

EVOLUCIÓN DE LOS MÉTODOS PARA EL RECONOCIMIENTO DE OLORES
UTILIZANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES

LUCAS ALBERTO PERCY VERGARA

EDUARDO FELIPE ONIEL RAMOS

CORPORACIÓN UNIVERSITARIA TECNOLÓGICA DE BOLIVAR
FACULTAD DE INGENIERIA ELECTRICA Y ELECTRÓNICA
MINOR EN AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL
CARTAGENA DE INDIAS DT Y C

2003

EVOLUCIÓN DE LOS MÉTODOS PARA EL RECONOCIMIENTO DE OLORES
UTILIZANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES

LUCAS ALBERTO PERCY VERGARA
EDUARDO FELIPE ONIEL RAMOS

Monografía para optar al título de
Ingeniero Electrónico o Electricista

Director
EDUARDO GOMEZ
Ingeniero Electricista (Mcs)

CORPORACIÓN UNIVERSITARIA TECNOLÓGICA DE BOLIVAR
FACULTAD DE INGENIERIA ELECTRICA Y ELECTRÓNICA
MINOR EN AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL
CARTAGENA DE INDIAS DT Y C
2003

Nota de Aceptación

Presidente del Jurado

Jurado

Jurado

Cartagena de Indias DT y C, 6 de Mayo de 2003

A Dios Padre que nos ha
bendecido con familias tan
hermosas.

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan sus agradecimientos a: Eduardo Gómez, Ingeniero Electricista, Maestro en Ciencias Computacionales y Director de la investigación, por su paciencia, motivación y valiosas orientaciones, a la Dirección de la Facultad de Ingeniería Eléctrica y Electrónica por facilitar los mecanismos y diversificar las opciones para optar al título profesional, a nuestros padres y en general a nuestros familiares y amigos, pues su apoyo emocional fue determinante para la realización de este trabajo.

TABLA DE CONTENIDO

	Pag.
OBJETIVOS	10
INTRODUCCIÓN	11
1. RECONOCIMIENTO DE OLORES	12
2. LA e-NOSE	15
2.1 EL SISTEMA SENSOR	22
2.2 SISTEMA DE RECONOCIMIENTO AUTOMATICO DE PATRONES	24
3. FUNDAMENTACION DE LAS REDES NEURONALES	34
3.1 CARACTERISTICAS DE UNA RED NEURONAL	35
3.2.1 MODELO BACKPROPAGATION	36
3.2.2 REDES COMPETITIVAS	42
3.2.3 MAPAS DE AUTOORGANIZACIÓN	45
3.2.4 LEARNING VECTOR QUANTIZATION	47
3.2.5 RED DE HAMMING	48
3.2.6 RED DE HOPFIELD	54
4. POTENCIALIDAD	59
4.1 INDUSTRIA ALIMENTICIA	59
4.2 APLICACIONES MEDICAS	60
4.3 APLICACIONES AMBIENTALES	61
4.4 APLICACIONES MILITARES	62
4.5 UN EJEMPLO PRACTICO	63
5. APLICACIONES LOCALES	67
6. CONCLUSIONES	70
7. BIBLIOGRAFÍA	71

LISTA DE FIGURAS

	Pag.
Figura 1. Proceso del sistema olfativo	12
Figura 2. Componentes del sistema olfativo humano	13
Figura 3. Diagrama de bloques de la e-NOSE	20
Figura 4. Secuencia del análisis de olores de una e-NOSE	21
Figura 5. PCA (análisis de las componentes principales)	26
Figura 6. DFA (análisis discriminante de funciones)	27
Figura 7. PLS (cuadrados parciales mínimos)	28
Figura 8. Histograma producido por un conjunto serial de sensores	29
Figura 9. Sistema de cromatografía de gases usando sensores SAW	30
Figura 10. Cromatografía de gases para crear imágenes de vapor	30
Figura 11. Proceso de una red neuronal	25
Figura 12. Red de tres capas	36
Figura 13. Notación compacta de una red de tres capas	38
Figura 14. Disposición de una red sencilla de 3 capas	40
Figura 15. on-center/off-surround; para capas biológicas	46
Figura 16. Vecindarios	47
Figura 17. Red LVQ	48
Figura 18. Comportamiento de las neuronas en una red LVQ	49
Figura 19. Resultado después de la primera y después de muchas iteraciones	50
Figura 20. Red de Hamming	51
Figura 21. Variación de la rata de aprendizaje	53
Figura 22. Causa de la muerte de una neurona	54
Figura 23. Circuito Eléctrico red Hopfield	55

Figura 24. Notación compacta red de Hopfield	56
Figura 25. Diagrama esquemático y fotografía de un prototipo de e-NOSE	63
Figura 26. Salida por pantalla del sistema de nariz electrónica	64

LISTA DE TABLAS

	Pag.
Tabla 1. Algunas e-NOSE disponibles en el mercado internacional	33
Tabla 2. Comparativo entre Backpropagation(BP) y Neurofuzzy(FA)	66

OBJETIVO GENERAL

Consolidar el estado del arte de los sistemas de reconocimiento de olores para posteriores proyectos de investigación a desarrollar en la Corporación Universitaria Tecnológica de Bolívar.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Describir los diferentes métodos utilizados en reconocimiento de olores haciendo énfasis en Redes Neuronales.
- Elaborar un compendio sobre redes neuronales artificiales aplicadas al reconocimiento de olores que sirva como base para el desarrollo de proyectos futuros en la CUTB.
- Documentar los diferentes métodos y modelos para el reconocimiento de olores utilizando RNA's.
- Presentar una recopilación bibliográfica sobre aplicaciones y potencialidad del reconocimiento de olores utilizando RNA's
- Exponer estructuradamente los métodos para el procesamiento de señales en un sistema de reconocimiento de olores utilizando RNA's.
- Realizar una síntesis de las diferentes topologías, algoritmos de aprendizaje y potencialidad de las RNA's aplicadas al reconocimiento de olores.

INTRODUCCIÓN

Los seres vivos son máquinas complejas, dotadas de una gran variedad de instrumentos de medición, de análisis, de recepción de estímulos, de reacción y de respuesta. Los cinco sentidos, esas ventanas que nos conectan con el mundo exterior y a través de las cuales percibimos importante información sobre todo cuanto nos rodea, nos permiten ejercer nuestra capacidad de selección en el proceso de asimilación de información. Así, un ser humano puede evaluar las cosas por medio de las percepciones sensoriales en combinación con su memoria. La vista, el oído, el olfato... trabajando por separado o en combinación constituyen nuestra conexión con el mundo, una conexión que se erige como el gran misterio a develar por la medicina y la tecnología actual; crear máquinas que se parezcan a cerebros humanos, capacitadas para observar un comportamiento inteligente, es el campo de investigación de la robótica y la inteligencia artificial, dentro de esta temática se encuentran tanto las actividades relacionadas con el raciocinio, es decir, planeamiento y estrategia, como las relacionadas con la percepción y reconocimiento de la información del entorno (imágenes, olores, sonidos, texturas y sabores). Así, las llamadas tecnologías bioinspiradas nacen de la aplicación de conceptos de inspiración biológica al diseño de sistemas analíticos. El objetivo, en suma, es comprender e imitar la forma en que los sistemas biológicos aprenden y evolucionan. Para diseñar estos sistemas, además de utilizar la computación tradicional, se usan otras metodologías tales como las redes neuronales artificiales, la lógica difusa y la computación evolutiva. Por ello, esta monografía busca orientar y servir de ayuda al estudiante que inicia su proceso de investigación en el tema de las narices electrónicas.

1. RECONOCIMIENTO BIOLÓGICO DE OLORES

El sistema olfativo de los mamíferos utiliza una gran variedad de sensores químicos conocidos como receptores olfativos combinados con un procesamiento de señales en el bulbo olfativo y el reconocimiento automático de patrones en la corteza olfativa del cerebro. No hay un tipo de receptor que identifique un olor específico, es el conjunto de receptores combinado con patrones de reconocimiento lo que conlleva a un resultado cualitativo en la detección e identificación de cada olor. En la figura 1 se ilustra el proceso del sistema olfativo. Al oler las moléculas de olor se estimulan los receptores olfativos y se produce una respuesta electroquímica que es transmitida hasta el bulbo olfativo y luego a la corteza olfativa para su identificación.

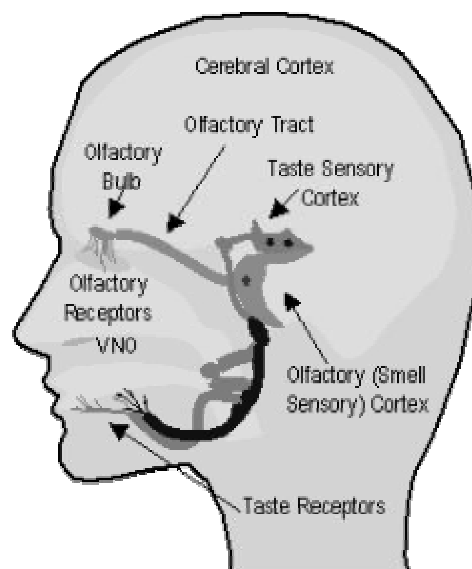


Figura 1. Proceso del sistema olfativo

El proceso olfativo empieza con oler cada molécula del aroma desde el exterior hasta dentro de la nariz. Con la acción de los cornetes (estructura ósea de la nariz que produce turbulencia), la acción de oler también mezcla las moléculas del aroma dentro de una concentración uniforme y envía estas moléculas hasta las capas de mucosa en el epitelio olfativo en la parte superior de la cavidad nasal. Luego, las moléculas de aroma disueltas en esta delgada capa mucosa son transportadas hasta la cilia (conjunto de fibras microscópicas) de las neuronas receptoras olfativas, la capa mucosa también actúa como filtro para remover partículas grandes que pudieran bloquear la acción receptora.

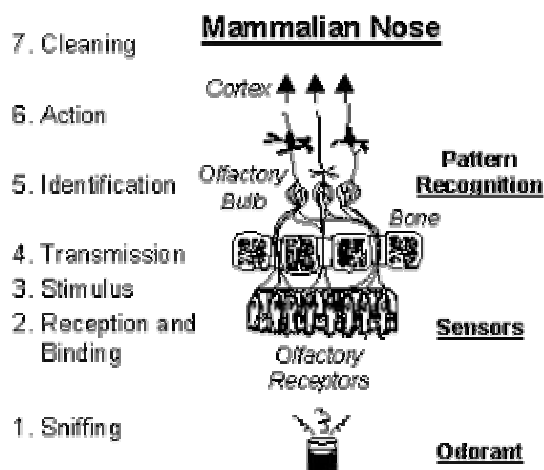


Figura 2. Componentes del sistema olfativo humano.

El sistema olfativo de los mamíferos¹ cuenta con todos los bloques necesarios para su reproducción de manera artificial, cuenta con los receptores olfativos (sensores), el bulbo olfativo (procesamiento de señales) y la corteza olfativa (identificación del olor), sin embargo, un paso fundamental es el aspirado o “sniff” que lleva las moléculas de olor hasta los receptores olfativos.

1. P. Keller, "Physiologically Inspired Pattern Recognition for Electronic Noses," SPIE Aplicaciones y ciencia de la inteligencia computacional II, Procedimientos de SPIE, vol. 3722, no. 13, pp. 144-153, 1999.

Estos receptores olfativos responden químicamente a las moléculas del olor, este proceso combina temporalmente las moléculas del olor con las proteínas que las transportan y atraviesan la membrana receptora. Cada vez que atraviesan el límite, las moléculas del olor estimulan químicamente a los receptores y generan una señal eléctrica, estos están compuestos por diferentes lazos de proteínas y están organizados aleatoriamente en el epitelio olfativo, las señales eléctricas son transportadas desde las neuronas receptoras por el axon olfativo a través del plato cribiforme (un hueso perforado que separa la cavidad craneal y el cerebro de la cavidad nasal) hasta el bulbo olfativo (una estructura en el cerebro localizada sobre la cavidad nasal). Desde ahí, la información de respuesta del receptor es transmitida hasta la corteza olfativa donde se lleva a cabo el reconocimiento del olor, después, la información es transmitida hasta el sistema límbico y luego a la corteza cerebral; finalmente, para que la nariz vuelva a responder a nuevos olores, los receptores olfativos deben ser limpiados, esto implica aspirar aire fresco y remover las moléculas del olor de los receptores olfativos. El estudio de los aromas es importante en las industrias de alimentos, cosméticos y en el empaque de productos, es de relevancia para el control de la calidad de estos y para el de ciertos procesos industriales que emiten olores ya que el olor interviene en forma destacada cuando se elige qué comprar y por ende, es un instrumento esencial de comercialización, lo que influye en la actividad industrial. La identificación de olores ayuda en la seguridad industrial en casos como la constatación, por esa vía, de la presencia de gases nocivos en ambientes cerrados. Así, se han colocado narices electrónicas en las estaciones satelitales y en naves de guerra, para descartar falsas alarmas de incendio o de contaminación con agentes tóxicos.

2. LA e-NOSE

De los cinco sentidos, el olfato ha sido siempre el más difícil de definir, comprender su funcionamiento es la meta que se han fijado desde hace tiempo muchos investigadores, el aroma es una cualidad subjetiva desde el punto de vista humano pues depende de numerosas sustancias químicas que le dan un carácter y unas cualidades únicas. La capacidad de medir e identificar fiablemente el desarrollo óptimo del aroma, así como las características constantes del sabor, es por tanto, un punto crucial en el desarrollo de muchos productos, los encargados de esta difícil tarea siempre han sido los "expertos en olores", pero es inevitable que esas personas incluyan en su juicio individual un toque de apreciación personal²; en contraposición a este hecho, existen técnicas analíticas pero muchas veces es difícil combinar datos con informaciones sensoriales; por otra parte, los costos de la labor de los expertos son muy elevados, en cambio, las medidas efectuadas con una nariz electrónica son objetivas, reproducibles, fiables y, además, relativamente baratas. Su interpretación es sencilla, rápida y se realiza en tiempo real; al igual que ocurre con el olfato humano, la nariz electrónica puede aprender con la experiencia y mejorar sus facultades a medida que se va utilizando, está diseñada para analizar, reconocer e identificar niveles muy bajos (partes por millón) de sustancias químicas volátiles, su tecnología se basa en la absorción y desorción de sustancias químicas volátiles que atraviesan una matriz de sensores, que traducen los cambios específicos en resistencias e impulsos eléctricos y en el procesamiento cualitativo pero específico de estas señales.

2. B.S. Hoffheins, Using Sensor Arrays and Pattern Recognition to Identify Organic Compounds, MS-Thesis, University of Tennessee, Knoxville, TN, USA, 1989.

Las narices electrónicas, son en esencia complejos artefactos que crean huellas olfativas únicas, y se usan en un número cada vez más importante de industrias para el control de calidad y el desarrollo de algunos productos, su potencialidad es prácticamente inimaginable: desde productos alimenticios, pasando por detección de sustancias disueltas, sistemas antiterroristas, control de narcóticos, medición de concentración de gases peligrosos, calidad del ambiente, etc, estos dispositivos están inspirados en el sistema olfativo de los mamíferos y diseñados para realizar las mismas funciones que dicho sistema, entre las narices naturales, las de algunas razas de perros se cuentan entre las más asombrosas, pues son capaces de identificar a ciertas personas, como el amo del animal, solo por el olor, las narices electrónicas intentan hacer lo mismo, pero a diferencia de las biológicas, tienen la particularidad de que se valen de la matemática para describir lo que identifican, de manera análoga, las eNOSE pueden identificar distintos olores (por ejemplo varios perfumes diferentes) sin conocer la composición química de la mezcla de gases que los provocan ni la de los productos que emiten esos gases. La cualidad olor interviene en forma destacada cuando se elige qué comprar y, por ende es un instrumento esencial de comercialización, lo que influye en la actividad industrial, por ello el estudio de los aromas es tan importante en las industrias de alimentos, cosméticos, bebidas y en el empaque de productos, y es por esto que es de tanta relevancia para el control de calidad y de ciertos procesos industriales que emiten olores. La identificación de olores ayuda en la seguridad industrial en casos como la constatación, por esa vía, de la presencia de gases en ambientes cerrados, así, se han colocado narices electrónicas en las estaciones satelitales y en naves de guerra, para descartar falsas alarmas de incendio. A la pregunta básica de qué es un olor, solo se puede dar una respuesta casi tautológica: es la señal que vapores o gases inducen en el cerebro por la vía de los estímulos del sistema olfativo, en muchos casos esos

gases son liberados en el aire por un solo compuesto, por ejemplo alcohol puro, pero en la mayoría de los casos, el olor se debe a una mezcla de sustancias químicas: un perfume fino puede provenir de hasta 150 compuestos diferentes, mezclados en proporciones establecidas. Los olores de los alimentos provienen por lo común de un número mayor de compuestos, que puede ascender a varios cientos, a través de redes de sensores se puede percibir la presencia de ciertas cosas, por ejemplo algún compuesto químico o radiación electromagnética, y de producir, como consecuencia, una señal eléctrica. Dicha percepción tiene lugar porque el objeto o fenómeno percibido ocasiona un cambio físico o químico en el material del sensor, el cual da origen a la señal eléctrica, que constituye su respuesta. Los ojos actúan como sensores de un tipo particular de radiación electromagnética, llamada, precisamente, radiación visible, del mismo modo, las células receptoras de la nariz son sensores de algunos tipos de mezclas gaseosas, cuya presencia percibimos bajo la forma de olores. Pero de la misma manera que los ojos no pueden detectar radiaciones como las infrarrojas, las ultravioletas o los rayos X, los sensores olfativos tampoco son de aplicación universal; por ejemplo, los receptores olfativos humanos no permiten oler gases como el monóxido de carbono, ni la mayoría de los que componen el gas natural, porque, posiblemente, a lo largo de la evolución ello no haya sido indispensable para la supervivencia de la especie, ni hubiese conferido una sensible ventaja a los individuos dotados de esa facultad. El campo de los sensores es amplísimo³ e incluye desde aquellos que reaccionan ante propiedades físicas (temperatura, humedad, radiación), los que detectan moléculas biológicas como enzimas, antibióticos, fármacos, etc., llamados biosensores, con enormes aplicaciones en medicina, bioquímica y

3. T. Moriizumi, T. Nakamoto, and Y. Sakuraba, "Pattern Recognition in Electronic Noses by Artificial Neural Network Models," *Sistemas de Sensores y Sensorización para una Nariz Electrónica*, J.W. Gardner and P.N. Bartlett (ed.s), pp. 217-236, Publicaciones Académicas Kluweer, Amsterdam, Netherlands, 1992

biotecnología, y los sensores químicos, que reaccionan ante la presencia de gases, muchos de los últimos son inespecíficos, es decir, tienen la misma respuesta ante gases de naturaleza química distinta (ante determinada concentración de vapores de benceno reaccionan igual que ante vapores de alcohol en menor concentración). Técnicamente se dice que los sensores químicos no pueden reconocer las moléculas que les llegan: carecen de reconocimiento molecular, existen muy diferentes e ingeniosos tipos de sensores de gases; los tradicionales se basan en semiconductores de óxidos metálicos, diseñados principalmente con base en dióxido de estaño (SnO_2), sin embargo, otros materiales gozan hoy de mayor popularidad, como cierto tipo de polímeros conductores, basados en cadenas conjugadas de pirrol, anilina o tiofeno, se caracterizan por su alta sensibilidad, operan a temperatura ambiente y son relativamente fáciles de obtener en el laboratorio por oxidación de sus monómeros. Pero un sensor no es una nariz electrónica porque su capacidad de percepción se restringe a un tipo específico de fenómenos, un sensor individual puede indicar, por ejemplo, que se produjo un escape de gas en una vivienda, en un establecimiento industrial o comercial o en un vehículo propulsado por gas natural comprimido. Pero seguramente daría la misma señal de alarma en un depósito si derramaran solventes volátiles que si tuviera lugar un incendio, pues no puede distinguir entre ambas situaciones, por eso no es raro que las alarmas de incendio se activen en presencia de humo de cigarrillo.

Un sensor individual no puede diferenciar ni, mucho menos, clasificar olores, una nariz electrónica, en cambio, puede hacerlo. Una nariz electrónica realiza, esencialmente, dos tareas: detecta gases mediante un conjunto de sensores con distinta capacidad específica (es decir que perciben diferentes gases) y analiza las respuestas de esos sensores para identificar los olores. Cada olor se caracteriza

por determinado patrón de reacción de conjuntos específicos de sensores, ya que cada olor es el producto de una mezcla que puede o no ser muy compleja, ese patrón conforma algo así como una huella digital que permite identificar el olor, las narices electrónicas se valen de la inespecificidad de las respuestas de los sensores individuales y realizan un reconocimiento de patrones. Algunos sensores pueden dar la misma respuesta a mezclas gaseosas diferentes, pero el conjunto de los sensores, si estos están bien elegidos, producirá una respuesta distintiva ante cada mezcla y, por ende, permitirá identificar el olor, aunque no necesariamente proporcione información acerca de los componentes gaseosos individuales que lo ocasionan. Los dos grandes componentes de una nariz electrónica son el sistema sensor y el sistema de reconocimiento automático de patrones. El sistema sensor como se mencionó anteriormente funciona con uno de los tres métodos siguientes: una matriz de sensores químicos en donde cada sensor mide una propiedad diferente del químico sentido o un solo sensor que produzca una matriz de mediciones para cada químico o una combinación de ambos métodos. Cada olor o componente volátil presentado a la matriz de sensores produce un patrón característico del olor, presentado varios olores a la matriz de sensores se puede crear una base de datos de patrones, una vez que se tenga esta base de datos se procede a utilizarla en el entrenamiento de la red. La meta de este proceso de entrenamiento es por supuesto configurar el sistema de reconocimiento para que produzca clasificaciones únicas o encadenamientos de olores y así sea posible la automatización del proceso. Al igual que los sistemas biológicos, las e-NOSE son sistemas cualitativos y rara vez son utilizadas para hacer mediciones exactas de la concentración de alguna sustancia, sin embargo a diferencia de los sistemas biológicos estos dispositivos son usualmente entrenados para identificar solo una pequeña cantidad de olores.

Pero un sistema completo de e-NOSE no solo incluye una matriz de sensores y un software de reconocimiento de patrones, también debe tener un sistema de muestreo, un ventilador para llevar los olores hasta los sensores, un sistema de adquisición y digitalización de datos y por supuesto un efectivo sistema de limpieza, la figura 3 ilustra en un diagrama de bloques la disposición de estos elementos:

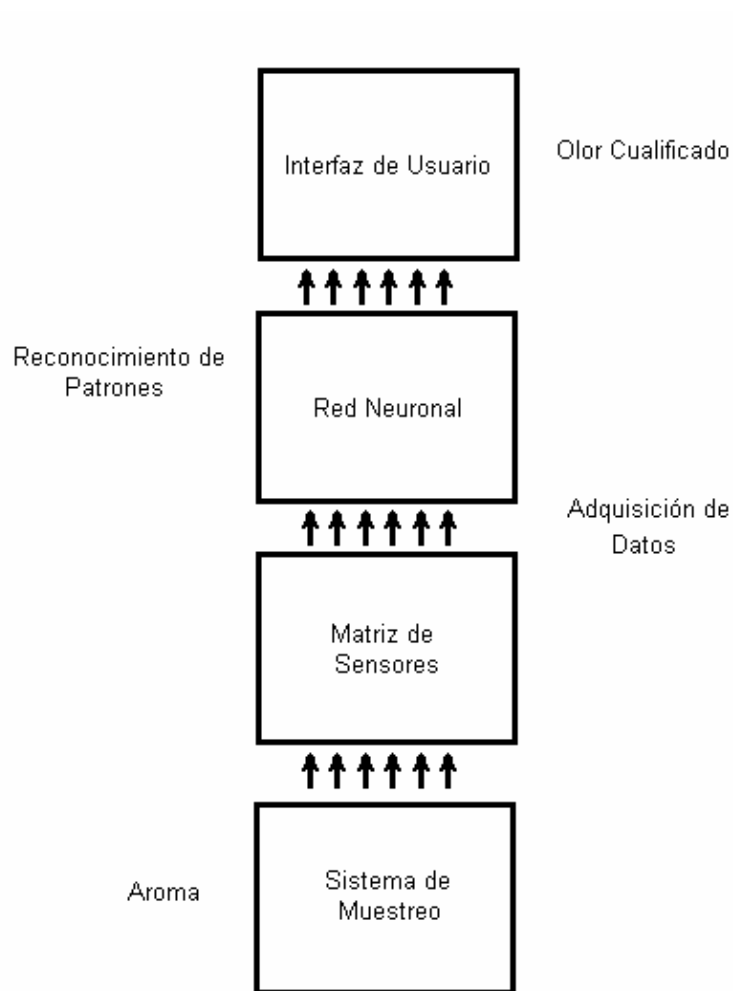


Figura 3. Diagrama de bloques de la e-NOSE

Para ilustrar mejor el funcionamiento descrito con el diagrama de bloques de la figura 3, se muestra la figura 4 en la cual se presenta un diagrama de flujo del proceso de reconocimiento de olores aplicado por las e-NOSE: la muestra es introducida en el sistema de acondicionamiento de muestra que regularmente es una caja con un ventilador que es capaz de llevar la muestra de olores hasta la matriz de sensores en donde es medida y transformada en una variación de impulsos eléctricos, esta señal es amplificada y digitalizada y de acuerdo a la matriz de composición resultante (producto de las mediciones de cada uno de los sensores en la matriz de sensores) se extraen los rasgos característicos únicos para cada aroma, posteriormente la red con base en el conocimiento derivado del entrenamiento visualiza un resultado en forma de mapa o de variación porcentual y con base en esto emite un rótulo con el resultado de la clasificación.

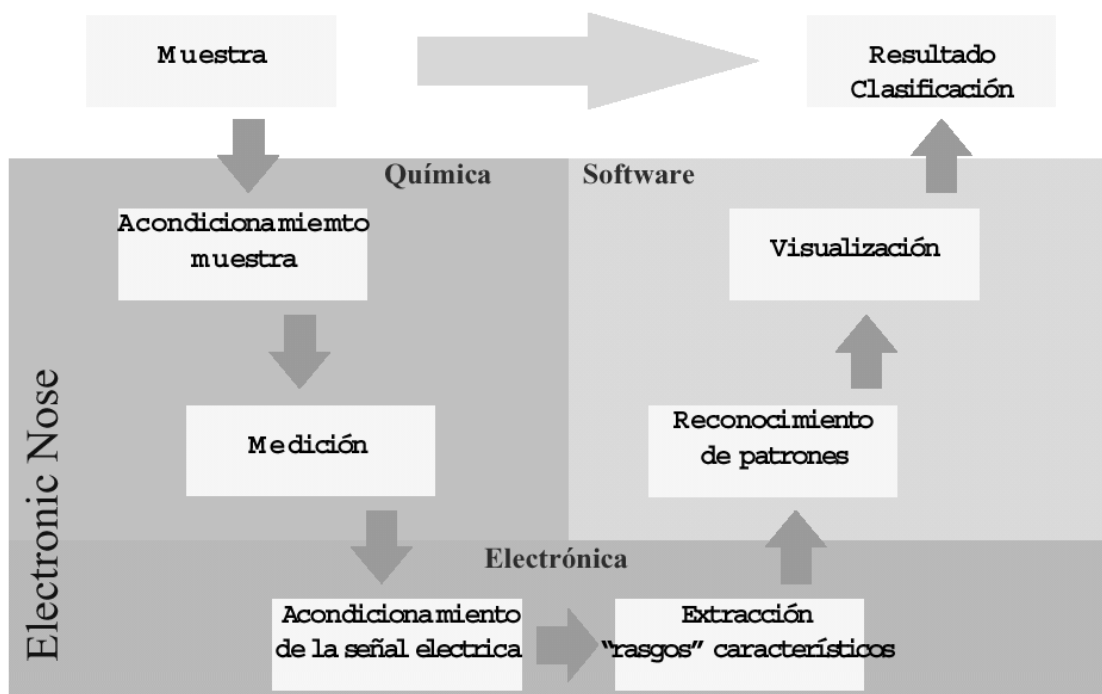


Figura 4. Secuencia del análisis de olores de una e-NOSE

2.1 EL SISTEMA SENSOR

Como se dijo anteriormente, se llama sensor a un elemento capaz de percibir la presencia de ciertas cosas, por ejemplo algún compuesto químico o radiación electromagnética, y de producir, como consecuencia, una señal eléctrica, un cambio de estado o una variación de algún tipo de sistema, dicha percepción tiene lugar porque el objeto o fenómeno percibido ocasiona un cambio físico o químico en el material del sensor, el cual da origen a una señal, que constituye la respuesta del sensor. El amplio rango de medición de los sensores es compensado con los sistemas avanzados de procesamiento de información y por ello deben estar perfectamente ajustados a las necesidades del sistema, esto incluye factores como velocidad de operación, costo, tamaño, niveles de señal, vida útil, factores de calibración, condiciones de operación y lo mas importante en este tipo de aplicación: la posibilidad de ser limpiados rápidamente; al igual que sucede con el olfato humano, los sensores se saturan luego de un par de pruebas pues deben absorber una cantidad determinada de moléculas de olor para poder producir cambios en su salida, después de haber hecho el reconocimiento, el proceso de sensado debe revertirse completamente por medio de una rutina de limpieza. La elección del tipo de sensor para cumplir con lo expresado anteriormente es compleja⁴ debido al estudio previo de componentes de las sustancias que se quieren reconocer y a las hojas de condiciones técnicas y de operación e incluye semiconductores tipo oxido de metal (MOS), polimeros conductores (CP), oligomeros conductores (CO), dispositivos de superficie de onda acústica (SAW), sensores de microbalanza de cuarzo, transistores de efecto de campo químico (ChemFET), sensores de fibra óptica (FO), entre otros.

4. Gardner J.W., Bartlett P.N., 1994, A brief history of electronic noses. *Sensors and Actuators B* 18-19, 211-220.

Un semiconductor del tipo óxido de metal (MOS) es un dispositivo que opera por principio resistivo, las moléculas de gas experimentan un proceso de reducción en la superficie de la película produciendo un cambio en la resistividad; para remover las moléculas ocurre una reacción de oxidación, y un microcalefactor ayuda a esta reacción. Entre otras ventajas están: bajo costo, longevidad, baja sensibilidad a la humedad, electrónica sencilla y el hecho de que la selectividad puede ser modificada dopando el óxido metálico con otro elemento (Por ejemplo Pt, Pd, Au etc...), las desventajas de este tipo de sensores son: opera a muy altas temperaturas (entre 300 y 500 °C), alto consumo de energía, y una sensibilidad bastante modesta (de 5 a 500 partes por millón). Un sensor tipo polímero conductor (CP) es una lámina semiconductor de polímeros diseñada para absorber cierto tipo de moléculas, cuando esto ocurre la conductividad del sensor cambia. Ventajas: amplio rango de selectividad, alta sensibilidad (0.1 a 100 ppm), estabilidad y operación a temperatura ambiente, su mayor desventaja es la altísima sensibilidad a la humedad. Los dispositivos de superficie de onda acústica (SAW) son cristales de cuarzo piezoeléctrico combinados con membranas selectivas que absorben cierto tipo de moléculas, estas moléculas absorbidas incrementan levemente la masa del sensor cambiando la frecuencia de resonancia del dispositivo, sus ventajas son: alta selectividad, alta sensibilidad, estabilidad en un amplio rango de temperaturas, baja respuesta a la humedad y excelente reproducibilidad, su desventaja es la alta complejidad en la interfase electrónica. Los sensores de microbalanza de cuarzo (QCM) son dispositivos similares a los SAW en el uso de el cambio de la masa de un cristal piezoeléctrico que indica la presencia y concentración de las moléculas de olor, sin embargo un QCM consiste básicamente en un disco de cuarzo montado entre dos electrodos de oro, tiene características muy semejantes a los SAW. El transistor de efecto de campo químico (ChemFET) es un transistor con el electrodo de compuerta combinado

con una membrana selectiva que absorbe las moléculas de olor y cambia la conductividad a través de la compuerta del transistor. Ventajas: Alta sensibilidad, alta selectividad, y fácil integración con otros elementos electrónicos. Desventajas: muy pocas empresas producen este tipo de dispositivo y en ocasiones las moléculas de olor llegan a penetrar en la química semiconductor del dispositivo. El Sensor de fibra óptica (FO) es un cable de fibra que esta recubierto con una lámina fluorescente que interactúa con las moléculas de olor, un pulso de luz se aplica al sensor y es absorbido por el recubrimiento, la interacción entre las moléculas de olor y la lámina fluorescente hace que haya un pequeño cambio de frecuencia en el retorno del pulso, de este modo la señal reflejada es analizada para determinar las propiedades de la molécula de olor.

2.2 SISTEMA DE RECONOCIMIENTO AUTOMATICO DE PATRONES

Para discriminar entre distintos patrones de reacción, se utilizan diversos métodos matemáticos, como el llamado *redes neuronales artificiales*, inspirado de alguna manera en el sistema nervioso, o el denominado *análisis de componentes principales* (PCA), empleado para análisis estadísticos en biología, medicina, química analítica, etc, las narices electrónicas se valen de la inespecificidad de las respuestas de los sensores individuales y realizan un reconocimiento de patrones; algunos sensores pueden dar la misma respuesta a mezclas gaseosas diferentes, pero el conjunto de los sensores, si estos están bien elegidos, producirá una respuesta distintiva ante cada mezcla y, por ende, permitirá identificar el olor, aunque no proporcione información acerca de los componentes gaseosos

individuales que lo ocasionan, es decir hace lo mismo que el sistema olfativo humano, que identifica los olores como un todo.

El PCA⁵ (Análisis de componentes principales) es uno de los algoritmos de reconocimiento de patrones utilizado en narices electrónicas, el núcleo fundamental de esta técnica, es el problema de la obtención de los vectores y valores propios (principales) de un operador vectorial, que en el campo del cálculo matricial se da bajo el problema de la diagonalización de una matriz cuadrada. Este problema algebraico, que inicialmente impulsó el desarrollo del Análisis Factorial en el estudio de la regresión lineal entre múltiples variables en los trabajos que Hotelling (1933, 1936) y que realizó en aplicaciones biológicas y psicométricas, se ha convertido, a lo largo de nuestro siglo, en uno de los instrumentos más extendidos en todas las ramas científicas. No sólo es una técnica de análisis empírico de la varianza, sino que puede jugar un papel decisivo en la formulación teórica, tal y como lo demuestra su papel protagonista en la formulación de la teoría de la Mecánica Cuántica moderna. En esta técnica, el vector de respuestas puede reducirse si en lugar de las respuestas originales se toman unas pocas combinaciones significativas; entre las ventajas que presenta este método tenemos que es cualitativo, no supervisado, lineal, y con buena repetibilidad; a continuación se muestra un ejemplo construido en computadora: se ha modelado la respuesta de una nariz que tiene 10 sensores, se toman 8 muestras de "olores", por lo que quedan sólo dos componentes principales, a continuación aparecen dos "sectores" en el plano y por lo tanto al aplicar los componentes principales se organizan automáticamente las señales en dos categorías (ver figura 5).

5. H. Hotelling, "Analysis of a complex of statistical variables into principal components," *Trabajos de Psicología Organizacional* 24, pp. 417-498 y pp. 498-520, 1933.,
R. Vaquerizo Romero "Curso de estadística aplicada", http://es.geocities.com/r_vaquerizo/Manual_R9.htm

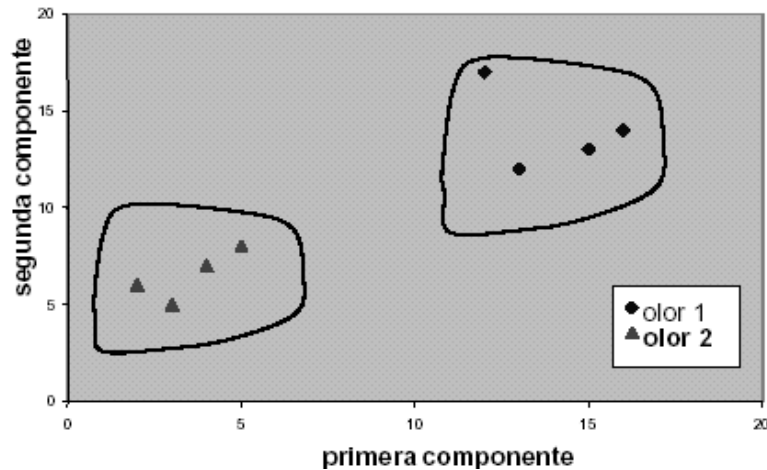


Figura 5. PCA (análisis de las componentes principales)

Otro de los algoritmos estadísticos es análisis discriminante de funciones⁶ (DFA) mostrado en una simulación por computadora en la figura 6, este método es cualitativo, supervisado y paramétrico, y su finalidad es analizar si existen diferencias significativas entre grupos de objetos respecto a un conjunto de variables medidas sobre los mismos para, en el caso de que existan, explicar en qué sentido se dan y proporcionar procedimientos de clasificación sistemática de nuevas observaciones de origen desconocido en uno de los grupos analizados, los resultados obtenidos se interpretan desde dos ópticas: el significado de las dimensiones de discriminación entre los grupos proporcionadas por las funciones discriminantes mediante el análisis de una matriz de estructura y de la de los coeficientes estandarizados de las funciones discriminantes y el análisis del sentido de la discriminación entre dichos grupos, es decir, averiguar qué grupos separa cada función discriminante y en qué sentido. Este análisis se lleva a cabo mediante representaciones gráficas del espacio de discriminación así como de perfiles multivariantes correspondientes a cada grupo.

6. Salvador Figueras, M (2000): "Análisis Discriminante", Estadística <http://ciberconta.unizar.es/LECCION/discr/inicio.html>

El Análisis Discriminante es una técnica estadística multivariante con una finalidad doble: Un fin descriptivo consistente en analizar si existen diferencias entre una serie de grupos en los que se divide una población, con respecto a un conjunto de variables y, en caso afirmativo, averiguar a qué se deben y un fin predictivo consistente en proporcionar procedimientos sistemáticos de clasificación de nuevas observaciones de origen desconocido en algunos de los grupos considerados.

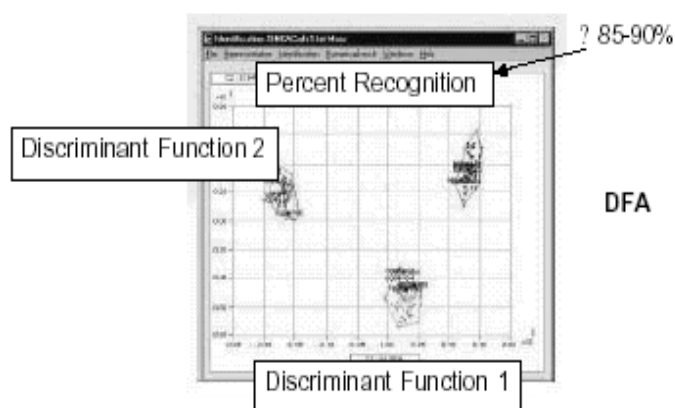


Figura 6. DFA (análisis discriminante de funciones)

De modo análogo, el análisis de cuadrados parciales mínimos (PLS) como se ve en la figura 7, es otro de los algoritmos empleados para el reconocimiento de olores. Es un método cuantitativo, supervisado y lineal en el cual un conjunto de factores rotados son empleados para las principales componentes hasta optimizar la correlación del logro de ambas respuestas y la matriz de concentraciones. Las ventajas sobre la regresión lineal múltiple son: el PLS acepta datos colineales, separa el ruido de la muestra y hace combinaciones lineales en la matriz dependiente de concentraciones.

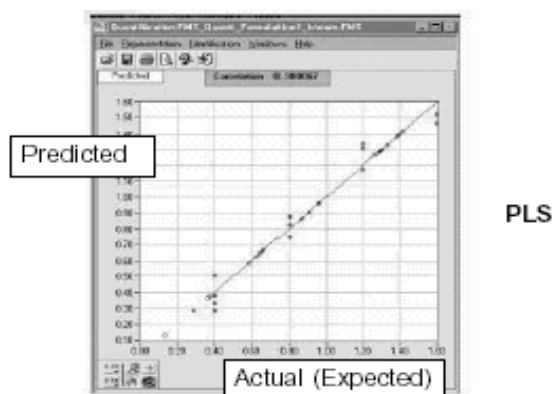


Figura 7. PLS (cuadrados parciales mínimos)

Tradicionalmente, el aroma en los alimentos se ha analizado empleando técnicas de análisis sensorial y/o técnicas cromatográficas con sistemas de detección universal como la espectrometría de masas (MS) o la ionización de llama (FID), además, se encuentra el método manual a través de muestras a mano y analizadas por un especialista, tal método no provee muestras periódicas ni de suficiente frecuencia lo cual resulta poco satisfactorio. Una nariz electrónica provee de una reconocible imagen visual de mezclas de vapores específicas (aromas) que contienen posiblemente cientos de diferentes especies de químicos, los sensores son seleccionados por sus afinidades químicas y son usados comúnmente para este propósito. Cualquier sensor puede ser usado y se puede obtener un señal serial de cada una de las lecturas del sensor produciendo un histograma de las salidas del sensor como se aprecia en la figura 8. Esta respuesta es no correlacionada y algunas veces los sensores múltiples responden a algunas superposiciones de vapores. Esto hace que sea casi imposible de calibrar este tipo de nariz electrónica con los vapores de muestra que contienen mas de un componente.

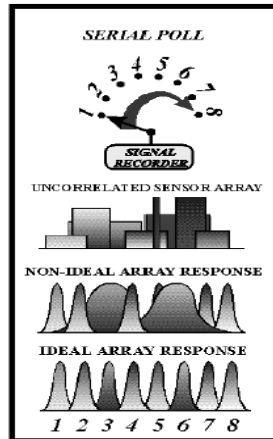


Figura 8. Histograma producido por un conjunto serial de sensores.

En los últimos años, otras técnicas como la cromatografía de gases con detección olfativimétrica (GCO) han complementado el resultado de las técnicas más clásicas, puesto que han permitido cuantificar los componentes volátiles e identificar aquellos que aportan alguna nota aromática al alimento en cuestión; no obstante, esta técnica, como técnica cromatográfica que es, adolece de una falta de rapidez analítica que la hace poco útil en control de calidad, la nariz electrónica, sin embargo, si posee esta característica, puesto que procesa la fracción volátil o aroma de forma global, igual que lo hace la nariz humana, permitiendo clasificar los diferentes alimentos en función de su similitud aromática, aunque no determina la composición de dicho aroma. Un nuevo sistema de cromatografía de gas usando sensores de superficie de onda acústica (SAW) es representado en la figura 9. El sistema incluye un fluido caliente, vapor preconcentrado, ramped de temperatura y una columna de GC directamente calentada, y un sensor SAW . La sensibilidad es excelente porque el sensor SAW tiene picogramos de sensibilidad y no hay disolución de la muestra de vapor, el sensor SAW produce una frecuencia variable en respuesta al análisis de la condensación y evaporación sobre la superficie de cristal de cuarzo.

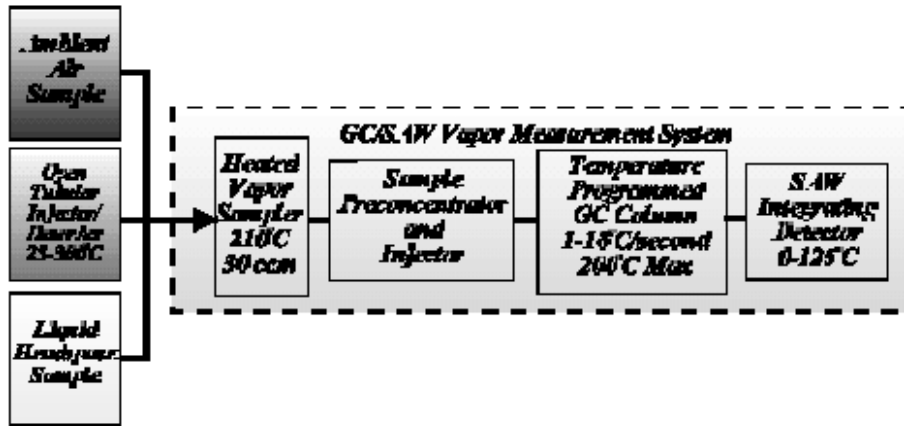


Figura 9. Sistema de cromatografía de gases usando sensores SAW

En una rápida cromatografía la duración del cromatograma es de 10 segundos, los picos anchos son en milisegundos y el tiempo de retención es resuelto dentro de los 20 milisegundos. Así, la potencialidad de los 500 sensores en 10 segundos puede ser obtenida serialmente.

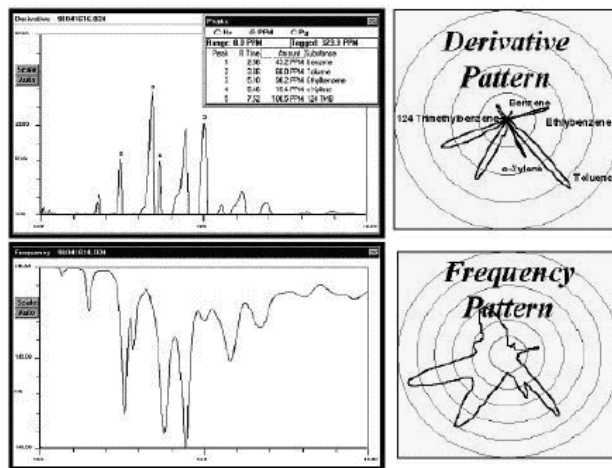


Figura 10. Cromatografía de gases para crear imágenes de vapor

Las respuestas del sensor son casi ortogonales con un mínimo de superposición. Esta característica permite para una fácil y mínima detección un nivel de determinación usando una mezcla química estándar. En la figura 10, también está representado por imágenes de vapor de ambos el sensor de frecuencia y la derivada de la frecuencia. Estas imágenes son formadas por la transformada de la variable tiempo para un ángulo radial con el origen y el fin del análisis ocurrido para 0° o la vertical. Otra técnica muy utilizada es una nariz electrónica basada en la espectrometría de masas (HS-MS). Mediante esta técnica, cuya capacidad analítica ha sido suficientemente probada, se consigue obtener un espectro que equivaldría a un multisensor con tantos sensores como iones formados. Para este tipo de sistema, la presencia de componentes como el etanol no supone un problema, puesto que las interferencias pueden soslayarse prescindiendo de analizar sus iones característicos; otra ventaja sustancial es el hecho de que no sea necesario ningún acondicionamiento del sensor ni de la muestra, con lo que es una técnica muy competitiva para el control de calidad. Además, permite obtener información adicional de la composición de la fracción volátil, ya que los iones contienen información directa de las moléculas, con lo que puede mejorarse la sensibilidad y la selectividad de la medida.

Una de las técnicas novedosas en el campo de la inteligencia artificial (IA) es la que viene desarrollándose con las redes neuronales artificiales (RNA), estas se caracterizan por el aprendizaje a través del entrenamiento en lugar de las descripciones formales, esto las ha hecho la opción preferencial para modelar procesos de variables con interrelaciones complejas, algunos de estos procesos se encuentran en el área de la biotecnología. La estimación de la biomasa en un proceso de fermentación es de particular interés por las dificultades que implica hacer mediciones de este tipo y debido a la robustez implícita en las RNA se

pueden implementar sensores virtuales a través de este método; la meta de muchas de las investigaciones con respecto al sistema de reconocer olores es entender como los olores individuales pueden ser identificados. Muchas investigaciones tienen modelos matemáticos producto de los sistemas de reconocimiento de olores, estos modelos a menudo incluyen simulaciones de sistemas de procesamiento de información neurobiológica⁷ (redes neuronales basadas en la biología); esto es importante considerarlo ya que animales como el ratón tienen aproximadamente 1 millón de neuronas sensoriales mientras que el cerdo tiene alrededor de 100 millones y el ser humano tiene aproximadamente 10 millones; las narices electrónicas son mucho más simples que casi todos los sistemas de olfatear biológicos y detecta solo un pequeño rango de olores, no obstante, tendrá muchas posibilidades de aplicaciones en un futuro próximo.

Cuando una red neuronal se combina con una matriz de sensores, el número de químicos detectables es generalmente es mayor que el número de tipo de sensores que tiene la matriz, adicionalmente, como el análisis de la red neuronal es cualitativo y no requiere gran precisión cuantitativa, es posible utilizar sensores menos precisos, menos especializados y por ende menos costosos. Una vez que la red ha sido entrenada para reconocer los patrones de olor como se describió antes, la operación se vuelve increíblemente sencilla y consiste en la propagación de la información de los sensores a través de la red, lo que computacionalmente consiste en una serie de multiplicaciones de vectores y matrices, operación esta que generalmente demora solo unos milisegundos. A continuación se presenta en la tabla 1 algunas e-NOSE disponibles en el mercado internacional incluyendo el tipo de algoritmo utilizado y su aplicación práctica:

7. T. Kohonen, Self Organization and Associative Memory, Tercera edición. New York, NY, USA, Springer-Verlag, 1989.

Producto	Tipo de Sensor	Proceso	Aplicaciones	Website
Airsense Analysis GmbH	MOS	RNA DC PCA	Producción de alimentos, Adulteración de productos, Sabores y fragancias, Supervisión de olores en producción	www.airsense.com
AlphaMOS	CP MOS QCM SAW	RNA DFA PCA	Control de procesos, de calidad, inspección de aliento, fragancias, procesamiento de alimentos, monitoreo ambiental	www.alpha-mos.com
AromaScan PLC	CP	RNA	Control de procesos, de calidad, fragancias, procesamiento de alimentos, monitoreo ambiental	www.aromascan.com
Bloodhound Sensors Ltd.	CP DLC*	RNA CA DA PCA	Procesamiento de alimentos, control microbiológico, sabores y fragancias, monitoreo ambiental, aseguramiento de la calidad de productos alimenticios, detección de descomposición alimentaria.	www.bloodhound.co.uk/ bloodhound/
Cyrano Sciences Inc.	CP	RNA DA PCA	Calidad en alimentos, control de procesos, diagnóstico médico, monitoreo ambiental	www.cyranosciences.com
EEV Ltd. Neotronics	BAW CP MOS	RNA DA PCA	Producción de alimentos, Sabores y fragancias, Supervisión de olores en producción, monitoreo ambiental, detección de contaminación en empaques, calidad química	www.chemicalsensor.eev.com
Electronic Sensor Technology Inc.	GC SAW	RNA DA	Análisis de aguas oceánicas, fragancias, Producción de alimentos, vapores y enfermedades infecciosas, detección de drogas, explosivos y agentes nerviosos	www.estcal.com
HKR-Sensorsysteme GmbH	QCM MS*	RNA PCA	Producción de alimentos, Sabores y fragancias, Supervisión de olores en producción, monitoreo ambiental, detección de contaminación en empaques, calidad química	home.t-online.de/ home/hkrsensor
Illumina	FO	RNA	Farmacéutica, detección de drogas, bombas y procesamiento de alimentos.	www.illumina.com
Lennartz Electronic GmbH	MOS QCM	RNA PCA	Producción de alimentos, contaminación en empaques	www.lennartz-electronic.de
Nordic Sensor Technologies AB	Chem-FET MOS	RNA PCA	Producción de alimentos, control de calidad, Supervisión de olores en producción, monitoreo ambiental, diagnósticos médicos	www.nordicsensor.com
OligoSense	CO	RNA PCA	Producción de alimentos, Sabores y fragancias, Supervisión de olores en producción, monitoreo ambiental, detección de contaminación en empaques, calidad química	www.uia.ac.be/struct/oligosense/
SMart Nose	MS	DFA PCA	Producción de alimentos, Sabores y fragancias, Supervisión de olores en producción, monitoreo ambiental, detección de contaminación en empaques, calidad química, farmacéutica,	www.smartnose.com
Sawtek Inc.	SAW	RNA PCA	Detección de fraude en productos alimenticios, control de emisiones y contaminantes, agentes químicos.	www.sawtek.com

* = tecnología de sensores planeada para productos futuros, ChemFET = transistor de efecto de campo químico, CO = oligómero conductivo, CP = polímero conductivo, DLC = disco de cristal líquido, FO = Fibra óptica, GC = cromatografía de gases, MOS = semiconductor de metal-óxido, MS = espectrometría de masas, QCM = microbalanzas de cristal de cuarzo, SAW = superficie de onda acústica, RNA = red neuronal artificial, CA = análisis de cadenas, DA = análisis discriminante, DFA = análisis discriminante doble, PCA = análisis de componentes principales.

Tabla 1. Algunas e-NOSE disponibles en el mercado internacional

3. FUNDAMENTACION DE LAS REDES NEURONALES

Basados en la eficiencia de los procesos llevados a cabo por el cerebro e inspirados en su funcionamiento, varios investigadores han desarrollado desde hace más de 30 años la teoría de las Redes Neuronales Artificiales (RNA), las cuales emulan las redes neuronales biológicas, y que se han utilizado para aprender estrategias de solución basadas en ejemplos de comportamiento típico de patrones; estos sistemas no requieren que la tarea a ejecutar se programe, ellos generalizan y aprenden de la experiencia. Las RNA no ejecutan instrucciones, responden en paralelo a las entradas que se les presenta. El resultado no se almacena en una posición de memoria, luego el conocimiento de una red neuronal no se almacena en instrucciones, el poder de la red está en su topología y en los valores de las conexiones entre neuronas. La verdadera potencialidad de las RNA no se ha alcanzado todavía aunque los investigadores han desarrollado potentes algoritmos de aprendizaje de gran valor práctico, tarde o temprano los estudios computacionales del aprendizaje con RNA acabarán por converger a los métodos descubiertos por evolución⁸, cuando eso suceda, muchos datos empíricos concernientes al cerebro comenzarán súbitamente a adquirir sentido y se tornarán factibles muchas aplicaciones desconocidas de las redes neuronales. Las RNA no alcanzan la complejidad del cerebro, sin embargo hay dos aspectos similares entre redes biológicas y artificiales, primero los bloques de construcción de ambas redes son sencillos elementos computacionales altamente interconectados y segundo, las conexiones entre neuronas determinan la función de la red.

8. C. Linster, F. Grasso, W. Getz, "Olfactory Coding: Myths, Models and Data," Post-Conferencia de Trabajo sobre Procesamiento de información neuronal, Breckenridge, Colorado, USA, 4-5 December 1998.

3.1 CARACTERISTICAS DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL

El modelo de una neurona artificial es una imitación del proceso de una neurona biológica, puede también asemejarse a un sumador hecho con un amplificador operacional, Matemáticamente, podemos representar una neurona simplificada por un valor (que debe ser superado para que se active) y una lista de sus sinapsis y sus fuerzas asociadas.

Se ha postulado que paquetes de neuronas deben compartir esencialmente entradas de otros paquetes, así que la conducta de neuronas individuales es irrelevante. Los paquetes de neuronas más que neuronas individuales necesitan ser modelados pues la fundamentación matemática expresa que los aportes individuales de cada neurona solo hacen parte de una respuesta global.

Existen varias formas de nombrar una neurona artificial, se le puede llamar nodo, neuronodo, celda, unidad o elemento de procesamiento (PE); En la figura 12 se observa un PE en forma general. Las señales de entrada a una neurona artificial son variables continuas en lugar de pulsos discretos, como se presentan en una neurona biológica. Cada señal de entrada pasa a través de una ganancia o peso, llamado peso sináptico o fortaleza de la conexión cuya función es análoga a la de la función sináptica de la neurona biológica. Los pesos pueden ser positivos (excitatorios), o negativos (inhibitorios), el nodo sumatorio acumula todas las señales de entradas multiplicadas por los pesos o ponderadas y las pasa a la salida a través de una función umbral o función de transferencia. La entrada neta a cada unidad se muestra en la figura 12, en donde puede observarse el recorrido de un conjunto de señales que entran a la red.

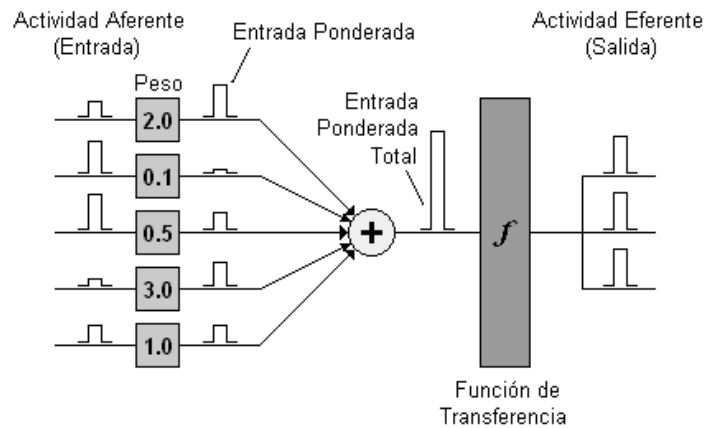


Figura 12. Proceso de una red neuronal

Una vez que se ha calculado la activación del nodo, el valor de salida equivale a: $x_i = f_i(neta_i)$, donde f_i representa la función de activación para esa unidad, que corresponde a la función escogida para transformar la entrada neta i en el valor de salida x_i y que depende de las características específicas de cada red.

3.2.1 Modelo Backpropagation

El primer algoritmo de entrenamiento para redes multicapa fue desarrollado por Paul Werbos en 1974, este se desarrolló en un contexto general, para cualquier tipo de redes, siendo las redes neuronales una aplicación especial, razón por la cual el algoritmo no fue aceptado dentro de la comunidad de desarrolladores de redes neuronales. Fue solo hasta mediados de los años 80 cuando el algoritmo Backpropagation⁹ o algoritmo de propagación inversa fue

redescubierto al mismo tiempo por varios investigadores, David Rumelhart, Geoffrey Hinton y Ronal Williams, David Parker y YRNA Le Cun. El algoritmo se popularizó cuando fue incluido en el libro "Parallel Distributed Processing Group" por los sicólogos David Rumelhart y James McClelland. La publicación de este libro trajo consigo un auge en las investigaciones con redes neuronales, siendo la Backpropagation una de las redes más ampliamente empleadas, aun en nuestros días. Uno de los grandes avances logrados con la Backpropagation es que esta red aprovecha la naturaleza paralela de las redes neuronales para reducir el tiempo requerido por un procesador secuencial para determinar la correspondencia entre unos patrones dados. Además el tiempo de desarrollo de cualquier sistema que se este tratando de analizar se puede reducir como consecuencia de que la red puede aprender el algoritmo correcto sin que alguien tenga que deducir por anticipado el algoritmo en cuestión. La Backpropagation es un tipo de red de aprendizaje supervisado, que emplea un ciclo de propagación – adaptación de dos fases. Una vez que se ha aplicado un patrón a la entrada de la red como estímulo, este se propaga desde la primera capa a través de las capas superiores de la red, hasta generar una salida. La señal de salida se compara con la salida deseada y se calcula una señal de error para cada una de las salidas. Las salidas de error se propagan hacia atrás, partiendo de la capa de salida, hacia todas las neuronas de la capa oculta que contribuyen directamente a la salida. Sin embargo las neuronas de la capa oculta solo reciben una fracción de la señal total del error, basándose aproximadamente en la contribución relativa que haya aportado cada neurona a la salida original. Este proceso se repite, capa por capa, hasta que todas las neuronas de la red hayan recibido una señal de error que describa su contribución relativa al error total. Basándose en la señal de error percibida, se actualizan los pesos de conexión de cada neurona, para hacer que la

9. Rumelhart DE, Hinton GE, Williams RJ. Learning Representations by Back-Propagating Errors. Nature 1986;323:533-6.

red converja hacia un estado que permita clasificar correctamente todos los patrones de entrenamiento. La importancia de este proceso consiste en que, a medida que se entrena la red, las neuronas de las capas intermedias se organizan a sí mismas de tal modo que las distintas neuronas aprenden a reconocer distintas características del espacio total de entrada. Después del entrenamiento, cuando se les presente un patrón arbitrario de entrada que contenga ruido o que esté incompleto, las neuronas de la capa oculta de la red responderán con una salida activa si la nueva entrada contiene un patrón que se asemeje a aquella característica que las neuronas individuales hayan aprendido a reconocer durante su entrenamiento. Y a la inversa, las unidades de las capas ocultas tienen una tendencia a inhibir su salida si el patrón de entrada no contiene la característica para reconocer, para la cual han sido entrenadas. La estructura típica de una red multicapa se observa en la figura 13.

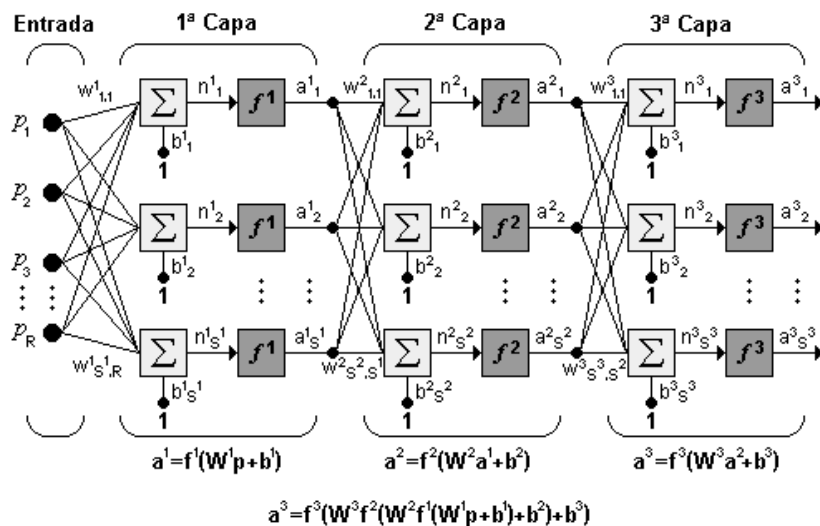


Figura 13. Red de tres capas

En la figura C, W^1 representa la matriz de pesos para la primera capa, W^2 los pesos de la segunda y así similarmente para todas las capas que incluya una red.

Para identificar la estructura de una red multicapa, se empleará una notación abreviada, donde el número de entradas va seguido del número de neuronas en cada capa: $R : S^1 : S^2 : S^3$, donde S representa el número de neuronas y el exponente representa la capa a la cual la neurona corresponde. La notación de la figura 13 es bastante clara cuando se desea conocer la estructura detallada de la red, e identificar cada una de las conexiones, pero cuando la red es muy grande, el proceso de conexión se torna muy complejo .

El algoritmo Backpropagation para redes multicapa realiza su labor de actualización de pesos y ganancias con base en el error medio cuadrático. La red trabaja bajo aprendizaje supervisado y por tanto necesita un set de entrenamiento que le describa cada salida y su valor de salida esperado de la siguiente forma: $\{p_1, t_1\}, \{p_2, t_2\}, \dots, \{p_Q, t_Q\}$, donde p_Q es una entrada a la red y t_Q es la correspondiente salida deseada para el patrón q -ésimo. El algoritmo debe ajustar los parámetros de la red para minimizar el error medio cuadrático. El entrenamiento de una red neuronal multicapa se realiza mediante un proceso de aprendizaje, para realizar este proceso se debe inicialmente tener definida la topología de la red esto es: número de neuronas en la capa de entrada el cual depende del número de componentes del vector de entrada, cantidad de capas ocultas y número de neuronas de cada una de ellas, número de neuronas en la capa de la salida el cual depende del número de componentes del vector de salida o patrones objetivo y funciones de transferencia requeridas en cada capa, con base en la topología escogida se asignan valores iniciales a cada uno de los parámetros que conforma la red, cada patrón de entrenamiento se propaga a través de la red y sus parámetros para producir una respuesta en la capa de salida, la cual se compara con los patrones objetivo o salidas deseadas para calcular el error en el aprendizaje, este error marca el camino mas adecuado para

la actualización de los pesos y ganancias que al final del entrenamiento producirán una respuesta satisfactoria a todos los patrones de entrenamiento, esto se logra minimizando el error medio cuadrático en cada iteración del proceso de aprendizaje. En la figura 14 se vé la disposición de una red sencilla de 3 capas.

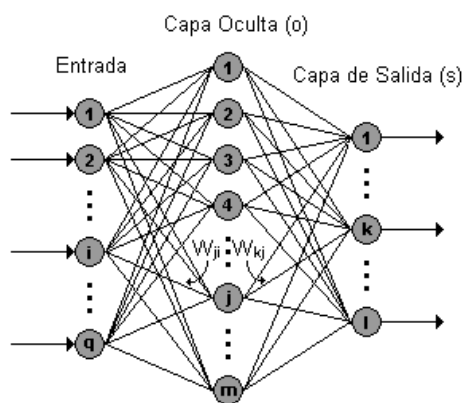


Figura 14. Disposición de una red sencilla de 3 capas

Donde:

q : Equivale al número de componentes el vector de entrada.

m : Número de neuronas de la capa oculta

l : Número de neuronas de la capa de salida

Para iniciar el entrenamiento se le presenta a la red un patrón de entrenamiento, el cual tiene q componentes, luego este se propaga a través de las conexiones existentes produciendo una entrada neta n en cada una las neuronas de la siguiente capa, la entrada neta a la neurona j de la siguiente capa debido a la presencia de un patrón de entrenamiento en la entrada neta es el valor justo antes de pasar por la función de transferencia, luego la salida de la red de cada neurona se compara con la salida deseada para calcular el error en cada unidad de salida y se obtiene un error debido a cada patrón propagado, este proceso se repite para el número total de patrones de entrenamiento, para un proceso de aprendizaje

exitoso el objetivo del algoritmo es actualizar todos los pesos y ganancias de la red minimizando el error medio cuadrático total; el error que genera una red neuronal en función de sus pesos, genera un espacio de n dimensiones, donde n es el número de pesos de conexión de la red, al evaluar el gradiente del error en un punto de esta superficie se obtendrá la dirección en la cual la función del error tendrá un mayor crecimiento, como el objetivo del proceso de aprendizaje es minimizar el error debe tomarse la dirección negativa del gradiente para obtener el mayor decremento del error y de esta forma su minimización, condición requerida para realizar la actualización de la matriz de pesos en el algoritmo Backpropagation; este algoritmo se denomina Backpropagation o de propagación inversa debido a que el error se propaga de manera inversa al funcionamiento normal de la red, de esta forma, el algoritmo encuentra el error en el proceso de aprendizaje desde las capas más internas hasta llegar a la entrada; con base en el cálculo de este error se actualizan los pesos y ganancias de cada capa, en consecuencia la salida de la red no es una función explícita de los pesos de la conexión entre la capa de entrada y la capa oculta, utilizando las técnicas de gradiente descendiente es conveniente avanzar por la superficie de error con incrementos pequeños de los pesos; esto se debe a que tenemos una información local de la superficie y no se sabe lo lejos o lo cerca que se está del punto mínimo, con incrementos grandes, se corre el riesgo de pasar por encima del punto mínimo, con incrementos pequeños, aunque se tarde más en llegar, se evita que esto ocurra; el elegir un incremento adecuado influye en la velocidad de convergencia del algoritmo, esta velocidad se controla a través de la tasa de aprendizaje α , la que por lo general se escoge como un número pequeño, para asegurar que la red encuentre una solución. Un valor pequeño de α significa que la red tendrá que hacer un gran número de iteraciones, si se toma un valor muy grande, los cambios en los pesos serán muy grandes, avanzando muy

rápidamente por la superficie de error, con el riesgo de saltar el valor mínimo del error y estar oscilando alrededor de él, pero sin poder alcanzarlo, en el desarrollo matemático que se ha realizado para llegar al algoritmo Backpropagation, no se asegura en ningún momento que el mínimo que se encuentre sea global, una vez la red se asiente en un mínimo sea local o global cesa el aprendizaje, aunque el error siga siendo alto. En todo caso, si la solución es admisible desde el punto de vista del error, no importa si el mínimo es local o global o si se ha detenido en algún momento previo a alcanzar un verdadero mínimo.

3.2.2 REDES COMPETITIVAS

En las redes con aprendizaje competitivo (y cooperativo), suele decirse que las neuronas compiten (y cooperan) unas con otras con el fin de llevar a cabo una tarea dada. Con este tipo de aprendizaje se pretende que cuando se presente a la red cierta información de entrada, sólo una de las neuronas de salida de la red, o una por cierto grupo de neuronas, se active (abance su valor de respuesta máximo). Por tanto las neuronas compiten para activarse quedando finalmente una, o una por grupo, como neurona vencedora y el resto quedan anuladas y siendo forzadas a sus valores de respuesta mínimos, la competición entre neuronas se realiza en todas las capas de la red, existiendo en estas redes neuronas con conexiones de autoexcitación (signo positivo) y conexiones de inhibición (signo negativo) por parte de neuronas vecinas; el objetivo de este aprendizaje es categorizar (clusterizar) los datos que se introducen en la red, de esta forma las informaciones similares son clasificadas formando parte de la

misma categoría y por tanto deben activar la misma neurona de salida. Las clases o categorías deben ser creadas por la propia red, puesto que se trata de un aprendizaje no supervisado a través de las correlaciones entre los datos de entrada. A principios de 1959, Frank Rosenblatt creó su simple clasificador espontáneo, una red de aprendizaje no supervisado basado en el Perceptrón, el cual aprendía a clasificar vectores de entrada en dos clases con igual número de términos; a finales de los años 60's y principios de los 70's, Stephen Grossberg introdujo muchas redes competitivas que usaban inhibición lateral obteniendo buenos resultados. Algunos de los comportamientos útiles obtenidos por él, fueron la supresión del ruido, aumento del contraste y normalización de vectores, en 1973, Christoph Von Der Malsburg introduce la regla del mapa de organización propia, que permitía a la red clasificar entradas en las cuales las neuronas que estuviesen en un vecindario cercano a la neurona ganadora, respondieran a entradas similares. La topología de esta red imitaba de alguna forma las estructuras encontradas en la corteza visual de los gatos, estudiada por David Hubel y Torte Wiesel. Su regla de aprendizaje generó gran interés, pero esta utilizaba un cálculo no local para garantizar que los pesos fueran normalizados, este hecho hacía este modelo biológicamente poco posible, Grossberg extendió el trabajo de Von Der Malsburg, redescubriendo la regla Instar. Grossberg mostró que la regla Instar removi6 la necesidad de renormalizar los pesos, porque los vectores de pesos que aprendían a reconocer vectores de entrada normalizados, automáticamente se normalizarán ellos mismos. El trabajo de Grossberg y Von Der Malsburg enfatizó la posibilidad biológica de sus redes. Otro exitoso investigador, Tuevo Kohonen ha sido también un fuerte proponente de las redes competitivas; sin embargo, su énfasis ha sido en aplicaciones para ingeniería y en descripciones de eficiencia matemática de las redes. Durante la década de los 70 Kohonen desarrolló una versión simplificada de la regla Instar, inspirada también

en la red de Von Der Malsburg y Grossberg, de esta forma encontró una manera muy eficiente de incorporar topología a una red competitiva.

Otra forma de aplicar este tipo de aprendizaje fue propuesta por Rumelhart y Zisper en 1985, quienes utilizaban redes multicapa dividiendo cada capa en grupos de neuronas, de tal forma que éstas disponían de conexiones inhibitorias con otras neuronas de su mismo grupo y conexiones excitadoras con las neuronas de la siguiente capa; en una red de este tipo, después de recibir diferentes informaciones de entrada, cada neurona en cada grupo se especializa en la respuesta a determinadas características de los datos de entrada. En este tipo de redes cada neurona tiene asignado un peso total (suma de todos los pesos de las conexiones que tiene a su entrada), el aprendizaje afecta sólo a las neuronas ganadoras (activas), en las que se redistribuye el peso total entre sus conexiones y se sustrae una porción de los pesos de todas las conexiones que llegan a la neurona vencedora, repartiendo esta cantidad por igual entre todas las conexiones procedentes de unidades activas, por tanto la variación del peso de una conexión entre una unidad i y otra j será nula si la neurona j no recibe excitación por parte de la neurona i (no vence en presencia de un estímulo por parte de i) y se modificará (se reforzará) si es excitada por dicha neurona.

Una variación del aprendizaje supervisado aplicado a redes multicapa consiste en imponer una inhibición mutua entre neuronas únicamente cuando están a cierta distancia unas de otras (suponiendo que las neuronas se han dispuesto geométricamente, por ejemplo formando capas bidimensionales), existe entonces un área o región de vecindad alrededor de las neuronas que constituye un grupo local, fukushima empleó esta idea en 1975 para una red multicapa

llamada Cognitron, fuertemente inspirada en la anatomía y fisiología del sistema visual humano y en 1980 el mismo Fukushima en una versión mejorada de la anterior a la que llamó Necognitron, presentó una variación de esta red utilizando aprendizaje supervisado. El Necognitron disponía de un gran número de capas con arquitectura muy específica de interconexiones entre ellas y era capaz de aprender a diferenciar caracteres, aunque estos se presentasen a diferente escala, en diferente posición o distorsionados. El aspecto geométrico de la disposición de neuronas de una red, es la base de un caso particular de un tipo de aprendizaje competitivo introducido por Kohonen en 1982 conocido como feature mapping (mapas de características), aplicado en redes con una disposición bidimensional de las neuronas de salida, que permiten obtener mapas topológicos o topográficos (topology preserving maps, topographic maps, self organization maps) en los que de algún modo estarían representadas las características principales de las informaciones presentadas a la red. De esta forma, si la red recibe informaciones con características similares, se generarían mapas parecidos, puesto que serían afectadas neuronas de salidas próximas entre sí.

3.2.3 MAPAS DE AUTO ORGANIZACIÓN (SOM)

Se cree que algunos sistemas biológicos realizan sus operaciones siguiendo un método de trabajo que algunos investigadores han llamado, *on-center/off-surround*; este término describe un patrón de conexión entre neuronas, cada neurona se refuerza a ella misma (center) mientras inhibe a todas las neuronas a

su alrededor (surround). En las redes competitivas biológicas, lo que sucede realmente es que cuando una neurona se refuerza a ella misma, refuerza también las neuronas que están cerca; la transición entre reforzar las neuronas "vecinas" o inhibirlas, se realiza suavemente a medida que la distancia entre las neuronas aumenta. De esta forma el proceso *on-center/off-surround*; para redes biológicas sigue el comportamiento señalado en la figura 15, función que habitualmente es referida como sombrero mejicano debido a su forma.

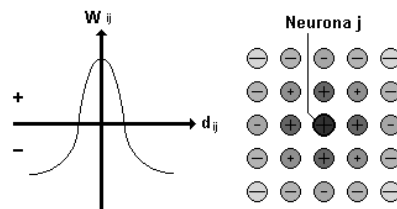


Figura 15. *on-center/off-surround*; para capas biológicas

Tratando de emular la actividad biológica, sin tener que implementar conexiones *on-center/off-surround*¹⁰; de realimentación no lineal, Kohonen diseñó la red conocida como mapa de auto organización (SOM). Esta red determina primero la neurona ganadora i^* usando el mismo procedimiento que las redes competitivas, luego los vectores de pesos de todas las neuronas que se encuentren en una región cercana "vecindario", serán actualizados mediante la regla de Kohonen, donde el vecindario contiene el índice para todas las neuronas que se encuentren a un radio " d " de la neurona ganadora i como se muestra en la figura 16, cuando un vector es presentado, los pesos de la neurona ganadora y de sus vecinas tenderán hacia el, el resultado es que después de muchas presentaciones las neuronas vecinas habrán aprendido vectores similares que cada una de las otras.

10. Amari S, Murata N, Müller K, Finke M, Yang HH. Asymptotic statistical theory of overtraining and cross-validation. IEEE Trans On Neural Networks 1997;8(5):985-96.

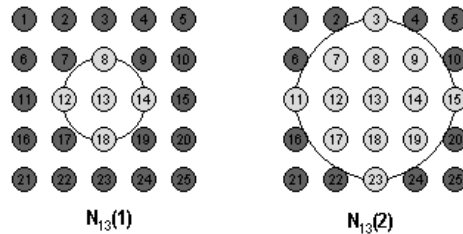


Figura 16. Vecindarios

El vecindario puede determinarse en diferentes formas; Kohonen, por ejemplo ha sugerido vecindarios rectangulares o hexagonales para lograr alta eficiencia; es importante destacar que el rendimiento de la red no es realmente sensitivo a la forma exacta del vecindario.

3.2.4 Learning Vector Quantization (LVQ)

Esta red es un híbrido que emplea tanto aprendizaje no supervisado, como aprendizaje supervisado para clasificación de patrones. La red LVQ se muestra en la figura 17, cada neurona de la primera capa es asignada a una clase, después cada clase es asignada a una neurona en la segunda capa. El número de neuronas en la primera capa, S^1 debe ser mayor o al menos igual que el número de neuronas en la segunda capa, S^2 . Al igual que con redes competitivas, cada neurona en la primera capa de la red LVQ aprende un vector prototipo, el cual permite a la neurona clasificar una región del espacio de entrada, sin embargo en lugar de calcular la distancia entre la entrada y el vector de pesos por medio del producto punto, la red LVQ calcula la distancia directamente.

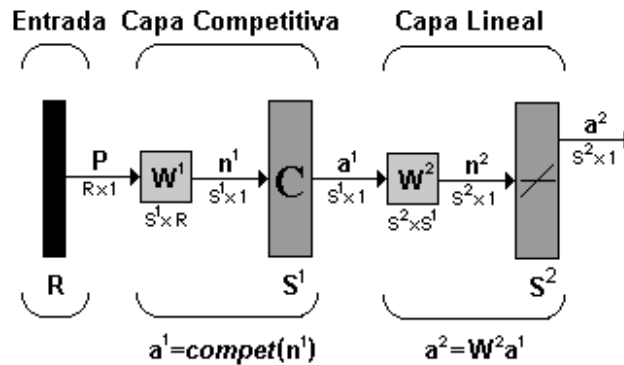


Figura 17. Red LVQ

Una ventaja de hacer el cálculo de la distancia directamente, es que los vectores no necesitan ser normalizados, cuando los vectores son normalizados la respuesta de la red será la misma sin importar la técnica que se utilice, así, la neurona cuyo vector de pesos este cercano al vector de entrada tendrá salida 1 y las otras neuronas, tendrán salida 0; en este aspecto la red LVQ se comporta igual a las redes competitivas, la única diferencia consiste en la interpretación, mientras que en las redes competitivas la salida no cero representa una *clase* del vector de entrada, para el algoritmo LVQ, indica mas bien una *sub-clase*, y de esta forma muchas neuronas (subclases), conforman una clase.

La segunda capa de la red LVQ es usada para combinar subclases dentro de una sola clase, esto es realizado por la matriz de pesos **W²**. Las columnas de **W²** representan las subclases y las filas representan las clases, **W²** tiene un solo 1 en cada columna, todos los demás elementos son cero, la fila en la cual se presenta el 1 indica cual es la clase a la que la subclase pertenece, una propiedad importante de esta red, es que el proceso de combinar subclases para formar clases, permite a la red LVQ crear clases más complejas. Una capa competitiva estándar tiene la limitación de que puede crear solo regiones de decisión convexas; la red LVQ soluciona esta limitación. La red LVQ combina aprendizaje

competitivo con aprendizaje supervisado, razón por lo cual necesita un set de entrenamiento que describa el comportamiento propio de la red, antes de que suceda el aprendizaje, cada neurona en la segunda capa es asignada a una neurona de salida, así se genera la matriz W^2 ; por lo general, igual número de neuronas ocultas son conectadas a cada neurona de salida, para que cada clase pueda ser conformada por el mismo número de regiones convexas. Una vez W^2 ha sido definida, nunca será alterada. Los pesos ocultos W^1 son actualizados por medio de la regla de Kohonen. En la figura 18 se muestran estos comportamientos.

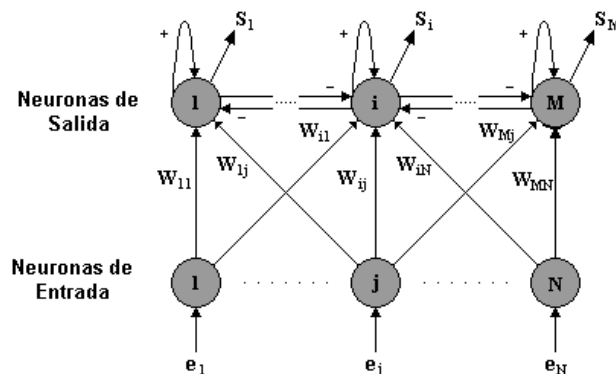


Figura 18. Comportamiento de las neuronas en una red LVQ

El diagrama al lado izquierdo de la figura 19, muestra como el vector peso ${}_3w^1$ es actualizado después de la primera iteración; el diagrama de la derecha, muestra la localización de los pesos después de que el algoritmo ha alcanzado convergencia, además en esta parte de la gráfica puede verse como las regiones del espacio de entrada son clasificadas. Los vectores de entrada p_1 y p_2 perteneciente a la clase uno son visualizadas en gris y los vectores p_3 y p_4 pertenecientes a la clase dos pueden verse en blanco.

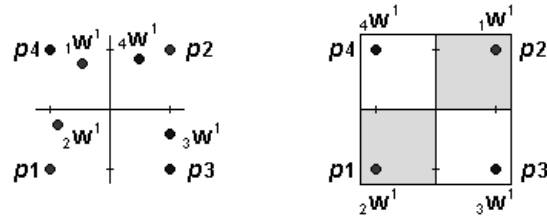


Figura 19. Resultado después de la primera y después de muchas iteraciones

3.2.5 Red de Hamming

La red de Hamming ilustrada en la figura 20 es uno de los ejemplos más simples de aprendizaje competitivo, a pesar de ello su estructura es un poco compleja ya que emplea el concepto de capas recurrentes en su segunda capa y aunque hoy en día en redes de aprendizaje competitivo se ha simplificado este concepto con el uso de funciones de activación más sencillas, la red de Hamming representa uno de los primeros avances en este tipo de aprendizaje, convirtiéndola en un modelo obligado de referencia dentro de las redes de aprendizaje competitivo. Las neuronas en la capa de salida de esta red compiten unas con otras para determinar la ganadora, la cual indica el patrón prototipo más representativo en la entrada de la red, la competición es implementada por inhibición lateral (un conjunto de conexiones negativas entre las neuronas en la capa de salida). Esta red consiste en dos capas; la primera capa, la cual es una red Instar, realiza la correlación entre el vector de entrada y los vectores prototipo, la segunda capa realiza la competición para determinar cual de los vectores prototipo está más cercano al vector de entrada.

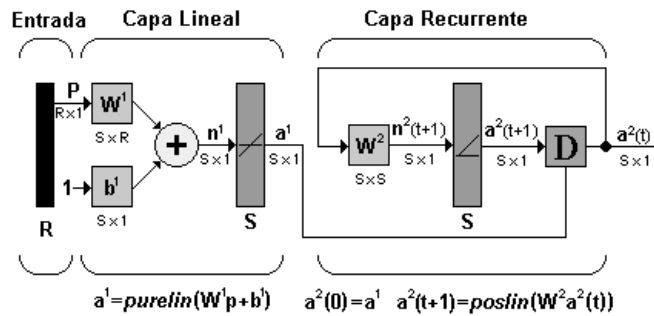


Figura 20. Red de Hamming

Capa 1: La red Instar es capaz de clasificar solo un patrón; para que múltiples patrones sean reconocidos se necesitan múltiples Instar y es precisamente de esa forma como está compuesta la primera capa de la red de Hamming. Para una mejor comprensión de su funcionamiento se partirá de unos vectores prototipo que la red debe clasificar, cada fila de **W¹** representa un vector prototipo, el cual deseamos reconocer y cada elemento **b¹** es igual al número de elementos en cada vector de entrada (**R**) (el número de neuronas **S** es igual al número de vectores prototipo **Q**); la salida de la capa 1 es igual al producto punto de los vectores prototipo con la entrada más el vector **R**; este producto indica cuan cercano está cada vector de entrada a los patrones prototipo.

Capa 2: La red Instar emplea una función de transferencia *poslin* para decidir si el vector de entrada estaba lo suficientemente cerca al vector prototipo. En la capa 2 de la red de Hamming se utilizan múltiples Instar, así se determinara por medio de una capa competitiva el patrón prototipo más cercano. Las neuronas en esta capa son inicializadas con la salida de la capa en realimentación, la cual indica la correlación entre los patrones prototipo y el vector de entrada. Las neuronas compiten unas con otras para determinar una ganadora; después de la competición solo una neurona tendrá una salida no cero. La neurona ganadora indica cual categoría de entrada fue presentada a la red (cada vector prototipo

representa una categoría). Esta matriz produce un efecto inhibitorio, en el cual la salida de cada neurona tiene un efecto inhibitorio sobre todas las otras neuronas. Para ilustrar este efecto, sustituimos los valores de pesos de 1 y $-\epsilon$ por los apropiados elementos de W^2 . En cada iteración, cada salida de la neurona se decrementará en proporción a la suma de las salidas de las otras neuronas. La salida de la neurona con la condición inicial más grande se decrementará más despacio que las salidas de otras neuronas; eventualmente cada neurona tendrá una salida positiva y en ese punto la red habrá alcanzado el estado estable. En este punto es posible diseñar una red competitiva que realice clasificaciones correctas fijando el valor de las filas de W en los valores del vector prototipo esperado, sin embargo es deseable tener una regla de aprendizaje que pueda entrenar los pesos en una red competitiva sin conocer los vectores prototipo, para redes competitivas, a_i tiene un valor diferente de cero solamente para la neurona ganadora ($i=i^*$), de esta forma los mismos resultados serán obtenidos utilizando la regla de Kohonen.

Problemas de las redes Competitivas: Las redes competitivas, son bastante eficientes para resolver problemas de clasificación, sin embargo presentan algunos problemas. El primero es la elección de una tasa de aprendizaje que permita hallar un punto de equilibrio entre velocidad de convergencia y la estabilidad final de los vectores de peso. Una tasa de aprendizaje cercana a cero, torna el aprendizaje muy lento pero garantiza que cuando un vector haya alcanzado el centro de la clase objetivo, se mantendrá allí indefinidamente. En contraste, una tasa de aprendizaje cercana a uno genera un aprendizaje muy rápido, pero los vectores de peso continuarán oscilando aún después de que se haya alcanzado convergencia. La indecisión que se presenta al escoger la tasa de aprendizaje puede ser empleada como una ventaja si se inicia el entrenamiento con una tasa de aprendizaje alta y se decrementa en el transcurso del proceso de

entrenamiento cuando sea necesario, desafortunadamente esta técnica no funciona si la red necesita continuamente ser adaptada a nuevos argumentos de los vectores de entrada (caso en que la red se trabaje On-line). Un ejemplo de este problema se visualiza en la figura 21.

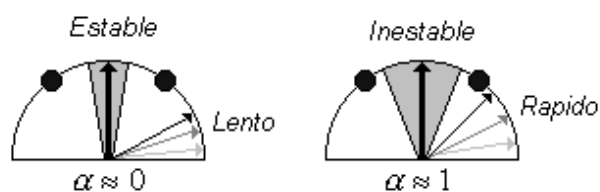


Figura 21. Variación de la tasa de aprendizaje

Un problema de estabilidad más serio, ocurre cuando las clases están muy juntas; en ciertos casos, un vector de pesos tratando de apuntar hacia una clase determinada, puede entrar al territorio de otro vector de pesos. En la figura 21, pueden observarse con círculos grises, como dos vectores de entrada son presentados repetidas veces a la red; el resultado, es que los vectores de pesos que representan las clases de la mitad y de la derecha se encuentran a la derecha. Con seguridad, se presentará el caso en que una de las clases de la derecha será clasificada por el vector de pesos del centro. Un tercer problema con redes competitivas, es que es posible que el vector de pesos inicial de una neurona se encuentre muy lejos de cualquiera de los vectores de entrada y por lo tanto nunca gane la competición. La consecuencia será, la "muerte" de la neurona, lo que por supuesto no es recomendable. En la figura 22, el vector de peso w_3 nunca ganará la competición, sin importar cual sea el orden en que se le presenten los vectores de entrada. Una solución a este problema, consiste en adicionar una ganancia negativa a la entrada neta de cada neurona y decrementar así la ganancia total cada vez que la neurona gane la competición; esto hará que

difícilmente una neurona gane varias veces la competición, a este mecanismo se le llama "conciencia".

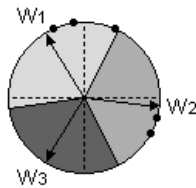


Figura 22. Causa de la muerte de una neurona

Una capa competitiva tiene tantas clases como neuronas, lo que podría complicar algunas aplicaciones, especialmente cuando el número de clases no se conoce de antemano. En capas competitivas, cada clase consiste de una región convexa del espacio de entrada, las capas competitivas no pueden formar clases con regiones no convexas o clases que sean la unión de regiones no conectadas.

3.2.6 Red de Hopfield

En la década de los 80's con el fin de estudiar procesos que involucran sistemas gobernados por ecuaciones diferenciales no lineales surge la teoría clásica de control geométrico basada en la geometría diferencial; simultáneamente renace el estudio de las Redes Neuronales debido al redescubrimiento del algoritmo Backpropagation, este hecho sumado al fracaso de las metodologías tradicionales aplicadas a la inteligencia artificial y a la disponibilidad de herramientas computacionales de bajo costo permitieron el desarrollo las redes neuronales recurrentes cuya principal aplicación es el control e identificación de

sistemas no lineales. Este desarrollo es posible debido a que las propiedades matemáticas de las redes recurrentes están enmarcadas en las mismas propiedades que fundamentan el control geométrico, la primera red neuronal recurrente de naturaleza dinámica fue propuesta por Hopfield en 1984 bajo el contexto de las memorias asociativas.

Estructura de la red: En búsqueda de una implementación práctica, Hopfield presentó su modelo básico como un circuito eléctrico, el cual se muestra en la figura 23, donde cada neurona se representa por un amplificador operacional y una red asociada formada por una capacitancia y una resistencia, la entrada a cada amplificador es la suma de las corrientes I_i más las realimentaciones provenientes de otros amplificadores, por ejemplo el segundo amplificador realimenta al amplificador S a través de la resistencia $R_{S,2}$, en caso de necesitarse realimentaciones con signo negativo, estas se hacen por medio de la salida inversora de cada amplificador; la ecuación para el modelo de Hopfield basado en las leyes de Kirchhoff.

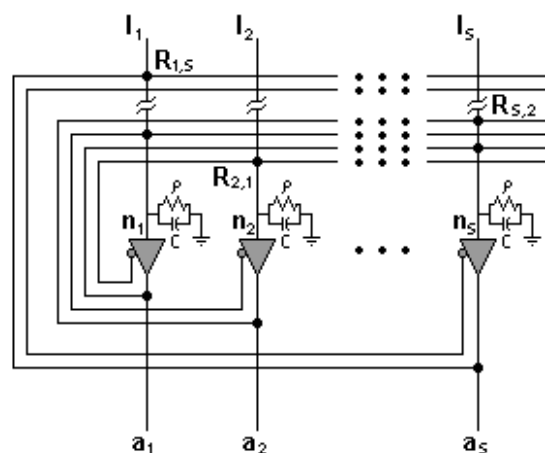


Figura 23. Circuito Eléctrico red Hopfield

La red de Hopfield en notación compacta se muestra en la figura 24, en donde el vector de \mathbf{p} no se considera como la entrada a la red sino como la condición inicial de la red.

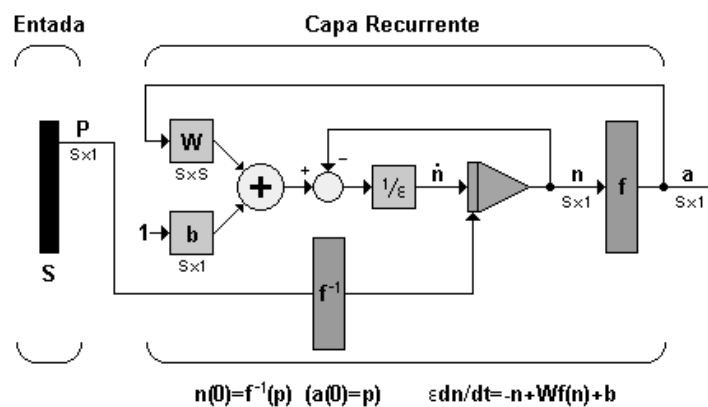


Figura 24. Notación compacta red de Hopfield

Como se observa, la red de Hopfield esta compuesta de neuronas dinámicas altamente interconectadas gobernadas por ecuaciones diferenciales no lineales, esta red funciona como una memoria asociativa no lineal que puede procesar patrones presentados de forma incompleta o con ruido, siendo útil como una poderosa herramienta de optimización. Una de las principales contribuciones de Hopfield fue la aplicación de la teoría de estabilidad de Lyapunov al análisis de las redes recurrentes, la teoría de estabilidad de Lyapunov se aplica a través del teorema de LaSalle y para su utilización el primer paso es escoger una función de Lyapunov, la escogencia de esta particular función, fue clave en el desarrollo de Hopfield, pues el primer y el tercer termino de esta ecuación conforman una función cuadrática, las cuales pueden aproximar gran cantidad de funciones en un pequeño intervalo, especialmente cerca de puntos donde se encuentre un mínimo local.

Regla de Aprendizaje: La red de Hopfield no tiene una ley de aprendizaje asociada, esto significa que la red no es entrenada ni realiza un proceso de aprendizaje, sin embargo es posible determinar la matriz de pesos por medio de un procedimiento basado en la función de alta ganancia de Lyapunov, el procedimiento consiste en escoger la matriz de pesos \mathbf{W} y el vector de ganancias \mathbf{b} tal que V toma la forma de la función que se quiere minimizar, convirtiendo el problema que se quiere resolver, en un problema de minimización cuadrática, puesto que la red de Hopfield minimizará a V . Una red de Hopfield puede diseñarse como una memoria asociativa, en este caso es llamada memoria de contenido direccionable, porque la memoria recupera la información almacenada con base en parte de su contenido, en contraste con las memorias estándar de computo, donde la información se recupera con base en sus direcciones, por ejemplo si se tiene una base de datos de contenido direccionable que contiene nombres y direcciones de los empleados de una empresa, la información completa se recupera por ejemplo suministrando el nombre (o parte de él), este tipo de memoria es la misma memoria autoasociativa excepto que en este caso se utilizará la red recurrente de Hopfield en vez del asociador lineal. Cuando se le presenta un patrón de entrada a la red de Hopfield, el estado inicial de la salida será el mismo patrón de entrada y luego la red convergerá al patrón prototipo almacenado que se encuentre más cercano (o que más se parezca) al patrón de entrada, para que la red memorice un patrón prototipo, este debe ser un mínimo de la función de Lyapunov que es igual al desempeño del error del contenido de la memoria direccionable, la salida de la red de Hopfield tenderá a converger a los patrones prototipo almacenados, en el caso que todos los patrones prototipo sean ortogonales, cada uno será un punto de equilibrio de la red; la red puede tener muchos otros puntos de equilibrio indeseables, una regla práctica para evitarlos consiste en que cuando se utilice la regla de Hebb, el número de patrones

almacenados no debe superar el 15% del número de neuronas de la red. Para el entrenamiento de la red de Hopfield en identificación de sistemas, se utiliza el algoritmo de Chemotaxis, el cual permite entrenar redes neuronales de cualquier tipo sin calcular el gradiente del error, este algoritmo fue formulado considerando el movimiento de una bacteria en un medio donde hay un gradiente de solución alimenticia; la bacteria se mueve inicialmente al azar hasta detectar un aumento en la concentración de la solución y luego continua en esa dirección.

4. POTENCIALIDAD

Como parte final de la presente monografía se expondrán brevemente algunas de las aplicaciones actuales, las perspectivas y un ejemplo práctico, comentado de la e-NOSE .

4.1 INDUSTRIA ALIMENTICIA

Actualmente el mayor mercado de las narices electrónicas está en la industria alimenticia, principalmente en aseguramiento de la calidad alimenticia. Tradicionalmente la calidad en los alimentos era asegurada por paneles de expertos catadores o de complejos análisis químicos, sin embargo, en vista de la subjetividad, el tiempo disponible de los humanos, y el costo, las e-NOSE encontraron ahí su mayor auge. Las aplicaciones en este ramo incluyen aseguramiento en cadenas de producción, control en cocción¹¹, inspección de pescadería, procesos de fermentación, nivel de ranciedad y conservación, concentración en jugos, orígenes de pulpas de fruta, maduración de cervezas, destilación de licores, calidad en el olor de empaques, sensibilización de tiempos de almacenaje y la subsecuente alteración de sabores y olores, etc.

En cierto modo, las narices electrónicas han comenzado a desplazar a los humanos expertos y subjetivos probadores y concedores de alimentos, en otros

11. A. Almeida, Neural network in oven prevents overcooking. *The Institute* (November 1994) 3.

casos las e-NOSE han venido a colaborar con la reducción de análisis químicos en la producción, y también comienzan a funcionar para crear nuevos aromas y sabores artificiales que compaginen exactamente con lo natural. Empresas como Agua Evian, Cerveza Coors, Café Nestlé y Starbucks, utilizan las e-NOSE para medir la calidad de sus productos¹². La Universidad de Warwick está desarrollando una e-NOSE para identificar los daños que causan las bacterias durante el proceso de maduración de la cerveza, los viñedos E&J Gallo que producen gran variedad de vinos y subproductos derivados del cultivo de la vid, han comenzado a utilizar estos dispositivos para controlar la presencia de químicos indeseados en el vino su relación entre los componentes orgánicos del mismo. La corporación NCR que es la mayor productora de escáneres de código de barras ahora trabaja en narices electrónicas que puedan ser incorporadas en cadenas de abastecimiento a nivel de supermercado para que identifiquen los productos por su olor.

4.2 APLICACIONES MEDICAS

La técnica de utilizar métodos químicos para las ayudas diagnósticas comenzó solo desde mediados del siglo 19, anteriormente el olfato era una herramienta de diagnóstico común, los doctores de entonces eran entrenados para utilizar el sentido del olfato durante su entrenamiento médico, en efecto, el término médico de “diabetes mellitus” traduce originalmente “orines dulces” y era esta una de las formas mas efectivas de diagnosticar la enfermedad.

12. “Going the nose one better,” *Food Engineering*, November 1994.

Desde entonces, el diagnóstico por olores ha sido ignorado y relegado a un lugar secundario como método y solo se utiliza en casos en los que no se tiene ninguna otra herramienta disponible. En estudios recientes, las e-NOSE han conseguido demostrar el potencial de diagnosticar ciertas enfermedades a partir del olor de diversas secreciones corpóreas, por ejemplo, por el aliento se pueden identificar problemas gastrointestinales, infecciones, diabetes, sinusitis y problemas internos, todo esto es posible ya que la mayoría de las enfermedades infecciosas emiten olores distintivos durante su ciclo de incubación.

La universidad de Pennsylvania ha desarrollado una e-NOSE a partir de una comercial y la esta utilizando para detectar infecciones como la neumonía y se trata de avanzar hacia la identificación de otro tipo de bacterias, la Universidad de Ohio trabaja con métodos muy similares para distinguir la presencia de e.coli en los alimentos, sin embargo la aplicación mas arriesgada fue propuesta en 1994 para telecirugía, en donde los olores que percibe una e-NOSE son transmitidos a un dispositivo que recrea esos olores en otro sitio de manera similar a como se transmite audio y video por un cable.

4.3 APLICACIONES AMBIENTALES.

En muchas de las aplicaciones de este tipo los sistemas son compactos, portátiles y capaces de identificar contaminantes en el campo rápidamente. Las e-NOSE se ajustan perfectamente a estos esquemas, una de las aplicaciones que mayor acogida ha tenido es la del analizador de gases vehiculares que identifica de manera muy rápida si los vehículos están correctamente sincronizados, es

decir, si la mezcla de combustible y aire es óptima¹³, otra de las aplicaciones que ha tenido éxito es el control de impurezas y gases tóxicos arrojados a la atmósfera. Hay una aplicación particular cuyo nombre es AromaScan, este sistema era utilizado a bordo de la estación espacial rusa MIR para monitorear en todo momento la calidad del aire, así como niveles peligrosos de gas carbónico y otro tipo de químicos que perturbaran el aire y las condiciones de vida de los astronautas. Otra aplicación importante es la de la medición de las concentraciones progresivas de monóxido de carbono en las grandes ciudades, de hecho en varias ciudades norteamericanas se ha contemplado la posibilidad de sacar narices electrónicas que indiquen a sus usuarios la necesidad de utilizar filtros y tapabocas en ciertas áreas contaminadas para evitar la alta incidencia de enfermedades respiratorias.

4.4 APLICACIONES MILITARES

Entre otras se están desarrollando narices electrónicas capaces de detectar explosivos, narcóticos, armas y contrabando. Debido a la oleada terrorista que sacudió recientemente a los estados unidos, y con el fin de evitar el pánico y las incomodidades que suponen las continuas requisas se han desarrollado portales que tienen incorporadas narices electrónicas, de modo que los usuarios de aeropuertos al pasar por una puerta como la que se utiliza para la detección de armas sean "olidos" para saber si han estado en contacto o portan algún tipo de explosivo.

13. P.E. Keller, R.T. Kouzes, and L.J. Kangas, "Three Neural Network Based Sensor Systems for Environmental Monitoring," *IEEE Electro 94 Conference Proceedings*, pp. 377-382, IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 1994.

Otra aplicación es la detección de minas y explosivos plásticos que son de difícil detección con los dispositivos convencionales así como la búsqueda y rescate de personas extraviadas en catástrofes.

En general las narices electrónicas buscan en este campo el reemplazo de los caninos ya que por varias razones como lo son tamaño, fiabilidad, y bajo coste de sostenimiento representan un gran atractivo.

4.5 UN EJEMPLO PRÁCTICO

En 1993 se construyó un proyecto simple en el Battelle Memorial Institute de la división Pacific Northwest, Richland, WA para probar los patrones de reconocimiento que eran necesarios para construir sistemas de reconocimiento de olores confiables, la figura 25 muestra una fotografía y un diagrama esquemático del prototipo.

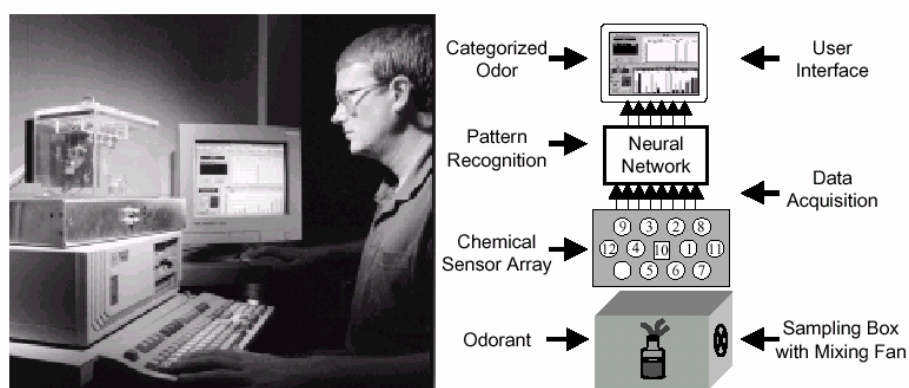


Figura 25¹⁴. Diagrama esquemático y fotografía de un prototipo de e-NOSE

14. Tomado de *SPIE Applications and Science of Computation Intelligence II* conference in Orlando, FL, USA during 5-9 April 1999 and published in the *SPIE Proceedings* **3722** (13), pp. 144-153, 1999.

En la parte izquierda de la fotografía se muestra el prototipo mostrando la caja de muestreo en la parte superior del computador de escritorio, en el fondo en el monitor del computador se muestra la grafica de salida del prototipo, a la derecha se muestra un diagrama esquemático del prototipo en el que se muestran sus componentes principales, los sensores químicos (1-9) son de gas tipo Taguchi standard (oxido de metal). El sensor de humedad (10) es un dispositivo tipo resistencia y los sensores de temperatura (11-12) son termistores. Todos estos sensores son comerciales y estan disponibles en Figaro Co. (1: TGS 109; 2: TGS 822; 3: TGS 822; 4: TGS 813; 5: TGS 821; 6: TGS 824; 7: TGS 825; 8: TGS 842; 9: TGS 880; 10: NH-2; 11 and 12: 5KD).

En la figura 26 se muestra el display de la nariz electrónica y la respuesta sensorial del sistema.

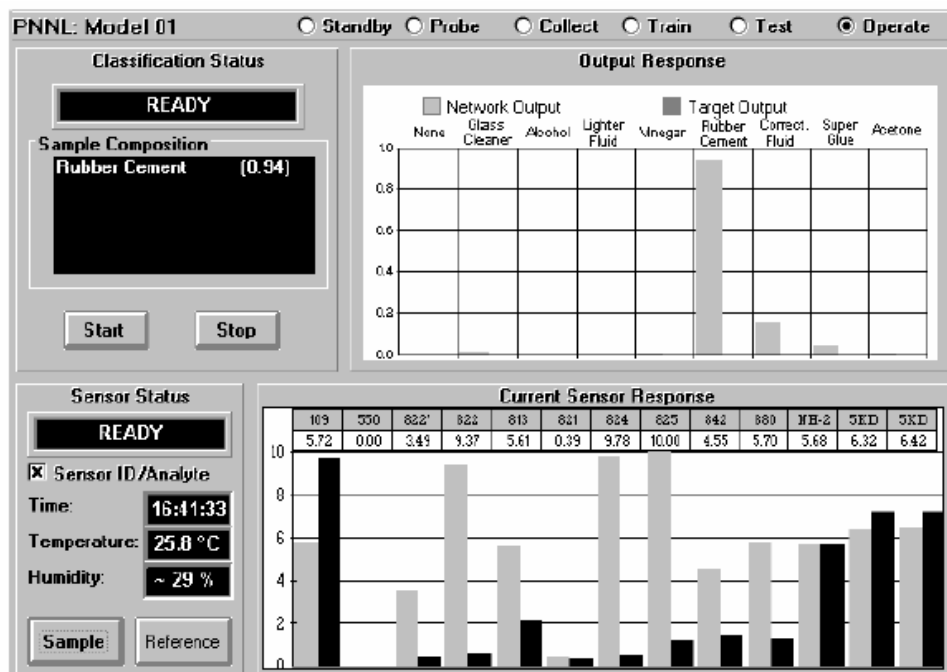


Figura 26. Salida por pantalla del sistema de nariz electrónica.

La figura 28 ilustra la pantalla principal de la interfaz de usuario del prototipo de nariz electrónica, la barra inferior muestra los valores actuales como barras grises y el sensor ambiental muestra su valor en barras negras. La barra superior muestra la clasificación de salida de los nueve categorías de olor disponibles para este modelo. La barra mas extensa indica la presencia de componentes volátiles saliendo de una muestra de cemento plástico (pegante), la caja en la esquina superior izquierda muestra en una lista el olor identificado. Las señales eléctricas de los sensores son enviadas desde la caja de muestreo a un conversor A/D en un computador de escritorio. Para el prototipo un sistema de adquisición de datos DT-1231 está incorporado a una tarjeta de 16 canales A/D con una resolución de 8 bits corriendo con una velocidad de muestreo de 300MHz. Los valores de los sensores digitalizados quedan de esta manera disponibles para la lectura, el procesamiento y el reconocimiento de los olores por parte de la red neuronal. Luego de muestrearse los olores son identificados por la RNA que ha sido implementada en módulos de software en el computador de escritorio, dos tipos de RNA fueron construidas con el prototipo una backpropagation y un algoritmo neurofuzzy. La tabla 2 muestra algunos resultados comparativos de esos algoritmos cuando el sistema ha sido entrenado y probado en olores químicos de productos de uso casero. El tiempo de respuesta en el prototipo está limitada a la respuesta en tiempo de los sensores químicos que como se sabe es del orden de los milisegundos. El paso final en el proceso es la limpieza de los sensores, para sensores los tipo metal-oxido la limpieza se realiza por medio de los microcalefactores ubicados en la base del sensor, por otra parte con solo abrir la caja de muestreo es posible liberar el aire con compuestos volátiles, todo el proceso tarda aproximadamente 50 segundos, sin embargo se hace proporcionalmente mayor en la medida en que se aumenten las concentraciones de los elementos muestreados.

Número de		Sustancia de Entrada	% Correcto	
Entrenamientos	Prueba		BP	FA
67	28	Ninguna	96.4	96.4
75	22	Acetona	100	100
64	14	Amoniaco	100	100
93	28	Isopropanol	92.9	100
5	3	Amonio e Isopropanol	0	66.7
106	25	Gas para encendedor	100	96
74	27	Amoniaco y Gas	100	92.6
66	21	Vinagre	81	95.2
68	26	Amoniaco y Vinagre	92.3	76.9
1	2	Isopropanol y Vinagre	0	0
619	196	TOTALES	92.9	93.4

Tabla 2¹⁵. Comparativo¹⁶ entre Backpropagation(BP) y Neurofuzzy(FA)

14. Tomado de *SPIE Applications and Science of Computation Intelligence II* conference in Orlando, FL, USA during 5-9 April 1999 and published in the *SPIE Proceedings* **3722 (13)**, pp. 144-153, 1999.

16. R.J. Lauf, B.S. Hoffheins, "Analysis of Liquid Fuels Using a Gas Sensor Array", pp. 935-940, 1991.

5. APLICACIONES LOCALES

Luego de realizada la recopilación de textos y su organización en la presente monografía es importante también conocer la perspectiva que los autores tienen sobre la aplicación de la e-NOSE en el entorno de la ciudad, la región y en general del país.

Cartagena de Indias, patrimonio histórico de la humanidad es una ciudad turística por excelencia, sin embargo en su condición de ciudad costera, se perfila también como uno de los principales puertos de la costa atlántica y uno de los centros industriales con mayor proyección del país, tiene las condiciones dadas para el desarrollo nuevos proyectos de investigación en este sentido, a continuación enunciaremos algunas de las problemáticas de la ciudad en las que las e-NOSE pueden ser de gran utilidad.

1. El problema de la contaminación de los cuerpos de agua de la ciudad: Este inconveniente es de vieja data y ha sido causado en la mayoría de los casos por el el vertimiento de aguas negras y estancamiento de los caños y lagunas debido a la interrupción de las corrientes que los nutren con oxígeno y agua fresca, sus consecuencias son entre otras la mortandad de gran número de especies acuáticas, deterioro progresivo del ecosistema y proliferación de enfermedades endémicas en los estratos bajos, una e-NOSE sería de gran utilidad para medir la calidad de estos cuerpos de agua y así determinar el impacto de las medidas correctivas como las del proyecto de la bocana.

2. Seguridad en las instalaciones industriales de Cartagena: Si bien es cierto que las empresas procesadoras de productos químicos y derivados del petróleo mantienen excelentes medidas de seguridad y parámetros muy estrictos en cuanto a niveles peligrosos de sustancias volátiles, también lo es el hecho de que un dispositivo portátil de medición podría ayudar en los casos en los que se refiere a espacios abiertos en donde los medidores convencionales ofrecen poca cobertura en cuanto a mediciones en tiempo real.
3. Detección de narcóticos y explosivos: Está comprobado que Cartagena como ciudad turística y puerto presenta condiciones atractivas para la exportación de sustancias prohibidas y que muchas veces pueden ser camufladas aún para las narices de los perros del grupo antinarcóticos, sería un buen proyecto elaborar e-NOSEs portátiles que estuvieran a la entrada de las salas de espera de los vuelos internacionales para detectar oportunamente la salida de este tipo de sustancias.
4. Control de calidad en las empresas pesqueras: Sería de gran importancia para todo el grupo económico que rodea este gremio la implantación de sistemas de análisis masivo que pudieran detectar la calidad de la materia prima al momento del desembarque pues esto garantizaría aún mas la calidad del producto final haciéndolo mas competitivo en los mercados internacionales debido a la baja en los costos causados por concepto de preclasificación y control de calidad de producto recibido.
5. Control de emisiones: Sería de gran utilidad para los agentes de tránsito departamental contar con narices electrónicas portátiles que analizaran la composición de gases de exosto de vehículos automotores y así se daría un

mejor cumplimiento a la revisión periódica que al respecto debe hacerse por orden del ente de vigilancia y control ambiental Cardique.

6. Calidad ambiental: Sería de gran importancia para el distrito disponer de estaciones de narices electrónicas que arrojaran datos sobre la calidad ambiental ya que por la proximidad entre zona industrial y la zona turística se puede estar ocasionando contaminación que en un futuro no muy lejano pudiera desencadenar en afecciones pulmonares a la población, adicionalmente se podría medir el nivel de gases tóxicos emitidos por el parque automotor y se podrían tener parámetros científicos para tomar medidas como el pico y placa para reducir la concentración de dichos gases en la atmósfera cartagenera.

6. CONCLUSIONES

- Con los diversos métodos y formas utilizados en el reconocimiento de olores enunciados en este trabajo, el estudiante podrá contar con una base conceptual para iniciar investigaciones y proyectos en este área en la CUTB.
- El desarrollo de las narices electrónicas a aportado a la industria la posibilidad de ejercer un mejor control de calidad de sus productos, debido a que han desplazado la subjetividad en el tema de apreciación de olores y aromas.
- Las redes neuronales artificiales ofrecen una gran ventaja sobre los sistemas computacionales tradicionales para análisis cualitativos dada su capacidad para la formación de patrones únicos a partir de señales provenientes de múltiples sensores organizados de manera matricial.
- Se logró una profundización académica y actualización de conocimientos con la realización de esta monografía incentivados por los contenidos en el primer minor de automatización industrial.

7. BIBLIOGRAFÍA

- DELGADO Alberto. "Propiedades Matemáticas y Aplicaciones de las Redes Neuronales Dinámicas Recurrentes". Santafé de Bogotá Colombia.
- HILERA José R., MARTINEZ Víctor J. "Redes Neuronales Artificiales. Fundamentos, modelos y aplicaciones ". Ra-ma Editorial. Madrid. 1995
- KOHONEN Tuevo. "Associative memory. A system theoretical approach". Springer-Verlag, 1977
- KOHONEN Tuevo. "Learning Vector Quantization". Abstracts of the first annual INNS Meeting, #308, 1988.
- P.E. Keller, L.J. Kangas, L.H. Liden, S. Hashem, R.T. Kouzes, "Electronic Noses and Their Applications," Proceedings of the World Congress on Neural Networks'96, pp. 928-931, Lawrence Erlbaum Associates Inc., Mahwah, NJ, USA, 1996.
- P.E. Keller, R.T. Kouzes, and L.J. Kangas, "Three Neural Network Based Sensor Systems for Environmental Monitoring," IEEE Electro 94 Conference Proceedings, pp. 377-382, IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 1994.
- SPIE Applications and Science of Computation Intelligence II conference in Orlando, FL, USA during 5-9 April 1999 and published in the SPIE Proceedings 3722 (13), pp. 144-153, 1999.
- WWW: http://www.emsl.pnl.gov:2080/proj/neuron/people/keller_pe.html
- E. Vanneste, "Review: the Electronic Nose, worldwide", University of Antwerp, Antwerpen, Belgium, 1998. <http://sch-www.uia.ac.be/struct/review/>.