



NEURAL NETWORK MODELING OF AN ELECTROKINETIC REMEDIATION PROCESS OF HYDROCARBON-POLLUTED SOIL

F. S. Hernández-Rodarte, C. A. Castillo-Ordaz, A. Martínez-Prado,
J. Pinto-Espinoza, and C. F. Cruz- Fierro

ABSTRACT

In this research, a Neural Network Model (NNM) was designed, constructed and validated with the purpose of modeling the electrokinetic remediation process of a hydrocarbon contaminated soil. The modeling environment used for the NNM was Toolbox[®] from Matlab[®] and Statistic NNtool[®].

The experimental data of the remediation process was previously reported by Mota Bolívar (2006). In his research, the electrokinetic remediation cell was divided into three compartments, with the soil in the middle compartment, and two electrodes that provided the electric current.. A surfactant solution flowed in the direction of the electrically-assisted migration of hydrocarbons, thus contributing to the overall removal rate.

The data was analyzed in order to identify the input and output variables, and to define the NNM target. A Feed Forward Back Propagation NNM was chosen. Neurons and layer number were optimized. The data was presented to the NNM for training and assessment of variable weight.

The weight variables that proved more relevant to the remediation process were voltage and fluid velocity. The concentration of surfactant (in weight percent) proved to be almost irrelevant for this process.

INTRODUCCIÓN

Las redes neuronales obtenidas en esta tesis nos dieron una reseña del grado de influencia que las variables tienen en el proceso de electroremediación, esto será de gran ayuda para los futuros trabajos que se realicen utilizando ésta técnica, tratando de obtener resultados más satisfactorios y porcentajes más altos de remediación del suelo contaminado.

El cerebro humano recibe continuamente, a través de los sentidos, miles de datos que capturamos con nuestros sentidos, estos datos son procesados en redes de neuronas biológicas las cuales emiten en todo momento la respuesta más adecuada a cada circunstancia para el desarrollo normal de la vida. Una red de neuronas artificiales es una herramienta que nace inspirada en este funcionamiento, con el fin de aprender a asociar datos de entrada (vectores inputs) a datos de salida (vectores outputs) a partir de ejemplos reales. Las redes neuronales están formadas por tanto por gran cantidad de elementos de proceso interconectadas capaces de aprender mediante el ajuste de los parámetros que componen la red. El objetivo del presente

trabajo fue diseñar, elaborar y validar un modelo de red neuronal en un proceso de electroremediación de un suelo contaminado con hidrocarburos.

MARCO TEÓRICO

El suelo es un cuerpo natural, de profundidad variable, compuesto de materiales orgánicos y minerales que, a su vez, se diferencian entre sí por sus propiedades físicas, químicas y mineralógicas. Este cuerpo natural es diferente de la roca, de quien procede, debido a la acción conjunta de una serie de factores: material originario, clima, vegetación, topografía y tiempo. La degradación del suelo puede ser de tres tipos: Física, Química y Biológica, La degradación química del suelo se conoce como contaminación. Un suelo está contaminado cuando contiene sustancias en cantidad suficiente para causar daño directo o indirecto al hombre, a los ecosistemas o a las infraestructuras (Núñez, 2007). La Contaminación del suelo es toda adición en el mismo que el hombre aporta, como materiales nocivos o energía calorífica en cantidades que causan alteraciones indeseables y se vuelven tóxicas para los organismos del suelo. Se trata pues de una degradación química que provoca la pérdida parcial o total de la productividad del suelo.

La técnica de electroremediación consiste en la descontaminación, especialmente de metales pesados y otros compuestos iónicos, de suelos o lodos provenientes de algún tratamiento previo, contaminados con estas especies. La técnica implica la aplicación de un campo eléctrico continuo entre dos electrodos enterrados en el suelo, con la aplicación de este campo eléctrico se consigue, dependiendo de diversos factores como el grado de humedad del terreno, acidez, etc., movilizar las especies cargadas hacia los electrodos correspondientes (ánodo o cátodo), éste transporte puede realizarse por migración, electroósmosis o electroforesis, dependiendo de la naturaleza del contaminante.

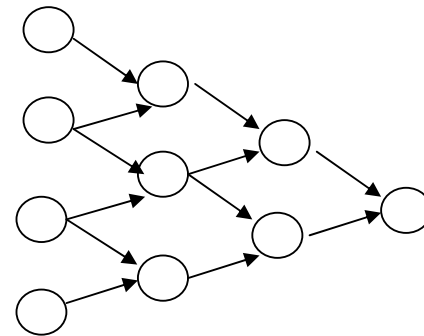


Figura 1. Sistema simple de red neuronal

El movimiento de las sustancias depende fundamentalmente de la intensidad de los campos eléctricos aplicados (Chinthamreddy, 2004). El cerebro es un sistema complejo constituido por unidades individuales bien diferenciadas, llamadas neuronas, unidas unas a otras por una malla de fibras nerviosas. Ramón Cajal identificó las neuronas como las unidades constitutivas del cerebro (Díaz, 1996).

Una red neuronal (Figura 1), según Freman y Skapura, es un sistema de procesadores paralelos conectados entre sí en forma de grafo dirigido. Esquemáticamente cada elemento de procesamiento (neuronas) de la red se representa como un nodo. Estas conexiones establecen una estructura jerárquica que tratando de emular la fisiología del cerebro busca nuevos modelos de procesamiento para solucionar problemas concretos del mundo real (Freeman, 1991).

Proceedings

Una red neuronal se compone de unidades llamadas neuronas. Cada neurona recibe una serie de entradas a través de interconexiones y emite una salida. Esta salida viene dada por tres funciones:

Una función de propagación (también conocida como función de excitación), que por lo general consiste en el sumatorio de cada entrada multiplicada por el peso de su interconexión (valor neto). Si el peso es positivo, la conexión se denomina excitatoria; si es negativo, se denomina inhibitoria.

Una función de activación, que modifica a la anterior. Puede no existir, siendo en este caso la salida la misma función de propagación.

Una función de transferencia, que se aplica al valor devuelto por la función de activación. Se utiliza para acotar la salida de la neurona y generalmente viene dada por la interpretación que queramos darle a dichas salidas. Algunas de las más utilizadas son la sigmoide (para obtener valores en el intervalo $[0, 1]$) y la hiperbólica-tangente (para obtener valores en el intervalo $[-1, 1]$).

Biológicamente, un cerebro aprende mediante la reorganización de las conexiones sinápticas entre las neuronas que lo componen. De la misma manera, las RNA tienen un gran número de *procesadores* virtuales interconectados que de forma simplificada simulan la funcionalidad de las neuronas biológicas. En esta simulación, la reorganización de las conexiones sinápticas biológicas se modela mediante un mecanismo de *pesos* (Weights) que son ajustados durante la fase de aprendizaje. En una RNA entrenada, el conjunto de los pesos determina el *conocimiento* de esa RNA y tiene la propiedad de resolver el problema para el que la RNA ha sido entrenada. Por otra parte, en una RNA, además de los pesos y las conexiones, cada neurona tiene asociada una función matemática denominada función de transferencia. Dicha función genera la señal de salida de la neurona a partir de las señales de entrada (Freeman, 1991).

METODOLOGÍA

Los datos experimentales empleados fueron obtenidos de Mota Bolívar (2006). Se analizaron los resultados de los experimentos y se tomaron en cuenta los datos hasta el tiempo de 36 horas de tratamiento, porque se consideraron más robustos. Una vez que se obtuvieron los datos, se identificaron las variables tanto de entrada, que fueron Voltaje, Flujo y % de surfactante, como las de salida, que fue el % de Remoción, y para tener un mejor manejo de los datos se normalizaron (Tabla 1)

Tabla 1 Datos Normalizados				
Muestra	Surfactante %	Voltaje	Flujo	% TPH removido (36 h)
1	0.99	0.48	0.48	0.401
2	0.99	0.48	0.38	0.177
3	0.54	0.48	0.57	0.182
4	0.54	0.48	0.38	0.204
5	0.99	0.69	0.88	0.161
6	0.99	0.99	0.99	0.104
7	0.00	0.00	0.67	0.062
	V_1	V_2	V_3	a

Diseño, arquitectura y Optimización del Modelo de Red Neuronal

Para el diseño del MRN se optó por una red tipo Feed Forward Back Propagation debido al comportamiento de los datos que no justificaban una red más compleja

Función de entrenamiento: Train LM

Determinación del error: Mínimos cuadrados

Optimización de la Red

Para la optimización se utilizó el método empleado por Noble, 1999; el efecto de la arquitectura en la determinación del modelo fue establecido por selección aleatoria de dos grupos de datos, cada grupo fue usado para crear redes, se variaron el número de capas y el número de neuronas.

Grupos que se utilizaron para crear las redes:

Grupo 1: (0.99 0.48 0.48 0.99), (0.54 0.48 0.38 0.50), (0.99 0.69 0.88 0.39), (0 0 0.67 0.15),

Grupo 2: (0.99 0.48 0.38 0.43), (0.54 0.48 0.57 0.44), (0.99 0.99 0.99 0.22)

Validación de la Red Neuronal

Para la validación del modelo se utilizó el método utilizado por Frangú et al.,2001; en donde se separan los datos en dos grupos y se elaboran redes para cada uno luego se determina la diferencia significativa entre ambos grupos de redes

Modelo de Red Neuronal de Tendencia

Se utilizó el programa Neural Network de Statistic® versión 6.0, para obtener un modelo del comportamiento de los datos que se manejaron.

Identificación de Variables y Adecuación de los Datos.

Las variables de entrada que se utilizaron fueron: V1 % de surfactante, V2 voltaje, V3 flujo. La variable de salida fue: a % removido

RESULTADOS

La red Neuronal que se utilizó fue Feed Forward Back Propagation se construyó con tres neuronas de entrada Se empleó la función Logaritmo Sigmoidal pues es la que se aplica a procesos químicos. El programa mostró el valor de las condiciones óptimas que estarán determinadas por los pesos: W_1 , W_2 y W_3 (Figura 2)

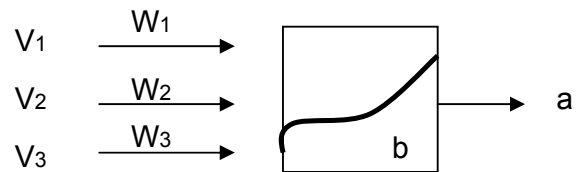


Figura 2 Diseño de la Red Neuronal

Arquitectura propuesta: Feed Forward Back Propagation
 Función de entrenamiento: Train LM
 Determinación del error: Mínimos cuadrados

Optimización

La red que funcionó con los datos es la siguiente: 3 neuronas y 1 capa oculta (Figura 3).

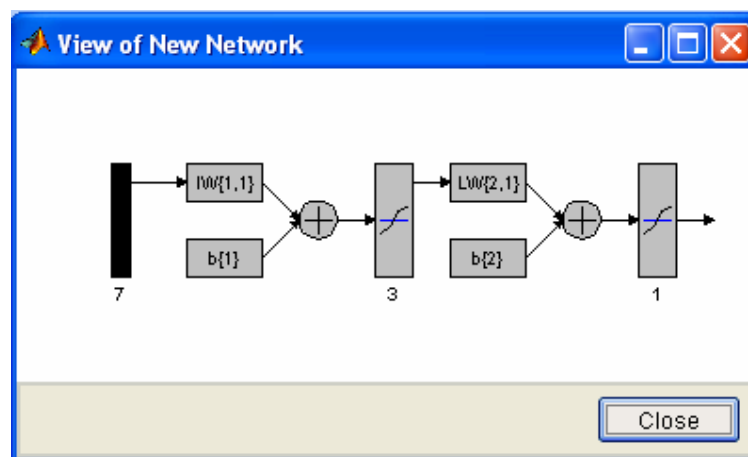


Figura 3 Estructura de la Red

Finalmente la Estructura de la red quedó como se muestra en la Figura 4.

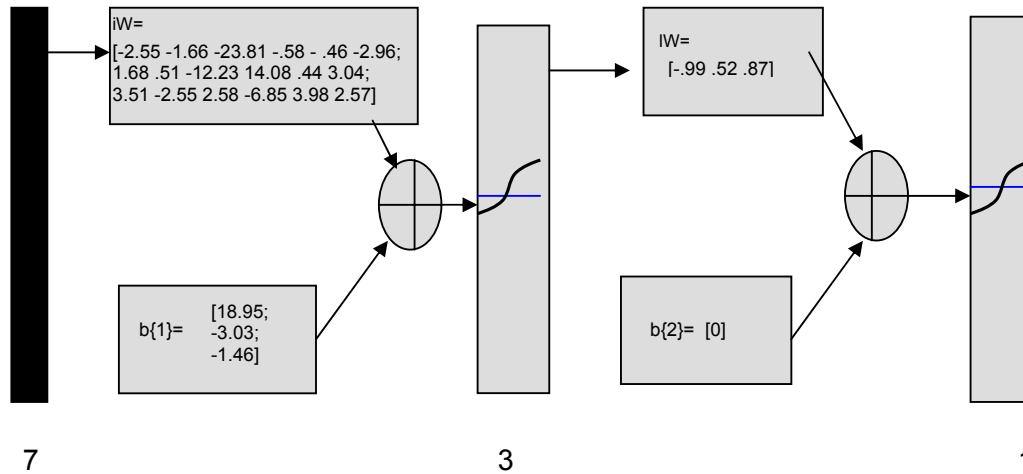


Figura 4. Red Terminada

De acuerdo a los Weights de entrada hay más relevancia del voltaje en el proceso, hasta un 50% más que el Flujo. Siendo el % de Surfactante casi irrelevante puesto que su valor es negativo. Los valores de la capa iw demuestran una mayor interrelación entre el voltaje y el flujo (Figura 4), y respecto al % de Surfactante no existe casi relación entre el voltaje y el flujo puesto que tiene valores negativos y su valor es más bajo.

CONCLUSIONES

Se obtuvo un modelo de red neuronal que determinó mayor influencia del flujo en el proceso. El tipo de Red Neuronal que se eligió fue la feed forward, Back Propagation. La función de entrenamiento fue: Train LM. Para trabajar con una red neuronal se necesitan un número de datos significativo de lo contrario la red no correrá y siempre dará un error con el número de datos. Fue el caso que paso inicialmente con la red cuando los datos se dividieron en dos grupos, estos eran insuficientes.

El número de neuronas de entrada con las que se trabajaron fueron 3 debido a que se tienen tres variables de entrada. El número de Capas con las que se trabajó fue 1 ya que para que pueda tener 2 capas se requiere un problema más complejo.

Se observó que hay más relevancia del voltaje en el proceso, hasta un 50% más que el Flujo. Y el % de Surfactante es casi irrelevante. Existe una mayor interrelación entre el voltaje y el flujo



BIBLIOGRAFÍA

- Chinthamreddy Supraja y Reddy Krishna R. 2004. Enhanced Electrokinetic Remediation of Heavy Metals in Glacial Till Soils Using Different Electrolyte Solutions. Journal of Environmental Engineering. April 2004; Vol. 130 4:442-445.
- Díaz Fernández. Adenso, González Velarde Jose Luis, Laguna Manuel, Moscazo Pablo, Tseng Fan T. Glover Fred Ghaziri Hassan M. 1996. Optimización heurística y Redes Neuronales. Ed. Paraninfo. pp. 164-170|
- Frangu, L., Caraman, S., and Changa E. 2001 Model Based Predictive Control using Neural Network for Bioreactor Process Control, Control Engineering and Applied Informatics. No. 1/2001.
- Freeman James A. y Skapura David. 1991 Redes Neuronales. Algoritmos, aplicaciones y técnicas de programación. Ed. Addison-Eesley. pp. 1-44
- Hernández Rodarte Felipe Samuel. 2005. Mejoramiento de la biolixiviación de minerales por *Acidithiobacillus ferroxidans* con la aplicación de un sistema neurocontrolado. Tesis Doctoral. Facultad de Ciencias Biológicas. UANL.
- Neural Networks TOOLBOX. User's Guide. The MATHWORKS Inc.
- Noble Meter A., Almeida Jonas S., Novell Charles R. 1999. Application of Neural Computing Methods for Inte Phospholipid Fatty Acid Profiles of Natural Microbial Communities. Applied And Rnvironmental Microbiology, Feb. 2000: 694-699.
- Núñez Enrique. 2007. El Suelo como Sistema Ecológico. Wikipedia. Mayo 2007.
- Mota Bolívar Pedro Alejandro. 2006. Electroremediación de suelo contaminado con hidrocarburos desechados por la industria minera. Tesis de Maestría. Departamento de Ingeniería Química. Instituto Tecnológico de Durango.