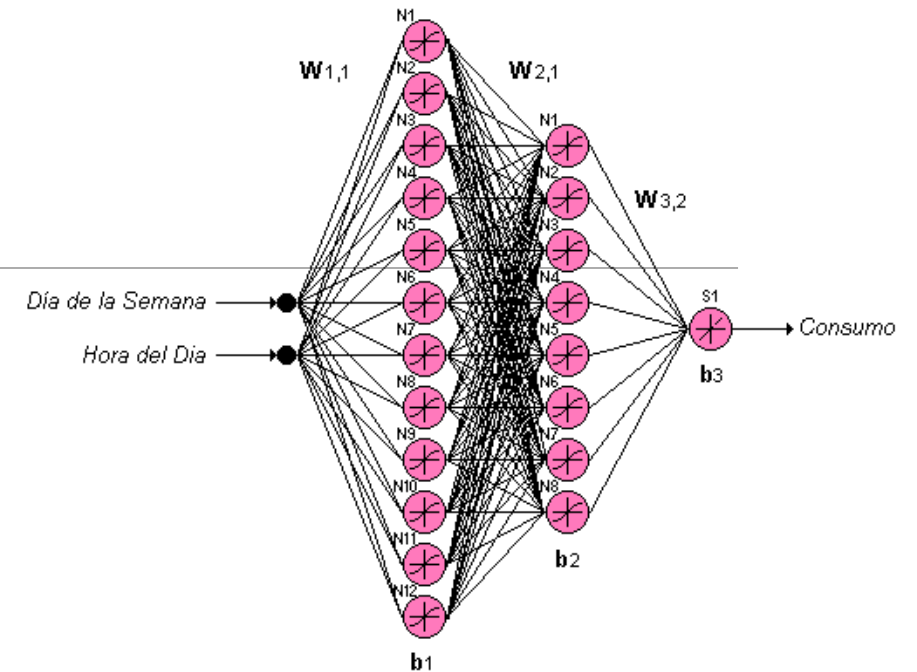
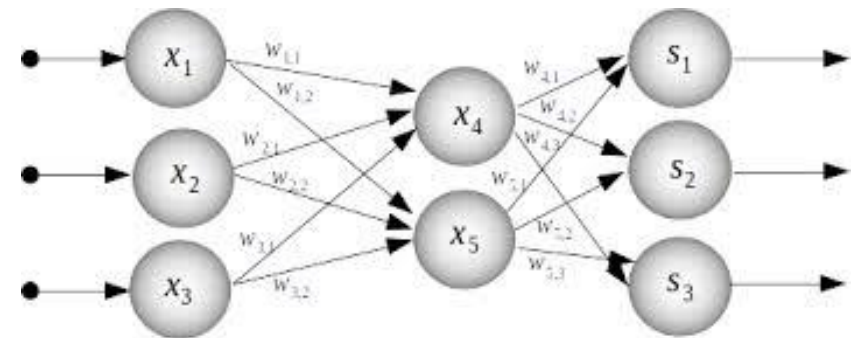


# Redes neuronales artificiales



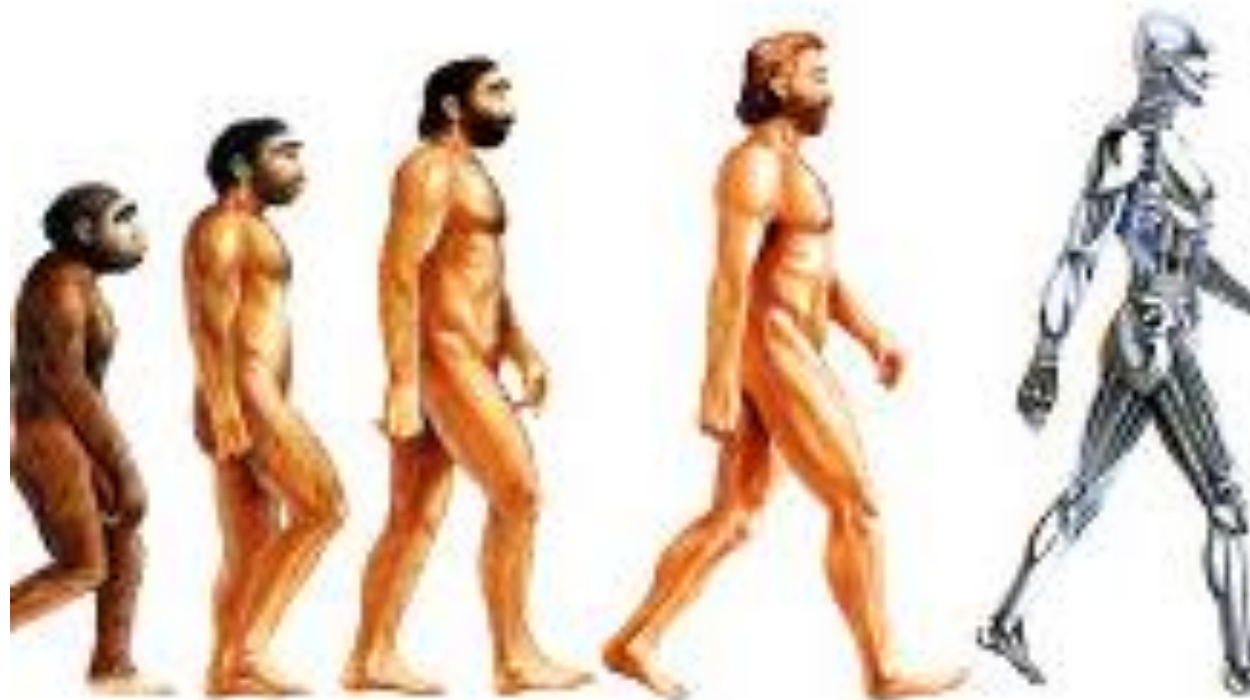
# Redes neuronales artificiales

Las redes de neuronas artificiales (denominadas habitualmente como RNA o en inglés como: "ANN"1 ) son un paradigma de aprendizaje y procesamiento automático inspirado en la forma en que funciona el sistema nervioso biológico. Se trata de un sistema de interconexión de neuronas que colaboran entre sí para producir un estímulo de salida. En inteligencia artificial es frecuente referirse a ellas como redes de neuronas o redes neuronales.

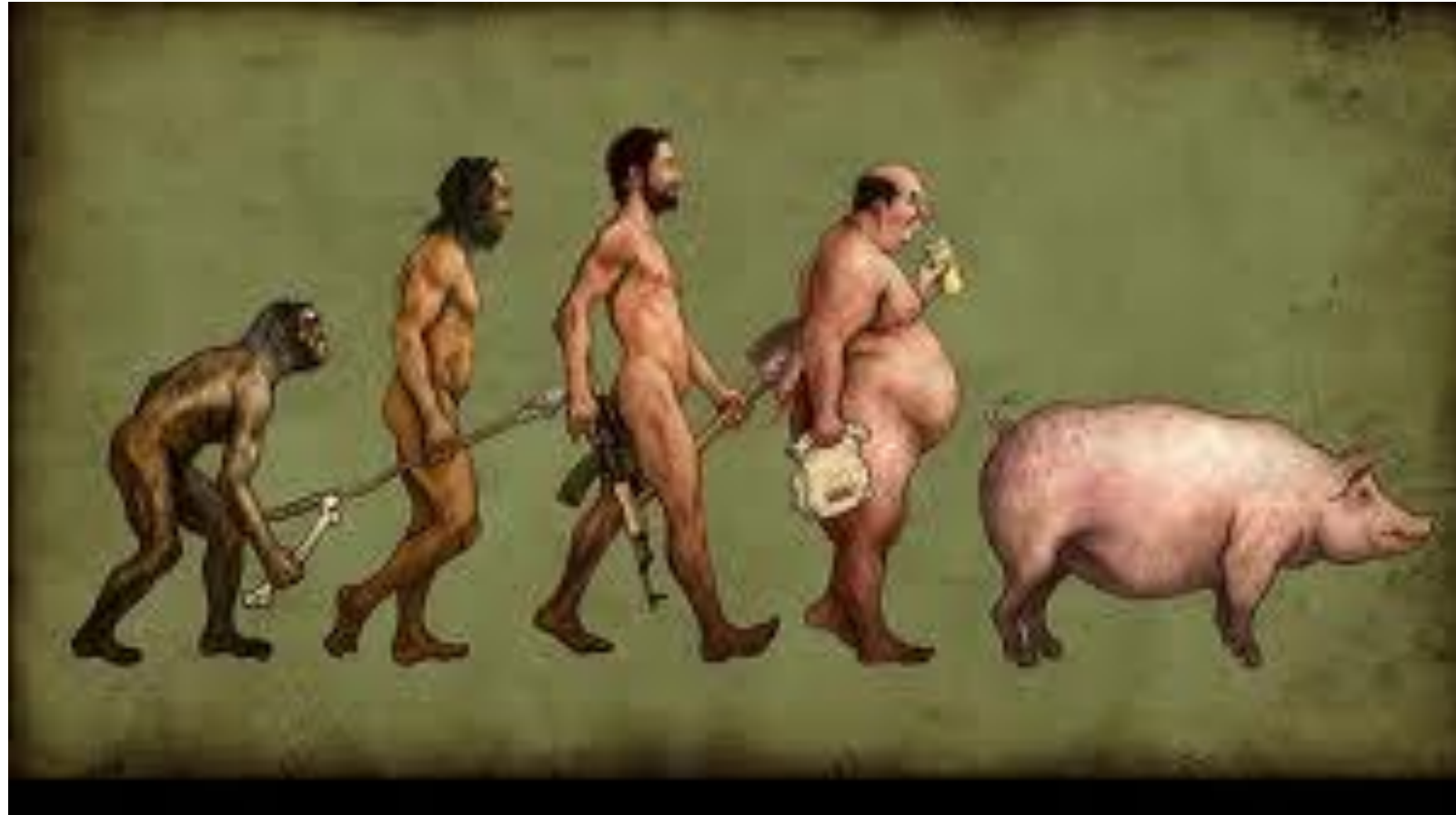


# Redes neuronales artificiales

---



# Redes neuronales artificiales



# RNA y la ESTADÍSTICA

---

Aunque las técnicas modernas de RNA no son infalibles, los métodos estadísticos tradicionales muestran limitaciones.

<b>Terminología estadística</b>	<b>Terminología de redes neuronales</b>
Observación	Patrón
Muestra	Datos de entrenamiento
Muestra de validación	Datos de validación (test)
Variables explicativas	Variables de entrada
Variable respuesta	Variable salida
Modelo	Arquitectura
Residual	Error
Error aleatorio	Ruido
Estimación	Entrenamiento, aprendizaje
Interpolación	Generalización
Interacción	Conexión funcional
Coefficientes	Pesos de conexión
Constante	Peso umbral
Regresión y análisis discriminante	Aprendizaje supervisado o heteroasociación
Reducción de datos	Aprendizaje no supervisado o autoasociación
Análisis de cluster	Aprendizaje competitivo



<b>Terminología estadística</b>	<b>Terminología de redes neuronales</b>
Regresión lineal múltiple	Perceptrón simple con función lineal
Regresión logística	Perceptrón simple con función logística
Función discriminante lineal	Perceptrón simple con función umbral
Regresión no lineal múltiple	Perceptrón multicapa con función lineal en la salida
Función discriminante no lineal	Perceptrón multicapa con función logística en la salida
Análisis de componentes principales	Regla de Oja
Análisis de clusters	Perceptrón multicapa asociativo
k vecinos más cercanos	Mapas de autoorganización de Kohonen
Regresión Kernel	Learning Vector Quantization (LVQ)
	Funciones de Base Radial (RBF)

$$\Delta Z_i = \frac{\text{Alto} - \text{Bajo}}{2}$$

# Diseño de experimento

$$\Delta Z_i = \frac{\text{Alto} - \text{Bajo}}{2}$$

$$\bar{Z}_i = \frac{\text{Alto} + \text{Bajo}}{2}$$

$$X_1 = \frac{Z_1 - \bar{Z}_1}{\Delta Z_1}$$

$$X_2 = \frac{Z_2 - \bar{Z}_2}{\Delta Z_2}$$

Trat	Variables explicativas			
	Codificados		Reales	
	X1	X2	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)
1	-1	-1	1.05	104
2	1	-1	1.87	104
3	-1	1	1.05	316
4	1	1	1.87	316
5	-1.41421	0	0.88	210
6	1.41421	0	2.04	210
7	0	-1.41421	1.46	60
8	0	1.41421	1.46	360
9	0	0	1.46	210
10	0	0	1.46	210
11	0	0	1.46	210
12	0	0	1.46	210



# Desarrollo experimental

---



# Desarrollo experimental

---



# Desarrollo experimental

---



# Resultados experimentales

Trat	Variables explicativas				Variables respuesta	
	Codificados		Reales		Antocianinas	Compuestos fenolicos
	X1	X2	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)		
1	-1	-1	1.05	104	56.65	90.64
2	1	-1	1.87	104	59.41	110.46
3	-1	1	1.05	316	59.70	89.66
4	1	1	1.87	316	66.63	103.19
5	-1.41421	0	0.88	210	57.78	91.73
6	1.41421	0	2.04	210	65.71	110.20
7	0	-1.41421	1.46	60	61.70	98.06
8	0	1.41421	1.46	360	67.46	102.02
9	0	0	1.46	210	73.39	106.32
10	0	0	1.46	210	66.25	109.03
11	0	0	1.46	210	72.22	107.71
12	0	0	1.46	210	74.27	112.84

# Diseño central compuesto rotacional

## Antocianinas

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F	p
Model	357.966	5	71.593	8.054	0.012
A-Concentración	54.616	1	54.616	6.144	0.048
B-Tiempo	42.399	1	42.399	4.770	0.072
AB	4.357	1	4.357	0.490	0.510
A <sup>2</sup>	196.194	1	196.194	22.072	0.003
B <sup>2</sup>	108.495	1	108.495	12.206	0.013
Residual	53.332	6	8.889		
Falta de ajuste	14.040	3	4.680	0.357	0.790
Error puro	39.292	3	13.097		
Total	411.299	11			

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F	p
Regresión	357.966	5	71.593	8.054	0.012
Error	53.332	6	8.889		
Total SS	411.299	11			
<b>R<sup>2</sup></b>	<b>0.870</b>	<b>R<sup>2</sup>-ajustado</b>	<b>0.762</b>		

## Compuestos fenólicos

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F	p
Model	693.311	5	138.662	13.368	0.003
A-Concentración	442.092	1	442.092	42.620	0.001
B-Tiempo	0.883	1	0.883	0.085	0.780
AB	9.903	1	9.903	0.955	0.366
A <sup>2</sup>	130.086	1	130.086	12.541	0.012
B <sup>2</sup>	158.093	1	158.093	15.241	0.008
Residual	62.237	6	10.373		
Falta de ajuste	38.657	3	12.886	1.639	0.347
Error puro	23.580	3	7.860		
Total	755.548	11			

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F	p
Regresión	693.311	5	138.662	13.368	0.003
Error	62.237	6	10.373		
Total SS	755.548	11			
<b>R<sup>2</sup></b>	<b>0.918</b>	<b>R<sup>2</sup>-ajustado</b>	<b>0.849</b>		



## Antocianinas

Factor	Coefficiente estimado	Error estándar	t(6)	p	VIF
Intercepto	<b>71.534</b>	1.491	47.987	0.000	
A-Concentración	<b>2.613</b>	1.054	2.479	0.048	1.00
B-Tiempo	<b>2.302</b>	1.054	2.184	0.072	1.00
AB	<b>1.044</b>	1.491	0.700	0.510	1.00
A <sup>2</sup>	<b>-5.537</b>	1.178	-4.698	0.003	1.04
B <sup>2</sup>	<b>-4.117</b>	1.178	-3.494	0.013	1.04

$$\begin{aligned}
 \text{Antocianinas} = & 71.534 \\
 & 2.613 * \text{Concentración} \\
 & 2.302 * \text{Tiempo} \\
 & 1.044 * \text{Concentración} * \text{Tiempo} \\
 & -5.537 * \text{Concentración}^2 \\
 & -4.117 * \text{Tiempo}^2
 \end{aligned}$$

## Compuestos fenólicos

Factor	Coefficiente estimado	Error estándar	t(6)	p	VIF
Intercepto	<b>108.975</b>	1.610	67.672	0.000	
A-Concentración	<b>7.434</b>	1.139	6.528	0.001	1.00
B-Tiempo	<b>-0.332</b>	1.139	-0.292	0.780	1.00
AB	<b>-1.573</b>	1.610	-0.977	0.366	1.00
A <sup>2</sup>	<b>-4.508</b>	1.273	-3.541	0.012	1.04
B <sup>2</sup>	<b>-4.970</b>	1.273	-3.904	0.008	1.04

$$\begin{aligned}
 \text{Compuestos fenólicos} = & 108.975 \\
 & 7.434 * \text{Concentración} \\
 & -0.332 * \text{Tiempo} \\
 & -1.573 * \text{Concentración} * \text{Tiempo} \\
 & -4.508 * \text{Concentración}^2 \\
 & -4.970 * \text{Tiempo}^2
 \end{aligned}$$

## Antocianinas

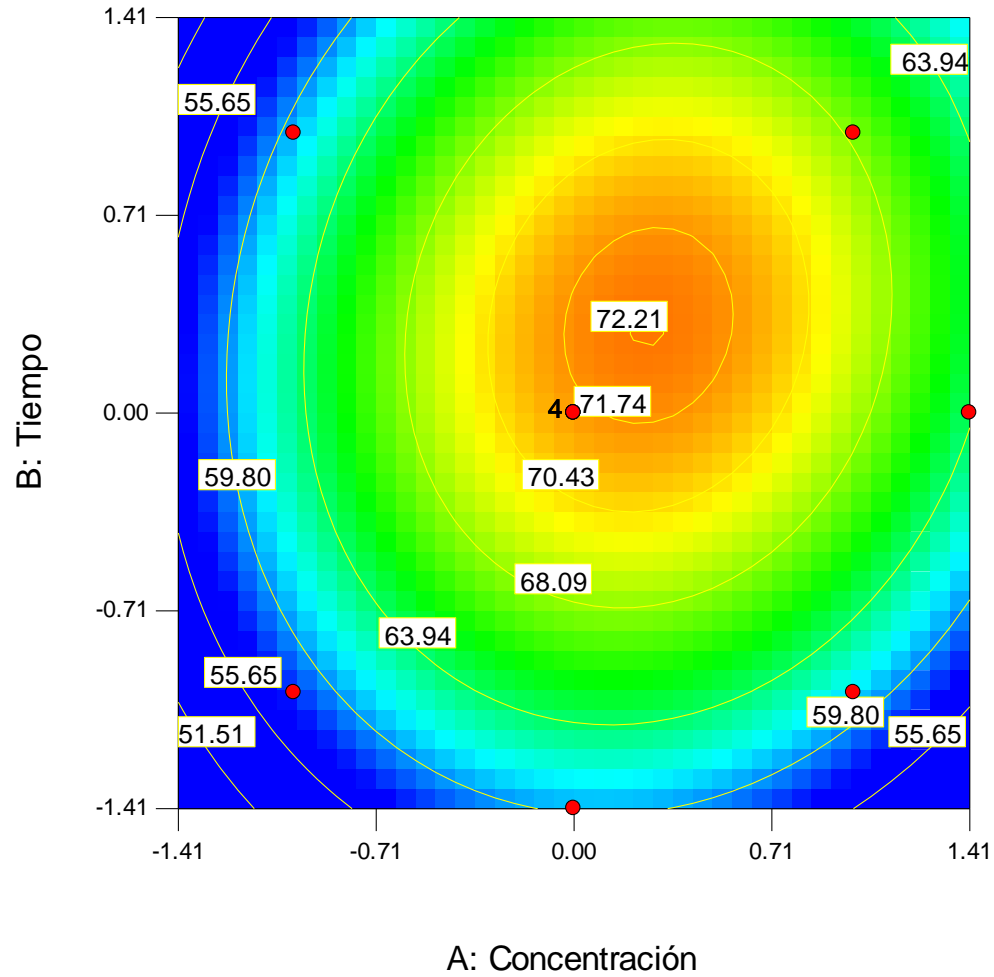
Conc. de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas				
		Observados	Predichos	Residual	Error (%)	Error absoluto (%)
-1	-1	56.65	58.01	-1.36	-2.40	2.40
1	-1	59.41	61.15	-1.74	-2.93	2.93
-1	1	59.70	60.53	-0.83	-1.39	1.39
1	1	66.63	67.84	-1.21	-1.82	1.82
-1.414	0	57.78	56.77	1.01	1.75	1.75
1.414	0	65.71	64.16	1.55	2.37	2.37
0	-1.414	61.70	60.04	1.66	2.69	2.69
0	1.414	67.46	66.55	0.91	1.35	1.35
0	0	73.39	71.53	1.86	2.53	2.53
0	0	66.25	71.53	-5.28	-7.97	7.97
0	0	72.22	71.53	0.69	0.95	0.95
0	0	74.27	71.53	2.73	3.68	3.68
<b>Promedio</b>				<b>-0.10</b>	<b>2.65</b>	

## Compuestos fenólicos

Conc. de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Compuestos fenólicos				
		Observados	Predichos	Residual	Error (%)	Error absoluto (%)
-1	-1	90.64	90.82	-0.18	-0.20	0.20
1	-1	110.46	108.84	1.63	1.47	1.47
-1	1	89.66	93.30	-3.64	-4.06	4.06
1	1	103.19	105.02	-1.83	-1.78	1.78
-1.414	0	91.73	89.45	2.29	2.49	2.49
1.414	0	110.20	110.47	-0.27	-0.25	0.25
0	-1.414	98.06	99.50	-1.44	-1.47	1.47
0	1.414	102.02	98.57	3.46	3.39	3.39
0	0	106.32	108.98	-2.66	-2.50	2.50
0	0	109.03	108.98	0.06	0.05	0.05
0	0	107.71	108.98	-1.26	-1.17	1.17
0	0	112.84	108.98	3.86	3.42	3.42
<b>Promedio</b>				<b>-0.05</b>	<b>1.85</b>	



## Antocianinas



Design-Expert® Software

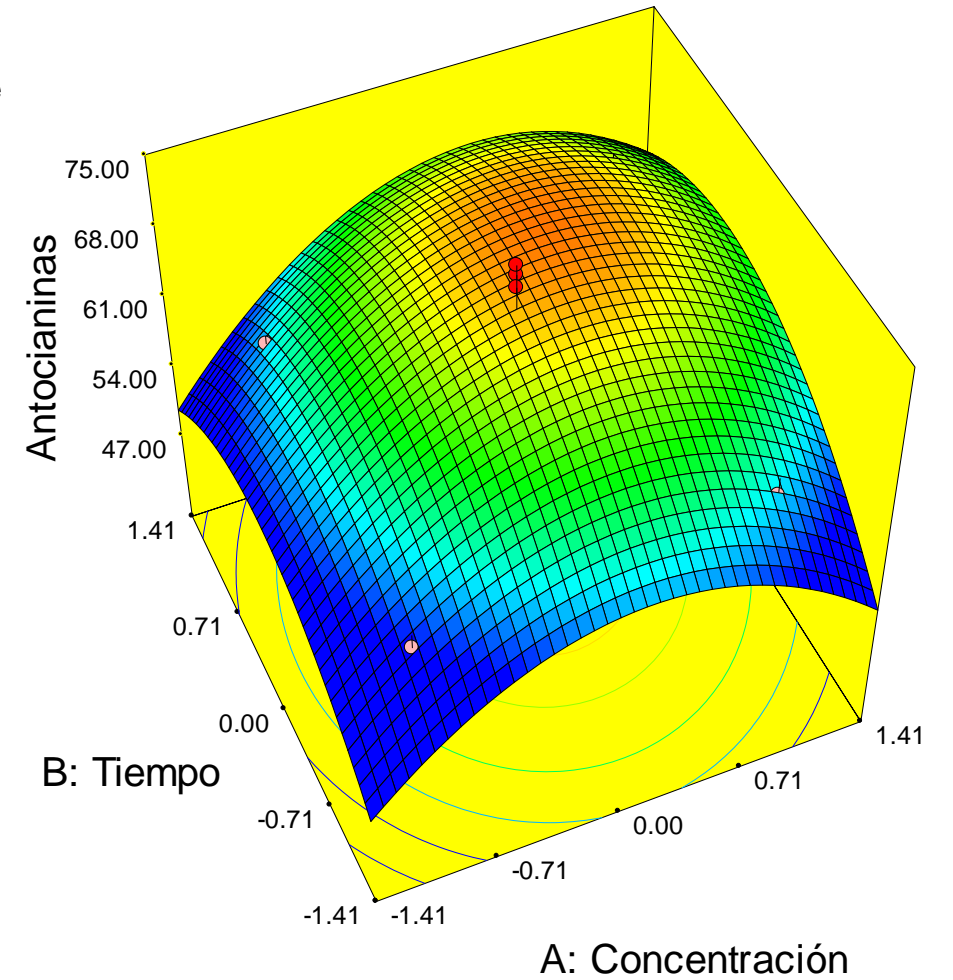
Antocianinas

74.2683

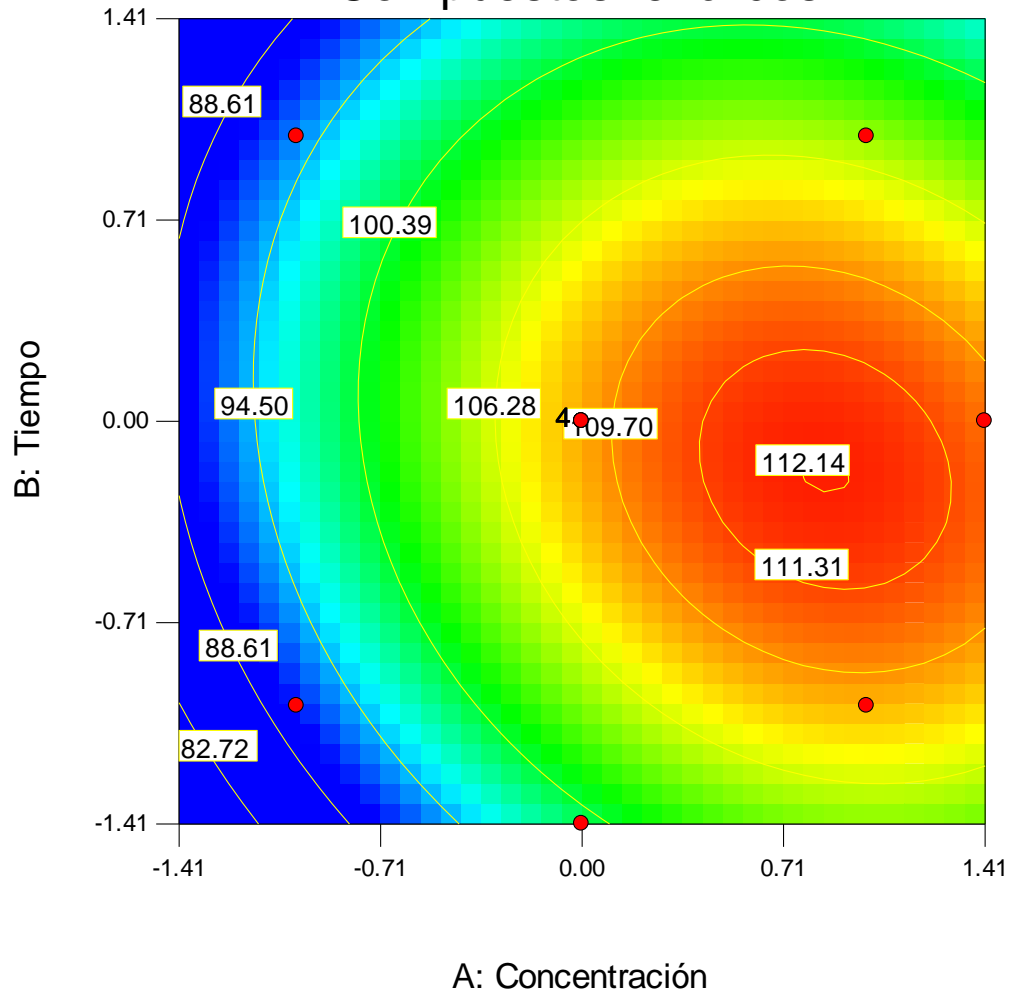
56.651

X1 = A: Concentración

X2 = B: Tiempo



## Compuestos fenólicos



Design-Expert® Software

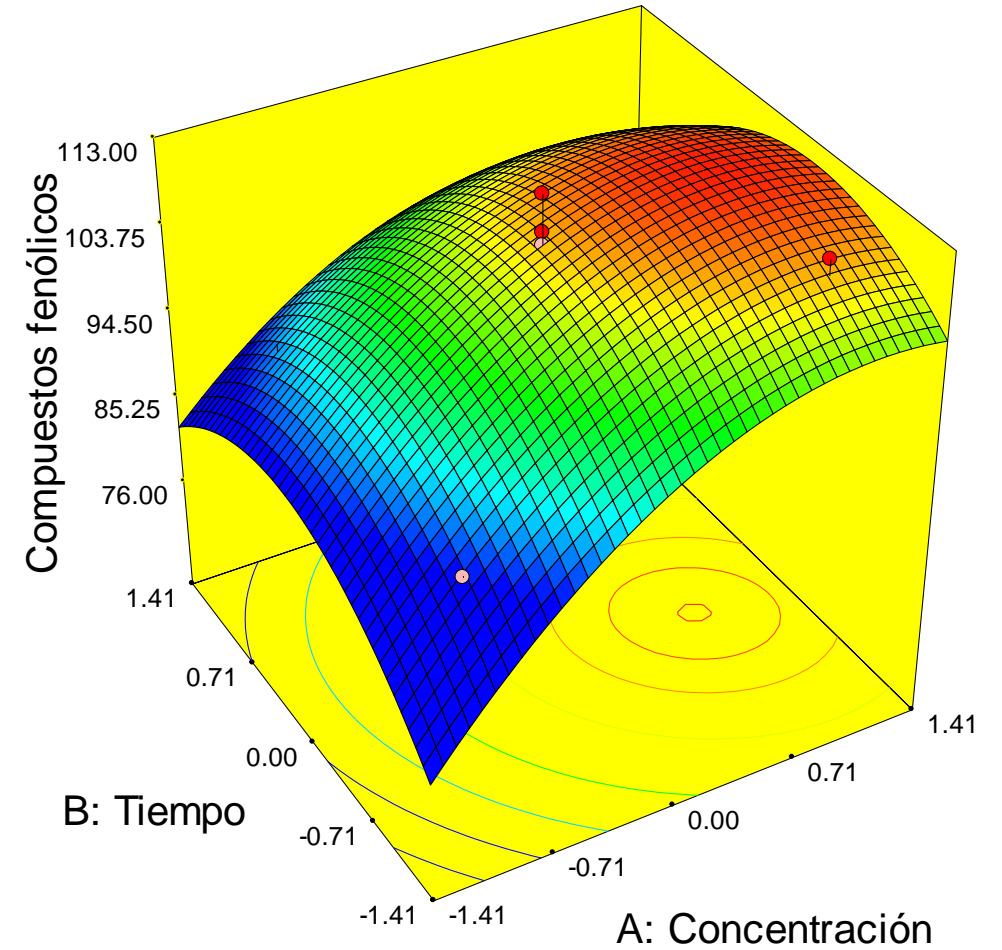
Compuestos fenólicos

112.838

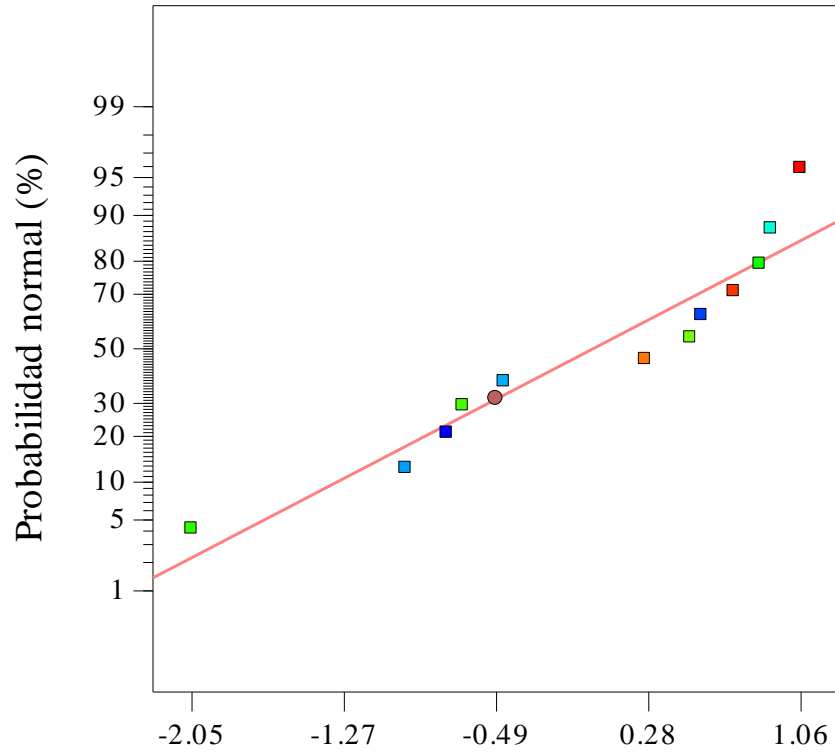
89.6599

X1 = A: Concentración

X2 = B: Tiempo



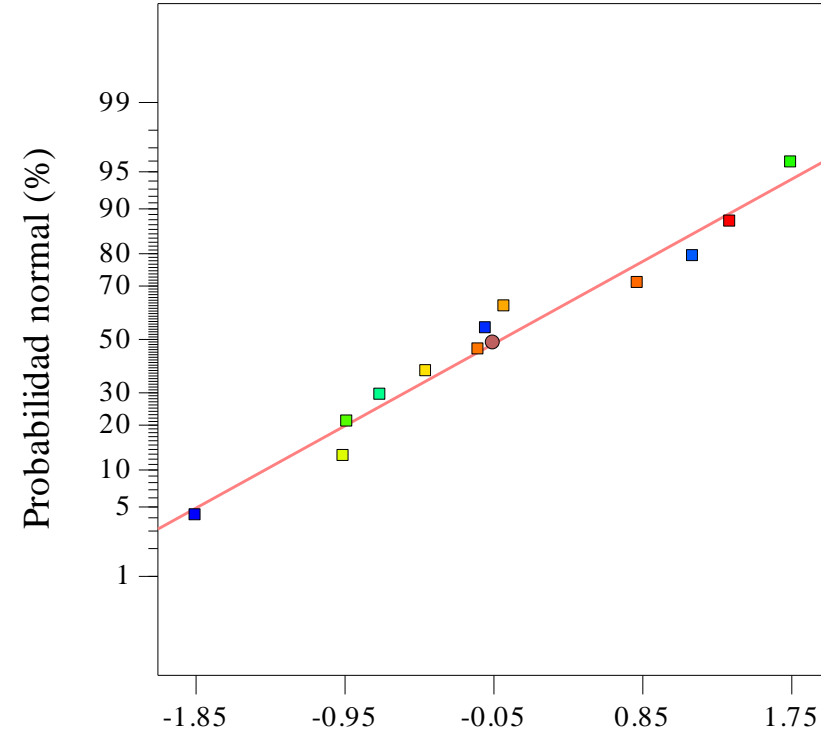
## Antocianinas



Residuos internamente estudentizados

Shapiro-Wilk	p
0.895	0.136

## Compuestos fenólicos

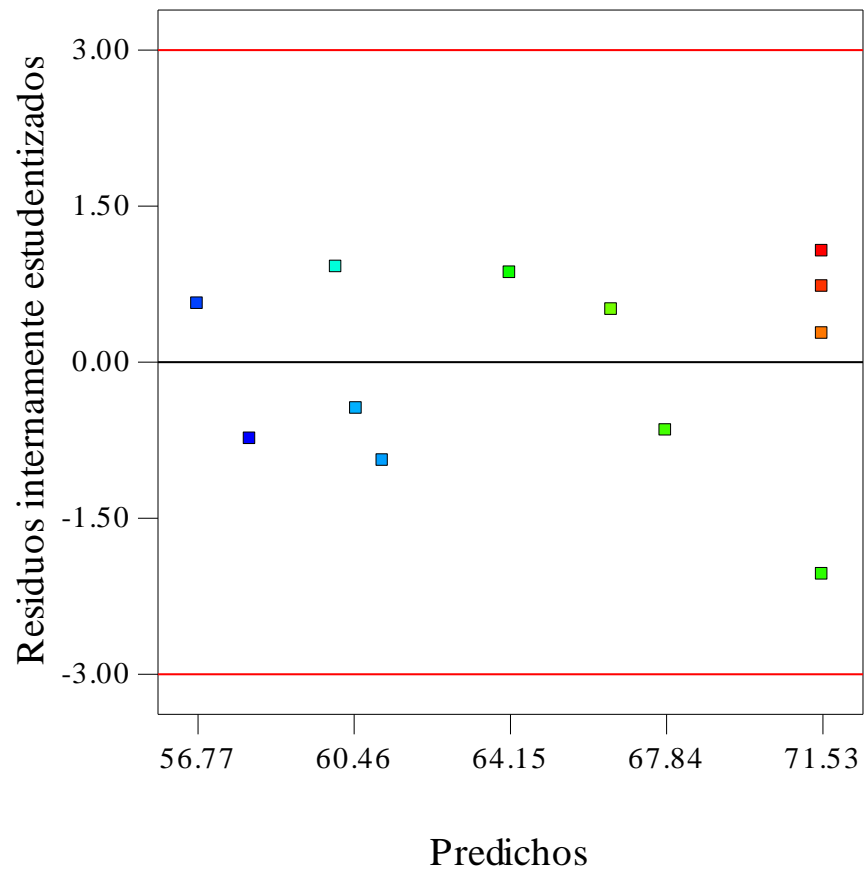


Residuos internamente estudentizados

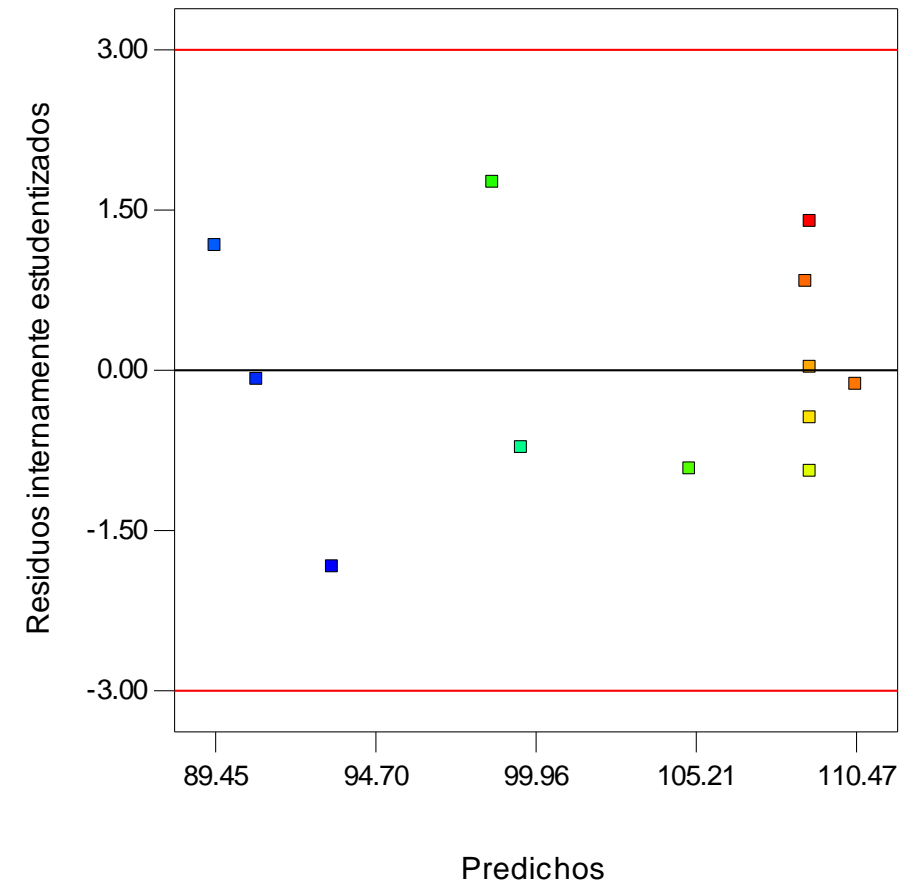
Shapiro-Wilk	p
0.958	0.756

# Homogeneidad de varianzas

## Antocianinas



## Compuestos fenólicos



Design-Expert® Software

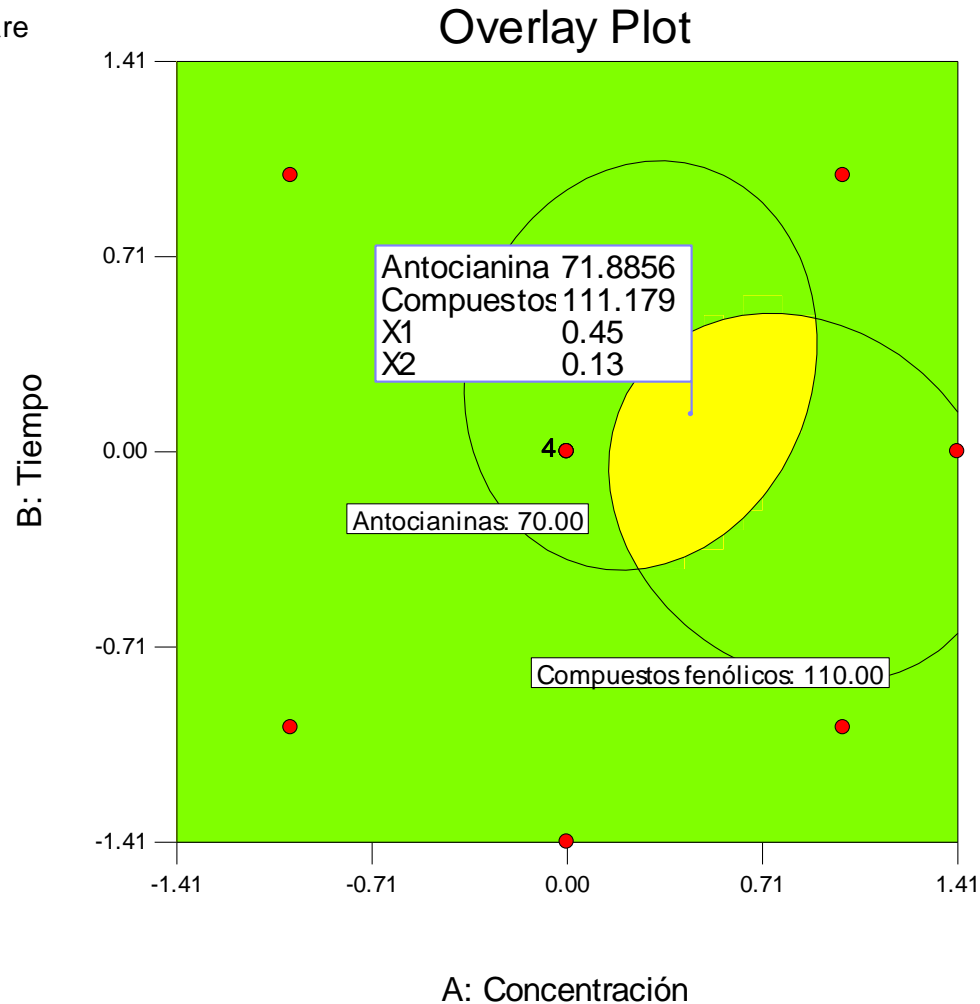
Overlay Plot

Antocianinas  
Compuestos fenólicos

● Design Points

X1 = A: Concentración

X2 = B: Tiempo



Factor	Name	Level	Low Level	High Level	Std. Dev.	Coding
A	Concentración	0.450	-1.000	1.000	0.000	Actual
B	Tiempo	0.134	-1.000	1.000	0.000	Actual

Response	Prediction	SE Mean	95% CI low	95% CI high	SE Pred	95% PI low	95% PI high
Antocianinas	71.885	1.430	68.386	75.384	3.307	63.794	79.976
Compuestos fenólicos	111.180	1.545	107.400	114.959	3.572	102.439	119.920

$$X_1 = \frac{Z_1 - \bar{Z}_1}{\Delta Z_1}$$

$$X_2 = \frac{Z_2 - \bar{Z}_2}{\Delta Z_2}$$

Concentración de solución (mol/L)	1.645
Tiempo (min)	224.161

# Redes Neuronales Artificiales (RNA)

Datos de entrenamiento (75%)

Variables entrada				Variables salida	
Codificados		Reales		Sin normalizar	
X1	X2	Conc. de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas	Compuestos fenolicos
-1	-1	1.05	104	56.65	90.64
1	-1	1.87	104	59.41	110.46
-1.41421	0	0.88	210	57.78	91.73
1.41421	0	2.04	210	65.71	110.20
0	-1.41421	1.46	60	61.70	98.06
0	1.41421	1.46	360	67.46	102.02
0	0	1.46	210	73.39	106.32
0	0	1.46	210	66.25	109.03
0	0	1.46	210	72.22	107.71

Datos de validación o test (25%)

Variables entrada				Variables salida	
Codificados		Reales		Sin normalizar	
X1	X2	Conc. de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas	Compuestos fenolicos
-1	1	1.05	316	59.70	89.66
1	1	1.87	316	66.63	103.19
0	0	1.46	210	74.27	112.84

# Entrenamiento (RNA) sin normalizar

## Ira prueba

Datos sin normalizar

**Algoritmo de entrenamiento**

Backpropagation

Algoritmo ajuste de pesos

Levenberg-Marquardt

## Topologia inicial

Numero de capas ocultas

1

Funcion de transferencia

Tansig-purelin

Tasa de aprendizaje

0.01

Tasa de momento

0.5

Numero de ciclos o etapas

Error cuadratico medio	50	100	500	1000
Neuronas				
1	15.1502	33.5892	40.5387	9.8338
2	37.3238	13.4073	4.138	43.032
3	7.9803	15.1502	33.595	43.032
4	15.1504	39.3683	32.3941	43.032
5	9.5636	30.0138	4.2214	33.5893
6	9.8338	19.6397	15.1502	40.4992
7	30.191	9.8338	43.032	9.8338
8	43.032	6.1173	41.0705	37.6508
9	43.032	3.7793	43.032	43.032
10	43.032	9.7971	41.0705	3.7792
15	9.8338	43.032	43.0301	7.0763
20	43.032	43.032	7.9803	28.1952
25	28.5072	12.3802	41.0705	7.243
30	24.0594	43.032	41.0705	1.8335
40	28.561	43.032	1.8861	1.9597
50	9.8321	1.9597	19.7375	6.5866
60	3.4328	9.9415	1.8335	37.3237
70	17.8619	15.8953	17.2307	<b>1.8335</b>
80	3.5875	1.8896	<b>1.8335</b>	16.0163
90	3.8804	4.4054	<b>1.8335</b>	13.1891
100	<b>1.8335</b>	8.572	<b>1.8335</b>	<b>1.8335</b>



# Entrenamiento (RNA) normalizados

Entrenamiento

Variables entradas				Variables salidas			
Codificados		Reales		Sin normalizar		Normalizados	
X1	X2	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas	Compuestos fenolicos	Antocianinas	Compuestos fenolicos
-1	-1	1.05	104	56.65	90.64	0.5665	0.0906
1	-1	1.87	104	59.41	110.46	0.5941	0.1105
-1.41421	0	0.88	210	57.78	91.73	0.5778	0.0917
1.41421	0	2.04	210	65.71	110.20	0.6571	0.1102
0	-1.41421	1.46	60	61.70	98.06	0.6170	0.0981
0	1.41421	1.46	360	67.46	102.02	0.6746	0.1020
0	0	1.46	210	73.39	106.32	0.7339	0.1063
0	0	1.46	210	66.25	109.03	0.6625	0.1090
0	0	1.46	210	72.22	107.71	0.7222	0.1077

$$\text{Norm\_antocianinas} = \frac{\text{Antocianinas}}{100}$$

$$\text{Norm\_comp\_fenólicos} = \frac{\text{Comp.fenólicos}}{1000}$$

Validación

Codificados		Reales		Sin normalizar		Normalizados	
X1	X2	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas	Compuestos fenolicos	Antocianinas	Compuestos fenolicos
-1	1	1.05	316	59.70	89.66	0.5970	0.0897
1	1	1.87	316	66.63	103.19	0.6663	0.1032
0	0	1.46	210	74.27	112.84	0.7427	0.1128

$$0 < \text{Norm} < 1$$

# Entrenamiento (RNA) normalizados

## 2a prueba

Datos normalizados

Algoritmo de entrenamiento

Backpropagation

Algoritmo ajuste de pesos

Levenberg-Marquardt

Topologia inicial

Numero de capas ocultas

1

Funcion de transferencia

Tansig-purelin

Tasa de aprendizaje

0.01

Tasa de momento

0.5

Etapas o ciclos de entrenamiento

50

## Efecto del error meta

		Numero de neuronas							
Error cuadratico medio (meta)		2	5	10	15	20	30	100	
1.00E-01	0.00232810	0.02379500	0.00224080	0.04080300	0.06692900	0.03151000	0.00550530		
1.00E-02	0.00280150	0.00447110	0.00479480	0.00607260	0.00856990	0.00630360	0.00855900		
1.00E-03	0.00082725	0.00055432	0.00035752	0.00084860	0.00063502	0.00050811	0.00017783		
1.00E-04	0.00021160	0.00016327	0.00020642	0.00457400	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016327</b>	<b>0.00016315</b>		
1.00E-05	0.00019112	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016328</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>		
1.00E-06	0.00021160	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	0.00020649	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>		
1.00E-07	0.00020690	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>		
1.00E-08	0.00070911	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>		

## Efecto del número de neuronas

3a prueba		Datos normalizados
<b>Algoritmo de entrenamiento</b>	Backpropagation	
Algoritmo ajuste de pesos	Levenberg-Marquardt	
Topologia inicial		
Numero de capas ocultas		1
Funcion de transferencia	Tansig-purelin	
Tasa de aprendizaje		0.01
Tasa de momento		0.5
Etapas o ciclos de entrenamiento		50
Error cuadrático (goal)		1.00E-04

Neuronas	ECM
1	0.00071933
2	0.00021161
3	0.00016345
4	0.00016320
5	0.00016315
6	0.00016315
7	0.00016315
8	0.00017714
9	0.00109410
10	0.00016315
11	0.00016315
12	0.00104560
13	0.00016315
14	0.00016315
15	0.00016315
16	0.00016315
17	0.00016444
<b>18</b>	<b>0.00016315</b>
19	0.00016315
20	0.00016315
30	0.00016315
40	0.00016315
50	0.00016315
60	0.00016315
70	0.00016315
80	0.00016315
90	0.00016315
100	0.00016315

## Efecto de las etapas de entrenamiento

4a prueba Datos normalizados

Algoritmo de entrenamiento Backpropagation  
Algoritmo ajuste de pesos Levenberg-Marquardt

Topologia inicial

Numero de capas ocultas 1  
Funcion de transferencia Tansig-purelin  
Tasa de aprendizaje 0.01  
Tasa de momento 0.5  
Error cuadrático (goal) 1.00E-04

Etapas	Neuronas							
	10	11	13	14	15	16	18	19
5	0.0003469	0.0003380	0.0026593	0.0135490	0.0049838	0.2349000	0.1197700	0.0539910
10	0.0002297	0.0055727	0.0008837	0.0001633	0.0214850	0.0014198	0.0008976	0.0009876
15	0.0001632	0.0001632	0.0001764	0.0001777	0.0004001	0.0005880	0.0001715	0.0008609
20	0.0001632	0.0007094	0.0002898	0.0001756	0.0001733	0.0061834	0.0003309	0.0008608
25	0.0002296	0.0001633	0.0004874	0.0001652	0.0002135	0.0281300	0.0161240	0.0008608
30	0.0001632	0.0002876	0.0001632	0.0001736	0.0111670	0.0002062	0.0001632	0.0008608
40	0.0001793	0.0008611	0.0001632	0.0007346	0.0001633	0.0002065	0.0001632	0.0008608
50	0.0001632	0.0020490	0.0001915	0.0001740	0.0006346	0.0002670	0.0001632	0.0008608
60	0.0001632	0.0003964	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0003349
75	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001661
100	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
125	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
150	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
200	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
300	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
400	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
500	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
750	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
1000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
2000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
3000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
5000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
10000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
15000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
20000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632
30000	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632	0.0001632

27 ciclos

## Evaluación de la función de transferencia

5a prueba Datos normalizados

Algoritmo de entrenamiento Backpropagation

Algoritmo ajuste de pesos Levenberg-Marquardt

Topología inicial

Numero de capas ocultas	1
Tasa de aprendizaje	0.01
Tasa de momento	0.5
Error cuadrático (goal)	1.00E-04
Etapas o ciclos de entrenamiento	27
Neuronas	18

Neuronas	Funciones de transferencia							
	tansig-purelin	tansig-tansig	tansig-logsig	logsig-purelin	logsig-tansig	logsig-logsig	purelin-purelin	
5	0.00016326	0.00019953	0.00016318	0.00016315	0.40323000	0.00083752	0.00100490	
10	0.00017210	0.00165160	0.00016913	0.00017272	0.06462400	0.00016317	0.00100490	
15	0.00028511	0.00109590	0.00020610	0.00028656	0.00016814	0.00028230	0.00100490	
20	0.00029526	0.40381000	0.00028996	0.00023773	0.00017760	0.00016574	0.00100490	
25	0.00016315	0.00016315	0.00020674	0.00016315	0.00016315	0.00086454	0.00100490	
30	0.00016315	0.00016315	0.00016679	0.00016315	0.00020609	0.00031811	0.00100490	
40	0.00016315	0.00084181	0.00135220	0.00016315	0.46703000	0.00016315	0.00100490	
50	0.00016315	0.00066479	0.00090352	0.00016315	0.00017362	0.00016315	0.00100490	
60	0.00016315	0.00016315	0.00021253	0.00016315	0.60838000	0.00109930	0.00100490	
70	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.46703000	0.00016315	0.00100490	
80	0.00732160	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00100490	
90	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.40258000	0.00016315	0.00100490	
100	0.00016315	0.04882400	0.00016315	0.00016315	0.00016315	0.00078994	0.00100490	
Promedio	<b>0.00073404</b>	<b>0.03523589</b>	<b>0.00033252</b>	<b>0.00017912</b>	<b>0.18569915</b>	<b>0.00041049</b>	<b>0.00100490</b>	

## Evaluación de la función de transferencia

**6a prueba** Datos normalizados

Algoritmo de entrenamiento Backpropagation  
Algoritmo ajuste de pesos Levenberg-Marquardt

Topología inicial

Numero de capas ocultas	1
Funcion de transferencia	tansig-logsig y logsig-purelin
Tasa de aprendizaje	0.01
Tasa de momento	0.5
Error cuadrático (goal)	1.00E-04
Etapas o ciclos de entrenamiento	27

Neuronas	Funciones de transferencia	
	tansig-logsig	logsig-purelin
1	0.00073633	0.00165160
2	0.00080675	0.00032556
3	0.00055693	0.00066172
4	0.00079427	0.00016803
5	0.00034113	0.00016319
6	0.00165160	0.00016321
7	0.00016323	0.00038667
8	0.00020358	0.00080896
9	0.00016315	0.00016315
10	0.00016968	0.00026028
11	0.00023122	0.00016514
10	0.00017410	0.00045868
13	0.00086081	0.00016315
14	0.00047783	0.00016315
15	0.00025569	0.00016315
16	0.00016513	0.00016315
17	0.00075264	0.00016315
18	0.00016513	0.00016315
19	0.00016513	0.00016315
20	0.00139000	0.00016315
21	0.00046687	0.00016315
22	0.00045294	0.00016315
23	0.00016371	0.00016315
24	0.00016315	0.00016315
25	0.00206450	0.00016315
26	0.00016448	0.00016315
27	0.00016474	0.00016315
28	0.00108510	0.00016315
29	0.00094225	0.00016315
30	0.00029047	0.00016315
31	0.06463500	0.00016315
32	0.00016315	0.00016315
33	0.00024603	0.00016315
34	0.00016584	0.00016315
35	0.00020609	0.00016315
36	0.00020873	0.00016315
37	0.00016315	0.00016315
38	0.00016315	0.00016315
39	0.00016315	0.00016315
40	0.00016315	0.00016315
50	0.00016315	0.00016315
Promedio	0.00201520	0.00024653
Max	0.06463500	0.00165160
Min	0.00016315	0.00016315

## Efecto de la tasa de aprendizaje y del coeficiente de momento

**7a prueba** Datos normalizados

**Algoritmo de entrenamiento** Backpropagation  
**Algoritmo ajuste de pesos** Levenberg-Marquardt

**Topologia inicial**

Numero de capas ocultas	1
Funcion de transferencia	tansig-logsig y logsig-purelin
Tasa de aprendizaje	?
Tasa de momento	?
Error cuadrático (goal)	1.00E-04
Etapas o ciclos de entrenamiento	27
Numero de neuronas	13

Variación de tasa de aprendizaje

Tasa de aprendizaje	ECM	
	tansig-logsig	logsig-purelin
0.00000001	0.00027564	0.00016315
0.0000001	0.00120960	0.00016315
0.000001	0.00038745	0.00016315
0.00001	0.00112270	0.00016315
0.0001	0.00026208	0.00016315
0.001	0.00142120	0.00016315
<b>0.01</b>	<b>0.00141270</b>	<b>0.00016315</b>
0.1	0.00016315	0.00016315
1	0.00028932	0.00016315

Variación de tasa de aprendizaje

Coeficiente de momento	ECM	
	tansig-logsig	logsig-purelin
0.1	0.00130500	0.00018246
0.2	0.00602740	0.00016315
0.3	0.00016666	0.00016315
0.4	0.00020612	0.00016315
<b>0.5</b>	<b>0.00024738</b>	<b>0.00016315</b>
0.6	0.00016326	0.00016315
0.7	0.00016315	0.00016315
0.8	0.00107640	0.00016315
0.9	0.00081951	0.00016315
1.0	0.00077203	0.00016315



## Evaluación del número de capas ocultas con neuronas

3a prueba		Datos normalizados
Algoritmo de entrenamiento	Backpropagation	
Algoritmo ajuste de pesos	Levenberg-Marquardt	
Topología inicial		
Numero de capas ocultas	I, 2II y II	
Funcion de transferencia	tansig-logsig y logsig-purelin	
Tasa de aprendizaje	0.01	
Tasa de momento	0.5	
Error cuadrático (goal)	1.00E-04	
Etapas o ciclos de entrenamiento	27	
Numero de neuronas	<b>13</b>	

Numero de neuronas	Capas ocultas					
	tansig			logsig		
	I	II	III	I	II	III
8	0.00070910	0.09102000	0.09102	0.00016328	0.00018384	0.0016516
9	0.00070947	0.09102000	0.09102	0.00016315	0.00020149	0.0016516
10	0.00140890	0.09102000	0.09102	0.00016717	0.00035979	0.0016516
11	0.00023317	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	0.00018694	0.0016516
12	0.00028686	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	0.00018384	0.0016516
13	0.00049313	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	0.00018891	0.0016516
14	0.00028224	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	0.0016516
15	0.00140920	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	0.00021120	0.0016516
16	0.00076037	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	0.0016516
17	0.00045906	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	0.00020432	0.0016516
18	0.00140920	0.09102000	0.09102	<b>0.00016315</b>	<b>0.00016315</b>	0.0016516

## Evaluación del número de capas ocultas con etapas o ciclos de entrenamiento

### 3a prueba

Datos normalizados

**Algoritmo de entrenamiento** Backpropagation  
 Algoritmo ajuste de pesos Levenberg-Marquardt

#### Topología inicial

Numero de capas ocultas I, 2II y II  
 tansig-logsig y logsig-  
 purelin

Tasa de aprendizaje 0.01  
 Tasa de momento 0.5  
 Error cuadrático (goal) 1.00E-04  
 Etapas o ciclos de entrenamiento ¿?  
 Numero de neuronas 11

Etapas	Capas ocultas					
	I capa oculta		II capa oculta		III capa oculta	
	Tansig	Logsig	Tansig	Logsig	Tansig	Logsig
5	0.00182690	0.03386600	0.09102000	0.00020047	0.09102000	0.00165160
10	0.00038941	0.00027195	0.09102000	0.00032892	0.09102000	0.00165160
15	0.00016315	0.00021682	0.09102000	0.00019800	0.09102000	0.00165160
20	0.00033731	0.00016384	0.09102000	0.00023180	0.09102000	0.00165160
25	0.00076476	0.00016381	0.09102000	0.00022620	0.09102000	0.00165160
30	0.00016329	0.00016315	0.09102000	0.00016315	0.09102000	0.00165160
50	0.00140920	0.00016315	0.09102000	0.00018401	0.09102000	0.00165160
100	0.00020646	0.00016315	0.09102000	0.00022837	0.09102000	0.00165160
1000	0.00018485	0.00016315	0.09102000	0.00016315	0.09102000	0.00165160
5000	0.00028223	0.00016315	0.09102000	0.00018384	0.09102000	0.00165160

## Comparación de la capacidad predictiva de las funciones de transferencia tansig-logsig y logsig-purelin

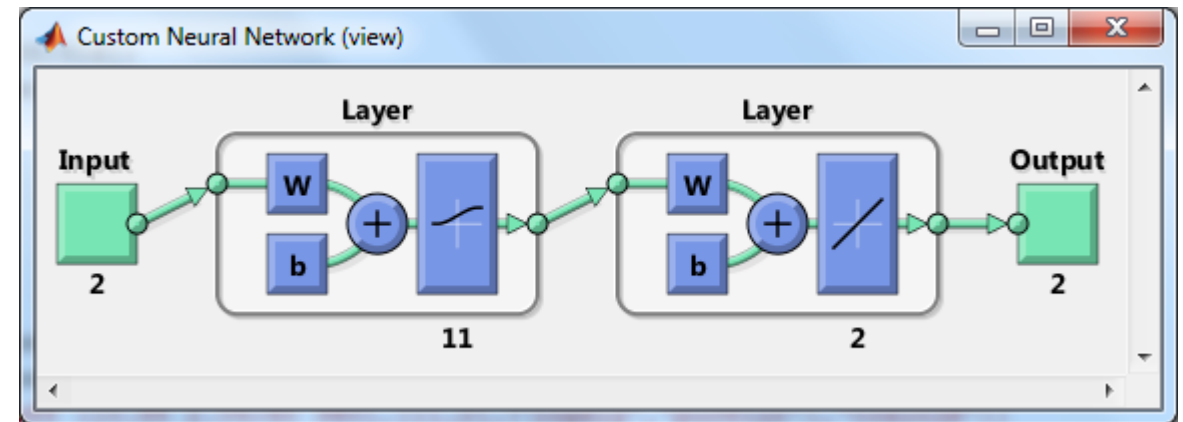
UE	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Respuesta	tansig-logsig				logsig-purelin			
				Observados	Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)	Observados	Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)
3	1.05	316	Antocianinas	59.70	56.26	5.76	5.76	59.70	60.41	-1.19	1.19
			Compuestos fenolicos	89.66	89.80	-0.16	0.16	89.66	89.9	-0.27	0.27
4	1.87	316	Antocianinas	66.63	71.52	-7.34	7.34	66.63	70.7	-6.11	6.11
			Compuestos fenolicos	103.19	108.90	-5.53	5.53	103.19	108.1	-4.76	4.76
12	1.46	210	Antocianinas	74.27	70.62	4.91	4.91	74.27	70.62	4.91	4.91
			Compuestos fenolicos	112.84	107.40	4.82	4.82	112.84	107.7	4.55	4.55
				<b>Promedio</b>		<b>0.41</b>	<b>4.75</b>	<b>Promedio</b>		<b>-0.48</b>	<b>3.63</b>

# Topología o arquitectura final

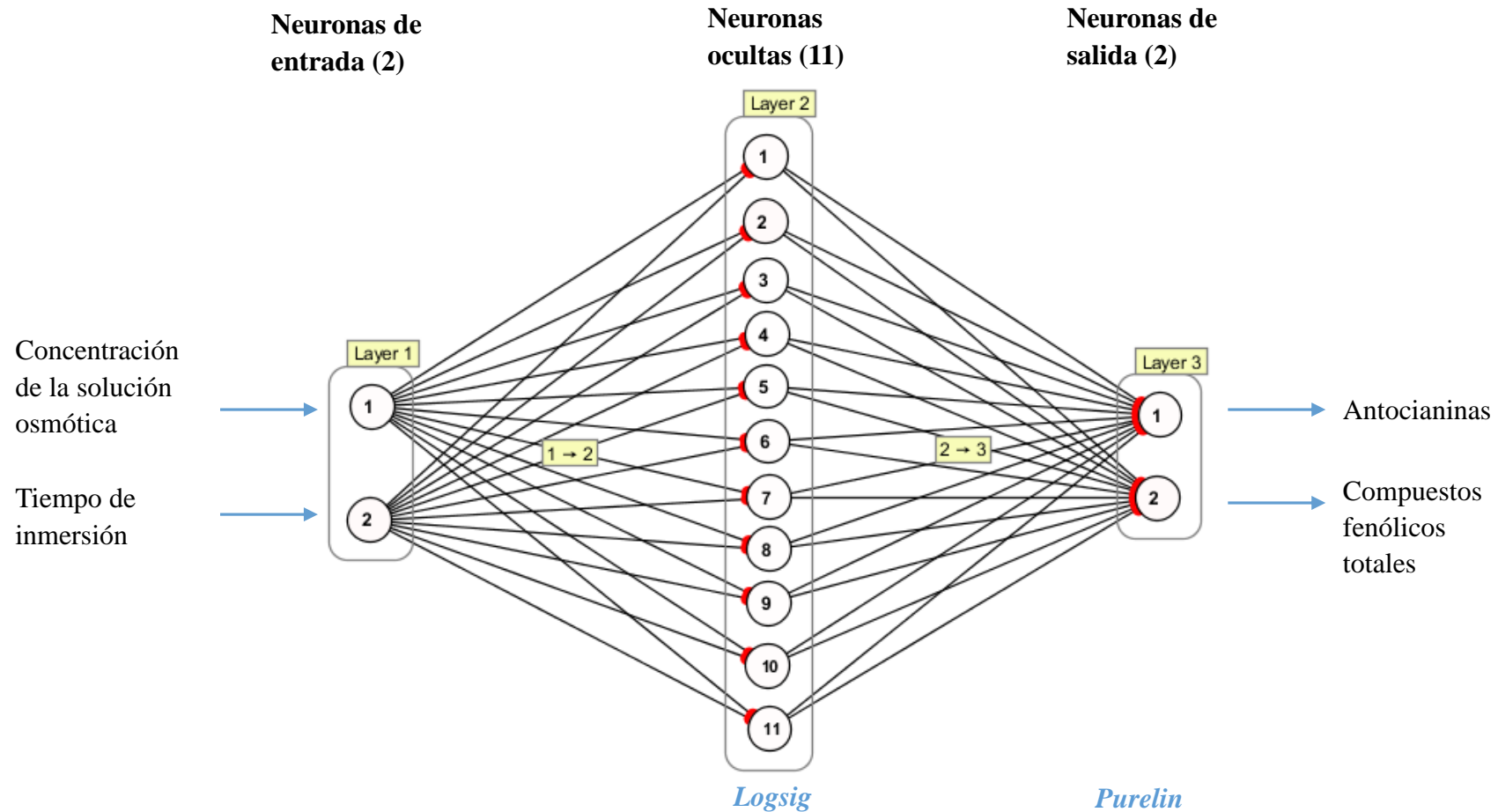
Tipo de red	Feedforward con aprendizaje supervisado
<b>Algoritmo de entrenamiento</b>	Backpropagation (retropropagación del error)
Algoritmo ajuste de pesos	Levenberg-Marquardt

## Topología FINAL

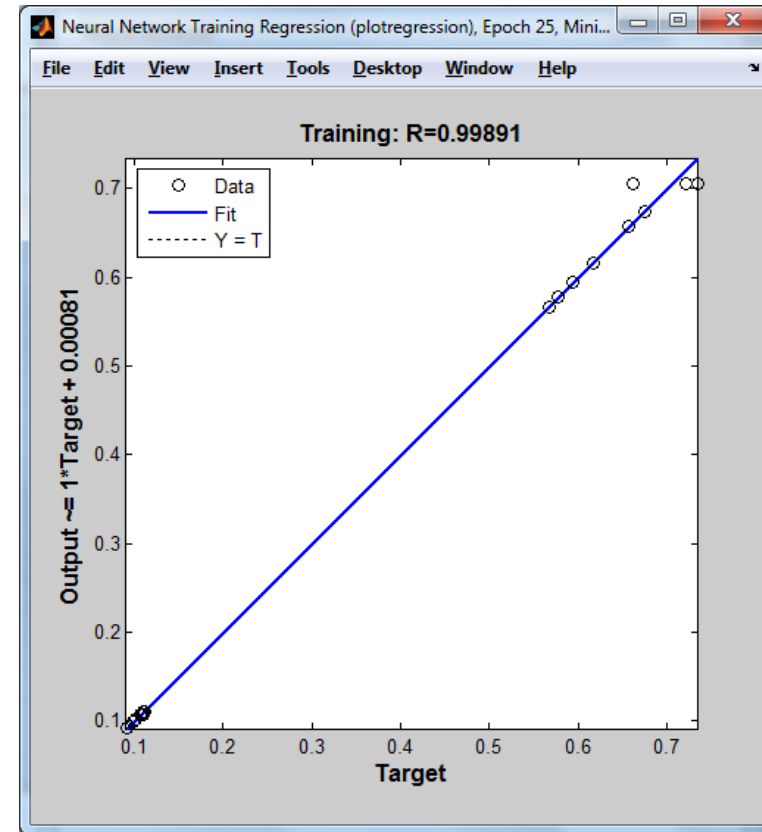
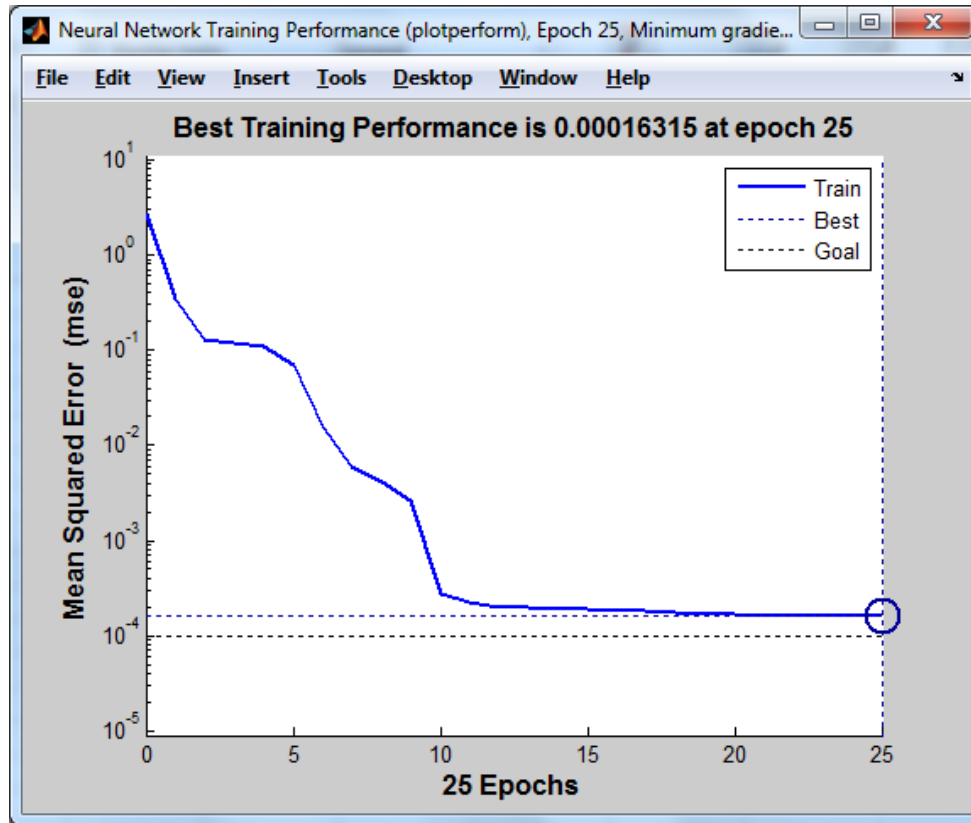
Numero de capas ocultas	1
Funcion de transferencia de capa oculta	Logsig
Funcion de transferencia de capa de salida	Purelin
Tasa de aprendizaje	0.01
Tasa de momento	0.5
Neuronas en la capa de entrada	2
Neuronas en la capa oculta	11
Neuronas en la capa de salida	2
Etapas o ciclos de entrenamiento	30
Error meta	0.0001
Criterio de evaluación	ECM



# Topología o arquitectura final



# Topología o arquitectura final



# Validación

Unidad de validación 1

Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Salidas	Observado	Predicho	Error (%)	Error absoluto (%)
1.05	316	Antocianinas	59.70	60.41	-1.192	1.192
		Compuestos fenólicos	89.66	89.90	-0.268	0.268
<b>Promedio</b>					<b>-0.730</b>	<b>0.730</b>

Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Salidas	Observado	Predicho	Error (%)	Error absoluto (%)
1.87	316	Antocianinas	66.63	70.70	-6.111	6.111
		Compuestos fenólicos	103.19	108.10	-4.758	4.758
<b>Promedio</b>					<b>-5.434</b>	<b>5.434</b>

Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Salidas	Observado	Predicho	Error (%)	Error absoluto (%)
1.46	210	Antocianinas	74.27	70.62	4.912	4.912
		Compuestos fenólicos	112.84	107.70	4.553	4.553
<b>Promedio</b>					<b>4.733</b>	<b>4.733</b>

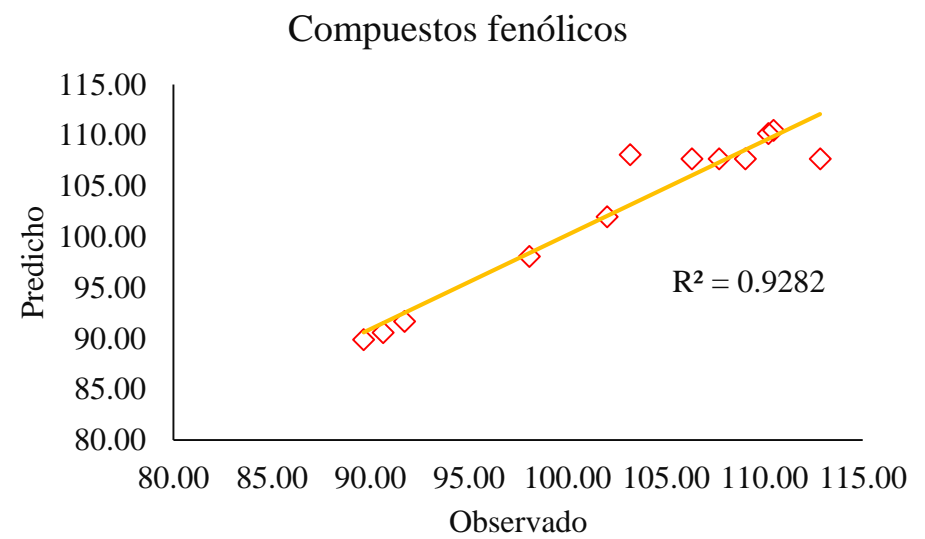
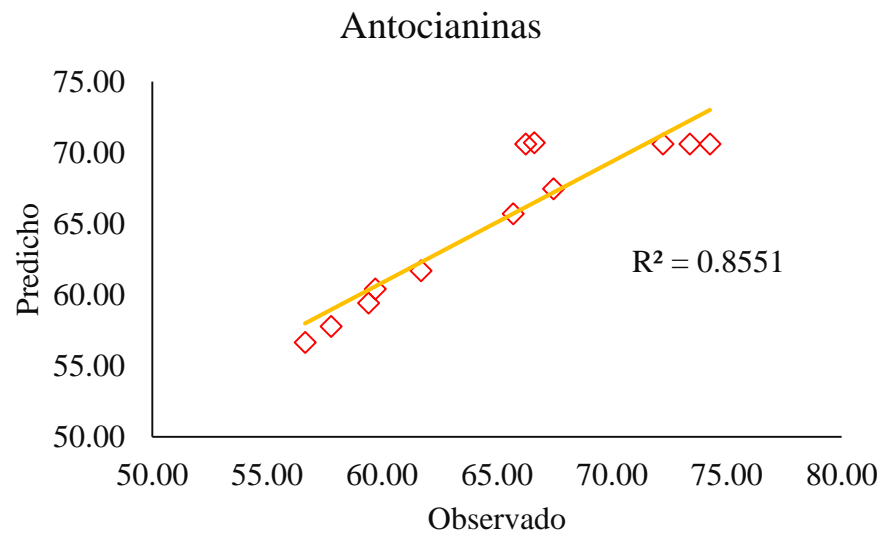
Error porcentual global (%) **3.632**

## Observados vs predichos

UE	Variables entrada		Variables salida							
	Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Antocianinas				Compuestos fenolicos			
			Observadas	Predichas	Error (%)	Error absoluto (%)	Observadas	Predichas	Error (%)	Error absoluto (%)
1	1.05	104	56.65	56.65	0.002	0.002	90.64	90.60	0.044	0.044
2	1.87	104	59.41	59.41	-0.006	0.006	110.46	110.50	-0.033	0.033
3	1.05	316	59.70	60.41	-1.192	1.192	89.66	89.90	-0.268	0.268
4	1.87	316	66.63	70.70	-6.111	6.111	103.19	108.10	-4.758	4.758
5	0.88	210	57.78	57.78	-0.003	0.003	91.73	91.70	0.036	0.036
6	2.04	210	65.71	65.71	0.000	0.000	110.20	110.20	0.000	0.000
7	1.46	60	61.70	61.70	0.004	0.004	98.06	98.10	-0.036	0.036
8	1.46	360	67.46	67.46	0.005	0.005	102.02	102.00	0.021	0.021
9	1.46	210	73.39	70.62	3.776	3.776	106.32	107.70	-1.300	1.300
10	1.46	210	66.25	70.62	-6.592	6.592	109.03	107.70	1.221	1.221
11	1.46	210	72.22	70.62	2.219	2.219	107.71	107.70	0.012	0.012
12	1.46	210	74.27	70.62	4.912	4.912	112.84	107.70	4.553	4.553
			<b>Promedio</b>		<b>-0.25</b>	<b>2.07</b>	<b>Promedio</b>		<b>-0.04</b>	<b>1.02</b>

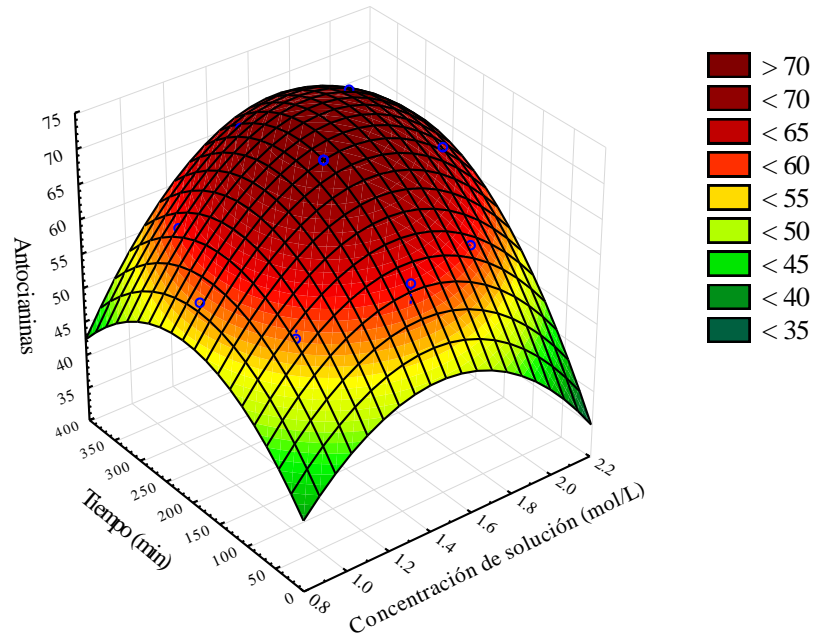


## Observados vs predichos

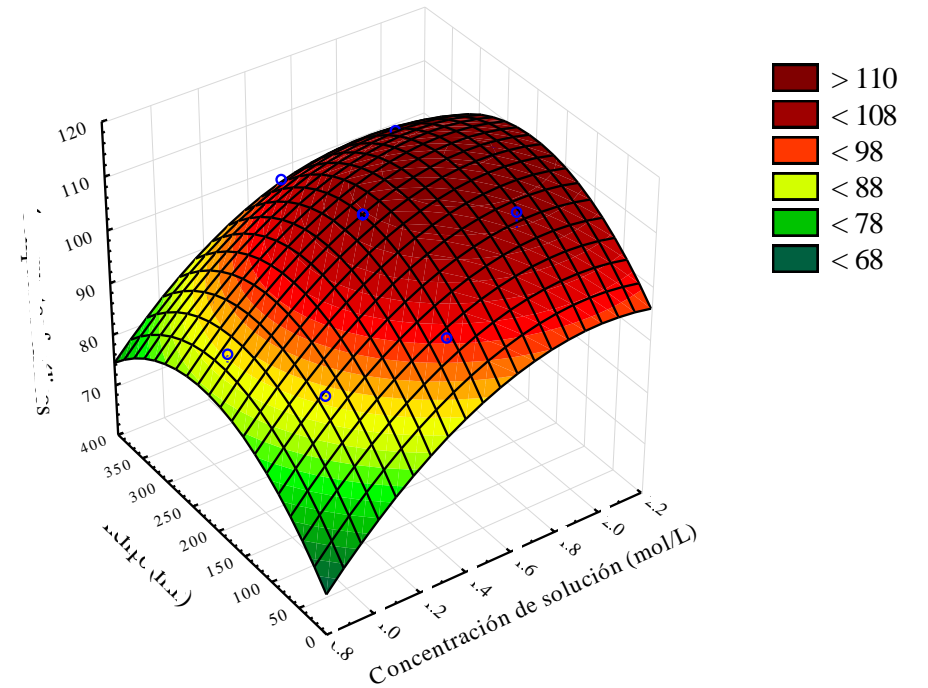


## Superficie de respuesta

### Antocianinas

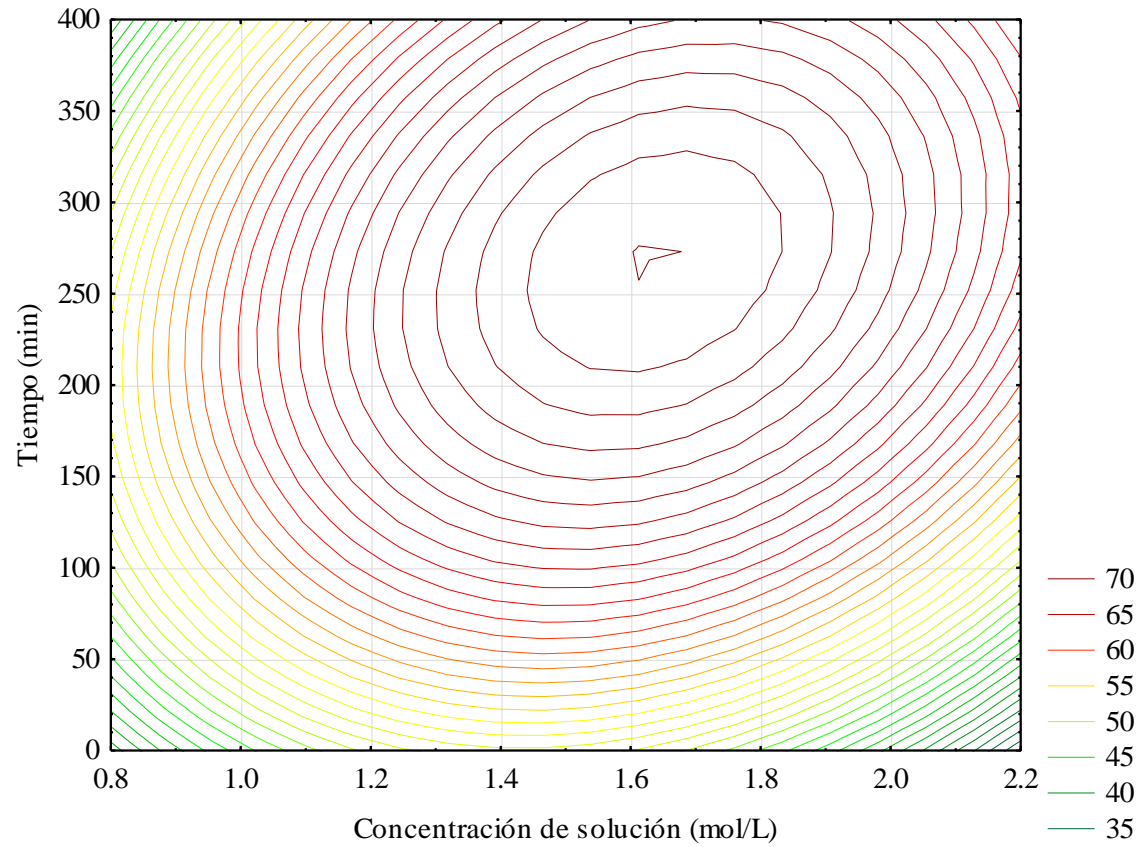


### Compuestos fenólicos

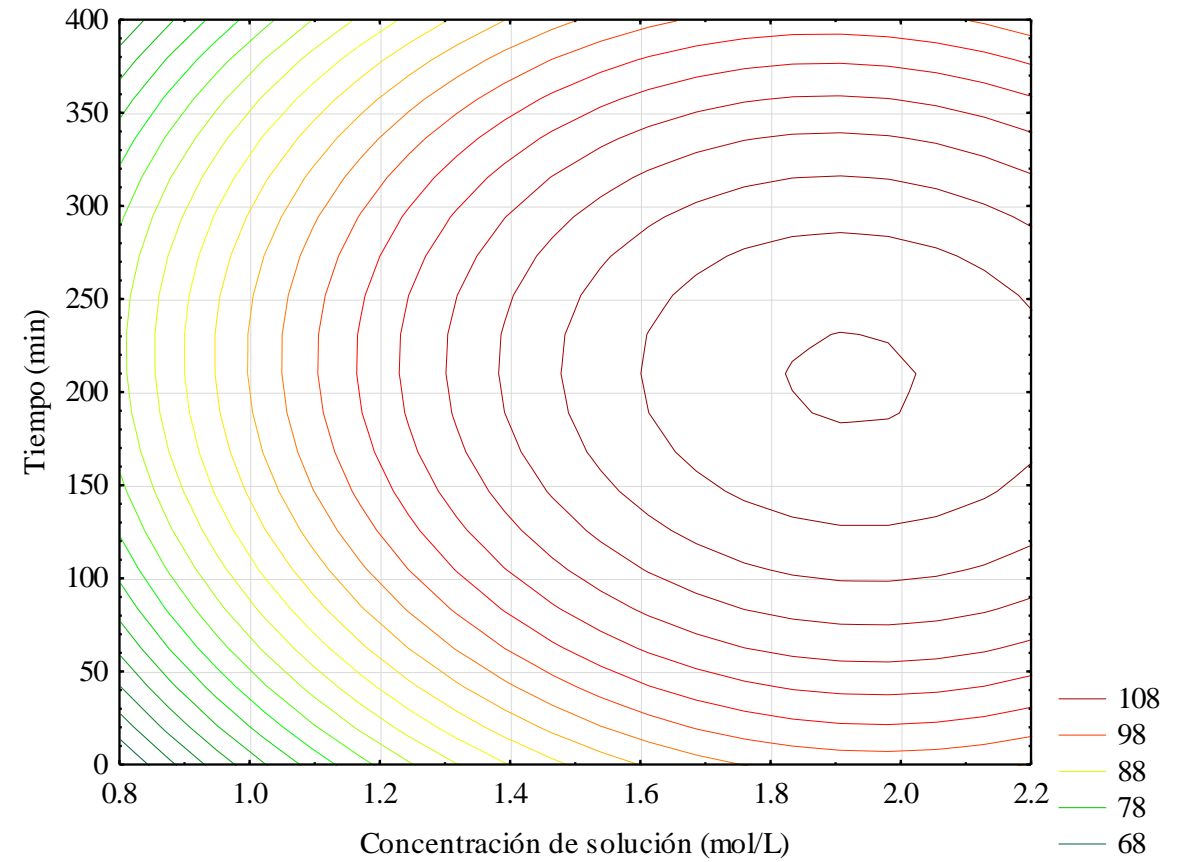


# Superficie de contornos

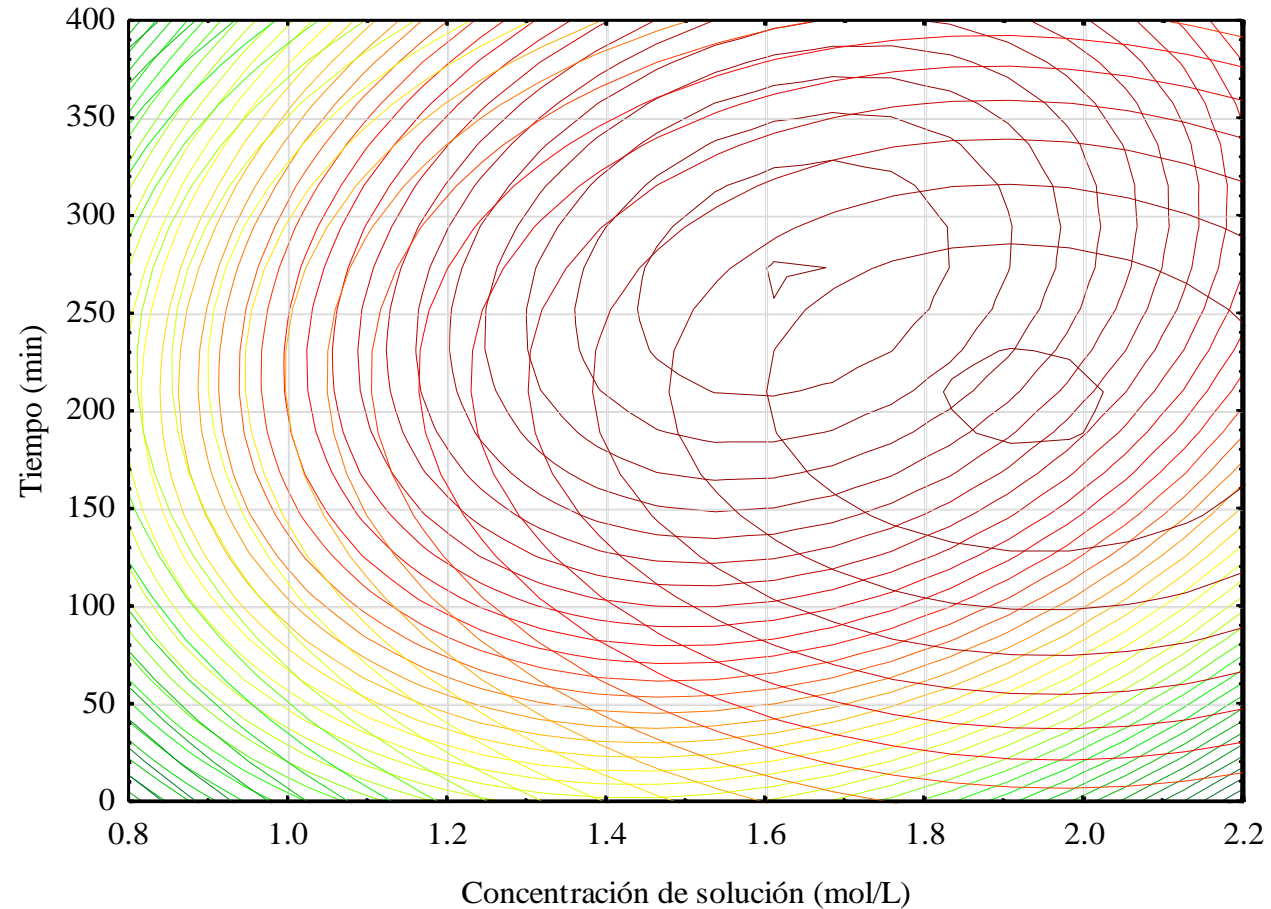
## Antocianinas



## Compuestos fenólicos



## Superposición de contornos



<b>Concentración de solución (mol/L)</b>	1.645
<b>Tiempo (min)</b>	224.161

<b>Antocianinas</b>	<b>Compuestos fenólicos</b>
70.76	108.30

## Comparaciones antocianinas

Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Observados	Redes neuronales artificiales			Superficie de respuesta DCCR		
			Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)	Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)
1.05	104	56.65	56.65	0.00	0.00	58.01	-2.40	2.40
1.87	104	59.41	59.41	-0.01	0.01	61.15	-2.93	2.93
1.05	316	59.70	60.41	-1.19	1.19	60.53	-1.39	1.39
1.87	316	66.63	70.70	-6.11	6.11	67.84	-1.82	1.82
0.88	210	57.78	57.78	0.00	0.00	56.77	1.77	1.77
2.04	210	65.71	65.71	0.00	0.00	64.16	2.37	2.37
1.46	60	61.70	61.70	0.00	0.00	60.04	2.71	2.71
1.46	360	67.46	67.46	0.01	0.01	66.55	1.36	1.36
1.46	210	73.39	70.62	3.78	3.78	71.53	2.53	2.53
1.46	210	66.25	70.62	-6.59	6.59	71.53	-7.97	7.97
1.46	210	72.22	70.62	2.22	2.22	71.53	0.95	0.95
1.46	210	74.27	70.62	4.91	4.91	71.53	3.68	3.68
Promedio				-0.25	2.07		-0.09	2.66
R <sup>2</sup>				0.855			0.870	

$$H_0: b_0 = 0 \quad H_0: b_1 = 1$$

Observados con DCCR

	Coeficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	8.441	-7.030	23.912
$b_1$	0.870	0.634	1.107

Observados con RNA

	Coeficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	9.662	-6.511	25.835
$b_1$	0.853	0.606	1.100

DCCR con RNA

	Coeficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	2.938	-8.634	14.509
$b_1$	0.956	0.779	1.133

## Comparaciones compuestos fenólicos

Concentración de solución (mol/L)	Tiempo (min)	Observados	Redes neuronales artificiales			Superficie de respuesta DCCR		
			Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)	Predichos	Error (%)	Error absoluto (%)
1.05	104	90.64	90.60	0.04	0.04	90.82	-0.20	0.20
1.87	104	110.46	110.50	-0.03	0.03	108.84	1.47	1.47
1.05	316	89.66	89.90	-0.27	0.27	93.30	-4.06	4.06
1.87	316	103.19	108.10	-4.76	4.76	105.02	-1.78	1.78
0.88	210	91.73	91.70	0.04	0.04	89.45	2.50	2.50
2.04	210	110.20	110.20	0.00	0.00	110.47	-0.24	0.24
1.46	60	98.06	98.10	-0.04	0.04	99.50	-1.46	1.46
1.46	360	102.02	102.00	0.02	0.02	98.57	3.40	3.40
1.46	210	106.32	107.70	-1.30	1.30	108.98	-2.50	2.50
1.46	210	109.03	107.70	1.22	1.22	108.98	0.05	0.05
1.46	210	107.71	107.70	0.01	0.01	108.98	-1.17	1.17
1.46	210	112.84	107.70	4.55	4.55	108.98	3.42	3.42
Promedio				-0.04	1.02		-0.05	1.86
R <sup>2</sup>				0.928			0.918	

$$H_0: b_0 = 0 \quad H_0: b_1 = 1$$

Observados con DCCR

	Coefficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	8.456	-11.489	28.402
$b_1$	0.918	0.724	1.111

Observados con RNA

	Coefficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	7.521	-11.179	26.221
$b_1$	0.927	0.745	1.108

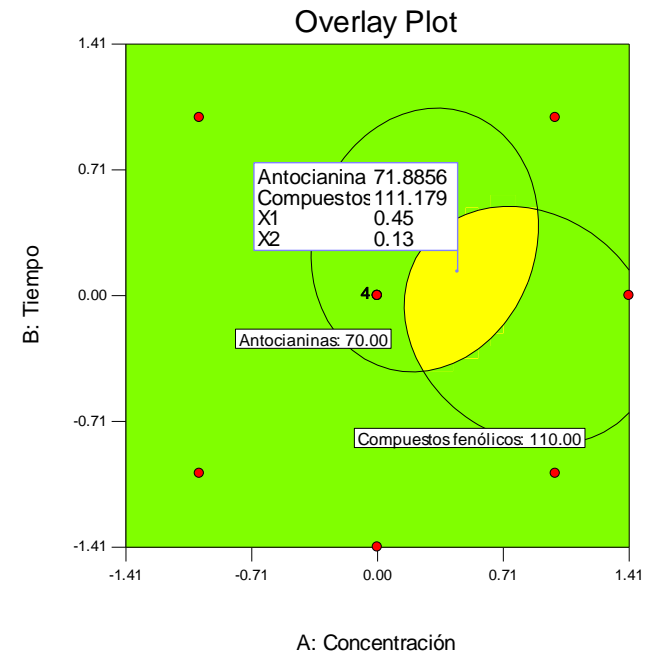
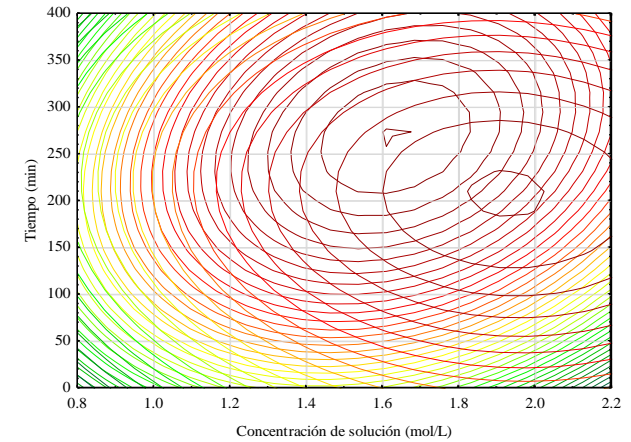
DCCR con RNA

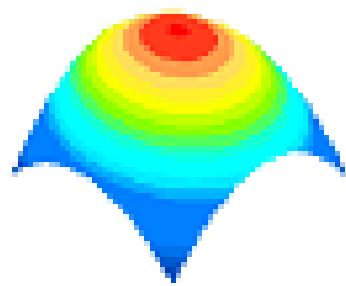
	Coefficientes	Inferior 95%	Superior 95%
$b_0$	3.221	-15.985	22.427
$b_1$	0.969	0.782	1.155

## Combinaciones y respuesta óptima predicha

Factor	Level
Concentración (mol/L)	1.645
Tiempo (min)	224.161

Response	Predicción		
	RNA	DCCR	Dif (absoluta)
Antocianinas	70.76	71.89	1.13
Compuestos fenólicos	108.30	111.18	2.88





**Data Engineering**

*Soluciones e Ingeniería*

**Gracias.....**