sólido amarillo pálido. Con el fin de eliminar subproductos de reacción y favorecer la cristalización de la fase γ -Bi₂MoO₆, el material precursor es tratado térmicamente en aire a 300, 350, 400, 450 y 500°C durante 96 horas con una velocidad de calentamiento de 10°C/min (Figura 7), una experimento adicional del material precursor es sometido durante 24 horas al tratamiento térmico [23].



Figura 7. Equipo que se utiliza para el tratamiento térmico.

Se observa el diagrama de pasos de la síntesis del óxido semiconductor en la figura 8.

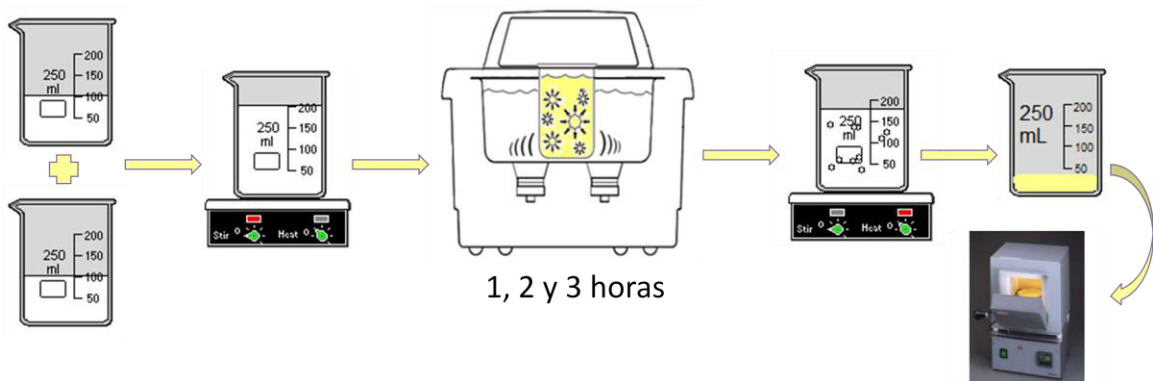


Figura 8. Diagrama de pasos para la síntesis del óxido semiconductor

Finalmente para evaluar el tiempo de vida medio del fotocatalizador, se utiliza un reactor fotocatalítico el cual se obtienen muestras por cada cierto periodo de tiempo (Figura 9).

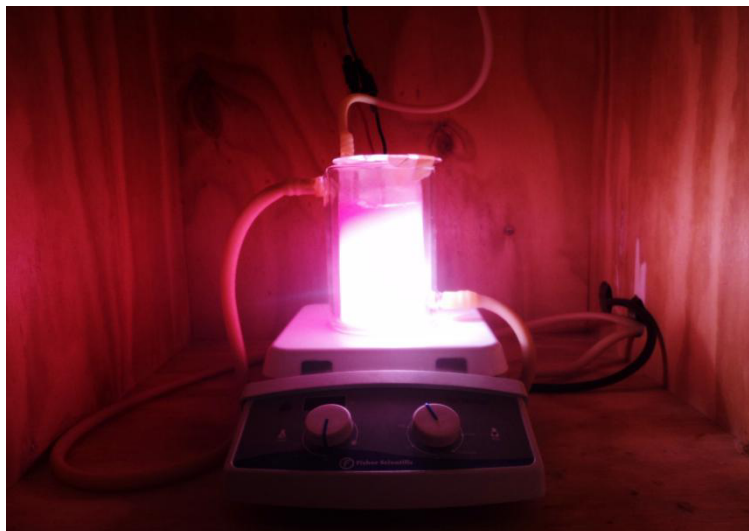


Figura 9. Reactor fotocatalítico para evaluar el óxido γ - Bi_2MoO_6 en la degradación de Rodamina B.

Transcurrido este tiempo, la lámpara es encendida y se toman alícuotas de 4 mL a diferentes intervalos de tiempo, las cuales son centrifugadas a 2500 rpm durante 10 minutos para precipitar el fotocatalizador. La solución que se obtiene se analiza mediante un espectrofotómetro UV-Vis (Perkin Elmer Lambda 35) a la longitud de onda de máxima absorción de la rodamina B (554 nm) para determinar su concentración y su tiempo de vida media [23].

2.3 PROCESO DE ENTRENAMIENTO

Posterior al obtener los datos experimentales ahora es necesario entrenar a la red de modo que vaya aprendiendo del proceso mismo. Por esta razón resulta una ventaja competitiva, ya que en este proceso de entrenamiento funciona como para aprender el proceso de síntesis de un fotocatalizador, como la predicción de ventas de una empresa.

La metodología de entrenamiento que se sigue en este trabajo se describe a continuación:

1. **Normalizar.-** En este proceso se toman todos los datos de entrada los cuales corresponden al tiempo de ultrasonido, la temperatura de calcinación y el tiempo de calcinación; y la salida el cual es el tiempo de vida media, con el fin normalizarlos de 0 a 1, el valor mínimo de todos los datos es acotado a 0 y el valor máximo a 1.
2. **Elección de datos.-** Los datos normalizados se desordenan para evitar sesgos de orden y se genera una base de datos para el entrenamiento de un 80% del total de los datos y el 20% restante se consideran para la validación y prueba del entrenamiento.
3. **Entrenamiento.-** En este paso la red utiliza los datos de entrenamiento aplicando las ecuaciones matemáticas 6, 7, 8, 9, 10, 11 y 12
4. **Validación.-** Utilizando el 20% de los datos se procede a realizar la validación de los resultados utilizando las ecuaciones 2, 3, 4 y 5.
5. **Utilizar la red neuronal artificial.-** Después de haber entrenado y validado la red, podemos utilizarla experimentado con diferentes datos o los mimos que ya hemos obtenido en el diseño experimental

2.4 PROCESO DE GENERACION DE SUPERFICIES DE RESPUESTA

En este nuevo método de síntesis del oxido semiconductor $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ se está proponiendo utilizar una radiación ultrasónica con 3 valores diferentes de exposición, de 60, 120 y 180 minutos. Los demás métodos tradicionales de síntesis no consideran esta variable, por lo tanto la innovación de este proceso consiste en aplicar esta radiación ultrasónica, sin embargo no existe aun mucha información al respecto de que tanto y cómo afecta directamente en los resultados.

A partir de la primicia de utilizar 3 valores diferentes de tiempo de exposición a la radiación ultrasónica, se realizaron 12 experimentos y con estos 12 datos se decide optimizar el proceso mediante 3 superficies de respuesta las cuales nos ayudan a conocer gráficamente el comportamiento de las otras 2 variables como lo son la temperatura en el tratamiento térmico y el tiempo de calentamiento cuando el tiempo en ultrasonido se mantuviera constante.

Para esta generación de superficies de respuesta, solo se tienen máximo 5 datos por cada tiempo diferente de exposición ultrasónica (US), por lo tanto se decide utilizar la red neuronal artificial ya entrenada en el proceso para generar nuevos datos simulados y que completar una tabla de 12 datos por cada tiempo de US. Por lo tanto en cada gráfica de superficie de respuesta se tienen 12 datos, los mismos que si se hubieran realizado en los experimentos, en total se obtienen con la red neuronal artificial 36 datos.

Se utiliza el software Minitab® en la versión 16.2.1 para generar la superficies de respuesta, en este software estadístico se tiene la opción de elegir entre 2 métodos de interpolación de datos, con el fin de completar los huecos de información que existen en la superficie a graficar. El método elegido de interpolación es el de distancia con valores de “Distance power” de 2 (Figura 10). En la figura 11 se puede observar la ventana ejemplo al estar generando las superficies de respuesta.

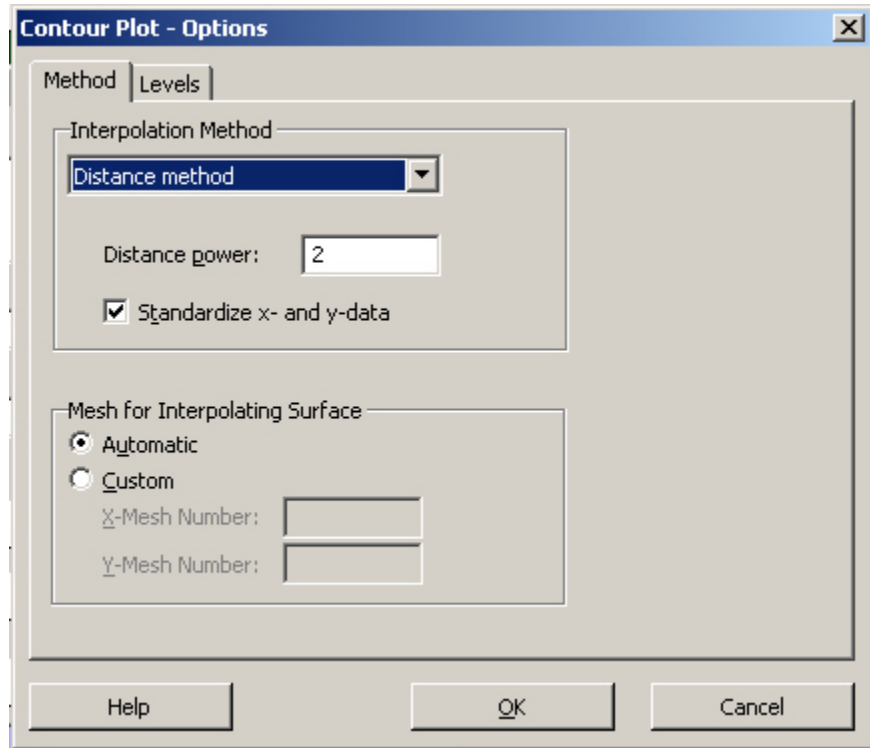


Figura 10. Opciones del método de interpolación en Minitab® 16

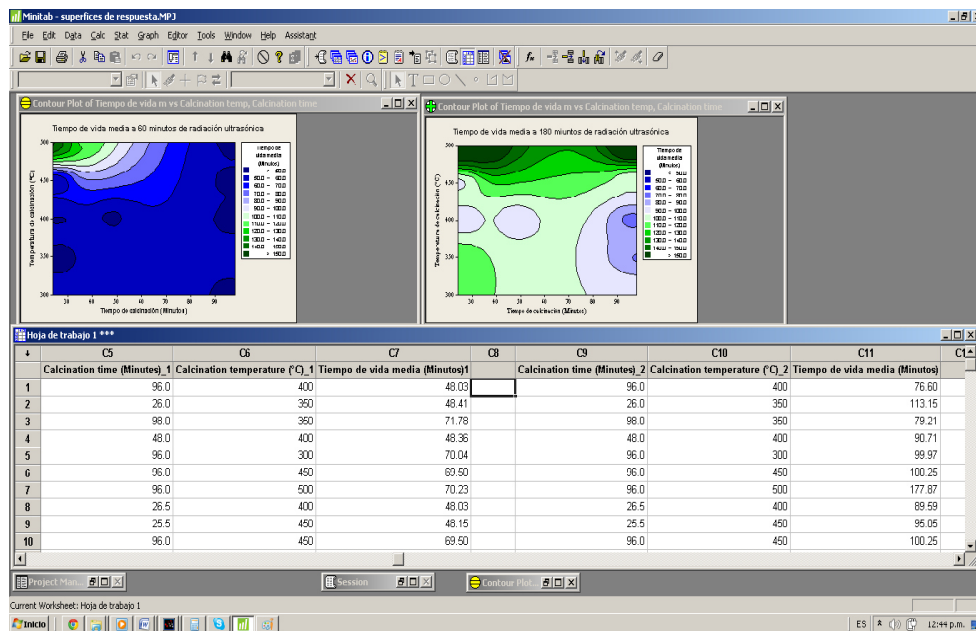


Figura 11. Ventana de Minitab® 16

3. EXPERIMENTACIÓN

3.1 MODELOS DE RESPUESTA Y CONFIGURACION

A partir del desarrollo de la síntesis de este material se obtienen diferentes resultados al cambiar las diferentes variables. Cabe resaltar que el desarrollo de este tipo de experimentos químicos tiene un costo de recursos económicos y de tiempo, es por esta razón que la cantidad de datos experimentales fue limitada a solo 12 muestras.

En la tabla 1 se muestra el grupo de datos experimentales que consiste en 12 muestras con el objetivo de sintetizar el material con la mayor actividad fotocatalítica y tener como objetivo el menor tiempo de vida media.

Tabla 1. Grupo de datos experimentales

Muestra	Tiempo de ultrasonido (min)	Tiempo de calcinación (h)	Temperatura de calcinación (°C)	Tiempo de vida media (min)
1	60	96	300	40.7
2	60	96	400	76.8
3	60	96	450	49.8
4	60	96	500	85.8
5	120	96	300	58.1
6	120	96	350	38.7
7	120	96	400	75.3
8	120	96	450	63.8
9	120	96	500	52.6
10	180	24	100	104.1
11	180	96	450	101.4
12	180	96	500	193.1

Para medir la eficiencia y obtener los valores de tiempo de vida media, los materiales se prueban como fotocatalizadores en la degradación de Rodamina B.

El software que se utiliza para la RNA es Scilab® en versión 5.3.3 con el algoritmo que se encuentra en el apéndice A. En esta RNA se compone de 3 capas; la capa de entrada, la capa intermedia y la capa de salida, donde la capa de entrada consiste de 3 variables; la exposición a la irradiación ultrasónica, tiempo de calcinación y la temperatura de calcinación (Figura 12).

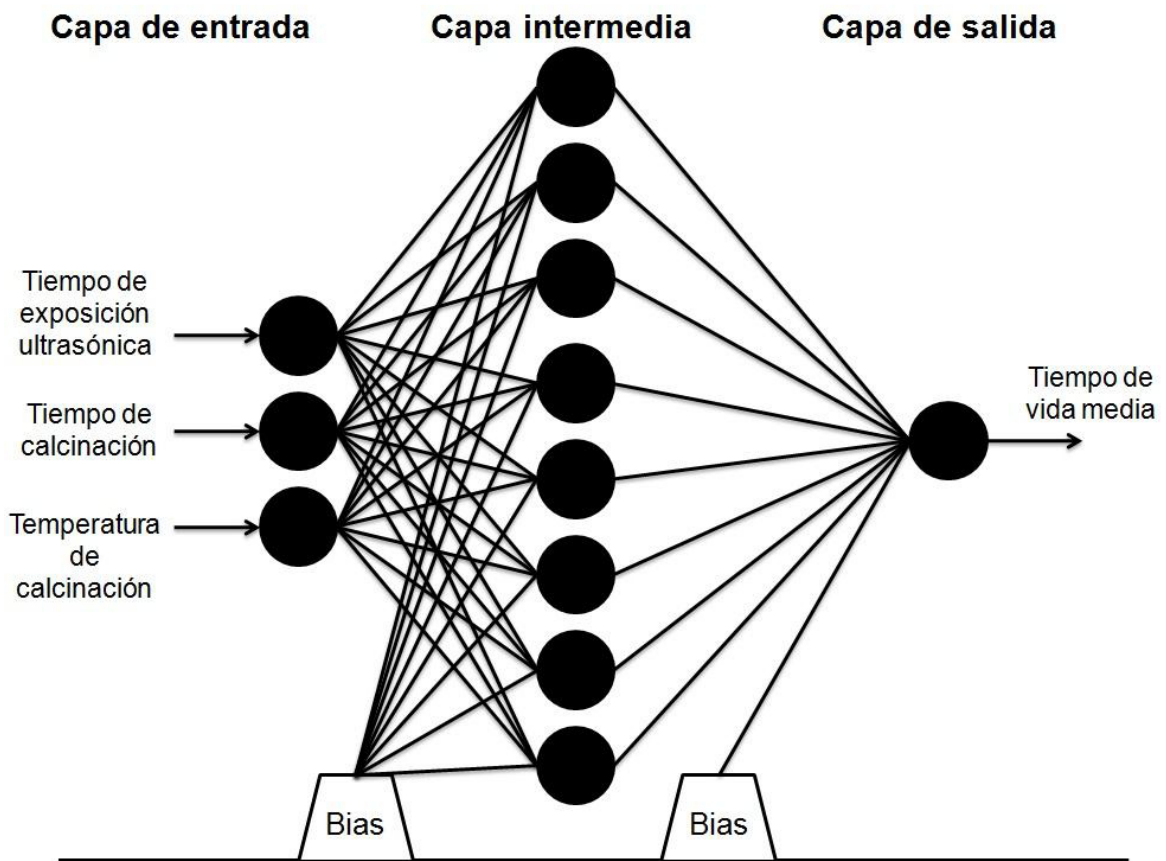


Figura 12. Arquitectura de la RNA para modelar el tiempo de vida media

Desde un principio se utilizan diferentes resultados de los experimentos, ya que algunos cambian gracias al modelado que nos da nuestra RNA y como resultados finales quedan estos datos para modelar la mejor respuesta, es importante destacar que esta paso para realizar el entrenamiento es una de las más importantes con el fin de obtener los mejores resultados y la mejor configuración de la red. Lo ideal es obtener un error cuadrático medio con un valor muy bajo en el entrenamiento ya que este valor representa que tan bien ha sido entrenada la RNA con los valores que le fueron alimentados. Además para poder comprobar la eficiencia de la simulación se comprueban los datos reales obtenidos contra los resultados modelados por la RNA.

3.2 ENTRENAMIENTO

Durante el proceso de entrenamiento es necesario trabajar con los parámetros cómo el momento y la constante de aprendizaje. Estos parámetros son parecidos a lo que sería la velocidad y aceleración en que va aprendiendo del proceso. Además la cantidad de neuronas en la capa intermedia es un factor determinante para su aprendizaje junto con la cantidad de iteraciones o épocas en la que será corrido este algoritmo. La combinación ideal después de múltiples intentos nos da como finalidad los que se utilizan en este proceso.

Se realiza el diseño experimental con diferentes valores para obtener la mejor configuración de parámetros, en la tabla 2 se muestra la matriz de valores que se utilizan. Se intenta no sobre ajustar los valores en el entrenamiento y tener el menor error cuadrático medio.

Tabla 2. Matriz de configuración de parámetros

Constante de aprendizaje	Momento	Épocas
.01	.01	1000
.10	.2	5000
.2	.5	10000
.25	.6	30000
.5	.8	50000
.7	.9	100000
.9	.99	200000

Como resultados finales para la configuración de los parámetros de la RNA se utiliza una constante de aprendizaje con un valor 0.25 y un momento con el valor 0.5, dando como resultado un error cuadrático medio de 0.0093708 en el proceso de entrenamiento al ser ejecutado en 50,000 épocas. Como se menciona anteriormente, la red tiene una función de activación de tipo sigmoideal y la capa de salida corresponde a la variable de tiempo de vida media, la información resumida de los parámetros se observa en la tabla 3.

Tabla 3. Parámetros de optimización de la RNA

Parámetro	Valor	Rango			Unidades
		Variable	Mínimo	Máximo	
Variables de entrada	3	Tiempo de calcinación	24	98	Minutos
		Exposición ultrasónica	60	180	Minutos
		Temperatura de calcinación	300	500	Grados Celsius
Variables de salida	1	Tiempo de vida media	38.7	193.1	Minutos
Arquitectura	Perceptrón multicapa				
Regla de aprendizaje	Retro propagación				
Función de activación	Sigmoidal				
Épocas	50,000				
Numero de neuronas en la capa intermedia	8				

La curva de entrenamiento que se obtiene con esta configuración de parámetros se puede observar en la figura 13, donde en el eje de las ordenadas se observa el valor del error cuadrático medio y en el eje de las abscisas se percibe el número de épocas en las que fue corrido el proceso.

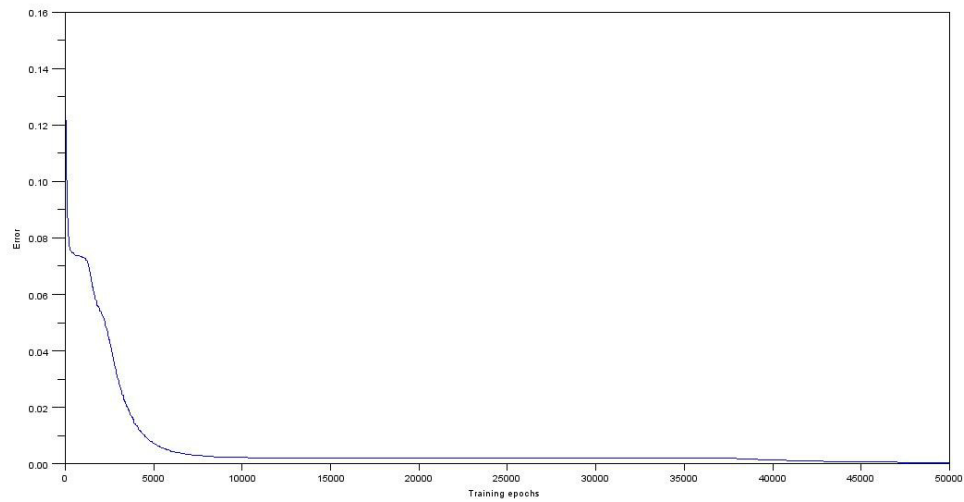


Figura 13. Curva de entrenamiento

La respuesta de la RNA considerando el entrenamiento y la validación de los datos se muestra en la figura 14, donde se observa en los puntos negros los valores reales y en las líneas azules los predichos en el entrenamiento.

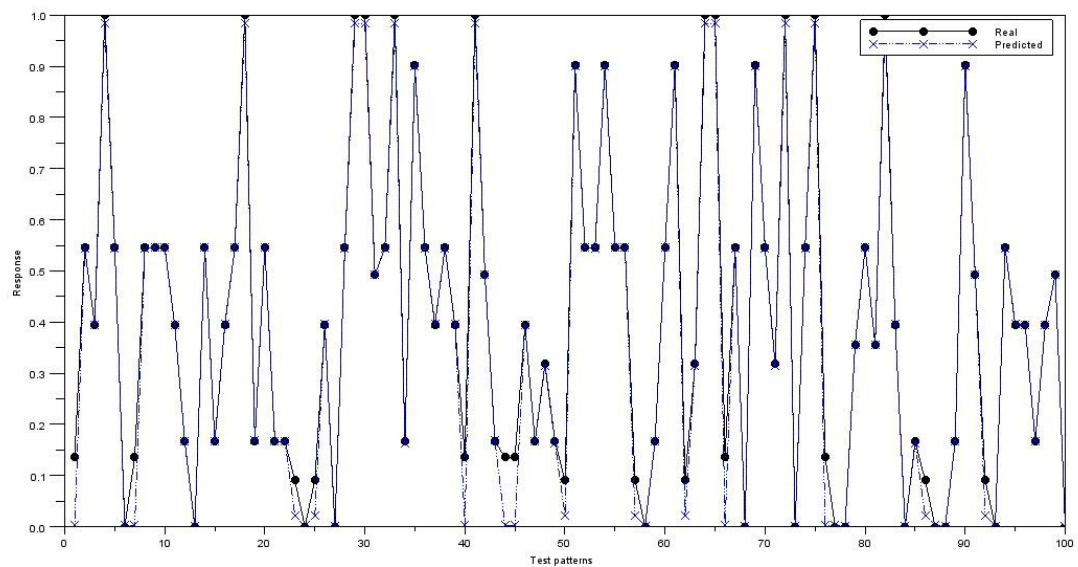


Figura 14. Respuesta de entrenamiento y validación

El error cuadrático medio y en comparación con los datos reales y los predichos se pueden ver la figura 15, mostrando una similitud entre las 2 graficas.

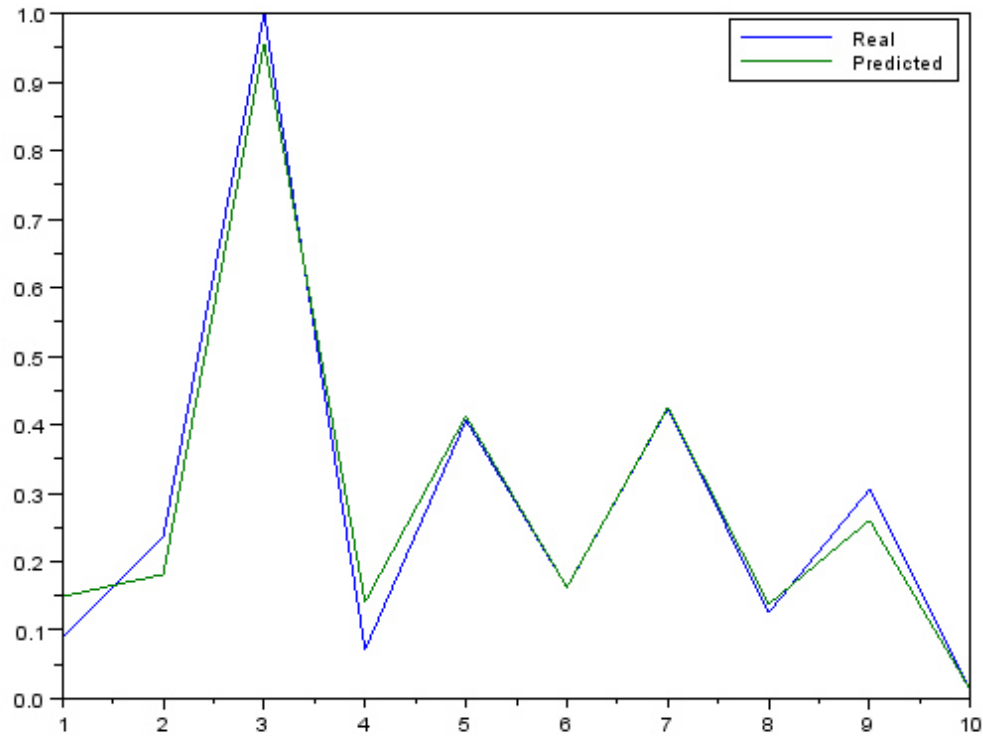


Figura 15. Grafica de error cuadrático medio

3.3 PRUEBAS Y ANÁLISIS DEL MODELO

La primera parte de la prueba consiste en simular el tiempo de vida media con los mismos valores de los parámetros de síntesis obtenidos en el grupo de datos experimentales, estos valores obtenidos a partir del entrenamiento de la RNA se observan en la tabla 4, donde se calcula el porcentaje de error de cada valor con respecto al valor real y posteriormente el promedio de los porcentajes de error de los datos reales y los datos simulados. Se puede observar principalmente el promedio del porcentaje de error de todos los datos el cual es

de 14.87%, este valor es considerablemente bueno para el objetivo planeado, sin embargo existen valores con un gran porcentaje de error de 39.05 % y 37.67% que no están siendo bien aprendidos. Por otro lado existen valores muy bajos en el porcentaje de error de 0.49% y 0.10%, esto quiere decir que los resultados en esas muestras son asertivas con respecto al valor real.

Tabla 4. Comparación de datos reales contra simulados

Muestra	Tiempo de ultrasonido (min)	Tiempo de calcinación (h)	Temperatura de calcinación (°C)	Tiempo de vida media real (min)	Tiempo de vida media simulado (min)	Porcentaje de error
1	60	96	300	40.7	40.9	0.49%
2	60	96	400	76.8	70.6	8.78%
3	60	96	450	49.8	79.9	37.67%
4	60	96	500	85.8	86.9	1.27%
5	120	96	300	58.1	45.2	28.54%
6	120	96	350	38.7	52.1	25.72%
7	120	96	400	75.3	61.1	23.24%
8	120	96	450	63.8	71.2	10.39%
9	120	96	500	52.6	86.3	39.05%
10	180	24	100	104.1	104	0.10%
11	180	96	450	101.4	102.1	0.69%
12	180	96	500	193.1	188.4	2.49%
					Promedio	14.87%

En esta parte experimental para obtener los resultados más cercanos a los reales, es necesario realizar una evaluación de los datos mediante el porcentaje de error de cada uno de los resultados, sin embargo para poder estudiar y optimizar el comportamiento de este proceso químico se procede a realizar unas superficies de respuesta con el fin de predecir el comportamiento. Para esto se decide dejar como valor constante la variable de entrada de tiempo de exposición ultrasónica ya que como se observan en el grupo de datos

experimentales existen 3 valores diferentes de 60, 120 y 180 y no en todos de ellos se realizan experimentos conjugando todas las combinaciones posibles. Por ejemplo en la variable de tiempo de calcinación se tienen 2 valores distintos, pero en la mayoría prevalece solo el valor de 96 horas y solo en un experimento se utilizo 24 horas el cual nos sirve para conocer el comportamiento en ese rango, además en la variable de temperatura de calcinación se utilizan 6 valores diferentes y en conjunto con las otras 2 variables se pueden simular nuevos resultados sin necesidad de realizar los experimentos, y así optimizar el proceso del uso de recursos como energía para el tratamiento térmico, exposición a la radiación ultrasónica y el tiempo invertido en la preparación del material.

Tenemos un total de 36 combinaciones posibles por realizar y conocer el resultado, de estas 36 combinaciones posibles 12 de ellas ya se conocen por el hecho de haber realizado el experimento químico y aun así se simulan, mientras tanto las restantes se simulan en la RNA, donde se muestran los resultados en las tablas 5, 6 y 7.

Tabla 5. Conjunto de datos modelados con 60 minutos de exposición ultrasónica

Combinación	Tiempo de ultrasonido (min)	Tiempo de calcinación (h)	Temperatura de calcinación (°C)	Tiempo de vida media simulado (min)
1	60	96	300	40.9
2	60	96	400	70.6
3	60	96	450	79.92
4	60	96	500	86.9
5	60	96	300	40.9
6	60	96	350	70.6
7	60	96	400	70.6
8	60	96	450	79.92
9	60	96	500	86.9
10	60	24	100	41.37
11	60	96	450	79.92
12	60	96	500	86.9

En la tabla 5 se observan que cuatro de los valores ya han sido previamente realizados experimentalmente, de estos cuatro valores la combinación 3 es la que tiene un porcentaje de error más grande y la combinación 1 muestra el porcentaje de error menor.

Tabla 6. Conjunto de datos modelados con 120 minutos de exposición ultrasónica

Combinación	Tiempo de ultrasonido (min)	Tiempo de calcinación (h)	Temperatura de calcinación (°C)	Tiempo de vida media simulado (min)
1	120	96	300	45.2
2	120	96	400	61.1
3	120	96	450	71.2
4	120	96	500	86.3
5	120	96	300	45.2
6	120	96	350	52.17
7	120	96	400	61.1
8	120	96	450	71.2
9	120	96	500	86.3
10	120	24	100	40
11	120	96	450	71.2
12	120	96	500	86.3

En esta tabla 6 contiene cinco valores que ya conocemos su valor real, por lo tanto esta tabla es la que tiene el contenido experimental mayor enriquecido.

Tabla 7. Conjunto de datos modelados con 180 minutos de exposición ultrasónica

Combinación	Tiempo de ultrasonido (min)	Tiempo de calcinación (h)	Temperatura de calcinación (°C)	Tiempo de vida media simulado (min)
1	180	96	300	39.9
2	180	96	400	50
3	180	96	450	102.1
4	180	96	500	188.4
5	180	96	300	39.9
6	180	96	350	42.1
7	180	96	400	50
8	180	96	450	102.1
9	180	96	500	188.4
10	180	24	100	104
11	180	96	450	102.1
12	180	96	500	188.4

Por último la tabla 7 se destaca que en la combinación 10 el valor de porcentaje de error es el menor de todas las combinaciones posibles.

4.RESULTADOS

4.1 GENERACION DE LAS SUPERFICIES DE RESPUESTA

En este trabajo se utilizan superficies de respuesta para estudiar el comportamiento del tiempo de vida media. Este tipo de metodología de superficies de respuesta nos permite conjugar las 3 variables importantes en este proceso químico, donde podemos analizar y modelar la variable de interés, en este caso el tiempo a la exposición a la radiación ultrasónica de la solución que contiene las sales metálicas. Como se menciona anteriormente para realizar este tipo de superficies de respuesta se utiliza el software estadístico Minitab® en la versión 16. Para una mejor visualización se utiliza la gráfica de contornos con diferentes colores y el método de interpolación de punto a punto utilizado fue el de distancia. En el eje vertical (y) de la superficie de respuesta se encuentra el tiempo de calcinación, mientras que en el eje (x) se muestra la temperatura de calcinación. En todas las superficies de respuesta se encuentran dividida en 12 rangos equitativos con una resolución de 10 unidades por rango, con el fin de tener una comparación imparcial entre cada una de las gráficas de contornos que representaran a las superficies de respuesta.

4.1.1 SUPERFICIE DE RESPUESTA PARA MUESTRAS IRRADIADAS CON 60 MINUTOS DE ULTRASONIDO

La superficie de respuesta con una constante de 60 minutos de radiación ultrasónica que se muestra en la figura 16, donde se observa que el tiempo de vida media a temperaturas mayores y tiempos de calcinación bajos, resultan en un tiempo de vida media mayor, el cual no es el objetivo principal de la síntesis de este compuesto. Recordando que un tiempo de vida media con un valor mínimo posible es el mejor resultado para el proceso de síntesis, en conjunto con otras propiedades las cuales no se mencionan en este trabajo por considerarse ajenas a estas variables de entrada y de salida que se están optimizando.

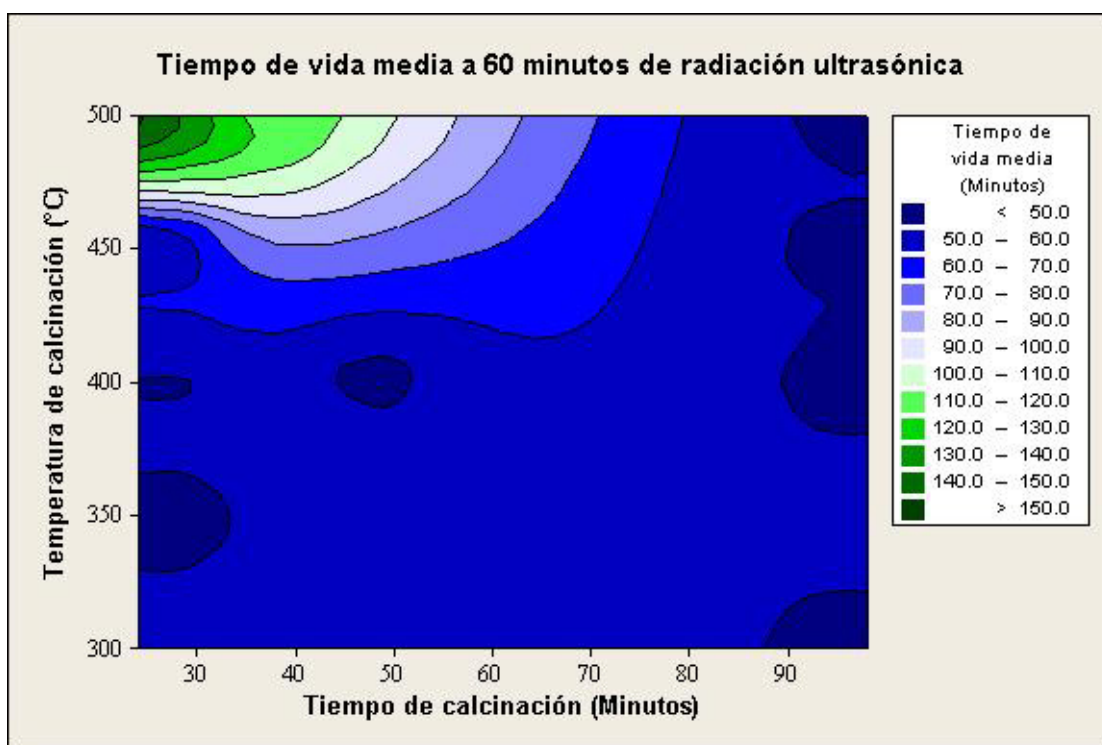


Figura 16. Superficie de respuesta a 60 minutos de radiación ultrasónica

Las regiones más oscuras que se ven en la figura 16 nos dan indicios de que existe un bajo tiempo de vida media, por lo tanto con esta combinación de

valores se pueden realizar más experimentos de síntesis, sin embargo hay que observar antes las siguientes superficies de respuesta con los diferentes tiempos de exposición ultrasónica.

4.1.2 SUPERFICIE DE RESPUESTA PARA MUESTRAS IRRADIADAS CON 120 MINUTOS DE ULTRASONIDO

En la superficie de respuesta de 120 minutos de exposición a radiación ultrasónica que se observa en la figura 17 hay una disminución en las regiones de tiempo de vida media mayores y persisten las mismas regiones donde el tiempo de vida media es menor. En este tipo de graficas es muy importante observar el comportamiento y forma de las regiones al ir cambiando la variable principal

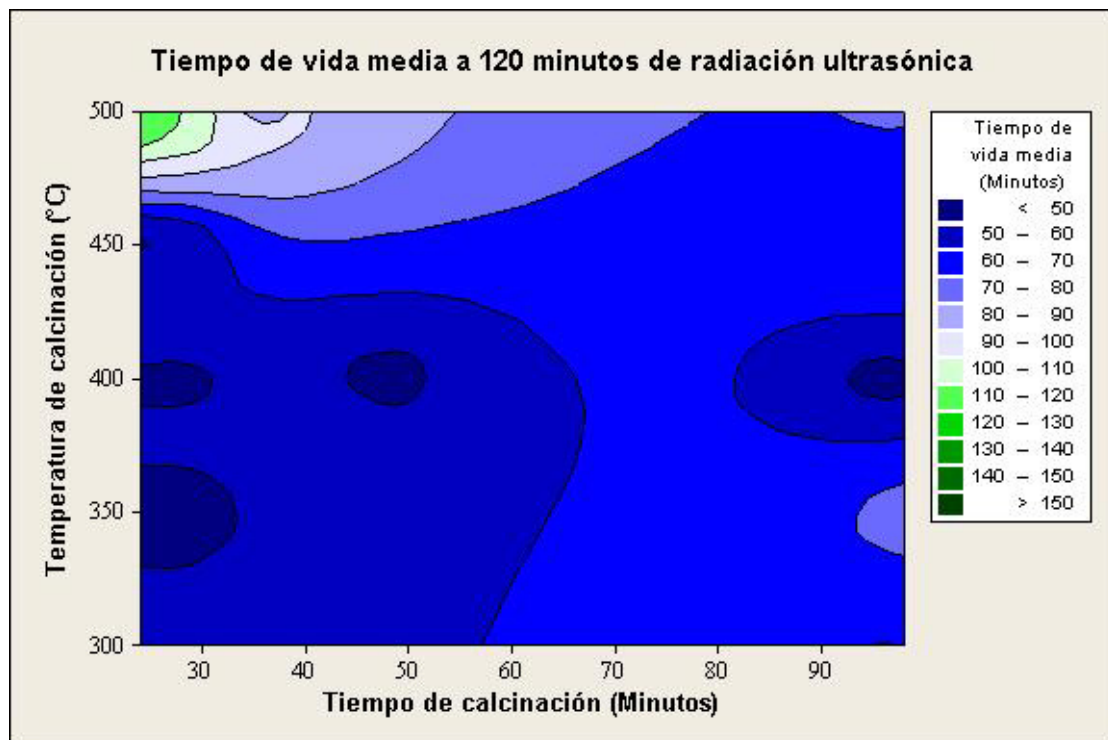


Figura 17. Superficie de respuesta a 120 minutos de radiación ultrasónica

4.1.3 SUPERFICIE DE RESPUESTA PARA MUESTRAS IRRADIADAS CON 180 MINUTOS DE ULTRASONIDO

Por último, en la superficie de respuesta con 180 minutos de radiación ultrasónica (figura 18), claramente se vuelven a observar las mismas regiones donde el tiempo de vida media es menor, pero en general los tiempo de vida media en esta grafica de superficie de respuesta son aún mayores que las 2 gráficas anteriores

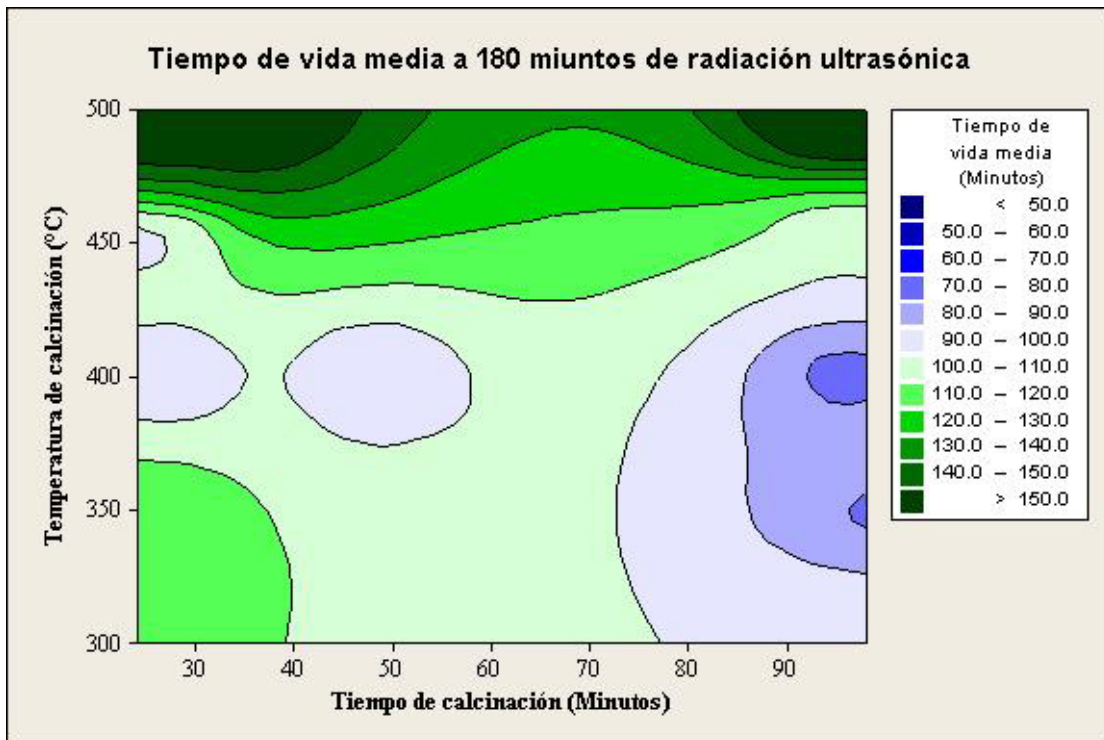


Figura 18. Superficie de respuesta a 180 minutos de radiación ultrasónica

4.2 UTILIZACION DE SUPERFICES DE RESPUESTA

Finalmente las superficies de respuesta han sido generadas, y es momento de utilizarlas como método de optimización.

Por ejemplo:

- Conocemos que el mejor resultado es obtener el menor tiempo de vida media, y en la figura 17 de la superficie de respuesta con 120 minutos de ultrasonido, podemos predecir que si mantenemos el valor de los 400°C por un tiempo de 30 minutos es posible obtener un tiempo de vida media menor al aplicarle anteriormente los 120 minutos de radiación ultrasónica.
- Por otro lado es conocido también que el tiempo de vida media no es el único valor que importa en el momento de sintetizar este tipo de compuestos, por ejemplo se sabe que a los 180 minutos de ultrasonido es cuando presenta la estructura cristalina, una propiedad deseada al sintetizar este fotocatalizador, sin necesidad de utilizar un tratamiento térmico posterior [23]. Por lo tanto en la gráfica 18 podemos obtener los valores de tiempo y temperatura de calcinación para obtener el menor tiempo de vida media y además la estructura cristalina deseada.
- Por último, en las 3 gráficas podemos observar que los valores cercanos a los 500°C en los tiempo de calcinación y con poco tiempo de calcinación es muy posible que se tengan los tiempo de vida media mayores, sin embargo esta información puede ser útil y válida para el interesado en la síntesis del oxido semiconductor $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ como fotocatalizador.

5. CONCLUSIONES

- Se modeló el proceso de síntesis del compuesto $\gamma\text{-Bi}_2\text{MoO}_6$ a partir de una red neuronal artificial de tipo perceptrón multicapa con una función de activación sigmoïdal
- A pesar de la poca cantidad de datos experimentales generados, fueran suficientes para predecir nuevamente estos datos por medio la red neuronal artificial, obteniendo un 14.87% de error como media en el grupo de datos. Se estima que teniendo una mayor cantidad de datos para ingresar a la red neuronal, se tendrá un mejor entrenamiento dando como resultado un menor error entre los datos reales y los modelados por la red neuronal
- A partir del entrenamiento de la red neuronal artificial, se modelaron las superficies de respuesta donde se tiene como variable principal el tiempo de exposición a la radiación ultrasónica, modificando con 3 valores diferentes todo los datos experimentales para generar 3 superficies de respuesta diferentes y así observar el comportamiento de las otras variables como el tiempo de calcinación y la temperatura de calcinación.
- Al observar las 3 superficies de respuestas generadas a partir de los datos obtenidos de la RNA, se puede observar un patrón de comportamiento en las regiones con el tiempo de calcinación mayores a 90 minutos y con una temperatura de calcinación cerca de la región de entre 350°C y 400°C; en estas regiones se observó que el tiempo de vida media es un poco menor

comparado a las otras regiones. Por otro lado en las 3 superficies de respuesta con tiempos de calcinación bajos y temperaturas muy altas, es donde se observó que los tiempos de vida media son muy altos, el cual no es el objetivo principal de un fotocatalizador, ya que este es una de las características para medir su eficiencia.

- Se utilizaron las superficies de respuesta como medio de optimización de este procesos químico, al poder visualizar gráficamente el comportamiento de las variables de entrada que afectan directamente a la salida del proceso.
- Para optimizar este tipo de proceso, se propone sintetizar el compuesto a tiempos de calcinación mayores a 90° C y con un tiempo de ultrasonido de 120 minutos, ya que en estas regiones será más fácil obtener un tiempo de vida medio menor. Sin embargo, esta no es la única propiedad a evaluar en un fotocatalizador, con estas superficies de respuesta en conjunto con otras propiedades mismos del compuesto, se obtendrá un mejor análisis de cuál es la mejor opción para sintetizar el γ -Bi₂MoO₆. Por mencionar algunas otras propiedades a evaluar se encuentran la presencia de una sola fase en el compuesto, la cristanilidad, el área superficial, tamaño de partícula, etc. Las cuales para optimizar el fotocatalizador con referencia a estas propiedades y no el tiempo de vida media, se debe de utilizar otra red neuronal, con otro entrenamiento y se obtendrán otros resultados que en conjunto con este trabajo se obtendría un modelo más completo de este nuevo proceso de síntesis.

-
- Se demostró que una red neuronal artificial en conjunto con alguna herramienta de estadística como lo es la superficie de respuesta, es una opción que ofrece buenos resultados para modelar, estudiar y optimizar un proceso no lineal químico.

Existen otras herramientas de la Inteligencia Artificial que pueden ayudar a optimizar este tipo de procesos o estudiar su comportamiento. Por ejemplo cuando se tenga una gran cantidad de datos e información sobre el proceso a optimizar se utiliza la herramienta de la minería de datos para obtener fácilmente la información que se necesita conocer, además la regresión simbólica se utiliza como otro método para simular datos.

Como futuro trabajo se pretende recopilar más información sobre el proceso químico de la síntesis de este fotocatalizador y entrenar nuevamente la red neuronal artificial para obtener mejores resultados, además se van utilizar estos datos utilizando ahora la regresión simbólica y comparar la eficiencia entre un método y otro. Además se recopilara más información de este compuesto químico y se buscara tener más información acerca de más compuestos que tengan la misma función de fotocatalizador con el fin de aumentar el conocimiento acerca del comportamiento de este tipo de compuestos.

REFERENCIAS

- [1] M. Tim. Jones. Artificial Intelligence: A systems approach. Infinity Science Press (2008) 1-2.
- [2] Luis M. Torres-Treviño, Felipe A. Reyes-Valdes, Victor López, Rolando Praga-Alejo. Multi-objective optimization of a welding process by the estimation of the Pareto optimal set. Expert systems with applications 38 (2011) 8045-8053.
- [3] Ramírez Q. Juan A. y Chacón M. Mario I. Redes neuronales artificiales para el procesamiento de imágenes, una revisión de la última década. Revista de ingeniería eléctrica, electrónica y computación. (2011) 9.
- [4] A.R. Khataee, M.B. Kasiri. Artificial neural networks modeling of contaminated water treatment processes by homogeneous and heterogeneous nanocatalysis. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 331 (2010) 86–100.
- [5] Suman Dutta, Simon A. Parsons, Chiranjib Bhattacharjee, Sibdas Bandhyopadhyay, Siddhartha Datta. Development of an artificial neural network model for adsorption and photocatalysis of reactive dye on TiO₂ surface. Expert Systems with Applications 37 (2010) 8634–8638.
- [6] Fatemeh Ghanbary, Nasser Modirshahla, Morteza Khosravi, Mohammad Ali Behnajady. Synthesis of TiO₂ nanoparticles in different thermal conditions and modeling its photocatalytic activity with artificial neural network. Journal of Environmental Sciences (2012), 24(4) 750–756
- [7] Filofteia-Laura Toma, Sofiane Guessasma, Didier Klein, Ghislain Montavon, Ghislaine Bertrand, Christian Coddet. Neural computation to predict TiO₂

photocatalytic efficiency for nitrogen oxides removal. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 165 (2004) 91–96

[8] Stuart J. Russell, Peter Norvig, *Inteligencia Artificial un enfoque moderno*. Prentice Hall (2004).

[9] A. L. Soleymani, J. Saien, H. Bayat. Artificial neural networks developed for prediction of dye decolorization efficiency with UV/K₂S₂O₈ process. *Chemical Engineering Journal*, (2011) 170 29–35.

[10] Haykin, S. *Neural networks: A comprehensive foundation*. Prentice Hall. (1999)

[11] Freeman, J. A., & Skapura, D. M. *Neural networks: Algorithms, applications, and programming techniques*. In: Addison-Wesley, (1991)

[12] Mark F. Bear, Barry W. Connors, Michael A. Paradiso. *Neuroscience: Exploring the Brain*. Lippincott Williams & Wilkins.(1996)

[13] Kuffler, Nicholls, & Martin. *From Neuron to Brain: A Cellular Approach to the Function of the Nervous System*. Sinauer Associates. (1984)

[14] M. N. Chong, B. Jin, C.W.K. Chow, C. Saint. Recent developments in photocatalytic water treatment technology: a review. *Water Research*, (2010) 44, 2997.

[15] S. Laufs, G. Burgeth, W. Duttlinger, R. Kurtenbach, M. Maban, C. Thomas, P. Wiesen, J. Kleffmann. Conversion of nitrogen oxides on commercial photocatalytic dispersion paints. *Atmospheric Environment*, (2010) doi:10.1016/j.atmosenv.2010.03.038.

-
- [16] S. Yang, L. Gao. New method to prepare nitrogen-doped titanium dioxide and its photocatalytic activities irradiated by visible light. *Journal of the American Ceramic Society*. (2004) 87 1803-1805.
- [17] R. Jain, M. Mathur, S. Sikarwar, A. Mittal. Removal of the Hazardous Dye Rhodamine B through Photocatalytic and Adsorption Treatments. *Journal of Environmental Management*, (2007). 85, 4, 956-964.
- [18] Z. G. Zou, J. H. Ye, K. Sayama, H. Arakawa. Direct Splitting of Water under Visible Light Irradiation with an Oxide Semiconductor Photocatalyst. *Nature*, (2001) 414, 625-627.
- [19] J. W. Tang, Z. G. Zou, J. H. Ye. Effects of Substituting Sr^{2+} and Ba_2^{2+} for Ca^{2+} on the Structural Properties and Photocatalytic Behaviors of CaIn_2O_4 . *Chemistry of Materials*, (2004) 16, 9, 1644-1649.
- [20] Z. Zou, J. Ye, K. Sayama, H. Arakawa. Photocatalytic and Photophysical Properties of a Novel Series of Solid Photocatalysts, Bi_2MNbO_7 ($\text{M}=\text{Al}_3^+, \text{Ga}^{3+}$ and In^{3+}). *Chemical Physics Letters*, (2001) 333, 1-2, 57-62.
- [21] A. Kudo, K. Omori, H. Kato. A Novel Aqueous Process for Preparation of Crystal Form-Controlled and Highly Crystalline BiVO_4 Powder from Layered Vanadates at Room Temperature and Its Photocatalytic and Photophysical Properties. *Journal American Chemistry Society*, (1999) 121, 49, 11459-11467.
- [22] H. Kato, M. Hori, R. Kouta, Y. Shimodaira, A. Kudo. Construction of ZScheme-Type Heterogeneous Photocatalysis Systems for Water Splitting into H_2 and O_2 under Visible Light Irradiation. *Chemistry Letters*, (2004). 33, 10, 1348-1349.

- [23] E. Lúevano-Hipólito. Síntesis por coprecipitación asistida con ultrasonido de γ - Bi_2MoO_6 , caracterización y evaluación de su actividad fotocatalítica. Universidad Autónoma de Nuevo León. (2011) 21.

APÉNDICE A

ALGORITMO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL

```
//Desnormalization
//Interval [0, 1] -> [LMIN, LMAX]

function a=desnormalization(Vn, LMIN, LMAX)

a=Vn*LMAX+LMIN*(1-Vn);

if a>LMAX
    a=LMAX;
end
if a<LMIN
    a=LMIN;
end

endfunction

//Normalization. Interval [LMIN, LMAX] -> [0, 1]

function a=normalization(Van, LMIN, LMAX)

a=(Van-LMIN)/((LMAX-LMIN)+0.000001);

if a>1
    a=1;
end
if a<0
    a=0;
end

endfunction

//Algoritmya Evolutionary computation 2004
//Proyect of simplification of algorithms
//Autor: Luis Torres T.
//All rights reserved
//May 2004
//Evolution Strategies and Genetic Algorithms
//Maxp
```

```
function [posmax, valmax]=maxp(V)

temp=size(V);
NTB=max(temp);

posmax=0;
valmax=0;
for b=1:NTB
    if V(b)>valmax
        valmax=V(b);
        posmax=b;
    end
end

endfunction

//Algoritmya Evolutionary computation 2004
//Proyect of simplification of algorithms
//Autor: Luis Torres T.
//All rights reserved
//May 2004
//Evolution Strategies and Genetic Algorithms
//Maxp

function [posmin, valmin]=minp(V)

temp=size(V);
NTB=max(temp);

posmin=0;
valmin=1000000000;
for b=1:NTB
    if V(b)<valmin
        valmin=V(b);
        posmin=b;
    end
end

endfunction

function [M]=shaking(M)

[NTPat NTCol]=size(M);
//Shaking the information
```

```

for i=1:10*NTPat
    pos1 = round(rand()*NTPat+0.5);
    pos2 = round(rand()*NTPat+0.5);

    temp=M(pos1,:);
    M(pos1,:)=M(pos2,:);
    M(pos2,:)=temp;
end

endfunction

function [DataTrain, DataVal1, DataVal2, MRange]=GenTrainVal(DataExp,
percent)
    //LMTT2006 Derechos reservados 2006

    //Generation of training and validation databases

    [NTPat NTCol]=size(DataExp);
    //Shaking the information

    for i=1:10*NTPat
        pos1 = round(rand()*NTPat+0.5);
        pos2 = round(rand()*NTPat+0.5);

        temp=DataExp(pos1,:);
        DataExp(pos1,:)=DataExp(pos2,:);
        DataExp(pos2,:)=temp;
    end

    //Normalization of information

    //Normalization of the data;
    [NTD NTCols]=size(DataExp); //columns of the data
    [NTR2,NTC2]=size(DataExp);
    DataN=zeros(NTR2,NTC2);
    //Matriz to save every range of the matrix
    MRange=zeros(NTCols,2);//1-Lmin, 2-Lmax
    for col=1:NTCols
        Lmax = max(DataExp(:,col)); //+max(DataExp(:,col))*0.1;
        Lmin = min(DataExp(:,col)); //-min(DataExp(:,col))*0.1;
        MRange(col,1)=Lmin; MRange(col,2)=Lmax;
        DataN(:,col)=(DataExp(:,col)-Lmin)./(Lmax-Lmin);
    end

    //Generation of Training data base
    //percent=0.8;

```

```
posel=round(percent*NTPat);
DataTrain = DataN(1:posel,:);

//Generation of validation Data Base
//Direct experimental data
DataVal1 = DataN(posel:NTPat,:);

//Random NTPat data
DataVal2=zeros(NTPat,NTCols);
for d=1:100
    pos=round(rand()*NTPat+0.5);
    DataVal2(d,:) = DataN(pos,:);
end

endfunction

function y=fa(x)

if x>20 x=20; end
if x<-20 x=-20; end
x = exp(-x);
y = 1 / ( 1 + x );

endfunction

function y=fad(x)

    y = fa(x)*(1-fa(x));

endfunction

function [m, ma, o, oa]=RandomWeights(TINP, TMID, TOUT)
//LMTT2006 Derechos reservados 2006
m = zeros(TMID,TINP);
o = zeros(TOUT, TMID);
ma = zeros(TMID, TINP);
oa = zeros(TOUT, TMID);

for x=1:TINP
    for y=1:TMID
        m(y,x) = rand() - 0.5;
```

```
end
end

for y=1:TMID
    for z=1:TOUT
        o(z,y)=rand() - 0.5;
    end
end

endfunction

function [sm, so, neto, netm]=ForwardBKG(VI, m, o)
//LMTT2006 Derechos reservados 2006
[TMID TINP] = size(m);
[TOUT TMID] = size(o);

neto=zeros(1,TOUT);
netm=zeros(1,TMID);

so = zeros(1,TOUT); //activation per ouput neuron
sm = zeros(1,TMID); //Activation per middle neuron

//TINP, TMID, TOUT,pause
for y=1:TMID
    netm(y)=0;
end
for y=1:TMID
    for x=1:TINP
        netm(y) = netm(y) + m(y,x) * VI(x);

    end
    sm(y) = fa(netm(y));
end

for z=1:TOUT
    neto(z)=0;
end
for z=1:TOUT
    for y=1:TMID
        neto(z) = neto(z) + o(z,y) * sm(y);

    end
    so(z) = fa(neto(z));
end

endfunction
```

```

function [em, eo]=BackwardBKG(DO, netm, m, o, so, neto)
//LMTT2006 Derechos reservados 2006
//desired output DO

[TMID TINP] = size(m);
[TOUT TMID] = size(o);

eo=zeros(1,TOUT);
em=zeros(1,TMID);
sum1=0;

    for z=1:TOUT
        eo(z)=(DO(z) - so(z))*fad(neto(z));
    end
    sum1=0;
    for y=1:TMID
        sum1=0;
        for z=1:TOUT
            sum1 = sum1 + eo(z)*o(z,y);
        end
        em(y) = fad(netm(y))*sum1;
    end
endfunction

function [m, ma, o, oa]=LearningBKG(VI, m, ma, sm, em, o, oa, eo, ETA,
ALPHA)
//LMTT2006 Derechos reservados 2006
[TMID TINP] = size(m);
[TOUT TMID] = size(o);

for z=1:TOUT
    for y=1:TMID
        o(z,y) = o(z,y) + ETA*eo(z)*sm(y) + ALPHA*oa(z,y);
        oa(z,y) = ETA*eo(z)*sm(y);
    end
end

for y=1:TMID

    for x=1:TINP
        m(y,x) = m(y,x) + ETA*em(y) * VI(x) + ALPHA*ma(y,x);
        ma(y,x) = ETA*em(y)*VI(x);
    end
end

```

```
endfunction
```

```
function [m, o, errcm, MRange]=TestNNBK(NTEpochs)
//Programador: Dr. Luis M. Torres Treviño
//Victor Lopez Experimental data
//LMTT2006 Derechos reservados 2006
clf

//x1 = Tiempo ultrasonido
//x2 = Tiempo de calcinación
//x3 = Temperatura de calcinación
//y = Vida Media
ExpData=[60 96 300 40.7
60 96 400 76.8
60 96 450 49.8
60 96 500 85.8
120 96 300 58.1
120 96 350 38.7
120 96 400 75.3
120 96 450 63.8
120 96 500 52.6
180 24 100 104.1
180 96 450 101.4
180 96 500 193.1
];
TINP = 3+1; //Neuronas de la capa de entrada mas polarización
TMID = 8; //Neuronas de la capa media
TOUT = 1; //Neuronas de la capa externa
ETA = 0.25; //Constante de aprendizaje : entre 0.25 y 0.01
ALPHA = 0.5; //parámetro de momento:menor que uno y positivo
//NTEpochs=20;
noe=0;
// o-out, r-resultante o esperado, m-medio, e-error, i-input
x=0;y=0;w=1;pat=0;cuenta=0;

[m, ma, o, oa]=RandomWeights(TINP, TMID, TOUT);

[DataTrain,DataVal1,DataVal2,MRange] = GenTrainVal(ExpData,0.8);
[NTPat NTC] = size(DataTrain);
XI = zeros(NTPat,TINP); //plus bias
YO = zeros(NTPat, TOUT);

//Input-Output Especifications
```

```

//x1 = tiempo ultrasonido
XI(:,1) = DataTrain(:,1);
//x2 = tiempo de calcinación
XI(:,2) = DataTrain(:,2);
//x3 = Temperatura de calcinación
XI(:,3) = DataTrain(:,3);
//Bias
XI(:,4) = DataTrain(:,3)*0+1;
//y = vida media
YO = DataTrain(:,4);
//End of the data structure

for z=1:TOUT
    eo(z) = 1;
end
Errg=[];
emin=10000000;

for noe=1:NTEpochs
    etotal=0;

    //Shaking
    M=[XI YO];

    [M] = shaking(M);

    [pat NTcol] = size(M);

    XI = M(:,1:NTcol-1);

    YO = M(:,NTcol);

    // aprendizaje obligatorio, patrón por patrón
    for w=1:NTPat

        VI=XI(w,:);
        DO = YO(w,:);
        [sm,so,neto,netm] = ForwardBKG(VI,m,o);
        [em,eo] = BackwardBKG(DO, netm, m, o, so, neto);
        [m, ma, o, oa] = LearningBKG(VI, m, ma, sm, em, o, oa, eo, ETA, ALPHA);

        // error:',eo(1),' salida n: ',so,' salida real: ',sr(1,w),
        etotal= eo*eo + etotal;
    end

    errcm = 0.5*sqrt(etotal);

```

```

//noe,errcm,

if errcm<emin
    emin=errcm;
end

Errg=[Errg emin];

end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
//Test Training
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

Ynn=[];
for w=1:NTPat
    VI=XI(w,:);
    DO = YO(w,:);
    [sm,so,neto,netm] = ForwardBKG(VI,m,o);
    a=[DO so];
    Ynn = [Ynn; a];
end

plot(Ynn)
legend('Real', 'Predicted'),pause

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
//Validation
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

//Define the structures for validation
[NTPat NTC] = size(DataVal2);
XI = zeros(NTPat,TINP); //plus bias
YO = zeros(NTPat, TOUT);

//Input-Output Especifications

//x1 = tiempo ultrasonido
XI(:,1) = DataVal2(:,1);
//x2 = tiempo calcinacion
XI(:,2) = DataVal2(:,2);
//x3 = temperatura calcinacion
XI(:,3) = DataVal2(:,3);
//Bias
XI(:,4) = DataVal2(:,3)*0+1;
//y = vida media

```

```

YO = DataVal2(:,4);
//End of the data structure

Ynn=[];
for w=1:NTPat
    VI=XI(w,:);
    DO = YO(w,:);
    [sm,so,neto,netm] = ForwardBKG(VI,m,o);
    a=[DO so];
    Ynn = [Ynn; a];
end

clf
plot(Ynn(:,1),'-k')
plot(Ynn(:,2),'x:b')
legend('Real', 'Predicted'),
xlabel('Test patterns')
ylabel('Response')

//Store the weights for the model.

//save m
//save o

// ///***Probar el modelo ****
// 'Probar modelo'
// pause
//
// VR=[255 27 55 15],
//
// //Normalize input
// for col=1:4
//     Lmax=MRange(col,1); Lmin=MRange(col,2);
//     VRN(col)=(VR(col)-Lmin)./(Lmax-Lmin);
// end
//
// //Give a input vector;
// VI = [VRN 1];
// [sm,so,neto,netm] = ForwardBKG(VI,m,o);
// //VO,pause
//
//
// //desnormalize
//
// R = desnormalization(so,MRange(6,2),MRange(6,1)),
pause

```

```
clf
plot(Errg)
xlabel('Training epochs')
ylabel('Error')

endfunction

function [R]=UseNNBK(X, m, o, MRange)

//tiempo ultrasonido
x1n = normalization(X(1),MRange(1,1),MRange(1,2));
//tiempo calcinacion
x2n = normalization(X(2),MRange(2,1),MRange(2,2));
//temperatura de calcinacion
x3n = normalization(X(3),MRange(3,1),MRange(3,2));

Xn = [x1n x2n x3n 1];

[sm,so,neto,netm] = ForwardBKG(Xn, m, o);

//Desnormalization
//vida media
R = desnormalization(so, MRange(4,1), MRange(4,2)),

endfunction
```