



**UNIVERSIDAD DE GRANADA**

**E.T.S. DE INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE  
TELECOMUNICACIONES**

**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN  
E INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

**Tesis Doctoral**

**Redes Neuronales Artificiales en  
Ingeniería y Física Nuclear.  
Caracterización de espectros PIXE**

**RAFAEL CORREA DEVES**  
**Octubre 2006**

**Director: Dr. Ignacio Requena Ramos**

Editor: Editorial de la Universidad de Granada  
Autor: Rafael Correa Deves  
D.L.: Gr. 2281 - 2006  
ISBN: 978-84-338-4156-8

La memoria titulada **Redes Neuronales Artificiales en Ingeniería y Física Nuclear. Caracterización de espectros PIXE**, que presenta D. Rafael Correa Deves para optar al grado de doctor, ha sido realizada en el Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial de la Universidad de Granada, y en la Universidad Tecnológica Metropolitana de Santiago de Chile, bajo la dirección del Dr. D. Ignacio Requena Ramos, profesor del citado departamento.

Granada, Octubre del 2006

El doctorando



Fdo.: Rafael Correa Deves

El Director



Fdo.: Ignacio Requena Ramos



## **Agradecimientos**

En estas líneas deseo expresar los agradecimientos a las personas y las instituciones que ellos representan y que han sido pilares fundamentales para que la posibilidad de esta Tesis Doctoral se hiciera realidad.

Agradezco al Dr. Ignacio Requena, Director de esta Tesis, por su constante apoyo al desarrollo general de este trabajo y cuya rigurosidad científica en el tratamiento de cada tema abordado ha constituido una real escuela. También quiero expresar mis agradecimientos a todos los académicos del Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial de la Universidad de Granada que han participado en el desarrollo de este Programa de Doctorado.

El Programa de Doctorado conjunto de la Universidad de Granada de España y la Universidad Tecnológica Metropolitana del Estado de Chile en el ámbito de la computación avanzada y la inteligencia artificial, ha generado desafíos mutuos. Y para nuestra Universidad tiene un significado muy especial ya que la ubica en un nuevo sitio académico en el área de la educación superior de Chile, desde el instante en que ofrece un Programa de Doctorado de alto nivel. En este sentido quiero expresar los agradecimientos a las autoridades de la UTEM, en particular al Rector M. Sc. Miguel Avendaño B. y al Vicerrector Académico Dr. Patricio Olivares I. por la gestión desarrollada en esta línea y que han hecho realidad este Programa de Doctorado.

La aplicación de redes neuronales artificiales en el ámbito del análisis espectral que se presenta en esta Tesis contó con el valioso apoyo del Centro de Física Experimental (CEFEX) de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile y en particular de su Director Dr. Roberto Morales, no sólo porque puso a nuestra disposición valiosos datos y antecedentes experimentales sino porque se involucró en forma real en el éxito de esta nueva metodología de análisis espectral.

A todos los que, de una u otra forma, me han dado su apoyo durante estos años los considero coparticipes de este desafío, que en cierta medida recién comienza.



Esta Tesis Doctoral se la dedico a mis mujeres: Claudia Ester, Claudia Inés, Sofía Pilar y Rafaela Amanda. Su apoyo y comprensión permanente ha constituido un factor fundamental para enfrentar cualquier desafío.





# **Redes Neuronales Artificiales en Ingeniería y Física Nuclear. Caracterización de espectros PIXE**

**Memoria que para optar al grado de Doctor, presenta  
el Licenciado D. RAFAEL CORREA DEVES**

**Santiago de Chile, Octubre del 2006**

**Director: Dr. Ignacio Requena Ramos**

**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN  
E INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

**UNIVERSIDAD DE GRANADA**

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA METROPOLITANA  
DEL ESTADO DE CHILE**



# INDICE

	Índice de Contenidos	i
	Índice de Figuras	v
	Índice de Tablas	xvii
	<b>INTRODUCCION, MOTIVACION Y OBJETIVOS</b>	<b>1</b>
<b>CAPITULO I</b>	<b>PRINCIPIOS BÁSICOS Y DESCRIPCIÓN DE LAS HERRAMIENTAS UTILIZADAS.</b>	<b>7</b>
	1.1) Redes Neuronales Artificiales (Rnas)	9
	1.1.1) La Neurona Artificial (NA)	10
	1.1.2) Redes Neuronales (Rns)	12
	1.1.3) Algunos Modelos de Redes Neuronales.	17
	a) Redes Neuronales de Propagación Hacia Delante (Feedforward).	17
	b) Redes Neuronales Recurrentes. Red De Hopfield.	19
	c) Redes Neuronales de Función Radial Base (RBF).	20
	d) Redes de Kohonen. Redes Neuronales Autoorganizadas (SOM) y LVQ.	21
	e) Otros Modelos de Redes Neuronales. Modelos Híbridos.	23
	1.2) Análisis Espectral Experimental Con Técnica Pixe.	27
<b>CAPITULO II</b>	<b>REVISION DEL ESTADO DEL ARTE DE LAS APLICACIONES DE RNAS EN LA INGENIERÍA Y CIENCIA NUCLEAR.</b>	<b>37</b>
	2.1) Resumen Global de la literatura revisada.	41

2.2)	RN y Análisis Espectral e Identificación de elementos.	44
	a) Redes Neuronales de Propagación hacia delante en Análisis Espectral.	46
	b) Redes Neuronales Recurrentes en Análisis Espectral.	56
	c) Redes Neuronales RBF en Análisis Espectral	58
	d) Redes Neuronales Autoorganizadas en Análisis Espectral.	58
	e) Otros Modelos de Redes Neuronales y Modelos Híbridos en el Análisis Espectral.	58
2.3)	RNAs y Operación y Control de Procesos en Reactores y Plantas Nucleares.	67
2.4)	RNAs, dosimetría y espectrometría de neutrones.	82
2.5)	RNAs Aplicadas a la Interacción de Partículas Altamente Energéticas.	93
2.6)	RNAs con pocos Ejemplos de Entrenamiento.	104

### **CAPITULO III ANÁLISIS DE ESPECTROS PIXE DE MUESTRAS ORGÁNICAS CON SNs.**

3.1)	Situación Experimental y Datos Espectrales.	110
3.2)	Diseño de los Experimentos.	112
3.3)	Resultados Experimentales.	118
	3.3.1) Resultados para cada Elemento.	119
	a) Elemento Fósforo – P	120
	b) Elemento Azufre – S	123
	c) Elemento Potasio – K	126
	d) Elemento Calcio – Ca	129
	e) Elemento Hierro – Fe	132
	f) Elemento Zinc –Zn	135
	3.3.2) Comentarios adicionales	138
	3.3.3) Tablas de Errores Relativo	139
3.4)	Clasificación del Grado de Polución Elemental en Muestras Orgánicas.	143

<b>CAPITULO IV</b>	<b>SISTEMAS NEURONALES PARA EL ANÁLISIS DE ESPECTROS PIXE DE MUESTRAS DE AEROSOLES.</b>	149
4.1)	Situación Experimental y Datos Espectrales.	154
4.2)	Diseño de los Experimentos.	155
4.3)	Resultados Experimentales.	157
4.3.1)	Resultados para cada Elemento.	157
a)	Elemento Aluminio – Al.	158
b)	Elemento Silicio – Si.	161
c)	Elemento Azufre – S.	165
d)	Elemento Potasio – K.	168
e)	Elemento Hierro. – Fe.	172
4.3.2)	Comentarios Adicionales	175
4.3.3)	Tablas de Errores Relativos.	177
4.4)	Clasificación del Grado de Polución Elemental en Muestras de Material Particulado de Aerosoles.	179
<b>CAPITULO V</b>	<b>ANALISIS ESTADÍSTICO DE RESULTADOS DE LA APLICACIÓN DE SNs.</b>	187
5.1)	Análisis Estadístico de la Determinación de las Concentraciones Elementales en Muestras Orgánicas por los SNs.	190
5.1.1)	Conjunto de Entrenamiento.	191
5.1.2)	Conjunto de Test.	193
5.2)	Análisis Estadístico de la Determinación de Concentraciones Elementales en Muestras de Aerosoles por los SNs.	195
5.2.1)	Conjunto de Entrenamiento.	196
5.2.2)	Conjunto de Test.	198
<b>CAPITULO VI</b>	<b>CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS</b>	201
6.1)	CONCLUSIONES.	203
6.1.1)	Diseño de sistemas neuronales (SNs) para el análisis	

	de espectros PIXE.	213
	a) Resultados obtenidos por los SNs en el análisis de espectros PIXE de sustancias orgánicas y aerosoles.	205
	b) Revisión literaria y estudio del estado del arte en el ámbito de la ingeniería y ciencia nuclear.	206
	c) Publicaciones realizadas sobre el contenido de la tesis.	207
	6. 2) LÍNEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN.	208
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	BIBLIOGRAFÍA.	211
<b>APENDICES</b>	APENDICES	227
	A 1. Resultados de Series Ejecutadas por los SNs en Análisis de Sustancias Orgánicas.	229
	A 2: Resultados de Series Ejecutadas por los SNs en Análisis de Aerosoles.	261

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.	Esquema de una Neuron Artificial (NA)	11
Figura 2.	RN de propagación hacia delante	13
Figura 3.	RNA de propagación hacia delante, con $n$ – entradas, $L$ – neuronas ocultas y una salida	14
Figura 4.	Arquitectura de una RN ADALINE	18
Figura 5.	Arquitectura de una Memoria Asociativa Bidireccional BAM	19
Figura 6.	Arquitectura de una RN Función Radial Base (RBF)	20
Figura 7.	RN Auto organizada SOM.	21
Figura 8.	Estructura de Red Neuronal Modular.	24
Figura 9.	Arquitectura no lineal jerarquizada de RNs de varios niveles para el análisis espectral.	26
Figura 10.	Esquema de etapas experimentales en el análisis elemental con la metodología PIXE.	28
Figura 11.	Esquema del diseño experimental utilizado en el CEFEX para el análisis de muestras con la metodología PIXE.	29
Figura 12.	Componentes básicos de un acelerador del tipo Van de Graaff.	29
Figura 13.	Componentes del acelerador Van de Graaff usado en el CEFEX en los experimento PIXE tratados en esta memoria: (a) Tanque contenedor de gas ionizante, (b) tubo de aceleración e imán deflector.	30
Figura 14.	Diagrama del proceso de interacción del haz iónico con la muestra y disposición geométrica de los elementos.	31
Figura 15.	Procesos que ocurren en la interacción de los protones con energía cercana a los 3 MeV con los átomos de la muestra.	32
Figura 16.	Posibles transiciones de electrones en un átomo al generarse vacancias en los niveles más ligados: K, L y M. En experimentos PIXE las transiciones más probables son las $K_{\alpha}$ y $K_{\beta}$ .	32
Figura 17.	Espectro PIXE de una muestra de carácter biológico	

	correspondiente a hígado de pez carpa utilizando haz de protones de 2.0 MeV. El ajuste se calcula con el programa AXIL.	33
Figura 18.	Eficiencia absoluta del detector por unidad de carga y por unidad de masa. La línea sólida es el ajuste.	35
Figura 19.	Esquema experimental de análisis espectral	47
Figura 20.	RN de dos capas (512 nodos de entrada y 8 de salidas) para la identificación 8 elementos.	47
Figura 21.	Ilustración de un proceso de derivación de un espectro.	50
Figura 22.	RN similar al perceptron usada en análisis espectral	50
Figura 23.	RN (20 – 15 – 1) para análisis de presencia de Pu.	52
Figura 24.	Espectros de emisiones alfa calificados por RNs	53
Figura 25.	Histograma de validez de clasificación de espectros de emisiones alfa por RN.	53
Figura 26.	Comparación de clasificación en experiencia de análisis espectral de una RN perceptron lineal y una OLAM de muestra compuesta por $^{60}\text{Co}$ y $^{137}\text{Cs}$ .	56
Figura 27.	Comparación de clasificación en experiencia de análisis espectral de una RN perceptron lineal y una OLAM de muestra compuesta por $^{12}\text{Na}$ , $^{57}\text{Co}$ , $^{60}\text{Co}$ , $^{137}\text{Cs}$ , $^{152}\text{Eu}$ y $^{154}\text{Eu}$ .	57
Figura 28.	Espectro tipo LIBS.	60
Figura 29.	Esquema de aplicación LIBS con RNs.	61
Figura 30.	Esquema de reconocimiento espectral LIBS con RNs.	61
Figura 31.	Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Cr	62
Figura 32.	Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Mg	62
Figura 33.	Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Mn	63
Figura 34.	Funciones de correlación para la detección de materiales radiactivos con RNs	63
Figura 35.	Resultado de predicción de material radiactivo con RNS	64
Figura 36.	RNA Jump	68
Figura 37.	Estructura de controlador inteligente del núcleo de un reactor	70

Figura 38.	Estructura de RN de propagación hacia delante usada en [8]	73
Figura 40.	Respuesta de dosímetro según la energía efectiva de un fotón .	83
Figura 41.	Curva de distribución de energía entregada por la RN después de un proceso de entrenamiento.	84
Figura 42.	Espectros comparativos de C-4 encubiertos en nylon y PAN y los respectivos espectros de materiales PAN y nylon solos	87
Figura 43.	Estructura de RNs implementadas en el análisis litológico	89
Figura 44.	Estructura de un perceptron multicapa de conectividad parcial dinámica.	96
Figura 45.	Curva de relación entre la masa reconstruida por la red neuronal y la masa verdadera del boson Higos.	98
Figura 47.	Esquema de la relación del análisis de espectros PIXE con RNs y la situación experimental general.	110
Figura 48.	Espectros PIXE obtenidos de muestras orgánicas de músculos, hígado y branquias de peces	111
Figura 49.	Esquema del diseño de aplicación de RNs al análisis de espectros PIXE	113
Figura 50.	Arquitectura de un SN especializado en el análisis de espectros PIXE.	114
Figura 51.	Arquitectura ( 4 – 4 – 1 ) de RN de propagación hacia delante utilizada en los SNs.	116
Figura 52.	Fósforo - P. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas $C_{exp}$ y las determinadas por el SN del P – $C_{nn}$ . (b)Gráfico comparativo de las $C_{exp}$ y $C_{nn}$ para el P.	121
Figura 53.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $S_{nn}$ ) en la Serie I para el P.	122
Figura 54.	Azufre - S. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas $C_{exp}$ y las determinadas por el SN del S – $C_{nn}$ . (b)Gráfico comparativo de las $C_{exp}$ y $C_{nn}$ para el S.	124
Figura 55.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $S_{nn}$ ) en la Serie I para el S.	125
Figura 56.	Potasio - K. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas $C_{exp}$ y las determinadas por el SN del K – $C_{nn}$ .	

	(b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el K.	127
Figura 57.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie 5 para el K.	128
Figura 58.	Calcio - Ca. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Ca – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Ca.	130
Figura 59.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie 4 para el Ca.	131
Figura 60.	Hierro - Fe. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Fe – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Fe.	133
Figura 61.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie 3 para el Fe.	134
Figura 62.	Zinc - Zn. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Zn – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Zn.	136
Figura 63.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie 3 para el Zn.	137
Figura 64.	Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras orgánicas.	147
Figura 65.	Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de test de las muestras orgánicas.	148
Figura 66.	Esquema de procedimiento experimental y su relación con las RNAs para determinar las concentraciones de los elementos investigados en aerosoles.	152
Figura 67.	(a) Espectro PIXE de muestras de material particulado obtenido en la ciudad de Santiago de Chile. (b) Espectro PIXE de muestras de aerosoles que indica las líneas espectrales de los elementos investigados en esta Tesis.	153
Figura 68.	Aluminio - Al. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Al – Cnn. (b) Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Al.	159

Figura 69.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en el SN para el Al.	161
Figura 70.	Sicilio – Si. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Si – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Si.	163
Figura 71.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en el SN para el Si.	164
Figura 72.	Azufre - S. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del S – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el S.	166
Figura 73.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en el SN para el S.	168
Figura 74.	Potasio - K. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del K – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el K.	170
Figura 75.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en el SN para el K.	170
Figura 76.	Hierro - Fe. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las determinadas por el SN del Fe – Cnn. (b)Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn para el Fe.	173
Figura 77.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en el SN para el Fe.	175
Figura 78.	Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras aerosoles.	184
Figura 79.	Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras aerosoles.	185
Figura 80.	Gráfico de correlación de los resultados obtenidos por los SNs en el análisis de muestras orgánicas. Se incluyen los conjuntos de entrenamiento y test.	190
Figura 81.	Gráfico de regresión lineal Gnn vs Cexp) para las concentraciones elementales en el conjunto de entrenamiento en las muestras	

	orgánicas.	191
Figura 82.	Gráfico de residuos basado en la $t$ de Student en las concentraciones elementales del conjunto de entrenamiento en las muestras orgánicas.	192
Figura 83.	Gráfico de regresión lineal $G_{nn}$ vs $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de test en las muestras orgánicas.	193
Figura 84.	Gráfico de residuos basado en la $t$ de Student en las concentraciones elementales del conjunto de test en las muestras orgánicas.	194
Figura 85.	Gráfico de correlación de los resultados obtenidos por los SNs. Se incluyen los conjuntos de entrenamiento y test de las muestras de aerosoles.	195
Figura 86.	Gráfico de regresión lineal $G_{nn}$ vs $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de entrenamiento en las muestras de aerosoles.	196
Figura 87.	Gráfico de residuos basado en la $t$ de Student en las concentraciones elementales del conjunto de entrenamiento en las muestras de aerosoles.	197
Figura 88.	Gráfico de regresión lineal $G_{nn}$ vs $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de test en las muestras de aerosoles.	198
Figura 89.	Gráfico de residuos basado en la $t$ de Student en las concentraciones elementales del conjunto de test en las muestras de aerosoles.	199
Figura 90.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $S_{nn}$ ) en la Serie I para el P en el conjunto de Test.	230
Figura 91.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $S_{nn}$ ) en la Serie II para el P en el conjunto de Test.	231
Figura 92.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $S_{nn}$ ) en la Serie III para el P en el conjunto de Test.	232
Figura 93.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y	

	las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el P en el conjunto de Test.	233
Figura 94.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el P en el conjunto de Test.	234
Figura 95.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el S en el conjunto de Test.	235
Figura 96.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el S en el conjunto de Test.	236
Figura 97.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el S en el conjunto de Test.	237
Figura 98.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el S en el conjunto de Test.	238
Figura 99.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el S en el conjunto de Test.	239
Figura 100.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el K en el conjunto de Test.	240
Figura 101.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el K en el conjunto de Test.	241
Figura 102.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el K en el conjunto de Test.	242
Figura 103.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el K en el conjunto de Test.	243
Figura 104.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y	

	las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el K en el conjunto de Test.	244
Figura 105.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Ca en el conjunto de Test.	245
Figura 106.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Ca en el conjunto de Test.	246
Figura 107.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Ca en el conjunto de Test.	247
Figura 108.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Ca en el conjunto de Test.	248
Figura 109.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Ca en el conjunto de Test.	249
Figura 110.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Fe en el conjunto de Test.	250
Figura 111.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Fe en el conjunto de Test.	251
Figura 112.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Fe en el conjunto de Test.	252
Figura 113.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Fe en el conjunto de Test.	253
Figura 114.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Fe en el conjunto de Test.	254
Figura 115.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y	

	las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Zn en el conjunto de Test.	255
Figura 116.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Zn en el conjunto de Test.	256
Figura 117.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Zn en el conjunto de Test.	257
Figura 118.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Zn en el conjunto de Test.	258
Figura 119.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Zn en el conjunto de Test.	259
Figura 120.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	262
Figura 121.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	263
Figura 122.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	264
Figura 123.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	265
Figura 124.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	266
Figura 125.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	267
Figura 126.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y	

	las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	268
Figura 127.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	269
Figura 128.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	270
Figura 129.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Si en el conjunto de Test.	271
Figura 130.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	272
Figura 131.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	273
Figura 132.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	274
Figura 133.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	275
Figura 134.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	276
Figura 135.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	277
Figura 136.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	278
Figura 137.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y	

	las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	279
Figura 138.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	280
Figura 139.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	281
Figura 140.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	282
Figura 141.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	283
Figura 142.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	284
Figura 143.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	285
Figura 144.	Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.	286

## LISTA DE TABLAS

Tabla 1.	Publicaciones ISI sobre aplicaciones de RNAs en la ingeniería nuclear y física de partículas en periodo 2005 – 2006.	41
Tabla 2.	Clasificación temporal de trabajos analizados, período 1988 – 2004.	42
Tabla 3.	Sistemática de aplicaciones de RNs en la ingeniería y ciencia nuclear hasta el año 2004.	43
Tabla 4.	Sistemática de aplicaciones de SHs en el ámbito de la ciencia e ingeniería nuclear hasta el año 2004.	43
Tabla 5.	Comparación de predicciones con RNs y curvas de calibración.	60
Tabla 6.	Composición elemental y densidad física de algunas sustancias de interés analizadas en [96]	87
Tabla 7.	Líneas características de emisiones X ( $K_{\alpha}$ , $K_{\beta}$ ) de elementos investigados en muestras orgánicas.	112
Tabla 8.	Resultados obtenidos en la Serie 1 (mejor serie) para el P.	122
Tabla 9.	Resultados obtenidos en la Serie 1 (mejor serie) para el S.	125
Tabla 10.	Resultados obtenidos en la Serie 5 (mejor serie) para el K.	128
Tabla 11.	Resultados obtenidos en la Serie 4 (mejor serie) para el Ca.	131
Tabla 12.	Resultados obtenidos en la Serie 3 (mejor serie) para el Fe.	134
Tabla 13.	Resultados obtenidos en la Serie 3 (mejor serie) para el Zn.	137
Tabla 14.	Errores relativos en la determinación de la concentración del P en muestras orgánicas con SN.	140
Tabla 15.	Errores relativos en la determinación de la concentración del S en muestras orgánicas con SN.	140
Tabla 16.	Errores relativos en la determinación de la concentración del K en muestras orgánicas con SN.	141
Tabla 17.	Errores relativos en la determinación de la concentración del Ca en muestras orgánicas con SN.	141
Tabla 18.	Errores relativos en la determinación de la concentración del Fe en muestras orgánicas con SN.	141
Tabla 19.	Errores relativos en la determinación de la concentración del Zn en	

	muestras orgánicas con SN.	142
Tabla 20.	Clasificación con SN del grado de polución de P en muestras orgánicas.	144
Tabla 21.	Clasificación con SN del grado de polución de S en muestras orgánicas analizadas.	144
Tabla 22.	Clasificación con SN del grado de polución de K en muestras orgánicas analizadas.	145
Tabla 23.	Clasificación con SN del grado de polución de Ca en muestras orgánicas analizadas.	145
Tabla 24.	Clasificación con SN del grado de polución de Fe en muestras orgánicas analizadas.	145
Tabla 25.	Clasificación con SN del grado de polución de Zn en muestras orgánicas analizadas.	146
Tabla 26.	Resumen de clasificación del grado de polución de los elementos investigados en muestras orgánicas analizadas.	146
Tabla 27.	Relaciones de clasificación de los SNs para cada elemento en el conjunto de entrenamiento y de Test.	146
Tabla 28.	Líneas características de emisiones X ( $K_{\alpha}$ , $K_{\beta}$ ) de elementos investigados en muestras de aerosoles.	154
Tabla 29.	Resultados obtenidos en el SN del Al.	160
Tabla 30.	Resultados obtenidos en el SN del Si.	164
Tabla 31.	Resultados obtenidos en el SN del S.	167
Tabla 32.	Resultados obtenidos en el SN del K.	171
Tabla 33.	Resultados obtenidos en el SN del Fe.	174
Tabla 34.	Errores absolutos y relativos en la determinación con RNs de la concentración de los elementos investigados en muestras de aerosoles.	178
Tabla 35.	Errores absolutos y relativos en la determinación con SNs de la concentración de los elementos investigados en muestras de aerosoles.	179
Tabla 36.	Clasificación con SN del grado de polución del elemento Al investigado en muestra de aerosoles.	180
Tabla 37.	Clasificación con SN del grado de polución del elemento Si	

	investigado en muestra de aerosoles.	181
Tabla 38.	Clasificación con SN del grado de polución del elemento S investigado en muestra de aerosoles.	181
Tabla 39.	Clasificación con SN del grado de polución del elemento K investigado en muestra de aerosoles.	182
Tabla 40.	Clasificación con SN del grado de polución del elemento Fe investigado en muestra de aerosoles.	182
Tabla 41.	Resumen de clasificación general con SNs del grado de polución de los elementos investigados en muestras de aerosoles analizadas en los conjuntos de entrenamiento y test.	183
Tabla 42.	Relaciones de clasificación de los SNs para cada elemento en el conjunto de entrenamiento y de Test, para muestras de aerosoles.	183
Tabla 43.	Antecedentes estadísticos de análisis realizado en muestras orgánicas y aerosoles.	200
Tabla 44.	Resultados obtenidos en la Serie I para el P.	230
Tabla 45.	Resultados obtenidos en la Serie II para el P.	231
Tabla 46.	Resultados obtenidos en la Serie III para el P.	232
Tabla 47.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el P.	233
Tabla 48.	Resultados obtenidos en la Serie V para el P.	234
Tabla 49.	Resultados obtenidos en la Serie I para el S.	235
Tabla 50.	Resultados obtenidos en la Serie II para el S.	236
Tabla 51.	Resultados obtenidos en la Serie III para el S.	237
Tabla 52.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el S.	238
Tabla 53.	Resultados obtenidos en la Serie V para el S.	239
Tabla 54.	Resultados obtenidos en la Serie I para el K.	240
Tabla 55.	Resultados obtenidos en la Serie II para el K.	241
Tabla 56.	Resultados obtenidos en la Serie III para el K.	242
Tabla 57.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el K.	243
Tabla 58.	Resultados obtenidos en la Serie V para el K.	244
Tabla 59.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Ca.	245
Tabla 60.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Ca.	246
Tabla 61.	Resultados obtenidos en la Serie III para el Ca.	247
Tabla 62.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el Ca.	248

Tabla 63.	Resultados obtenidos en la Serie V para el Ca.	249
Tabla 64.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Fe.	250
Tabla 65.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Fe.	251
Tabla 66.	Resultados obtenidos en la Serie III para el Fe.	252
Tabla 67.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el Fe.	253
Tabla 68.	Resultados obtenidos en la Serie V para el Fe.	254
Tabla 69.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Zn.	255
Tabla 70.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Zn.	256
Tabla 71.	Resultados obtenidos en la Serie III para el Zn.	257
Tabla 72.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el Zn.	258
Tabla 73.	Resultados obtenidos en la Serie V para el Zn.	259
Tabla 74.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Al en aerosoles.	262
Tabla 75.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Al en aerosoles.	263
Tabla 76.	Resultados obtenidos en la Serie III para el Al en aerosoles.	264
Tabla 77.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el Al en aerosoles.	265
Tabla 78.	Resultados obtenidos en la Serie V para el Al en aerosoles.	266
Tabla 79.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Si en aerosoles.	267
Tabla 80.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Si en aerosoles.	268
Tabla 81.	Resultados obtenidos en la Serie III para el Si en aerosoles.	269
Tabla 82.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el Si en aerosoles.	270
Tabla 83.	Resultados obtenidos en la Serie V para el Si en aerosoles.	271
Tabla 84.	Resultados obtenidos en la Serie I para el S en aerosoles.	272
Tabla 85.	Resultados obtenidos en la Serie II para el S en aerosoles.	273
Tabla 86.	Resultados obtenidos en la Serie III para el S en aerosoles.	274
Tabla 87.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el S en aerosoles.	275
Tabla 88.	Resultados obtenidos en la Serie V para el S en aerosoles.	276
Tabla 89.	Resultados obtenidos en la Serie I para el K en aerosoles.	277
Tabla 90.	Resultados obtenidos en la Serie II para el K en aerosoles.	278
Tabla 91.	Resultados obtenidos en la Serie III para el K en aerosoles.	279
Tabla 92.	Resultados obtenidos en la Serie IV para el K en aerosoles.	280
Tabla 93.	Resultados obtenidos en la Serie V para el K en aerosoles.	281
Tabla 94.	Resultados obtenidos en la Serie I para el Fe en aerosoles.	282
Tabla 95.	Resultados obtenidos en la Serie II para el Fe en aerosoles.	283

Tabla 96. Resultados obtenidos en la Serie III para el Fe en aerosoles.	284
Tabla 97. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Fe en aerosoles.	285
Tabla 98. Resultados obtenidos en la Serie V para el Fe en aerosoles.	286

# **INTRODUCCIÓN. MOTIVACIÓN Y OBJETIVOS**



El conocimiento científico y tecnológico, y su tasa de crecimiento, aumentan en forma creciente en el tiempo, lo que implica un desarrollo continuo de las metodologías de investigación, procesamiento y análisis de resultados, cuestión que deriva en avances de la investigación científica en determinada área pero también trae como consecuencia progresos significativos en la investigación de la metodología aplicada. Dichas herramientas metodológicas se desarrollan, en general, en torno a una aplicación en un área específica, pero si su capacidad resulta eficiente, son implementadas en otros campos de la ciencia y la tecnología, demostrando la generalización de sus atributos.

Las herramientas metodológicas de la inteligencia artificial (IA) permiten abordar situaciones y problemas complejos en diversas áreas de la actividad humana. Esto es una realidad que se robustece y se expande con el tiempo, principalmente en los últimos veinte años.

En este sentido, aparecen como algo natural las aplicaciones de nuevas tecnologías de la información, tanto en la ingeniería y ciencia nuclear, como en la física atómica y de las partículas de altas energías. Estas aplicaciones se enmarcan en el ámbito general de la inteligencia artificial (IA) y de la neurocomputación en particular, y se desarrollan con intensidad creciente desde finales de la década de los ochenta en adelante. Los paradigmas más referidos en este tipo de aplicaciones de IA, tanto en investigaciones fundamentales como aplicadas en los campos mencionados, son los sistemas expertos (SE), algoritmos genéticos (AG), sistemas difusos (SD), redes neuronales artificiales (RNA) y sistemas

híbridos (SH) de la IA. En especial, un mayor impacto y desarrollo adquieren las investigaciones científicas y técnicas que utilizan las RNAs en un amplio espectro de soluciones y problemas.

En este sentido, un objetivo de la presente memoria es la realización de un estudio del Estado del Arte de la aplicación de RN en la ingeniería y ciencia nuclear, incluyendo la física de partículas de alta energía, lo que reportará sin duda un importante beneficio para la comunidad científica del área.

Si bien el mayor número de aplicaciones se vincula a la investigación e implementación de nuevas técnicas de control y operación de reactores y plantas nucleares de potencia, también se han desarrollado en forma creciente las aplicaciones que se refieren al análisis espectral e identificación de elementos y sus concentraciones en una determinada muestra en estudio. Este tipo de análisis se relaciona principalmente con espectros de emisiones alfa y gamma y en menor grado con espectros de rayos X e infrarrojos. En particular, son muy escasas las aplicaciones referidas a espectros de emisiones X obtenidos a través de la técnica experimental PIXE (proton induced X-ray emissions) y permanece casi inexplorada la utilización de RNAs en espectros de tipo BIXE (beta induced X-ray emissions).

La técnica PIXE es un método experimental fundamentado científicamente, que permite determinar correctamente la presencia y concentración en determinada muestra de los elementos químicos presentes, a partir del espectro resultante.

Una vez obtenido el espectro, para determinar la concentración de los elementos presentes en la muestra, hay que aplicar un proceso complejo de cálculo, costoso en tiempo de computación y también económicamente.

Surge entonces, como idea natural, la utilización de RNs para “aprender” el proceso de cálculo de las concentraciones, y teniendo en cuenta la rapidez de las RNs en modo uso, poder obtener las concentraciones de los elementos en tiempo real “on-line”.

Así, otro objetivo central de este trabajo es el desarrollo de una aplicación de RNAs en el análisis de espectros PIXE, actuando como alternativa al proceso de determinación de la concentración, una vez obtenido el espectro de la muestra. La eficacia de la RN se mostrará sobre espectros obtenidos a partir de muestras orgánicas y de aerosoles.

La motivación de esta aplicación es avanzar en la automatización del proceso de clasificación de los elementos presentes en la muestra investigada y la determinación de sus respectivas concentraciones elementales. En esta línea, se busca reducir considerablemente los tiempos y costos de cálculo y computación en el proceso del análisis espectral.

Con este objetivo se propone la idea nueva de explorar el diseño e implementación de Sistemas Neuronales (SNs) especializados, para el análisis de los elementos en estudio. Cada SN (para un elemento químico concreto), está compuesto por una serie de RNAs que actúan independiente y en forma paralela, lo que permite que sus respuestas sean simultáneas, para que al recombinarlas mediante alguna función (media, máximo, ...), se obtenga la salida del SN. Para conseguir la respuesta en tiempo real, será necesario que las entradas a cada SN sean conocidas en el momento en que el espectro es obtenido.

Para el entrenamiento del SN, se utilizarán muestras cuyas concentraciones de los elementos considerados, han sido obtenidas previamente usando el proceso PIXE clásico. En el diseño del SN se tendrá en cuenta las características propias de los tipos de muestras utilizadas.

La estructura de la presente memoria es como sigue:

- En el Capítulo 1 se presenta un breve desarrollo sobre las herramientas a usar en la aplicación mencionada. Se analizan los elementos y principios básicos sobre los que se sustentan las RNAs y los modelos más usados en aplicaciones científicas y tecnológicas. Se incluye una breve descripción de la metodología experimental PIXE en el análisis espectral de materiales.
- En el Capítulo 2 se efectúa un análisis del estado del arte de las aplicaciones de las RNAs en el ámbito de la ingeniería y ciencia nuclear, profundizando el estudio de éstas en lo referido al análisis espectral de tipo atómico y nuclear.
- En el Capítulo 3 se describe el diseño de SNs para el análisis de espectros PIXE obtenidos de muestras orgánicas y se describe la situación experimental y su relación con el proceso de entrenamiento de las RNAs utilizadas en el interior de cada SN. Se presentan detalladamente los resultados de la implementación de los SNs en dos líneas principales: en primer lugar en la determinación de las concentraciones elementales en cada muestra orgánica testeada y en segundo lugar en la clasificación del grado de polución de los

elementos en las muestras. Se realiza un estudio de errores de las respuestas de los SNs.

- En el Capítulo 4 se describe el diseño de SNs para el análisis de espectros PIXE obtenidos de muestras de aerosoles (polución en el aire) y se describe la situación experimental y su relación con el proceso de entrenamiento de las RNAs utilizadas. Se presentan detalladamente los resultados de la implementación de los SNs en las mismas líneas consideradas en el capítulo 3.
- En el Capítulo 5 se presenta un análisis estadístico de los resultados de las aplicaciones de los SNs en el análisis de las muestras orgánicas y de aerosoles, para determinar las concentraciones de los elementos químicos estudiados en dichas muestras. Para ello se construyen gráficos de correlación para los conjuntos de entrenamiento y test que incluyen los resultados de todos los elementos, y de las diferentes ejecuciones del SN realizadas para las muestras orgánicas y las de aerosoles. Se realiza una estadística en base a curvas de regresión lineal simple entre las concentraciones experimentales y las determinadas por los SNs, lo que nos permite deducir el grado de confiabilidad de los resultados obtenidos por los SNs tanto en los conjuntos de test como de entrenamiento.
- El capítulo 6 contiene las conclusiones relacionadas con el contenido de la presente memoria y comentarios sobre futuras aplicaciones de Redes Neuronales en este campo, y su impacto en el desarrollo de la investigación científica en esta línea.
- Finalmente se presenta un listado de todas las referencias utilizadas y citadas en el texto de la memoria.
- En los apéndices se añaden todos los resultados obtenidos en la experimentación, con formato de tablas.

## **CAPÍTULO I.**

### **PRINCIPIOS BÁSICOS Y DESCRIPCIÓN DE LAS HERRAMIENTAS UTILIZADAS.**



En este capítulo se presentan, en primer lugar, los postulados básicos de las redes neuronales artificiales y se realiza una breve descripción de los modelos más utilizados en el campo de la ingeniería y ciencia nuclear. También se ilustran algunos modelos complejos de sistemas de redes neuronales utilizados en este tipo de investigación. Y en segundo lugar, se resumen los elementos básicos de la metodología de análisis experimental de espectros de emisiones X inducidas por protones, que se utiliza en procesos de investigación no destructivo de muestras de sustancias orgánicas e inorgánicas.

### **1. 1) REDES NEURONALES ARTIFICIALES.**

Las redes neuronales artificiales se pueden considerar como dispositivos de ingeniería, que inspiradas en el funcionamiento del cerebro humano, tienen por objeto permitir el aprendizaje artificial, es decir, al fin y al cabo son máquinas. En esta línea el aspecto central de una red neuronal es la capacidad de aprender de la experiencia acumulada en un conjunto de ejemplos, tratando de emular en alguna forma, la actividad natural del cerebro para aprender.

De esta forma es posible atacar aquellos problemas que no pueden expresarse a través de un algoritmo, bien porque no se conoce, o porque es demasiado complejo. En síntesis, una red neuronal se puede considerar como un sistema para el tratamiento de la información, cuya unidad básica de procesamiento está inspirada en la célula fundamental del sistema nervioso humano: la neurona ([112]).

### 1. 1. 1) La Neurona Artificial (NA).

El proceso de una neurona biológica se puede sintetizar en una serie de estímulos o entradas, que se agregan de forma ponderada (fuerza sináptica), excitando a la neurona. Cuando la excitación alcanza un cierto umbral, permite la activación de la neurona que emite una señal, o salida, que a su vez puede estimular a otras neuronas. En forma análoga una neurona artificial se puede considerar como un dispositivo de estímulo – respuesta (E – R), que actúa como un Procesador Elemental (PE) ya que las operaciones que realiza son muy simples, y que al interrelacionarse con otras neuronas, vía una arquitectura bien definida previamente, da origen a una red neuronal artificial (RNA)[94].

Entonces, se puede considerar que una **neurona artificial**, es un procesador elemental que recibe una serie de entradas con ponderaciones diferentes que al agregarse producen el nivel de **excitación**  $S$ . La activación de la neurona artificial se produce mediante la aplicación de una **función de activación**  $F$ , generalmente no lineal, a cada nivel de excitación, proporcionando una salida.

Las entradas pueden ser binarias o continuas y se suelen representar con un vector de entrada:  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ . La excitación  $S$  se calcula a partir de este vector de entrada, y las ponderaciones que se definen con un vector de pesos  $W$ :

$W = (w_1, w_2, \dots, w_n)$ . La forma habitual es la suma de entradas ponderadas.

$$S = XW = \sum_i x_i w_i$$

La **función de activación** determina el estado de actividad de una neurona transformando la excitación en un valor de activación, que es la salida de la neurona, y cuyo rango se encuentra generalmente en el intervalo (0,1) o (-1,1), ya que se considera que una neurona puede estar totalmente activa (1) o totalmente inactiva (0 ó -1).

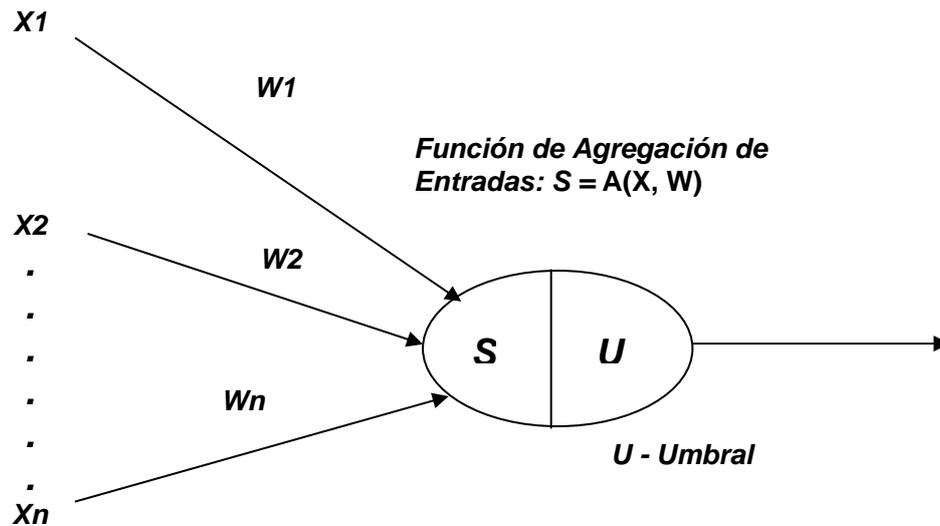


Figura 1. Esquema de una Neurona Artificial (NA)

Existen diferentes tipos de funciones de activación  $F_a(S)$ . Las más usadas son:

- Función Umbral (salida 0, 1)

$$F(x) = 1 \text{ si } x > U ; \quad F(x) = 0 \text{ si } x \leq U$$

- Función Umbral-Lineal ( $a > 0$  y salida en (-1, 1))

$$F(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } x \leq -1/a \\ ax & \text{si } -1/a < x < 1/a \\ 1 & \text{si } x \geq 1/a \end{cases}$$

- Función Sigmoide (salida en (0, 1))

$$F(x) = 1 / (1 + e^{-gx})$$

- Función Tangente Hiperbólica (salida en (-1, 1))

$$F(x) = (e^{gx} - e^{-gx}) / (e^{gx} + e^{-gx})$$

En estas dos últimas funciones,  $g$  varía con la pendiente de  $F$

- Función de Gauss

$$F_a = \exp [(x - \mu)^2 / \sigma]$$

donde  $\sigma$  es la desviación estándar y  $\mu$  es una medida de la media.

### 1. 1. 2) Redes Neuronales (RNs).

La interconexión de un conjunto de neuronas o PE, mediante una estructura y arquitectura predefinida da origen a una **red neuronal**. Una red neuronal puede definirse de diversas maneras, pero en forma más precisa se puede decir que una RNA es “un conjunto de procesadores elementales interconectados, no lineal ni estacionario, que realiza al menos alguna de las siguientes funciones: Aprendizaje, Memorización, Generalización o Abstracción de características esenciales, a partir de un conjunto de ejemplos” [112].

En una RNA se pueden considerar tres aspectos esenciales:

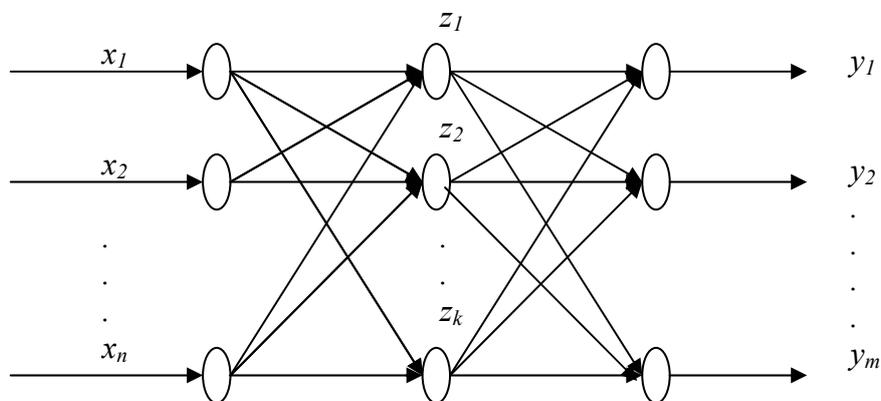
- **Diseño Estructural:** Contempla el tipo de neurona, sus entradas y funciones de activación, el tipo de conexiones entre estas, su topología y la selección de un conjunto adecuado de datos para el entrenamiento y para la verificación o prueba (test).
- **Aprendizaje:** Consiste en el proceso de adaptación de los pesos para que la respuesta de la RNA sea la deseada tanto para datos de los conjuntos de entrenamiento y verificación, como para otros datos de entrada no contemplados en los conjuntos antes dichos. Los métodos de aprendizaje se clasifican en dos grupos : **supervisado** – con maestro, donde la red se entrena en base a ejemplos con entrada y salida (esperada), y **no supervisado** – sin maestro, en base a entrenamiento con ejemplos que incluyen sólo la entrada.
- **Recuperación de la información:** Consiste en recuperar la información almacenada en los pesos durante el proceso de entrenamiento para que sea utilizada en la aplicación, donde los datos de entrada pueden o no coincidir con los presentados en el proceso de aprendizaje. Si los datos de entrada no coinciden con los del entrenamiento, se espera que la respuesta de la RNA, previamente entrenada, sea lo más aproximada posible a la respuesta esperada.

Uno de los modelos de redes neuronales más utilizado, es la de propagación hacia delante. En este tipo de red, las neuronas se agrupan en capas paralelas, con diferente número de neuronas por capa, tal que los enlaces y conexiones se dan entre las neuronas

de una capa y la siguiente solamente. Se pueden diferenciar tres tipos de capa: **capa de entrada** (donde no hay proceso de los datos), **capas ocultas** y **capa de salida**. El número de capas ocultas, no conectadas directamente a las entradas ni las salidas, puede ser variable.

La Figura 2 presenta una típica estructura de red neuronal multicapa totalmente conectada y de propagación hacia adelante, con una capa de entrada ( $n$  – neuronas), una oculta ( $k$  – neuronas) y una de salida ( $m$  – neuronas).

$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  e,  $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$  representan los vectores de entrada y salida respectivamente.



**Figura 2. RN de propagación hacia adelante.**

Uno de los aspectos esenciales en una red neuronal lo constituye el **proceso de aprendizaje y verificación**, donde la red hace generalizaciones a partir de un conjunto de ejemplos y aprende a calcular la salida esperada para cada vector de entrada. La esencia de este proceso es la adaptación de los pesos, o ponderaciones, en las conexiones de una RNA. Existen dos clases básicas de aprendizaje: **supervisado y no supervisado**.

En el **aprendizaje supervisado** los datos de entrenamiento están constituidos por patrones de parejas (entrada, salida). El aprendizaje, llamado también proceso de entrenamiento de la red, consiste en la optimización de una función que mide las discrepancias entre las salidas calculadas por la red y las salidas esperadas (maestro). Para conseguir esta optimización, se ajustan los valores de los pesos de las conexiones, en forma iterativa, de acuerdo con algún criterio, generalmente basado en técnicas

matemáticas de optimización no lineal. Normalmente la función de discrepancia suele ser una medida del error, casi siempre el Error Cuadrático Medio. “El objetivo del entrenamiento es encontrar los pesos óptimos para minimizar el error entre los valores del maestro y las salidas de respuesta actual” [34].

En el proceso de aprendizaje debe producirse el ajuste de los pesos de las conexiones entre las neuronas de acuerdo a una determinada regla. Hay muchas reglas para el ajuste de los pesos.

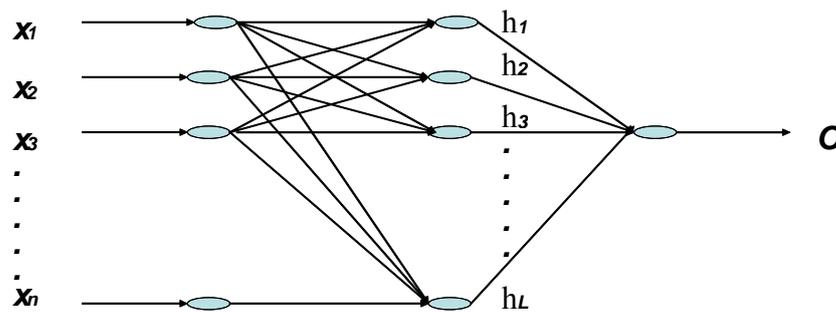
La ley de Hebb, basada en la idea de que cuando dos PE conectados están activados simultáneamente, su interconexión se refuerza, lleva a una expresión matemática de correlación, que puede ser entre los valores de salida, o incluso entre los valores de excitación de ambas neuronas, moderadas mediante una tasa de aprendizaje  $\gamma$  ( $0 < \gamma < 1$ ):

$$\Delta w_{ij} = \gamma o_i o_j$$

Otro criterio de ajuste se utiliza en la Regla Delta (válida solo para redes sin capas ocultas), que busca minimizar el ECM, siguiendo la idea del gradiente descendente, y cuya expresión es:

$$\Delta w_{ij} = \gamma o_i (d_j - o_j)$$

La limitación de la regla delta (solo es válida en redes sin capas ocultas) implica que pueden resolver solamente problemas linealmente separables.



**Figura 3 . RNA de propagación hacia delante, con n – entradas, L – neuronas ocultas y una salida**

El algoritmo de retropropagación del error utiliza como criterio de ajuste, una generalización de la regla delta, y el objetivo del proceso sigue siendo el de minimizar el error cuadrático de la diferencia entre la salida esperada y la salida actual.

El problema para ajustar los pesos es que no hay salidas esperadas para la capa oculta, con lo que no podemos usar la regla delta capa por capa. Esto se resuelve retropropagando los errores de la capa de salida, hacia las capas ocultas, a través de las conexiones correspondientes. Con capas ocultas, el problema de la separabilidad lineal desaparece y este tipo de RN de propagación adelante, también llamada Perceptron Multicapa, se puede aplicar a casi cualquier problema.

El algoritmo de retropropagación del error es el más usado en redes neuronales de propagación hacia delante. Consideremos una RN de tres capas con  $n$  entradas,  $L$  neuronas en la capa oculta y una en la de salida – como se indica en la Figura 3, que es similar al tipo de red usada en la aplicación realizada en el presente trabajo. Una medida del error en un par etiquetado (entrada/salida)  $(x^k, y^k)$  se define por la expresión

$$E_k = \frac{1}{2}(y^k - O^k) \quad (1.1)$$

donde  $O^k$  es la salida calculada por la red cuando se le presenta un vector de entrada  $x^k = (x_1^k \dots \dots \dots x_n^k)$  y que se calcula mediante una función de transferencia sigmoideal del tipo

$$O^k = (1 + \exp(-Wh^k))^{-1} \quad (1.2)$$

donde  $h^k = (h_1^k \dots \dots \dots h_L^k)$  es el vector de las salidas de la capa oculta y  $W$  es el vector de pesos de la neurona de salida :  $W = (W_1, W_2, \dots \dots \dots, W_L)$

$$h_l^k = (1 + \exp(-\sum w_l x^k))^{-1} \quad (1.3)$$

y  $w_l = (w_{l1}, w_{l2}, \dots \dots \dots, w_{ln})$  es el vector de pesos de la neurona oculta  $l$ , donde  $l=1, \dots \dots \dots L$ . La medida del error total es  $E$ :

$$E = \sum E_k \quad (1.4)$$

La regla de cambio de pesos con una nueva presentación de un par (entrada, salida) se realiza mediante el método del gradiente descendente para la minimización del error cuadrático medio  $E$  a través del siguiente proceso iterativo.

Al vector de peso  $W$  se le asigna el valor

$$W := W - \Delta W$$

Donde  $\Delta W$  es la variación del peso, definido por la expresión

$$\Delta W = \eta \frac{\partial E_K(W, w)}{\partial W}$$

Y  $E_K$  se determina por la expresión (1.1) considerando las expresiones (1.2) y (1.3), y  $\eta > 0$  es la tasa de aprendizaje. Se obtienen los siguientes valores para  $W$  y  $w_l$

$$W := W - \eta \frac{\partial E_K(W, w)}{\partial W}$$

$$w_l := w_l - \eta \frac{\partial E_K(W, w)}{\partial W}$$

Realizando la adecuada derivación se obtiene

$$\frac{\partial E_K(W, w)}{\partial W} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial W} \left[ y^K - \frac{1}{1 + \exp(-W^T h^K)} \right]^2 = -(y^K - O^K) O^K (1 - O^K) h^K.$$

El vector de pesos en la salida  $W = (W_1, \dots, \dots, W_L)$  y los vectores de pesos  $w_l$  asociados a las neuronas ocultas ajustan su valor en cada ciclo de acuerdo a las siguientes expresiones.

$$W := W + \eta (y^K - O^K) O^K (1 - O^K) h^K = W + \eta \delta_K h^K$$

$$W_l := W_l + \eta \delta_K h_l^K$$

donde  $\delta_K = (y^K - O^K) O^K (1 - O^K)$

$$\frac{\partial E_K(W, w)}{\partial w_l} = -O^K (1 - O^K) W_l h_l^K (1 - h_l^K) x_j^K$$

$$w_l := w_l + \eta \delta_K W_l h_l^K (1 - h_l^K) x_j^K$$

Este proceso iterativo continúa hasta que se minimiza el error  $E$  en (1.4) hasta el valor deseado.

En el **aprendizaje no supervisado**, es decir, sin maestro, el conjunto de datos de entrenamiento consiste sólo en los patrones de entrada. En este tipo de aprendizaje se pueden distinguir dos grandes grupos de redes: redes de pesos fijos y redes de aprendizaje competitivo.

En las primeras, los pesos son preestablecidos y precalculados, por ello no resultan adecuadas en aplicaciones en ambientes cambiantes. Ejemplos de estas redes son las

Memorias Asociativas o las redes de Hopfield entre otras. Son sistemas dinámicos, que evolucionan en el tiempo, modificando los valores de salida de los PE (estado del PE), y cuya respuesta se obtiene al estabilizarse la red, es decir, cuando los estados de los PE ya no cambian.

Por otro lado, las redes de aprendizaje competitivo se caracterizan por que solo se adaptan los pesos de la neurona ganadora (la que más se activa en competencia con las demás), para hacerse más ganadora en una nueva pasada del mismo ejemplo. Realmente se usa una regla equivalente, que declara ganadora a la neurona cuyo vector de pesos se parece más al ejemplo de entrada actual. Como se dijo antes, el entrenamiento se basa solo en la información de entrada, buscando similitudes entre el ejemplo de entrada y los vectores de pesos de las distintas neuronas de salida. Ejemplo de este tipo de red es la red de autoorganización de Kohonen.

El aprendizaje de una red puede también clasificarse “fuera de línea o en línea, según el proceso requiera un entrenamiento completo con todos los ejemplos, antes de ser usadas, o que se pueda añadir nueva información, en su aplicación, sin necesitar un reentrenamiento de la información almacenada” [84]

### **1. 1. 3) Algunos Modelos de Redes Neuronales.**

En este apartado se presentan breves resúmenes y referencias de algunos de los tipos y arquitecturas de redes neuronales más frecuentemente aplicados en el campo de la física y de la ingeniería nuclear, y que algunos de ellos se desarrollarán, en apartados posteriores, más detalladamente en referencias a aplicaciones específicas. Existe diversa literatura disponible donde se desarrollan con diverso grado de profundidad y detalle estos modelos [34, 51, 84, 94, 112], como algunas aplicaciones relevantes.

#### **a) Redes neuronales de propagación hacia delante (feedforward)**

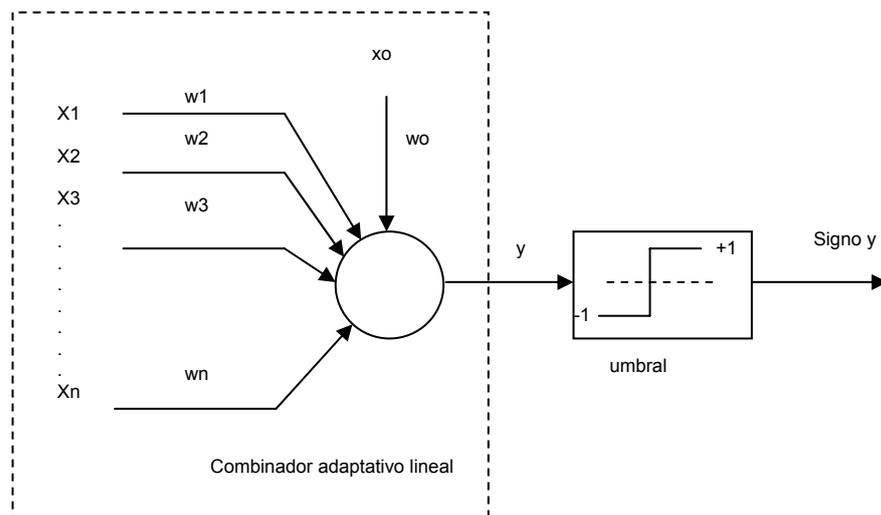
- Perceptron

Es el tipo de red más simple (Roseblatt 1962). Tiene dos capas : entrada y salida, y no posee capas ocultas (ver Figura 1). Tiene propagación hacia delante y

como función de activación utiliza una función de umbral. Su entrenamiento es supervisado en base a un conjunto de ejemplos binarios con valores de entrada y salida conocidas lo que permite ajustar los pesos de conexión entre la capa de entrada y la capa de salida para obtener el valor y la respuesta esperada. La información fluye de la capa de entrada a la de salida.

- Adaline y Madaline .

Este modelo de red fue desarrollada por Bernie Widrow en 1960 y son muy similares a un perceptron lineal con la particularidad de que se agrega un factor de tendencia y que se añade una condición bipolar, tal que si la salida del combinador adaptativo lineal es positiva la salida del Adaline es +1 y si es negativa la salida será -1, y esto genera una condición de salida binaria del Adaline. El ADALINE tiene una neurona de salida y la MADALINE es una combinación de módulos ADALINES básicos lo que permite superar algunas de sus limitaciones. Su entrenamiento es supervisado y para el ajuste de pesos se considera minimizar el error cuadrático medio con la regla delta.



**Figura 4: Arquitectura de una RN ADALINE**

- Perceptron multicapa

Es una red de propagación hacia adelante con capa de entrada, capa de salida y una o más capas ocultas (ver Figura 2). Esta red es por lo general es

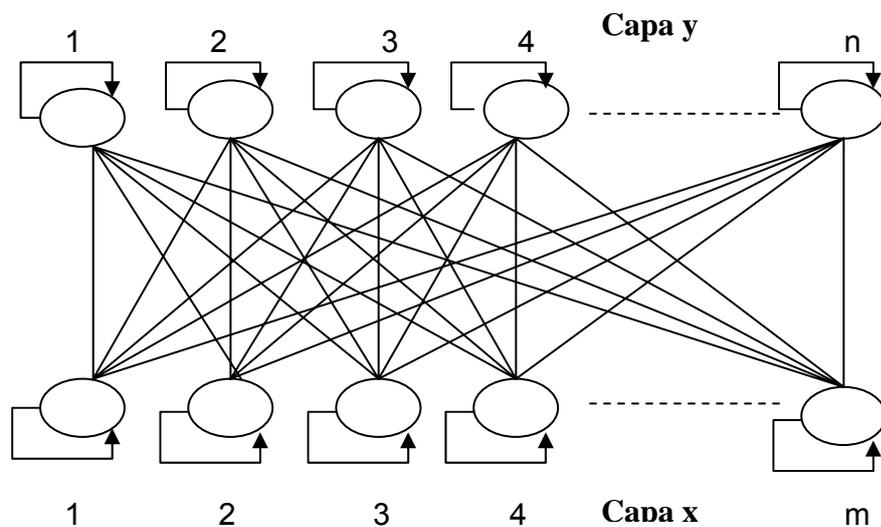
entrenada con el algoritmo de retropropagación ( backpropagation, que se explica en el apartado anterior ) lo que precisa de funciones de activación continuas y diferenciables. Este método de aprendizaje utiliza la regla delta generalizada para adaptar los pesos. Existen distintas versiones de este algoritmo y por ende hay diferentes tipos de arquitectura y conexiones que pueden ser implementadas. Más adelante se analizarán algunas de estas versiones.

**b) Redes neuronales recurrentes. Red de Hopfield (RH)**

Estas redes tienen como característica común la recurrencia, ya que al existir conexiones de retro-alimentación entre las neuronas, la red opera como un sistema dinámico. Los modelos más referidos son las memorias asociativas y las RHs.

- Memoria asociativa bidireccional (BAM). Red de Hopfield

Esta red consta de dos capas de PE completamente interconectados entre capas, pero no hay conexión intracapa, salvo posibles autoconexiones. Las conexiones entre las capas son bidireccionales, con pesos iguales en ambos sentidos, y la información fluye a través de estas conexiones. Los pesos en este tipo de red se obtienen a partir del conjunto de ejemplos que se quieren almacenar. Estas arquitecturas recurrentes utilizan funciones de activación de umbral (cada unidad puede tomar los estados 0 y 1, dependiendo de si la estimulación total recibida supera determinado umbral). La BAM es una extensión a dos capas de la Red de Hopfield, unicapa y previa en el tiempo.



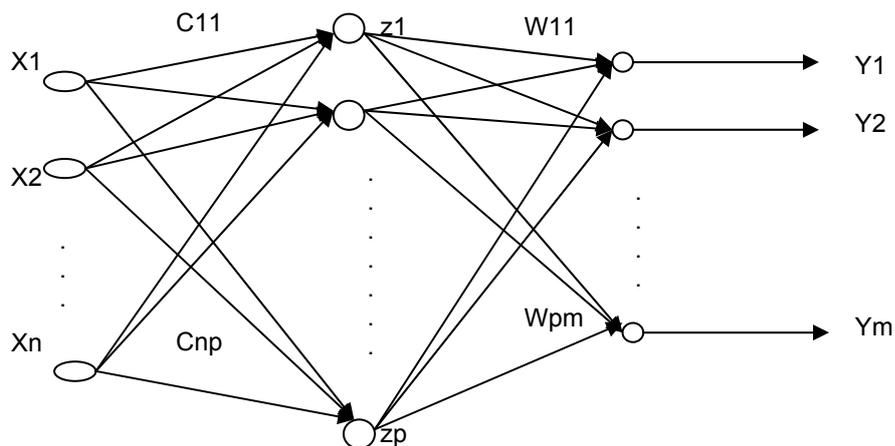
**Figura 5. Arquitectura de una Memoria Asociativa Bidireccional**

La Red de Hopfield ha sido muy aplicada en problemas de optimización combinatoria, donde los pesos se fijan para que las restricciones del problema se preserven.

- Máquina de Boltzmann

Este tipo de redes recurrentes son de adaptación probabilística, con dinámica según el enfriamiento estocástico (Simulated Annealing). Aprenden a reconstruir los patrones de entrada que memorizan durante el entrenamiento, que es supervisado. Su arquitectura es sin capas con interconexión total y usa funciones de activación de umbral donde cada unidad puede tomar valores 0 o 1, dependiendo de que el estímulo recibido supere determinado umbral. En general se usan en problemas dinámicos, no estables.

**c) Redes neuronales de Función Base Radial (RBF)**



**Figura 6: Arquitectura de una RN Función Radial Base (RBF)**

La estructura de la RBF es de propagación hacia delante con tres capas (su arquitectura recuerda a la de un perceptrón multicapa): entrada, oculta y salida. No hay entrenamiento en la capa oculta, donde de hecho no existen pesos, y hay entrenamiento supervisado, con la regla delta, en la capa de salida. Otra diferencia, es que la capa oculta tiene una función de transferencia de tipo gaussiano, con dos parámetros ( $u, \sigma$ ) específicos de cada neurona, que se calculan directamente de los ejemplos de entrenamiento. Cada neurona oculta es receptiva solo para ejemplos con

una distancia al parámetro  $u$  menor que  $\sigma$ , por lo que actúa en realidad como un filtro sobre el espacio de entradas. Las salidas de la capa oculta se procesan en la capa de salida, con activación lineal, de forma similar al Madaline, pero sin neuronas de tendencia.

Un aspecto clave en las RBF es el número de neuronas en la capa oculta. Suele tomarse una por ejemplo de entrenamiento, o una por clase si se produce una agrupación de los ejemplos.

A veces se considera “entrenamiento” la determinación de los parámetros ( $u$ ,  $\sigma$ ) con algoritmos como las K-medias, para determinar el número de clases (número de neuronas ocultas), Cada vector  $u$  asociado a una neurona oculta se puede tomar como los pesos de esa neurona y su cálculo, el proceso de “entrenamiento”.

La aplicación de estas redes se orienta más a la aproximación de funciones y a la clasificación. Una característica importante es que su entrenamiento es rápido, en comparación con el de retropropagación, y supera algunas dificultades de este, como el problema de los mínimos locales, pero requiere muchas neuronas ocultas, a veces tantas como ejemplos de entrenamiento, y en modo uso es muy lenta.

#### d) Redes de Kohonen. Redes neuronales autoorganizadas (SOM) y LVQ

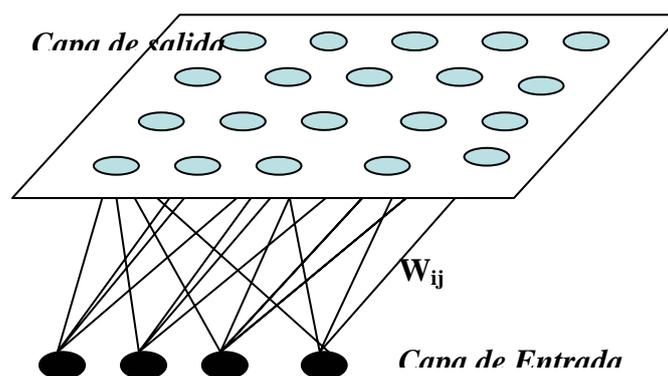


Figura 7: RN Auto organizada SOM

- Mapas autoorganizados (SOM).

Estas son redes que se organizan en dos capas: la primera está constituida por las neuronas de entrada y la segunda consiste en un conjunto de neuronas que

se suelen distribuir en un plano (a veces se definen con dos índices  $(i, j)$ , y los pesos sinápticos con tres índices  $(i, j, k)$  donde los dos primeros índices indican la posición de la neurona en la capa de salida y el tercer índice la neurona de la capa de entrada). El entrenamiento es no supervisado de tipo competitivo, es decir, la red encontrará regularidades, o clases, sólo con los datos de entrada y modificará sus pesos para ser capaz de reconocer estas regularidades o clases.

La neurona que más se excita para una determinada entrada se considera ganadora de la competición, y adapta sus pesos para hacerse más ganadora aún. Las demás neuronas no modifican sus pesos.

Esto produce que neuronas cercanas en la capa de salida se exciten para ejemplos “cercanos”, lo que produce el efecto de la autoorganización.

En un esquema general, la capa de salida está totalmente conectada, con auto conexiones excitatorias y el resto son conexiones de inhibición lateral, que producen el efecto competitivo. En programación, el efecto de competición se implementa directamente de forma sencilla, por lo que en la práctica no se consideran conexiones en la capa de salida.

Las unidades de entrada reciben datos continuos normalizados, se normalizan así mismo los pesos de las conexiones con la capa de salida. Tras el aprendizaje de la red, cada patrón de entrada activará una única unidad de salida. En algunas versiones, el ajuste de los pesos se hace, además de para la neurona ganadora, para neuronas cercanas en un entorno de vecindad, lo que facilita la formación de mapas autoorganizados.

El objetivo de este tipo de redes es clasificar los patrones de entrada en grupos de características similares, incluso sin conocer el número concreto de clases (no supervisado), de manera que cada grupo activará siempre la(s) misma(s) salida(s). Cada grupo de entradas queda representado en los pesos de las conexiones de la unidad de salida triunfante. La unidad de salida ganadora para cada grupo de entradas no se conoce a priori, es necesario entrenar la red.

Una de las cualidades de este tipo de redes es la incorporación a la regla de aprendizaje de cierto grado de sensibilidad con respecto al vecindario o historia. Esto hace que el número de neuronas que no aprenden desaparezca, aumentando así su capacidad de extraer o mapear características topológicas de los datos.

La red mapea el espacio de entrada hacia un espacio de salida con cierto orden topológico. Kohonen propone un método para que este orden se conserve al entrenar la red, la clave está en reducir el tamaño del vecindario de la unidad ganadora en cada iteración.

- LVQ ( learning vector quantization)

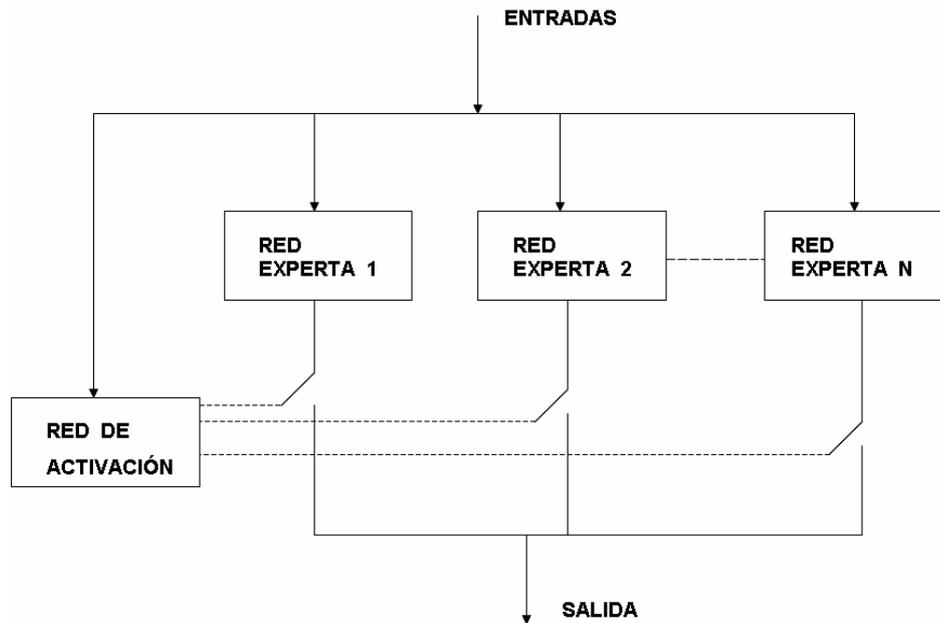
LVQ es un algoritmo de aprendizaje supervisado que construye en forma adaptiva el vector de cuantización a partir de un conjunto de entrenamiento [72]. Se ingresa un conjunto etiquetado de vectores representativos, denominados centros, y para cada nuevo vector se busca la referencia más próxima vía un ajuste de posición de los centros. La topología de esta red es de dos capas, una de entrada que debe tener la misma cantidad de componentes que las muestras de entrada, y una de salida que debe tener un número de unidades igual al número de centros, y en su entrenamiento no hay retro-alimentación y el ajuste de los pesos es programada. Este algoritmo de aprendizaje fue establecido por Kohonen (1984) quien propuso posteriormente nuevas versiones: LVQ – 2 (1989) y LVQ – 3 (1995).

#### e) **Otros modelos de redes neuronales. Modelos híbridos**

Debido a la complejidad de los problemas en la ingeniería y ciencia nuclear, las redes neuronales que se aplican, en muchos casos, se construyen en forma muy particular, ligada al tema a investigar, lo que deriva en el surgimiento de nuevos tipos de redes y soluciones que, si bien, se inspiran en las clases antes mencionadas, no se pueden asociar directamente a ellas. Algunos de estos tipos, que son analizados en el contexto de las aplicaciones concretas que se han estudiado, son:

- **Red neuronal modular**

La utilización de una **red neuronal modular (Modular neural network – MNN)** se presenta en [21] para alcanzar una alta tasa de clasificación en el análisis de experimentos en física de altas energías. Esta red permite dividir el problema fundamental, la identificación de eventos, en dos acciones paralelas: la identificación de eventos particulares, procesado por los módulos (redes expertas en determinados eventos). Así, actúan en paralelo varias redes que tratan los eventos y acciones individualmente y luego estas redes compiten entre sí, conectándose con una red de puerta (gating network) que coordina el funcionamiento de los módulos.



**Figura 8: Estructura de Red Neuronal Modular**

El entrenamiento de las redes paralelas expertas es supervisado y el de la red puerta es no supervisado, es decir, el entrenamiento de la RN Modular es híbrido. Las entradas a la red son los eventos a clasificar y las salidas de cada una de las redes expertas es 1 si clasifica señal y cero si clasifica ruido.

En la clasificación de eventos electrón / fotón, referida en el citado artículo, la arquitectura de la red comprende 5 redes expertas del tipo Perceptrones lineales entrenadas con la regla de aprendizaje del Perceptron y que clasifican un vector de entrada con 16 componentes o eventos a clasificar y la salida de la red es una neurona que entrega una salida binaria, 1 ó 0, y la red puerta es una red con entrenamiento no supervisado que clasifica, activa o desactiva, las respuestas de las redes expertas. Esta red con estructura no especificada, puede ser una red auto organizada.

Esta RN Modular se implementó para analizar situaciones concurrentes, en línea, como la identificación de electrones – fotones y del efecto Cherenkov.

#### - **Red neuronal einsteniana**

Un modelo de RN que tiene como fundamento la interpretación de Einstein de los espectros de fotones se desarrolla en [105], de ahí el nombre de **RN Einsteiniana**. La idea de Einstein es que los espectros de fotones son una superposición de diversas señales

electromagnéticas provenientes de distintos orígenes y por el carácter aleatorio de las frecuencias de los fotones, el espectro se puede representar con una distribución de probabilidad de los fotones. La función de distribución de probabilidad es la que se aplica a las partículas bosones (partículas que se rigen por la estadística de Bose–Einstein). El principio físico que se utiliza en esta teoría de análisis espectral es el de la **máxima entropía**.

La RN Einsteiniana está compuesta por la interacción de dos subsistemas:

- **Subsistema de modelación:** que se fundamenta en tres ecuaciones estadísticas para la estimación de parámetros como:  $N_m$  – número de fotones de origen (fuente)  $m$ ;  $w_m$  – frecuencia angular de dichos fotones; y  $\sigma_m$  – desviación estándar asociada a la función de distribución de determinado espectro original.
- **Subsistema de asociación:** se fundamenta en una cuarta ecuación estadística que permite la asociación de los valores originales de los espectros –  $S_m(w)$ , con señales de orígenes, mediante la determinación de los pesos  $P_{mw}$  del subsistema de modelación, donde  $P_{mw}$  se interpreta como la probabilidad de que un fotón de frecuencia  $w$  provenga de la fuente  $m$ .

Las **entradas al subsistema de modelación** son los valores espectrales  $S(w_{\min}), \dots, S(w_{\max})$ , que se obtienen del espectro medido y que responde a la siguiente relación:  $S(w) = N E$

donde  $N$  es el número de fotones con energía  $E = hw$ , y  $h$  es la constante de Planck. Las neuronas de salidas del subsistema de modelación son los parámetros  $N_m$ ,  $w_m$  y  $\sigma_m$  que en el proceso de entrenamiento son utilizados por el subsistema de asociación.

Las **entradas al subsistema de asociación** son las frecuencias de los fotones en cada valor espectral:  $w_{\min}, \dots, w_{\max}$ , y las salidas la constituyen los pesos del subsistema de modelación.

En síntesis, las entradas a este sistema de red la constituyen las frecuencias de los fotones y los datos espectrales y las salidas son los parámetros, antes mencionados, usados en las respectivas ecuaciones estadísticas de simulación espectral. Esta red se considera similar a una red de propagación hacia delante con varias capas, pero su entrenamiento es no supervisado.

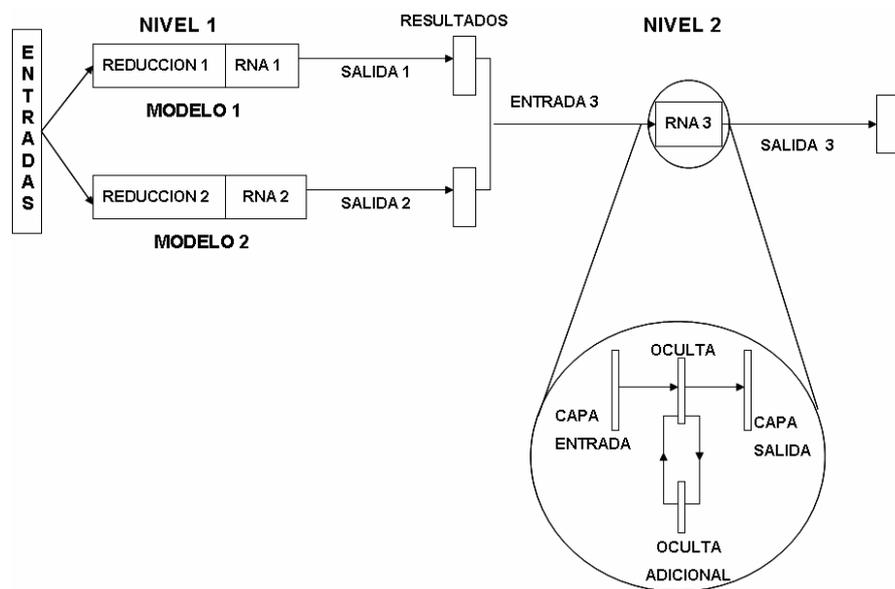
Este sistema de RNs que se analiza teóricamente en [105], tiene su implementación concreta para analizar de señales proveniente de la ionósfera.

Es necesario resaltar que este tipo de RN para el análisis espectral considera elementos de física estadística en la formación de espectros y de física cuántica en el origen de estos. Por ello se puede considerar como una red de topología inspirada con cuestiones físicas del fenómeno que se investiga.

- **Modelo jerarquizado no lineal de redes neuronales totalmente conectadas.**

Con este objeto en [40] se describe la implementación de un modelo jerarquizado que utiliza redes neuronales con arquitectura diferente en cada nivel, y que en [123] se materializa en la proposición de combinar dos redes neuronales para el análisis espectral donde las salidas de la primera RN constituyen las entradas de la segunda red.

La idea central del **modelo jerarquizado no lineal de redes neuronales**, la constituye la posibilidad de intervenir cada nivel separadamente, con el fin de disminuir los parámetros a definir, cuya arquitectura se ilustra la Figura 9.



**Figura 9. Arquitectura no lineal jerarquizada de RNs de varios niveles para el análisis espectral.**

En esta aplicación se utilizan en el nivel 1 dos RNs de propagación hacia delante que pueden ser total o parcialmente conectadas entrenadas con el algoritmo de retro propagación. Y en el nivel 2 se utiliza una RN recurrente, con interacciones múltiples que permite representar mejor la asociación entre entradas y salidas, y donde las entradas la constituyen las salidas del primer nivel.

En esta línea de reducción de parámetros, se analizan, en forma teórica, distintas estrategias de preprocesamiento de los datos de entrada, que originalmente es el espectro resultante de la irradiación de las muestras. Estas redes son de tres capas: entrada, oculta y salida. El número de neuronas en la capa oculta se ajusta a un criterio de optimización que considera la reducción de los datos de entrada.

#### **- Modelos Híbridos**

Existen diversas aplicaciones donde se construyen modelos híbridos que combinan redes neuronales con otros paradigmas de la inteligencia artificial, con el objeto de optimizar el resultado de las aplicaciones. Los modelos híbridos encontrados en las aplicaciones analizadas son:

- Redes neuronales y algoritmos genéticos
- Redes neuronales y sistemas difusos
- Redes neuronales y sistemas expertos
- Redes neuronales y árboles de decisión

En algunos casos se combinan redes neuronales con más de un paradigma de IA

### **1. 2) ANÁLISIS ESPECTRAL EXPERIMENTAL CON TÉCNICA PIXE.**

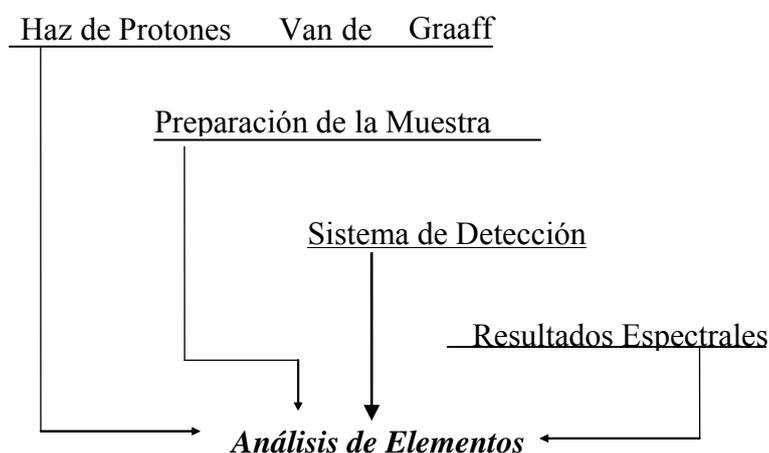
En las últimas décadas se viene desarrollando con intensidad creciente la metodología PIXE (radiaciones X inducidas por protones) en el análisis de materiales y sustancias. Sus fundamentos se encuentran ampliamente desarrollado en [63]. Una de las características esenciales y atractiva en diversas aplicaciones es el carácter no destructivo

respecto de la muestra a analizar. Sus aplicaciones son variadas y comprenden ámbitos tan amplios como medioambiente, salud, minería ó arqueología, entre otros.

El Centro de Física Experimental de la Universidad de Chile posee gran experiencia en el uso de la metodología PIXE para el análisis de sustancias inorgánicas y orgánicas, teniendo como elemento central el acelerador electrostático del tipo Van de Graaff.

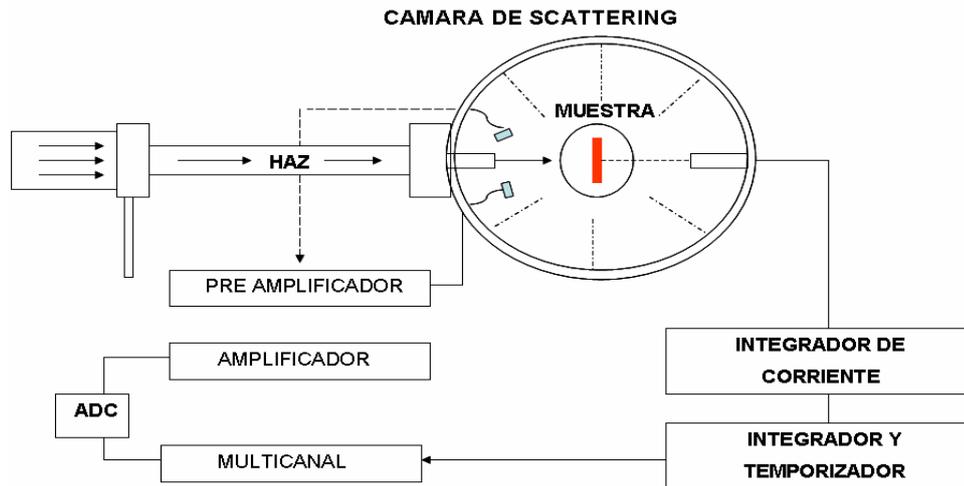
Las etapas experimentales en el análisis de sustancias mediante la metodología PIXE que se ilustran en la Figura 10, son las siguientes:

- Obtención de la sustancia (orgánica o no) que se desea analizar y preparación (técnica de precisión) de muestras para ser irradiadas por un haz iónico, como por ejemplo protones.
- Irradiación de muestras con haz de protones de (3 – 4) MeV de energía, producido por un acelerador de partículas, tipo Van de Graaff.
- Sistema de detección de emisiones X, que tiene como elemento principal un detector del tipo Na(I) o un Si(Li).
- Sistema computacional de procesamiento de la información espectral de emisiones X provenientes del sistema de detección.



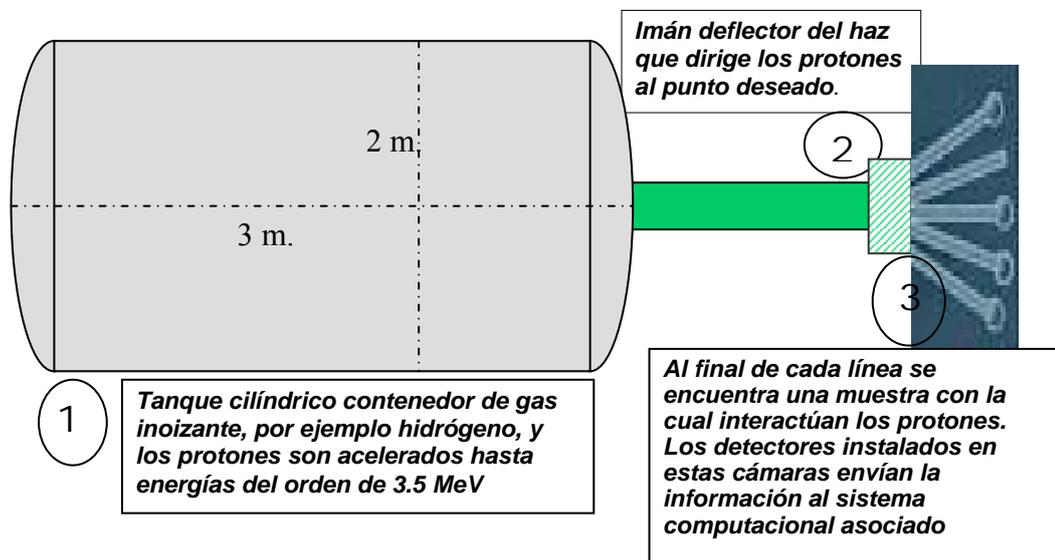
**Figura 10. Esquema de etapas experimentales en el análisis elemental con la metodología PIXE**

En la Figura 11 se presenta un esquema experimental requerido para el desarrollo de la técnica PIXE en la investigación de una muestra determinada.



**Figura 11 : Esquema del diseño experimental utilizado en el CEFEX para el análisis de muestras con la metodología PIXE.**

Un elemento central en los experimentos PIXE es la fuente generadora de haces iónicos mono energéticos, con las energías antes mencionadas. Por lo general se utilizan aceleradores electrostáticos, como los del tipo Van de Graaff, cuyos componentes esenciales se ilustran en las Figuras 12 y 13:

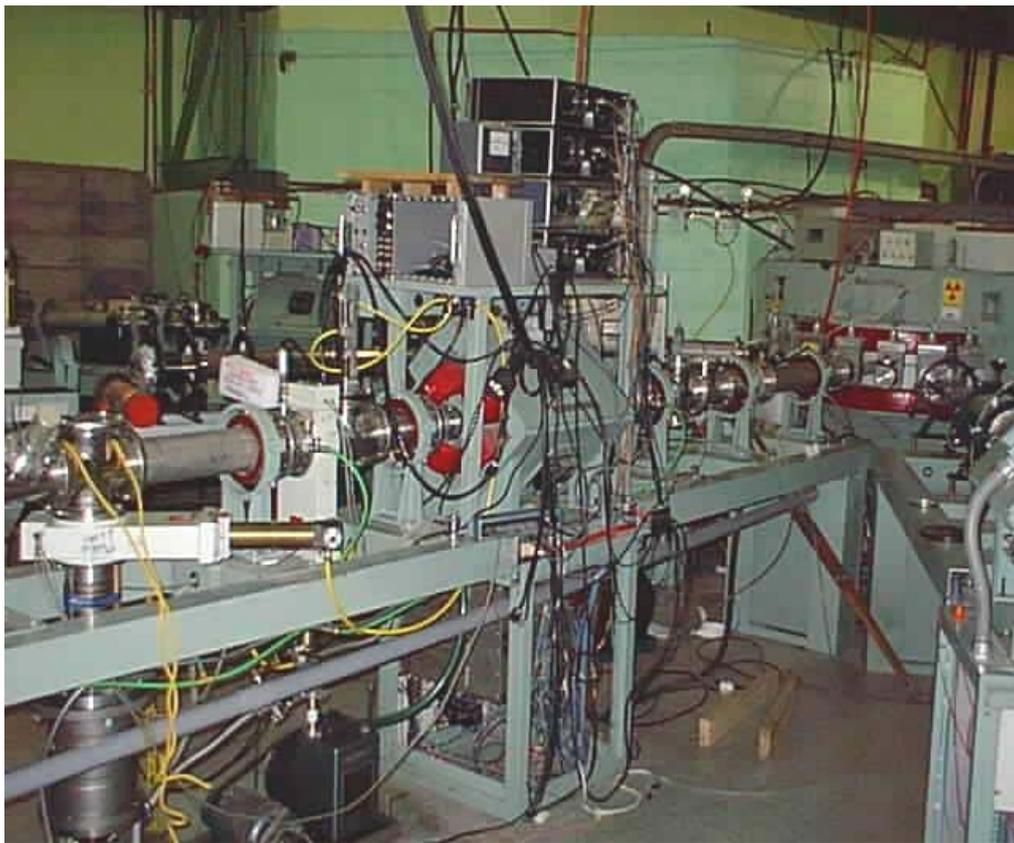


**Figura 12: Componentes básicos de un acelerador del tipo Van de Graaff.**

- Tanque contenedor de gas ionizante del cual se obtienen las partículas que se aceleran para dar origen al haz con la energía deseada.



(a)



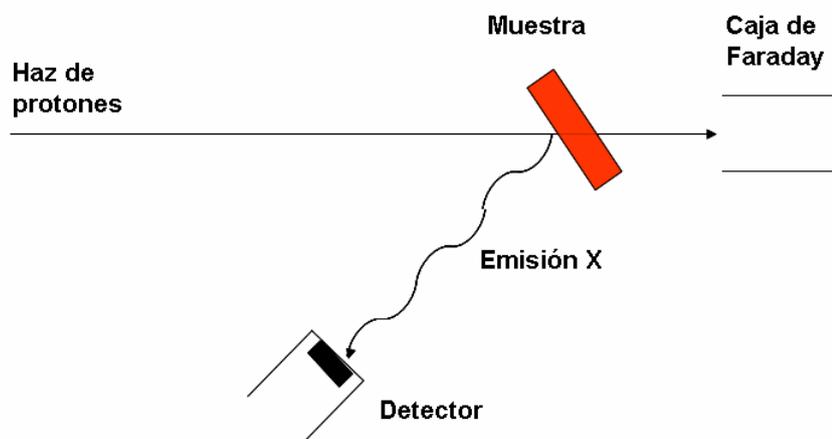
(b)

**Figura 13: Componentes del acelerador Van de Graaff usado en el CEFEX en los experimento PIXE tratados en esta memoria: (a) Tanque contenedor de gas ionizante, (b) tubo de aceleración e imán deflector.**

- Imán deflector del haz que lo dirige a la salida deseada para que interactúe con la muestra a analizar.
- Dispositivo donde se encuentra la muestra que se irradia y que contiene el sistema de detección respectivo.

Cada uno de estos momentos experimentales requiere de una preparación y puesta a punto de alta precisión, que deriva en una automatización del proceso que se controla externamente durante el desarrollo del experimento.

El proceso de interacción de los protones, u otro tipo de iones acelerados, con la muestra respectiva, consiste en que el haz de iones (partículas cargadas) de suficiente energía atraviesa la muestra y arranca electrones de las capas más ligadas de los átomos de los diferentes elementos presentes en la muestra, generando vacancias (espacios vacíos en dichas capas). Las vacancias creadas en la estructura electrónica de estos elementos son rápidamente llenadas por electrones provenientes de capas superiores. En este proceso de transición es cuando se produce la emisión X característica del átomo excitado (ver figura 14). Experimentalmente se detectan las radiaciones X con el detector respectivo y en la caja de Faraday se recopilan los protones que atraviesan la muestra.



**Figura 14: Diagrama del proceso de interacción del haz iónico con la muestra y disposición geométrica de los elementos.**

La transición mencionada de un electrón de una capa superior, con energía  $E_n$ , a una inferior, con energía  $E_m$ , es acompañada por una emisión de X de energía  $E_x = E_n - E_m$ . (Figura 15). Como las capas o niveles electrónicos son características para cada

átomo, se deduce que la emisión X de cada elemento es propia de él y por tanto constituye un fenómeno identificatorio, característico de cada elemento y este hecho es registrado mediante detectores semiconductores de rayos X de alta resolución energética, lo que da origen a los espectros obtenidos. En la Figura 16 se ilustran las transiciones posibles cuando se producen vacancias en los niveles electrónicos más ligados (llamados K, L, M). En los experimentos PIXE las transiciones más probables y determinantes del espectro

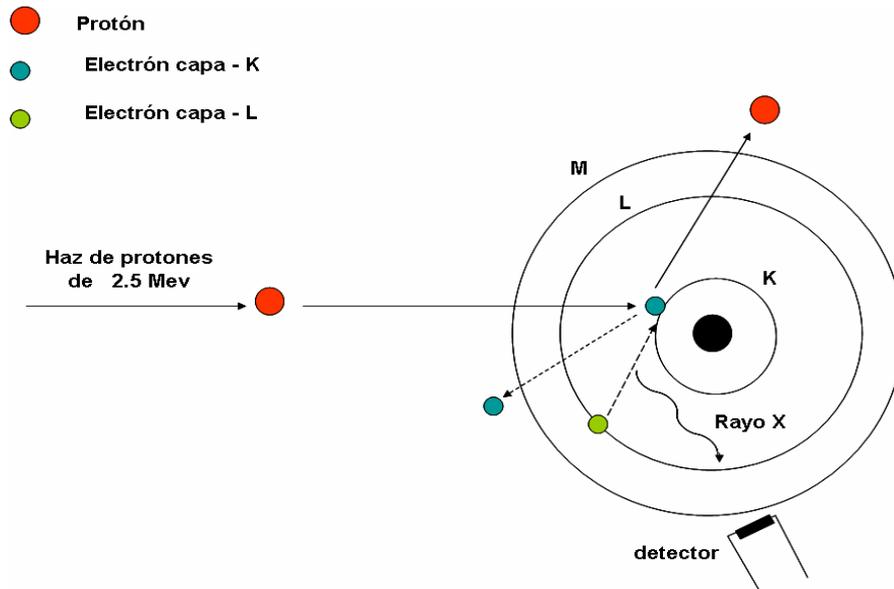


Figura 15: Procesos que ocurren en la interacción de los protones con energía cercana a los 3 MeV con los átomos de la muestra.

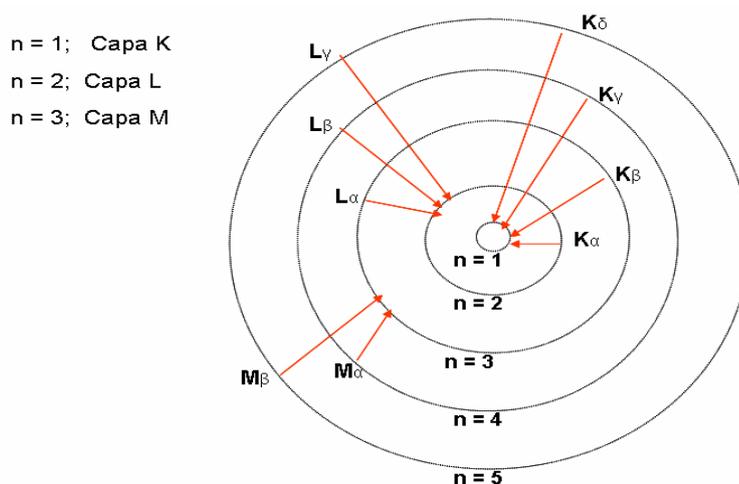
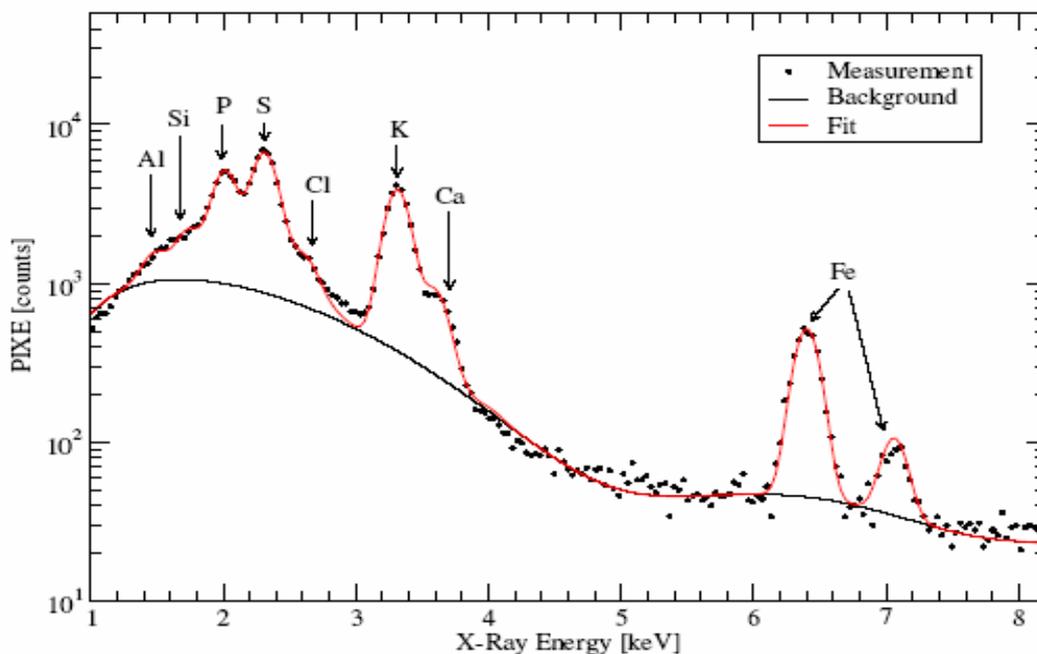


Figura 16: Posibles transiciones de electrones en un átomo al generarse vacancias en los niveles más ligados: K, L y M. En experimentos PIXE las transiciones más probables son las  $K_{\alpha}$  y  $K_{\beta}$ .

resultante son las  $K_{\alpha}$  y  $K_{\beta}$  en cada elemento. Este hecho se debe básicamente a la energía de los protones incidentes que extraen electrones de los niveles más ligados y estas vacancias son ocupadas principalmente por electrones de niveles más cercanos.

Cada elemento que compone la muestra es reconocido por las energías de los rayos X que emite y la intensidad en la línea espectral es una medida importante en la determinación del grado de presencia de determinado elemento en la muestra investigada. Una de las ventajas importantes de este procedimiento ultrasensible es el de poder trabajar con muestras muy pequeñas: son suficientes unos pocos microgramos de material. Además, la composición elemental de la muestra puede determinarse después de un solo proceso de irradiación, el que dura algunos minutos ( $\approx 10$  min.).

En el presente trabajo se analizan muestras orgánicas de tejidos biológicos de peces (cyprinos carpio) y muestras de aerosoles captados en la Región Metropolitana de Chile. En ambos casos se analizan los grados de concentración de determinados elementos químicos de interés en estudios de tipo ambiental y ecológico. El proceso experimental, las cuatro etapas indicadas, se realizan en el CEFEX, y tienen por objeto la realización de un análisis elemental no destructivo de las muestras, permitiendo determinar con una considerable precisión la concentración de los elementos químicos presentes.



**Figura 17. Espectro PIXE de una muestra de carácter biológico correspondiente a hígado de pez carpa utilizando haz de protones de 2.0 MeV. El ajuste se calcula con el programa AXIL.**

Un espectro PIXE típico recopilado con un detector Si(Li) es el que se muestra en la Figura 17, donde se pueden observar los picos característicos de emisiones X de los elementos identificados, con la radiación de fondo dominada por procesos de radiación de frenado (bremsstrahlung) que corresponden a interacciones de electrones secundarios con elementos de bajo número atómico ( $Z$ ) presente en la muestra. En el análisis de estos espectros se utilizó el programa computacional AXIL de la IAEA (Agencia Internacional de Energía Atómica), que permite calcular el área neta bajo los picos identificados mediante una aproximación gaussiana, restando el ruido correspondiente.

Uno de los objetivos principales en los experimentos PIXE es identificar la presencia de elementos y determinar las concentraciones de los elementos identificados en la muestra expuesta a la radiación iónica.

A continuación se describe brevemente el procedimiento matemático tradicional utilizado en la determinación experimental de las concentraciones elementales  $C_Z$ , donde  $Z$  es el número atómico del elemento respectivo.

La concentración se obtiene usando la siguiente ecuación semi empírica

$$C_Z = \frac{I_Z(E_{K_i})}{M \cdot Q \cdot J(E_{K_i})} \quad (1.5)$$

donde:  $I_Z$  – es la intensidad de la línea K de la emisión X del elemento Z.

$M$  ( $g/cm^2$ ) – es la densidad superficial de masa del material analizado en la muestra.

$Q(C)$  – Carga acumulada en la caja de Faraday de los protones que atraviesan la muestra.

$J(E_{K_i})$  ( $g^{-1}cm^2C^{-1}$ ) – es una medida de la eficiencia del detector, que se determina con la siguiente ecuación:

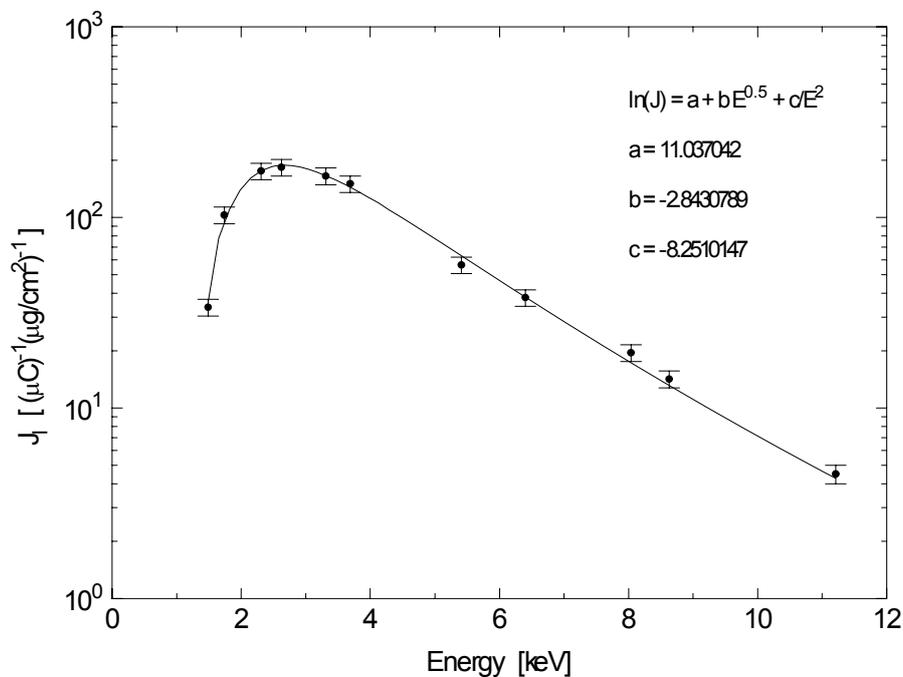
$$J(E) = \frac{N_0}{e \cdot A} \cdot \sigma_K(Z) \cdot \omega_K(Z) \cdot g_{K_i}(Z) \cdot \varepsilon(E) \quad (1.6)$$

donde  $\sigma_K(cm^2)$ ,  $\omega_K$  y  $g_{K_i}$  ( $i = \alpha, \beta$ ) son la sección eficaz de ionización, la porción de fluorescencia y la fracción de línea  $K_\alpha$  o  $K_\beta$ , respectivamente.  $\varepsilon(E)$  – es la función de eficiencia absoluta del detector Si(Li) dependiente de la energía  $E$ .  $N_0$  – es el número de Abogado.  $e$  – la carga eléctrica elemental:  $1.6 \times 10^{-19}$  (C).  $A$  – número de masa del elemento Z.

La función  $J(E)$  se obtiene del experimento como una función de ajuste de interpolación de  $n$  cantidades  $J_l$  ( $l = 1, 2, \dots, n$ ). La cantidad  $J_l$  se determina con la ecuación:

$$J_l = J(E_{K_i}^l) \frac{I_{st}^l(E_{K_i})}{Q^l \cdot m_{st}^l} \quad (1.7)$$

donde  $I_{st}^l$ ,  $Q^l$  y  $m_{st}^l$  son la intensidad del haz, carga acumulada en la muestra y masa de la muestra utilizada en experimentos PIXE sobre  $n$  – muestras ( $l = 1, 2, \dots, n$ ). Las  $n$  muestras son cargas delgadas de composiciones conocidas y certificadas. En los experimentos analizados en el presente trabajo se usaron muestras estándares de Al, SiO, CuS, KCl, CaF<sub>2</sub>, Cr, Fe y ZnTe para obtener las cantidades  $J_l$  en la región de energía de interés (2.0 – 8.0)keV. La función de ajuste para  $J_l(E)$  se ilustra en la Figura 18.



**Figura 18: Eficiencia absoluta del detector por unidad de carga y por unidad de masa. La línea sólida es el ajuste**

El cálculo matemático de las concentraciones de cada elemento presente en determinada muestra demanda un tiempo computacional y trabajo científico considerable, que en sí depende del grado de desarrollo computacional del respectivo laboratorio. En general, independiente del último factor mencionado que permite reducir en mayor o menor grado los costes de cálculo, esta metodología no está dispuesta para el análisis

elemental automático y en línea (en tiempo real) de determinada muestra. Eso sí, es una técnica de cálculo semi empírica que garantiza una buena precisión, con errores relativos bajos (en torno al 8%).

Como se dijo al inicio del presente apartado, el CEFEX cuenta con una experiencia de más de 25 años en el desarrollo del uso de la técnica PIXE en el análisis de materiales de distinta naturaleza y procedencia, donde en los últimos 10 años se trabaja con el acelerador Van de Graaff que permite un mejor monitoreo de intensidad y energía del haz iónico incidente. Previamente se trabajó con un acelerador del tipo ciclotrón.

A continuación se mencionan algunos trabajos realizados y reportados por los investigadores del CEFEX en esta área:

- Análisis de piezas arqueológicas pre colombinas de Chile [88, 89, 90].
- Determinación de principales componentes de aerosoles emitidos por el volcán Lonquimay de Chile [87].
- Aplicaciones al análisis de las secciones eficaces de decaimiento de un radionuclido por captura electrónica [91].

## **CAPÍTULO II.**

### **REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE DE LAS APLICACIONES DE RNAS EN LA INGENIARÍA Y CIENCIA NUCLEAR.**



La aplicación de nuevas tecnologías de la información que se enmarcan en el ámbito de la inteligencia artificial (IA) y la neurocomputación, en la ingeniería y ciencia nuclear, se desarrollan con intensidad creciente desde finales de la década de los ochenta en adelante. En [29, 32] hemos presentado un estudio relativo a este tipo de aplicaciones comprendidas entre los años 1989 y 2003 y en [92] se presenta un análisis de las principales aplicaciones de IA en el ámbito de la física nuclear y partículas elementales. Los paradigmas más referidos en aplicaciones de IA en investigaciones fundamentales y aplicadas en la ciencia nuclear y física de altas energías son los sistemas expertos, algoritmos genéticos, sistemas difusos, redes neuronales y modelos híbridos de la IA.

En especial, las aplicaciones de redes neuronales representan un mayor impacto en este tipo de investigaciones científicas y técnicas, en un amplio espectro de problemas y soluciones. En particular, la aplicación de RNs en el análisis de espectros de rayos gamma y partículas alpha se desarrollan en forma creciente en los últimos diez años [64, 65, 66, 139]. Sin embargo, son reducidas las aplicaciones de RNs a espectros de emisiones de rayos X [48, 61, 141], incluidas las de origen PIXE y permanece aun casi inexplorada su aplicación a espectros de tipo BIXE (emisiones X inducidas por radiación beta), donde la física del problema está analizada con más profundidad en [24, 81].

Los fundamentos de las RNAs ha sido descrita en forma relativamente profunda en diversas publicaciones y se puede encontrar una oferta significativa de sistemas computacionales, tanto de libre acceso como de difusión comercial, que facilita y promueve la aplicación creciente de estas tecnologías de información en una amplia variedad de campos: científicos, técnicos, sociales y económicos.

En el Trabajo de Investigación del programa de doctorado se inició un estudio sobre el estado del arte de la aplicación de RNs en el ámbito de la Ingeniería y Ciencia Nuclear, y en el campo de la Física de Altas Energías, que se resume en [29,32], y que ahora se extiende en el tiempo. Se ha realizado un estudio sobre las metodologías clásicas y los modelos de RNs más usados en este campo de la ingeniería y la ciencia, siguiendo básicamente la misma taxonomía y clasificación de las aplicaciones estudiadas desarrollada antes, considerando los siguientes tópicos de la ingeniería nuclear y física de partículas de alta energía.

- Análisis Espectral e Identificación de Isótopos (AE).
- Operación y Control de Procesos en Reactores y Plantas Nucleares de Potencia (RN).
- Dosimetría y Espectrometría de Neutrones (DE).
- Física de Partículas de Altas Energías (FP).

Las aplicaciones de redes neuronales en cada uno de los tópicos anteriores de la ingeniería y ciencia nuclear, se clasificaron según los siguientes tipos y modelos de sistemas neuronales:

- Redes neuronales de propagación hacia delante (RPD).
- Redes neuronales recurrentes (RNR).
- Redes neuronales de función radial base (RFB)
- Redes neuronales autoorganizadas (SOM).
- Otros tipos de redes neuronales y Modelos Híbridos (OMH).

Se ha mantenido la Taxonomía considerada anteriormente, detallando con más profundidad el apartado correspondiente a las aplicaciones en AE.

## 2. 1) RESUMEN GLOBAL DE LA LITERATURA REVISADA.

Se ha realizado una búsqueda por Internet, y en las revistas especializadas disponibles (electrónicamente) en la Universidad de Granada.

Se han revisado un total de 114 publicaciones relacionadas con aplicaciones de RNs y Sistemas Híbridos (SHs) en los campos antes mencionados, de las cuales 83 corresponden al período 1988–2004 y 32 al 2005–2006 (hasta Mayo). Esto representa un antecedente importante sobre el interés creciente que despierta esta línea de investigación científica y que se refleja en el número de publicaciones ISI, durante el segundo período mencionado, en las áreas temáticas referidas (ver Tabla 1).

Tabla 1: Publicaciones ISI sobre aplicaciones de RNAs en la ingeniería nuclear y física de partículas en periodo 2005 – 2006.

Temas	Núm. Publicaciones ISI	Referencias concretas
Análisis espectral	10	[2, 3, 5, 54, 56, 95, 109, 111, 118,130]
Reactores nucleares	10	[9, 17, 47, 52, 53, 70, 75, 77 , 116, 124]
Dosimetría y Física de Neutrones	6	[10, 18, 68, 117,120, 129]
Física de Partículas	5	[4, 7, 98, 113, 140]
TOTAL	31	

De las 31 publicaciones 8 utilizan RPD, 2 son aplicaciones con RNR, 1 aplican SOM, 2 RBF y 12 utilizan otros modelos (OM) de RN y 6 Sistemas Híbridos (SH).

De las referencias analizadas, publicadas entre los años 1988 y 2004, y relacionadas con aplicaciones de RNAs en los tópicos mencionados, se pueden resaltar trabajos pioneros en este tipo de investigación [35, 61, 72, 73, 83], y otros trabajos [36, 37, 38, 59, 92, 125] que incluyen revisiones parciales de publicaciones de estas aplicaciones.

En la Tabla 2 se muestra el número de publicaciones anuales sobre el tema en el período que abarca los años 1988-2004. De éstas, 30 corresponden al período 1988 – 1998, y 53 de 1999 en adelante, lo que indica la tendencia al creciente uso de nuevas tecnologías de información, y en particular de las redes neuronales, en este campo de acción científica y tecnológica.

Tabla 2: Clasificación temporal de trabajos analizados, período 1988 – 2004.

<b>Año</b>	<b>AE</b>	<b>RN</b>	<b>DE</b>	<b>FP</b>	<b>TOTAL</b>
<b>88-91</b>	0	2	0	1	<b>3</b>
<b>92-94</b>	4	2	0	1	<b>7</b>
<b>95-96</b>	3	2	0	0	<b>5</b>
<b>97-98</b>	5	4	2	4	<b>15</b>
<b>99-00</b>	12	3	2	3	<b>20</b>
<b>01-02</b>	5	2	5	3	<b>15</b>
<b>03- 04</b>	3	9	1	5	<b>18</b>
<b>TOTAL</b>	<b>32</b>	<b>24</b>	<b>10</b>	<b>17</b>	<b>83</b>

En [92] se analizan algunas tendencias de aplicaciones de inteligencia artificial en física nuclear y de altas energías. En [29, 32] se muestra el interés creciente de la comunidad científica, en el ámbito de la ingeniería y ciencia nuclear, por el uso de nuevas tecnologías de la información, resaltando el rol de las redes neuronales en lo relativo a clasificación y selección de eventos, identificación de partículas, estimación y clasificación de parámetros en análisis de espectros, reconstrucción de energías y análisis de trazas en complejos sistemas de detección de partículas de altas energías. Se concluye que las nuevas tecnologías de información de inteligencia artificial operan significativamente mejor, en este tipo de análisis científico, que las metodologías tradicionales del Área.

En las Tablas 3 y 4 se presenta una clasificación de aplicaciones de RNs y SHs respectivamente, según el modelo de RN y SH usado en cada uno de los tópicos de la

ingeniería y ciencia nuclear considerados, hasta el año 1006 (Mayo). El tipo de RN más usado, en cada tópico analizado, es el de propagación hacia delante, entrenadas con el algoritmo de retropropagación del error. También se puede observar que una mayor variedad relativa de tipos de RNAs y SHs usados está relacionado con el análisis espectral, y en segundo lugar con la operación y control de plantas nucleares de potencia. Las referencias repetidas en ambas tablas indican el uso de más de un modelo de RNs

Tabla 3: Sistemática de Aplicaciones referidas de RNs en la ingeniería y ciencia nuclear hasta el año 2004.

<b>RNAs</b>	<b>AE</b>	<b>RN</b>	<b>DE</b>	<b>FP</b>
<b>RPD</b>	[5, 20, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 48, 58, 64, 65, 66, 67, 95, 107, 108, 118, 121, 130, 131, 133, 139, 142]	[8, 9, 43, 45, 46, 49, 69, 72, 83, 86, 99, 100, 116, 124]	[12, 22, 42, 78, 79, 80, 96, 122]	[6, 14, 15, 33, 41, 44, 55, 76, 82, 106, 140]
<b>RNR</b>	[61, 62, 65, 66, 123]	[16, 47, 52, 73, 74, 101, 134]	[1]	[23, 33]
<b>SOM</b>	[2, 19, 67, 131]	[11, 93, 114]		[13, 97]
<b>RBF</b>	[50, 56, 66, 107]	[114, 115]		[ 98 ]
<b>OM</b>	[ 20, 40, 60, 103, 105, 107, 109, 110, 111, 132]	[16, 17, 25, 70, 72, 77, 93, 99, 100, 101, 102, 104, 119]	[10, 18, 68, 120, 129, 136]	[4, 21, 35, 113, 128, 135]

Tabla 4: Sistemática de aplicaciones de SHs en el ámbito de la ciencia e ingeniería nuclear hasta el año 2004<sup>1</sup>.

<b>Sistemas híbridos</b>	<b>AE</b>	<b>RN</b>	<b>DE</b>	<b>FP</b>
<b>RN y Alg. Genéticos</b>	[54, 110]	[53, 72, 75, 99, 100, 101, 102, 104]	[117]	[7]
<b>RN y Sist. Expertos</b>		[93]		
<b>RNN y Sist. Difusos</b>	[3]	[16]		

En la Tabla 4, se desglosan las aplicaciones que utilizan métodos híbridos de IA, junto con RNs, de una forma directa o indirecta.

En las aplicaciones de RNs citadas en cada tópico se utilizan diversos tipos de algoritmos de entrenamiento, prevaleciendo los de tipo supervisado, pero se dan varias aplicaciones con entrenamiento no supervisado, principalmente en las redes que actúan en tiempo real y en línea.

En los siguientes apartados se detallan algunas aplicaciones interesantes de las RN, en cada uno de los tópicos de Ciencia e Ingeniería Nuclear considerados.

## **2. 2) RN Y ANÁLISIS ESPECTRAL E IDENTIFICACIÓN DE ELEMENTOS.**

El **análisis espectral** es una actividad importante en la investigación científica, y en particular en el ámbito de la física. Los espectros permiten, entre otras cosas, determinar la composición y concentración de elementos en determinada muestra, y se caracterizan por la naturaleza de la fuente generadora del espectro, que en el estudio presente, se centra en aquellas de naturaleza atómica y nuclear.

El análisis espectral analizado en el presente trabajo tiene relación con los siguientes tipos de emisiones atómicas y nucleares:

- Emisión de partículas  $\alpha$
- Radiación  $\beta$
- Radiación  $\gamma$  y X
- Fisión espontánea de núcleos pesados, que por lo general es acompañada de emisión secundaria de partículas livianas, como por ejemplo neutrones.

Una de las aplicaciones esenciales del análisis espectral reside en:

- La investigación de elementos radioactivos presente en el entorno ambiental y en la identificación de elementos tóxicos y contaminantes en la atmósfera.
- La identificación de productos en interacciones nucleares, en especial en reacciones nucleares,

- Determinación de concentraciones de elementos y composición de muestras y materiales determinadas, que previamente son irradiados mediante adecuadas técnicas experimentales.

Existen diferentes metodologías y técnicas convencionales que se implementan en el reconocimiento espectral y que se han desarrollado por largo tiempo, en general durante todo el siglo XX.

En el análisis espectral de determinados materiales juega un rol clave el sistema de detección que se implementa, ya que se relaciona directamente con las condiciones concretas del experimento y del objeto a investigar. En esta línea, en el tratamiento experimental de espectros gama ( $\gamma$ ) se utilizan comúnmente detectores del tipo (NaI) y detectores semiconductores (Ge), pero se establece que los primeros resultan mejores en el trabajo de laboratorio ya que su sensibilidad es unas 30 veces superior a los de (Ge). Sin embargo para una medición móvil, en terreno, son mejores los segundos ya que su resolución de energía es una 20 veces superior a los (NaI). Y este tipo de medición espectral móvil es muy importante en situaciones de imprevistos y accidentes nucleares para determinar la presencia de radionuclidos naturales y artificiales.

El análisis espectral tiene como problema esencial la identificación de las líneas espectrales presentes y la estimación del área de éstos, lo que permite determinar el grado de presencia del elemento en una muestra. En este sentido se desarrollan continuamente, metodologías y códigos computacionales que buscan avanzar en la automatización del proceso. Un aspecto inherente de esta tarea es separar el fondo o ruido detectado, de la detección de la radiación propia inherente a los elementos de interés presentes en la muestra investigada.

Estas técnicas y metodologías de análisis espectral se basan principalmente en métodos de calibración y aproximación funcional, con alguna participación humana en el proceso en sí. En contraste con las líneas tradicionales, en el último decenio, se viene implementando en forma creciente el uso de herramientas de la inteligencia artificial, en particular de las RNA, en el análisis espectral, reconocimiento de elementos y determinación de las respectivas concentraciones.

El uso de redes neuronales artificiales en el **reconocimiento automático espectral**, irrumpe en la primera mitad de la década de los noventa. La ventaja esencial mostrada por esta metodología automática, es que el proceso de identificación espectral es

más rápido, menos costoso y más preciso, en comparación con los métodos convencionales. El mayor tiempo se ocupa en la etapa previa a la aplicación, es decir, en el proceso de entrenamiento de la red.

Por lo general, en estos casos, se desarrolla un entrenamiento supervisado en base a ejemplos, puesto que existe abundante y precisa información sobre transiciones atómicas y nucleares, es decir, de los espectros atómicos y nucleares característicos.

A continuación, analizaremos algunas aplicaciones relevantes desarrolladas en el uso de redes neuronales artificiales en el análisis espectral, clasificadas según las cinco clases o modelos de redes neuronales mencionados en la Introducción del presente trabajo, y que están orientadas básicamente a la identificación de elementos y su concentración, presentes en determinadas muestras.

#### a) Redes Neuronales de propagación hacia delante en Análisis Espectral

Un importante aplicación de las redes neuronales en el ámbito de la física nuclear consiste en la identificación automática de isótopos radioactivos, a partir de un espectro de rayos gama. En esta línea, en [65, 66] se examinan la aplicación de dos tipos de redes neuronales en la identificación de concentraciones isotópicas:

- **Optimal Linear Associative Memory – OLAM**, (será analizada en la sección b) del presente apartado
- **Perceptron Lineal – PL**

El principio de la aplicación de una red neuronal en el reconocimiento de espectros se fundamenta en que ésta aproxime al máximo una curva a la obtenida a través de datos experimentales. La ventaja del uso de RNs en este campo, en comparación a los métodos más convencionales, es que el mayor costo y tiempo computacional que ocupan las RNs está en su período de entrenamiento, ya que en su aplicación son muy rápidas.

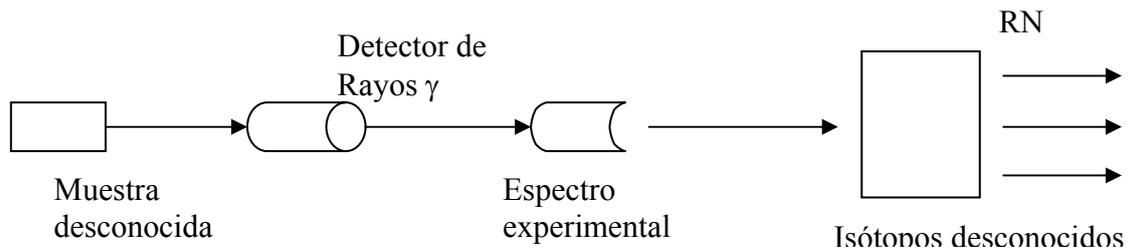


Figura 19. Esquema experimental de análisis

En la Figura 19 se muestra un esquema de un sistema prototipo usado en un proceso de análisis espectral de radiaciones gama:

La muestra a investigar, por lo general, está compuesta de varios isótopos, donde cada uno posee un espectro característico -  $s_i$ , y por ello, el espectro obtenido -S, puede considerarse como una superposición lineal de los espectros propios de los isótopos componentes, es decir:

$$S = \sum_i \alpha_i s_i \quad (2.1)$$

donde  $\alpha_i$  representa la concentración relativa de cada isótopo en la muestra.

El PL ha sido diseñado en este caso, para generar una respuesta lineal usando una función de activación lineal.

Una **red neuronal de propagación hacia adelante** que emplea esta arquitectura, puede simplificarse en una red de una capa de entrada y una capa de salida, como se ilustra en la Figura 20, y donde las salidas son los elementos a identificar.

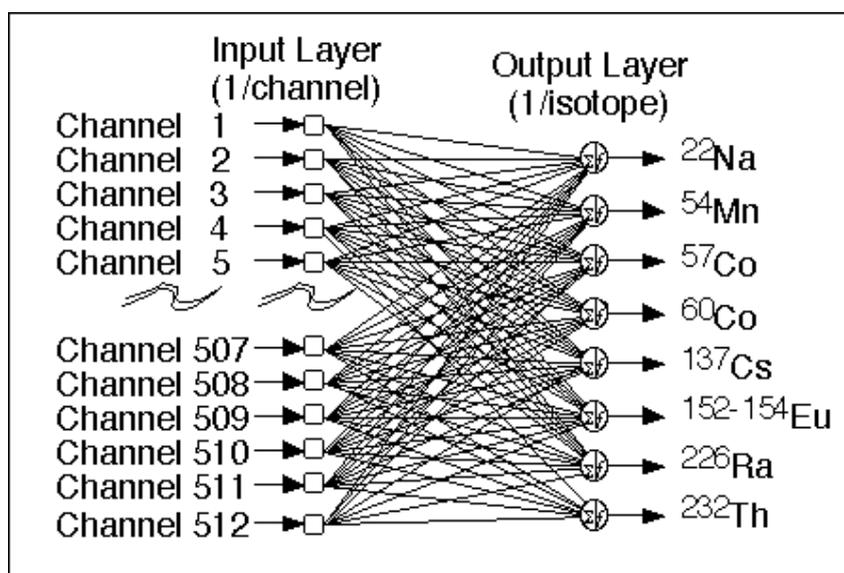


Figura 20. RN de dos capas (512 nodos de entrada y 8 de salidas) para la identificación de 8 elementos.

En la configuración de la red neuronal juega un rol fundamental la generación de los conjuntos de entrenamientos, mediante espectros de isótopos de concentración

conocida. El objetivo de este entrenamiento es que la red automáticamente, después del proceso de aprendizaje, pueda relacionar los datos espectrales experimentales con la representación obtenida en el entrenamiento.

Por ello, en la estructuración de una red neuronal es fundamental considerar los siguientes elementos definitorios: Tipo de función de activación ; Proceso de entrenamiento, y Qué red neuronal se ha de usar.

En los artículos antes referidos, se realiza una comparación de las ventajas y desventajas de la aplicación del Perceptron Lineal y del OLAM en el reconocimiento espectral, como también, se discuten sus virtudes comparativas con tecnologías y metodología más tradicionales de análisis de espectros gama.

Primero, se estudia el Perceptrón Lineal que, en este caso, se estructura en base a:

- Una **Función de Activación Modificada** – lineal para entradas positivas y cero para entradas negativas
- La **Regla  $\delta$**  como proceso de entrenamiento, que comprende un proceso iterativo cuyos pasos esenciales son:

- 1 Pesos iniciales son aleatorios.
- 2 Recogen un par etiquetado (espectro  $x^p$  y concentración conocida  $t^p$  )
- 3 Propagar hacia delante y generar una salida clasificada

$$y^p = wx^p \quad (2.2)$$

- 4 Calcular el error cuadrático medio entre cargas clasificadas y la actual clasificación
- 5 Adaptar los pesos vía Regla  $\delta$  para reducir el error de salida

$$\Delta w = \eta(t^p - y^p)x^p \quad (2.3)$$

donde  $\eta$  representa la tasa de aprendizaje

- 6 Si hay más espectros en el conjunto de entrenamiento volver al paso 2.
- 7 Si el error de salida es alto, o si no se ha realizado el el número de iteraciones requeridas, volver al paso 2.

Los resultados de esta comparación se presentan más adelante en la sección b) del presente apartado, cuando se analiza la red OLAM.

Una red de **propagación hacia delante de tres capas** (entrada – oculta – salida), entrenada con el algoritmo de retro propagación, se utiliza en [139] para la identificación de isótopos a través de espectros gamma obtenidos con un detector Ge(Li). En este trabajo las entradas a la red la constituyen las líneas **espectrales** de los elementos de interés para la presente investigación (53 líneas de 28 elementos) y las salidas son los elementos de interés (28 elementos). La respuesta de la red indica la probabilidad de la presencia de cada elemento en la muestra investigada. Las entradas se obtienen de los espectros que se analiza, tomando los picos que constituirán entrada a la red y en torno a cada línea espectral ( de las 53 de interés) se construye una función  $n = n(i)$ , donde  $n$  es el número de eventos en cada canal  $i$  y el error estadístico de esta curva es  $\sigma = (n(i))^{1/2}$  y si la segunda derivada  $n''(i)$  satisface la condición  $In''(i)I > S\sigma''(i)$ , entonces se identifica el pico correspondiente (se adopta  $S = 3$ ). Entonces, el valor de la neurona correspondiente al pico identificado adquiere el valor de entrada 1, y si no satisface la condición anterior, adquiere el valor de entrada 0.

Con este mecanismo de selección de entradas, la red se estructura en tres capas:

- **Capa de entrada:** 47 neuronas, correspondiente a líneas espectrales de los 28 elementos de interés,
- **Capa oculta:** 52 neuronas, cuyo número se determina en un proceso de optimización del error,
- **Capa de salida:** 28 neuronas, correspondiente a cada a los 28 radioisótopos investigados, y el valor arrojado por cada neurona representa la probabilidad de que ese elemento esté presente en la muestra.

En la Figura 21 se puede observar el proceso de búsqueda de valores de entrada a partir de los espectros originales de la muestra a investigar. La aplicación se utiliza para clasificar los elementos mencionados en muestras de isótopos estándares y en muestras de compuestos de uranio.

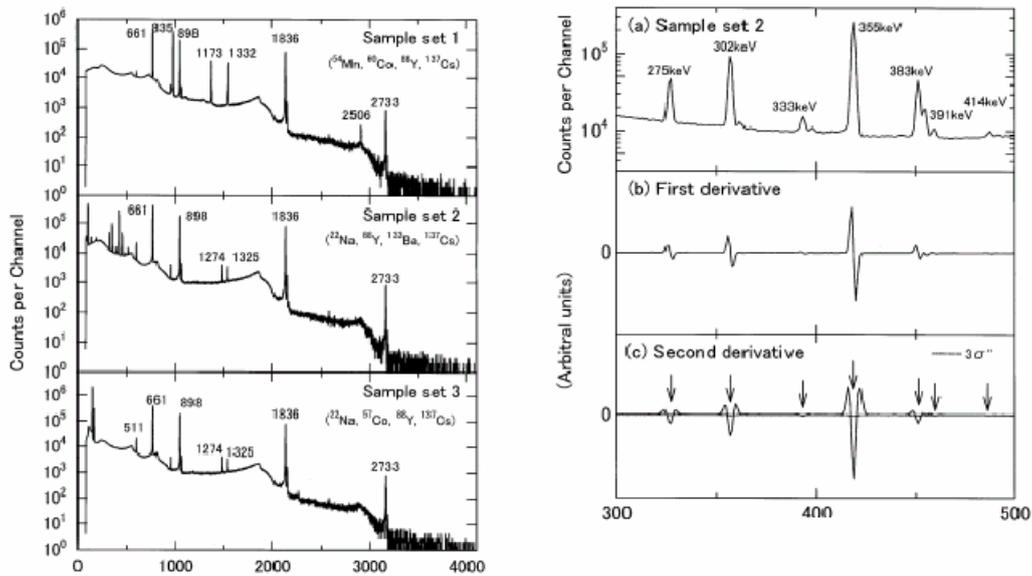


Figura 21. Ilustración del resultado de un proceso de derivación de un espectro.

En [108] se utiliza, para el análisis espectral, una red neuronal similar al **Perceptron**, (ver Figura 22) compuesta de dos capas: **entrada** (x) y **salida** (y), y en la cual cada neurona de entrada se conecta a todas las de salidas, y para cada conexión (i, j) se define un peso  $w_{ij}$  que es debidamente ajustado en el proceso de entrenamiento.

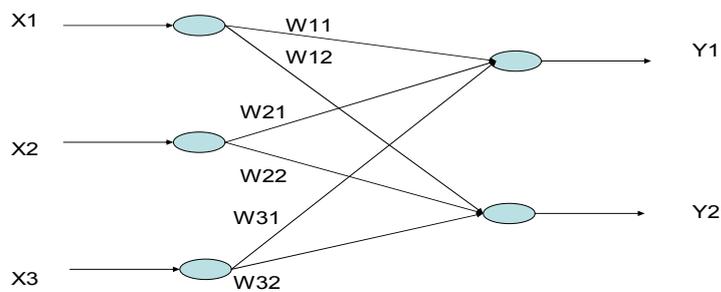


Figura 22. RN similar al perceptron usada en análisis espectral

Si  $s_j$  es una salida, esta se puede presentar de la forma siguiente:

$$s_j = \sum_i w_{ij} e_i \quad (2.4)$$

y las entradas a la red se representan por el vector

$$E = (e_1, e_2, \dots, e_n) \quad (2.5)$$

y las salidas esperadas por el vector

$$S_d = (s_{1d}, s_{2d}, \dots, s_{md}) \quad (2.6)$$

Luego, la red calcula la salida

$$S = (s_1, s_2, \dots, s_m) \quad (2.7)$$

y la diferencia

$$\Delta = (S - S_d) \quad (2.8)$$

debe ser minimizada por la modificación de los pesos utilizando la relación

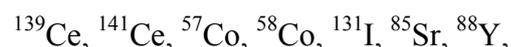
$$\Delta w_{ij} = -\alpha (s_j - s_{jd}) e_i \quad (2.9)$$

en la cual,  $\alpha$  es el factor de aprendizaje y tiene un valor del orden de 0.2.

En esta red las **entradas** la constituyen las áreas bajo las líneas espectrales de determinado número de elementos a considerar en el espectro que en esta aplicación son 12, una vez eliminado el background, o ruido. Y las **salidas** son la actividad de los radionuclidos a investigar en la muestra, los 8 isótopos que se mencionan más adelante. Luego, mediante un algoritmo específico las entradas se proyectan en una matriz ortogonal con el objeto de separar la señal del ruido presente.

Si  $A$  es la matriz de entrada, esta se relaciona con  $U$  – es una matriz rectangular ortogonal resultante de la proyección de  $A$ , con  $V$  – que es una matriz ortogonal cuadrada y que se denomina matriz de transferencia, y con  $W$  – que es una matriz diagonal que representa los pesos y cada elemento diagonal  $\lambda_i$  es el peso respectivo de la componente asociada con  $U$ . A su vez,  $\lambda_i$  son los valores singulares de la matriz  $A$ . Los pesos menores de estos elementos son descartados, y por ello, las nuevas entradas serán los  $n$  valores principales de  $U$ , siendo  $n$  la dimensión del espacio de entrada.

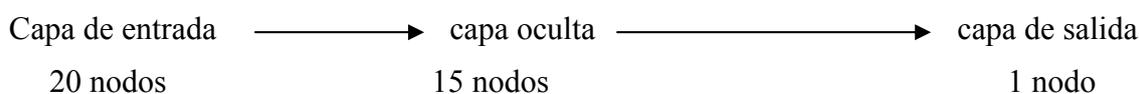
Este artículo, reporta una aplicación de esta red al análisis espectral, determinando la actividad de 7 isótopos presentes en una mezcla



y en el proceso de entrenamiento se incluye el isótopo no presente en la muestra  $^{137}\text{Cs}$ .

Los autores concluyen que la aplicación de la red neuronal es adecuada y reportan un error en la determinación de concentración de isótopos por esta vía del orden del 2%.

En [64] y [66] se desarrolla un modelo de red neuronal **de propagación hacia delante** cuya arquitectura se ilustra en el siguiente esquema:



El objeto de esta red es el reconocimiento de partículas alfa emitidas por Plutonio (Pu), para determinar la presencia de este elemento radioactivo en entornos ambientales de riesgo contaminante. Las 20 entradas de la red se obtienen de los 200 canales seleccionados en la zona espectral de interés, donde cada neurona de entrada se asocia al valor promedio de la intensidad de 10 canales consecutivos (ver Figura 23).

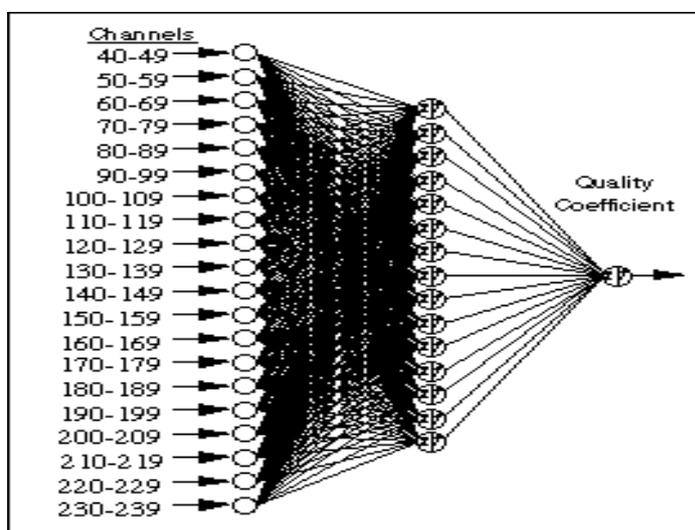


Figura 23. RN (20 – 15 – 1) para análisis de presencia de Pu.

En este caso, el papel de la red neuronal , después del respectivo entrenamiento, será asignar al espectro energético de las partículas alfa un valor de calidad (de 1 a 10), que constituye la salida de la red, y de esta manera indicar el grado de aproximación del espectro detectado al producido por la emisión de partículas alfa por el Pu en su decaimiento radioactivo, aplicando los siguientes criterios de selección espectral:

- (0,3) es aceptable e indica que hay claros indicios de presencia de Pu
- (4,6) es marginalmente aceptable, y
- (6,10) es pobremente aceptable, es decir, son muy bajos los indicios de presencia de Pu

La red es entrenada con **el algoritmo de retropropagación del error**. La tasa de aprendizaje ( 0.01 ) y el momentum ( 0.9 ) son constantes, y el entrenamiento de la red se detiene después de 3000 ciclos. Estos parámetros se obtienen mediante la optimización de la respuesta de la red. Se analizaron 139 espectros, los que habían sido clasificados por un experto, y luego fueron clasificados por la red neuronal.

A modo de ilustración en la Figura 24 se puede ver un espectro calificado con 1 y otro con 5, por un experto. Puede verse una diferencia decisiva en el eje vertical (counts).

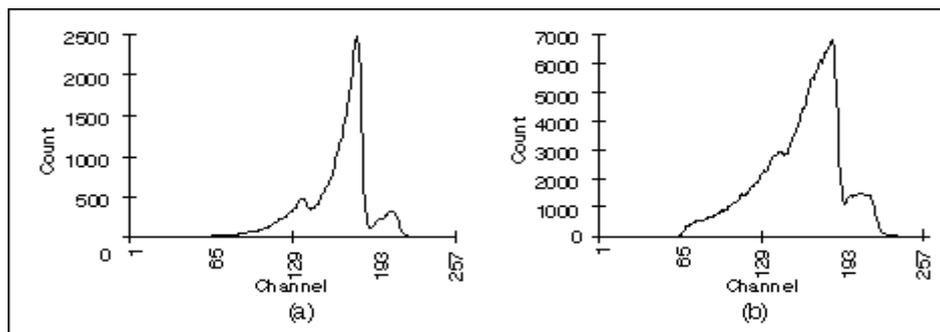


Figura 24. Espectros de emisiones alfa calificados por RNs

Originalmente los espectros constaban de 512 canales de datos, luego, en base a una selección de la zona de interés se reducen a 200 (del 40 al 239), y de estos se generan 20 entradas a la red, como se ve en la Figura 23. Esta investigación tiene por objeto demostrar que el conocimiento espectral experto de alta calidad puede ser transferido a una red neuronal artificial, permitiendo la automatización de esta acción.

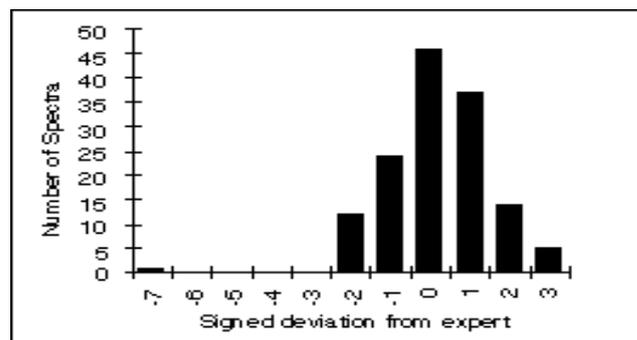


Figura 25. Histograma de validez de clasificación de espectros de emisiones alfa por RN.

Como resumen, en la Figura 25, el 83.5% de los espectros los califica la red en el rango (n-1, n+1) y el 97.5% en (n-2, n+2), n es el valor de calidad dado por el experto,

En [26] y [27] se propone un método de aproximación de funciones no lineales a través de una **red neuronal de propagación hacia delante** con una **capa de entrada** ( 1 neurona – espectro completo), una **capa oculta** ( $N_h$  neuronas – correspondiente al número de armónicos) y una **capa de salida** ( 1 neurona – función representada por una transformada discreta de Fourier). Se utiliza una **función de activación sigmoide en las neuronas ocultas** y una **función lineal en la neurona de salida**.

Como alternativa al algoritmo de entrenamiento de retro propagación se propone el uso de un **algoritmo de aprendizaje de análisis espectral** ( del cual se presentan cuatro variantes posibles a aplicar [26]) que presenta las ventajas de minimizar el número de neuronas en la capa oculta, homogeneizar los pesos de interconexión y reducir el tiempo computacional, y la consecuencia más importante es la disminución del error de aproximación de funciones no lineales. Este algoritmo de aprendizaje utiliza la transformación discreta de Fourier (DFT)

Si  $x(k)$  son los espectros de entrada e  $y(x(k))$  los respectivos espectros de salida de la red, la relación funcional está dada por:

$$\text{DFT}[y(x(k))] = \text{DFT}[d] + \sum_i c_i \text{DFT}[\tanh(b_i x(k) + a_i)] \quad (2.10)$$

Donde :  $d$  y  $a_i$  son los factores de tendencias (bias) de la neurona de salida y de las neuronas ocultas respectivamente, y  $c_i$  y  $b_i$  son los pesos ligados a la neurona de salida y a las neuronas ocultas.

El algoritmo de aprendizaje espectral que tiene por objeto determinar los mejores pesos de interconexión se implementa en los siguientes pasos fundamentales ( en el artículo referido se realiza un detallado análisis de él):

- Determinar la configuración y los pesos  $b_i$  de las neuronas de la capa oculta,
- Calcular los pesos  $c_i$  de la neurona de salida mediante la ecuación ( en forma matricial ) antes descrita.
- Si el error de la aproximación es aceptable el procedimiento de aprendizaje termina, de lo contrario una nueva configuración de la capa oculta se genera y se realizan las consecuentes iteraciones.

El tiempo de aprendizaje de el algoritmo de análisis espectral (cerca de 8 minutos en un PC Pentium compatible) es considerablemente menor que el requerido por el algoritmo tradicional de retropropagación ( que necesita varias horas, en el mismo PC, para alcanzar el mismo error de validación.

La aplicación en [131] no se enmarca en una investigación de análisis espectral de tipo nuclear, pero la metodología usada puede aplicarse a espectros de origen nuclear. Se presenta un análisis de espectros ultravioletas de origen estelar y en su reconocimiento y clasificación se comparan dos redes neuronales:

- **Red neuronal de propagación hacia delante con entrenamiento supervisado**, con **capa de entrada** (744 neuronas) que corresponden a datos espectrales directos, **dos capas ocultas** (120 neuronas cada una) y **capa de salida** ( 51 neuronas) que clasifica según los grupos, o clases, de estrellas seleccionados en el rango que abarca desde el grupo O3 al G5. La clasificación de esta red es comparada con los datos experimentales provenientes del IUE Low Dispersión Reference Atlas of Normal Stars. Y se reporta que el error de clasificación de la red fue de 1.1 sub clase espectral,
- **Red neuronal auto organizada con entrenamiento no supervisado**, (esta red se analiza en sección d) de este apartado)

En [142] se presenta la aplicación de una **red neuronal de propagación hacia delante** de tres capas (entrada – oculta – salida) en el reconocimiento de espectro de rayos X proveniente de radiación cósmica, con el objeto de clasificar los fotones de interés de aquellos que pueden considerarse ruido. Esta aplicación se enmarca en el proyecto XEUS (X-ray Envolving Universe Spectroscopy) que tiene por objeto investigar fenómenos en el universo en su etapa caliente, como los primeros agujeros negros masivos, los primeros grupos de galaxias y la evolución de elementos pesados.

En esta aplicación se desarrolla un algoritmo de entrenamiento que ajusta automáticamente en el proceso de aprendizaje los parámetros de tasa de aprendizaje y momento.

## b) Redes Neuronales Recurrentes en Análisis Espectral

En el caso de la red OLAM, que se compara con el PL [65, 66], se usa una **función de activación lineal** y el entrenamiento consiste en un **proceso de ortogonalización matricial**, donde cada etiqueta del conjunto de entrenamiento es proyectada por separado al eje ortogonal del espacio de salida.

Este proceso se puede sintetizar en los siguientes pasos:

- 1.- Se inicia a partir de las matrices de espectros y de concentración de isótopos.

$x^p$ , representa las columnas de una matriz X de dimensión  $n \times p$ , que caracteriza el espectro

$t^p$ , son las columnas de una matriz T, que caracteriza las concentraciones

- 2.- Se genera la matriz  $X'$ , inversa de la matriz espectral X. Y si X no es cuadrada, se implementa un cálculo de una matriz pseudo inversa  $X^+$ .

- 3.- Se obtiene la matriz de pesos W:

$$W = TX^+ \quad (2.11)$$

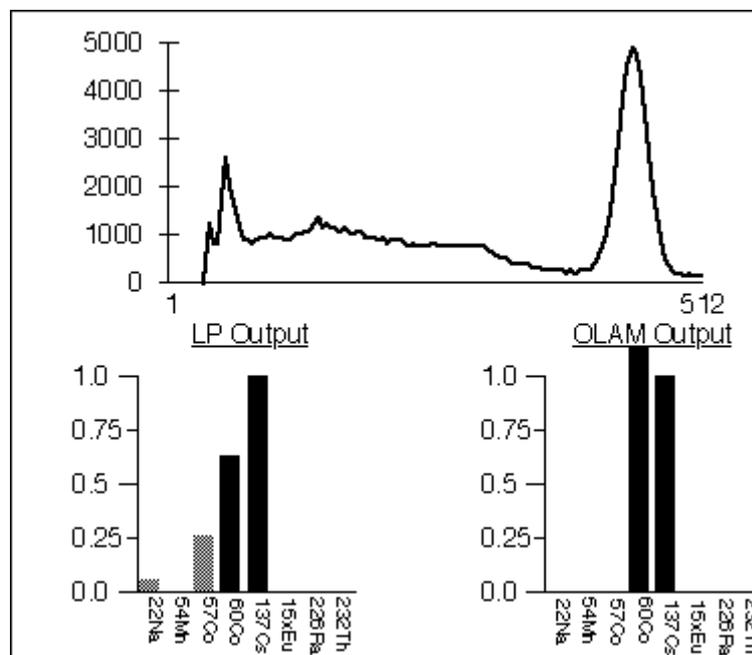


Figura 26. Comparación de clasificación en experiencia de análisis espectral de una RN perceptron lineal y una OLAM de muestra compuesta por  $^{60}\text{Co}$  y  $^{137}\text{Cs}$ .

Los dos paradigmas usados para obtener respuestas lineales, OLAM y PL, fueron aplicados por separados en muestras idénticas, y sus respuestas comparadas.

Los valores en las neuronas de salida, en estos casos, serán proporcionales a la cantidad, o concentración, de cada elemento en la muestra. La Figura 26 muestra la clasificación, realizada por PL y OLAM, sobre una muestra compuesta en igual cantidad por  $^{60}\text{Co}$  y  $^{137}\text{Cs}$ .

En esta muestra OLAM identifica correctamente los dos elementos presentes, mientras que el PL incluye una cantidad significativa a  $^{57}\text{Co}$ , no presente en la muestra analizada.

En la Figura 27 se ilustra la clasificación de una muestra de :  $^{12}\text{Na}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{152}\text{Eu}$  y  $^{154}\text{Eu}$ . En este caso, OLAM identifica correctamente todos los elementos, y el PL no identifica el isótopo  $^{60}\text{Co}$ .

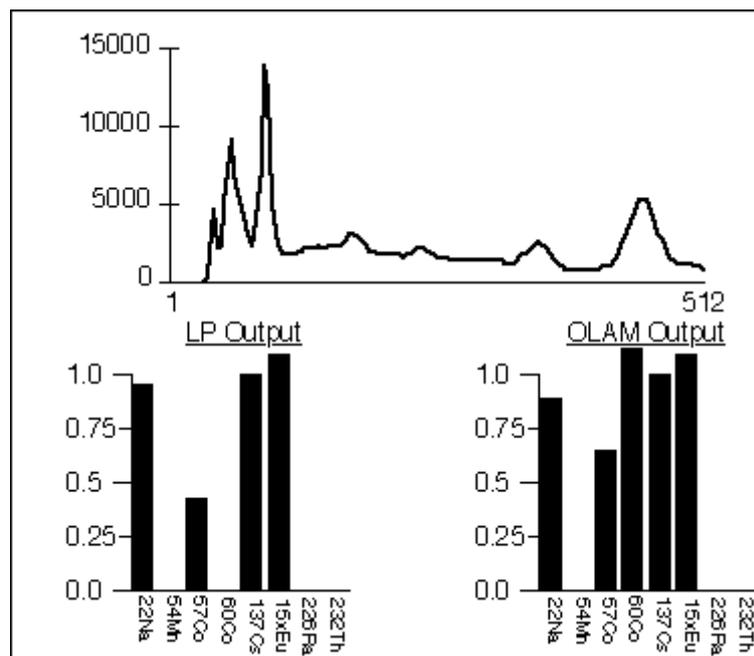


Figura 27. Comparación de clasificación en experiencia de análisis espectral de una RN perceptron y una OLAM de muestra compuesta por  $^{12}\text{Na}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{152}\text{Eu}$  y  $^{154}\text{Eu}$ .

Los resultados, según los autores, indican una mayor aproximación al espectro real y una mayor rapidez en el proceso de entrenamiento de OLAM sobre el PL, debido al uso de la ortogonalización matricial, ya que este no es un proceso iterativo.

Una **red neuronal recurrente** se utiliza en [40] como parte de un sistema de red jerarquizado en uno de sus niveles – analizado más detalladamente en la sección e) del presente apartado.

### **c) Redes Neuronales de Función Base Radial en Análisis Espectral (RBFN)**

En [107] uno de los tipos de redes neuronales usadas en una aplicación comparativa de análisis de espectros LIBS (que es analizado más adelante) es una **red de función radial base**.

En [66] se realiza una comparación de RBFN y MLP con análisis mediante sistemas de regresión de espectro infrarrojos obtenidos de sales con el objeto de determinar la presencia de sustancias orgánicas en las muestras. Se analiza la presencia de cuatro tipos de sustancias orgánicas y las redes son entrenadas con 140 muestras (35 de cada grupo de sustancia) y el conjunto de test se compone de 60 muestras (15 de cada sustancia analizada). Se explicita que las RNs tienen mejor respuesta que los métodos tradicionales y en particular la RBFN entrega mejores respuestas que el MLP

### **d) Redes Neuronales Autoorganizadas en Análisis Espectral**

La investigación en [131] presenta un análisis de espectros ultravioletas de origen estelar y en su reconocimiento y clasificación se comparan la aplicación de una **red neuronal auto organizada con entrenamiento no supervisado** con una red neuronal de propagación hacia delante con entrenamiento supervisado, con un mapa de 8 x 8 con 744 neuronas que representa la capa de entrada. Las entradas a la red la constituyen datos espectrales directos y las salidas es la clasificación de los espectros en determinadas clases y sub clases. El conjunto de entrenamiento en la red autoorganizada se usa para definir la asociación de los espectros a los 64 elementos del mapa.

### **e) Otros Modelos de Redes Neuronales y Modelos Híbridos en Análisis Espectral.**

En [107] se discute sobre la aplicación de redes neuronales en el análisis espectral inducido por radiación láser de muestras gaseosas del entorno ambiental, que permite

establecer la presencia y concentración de elementos tóxicos. El espectro característico que se obtiene representa el decaimiento de los átomos excitados en la muestra, debido a una intensa radiación láser, los que al volver a sus niveles energéticos estables emiten una radiación característica que da origen al espectro mencionado, que es detectado mediante técnicas y procedimientos experimentales probados, (a este proceso se le conoce como Laser Induced Breakdown Spectroscopy – LIBS). Si bien el espectro, dependiendo de la energía del haz incidente, por lo general es de naturaleza atómica, la aplicación de la metodología de redes neuronales aplicadas, puede ser generalizada para espectros de origen nuclear.

Esta investigación se enmarca en la política ambiental de la mayoría de los países desarrollados que exigen un monitoreo permanente de residuos tóxicos en la atmósfera. En el citado artículo, un aspecto novedoso es **la aplicación de diferentes y combinados tipos de redes neuronales**, dependiendo de la característica del espectro obtenido, es decir, las redes están relacionadas con los elementos a identificar. Por ello, una discusión actual es acerca de cuales deben ser las entradas a la red – que debe considerar diversos factores propios y bien definidos del experimento, como la potencia del haz, características de la muestra y otros factores medibles. Y además, se debe considerar la manera de incluir en la entrada el conjunto de datos espectrales: el espectro en su conjunto, el espectro dividido en intervalos iguales, o sólo las zonas de interés a investigar, por mencionar algunas de las maneras posibles. Los factores incontrolables en el análisis deben superarse a través de datos promedios, por ejemplo considerar unos 20 o más espectros para cada elemento a investigar. En [103] se informa sobre el desarrollo de un software fundamentado en un sistema inteligente denominado Spectral Support System - SSS, que contempla el uso de diferentes redes neuronales para predecir la concentración de elementos en determinada muestra gaseosa.

En [107] se reporta el uso de cuatro arquitecturas de redes diferentes, decidiendo que la última es la que aproxima mejor los resultados:

- Red de **retropropagación**
- Red de **función radial base**
- Red de **regresión general**
- Red de **retropropagación con arquitectura de cascada.**

Para determinar la concentración de determinado elemento se utiliza una red propia que tiene **24 neuronas de entrada** que corresponden a 20 datos espectrales directos de intensidades en canales en torno a la línea de interés y 4 datos propios del experimento y **la salida de la red** representa la concentración del elemento presente en la muestra. Sobre los otros modelos utilizados no se entregan más detalles.

La red es entrenada, en este caso, en forma supervisada en base a ejemplos, con espectros de concentraciones bien definidas, y para eliminar datos innecesarios se utilizan como datos de entrada sólo la región de los picos espectrales de interés en una región  $\pm 20$  canales en torno al máximo del pico escogido. Cabe mencionar que los espectros tanto en el proceso de entrenamiento como en la aplicación en sí, se agrupan en files y cada file contiene tiene 120 a 360 espectros de determinado elemento, y cada espectro puede tener de 2000 a 4000 canales, que están relacionados con la energía de las líneas, y por ende están con la longitud de onda y frecuencia de la señal detectada. Estos canales se representan en eje x y en el eje y está el número de actos registrados en cada canal. Así, el área bajo la curva de un pico de interés en el espectro, se relaciona con la concentración del elemento respectivo presente en la muestra.

El conjunto de entrenamiento para cada elemento contiene de 2250 a 3000 vectores de entrada y cerca de 1000 vectores se incluyen en el conjunto de test

La precisión de la respuesta de la red para la concentración de: Be, Cd, Pb, Cr, varía en el rango: 3% a 15%,

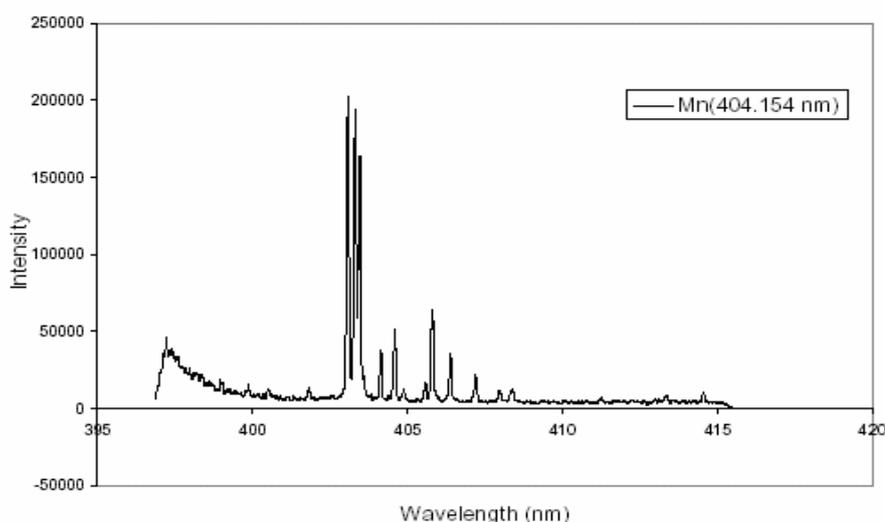


Figura 28. Espectro tipo LIBS.

Un típico espectro obtenido vía técnica LIBS es el de la Figura 28 ([60]). En este trabajo, se discute la comparación del análisis espectral LIBS a través de redes neuronales y de métodos convencionales aplicados. El esquema de aplicación planteado para demostrar que la hipótesis de mejor aproximación de las redes neuronales respecto a los métodos tradicionales, o simple calibración, es el representado en la Figura 29 :

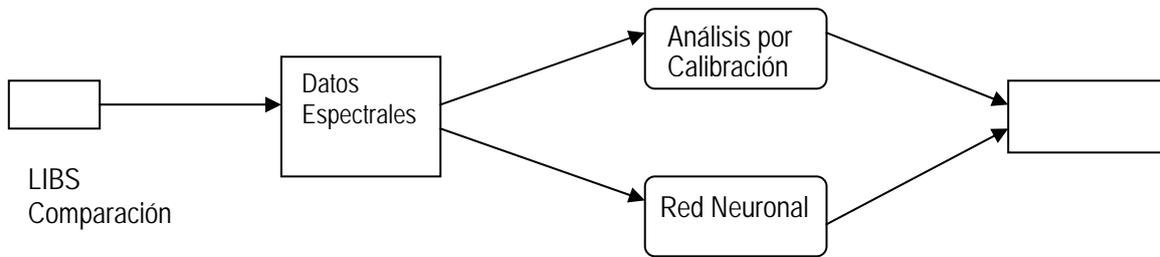


Figura 29. Esquema de aplicación LIBS con

El esquema de automatización del reconocimiento espectral LIBS propuesto en [107] es el siguiente

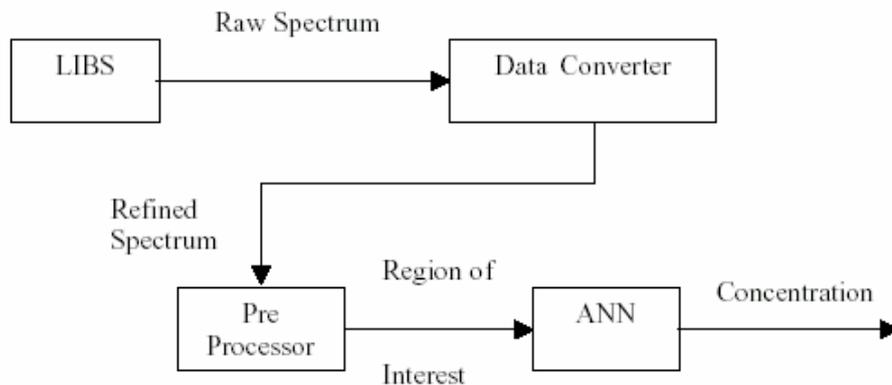


Figura 30. Esquema de reconocimiento espectral LIBS con RNs.

Inakollu et.al.[60] presenta la Tabla 5 y Figuras 31 - 33, donde se muestran algunos resultados que validan la aplicación de redes neuronales en este tipo de análisis espectral:

Tabla 5. Comparación de predicciones con RNs y curvas de calibración.

Chemical Analysis (%)	Neural Network			Calibration		
	Prediction (%)	Rel. Accry.(%)	Rel. Prec.(%)	Prediction (%)	Rel. Accry.(%)	Rel. Prec.(%)
0.0	0.009	—	24.784	0.094	—	26.878
0.040	0.037	7.500	16.153	0.062	54.075	16.583
0.042	0.043	2.381	4.651	0.042	0.043	16.4573
0.044	0.043	2.273	18.047	0.029	34.100	18.9606
0.060	0.059	1.667	3.559	0.029	50.813	22.251
0.173	0.175	1.156	12.881	0.236	36.636	17.445
0.275	0.280	1.818	8.065	0.268	2.473	14.172
0.473	0.466	1.479	0.566	0.316	33.102	19.705

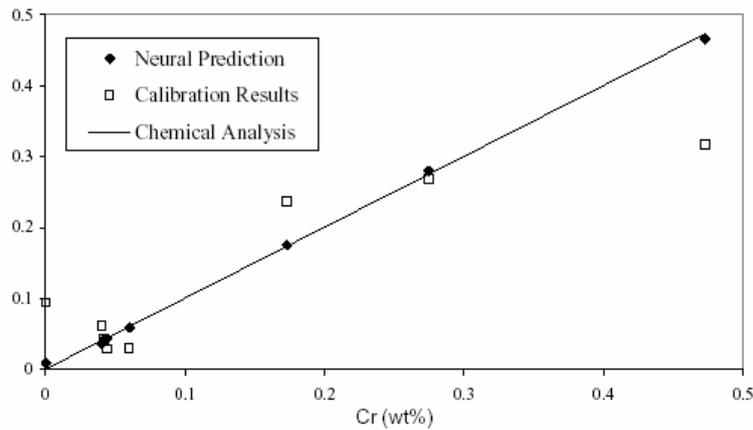


Figura 31. Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Cr

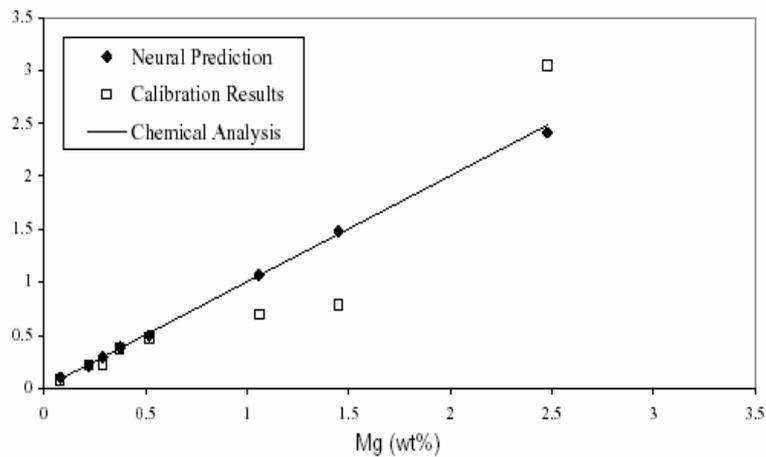


Figura 32. Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Mg

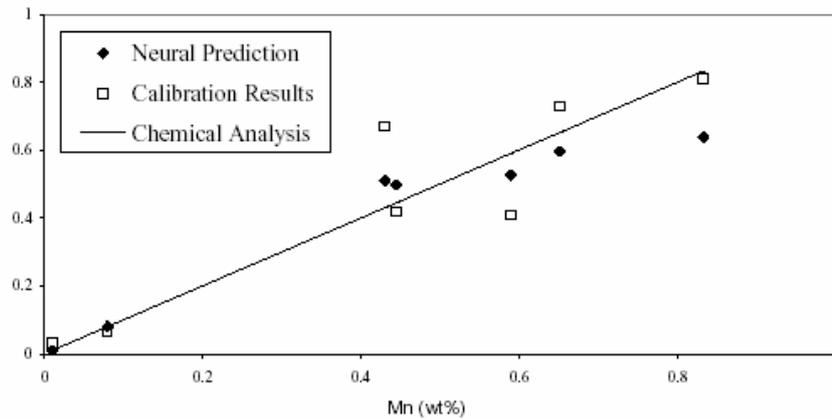


Figura 33. Comparación entre los valores predichos por RNA y las curvas basadas en análisis por calibración, para el Mn

En [110] se realiza una aproximación vía inteligencia artificial en la identificación no destructiva de materiales radioactivos presente en determinada muestra. Se implementan algoritmos de **redes neuronales y programación genética**. Con este objetivo se utiliza una simulación a través del método de Monte-Carlo para generar una función de correlación:  $R(\tau)$  – donde  $\tau$  es el llamado tiempo de retardo. Esta función se obtiene de la detección de emisiones correlacionadas de una muestra metálica de uranio donde neutrones y fotones son emitidos por el  $^{252}\text{Cf}$ . La función de correlación se obtiene para muestras de diferentes masas y con concentraciones de uranio diferentes (siete muestras con masas distintas y cada masa con cuatro tipo de concentraciones de uranio – 28 tipos de muestras, ver Figura 34).

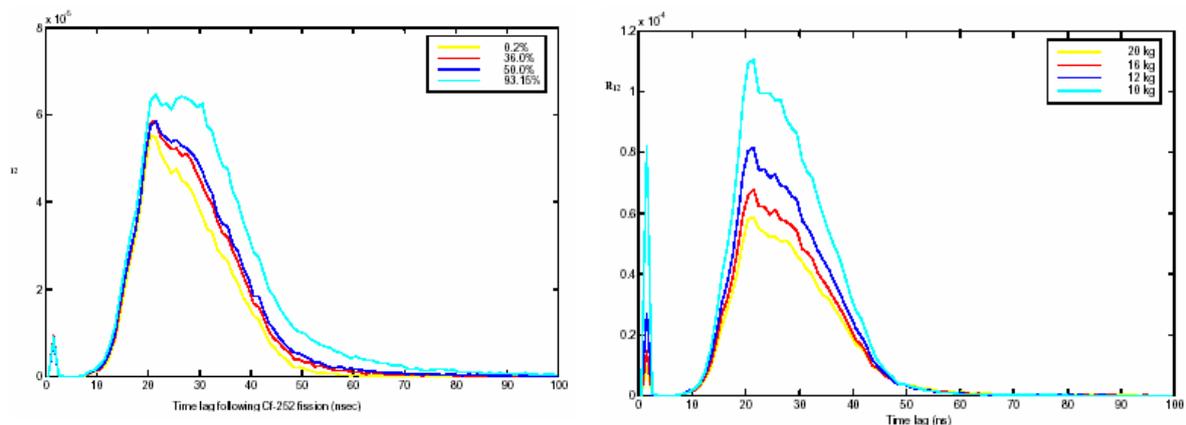


Figura 34. Funciones de correlación para la detección de materiales radiactivos con RNs

Dos **redes neuronales de propagación hacia delante de tres capas** fueron entrenadas para generar un reconocimiento y aprendizaje. La arquitectura de la red es: **entrada** – 4 neuronas, **oculta** – 2 neuronas y **salida** – 2 neuronas. Los factores de entrada que se consideran en el algoritmo de identificación de la muestra son:

- F1: factor relacionado con la integral de la función de correlación efectiva en un tiempo de 0 a 8ns, y que principalmente depende de la masa de la muestra.
- F2: es la integral de la función de correlación efectiva en un tiempo de 0 a 100 ns, y es sensible a la masa de la muestra y a su porcentaje de  $^{235}\text{U}$  enriquecido.
- F3: es el tiempo de retardo, entre la fisión y la correspondiente detección, que es constante para una muestra débilmente enriquecida con  $^{235}\text{U}$  y es muy sensible a la masa en muestra enriquecidas,
- F4: está relacionado con la inclinación o pendiente de la curva, para valores de enriquecimiento bajo en la muestra.

Este conjunto (F1, F2, F3, F4,) constituye **el conjunto de entrada de la red y la salida es la masa y la concentración** de material radioactivo de la muestra.

El algoritmo de **error - backpropagation** se usa para el entrenamiento de la red. Y como función de activación de la capa de entrada a la capa oculta se usa una **función sigmoideal** y una **función lineal** de la capa oculta a la capa de salida. Los valores de la **tasa de aprendizaje y momentum** para el entrenamiento fueron optimizados por el algoritmo genético. Los resultados de la aplicación se muestran en la Figura 35

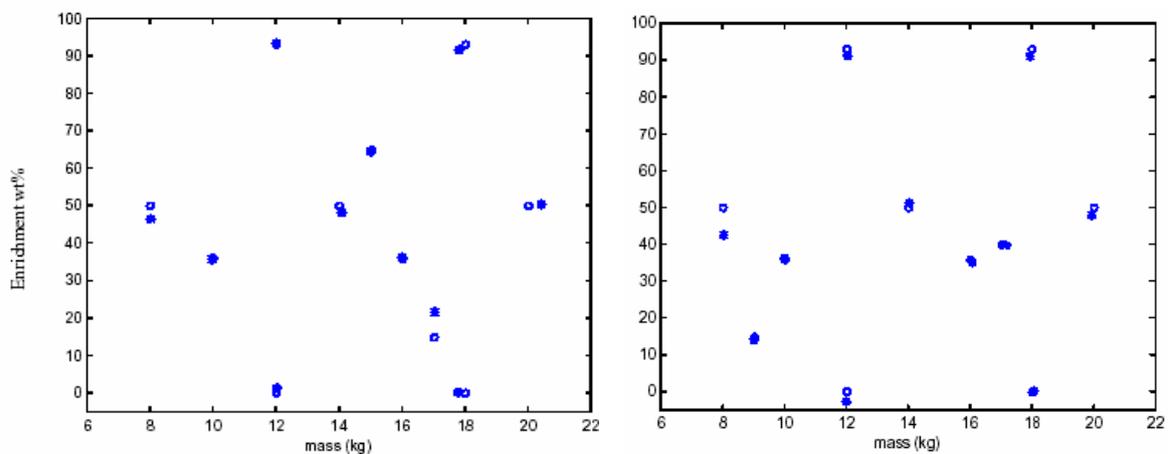


Figura 35. Resultado de predicción de material radiactivo con RNS.

Los resultados de esta aplicación indican que este sistema híbrido (SH) es más efectivo que los métodos tradicionales de regresión usados. El error del SH en la predicción de las masas es menor que 1% y de las concentraciones de los elementos radioactivos varía en el rango de 8% a 14%, mientras que los métodos de regresión predicen la masa en un rango de error de 1.08% a 1.87% y las concentraciones en el rango de error de 10.5% a 43.4%.

Una **combinación de diferentes tipos de redes neuronales** se analiza en [123] para construir un **modelo no lineal jerarquizado** de análisis de espectros atómicos de emisiones infrarrojos, cuando el número de muestras disponibles son escasas. El objetivo, significativo en procesos industriales, es determinar la presencia y concentración de elementos en determinadas muestras.

Este modelo se implementa en tres líneas de investigación principales:

- Análisis cualitativo, identificación de elementos complejos.
- Análisis semi cuantitativo de compuestos de varios elementos.
- Análisis cuantitativo preciso de compuestos de reducido número de elementos.

El objeto de esta metodología es abordar el criterio casi generalizado, y que no siempre se puede cumplir, de que la relación entre el número de muestras del conjunto de entrenamiento y el número de parámetros ajustables en el proceso de entrenamiento, debe ser lo más grande posible. Por lo tanto, se implementan diversas metodologías para reducir el número de parámetros ajustables relacionados con el vector de entrada.

Una muestra del continuo desarrollo de la investigación de aplicaciones de RNs en el análisis espectral se observa en el número significativo de publicaciones científicas que reportan experiencias distintas en el transcurso de los últimos meses. Algunas de ellas se mencionan a continuación.

En [95] se presenta un experimento cuyo objetivo es la determinación de la concentración de fósforo en entornos naturales y flujos de aguas, para ello utilizan un perceptron multicapa entrenado con el algoritmo de retropropagación del error.

Un sistema híbrido de una RN con un sistema difuso, se propone en [3] para el análisis de compuestos. El objeto es crear un modelo de reconocimiento etiquetado de señales espectrales dinámicas, variables en el tiempo.

RNAs y un análisis de componentes independientes para el análisis de complejos espectros obtenidos en procesos de espectroscopia de imágenes de resonancia magnética con protones aplicadas al análisis de tejidos humanos y detección de incipientes tumores cerebrales se propone en [111].

En [5] se utiliza una RN del tipo perceptron multicapa para el análisis de espectros que permiten la identificación y clasificación de pacientes con diagnóstico de epilepsia. La aplicación de RNs es comparada positivamente en relación a métodos estadísticos tradicionales. Los espectros que constituyen las entradas a la RN se obtienen del resultado de clasificadores multi señal y de métodos periodogramas aplicados en pacientes.

RNs del tipo LVQ y FLVQ son implementadas en [2] para el análisis de espectros vibracionales obtenidos en procesos industriales de análisis de materiales y control.

En [118] se aplica una RN modular FF para el análisis de espectros infrarrojos obtenidos de combustibles de distintos tipos, los resultados obtenidos con la RN se compara con los de métodos de regresión, mostrando una mejor respuestas que estos. En el proceso de entrenamiento se utilizan 60 muestras de distintos tipos de combustibles diesel y 30 muestras se utilizan en la validación de la RN.

En [56] se realiza un análisis comparativo del proceso de clasificación de estrellas realizadas por un sistema experto y una RN de función radial base.

En [130] se implementan RNs en el análisis de espectros obtenidos de los productos detectados en procesos de reacciones nucleares. Las RNs actúan como clasificadores de eventos.

Una RN capaz de analizar simultáneamente espectros de dispersión de Rutherford y de procesos elásticos obtenidos de una muestra se usa en [109]. Se plantea un proceso de optimización de la arquitectura de la RN y de su proceso de entrenamiento.

En [54] se propone el método experimental de activación neutrónica, con neutrones rápidos de 14 MeV, para determinar la presencia de hidrógeno, oxígeno y carbono en materiales de hulla. Los resultados espectrales obtenidos se analizan mediante un sistema híbrido compuesto por una RN de retropropagación y un sistema híbrido.

## **2. 3) RNA, OPERACIÓN Y CONTROL DE PROCESOS EN REACTORES NUCLEARES Y PLANTAS NUCLEARES.**

En esta sección se presentan aplicaciones de redes neuronales y otros paradigmas de la inteligencia artificial en la operación de reactores nucleares y plantas nucleares, principalmente en las siguientes líneas:

- Optimización y control de la operación del reactor y del propio núcleo.
- Desarrollo de sistemas de control y detección de imprevistos y situaciones anómalas con el objeto de lograr el mejor rendimiento operacional y evitar riesgos de accidentes.
- Implementar la optimización en el proceso del combustible del reactor.

Las primeras aplicaciones de RNAs en el control y operación de plantas nucleares de potencia data de comienzo de los años 90, destacándose los trabajos [72], [73] y [74] que informan de aplicaciones pioneras de redes neuronales en los procesos de operación y control en plantas nucleares de potencia. En [72] se presenta la aplicación de redes neuronales de propagación hacia delante y emplean el algoritmo de retropropagación del error en el entrenamiento de la red, y en [73, 74] utilizan RNs recurrentes en la implementación de sistemas dinámicos en procesos de monitoreo operacional y control del funcionamiento en plantas. Estos trabajos constituyen aplicaciones pioneras en este ámbito de la ingeniería nuclear.

En [86] se propone un sistema formado por dos redes neuronales multicapas (feedforward) de propagación hacia delante modificada - que los autores denominan red “jump”, con el objeto de detectar, en tiempo real, situaciones anómalas y desconocidas que surjan en la operación de un reactor. La estructura de esta red “jump” se muestra en la Figura 36, donde el aspecto novedoso es que cada neurona de una capa determinada está conectada a todas las neuronas de las capas precedentes.

El uso de un sistema formado por dos redes de este tipo se debe al gran número de variables complejas presentes en la operación de un reactor.

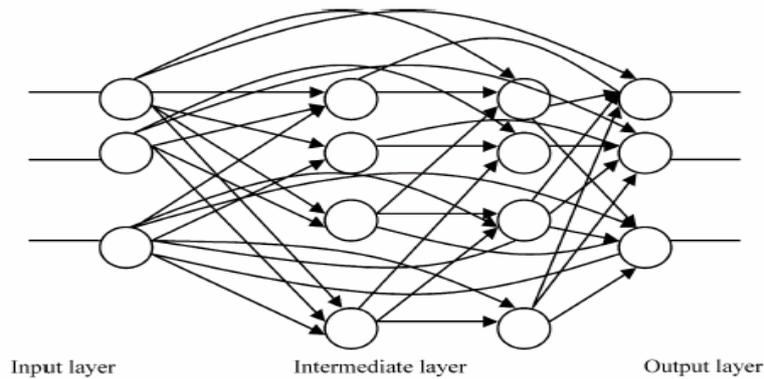


Figura 36. RNA Jump

La primera red tiene la misión de realizar una identificación dinámica a partir de un conjunto limitado de entradas constituidas por medidas recientes de cada variable. La segunda red se utiliza para la validación instantánea de lo realizado por la primera red, precisando cuál es el evento desconocido que ocurre, o bien, expresa un “no lo sé (don’t know)” ante una situación desconocida en el proceso de entrenamiento, lo que busca reducir la posibilidad de una mala clasificación.

La validación de esta metodología se hizo a través de la identificación de eventos relacionados con 17 fenómenos transitorios previamente establecidos para una planta nuclear de potencia, simulada con un reactor de presión de agua (PWR).

Estas situaciones se dividen en dos grupos, uno de ocurrencia de shutdown en el reactor y el otro no que son tratadas por cada subsistema. Y se constituyen dos grupos de entrenamiento para cada nivel: el primero con 480 pares conocidos de entrada – salida sin ruido, y 2500 con ruido y el segundo con 360 y 1800 respectivamente.

Ambas redes fueron entrenadas con el algoritmo de retropropagación. Y los parámetros de la red se pueden considerar bien definidos después de un número alto de simulaciones. Después del entrenamiento de la red se presenta la máxima desviación – es decir, la diferencia entre el valor de la variable y su valor de referencia, para cada variable de entrada, la que se mantiene en un rango razonable, a excepción de la variable catalogada “no conocida” donde la desviación máxima es muy alta. En este sistema las entradas la constituyen valores asociados a cada una de las variables transitorias definidas y las salidas indica, con un criterio de selección, la presencia o no de esa variable transitoria en el proceso del reactor

Las plantas nucleares tienen una naturaleza no lineal compleja y con interacciones multivariantes. Por esta razón en [16] se propone un controlador no lineal de la operación del núcleo del reactor, sustentado en un algoritmo de control heurístico que utiliza una red neuronal recurrente (RNN – recurrent neural network) y un sistema difuso basado en el conocimiento experto y la experiencia operacional.

El control inteligente del núcleo del reactor que se propone incluye:

- Un modelo de red neuronal recurrente para el núcleo,
- Un generador de maniobra del control rod group (CRG),
- Un sistema difuso y conocimiento óptimo del CRG

El objeto de la RNN es predecir el comportamiento del núcleo del reactor. Y el Sistema Difuso considera todas las maniobras del CRG y propone las maniobras óptimas para el CRG en el siguiente intervalo de tiempo. La red opera en línea en tiempo real con la planta, confrontando y recibiendo información cada cierto tiempo.

En la Figura 37 se presenta la estructura de un controlador inteligente del núcleo del reactor. Los pasos especificados se ejecutan en cada momento en que el controlador se encuentre con un imprevisto o algo inesperado en la operación del núcleo del reactor. Como se puede observar el sistema incluye seis pasos o etapas entre ocho módulos clasificados:

- Los módulos 1 y 2 constituyen las entradas del controlador,
- El módulo 3 es usado como el generador de maniobra del CRG,
- El módulo 4 representa el modelo de red neuronal usado para identificar la planta. Este modelo identifica cuatro variables dinámicas características del estado del núcleo del reactor, que permiten establecer la estabilidad operacional: la potencia térmica, reactividad, oscilaciones Xe y el pico de potencia. La estructura 33-78-78-78-4 indica una capa de entrada (33 neuronas), 3 capas ocultas (78 neuronas cada una) y una capa de salida (4 neuronas). El modelo de red es una RNN no lineal auto-regresiva.
- El módulo 5 calcula los parámetros identificatorios de los imprevistos que predice la red, y el módulo 6 consiste en un sistema difuso que analiza cada uno de los imprevistos generados en el CGR

- El módulo 7 debe encontrar la maniobra operacional óptima para el siguiente período la que será implementada en el módulo 8.

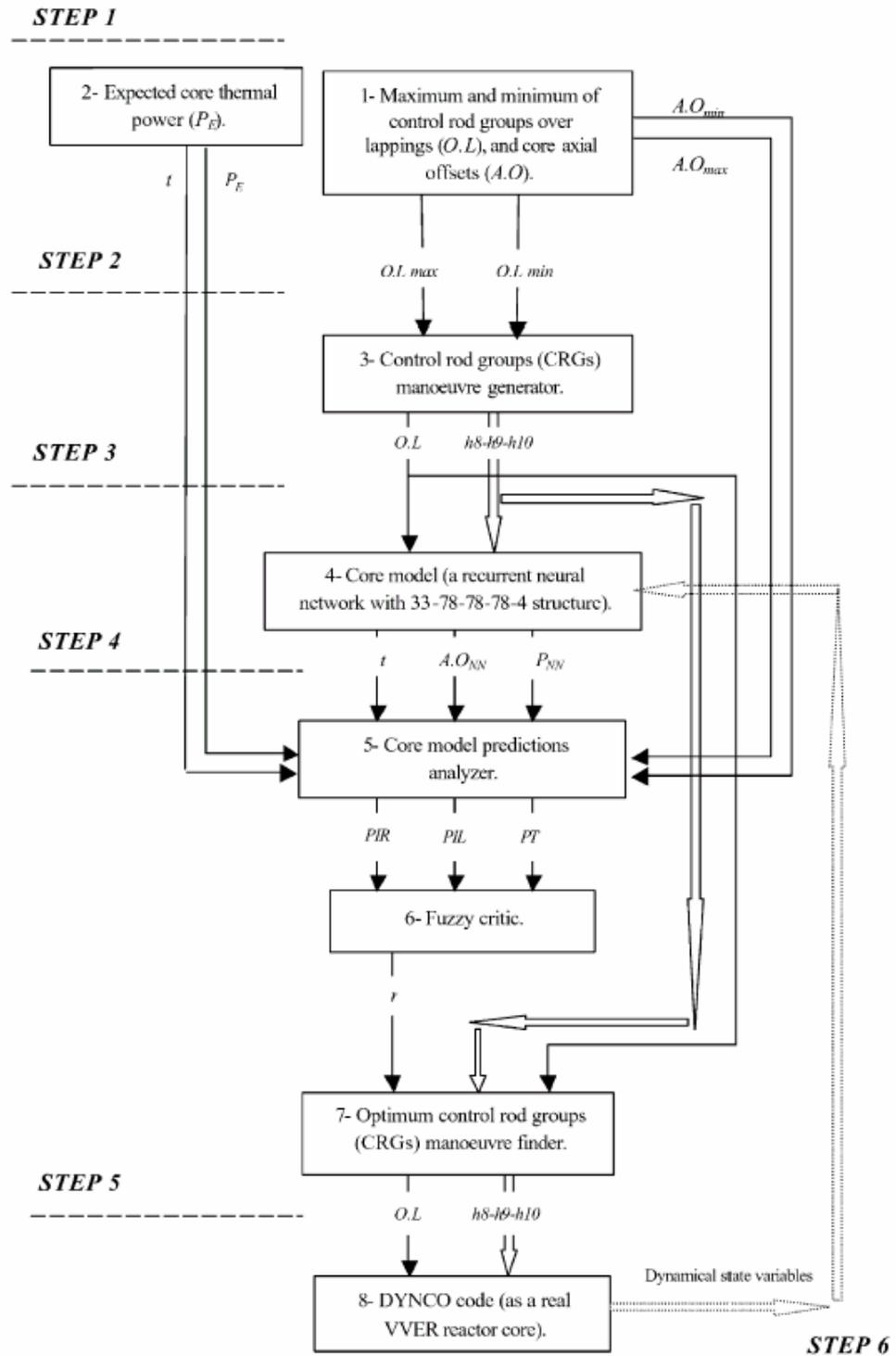


Figura 37. Estructura de controlador inteligente del núcleo de un reactor

La red fue entrenada fuera de línea usando 64 imprevistos generados por un código computacional externo. Y el elemento central del sistema difuso lo constituyen las 27 reglas – base (del tipo IF – THEN) escritas por un experto.

Una aplicación de RNAs combinadas con algoritmos genéticos en el ámbito de la operación de reactores y plantas nucleares relacionada con el proceso de combustible se desarrolla en los trabajos ([99-102], [119] y [134]). En el primer grupo de estos trabajos se utiliza un sistema híbrido de un algoritmo genético (AG) por un lado, y una Red Recurrente Multiestado (RNRME) por otro, acoplados a otra RN de propagación adelante, para optimizar el proceso de recarga de combustible en el reactor. La RN de propagación adelante (RNPA), entrenada con el algoritmo Backpropagation, se usa para estimar el comportamiento del reactor en el proceso, aprendiendo la actividad de un simulador (PRESTO) gobernado por un sistema de ecuaciones diferenciales. El AG y la RNRME, de forma independiente, realizan una búsqueda inteligente de la recarga óptima del combustible, usando la otra RNPA ya entrenada para evaluar las diferentes soluciones que se proponen.

Se proponen 3 RNPA, que usan diferentes parámetros como salidas. Una red evalúa el proceso de recarga en el inicio del ciclo (BOC – beginning of the cycle) y la segunda red evalúa el proceso al final del ciclo (EOC – end of the cycle). En el BOC se consideran los parámetros,  $K_{\text{eff}}$  (effective multiplication factor) y el PPF (power peak factor) y en el EOC se predicen,  $K_{\text{eff}}$  y los límites térmicos MCPR (minimal critical power ratio) y MLHGR (maximum linear heat generation rate). La tercera Red aprende ambos casos simultáneamente, con los 5 parámetros citados como salidas.

Las RNs implementadas son de retropropagación de 3 capas:

- Capa de entrada, 111 neuronas que corresponden al valor de enriquecimiento promedio de Uranio, de los 111 elementos de combustible en un cuarto de núcleo del reactor, ubicados en su correspondiente canal.
- Capa de salida, 2, 3 o 5 neuronas ya indicadas.
- Capa oculta, tiene un número de neuronas determinadas experimentalmente, tras varios experimentos previos, se consideran 10 neuronas ocultas.

Los mejores resultados se obtienen con la RNPA de 5 salidas.

Para el entrenamiento de la red, con el algoritmo de retropropagación del error se utilizaron 1500 recargas aleatorias, generadas a partir de recargas reales de una Central Nuclear, obteniendo permutaciones aleatorias de los elementos de combustible en la recarga real. Se usaron 1200 para entrenamiento y 300 como test.

El algoritmo genético por un lado, y la RNRME por otro, son optimizadores directos, que usan para evaluar las soluciones que proponen en cada iteración, la RNPA ya entrenada. Los resultados mejoran ostensiblemente las recargas realmente utilizadas en el reactor, en todos los ciclos considerados.

Los autores han usado también algoritmos genéticos y sistemas basados en colonias de hormigas para la optimización del proceso de las barras de control.

En [43] las RNAs se aplican en la predicción de la distribución de potencia de un PGR. El CPD (channel power distribution) que es una función de la reactividad del reactor y cuya predicción depende de un gran número de parámetros – que son los canales de distribución de potencia, que deben ser determinados a partir de un número reducido de variables – la configuración de cuatro barras de control, lo que demanda tiempo y trabajo computacional. En este contexto se aplica una red neuronal de propagación hacia delante de tres capas (feedforward NN), con 4 neuronas de entradas que se relacionan con la posición de barras de regulación y 306 neuronas en la capa de salida que corresponden a la distribución de potencia en los 306 canales de un reactor PHWR, y el número de neuronas (10) en la capa oculta es relativo, ajustable al resultado deseado. Como función de activación se utiliza la función sigmoide

La red es entrenada con el algoritmo de retropropagación del error, y se constituyen un conjunto de entrenamiento 25 pares con posiciones escogidas de las barras de ajuste y 99 con posiciones aleatorias. Y 150 con posiciones aleatorias de las barras de ajuste constituye el conjunto de test. Cada par en este conjunto tiene 4 entradas y 306 salidas. La distribución del error en la predicción indica que el 74% de estas tiene un error inferior al 1%, y sólo el 2.4% superior al 2%.

La predicción de esta aplicación se compara con las hechas por el código computacional PHANTOM – CEMESH para el análisis operacional detallado de los reactores de potencia. La predicción del Canal de Distribución de Potencia es generado por la red en 0.6 segundos y por CEMESH en 5 minutos.

En [8] se utiliza una red neuronal de retropropagación de tres capas, como la mostrada en la Figura 38, para la predicción de la cantidad de productos fisionables liberados (en este caso  $^{134}\text{Cs}$ ) en reactores de potencia de tipo CANDU (Canadian Deuterium Uranium) y en LWR (Light Water Reactor). La cantidad de productos fisionables de Cs, expresada como fracción de todos los productos fisionables (varía entre 0 y 1), constituye la salida de la red (1 neurona). El número de nodos en la capa de entrada son las variables de las que depende la salida, como por ejemplo la temperatura del combustible, tasa de cambio de temperatura, peso del fluido, etc., y se consideraron 14 nodos de entrada en el tipo CANDU y 5 en el LWR más un bias (que se consideró 1.0) que tiene por objeto acelerar la convergencia de la red. El número de nodos (4, o 5) en la capa oculta es optimizado de acuerdo a los resultados. Como función de activación se utiliza la tangente hiperbólica.

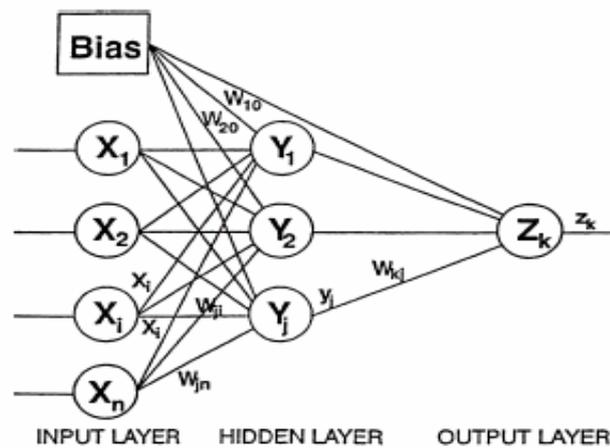


Figura 38. Estructura de RN usada en [8]

El entrenamiento de la red es supervisado y se considera para ello un conjunto de pares etiquetados (386) con entradas determinadas y la salida conocida. Los pesos iniciales fueron tomados aleatoriamente, y el conjunto de test considera 29 pares, en el tipo CANDU. En el proceso de entrenamiento se minimiza el error cuadrático medio con el algoritmo de la regla delta modificada, que se presenta en forma detallada en [8]

Luego del proceso de entrenamiento se establece que un factor muy determinante en la salida es la temperatura del combustible. Y las predicciones se validan con un error

absoluto promedio de 0.054, este error representa la diferencia entre la medida experimental y el valor que predice la red.

Una red neuronal de propagación hacia adelante entrenada con el algoritmo de retro propagación del error se utiliza en [49] con el objeto de optimizar el proceso de recarga del combustible de un reactor nuclear, obteniendo la configuración más adecuada de los elementos de combustible en un reactor de potencia PWR. Esta red tiene tres capas: entrada (21 neuronas) – oculta (número de neuronas optimizado) – salida (168 neuronas). Como función de activación se utiliza la función sigmoide en cada neurona y la red es entrenada en forma supervisada con el algoritmo de retropropagación.

Las neuronas de entrada corresponden a las 21 posiciones posibles de los elementos de combustible en un 1/8 del núcleo, y el valor que se ingresa en cada neurona es el denominado factor de potencia media para cada elemento de combustible en la posición especificada y las 168 neuronas de salida considera las posiciones adecuadas de todos los elementos de combustible en el núcleo. Cada neurona de salida toma el valor 1–activada, ó 0–desactivada. Como conjunto de entrenamiento se usan 100 configuraciones de combustible conocidas. Este estudio se presenta como un análisis preliminar que busca verificar la aplicación metodología.

La factibilidad de automatizar el proceso de inspección de los elementos de combustible nuclear, previo a su uso en el reactor, mediante redes neuronales se investiga en [69]. Con este objeto se analiza la aplicación de tres tipos de redes neuronales, que realizan una clasificación de imagen de los elementos de combustible en buenos y defectuosos. Para ello se diseñan dos redes de propagación hacia adelante de tres capas, entrenadas en forma supervisada con el algoritmo de la regla delta generalizada, y como función de activación en toda la red se usa la función sigmoide. También se analiza la aplicación de una red auto organizada con entrenamiento no supervisado del tipo ART2 y una red difusa ARTMAP con entrenamiento supervisado.

De acuerdo a los resultados obtenidos en esta aplicación se deriva que con una red neuronal de propagación hacia adelante, entrenada adecuadamente en forma supervisada, se obtienen resultados exitosos. Para el análisis se seleccionaron 252 elementos de combustible, y de cada cual – en relación a su geometría, se configuran cuatro niveles de imágenes, y un conjunto de 39 factores de imagen definitoria de cada elemento – que

representan las entradas a la red (39 neuronas), permite su clasificación en bueno o defectuoso – que es la salida de la red (2 neuronas). La red tiene una capa oculta y el número de neuronas es optimizado a través de un proceso de minimización de error. El tiempo de entrenamiento en un Power Macintosh 8500/120 fue menor de 5 minutos para 120 elementos de entrenamiento y el proceso alcanza 5000 ciclos y el valor del error RMS se estabiliza en 0.3%. En el proceso de test el 90% de los recipientes de combustibles bueno se clasifican bien y el 80% de los recipientes defectuosos son bien clasificados.

En [25] se utilizan dos redes neuronales de propagación hacia adelante, entrenada con el algoritmo de retropropagación, como interfases entre un simulador compacto de la operación de una planta nuclear y un sofisticado código computacional que analiza los accidentes y fenómenos, o imprevistos, transitorios en el proceso de operación de la planta. La función de activación utilizada en cada red es la función sigmoide.

La primera red tiene por misión ajustar y corregir las variables y datos que el simulador compacto entrega al código computacional. Las entradas a la red la constituyen 45 variables operacionales que permiten detectar y analizar situaciones dinámicas transitorias y accidentes. Las salidas son los valores corregidos de estas variables (45 neuronas). La arquitectura de esta red es : entrada–3 capas ocultas–salida, (45–54–35–54–45).

La segunda red debe predecir el mínimo valor del DNBR (departure from nuclear boiling ratio), para 10 posibles accidentes seleccionados previamente. Las entradas a la red se relacionan con los siguientes factores: presión del sistema, temperatura del núcleo del reactor, transferencia de calor y flujo neutrónico, y la salida es el valor del DNBR. Esta red tiene: entrada (4 neuronas) – capa oculta (9 neuronas) – salida (1 neurona).

El conjunto de entrenamiento de la primera considera 250 casos de accidentes bien conocidos y el entrenamiento concluye cuando el error cuadrático medio es de  $1.0 \times 10^{-6}$ , y en la segunda red se utilizan los mismos 250 casos y el entrenamiento se detiene cuando el error cuadrático medio es  $2.5 \times 10^{-6}$ .

Algunas virtudes que se mencionan sobre esta aplicación son:

- La obtención de resultados computacionales del simulador son más precisos.
- La integración en una sola etapa de cálculos algorítmicos múltiples para determinar el mínimo valor del DNBR.

En [45] se desarrolla un sistema para la identificación y clasificación de fenómenos dinámicos transitorios en la operación de un reactor de potencia que incluye una red de propagación hacia delante con dos capas ocultas, entrenada con el algoritmo de retropropagación, y se analiza su funcionamiento con datos ingresados en línea y con un preprocesamiento de datos. En el conjunto de entrenamiento se utilizaron 20 tipos de imprevistos transitorios conocidos que representan la salida de la red y 29 en el conjunto de test de los cuales 9 eran desconocidos. Y como entrada a la red se consideran 17 tipos de variables características de la operación del reactor y las salidas son los posibles imprevistos transitorios, dando como respuesta 0–no presente y 1–presente, para cada imprevisto. Como función de transferencia se usa la función sigmoide y los datos de entrada son normalizados en  $[0, 1]$ . Así, la arquitectura de la red es : entrada (17 neuronas) – 1ªcapa oculta (35 neuronas) – 2ªcapa oculta (25 neuronas) – salida (20 neuronas).

La red fue entrenada en una serie en el tiempo de 80 períodos, y si se consideran los 17 datos de entrada se tiene un total de 1360 datos para el entrenamiento. La red, también fue entrenada en base a un procesamiento previo de los datos de entrada, con una transformada discreta de Fourier, lo que deriva en una reducción del costo y no disminuye la calidad de la respuesta.

El entrenamiento de la red se detiene cuando el error cuadrático es menor que 0.02.

En [73] se implementa una red neuronal recurrente diagonal, de tres capas, en el control de la temperatura en la operación de un reactor, ya que esta red, según los autores, sería un sistema más dinámico y adecuado para la complejidad del problema, en comparación a las redes feedforward comúnmente aplicadas en estas situaciones. Y el proceso de entrenamiento, que se basa en un algoritmo de aprendizaje dinámico adaptativo que incorpora al algoritmo de retropropagación una tasa de aprendizaje adaptativa para producir una convergencia más rápida.

La red neuronal recurrente se aplica en dos líneas operacionales como controlador neuronal (DRNC) y como identificador neuronal (DRNI), donde a cada línea está asociada una red, y las entradas del identificador neuronal la comprende la salida del controlador neuronal.

La red en el DRNC tiene una estructura de: entrada (4 neuronas) – oculta (9 neuronas) – salida (1 neurona), y la red DRNI: entrada (2 neuronas) – oculta (5 neuronas) – salida (2 neuronas). Las entradas al DRNC son: el nivel de potencia deseado, la señal de ganancia de reactividad, la señal de control de retraso y la salida de retraso de la planta y la salida corresponde a la señal de control que ingresa a la planta. Y las entradas en el DRNI es la señal de control generada por el DRNC y la salida de retraso de la planta y las salidas la constituyen la clasificación de estas entradas.

En esta dirección, en [74] se realiza una comparación entre el funcionamiento de redes neuronales recurrentes del tipo diagonal, recurrentes totalmente conectadas y las feedforward, concluyendo sobre las ventajas que presentaría la red recurrente diagonal

Una red neuronal de Hopfield continua en conjunto con un annealing simulado (SA) se utiliza en [115] para optimizar la configuración del combustible nuclear en PWR. Las entradas a la red corresponden a  $22 \times 22 = 484$  neuronas que se relaciona con las 22 ubicaciones posibles de los elementos de combustible en un 1/8 del núcleo del reactor. Las funciones de energía  $E$  se consideran en forma similar a problema del vendedor viajero tratado por Hopfield en 1985. La energía depende de la salida de cada neurona y de dos parámetros  $A$  y  $D$  que se ajustan en base al método de optimización del error. Se describen las ecuaciones que se utilizan para la convergencia de la red, que en todas las neuronas aplica una función de activación sigmoide. Después de que la red converge cada neurona asume el valor de 1 ó 0, si el elemento de combustible está o no en la posición correspondiente. En la aplicación se consideran los parámetros  $A = 1000$ ,  $D = 500$  y  $\alpha = 1$  y la energía varía entre 0.12 y 0.3, y después de la convergencia se obtiene

$E = 0.1402$ . Valor que se compara con la energía de configuración propuesta por el constructor (KWU, 1975), se concluye que la solución encontrada mediante la red de Hopfield es óptima. La magnitud de la tarea abordada puede dimensionarse si se considera que en el núcleo de un reactor de este tipo hay cerca de 190 elementos de combustible y por ende se tienen  $190!$  posibles configuraciones las que se pueden reducir a  $10^{32}$  si se consideran los factores de simetría.

En [114] se investiga la aplicación de 4 tipos de redes neuronales, combinadas con aproximaciones difusas para la clasificación de variables dinámicas transitorias y prevención de accidentes en plantas nucleares de potencia. Las redes neuronales estudiadas son:

- Función radial base (RBF),
- Función radial base en cascada,
- Red neuronal autoorganizada,
- Red neuronal recurrente.

Los dos primeros tipos de redes se combinan con racimos, o agrupamientos difusos. El agrupamiento difuso se realiza para dividir el espacio de variables a considerar en la clasificación de los imprevistos transitorios y se consideran tres agrupamientos difusos que alimentan las entradas de tres redes RBF independientes. De esta forma cada red RBF tiene una entrada por cada agrupamiento y una salida por cada clase de eventos a clasificar, y la red se entrena para reconocer cada clase de eventos. Y la aplicación combinada de tipos diferentes de redes puede superar las limitaciones que tiene la aplicación individual de los prototipos antes mencionados.

La motivación esencial de esta aplicación es la minimización del tiempo entre la detección de situaciones anómalas y la implementación de la acción correctiva.

En [134] se analiza las ventajas comparativas, en cuanto a costos y tiempo, que presenta la acción de una RNA para diagnosticar situaciones de defectos y fallas en procesos de combustibles complejos, como es el caso de las plantas nucleares. El requerimiento que se le plantea a la red es su capacidad de clasificar condiciones de fallas, previo entrenamiento en base a un conjunto de experiencias definidas por un experto.

En esta investigación se realiza una comparación de diversas aplicaciones que incluyen redes neuronales del tipo: perceptron multicapa (MLP – multi layer perceptron) y la función radial base (RBF – radial basis function), en el diagnóstico de situaciones de fallas no catastrófica en la operación de procesamiento de combustible nuclear. Concluye que la clasificación es mejor con la RBF y que su tiempo de entrenamiento es inferior a del MLP, y que se produce una reducción de tiempos y costo si se realiza un procesamiento previo de los datos de entrada con el objeto disminuir su número. La red

consiste en 10 entradas, 12 centro y 7 salidas – una por cada tipo de falla seleccionada. Los datos de entrada provienen de datos previamente procesados por otras redes. El RMS para la salida de la red fue de 0.085.

En [69] se presentan dos tipos de redes auto organizadas ART-2 con entrenamiento no supervisado y ARTMAP difusa con entrenamiento supervisado, en una aplicación de automatización de la inspección de recipientes de combustible nuclear.

ART-2 tiene por entrada 4 conjuntos de datos, dos para recipientes buenos y dos para recipientes malos. Y cada conjunto se compone de 39 factores de imágenes, previamente definidos, característicos de los recipientes. La respuesta es 0 para un recipiente bueno y cualquier otra para uno defectuoso. La tasa de clasificación correcta es 80%.

ARTMAP, se diseña en base a un par de módulos difusos ARTa y ARTb y un modulo de interfase entre ambos o capa Map-field que asocia las categorías de reconocimiento de ARTa y ARTb, y si hay correspondencia entre ambos módulos entonces MAPf-field aprende. La red ARTMAP obtuvo una tasa de 80% de clasificaciones correctas.

En [93] se aplica una red neuronal auto-asociativa de propagación hacia delante con entrenamiento inicial supervisado, como parte integrante de un sistema de monitoreo híbrido, formado por la red neuronal y un sistema experto, de un reactor. La red tiene 3 capas: entrada, oculta y salida, con 22 nodos de entrada, 25 ocultos y 22 nodos de salida. Las señales de salida en cada ciclo constituye la respectiva señales de entrada en el ciclo siguiente. El objetivo principal del monitoreo del funcionamiento de un reactor nuclear es para identificar el estado operacional instantáneo de la planta a través de determinadas señales analógicas de proceso. En un reactor (PWR – pressurized water reactor) de agua a presión estas señales son alrededor de 90 y se envían a una estación de trabajo especial cada dos segundos. De estas 90 señales se seleccionaron las 22 más significativas para la operación del reactor y fueron usadas en las entradas para modelar la red neuronal tal que pueda predecir la salida del próximo ciclo.

El entrenamiento inicial de la red se hizo con 1559 ejemplos, y se hicieron 600 ciclos por ejemplo. Después del entrenamiento inicial se define como nivel de severidad  $1.25e_m$ , donde  $e_m$  es la máxima desviación alcanzada en el proceso de entrenamiento. Este

valor de 1.25 es una medida de la precisión de la respuesta de la red. Y la operación de la planta se considera normal si la diferencia entre la señal medida y la señal predicha es menor que el nivel de severidad. Este sistema híbrido se reporta como una ayuda importante para los operarios de una planta, ya que este sistema detecta las anomalías como mucho más rapidez que los sistemas convencionales usados.

En [104] se implementa un Algoritmo Genético (AG) como técnica potente de optimización basado en los principios naturales de evolución y selección de especies. El AG tiene variadas aplicaciones en el ámbito de la ingeniería nuclear, en especial en temas relativos a la operación y control de reactores nucleares. Se resaltan las ventajas del AG en relación a la aplicación de métodos tradicionales en el plan de optimización del núcleo del reactor, como también, se explora el uso del Island Genetic Algorithm (IGA) basado en la utilización de arquitecturas paralelas, y las ventajas que tiene sobre el tradicional AG fundamentado en estructuras no paralelas (Simple Genetic Algorithm – SGA) .

Un módulo basado en inteligencia artificial se propone en [11], para que asista al operador de un reactor nuclear, en la identificación de accidentes e imprevistos dinámicos transitorios. En particular, se usan redes neuronales de tipo probalístico – de las que no se dan detalles-, en la identificación y clasificación de estas situaciones no esperadas. Y con el objeto de minimizar el error de clasificación se entrena una determinada red para cada situación específica. Se consideran 8 imprevistos dinámicos transitorios de 36 más frecuentes definidos por la Comisión Reguladora de Energía Nuclear de USA.

Para cada escenario de determinado accidente, de los 8 previamente definidos, se establecen tres niveles de severidad: cambio significativo, cambio menor y sin cambio. Y estos niveles se relacionan con dos niveles de potencia: 100% y 50%. Es decir las redes se entrenan en torno a 48 situaciones transitorias específicas. La salida de la red es 1 si el accidente e imprevisto está presente y 0 en caso contrario.

La investigación en aplicaciones de metodologías inteligentes, en particular de RNas, relacionadas con la operación de reactores y plantas nucleares continúa un desarrollo creciente como se observa en los recientes artículos científicos publicados.

En [9] se presentan dos metodologías para el estudio y la optimización de estructuras de energías en las aproximaciones multi grupos en el análisis de radiaciones de partículas neutras (neutrones y rayos gama). Este proceso preocupa a investigadores en el ámbito de reactores nucleares y técnica nuclear en general. La primera metodología se basa en códigos computacionales determinísticos y la segunda en redes neuronales, y ésta se implementa con el objetivo principal de ahorro de tiempos y costos computacionales.

Un sistema híbrido neuro-difuso se implementa en [47] con el objeto de detectar defectos en reactores nucleares y su posterior clasificación. El módulo difuso se utiliza en el proceso de inferencia y su información pasa a una RN la que reconoce y clasifica el evento. Este es un proceso de evolución dinámica. En esta experiencia se usan RNs de propagación hacia delante y RNs recurrentes.

En el artículo [17] se describe un método original basado en RNs para resolver las ecuaciones cinéticas en un reactor nuclear. Se aplica una RN Celular multicapa. Este método permite el cálculo en línea de la distribución espacial temporal del flujo de neutrones en el núcleo del reactor. Este método se propone con el objeto de reducir los costos en los procesos de control en los reactores nucleares.

En [75] se propone un sistema híbrido de algoritmos genéticos y RNs que tiene la particularidad de permitir que las entradas a la red constituyan antecedentes que evolucionan. Este sistema se aplica como un aproximador funcional para determinar la mejor función crítica del flujo de calor en el proceso del combustible en un reactor nuclear.

Una RN para el análisis de señales ultrasonoras [70] obtenidas de la detección de defectos de materiales mediante métodos ultrasónicos, en particular se aplica a la evaluación del tubo generador de vapor en un reactor nuclear.

En [77] se implementa una técnica de monitoreo de diversas componentes, combinando RNs para detectar señales acústicas, con el objeto de evaluar la degradación de materiales componentes de un reactor nuclear como válvulas y otras piezas.

Un código computacional (programado en C++) basado en RNs ( NAROAS - Neural Network Advanced Reliability Advisory System ) se presenta en [52] y tiene por objeto alimentar un sistema de soporte de decisión, que al detectar averías en procesos normales o de defectos permita la determinación de políticas correctas de mantención. Se utilizan RNs de Hopfield. El sistema detecta en forma rápida irregularidades y permite la intervención oportuna.

Un sistema híbrido [53] constituido por un algoritmo genético y dos RNs se implementan para simular el comportamiento de varios parámetros físicos en la operación de un reactor. Este SH opera en forma dinámica previniendo imprevistos no deseados.

Un método para evaluar las razones de decaimiento en el vapor de agua de un reactor nuclear usando el método de descomposición del valor singular se propone en [124]. Esta técnica permite analizar señales a partir de los componentes de neutrones presentes en el ruido y en la clasificación de esta componentes se utiliza una RNA. El objeto de esta metodología es el análisis de estos procesos en tiempo real.

En [116] se implementa una RN de propagación hacia delante totalmente conectada para predecir la velocidad de fluidización en el proceso de un reactor de potencia, correlacionando diversas variables operacionales en las entradas de la RN.

#### **2. 4) RNA EN DOSIMETRÍA Y ESPECTROMETRÍA DE NEUTRONES.**

Los controles continuos de dosis de radiación nuclear en ambientes y personas que interactúan con tecnologías nucleares es una actividad permanente que obliga al desarrollo e innovación de los sistemas dosimétricos. En este contexto, en los últimos cinco años se puede apreciar un aumento creciente de publicaciones científicas que reportan e informan sobre la incorporación de elementos de inteligencia artificial, y en particular de RNAs, en sistemas de dosimetría.

En [78] y [79] se realiza un estudio en el que se propone un dosímetro personal del tipo OSL (optical stimulated luminescence) y TLD (termo luminiscence dosimeters) respectivamente, que utiliza  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:C}$  como material detector, debido a sus propiedades ópticas y de dependencias de energías, puesto que el objeto del dosímetro es, además de detectar y discriminar el tipo de radiación, medir la energía de ésta. Con este objeto el dosímetro posee 4 ventanas: una abierta y tres con determinados filtros.

La información espectral proveniente de emisiones X y gamma es analizada a través de una red neuronal de propagación hacia delante que es entrenada a través del algoritmo de retro propagación de error con una optimización Bayesiana.

La idea central planteada es la capacidad que adquiere la red, luego de un proceso de entrenamiento, de reconocer las líneas espectrales. La red es entrenada en forma supervisada considerando un conjunto de entrenamiento formado por pares etiquetados:

- Entrada – factores de respuestas, y,
- Salidas – distribución de energías.

El dosímetro se compone de cuatro áreas sensibles, o ventanas: (A1, A2, A3, A4), que mediante una técnica de filtrado permite discriminar el paso de determinada radiación, y los factores de respuestas se establecen a través de las relaciones (ver Figura 40):

$$R1 = A1/A2, \quad R2 = A1/A3, \quad R3 = A1/A4, \quad R4 = A2/A3, \quad R5 = A2/A4, \quad R6 = A3/A4$$

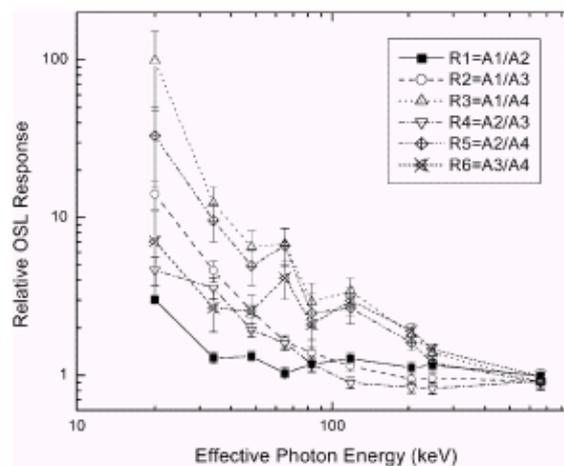


Figura 40. Respuesta de un dosímetro en función de la energía efectiva de un fotón incidente

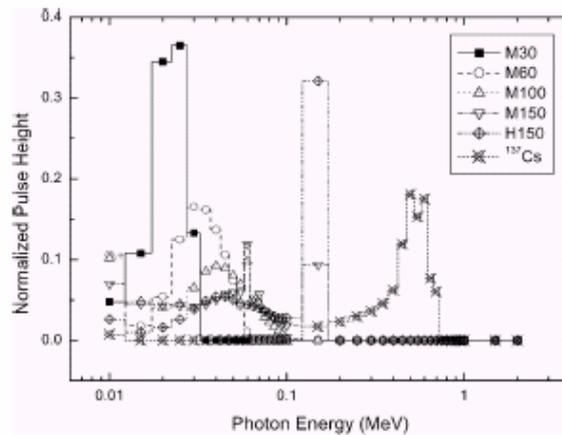


Figura 41. Curva de distribución de energía entregada por la RN después de un proceso de entrenamiento

La estructura de la red de propagación hacia delante (6–70–440–40) aplicada es:

- Entrada: 6 neuronas (factores de respuestas)
- 1ª capa oculta: 70 neuronas
- 2ª capa oculta: 440 neuronas
- Salida: 40 neuronas (número de regiones de energías en que se divide el espectro), y entrega el tipo de radiación a clasificar y la energía de ésta.

Se utiliza una función de activación sigmoide en la de entrada y una función lineal en las otras capas.

En el proceso de entrenamiento se consideran unos 125 espectros bases para conformar los conjuntos de entrenamiento y entrenar la red. Los espectros abarcan un rango de energía 10 KeV a 2 MeV, y se alcanza un error cuadrático de  $5 \times 10^{-6}$ , y en un Pentium PC dura cerca de 5 horas. Pero, una vez entrenada la red permite una evaluación dosimétrica muy rápida en relación a métodos convencionales.

En la determinación de dosis equivalentes simultáneas de neutrones y fotones, se debe discriminar en la medición de ambas partículas ya que su impacto y efecto biológico de dosis es diferente. Con este, objeto en [22] se compara la utilización de tres clasificadores de dos clases de eventos: neutrón (n) y fotón (p). Estos clasificadores son:

- RN perceptrón,
- RN de back propagation,
- Clasificador de Bayes.

La clasificación y entrenamiento se efectúa en un amplio rango de energía, de 15 KeV a varios MeV. En un problema bidimensional como el de clasificación neutrón – fotón, el criterio de separación de las dos clases se basa en una función de decisión  $D$ , evaluada para cada vector etiquetado  $X$ .

En el caso del clasificador RN perceptron (Figura 42) , se tiene que :  $X = \{x_1, x_2, x_3\}$  , donde  $x_1$  se relaciona con la energía,  $x_2$  con el tiempo y  $x_3$  es un parámetro que se puede asumir como la unidad, estas variables constituyen las entradas a la red y la salida son dos neuronas – una para el fotón y lo clasifica si  $D > 0$  y la otra para el neutrón y lo clasifica si  $D < 0$ . Y la función de decisión  $D$  está dada por:

$$D = \sum W_i X_i \quad , i = 1, 2, 3 \quad (2.12)$$

donde  $W$  es el vector de pesos y  $X$  es vector etiquetado. Y si  $D > 0$  la clasificación es correcta y si  $D < 0$  es incorrecta. El entrenamiento consiste en un proceso iterativo que que corrige los pesos hasta que todas las clasificaciones sean correctas.

En el clasificador de red neuronal de propagación hacia delante, de tres capas, las entradas y las salidas son las mismas que en la red anterior, y la capa oculta tiene 5 neuronas. La función de decisión  $D$  en este caso está dada por:

$$D = \phi_{q2} - \phi_{q1} \quad (2.13)$$

$\phi_{q2}$  y  $\phi_{q1}$  son funciones de salida, de tipo sigmoide:

$$\phi = (1 + e^{-t})^{-1} \quad (2.14)$$

Si  $D > 0$  clasifica neutrón y en cualquier otro caso fotón. La red es entrenada en forma supervisada con el algoritmo de retro propagación. El entrenamiento se detiene cuando el error cuadrático medio es menor que  $10^{-4}$ .

Cuando la razón neutrón / fotón  $> 10$  , lo que ocurre para altas energías, el error de clasificación de las RNs crece de 5% a 15% y en este caso se implementa un clasificador estadístico de Bayes, donde  $P(w_n)$  y  $P(w_p)$  son las funciones de probabilidad iniciales del

neutrón y del fotón respectivamente, y se obtienen de las salidas del perceptrón. La función de decisión en este caso está dada por:

$$D = L_n - L_p , \quad (2.15)$$

donde  $L_n$  y  $L_p$  están dadas por las expresiones

$$L_n = \int_{-\infty}^x P(x|w_n) P(w_n) dx, \quad L_p = \int_x^{\infty} P(x|w_p) P(w_p) dx, \quad (2.16)$$

En estas expresiones  $P(x|w_n)$  y  $P(x|w_p)$  son funciones de probabilidad del neutrón y del fotón. En el clasificador de Bayes si  $D < 0$  se tiene evento fotón y en otro caso evento neutrón. La evaluación general del método después de verificar las redes es que el método es adecuado y más rápido que los convencionales en dosímetros del tipo neutrón – fotón.

Para la detección de explosivos de tipos C – 4, semtex, TNT etc y drogas encubiertos en diversos materiales, se usa la técnica captura de neutrones térmicos (bajas energías) por núcleos atómicos y las respectivas emisión gamma del núcleo compuesto formado en estado excitado (prompt gamma neutron activation). En [96] se propone una aplicación de una red neuronal que permite clasificar el espectro detectado.

La técnica de detección mediante el análisis de activación con neutrones es usada con frecuencia debido al carácter no destructivo de materiales que posee.

En la Tabla 6 se muestran los materiales seleccionados de interés para el estudio de detección de sustancias ilícitas. En el caso del C – 4 el espectro de radiación gamma de altas energías abarca el rango de 2.2 MeV para el hidrógeno hasta 10.8 MeV del nitrógeno. Rango que se reedita en todos los materiales seleccionados ya que están formados por los mismos elementos, ya sean sustancias prohibidas o sustancias encubridoras de estas. Por ello el objeto de la red es determinar la presencia de las sustancias prohibidas encubiertas, luego de un adecuado proceso de entrenamiento para un reconocimiento espectral fino.

Se utiliza una red neuronal de propagación hacia delante (feedforward) con tres capas: entrada – 100 neuronas, que corresponden al espectro de entrada de 1 a 10 MeV (cada neurona abarca un rango de 0.1 MeV), oculta – 80 neuronas, definidas con el criterio de la mejor respuesta y la capa de salida – 19 neuronas, que corresponden a las sustancias de interés antes mencionadas. La respuesta de la red es binaria (0 y 1) obviando el ruido.

Para entrenar la red se utiliza el algoritmo de retropropagación. En la capa de entrada se usa una función de activación lineal y en las otras capas una función logística.

Tabla 6: Composición elemental y densidad física de algunas sustancias de interés analizadas en [96]

Physical density and elementary composition for various substances of interest		
Substance of interest	Elementary composition	Physical density (g/cm <sup>3</sup> )
Acrylic	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	1.19
Aluminum	Al	2.70
Ammonium nitrate	H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.66
C-4	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>6</sub> N <sub>6</sub>	1.83
Cellulose	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub>	1.00
Cocaine	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	1.40
Iron	Fe	7.86
Lead	Pb	11.30
Nitroglycerin	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	1.59
Nylon	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1.15
PAN	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	1.18
PETN	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	1.77
Polyethylene	CH <sub>2</sub>	0.94
PVC	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	1.19
Rubber	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>	0.94
Silk	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> O <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	0.30
Sucrose	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	0.90
TNT	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	1.65
Water	H <sub>2</sub> O	1.00

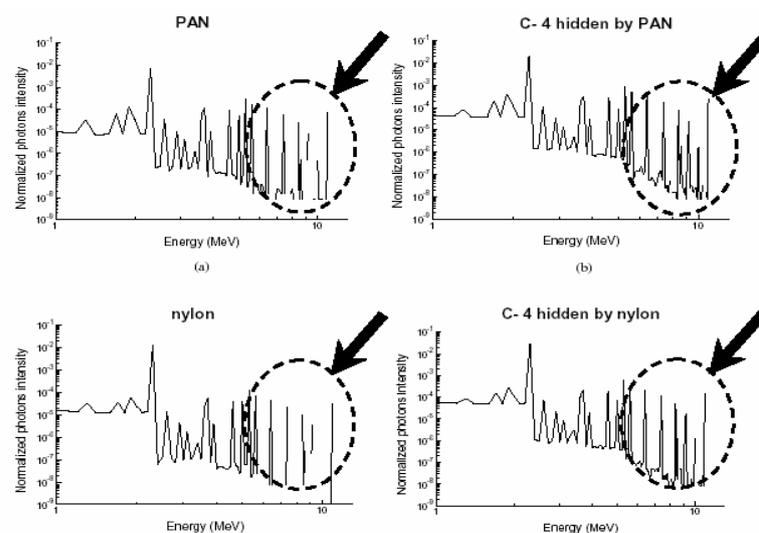


Figura 42. Espectros comparativos de C-4 encubiertos en nylon y PAN, y los respectivos espectros de los materiales PAN y nylon solos.

Y en la Figura 42 se pueden ver dos típicos pares de espectros a identificar:

- (PAN, C – 4 oculto en PAN)
- (nylon, C – 4 oculto en nylon)

La respuesta es correcta en 97.28% de los casos C–4 presentados como test.

Una técnica similar basada en un análisis de activación con neutrones seguido de un reconocimiento espectral usando redes neuronales y lógica difusa se propone usar en el futuro, en [137], para la detección de explosivos.

En [80] se reporta sobre la utilización de una red neuronal para analizar la correlación entre la sección eficaz total de captura de neutrones térmicos (bajas energías) en rocas y la presencia y concentración de K, U y Th en muestras de roca proveniente de dos lugares montañosos distintos del sur de Polonia. En esta línea, la sección eficaz total de captura de neutrones  $\Sigma_a$ , se presenta como una función de las concentraciones de los elementos de interés:

$$\Sigma_a = f(K, U, Th, \text{método}, \text{litología}) \quad (2.17)$$

El término método indica uno de los dos métodos diferentes para determinar  $\Sigma_a$

Cabe mencionar que esta correlación se puede plantear porque  $\Sigma_a$  es mucho mayor para los elementos mencionados que para los otros componentes comunes de la muestra.

Se utilizan dos redes neuronales similares de propagación hacia delante, una para cada caso investigado. Con la particularidad de que en un caso se ignora en la entrada los factores “método y litología” por su baja importancia relativa.

En la siguiente Figura 43 se muestra la arquitectura de cada red:

Entrada:	3 neuronas	5 neuronas
1ª c. oculta:	10 neuronas	11 neuronas
2ª c. oculta:	3 neuronas	3 neuronas
Salida:	1 neurona	1 neurona

Ambas redes fueron entrenadas en forma supervisada utilizando el algoritmo de retro propagación del error y la suma del error cuadrático en el entrenamiento es 0.023 y

en el test 0.046 y el coeficiente de correlación en el entrenamiento es 0.972 y en el test 0.949 y el coeficiente de relación experimental es 0.9.

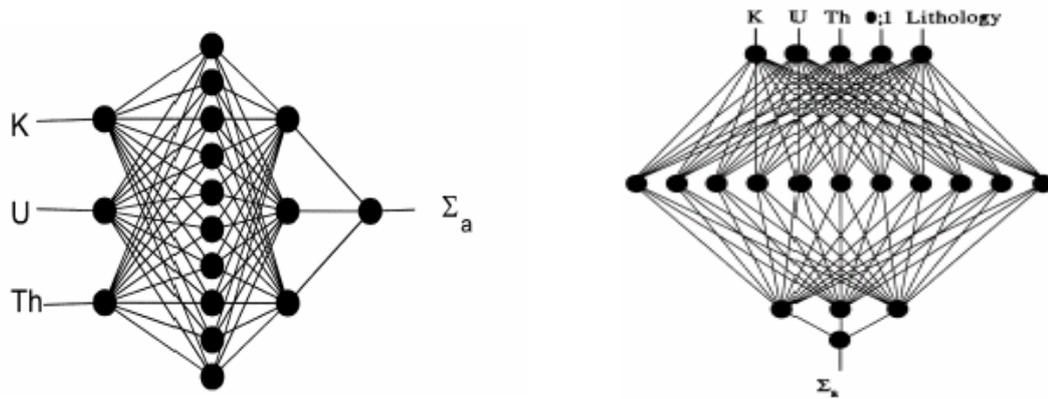


Figura 43. Estructura de RNs implementadas en el análisis litológico.

Se valora esta aplicación de redes neuronales por el buen resultado comparado con datos experimentales y por la perspectiva de su aplicación en el análisis de materiales.

Una aplicación novedosa de RNAs en el ámbito de la física de neutrones [122] consiste en el análisis de las señales obtenidas en el ruido de un espectro de neutrones de un reactor nuclear y que permite establecer, en línea, las localizaciones de inestabilidad en el núcleo del reactor. En este contexto se investiga la potencialidad de las RNAs, y en particular de una arquitectura de red de retropropagación, con tres capas: entrada – 2 neuronas, oculta – 13 neuronas y salida – 2 neuronas, para resolver el problema antes mencionado. Las entradas se construyen en base a las relaciones de las señales obtenidas de cuatro detectores ( $D_1, D_2, D_3, D_4$ ):

$$(D_4/D_2, D_4/D_3) \text{ si } D_1 \text{ se omite}$$

$$(D_4/D_3, D_3/D_1) \text{ si } D_2 \text{ se omite}$$

$$(D_3/D_1, D_2/D_1) \text{ si } D_4 \text{ se omite}$$

$$(D_2/D_1, D_4/D_2) \text{ si } D_3 \text{ se omite}$$

Y las salidas de la red son las coordenadas (x, y) de la localización de la inestabilidad en el plano que representa la configuración del combustible en el reactor.

Para el entrenamiento de la red se utilizan alrededor de 836 pares etiquetados y para la validación de esta 835, y la función sigmoide como función de activación. El número de ciclos considerados para el término del entrenamiento son cerca de 10.000 para cada composición de pares de entradas. Y el error medio para el entrenamiento es cerca  $2 \times 10^{-4}$  y para el test cerca de  $5 \times 10^{-4}$ .

La efectividad de este modelo se compara en lo relativo a su rapidez y a su operatividad en comparación con los modelos tradicionales que requieren cientos de salidas, una por cada elemento de combustible, en contraste con la red neuronal planteada que tiene dos salidas: las coordenadas ( x, y). Y se resalta el hecho que las entradas, construidas en base a la información de 4 detectores, proviene directamente de las señales de ruido.

En [12] se utiliza un perceptron lineal multicapa en el análisis espectral de neutrones en un amplio rango de energía (0.0001 eV – 10 MeV), la red se compone de tres capas con: 10 neuronas de entrada, 50 neuronas en la capa oculta y 52 neuronas de salida. El detector de neutrones utilizado es del tipo BSS – Bonner Sphere Spectrometer, que se caracteriza porque cada BS responde a determinada tasa de reacción –  $C_i$ , y en el presente caso  $i = 1, \dots, 10$ , por ello, las entradas corresponden a cada tasa de reacción de BS, y la salida corresponde a los intervalos energéticos a determinar, y el número de neuronas ocultas se ajusta experimentalmente. Para el entrenamiento se usa el algoritmo de retro propagación y se utiliza para el entrenamiento un conjunto de 44 espectros mono energéticos y 21 espectros continuos y 8 espectros para validar la red. El entrenamiento continua hasta que el error estándar es 0.0016 y se alcanza después de  $3 \times 10^5$  iteraciones. La tasa de aprendizaje fue 0.2 y el momento 0.06. Esta red es entrenada para espectros mono energéticos y para espectros continuos se utilizan la misma estructura, pero varían levemente los parámetros antes descritos. Se utiliza la función de activación sigmoide, en toda la red.

Los resultados se consideran buenos con una desviación estándar, entre la respuesta y la salida esperada que varía entre 5% y 10%, y se presenta a las redes neuronales como una alternativa real en el análisis de espectros de neutrones.

En [42] se usa una red de propagación hacia delante de tres capas entrenada con una nueva función de error en la aplicación del algoritmo de entrenamiento de retro propagación. Esta función se basa en el método del análisis del error cuadrático medio de los pesos (LMS – least mean squares),

El objeto de esta red es predecir las secciones eficaces ( $\sigma_p$  y  $\sigma_\alpha$ ) en reacciones nucleares inducidas por neutrones, del tipo:

- $\sigma_p$  – sección eficaz en reacción ( $n, p$ ), donde  $n$  es el neutrón incidente y  $p$  es el protón emitido,
- $\sigma_\alpha$  - sección eficaz en reacción ( $n, \alpha$ ) donde se emite una partícula alfa.

Se proponen distintos tipos de red que varían según por las entradas y las salidas:

- (a) entradas:  $Z$  y  $N$ , salidas:  $\sigma_p / \sigma_\alpha$
- (b) entradas:  $Z$ ,  $N$  y  $S_p / S_\alpha$ , salidas:  $\sigma_p / \sigma_\alpha$
- (c) entradas:  $Z$  y  $N$ , salidas:  $\sigma_p$  y  $\sigma_\alpha$
- (d) entradas:  $Z$ ,  $N$  y  $S_p$  y  $S_\alpha$ , salidas:  $\sigma_p$  y  $\sigma_\alpha$

donde  $Z$ ,  $N$  y  $A$  – son los números atómicos, de neutrones y de masa, respectivamente de la muestra irradiada por neutrones. Y  $S_p$  y  $S_\alpha$  son las energías de separación de los protones y partículas alfa.

El número de neuronas en la capa oculta se ajusta, en consideración de la respuesta entre 2 y 5. Y las redes son entrenadas, con el algoritmo mencionado, en base a ejemplos experimentales conocidos de secciones eficaces del tipo: neutrón – protón ( $n,p$ ), y neutrón – partícula alfa ( $n,\alpha$ ), inducidas por neutrones mono energéticos de altas energías ( $\sim 14.6\text{MeV}$ ) en núcleos pesados con número de masa, en el rango:  $40 < A < 240$ . El número de ejemplos son 171 para las reacciones ( $n, p$ ) y 114 para las ( $n, \alpha$ ).

En el entrenamiento se utiliza el modelo estándar LMS (least mean squares) de Widrow para minimizar la función de error. Se realiza una comparación entre los resultados dados por la red neuronal y los utilizados métodos paramétricos de regresión en la predicción de secciones eficaces, donde se puede validar y desarrollar esta nueva técnica en la predicción de secciones eficaces en interacciones nucleares.

La aplicación de RNAs tiene una presencia destacable en el ámbito de la espectrometría y dosimetría nuclear. Algunos ejemplos recientes de estas aplicaciones son:

En [129] se construye una RN para construir espectros de neutrones a partir de datos de diversas fuentes recogidos por un espectrómetro tipo Bonner. Se entrena la RN con 129 espectros de diferente procedencia. Las entradas a la RN son datos preprocesados provenientes del espectrómetro y la salida es el espectro de neutrones.

Una RN se utiliza para el análisis espectral de activación de materiales irradiados con flujo de neutrones [68]. La RN es capaz de relacionar la composición química del material con el espectro obtenido y las condiciones de irradiación.

Métodos estadísticos tradicionales y RNs se utilizan en [18] en el análisis de predicciones litológicas a partir de datos obtenidos por la metodología experimental de activación neutrónica. El objetivo es avanzar en la automatización de estos procesos.

Un sistema híbrido de RNs de propagación hacia adelante optimizadas con algoritmos genéticos [117] se diseñan con el objeto de determinar de presencia de elementos carbono, hidrógeno y oxígeno en muestras de hulla, las que son irradiadas por haz de neutrones rápidos mono energéticos de 14 MeV. Los datos obtenidos por el detector respectivo de la interacción neutrón-material constituyen las entradas a la RN.

RNs se usan en [120] para la clasificación de flujos en metales calientes y mezclas de aire –agua, analizadas experimentalmente mediante el método de radiografía neutrónica de imágenes, cuyos resultados, luego de un pre procesamiento, constituyen las entradas a la RN, la que clasifica los flujos respectivos en forma dinámica, es decir en tiempo real.

En [9] se reporta una aplicación de RNs con el objeto de analizar de fenómenos geofísicos estudiados mediante radiaciones de haces gama y de neutrones sobre el objetivo. La RN reconstruye el espectro a partir de los datos recogidos por los detectores y permite reconocer propiedades de salinidad y de saturación de petróleo y agua.

## **2. 5) RNAs APLICADAS A LA INTERACCIÓN DE PARTÍCULAS ALTAMENTE ENERGÉTICAS**

La aplicación de redes neuronales en el ámbito de la física de las partículas data desde 1988 con la aparición del artículo de Bruce Denby [35], y el mismo autor realiza diez años después [36] y [37] un análisis sobre el desarrollo que han tenido estas aplicaciones y sus perspectivas futuras. Las RNs se aplican en forma creciente en esta línea puesto que resultan ser una herramienta eficaz para detectar y separar fenómenos físicos de interés, o bien no conocidos, de aquellos que son conocidos o simplemente se pueden catalogar como ruido. Es decir, permite rescatar el evento a investigar del background, que por lo general es muy grande en la realización de investigaciones experimentales de partículas de altas energías, ya sea en experimentos realizados con aceleradores de partículas o de rayos cósmicos. De igual forma, pero en menor grado, las RNAs se han utilizado como instrumento efectivo complementario en el análisis de diversos fenómenos físicos en el campo de partículas de altas energías.

En estas aplicaciones las RNs se han implementado en tiempo real y también offline, y en la mayoría de los casos se usan redes del tipo de perceptrones multicapas y redes recurrentes entrenadas con el algoritmo de retropropagación.

En [85] se efectúa una comparación entre métodos tradicionales y las RNs aplicadas en la física de partículas. Para ello se tipifican dos tipos de partículas, como: +1 y -1, que se caracterizan por 4 propiedades genéricas que, a su vez, se relacionan con determinadas funciones de distribución. El método tradicional consiste en identificar que se cumplen las propiedades, en base a las funciones de distribución, para luego identificar la partícula. Y para la identificación automática se usa una red de propagación hacia delante (feedforward) con una capa de entrada (4 neuronas), una capa oculta (16 neurona) y la capa de salida (una neurona). Las entradas la constituyen las cuatro propiedades y la salida puede ser +1, -1, o bien 0 (caso de ambigüedad) en la identificación del evento. El número de neuronas de la capa oculta se ajusta para optimizar la aplicación. Se aplica en toda la red la función de activación tangente hiperbólica.

Para el entrenamiento de la red se usa el algoritmo de retropropagación ( back – propagation), y se consideran tres conjuntos de entrenamientos (5000 eventos cada uno) generados vía método Monte Carlo. En cada conjunto los parámetros usados para definir las propiedades son diferentes. Y los tres conjuntos de test, distintos a los de entrenamiento (también de 5000 eventos cada uno) permiten comparar el método convencional con la red. Y los resultados del experimento comparativo indica que la técnica de RNs, en este caso, es claramente superior a las aproximaciones tradicionales. El entrenamiento de la red, para cada conjunto de entrenamiento, se detiene después de 1000 ciclos o bien si el error cuadrático es 0.0005.

Se realiza una evaluación positiva de la red en este tipo de aplicaciones de clasificación, y se analiza el comportamiento de la red variando algunos de sus parámetros.

En [44] se realiza una aplicación de RNs a un tipo de interacción fundamental en la física de altas energías: las colisiones del tipo protón – protón

(p – p), permitiendo calcular, vía técnica de RNs, variables resultantes como diferentes secciones eficaces inelásticas y distribuciones de partículas cargadas.

Se usan dos redes neuronales de propagación hacia delante de cuatro capas: entrada, dos capas ocultas y una salida:

- La primera red (2 – 9 – 7 – 1) está destinada a calcular las distribuciones de partículas cargadas, y tiene como entradas la energía cinética total y el número de partículas cargadas y la salida la constituye la probabilidad de que se originen estas partículas con la energía cinética dada. La red tiene dos capas ocultas, y el número de neuronas por capas se ajusta en función de la respuesta deseada, y en este caso son 9 y 7 neuronas. En las tres primeras capas se utiliza la función de activación sigmoide y en la capa de salida una función de activación lineal.
- La segunda red (1 – 5 – 3 – 1) tiene por objeto calcular las secciones eficaces inelásticas, donde la entrada la constituye la energía cinética total y la salida la sección eficaz inelástica. La red también posee dos capas ocultas con número de neuronas ajustables, y en este caso tienen 5 y 3

neuronas. En las tres primeras capas se utiliza la función de activación sigmoide y en la capa de salida una función de activación lineal.

Ambas redes son entrenadas en base a datos experimentales y se usa la técnica de optimización de Levenberg- Marquardt [55] para minimizar el error cuadrático, que, según los autores, resulta más robusta que la técnica del gradiente descendiente. El entrenamiento se termina cuando la suma del error cuadrático medio es:  $4 \times 10^{-4}$  en la primera red y  $3 \times 10^{-7}$  en la segunda red.

Los resultados obtenidos con la técnica de RNs y su buena aproximación con resultados experimentales, avalan su aplicación, en si novedosa, en investigaciones de tipo fundamentales en física. Y se propone las redes neuronales como una nueva técnica para estudiar las colisiones protón – protón.

En otro tipo de investigación fundamental y de reciente origen en la física de las partículas, se aplican RNs es en el decaimiento beta doble (double beta decay) [82] que está relacionado con el estudio de las propiedades de los neutrinos, incluso sobre la posibilidad de que existan tipos de neutrinos con masa diferente de cero. El objeto de la red es identificar los decaimientos beta doble. Para ello se usa una red de propagación hacia delante (feedforward) de tres capas: entrada (180 neuronas), oculta (90 neuronas) y salida (1 neurona). Los pesos se ajustan de acuerdo a la regla delta generalizada. Y aplican en la red la función de activación sigmoide. Las entradas son eventos detectados y la salida es 1 si el evento es decaimientos beta doble y 0 si es una línea de absorción total.

Para el entrenamiento de la red se utilizan 20.000 eventos de cada tipo de fenómeno a identificar: decaimiento beta doble con energía de 1592 KeV y la línea en 1692 KeV de energía que corresponde a la absorción total. El entrenamiento de la red se completa en los  $4 \times 10^5$  iteraciones.

Se menciona la técnica de redes neuronales como un método muy eficiente en la clasificación de eventos particulares y eventos de múltiple dispersión en el estudio de la física de altas energías.

En [106] se propone una nueva estrategia de aplicación de RNAs para el reconocimiento de eventos: una definición dinámica de la topología de la red. En esta

línea se utiliza un perceptron multicapa de conectividad parcial dinámica, es decir, variable en el tiempo para cada etiqueta de entrada, y se ajusta hasta obtener la topología óptima para la salida esperada. A esta RN se le denomina perceptron dinámico (Figura 44)

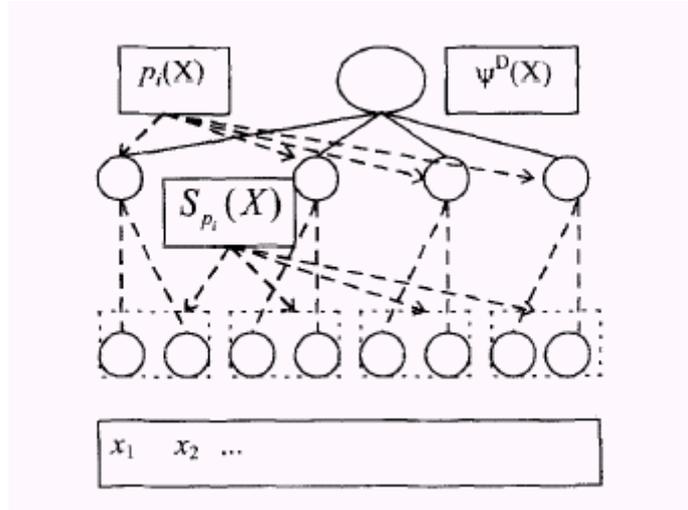


Figura 44. Estructura de un perceptron multicapa de conectividad parcial dinámica.

En el gráfico se aprecia que  $\Psi(X)$  es una función de salida y  $X$  es el vector de entrada, y se relacionan por la siguiente expresión:

$$\Psi(X) = \sum_i p_i(X) \quad (2.18)$$

$S_i(X)$  constituye una función de selección de entradas del conjunto de estas para cada  $p_i(X)$ .

Este tipo de red es aplicada al análisis de los procesos de aniquilación electrón – positrón, y que derivan en la aniquilación neutrón – antineutrón:



A esta red se le entregan tres tipos de datos de entradas: en primer lugar información topológica proveniente de elementos de detección primaria y de difícil utilización, el segundo tipo es información de eventos reales y el tercero es información de eventos Monte Carlo que simulan información de eventos  $e^+e^- \rightarrow n\bar{n}$  en rangos de energías desde 1920 MeV a 3100 MeV.

El perceptron dinámico clasificó bien el 85% de 1000 eventos Monte Carlo y el 90% de  $4 \times 10^5$  eventos reales. La clasificación de información topológica es más deficiente. Se resalta su bajo costo computacional en comparación con los métodos más convencionales.

Para la clasificación, y separación, de eventos gama ( $\gamma$ ) y hadrones [41] de determinada muestra y que son detectados en forma conjunta se construye una red de propagación hacia delante de tres capas: entrada (5 neuronas), oculta (5 neuronas) y salida (1 neurona) que clasifica el evento: 1 – evento gama y 0 – evento hadrón. Como entradas se utilizan diversas características propias de los procesos a investigar. Y el número de neuronas ocultas se define en base a la optimización de la respuesta. En toda la red se utiliza la función de activación sigmoide.

El entrenamiento de la red se efectúa vía una combinación de los algoritmos de retro propagación y del gradiente descendiente, para obtener un mejor ajuste de pesos. Como conjuntos de entrenamiento se utilizan 4000 ejemplos de eventos gama y 4000 de eventos hadrones. La tasa de aprendizaje de la red es 0.01, el momentum 0.1 y se considera un número de 500 épocas de entrenamiento.

Junto con resaltar las cualidades positivas de esta aplicación se propone en el futuro adecuarla a otras investigaciones en este campo de la física.

Una aproximación bayesiana se implementa en [138] para reconstruir propiedades de partículas, en este caso, para obtener la distribución de masa de los bosones Higgs. Y la función de distribución de probabilidad utilizada se obtiene vía redes neuronales.

En la aproximación bayesiana se calcula la probabilidad  $P(x/m)$  de cada evento, en que  $x$  pertenece a la clase  $m$ . En el presente estudio  $m$  es la masa del boson Higgs y  $x$  representa el vector de variables de los que depende  $m$ , y por lo tanto,  $x$  constituye la entrada a la red. Si se considera la reacción  $H \rightarrow b b'$ , que indica que el bosón Higgs decae en dos  $b$  – bosones de naturaleza opuesta, donde  $e_1$  y  $e_2$  son las respectivas energías de  $b$  y  $b'$  y  $\theta$  el ángulo entre ellos, la probabilidad bayesiana está dada por:

$$P(m / x_1 x_2 x_3) \sim \left\{ \prod_{i=1}^3 P(x_i / m) \right\} * P(m) \quad (2.20)$$

donde  $P(m)$  es una probabilidad de masa inicial del bosón Higgs definida a priori, y  $x_1 = e_1$ ,  $x_2 = e_2$ ,  $x = \cos\theta$ .

A través del método de Montecarlo se generan 13 muestras con masa de bosones entre 95 GeV y 155 GeV, variando en 5 GeV de una a otra. Para cada muestras se generan cerca de 500 eventos usados en el entrenamiento y test de la red, y la mitad de las muestras se usan en el conjunto de entrenamiento y la otra mitad en el conjunto de test.

Para cada muestra se utiliza una red de propagación hacia delante (3 – 50 – 1), entrenada con el algoritmo de retro propagación y que utiliza en cada neurona una función de activación sigmoide. La entrada a la red es el vector  $x = (e_1, e_2, \cos\theta)$  y la salida de la red  $NN_{out}$  adquiere el valor 1 en clasificación correcta y 0 en clasificación incorrecta, y la función  $P(x/m)$  se determina por la expresión:

$$P(x/m) \sim NN_{out} (1 - NN_{out})^{-1} \quad (2.21)$$

En la Figura 45 se puede apreciar la relación entre la masa reconstruida por la red neuronal y la masa verdadera del boson Higgs donde la barra de error corresponde al error cuadrático medio.

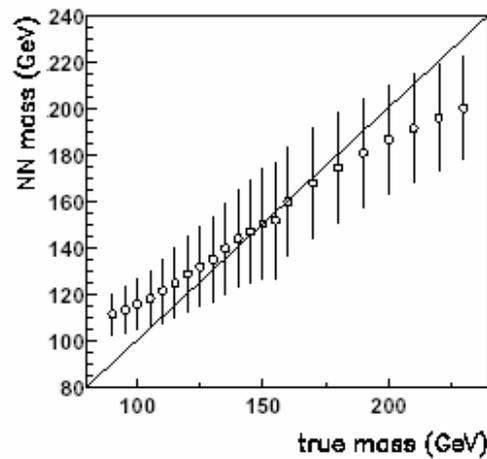


Figura 45. Curva de relación entre la masa reconstruida por la red neuronal y la masa verdadera del boson Higos.

En general se concluye que esta es una metodología válida en la reconstrucción de propiedades de partículas que dependen de variables desconocidas.

Un problema a resolver en física de altas energías es la información perdida en complejas investigaciones de identificación y clasificación de eventos, donde se implementan dispositivos experimentales que utilizan sistemas de detección compuestos de múltiples canales independientes, con diversas distribuciones geométricas, que entregan información que debe ser integrada para su procesamiento. En no pocas situaciones se produce la falla de uno o más canales, lo que puede provocar una distorsión de los eventos detectados. Por ello, en [14] se presenta como alternativa de solución a esta situación, de información perdida, la técnica de redes neuronales.

Se diseña una red neuronal de propagación hacia delante entrenada con el algoritmo de retro propagación, compuesta de cuatro capas: entrada (48 neuronas) – 1ª oculta (25 neuronas) – 2ª oculta ( 5 neuronas) – salida (1 neurona). Y se usa una función de activación lineal en toda la red.

Las entradas la constituye un vector de 48 valores de energías procesada por canales próximos al canal fallado, y la salida es determinado evento. La red fue entrenada y validada en base a 10000 eventos en situaciones en que ningún canal falló. Se define la tasa de aprendizaje en 0.2 y el momentum en 0.5 Esta técnica de redes neuronales para la reconstrucción de información perdida, en este tipo de investigaciones experimentales complejas, es comparada en forma auspiciosa frente a los métodos tradicionales utilizados, y el número de épocas por cada 10 ejemplos es de 100.

La reconstrucción de la información perdida es mejor con redes neuronales que con los métodos tradicionales, ya que el error sistemático de luminosidad obtenido con la red una vez reconstruida la información es despreciable, lo que no ocurre con los métodos tradicionales usados en estas situaciones.

En [33] se utiliza una red de propagación hacia delante de tres capas entrenada con el algoritmo de retro propagación para clasificar eventos concurrentes gamma y muon. La estructura de la red es : entrada (4 neuronas) – oculta (25 neuronas) – salida (2 neuronas). Las entradas se componen de 4 variables propias del sistema de detección previamente definidas y la salida es 0 si clasifica gamma y 1 si clasifica muon, y las neuronas de la capa oculta se determinan considerando la optimización del resultado. La tasa de aprendizaje de la red es 0.05 y la función de activación sigmoide se utiliza en toda la red.

El proceso de entrenamiento se efectúa en dos etapas: primero se entrena la red en evento gama, y luego se entrena en eventos muon (considerado ruido). Se cuenta con total de 10000 eventos simulados de cada tipo de los cuales el 90% se usa para el entrenamiento y el 10 % para el test. El test de la red demuestra una clasificación correcta de un 96% de los eventos presentados y para el autor esto valida el uso de las redes neuronales como técnica de clasificación e identificación en física de altas energías.

Una aplicación del LVQ (learning vector quantization) de Kohonen modificada, se presenta en [97] con el objeto de identificar y clasificar eventos en física de altas energías. Esta versión del LVQ clasifica eventos de interés que aparecen cubiertos, o sobrepuestos, por otros eventos que pueden considerarse como ruidos. En el LVQTC (LVQ with training count) cada neurona cuenta con un conjunto de números de entrenamiento que selecciona en forma estadística durante el proceso de entrenamiento no supervisado. Las neuronas se “especializan” en una clase de eventos vía una auto ubicación en cada clase.

Elementos propios del LQVTC son:

- Clasifica vectores etiquetados de acuerdo a las clases
- Los atributos adicionales de las neuronas son explotados en el proceso de entrenamiento y de clasificación en si.

Debido a esto las neuronas se definen por los atributos:

- Vector de referencia en el espacio etiquetado
- Nivel de clase
- Un número determinado para cada clase que representa el número de vectores temporales por clase con que ha sido entrenada cada neurona
- Vector en el espacio etiquetado que representa el centroide de la clase con que fue entrenada cada neurona.

En [97] se presenta un análisis detallado del proceso de entrenamiento del LVQTC y una aplicación realizada en el CERN con el objeto de estudiar partículas inestables en interacciones con hadrones. La importancia del rol de la red neuronal en este tipo de investigaciones es que las señales y eventos de interés a clasificar son algunos cientos

entre varios millones. Esta información es procesada en complejos sistemas de detección y se diseña la entrada a la red que se representa por un vector de 14 variables con valor entero de 1 a 6, y en base a información experimental se construye el conjunto de entrenamiento de la red: 3000 ejemplos de entrenamiento se usan como señal y la misma cantidad como ruido, y el conjunto de test tiene la misma composición que el conjunto de entrenamiento. La primera época se detiene cuando el número de neuronas señal es 133 y el número de neuronas ruido es 40, y se definen los parámetros de aprendizaje iniciales y se considera una métrica Euclideana y para la aceptación de un evento en el test se tiene en cada neurona una clasificación pura  $\pi = 0.69$  y una clasificación eficiente  $\varepsilon = 0.76$ . La variación de estos parámetros en el proceso de entrenamiento se presenta detalladamente.

Este trabajo está orientado principalmente a mostrar las virtudes del LQVTC en aplicaciones de clasificación en físicas de altas energías.

La utilización de una red neuronal modular ( Modular neural network – MNN) se presenta en [21] con el objeto de alcanzar una alta tasa de clasificación en el análisis de experimentos en física de altas energías. Esta red permite dividir el problema fundamental, es decir la identificación de eventos, en dos acciones paralelas: la identificación de eventos particulares, procesado por los módulos (redes expertas en determinados eventos). Así, actúan en paralelo varias redes que tratan los eventos y acciones individualmente y luego estas redes compiten entre sí, conectándose con una red de puertas (gating networks) que coordina el funcionamiento de los módulos.

El entrenamiento de las redes paralelas expertas es supervisado y el de la red puerta es no supervisado. Las entradas a la red son los eventos a clasificar y las salidas de cada una de las redes expertas es 1 si clasifica señal y cero si clasifica ruido.

Esta red – MNN, se implementó para analizar situaciones concurrentes, en línea, como la identificación de electrones – fotones y del efecto Cherenkov.

En [15] se realiza un análisis sobre una metodología de selección de las variables a considerar en el proceso de entrenamiento de una red neuronal, en aplicaciones de clasificación en física de altas energías y con el objeto de optimizar la aplicación se debe discriminar eventos de interés con el ruido detectado. Se propone la selección como

variables de entrenamiento aquellas de carácter cinético relacionadas con las singularidades que se encuentran en los diagramas de Feymann, y que permiten discriminar entre una señal de interés y el ruido, y también se consideran las variables angulares vinculados a los efectos de spin presente en los diagramas de Feymann. Este proceso de selección debe ser avalado en el proceso de test de la red, si no es así se inicia un nuevos proceso de búsqueda. Esta búsqueda, considerando los diagramas de Feymann, de eventos generados por el método de Monte Carlo, se efectúa con el código computacional CompHEP.

Sobre tipos de investigación, que se enmarca en los estudios de super simetrías, también se discute la aplicación de redes neuronales en los trabajos [135] y [6]. En estos artículos se reconoce que las redes neuronales son una técnica adecuada, pero se presenta una herramienta algorítmica de análisis de resultados: máquina de soporte vectorial (support vector machine - SVM), que según los autores entregaría aproximaciones comparables a las de las redes neuronales.

En la misma línea se plantea un estudio sobre el uso de redes neuronales y las técnicas de estimación de densidad probalística en el análisis de datos experimentales de partículas elementales en [23].

En [128] también se plantea que el SVM es un algoritmo de aprendizaje en el análisis multi variable comparable a las redes neuronales, para su aplicación en la investigación en la física de las partículas, en lo relativo a la identificación y clasificación de eventos y su separación del ruido, que en este tipo de investigaciones es grande. En particular, se propone su aplicación en el análisis de quarks en colisiones ( $p p'$ )obtenidas en un acelerador Tevatron.

Para clasificar y seleccionar eventos en física de altas energías en [13] se desarrolla un algoritmo que se ha utilizado en el ámbito de la visión computacional y separación de imágenes. Las ideas esenciales de este algoritmo son:

- Una exploración de datos deriva en múltiples hipótesis sobre cada señal registrada,
- Un procedimiento de selección basado en MDL ( minimum description length principle) selecciona determinadas hipótesis que permiten ampliar el análisis de los datos obtenidos.

Este algoritmo de clasificación y selección es analizado y comparado con otro tipo de técnicas comúnmente usadas, en particular con las aplicaciones exitosas de redes neuronales en este campo, como las redes de Hopfield.

Un análisis de 60 presentaciones en la sesión de IA en el Workshop sobre Neurocomputación, Métodos y Aplicaciones [59], 37 de ellas están referidas a aplicaciones en el ámbito de la física de partículas de altas energías, astrofísica, rayos cósmicos y física nuclear. La mayoría se orientan al uso de redes neuronales en la identificación de determinados fenómenos físicos y principalmente aplican redes de propagación hacia delante entrenadas con el algoritmo de retro propagación del error. Estas aplicaciones se realizan esencialmente en el análisis de fenómenos y procesos físicos donde las metodologías.

A las investigaciones antes mencionadas se pueden agregar diferentes aplicaciones específicas, si bien, no en gran número, que se reportan en los últimos meses sobre la utilización de RNs a la solución de problemas complejos en el ámbito de la investigación de partículas elementales.

En [113] se realiza un análisis de las potencialidades de los árboles de decisión y de las RNs en los procesos de clasificación e identificación de partículas de altas energías. Los experimentos analizados corresponden a oscilaciones de neutrinos.

RNs de función radial base se diseñan para el reconocimiento de eventos en el ámbito de la física de las partículas [98] y se presenta como alternativa en el proceso de entrenamiento el algoritmo de optimización “particle swarm”.

En [140] se utiliza una RN de retro propagación en el proceso de identificación de partículas quarks y gluones generadas por un simulador que utiliza el método de Monte Carlo. Se realiza un estudio de la topología más adecuada de la red a utilizar.

Un análisis del rol dominante de los protones en los rayos cósmicos captados en laboratorios de la región del Tibet, se publica en [7]. La RN se usa en la identificación de partículas en el proceso de clasificación primaria de masa de las partículas detectadas mediante un complejo sistema experimental híbrido.

En [4] RNAs se implementan en la identificación de los procesos concurrentes electrón/pion altamente energéticos del orden 2 a 6 GeV. Los resultados de la capacidad

de generalización de la red se comparan con aquellos obtenidos con los métodos tradicionales de análisis.

## **2. 6) RNAS CON POCOS EJEMPLOS DE ENTRENAMIENTO.**

En diversas aplicaciones de RNAs al análisis de fenómenos naturales y medio ambientales no se cuenta con un número alto de ejemplos que permitan un adecuado entrenamiento de la red, debido a que estas muestras por lo general son escasas y dependen del fenómeno en sí. Como también ocurre en aplicaciones de ingeniería donde el proceso a investigar o simular no puede ser reiterado en forma indiscriminada por razones de costo y tiempo. En particular, esto sucede a menudo en el estudio, mediante el análisis espectral, de elementos presentes en muestras orgánicas.

Por ello los investigadores han desarrollado algunas técnicas y métodos que permitan adecuar las entradas y la topología de la RN para aumentar la robustez de ésta, ante un hecho que se considera, por razones obvias, desventajoso para el aprendizaje y generalización de una RN.

Se pueden sintetizar dos líneas principales desarrolladas para encarar este problema. La primera consiste en reducir el número de datos de entrada a la red mediante métodos de preprocesamiento de los datos a través de distintos procesos matemáticos y la segunda consiste en adecuar la topología de la red optimizando algunos momentos del proceso, como la estructura de la red, número de nodos ocultos, ciclos de entrenamiento, etc, o bien, se estructura un sistema de redes [123]. En general, se busca reducir el factor de razón entre el número de ejemplos de entrenamiento y el número de parámetros a determinar en el entrenamiento – los pesos de las conexiones de la red-.

En [20] se propone un SH de RNs con el objeto de optimizar el número de entradas y conexiones en la RN que procesa. Para ello implementan una combinación de una RN autoorganizada de Kohonen y un perceptron multicapa (MLP). La red de Kohonen clasifica las entradas al MLP y éste determina la concentración de los componentes de una muestra de gas analizada. Las entradas a optimizar son las partes a considerar en un espectro completo. Por ello la limitante de este método es que igual

requiere de un número alto de ejemplos de entrenamiento (en artículo se refiere que el número más bajo de conexiones es del orden de 600). Los autores, junto con realizar una discusión sobre la estructura y eficiencia de los algoritmos de aprendizaje, comparan el comportamiento del SH utilizado con otras técnicas de procesamiento comúnmente usadas en análisis químico, como el mecanismo de análisis de componentes principales que tiene, según los autores, la limitación de su naturaleza lineal.

La clasificación de diagnóstico de pacientes en sanos o enfermos de cáncer, con el uso de una RN de propagación hacia delante se presenta en [58]. La estructura de la red es, 4 neuronas de entrada,  $n$  en la capa oculta y una de salida. Las entradas a la red la constituyen las concentraciones de los elementos Fe, Cu, Zn y Se, presentes en muestras de suero de sangre analizadas. Estas concentraciones se obtienen mediante métodos tradicionales de análisis de espectros de emisiones X obtenidos de las muestras. Debido al número relativamente bajo de muestras disponibles (33 de pacientes sanos y 27 de enfermos) los autores buscan optimizar dos parámetros: el número de nodos en la capa oculta  $n$  y el número de ciclos utilizados para entrenar la RN. Para ello analizan el error cuadrático medio obtenido en el proceso de entrenamiento en función de los dos parámetros mencionados. Concluyen que en su experimento la mejor respuesta de la red se produce cuando el entrenamiento se detiene en el ciclo 500 y con un número de nodos ocultos igual a 4.

En [76] se investiga el comportamiento de una RBFN y varias configuraciones de RNs de propagación hacia delante en el análisis de procesos industriales, donde los ejemplos disponibles para el entrenamiento de la red son pocos, porque su obtención demanda tiempo y costos de proceso. Los resultados obtenidos se comparan con modelos de regresiones lineales convencionales y las aplicaciones realizadas están orientadas a procesos industriales de la madera y el papel. Según los autores es aconsejable, para el caso de reducido número de ejemplos disponibles, escoger el conjunto de entrenamiento y no realizar una selección aleatoria, como también, entrenar diferentes RNs de idéntica estructura y sus salidas combinarla mediante algún método matemático para obtener un resultado más estable. La selección de variables de entrada se realiza mediante el método de optimización – D, que consiste en minimizar el determinante de la matriz de información a través de procesos iterativos.

En [137] se presenta una aplicación de RNs en el ámbito de la visión computacional y de algoritmos de control en robótica, que contando con pocos ejemplos de entrenamiento, muestra la habilidad de los mapas autoorganizados parametrizados (PSOM) con entrenamiento no supervisado. La RN PSOM es una variante computacional de los SOM, que se presenta por primera vez a mediados de la década de los 90 y que tiene por objeto adecuar los SOM a un entrenamiento con bajo número de ejemplos.

El número de ejemplos utilizados en el proceso de entrenamiento en visión en dos dimensiones (2D – espacio (x,y)) es de 16. Y para mejorar los resultados en estos casos, se propone el uso de un aprendizaje jerárquico en varias etapas, con la utilización de varias estructuras PSOMs.

En otra aplicación [127] se utiliza una RN de propagación hacia delante de tres capas, una oculta, para determinar el tiempo de retención de líquido cromatográfico y se analizan el comportamiento de retención de nueve fenoles. Debido al reducido número de ejemplos experimentales en el conjunto de entrenamiento (25 ejemplos) se aplica un método de optimización experimental del número de nodos en la capa oculta, número de ciclos en el entrenamiento y el número de ejemplos a usar en el entrenamiento de la red.

Los procesos de optimización experimental de cada parámetro mencionado se realiza analizando la variación de la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMS) en el proceso de entrenamiento y se construye una curva del RMS en función del parámetro respectivo. Los nodos ocultos se variaron de 5 a 15 encontrando el valor de RMS mejor en el 5, y el número de ciclos en torno a 900. La optimización del número de ejemplos de entrenamiento adquiere importancia en este tipo de aplicaciones debido a que el costo y tiempo de trabajo experimental por ejemplo son altos y el valor encontrado aceptable para que la red sea capaz de generalizar en este caso es 25.

## **CAPÍTULO III.**

### **SISTEMAS NEURONALES PARA EL ANÁLISIS DE ESPECTROS PIXE DE MUESTRAS ORGÁNICAS.**



En este capítulo se presenta una aplicación que tiene por objeto el uso de técnicas de redes neuronales en el análisis de espectros de emisiones X inducidas por protones (PIXE), y la determinación de las concentraciones de determinados elementos, en concreto P, S, K, Ca, Fe y Zn, presentes en muestras de sustancias orgánicas provenientes de especies de peces capturados en aguas dulces de Chile, en particular del Lago Rapel. Los análisis y estudios de carácter experimental aplicado se realizan en el Centro de Física Experimental (CEFEX) de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, y comprende investigaciones de análisis espectral atómico y nuclear en diversas áreas científicas [87-91]. El uso de redes neuronales se presenta como una alternativa novedosa para generar una automatización en el proceso de análisis espectral y de la determinación de concentraciones de determinados elementos presentes en las muestras investigadas, lo que deriva en una significativa disminución de costos y tiempos en el proceso de investigación y análisis experimental en general.

Cabe mencionar que las aplicaciones de redes neuronales en el análisis de radiaciones X, si bien son escasas, debido a las complicaciones que presentan los espectros, por la superposición de las líneas espectrales de interés con el ruido presente, y que por ende dificultan cualquier metodología de análisis, tienen antecedentes y perspectivas interesantes en trabajos de primer nivel, como las enmarcadas en el proyecto XEUS [142].

La metodología experimental y su relación con RNs para determinar concentraciones a partir de los espectros PIXE obtenidos de las muestras irradiadas se han presentado en la sección 1.2). Estos pasos del proceso de investigación experimental y su relación con las RNs utilizadas se pueden representar esquemáticamente como se indica en la figura 47:

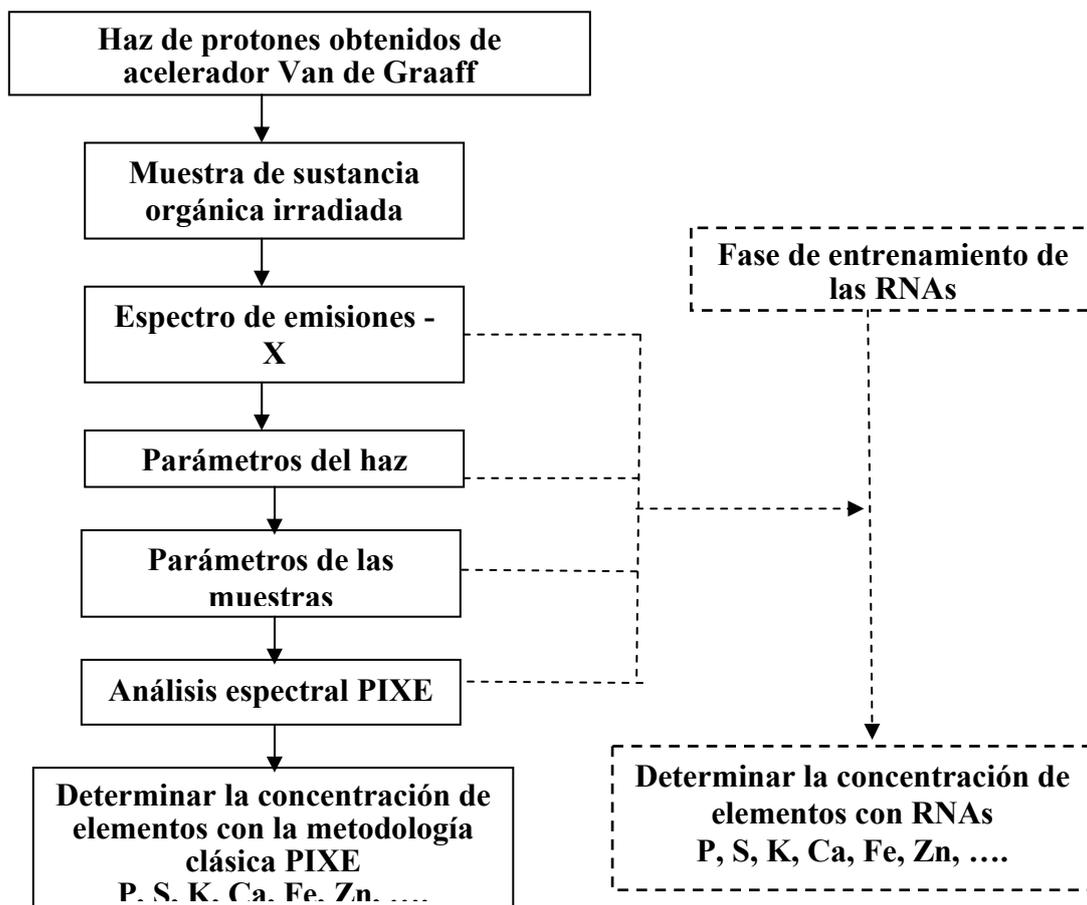


Figura 47. Esquema de la relación del análisis de espectros PIXE con RNs y la situación experimental general.

### 3. 1) SITUACIÓN EXPERIMENTAL Y DATOS ESPECTRALES.

Las 22 muestras orgánicas utilizadas en la presente memoria están formadas por tejidos biológicos de músculos, branquias e hígado de peces (cyprinos carpio). Todas las muestras se elaboran en forma idéntica en base a un proceso de digestión que utiliza

HNO<sub>3</sub> para obtener una solución homogénea. Para cada solución se deposita una cantidad controlada en 8.4 µm de película de Kapton, obteniendo muestras finas como se requiere en los experimentos PIXE.

Las muestras se irradian, siguiendo lo indicado en la sección 1.2), durante 15 min., con un haz de protones de 2.0 MeV de energía, de 3.0 mm<sup>2</sup> de sección eficaz e intensidad de 5.0 nA. Primero el haz pasa a través de la muestra, y después es captado por una caja de Faraday a 5.0 m detrás de ella. Los fotones de rayos X emitidos por la muestra irradiada se captan con un detector convencional tipo Si (Li) (FWHM =180 eV a 5.9 keV), ubicado en una posición a 90° respecto del haz incidente. Entonces, se recopilan los datos espectrales mediante un analizador multicanal insertado en el respectivo montaje electrónico.

En la Figura 48 se pueden apreciar tres espectros típicos obtenidos de muestras de músculo, hígado y branquia respectivamente, donde se observan las líneas características de las emisiones X de los elementos investigados. En los respectivos espectros se ilustra que los procesos de bio acumulación elemental son diferentes en los tres tipos de muestras orgánicas analizadas, como también se ven similitudes respecto al hecho de que los elementos analizados están presentes en todas las muestras.

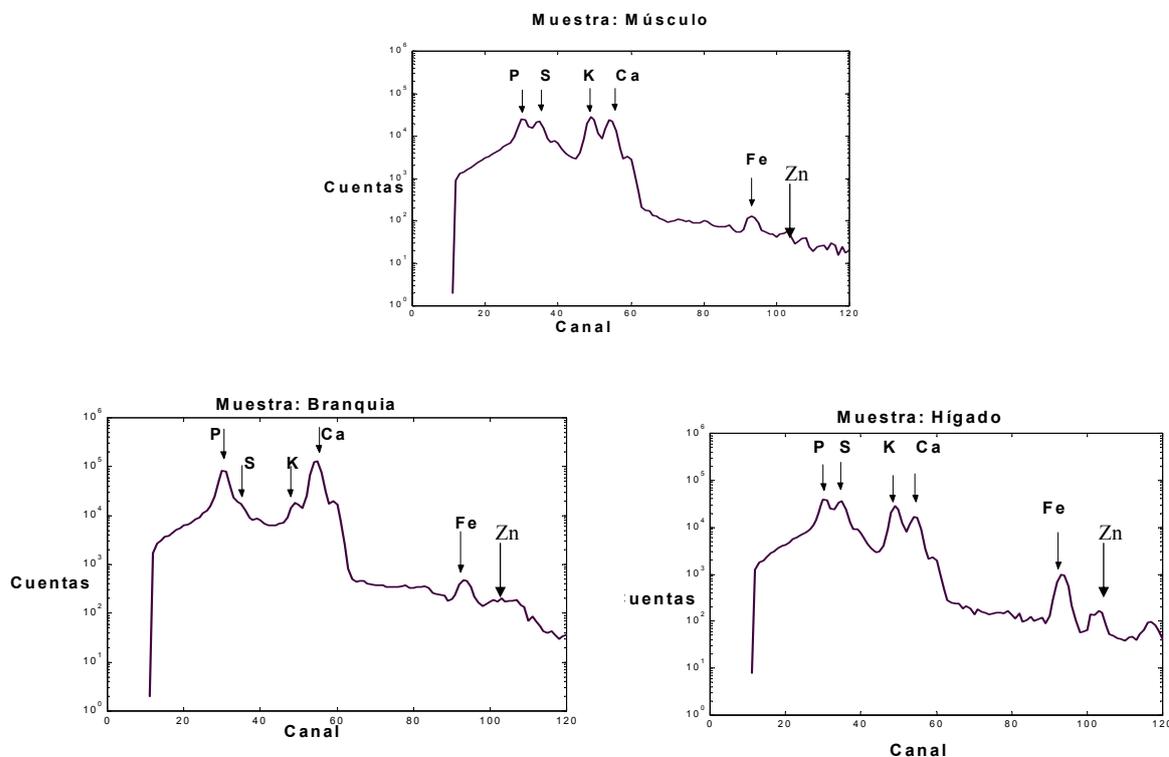


Figura 48.- Espectros PIXE obtenidos de muestras orgánicas de músculos, hígado y branquias de peces

Las líneas espectrales medidas en este tipo de espectros son características y representan transiciones de átomos energéticamente excitados a estados de energía inferior y son específicas de cada elemento.

Las líneas identificadas en el espectro anterior corresponden a emisiones X, del tipo  $K_{\alpha}$  y  $K_{\beta}$ , para cada uno de los elementos mencionados, ya que son las más intensas en espectros de emisiones X, y cuyas energías para los elementos P, S, K, Ca, Fe y Zn, se especifican en la Tabla 7.

En los espectros experimentales las líneas  $K_{\alpha}$  y  $K_{\beta}$  para cada elemento aparecen superpuestas, pero esta situación debe considerarse en la calibración realizada, y no tiene mayor significado en el análisis en sí.

Tabla 7. Líneas características de emisiones X ( $K_{\alpha}$  ,  $K_{\beta}$ ) de los elementos estudiados.

<b>Elemento</b>	<b>N° Atómico Z</b>	<b><math>K_{\alpha}</math> (Kev)</b>	<b><math>K_{\beta}</math> ( KeV)</b>
<b>Fósforo – P</b>	15	2.0137	2.0127
<b>Azufre – S</b>	16	2.3078	2.3066
<b>Potasio – K</b>	19	3.3138	3.3111
<b>Calcio – Ca</b>	20	3.6917	3.6881
<b>Hierro – Fe</b>	26	6.4038	6.3908
<b>Zinc – Zn</b>	30	8.6389	8.6158

### 3. 2) DISEÑO DE LOS EXPERIMENTOS.

Para el análisis neuronal de un determinado espectro PIXE correspondiente a una muestra, y para cada elemento químico considerado, se utilizan sistemas neuronales (SN) especializados. Estos SNs operan en paralelo y sus datos de entradas provienen de datos experimentales en general y datos espectrales en sí. La respuesta de los SNs puede ser de

clasificación, como la presencia o ausencia del elemento en la muestra, grado de polución de dicho elemento (bajo, medio, alto), o bien, puede ser una respuesta cuantitativa, como la concentración de dicho elemento en la muestra investigada.

La estructura global de la ejecución en paralelo de los SN, se indica en la figura 49, donde la notación representa lo siguiente:

SN-i : Sistema neuronal especializado en elemento i, ( $i = 1, \dots, n$ ), donde n representa el número de elementos investigados.

$R_i$  : Respuesta del SN-i, especializada en el elemento i, respecto a la consulta realizada.

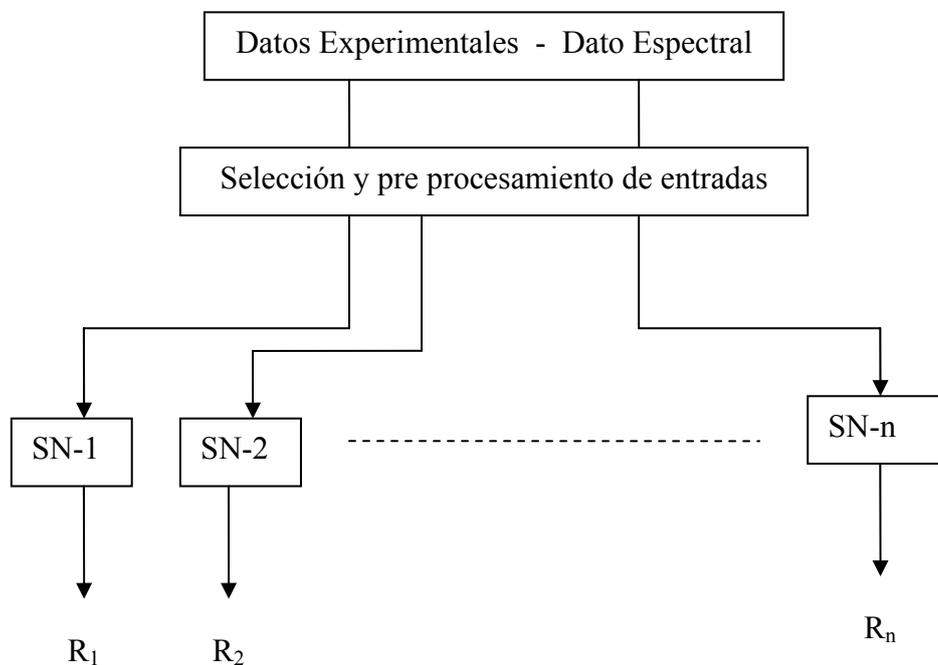


Figura 49. Esquema del diseño de aplicación de RNs al análisis de espectros PIXE.

En la figura 50 se presentan un esquema estructural del SN destinado a analizar la presencia del elemento i-esimo en la muestra en estudio. Cada SN responde a la respectiva consulta sobre determinado elemento, es decir, es un sistema especializado. Las características esenciales de estos sistemas son:

- Están constituidos por un número determinado, K, RN de propagación hacia delante, con igual topología, y que operan en paralelo en el interior de un SN.

- Todas las redes se entrenan en forma independiente con el algoritmo de retropropagación del error (Backpropagation).
- Si  $N$  es el conjunto de muestras disponibles, se subdivide en dos subconjuntos:  $M$  muestras para el entrenamiento, y  $P$  muestras para el test, tal que  $N = M + P$ .
- Las entradas a cada RN son datos experimentales previamente definidos, y del espectro sólo se utiliza el valor máximo del pico espectral del elemento investigado. Así, se dispone de todas las entradas al obtener el espectro.
- En el interior de cada SN los conjuntos de entrenamiento para todas las RNs pueden ser idénticos o diferentes. Lo mismo sucede con los conjuntos de test.

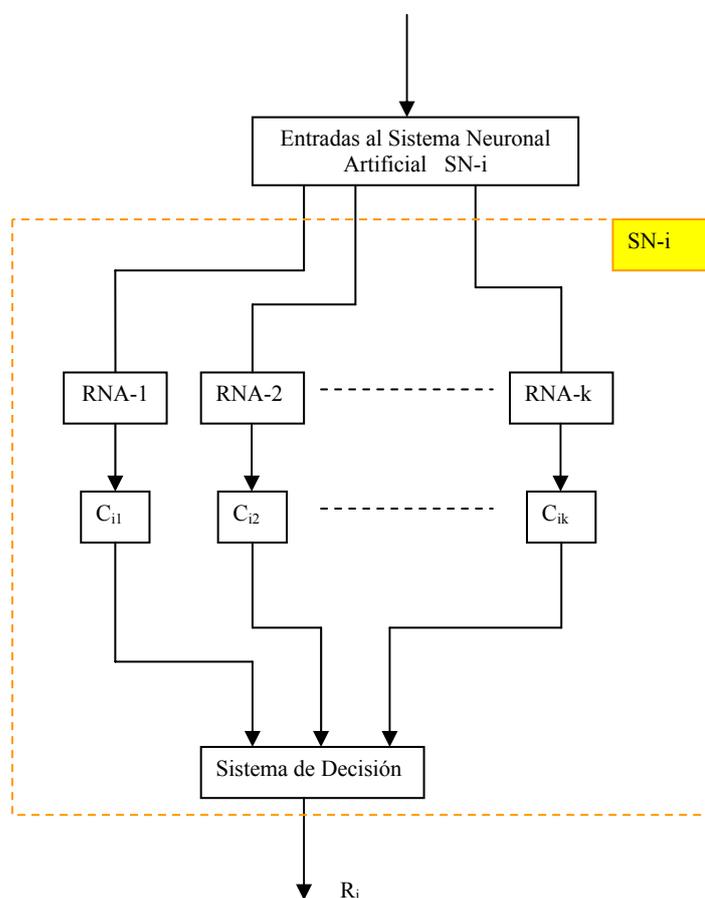


Figura 50. Arquitectura de un SN especializado en el análisis de espectros PIXE

Como se puede ver de forma directa, una ejecución del SN correspondiente a un elemento químico  $i$ , representa la ejecución simultánea de  $K$  redes neuronales, todas con la misma topología, e incluso con los mismos conjuntos de entrenamiento y test.

En la figura 50, la notación indica:

$k$  – representa el número de RN utilizadas en cada SN para determinar la concentración de cada elemento, donde cada una de las RNs se entrenan en forma independiente en base al mismo conjunto de entrenamiento y diferentes pesos iniciales.

$C_{ij}$  – es la concentración calculada por la RN- $j$  del elemento –  $i$ , con  $j=1, \dots, k$ .

SD (Sistema de decisión) – representa el mecanismo de combinación de las salidas  $C_{ij}$  de las RNs perteneciente a un determinado SN. En el SD las salidas  $C_{ij}$  pueden ser combinadas mediante distintos mecanismos o funciones. La salida del SD,  $R_i$ , es la respuesta a la consulta realizada al SN.

Uno de los objetivos principales de la presente propuesta, es avanzar en el análisis espectral en tiempo real (on-line), y en particular, la determinación de las concentraciones de elementos presentes en las muestras, en tiempo real.

Tras un análisis de las posibilidades, se utilizan como entradas a la RN, variables de antecedentes experimentales que inciden en el proceso de obtención del espectro, y que por tanto deben incidir en la respuesta de la RN, y que operan en tiempo real, ya que son conocidas previa o simultáneamente a la obtención del espectro. Coherente con un estudio experimental, se han determinado como influyentes en el proceso, la masa de la muestra, la carga que indica la intensidad del haz de protones y la superficie de incidencia del haz, además de la única variable de entrada que proviene directamente del espectro detectado, que es el número de emisiones máxima en el pico de la línea espectral correspondiente.

En definitiva, la estructura formal del Sistema para obtener la concentración de los elementos en las muestras orgánicas, es como sigue:

- 6 SNs, uno por elemento en estudio, P, S, K, Ca, Fe y Zn, que se ejecutan en paralelo.
- Cada SN está formado por 5 RNs (valor seleccionado,  $k=5$  (figura 50)), todas con la misma topología, que se ejecutan simultáneamente, con los mismos ejemplos de entrenamiento y diferentes pesos iniciales aleatorios.
- Las RNs son de propagación hacia delante con 4 neuronas de entrada, 4 neuronas ocultas y 1 neurona de salida, de acuerdo con la siguiente descripción, que se ilustra esquemáticamente en la Figura 51:

**a) Entradas:** Las entradas son cantidades físicas propias del procedimiento experimental implementado. Las 4 variables de entrada son:

**m** – La masa de la muestra medida en mg

**Q** – La carga, que es una medida de la intensidad del haz de protones que irradia la muestra, se mide en Coulomb (C).

**s** – La superficie normal al haz de protones, medida en  $\text{cm}^2$

**n** – número de emisiones X detectadas en el máximo de la línea espectral característica del elemento considerado y que corresponde a la energía que se especifica en la Tabla 5.

**b) Capa Oculta:** Con 4 neuronas, número obtenido de forma experimental.

**c) Salidas:** 1 neurona que corresponde a la concentración (c), medida en %, en la muestra del elemento en estudio.

**d) La función de activación** es sigmoide en toda la red.

➤ Se utilizan 22 ejemplos experimentales disponibles, 18 para el entrenamiento y 4 para el test, con selección aleatoria.

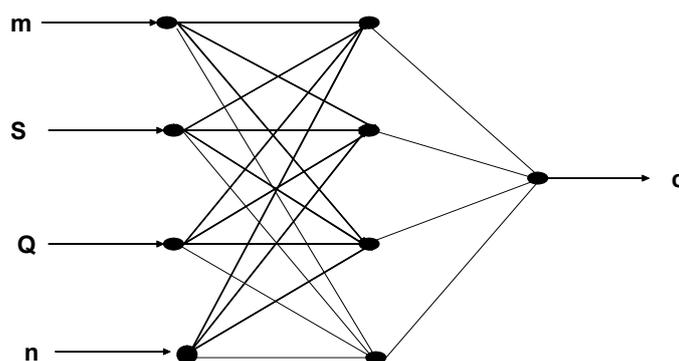


Figura 51. Arquitectura (4-4-1) de las RNs de propagación hacia adelante utilizada en los SN.

Para el ajuste de los pesos, la salida esperada es la concentración de los elementos considerados, obtenida en el laboratorio CEFEX, con el proceso PIXE clásico.

Las entradas y salidas esperadas en los SNs se normalizaron en el intervalo de valores [0,1], en función del valor máximo  $V_m$  respectivo. Si  $V$  es el valor real, el valor normalizado,  $V^n$ , se obtiene con:

$$V^n = V / V_m \quad (3.1)$$

En concreto, para las salidas esperadas, la normalización se hace con

$$C_{exp}^N = C_{exp} / (\max C_{exp}) \quad (3.2)$$

donde  $C_{exp}^N$ , es la respectivas concentraciones normalizadas y  $(\max C_{exp})$  es el valor máximo del conjunto de concentraciones experimentales para cada elemento analizado.

El número de decimales utilizados en los valores normalizados es 3 para las entradas **m**, **Q**, **s** y **n**. En los datos de salidas (esperadas) normalizados se utilizan 4 decimales (con 4 cifras significativas), pero los datos de salida sin normalizar, que varían en un rango de  $10^{-6}$  a  $10^{-2}$ , vienen dados con dos cifras significativas.

La respuesta del SN se desnormaliza en el SD.

Debido al pequeño número de muestras disponibles, se consideran 18 espectros para el entrenamiento y solo 4 para el test. Los parámetros ajustados en este proceso son: **tasa de aprendizaje 0.6, coeficiente de momentum 0.8 y un error de 0.01** (para finalizar el entrenamiento).

La implementación, vía software, se ha realizado utilizando MATLAB como base, y la toolbox de Neural Nets específicamente.

Cada SN se ejecuta 5 veces, para validar el modelo con valores medios. El conjunto de entrenamiento se obtiene aleatoriamente, y por tanto, normalmente es diferente en cada una de las 5 ejecuciones o series del sistema completo.

En definitiva, como para cada elemento se ejecutan 5 series, y en cada serie se realizan 5 (valor de k) procesos de entrenamiento y verificación en forma independiente, para cada elemento se disponen de 25 RNs entrenadas.

Las salidas en cada serie,  $C_{nn}$ , establecidas en el SD, son los valores promedios de las concentraciones determinadas por las respectivas 5 RNs:

$$C_{nn} = \sum_i C_{nn_i} / 5 \quad (i = 1, \dots, 5) \quad (3.3)$$

donde  $C_{nn_i}$  es la concentración determinada por la RN i-esima en el interior del SN.

También se analizan los valores del mejor experimento por serie, y esto hace posible un análisis más certero de la capacidad de generalización de cada RN entrenada y del SN respectivo. Después, estas redes entrenadas actúan en forma paralela en el interior de cada SN, especializado en determinado elemento, entregando sus respuestas  $C_{ij}$  al SD. Los SNs, como se dijo anteriormente, también actúan en forma paralela e independiente.

### 3.3) RESULTADOS EXPERIMENTALES.

En la presente sección se ilustran los resultados obtenidos por la aplicación de los SNs en el análisis de espectros PIXE de sustancias orgánicas con el objeto de obtener respuesta a la consulta relativa a la determinación de la concentración de los elementos investigados en cada muestra (respuesta cuantitativa).

El número de ciclos en el proceso de entrenamiento es diferente para cada red, y varía en el intervalo (5000 – 8000) ciclos.

Se presentan dos tipos de gráficos de resultados para cada elemento investigado: en primer lugar, un gráfico de correlación entre las concentraciones experimentales ( $C_{exp}$ ) (calculadas por la metodología PIXE) y las concentraciones determinadas por los SNs respectivos ( $C_{nn}$ ), es decir, la correlación entre las salidas esperadas y las calculadas por la Red. En segundo lugar se muestran gráficos de barra comparativos entre las  $C_{exp}$  y las  $C_{nn}$  correspondiente a los espectros utilizados en el conjunto de test.

El gráfico de correlación de cada elemento presenta los resultados del proceso de entrenamiento y de test, mediante la relación del conjunto de pares:

$$[(C_{exp}; C_{nn})_1, (C_{exp}; C_{nn})_2, \dots, (C_{exp}, C_{nn})_s] \quad (3.4)$$

donde  $s$  es el número de pares en cada conjunto. Tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de test se incluyen los valores de las 5 series analizadas para cada elemento. Cada serie está formada por conjuntos de entrenamiento y test diferente (18 espectros de entrenamiento y 4 de test), pero el proceso de entrenamiento es igual, por lo que hay  $s = 90$  valores en el conjunto de entrenamiento y  $s = 20$  en el conjunto de test, para cada elemento

Se utiliza, como criterio de correcta determinación de la concentración por parte de los SNs, que la respuesta  $C_{nn}$  de éstos verifique que:

$$C_{nn} \in [C_{exp} + 0.1 ; C_{exp} - 0.1 ] \quad (3.5)$$

La consideración empírica representada en la expresión (3.5), se basa en el hecho de que la propia determinación de los valores experimentales  $C_{exp}$ , que constituyen la respuesta esperada de los SNs, propaga un error cercano al 10% del valor determinado y a este elemento de incertidumbre en el resultado se agrega el que deriva del propio proceso de entrenamiento de los SNs y que se puede ver acrecentado por la alta dispersión de los valores  $C_{exp}$  para los elementos investigados. En los experimentos clásicos, es habitual que cuanto menor es la concentración, mayor es el error normal de medida, lo que justifica también la ecuación (3.5).

### 3.3.1) Resultados para cada elemento.

En este apartado se presentan los siguientes gráficos y tablas, y el análisis correspondiente:

- (a) Gráficos de correlación entre las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$ , tanto para los ejemplos del conjunto de entrenamiento como el de test, con los respectivos factores de correlación  $R_E^2$  y  $R_T^2$  para entrenamiento y test.  $C_{nn}$  indica la media de las 5 RN de cada serie, y el gráfico incluye los resultados de las cinco series.
- (b) Comparación de las  $C_{exp}$  y las  $C_{nn}$  del conjunto test para cada elemento estudiado, sobre las cinco series, destacando en otro color la mejor serie.
- (c) Tabla con resultados de las concentraciones  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$ , para los conjuntos de entrenamiento y test, de la mejor serie ejecutada por el SN de cada elemento.
- (d) Gráfico comparativo de concentraciones normalizadas  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$ , en la mejor serie, para el conjunto de test.

La mejor serie se considera aquella que minimiza la suma de las diferencias

$$\sum_{test} |C_{exp} - C_{nn}|$$

### a) Elemento Fósforo - P

El P es un elemento que está bien identificado en los tres tipos de espectros de muestras orgánicas analizadas, como se aprecia en la Figura 48, y tiene una distribución de valores de las concentraciones regular entre valores 0,001% y 0,01%, y como se ve en el gráfico (b) de la Figura 52, en ese rango se produce sólo un ejemplo donde la discrepancia entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  es comparativamente mayor. El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

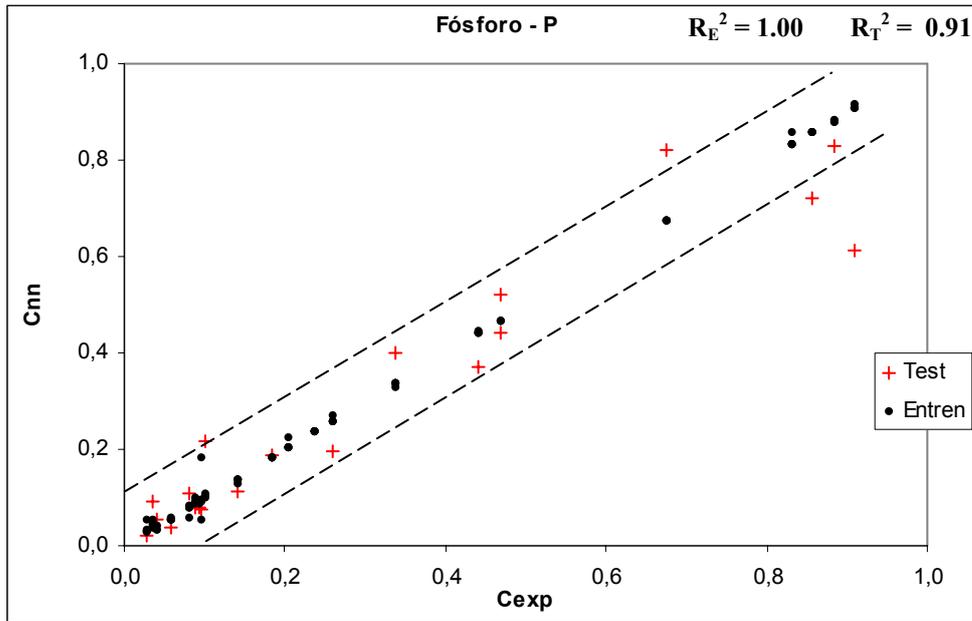
En la Figura 52 (a) se observa que los 3 valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5), son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamientos ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor. Hay que resaltar que estos 3 ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

En la Tabla 8 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del P, tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de test, que en este caso es la serie I. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

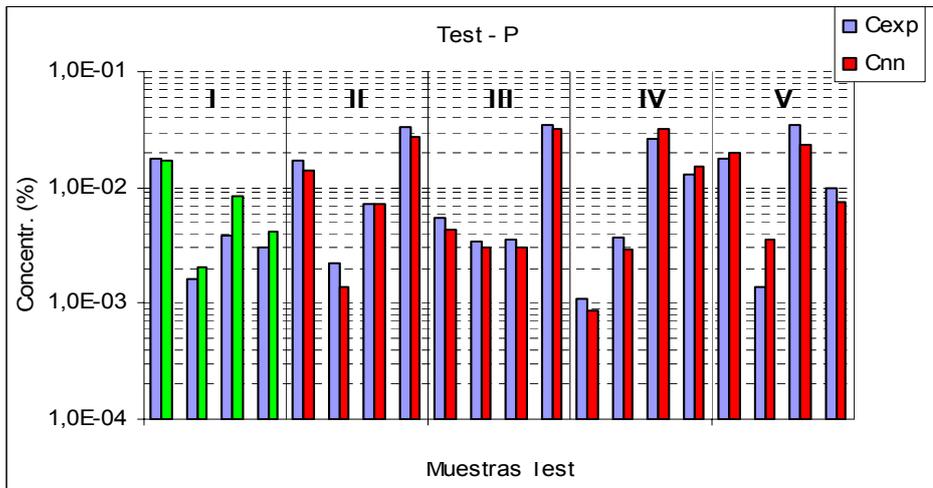
En la Figura 53 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie I). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada serie y en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 53 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 52. Fósforo - P. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas Cexp y las obtenidas por el SN del P – Cnn (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las Cexp y Cnn del conjunto de test, determinadas por el SN del P para cada serie aplicada.

Tabla 8. Resultados obtenidos en la Serie I (mejor serie) para el P

Fósforo - P		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,4416	0,4411	0,4412	0,4413	0,4412	0,4412	0,4412	0,00035	
3	0,1403	0,1343	0,1375	0,1355	0,1366	0,1380	0,1364	0,00388	
4	0,0286	0,0538	0,0541	0,0428	0,0540	0,0542	0,0518	0,02319	
5	0,0364	0,0523	0,0532	0,0635	0,0529	0,0533	0,0550	0,01869	
6	0,0961	0,0529	0,0535	0,0646	0,0533	0,0536	0,0556	0,04051	
7	0,0571	0,0588	0,0575	0,0436	0,0578	0,0573	0,0550	0,00215	
9	0,0883	0,0919	0,0909	0,0928	0,0913	0,0907	0,0915	0,00318	
10	0,0935	0,0939	0,0925	0,0933	0,0929	0,0925	0,0930	0,00048	
11	0,1844	0,1858	0,1846	0,1882	0,1850	0,1845	0,1856	0,00122	
13	0,8831	0,8827	0,8827	0,8783	0,8827	0,8827	0,8818	0,00130	
15	0,8312	0,8312	0,8313	0,8317	0,8313	0,8313	0,8314	0,00018	
16	0,2052	0,2048	0,2048	0,2045	0,2048	0,2048	0,2047	0,00045	
17	0,8571	0,8574	0,8574	0,8558	0,8575	0,8574	0,8571	0,00005	
18	0,6753	0,6751	0,6751	0,6757	0,6751	0,6751	0,6752	0,00009	
19	0,9091	0,9090	0,9091	0,9261	0,9090	0,9091	0,9125	0,00336	
20	0,3377	0,3376	0,3376	0,3406	0,3376	0,3376	0,3382	0,00051	
21	0,2597	0,2599	0,2599	0,2567	0,2600	0,2599	0,2593	0,00045	
22	0,2364	0,2375	0,2373	0,2366	0,2373	0,2372	0,2372	0,00082	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
2	0,4675	0,4439	0,4429	0,4461	0,4431	0,4428	0,4437	0,02379	
8	0,0416	0,0521	0,0531	0,0634	0,0528	0,0532	0,0549	0,01335	
12	0,1013	0,2072	0,2227	0,0001	0,2174	0,2259	0,1746	0,07335	
14	0,0805	0,1302	0,0974	0,1745	0,1051	0,0941	0,1203	0,03974	

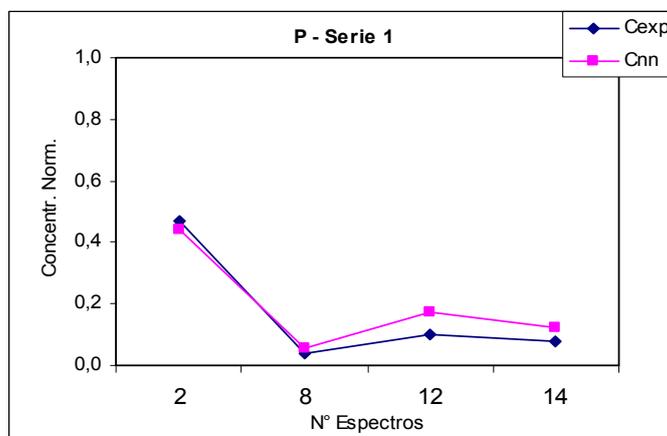


Figura 53. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el P.

## b) Elemento Azufre – S

En la Figura 48 se observa que el S, al igual que el P, está situado en una zona espectral donde el fondo es muy alto, sin embargo la dificultad en el análisis de la presencia de S reside en el hecho que la línea espectral se traslapa con la del P, como es el caso de los espectros de muestras de branquias. Por tanto, se espera que el error experimental en la determinación de  $C_{exp}$  pueda ser superior y esto se manifiesta en un incremento en el error de determinación de algunas  $C_{nn}$  para el S. El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

En la Figura 54 (a) se aprecia que los valores de  $C_{nn}$  que están fuera del intervalo de valores establecido en (3.5) son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamiento ( $C_{nn}$ ,  $C_{exp}$ ) es baja. Y en la Figura 54 (b) la mayor discrepancia comparativa de  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  está en aquellos valores donde  $C_{exp}$  es cercano al límite experimental de detección ( $\sim 10^{-4}$  %).

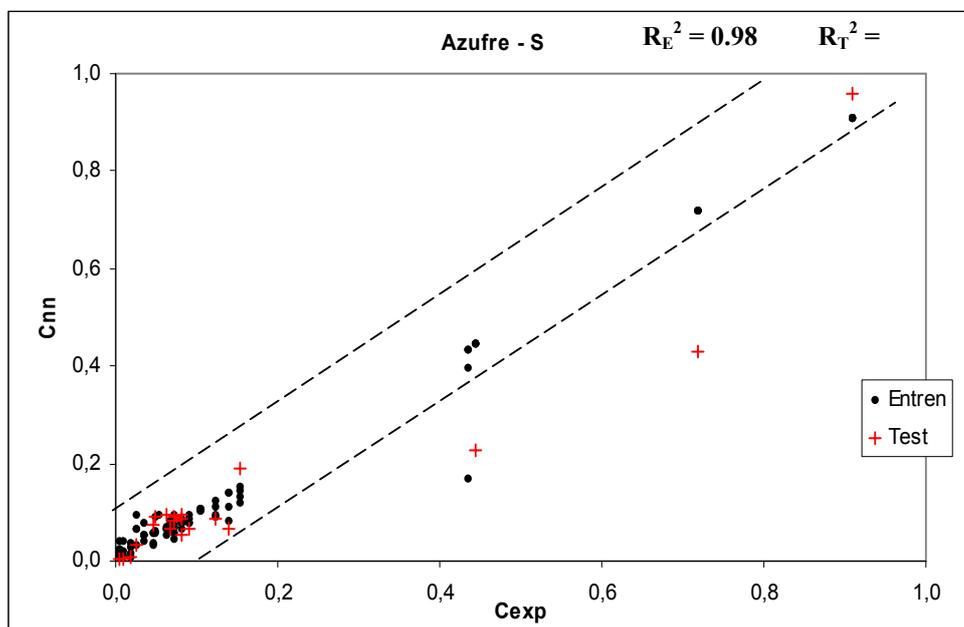
Hay que resaltar que el ejemplo de entrenamiento y los 2 de test que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con muestras distintas y en diferentes ejecuciones de las RNs.

En la Tabla 9 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del S, tanto para el conjunto de entrenamiento como de test. que en este caso es la serie I. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

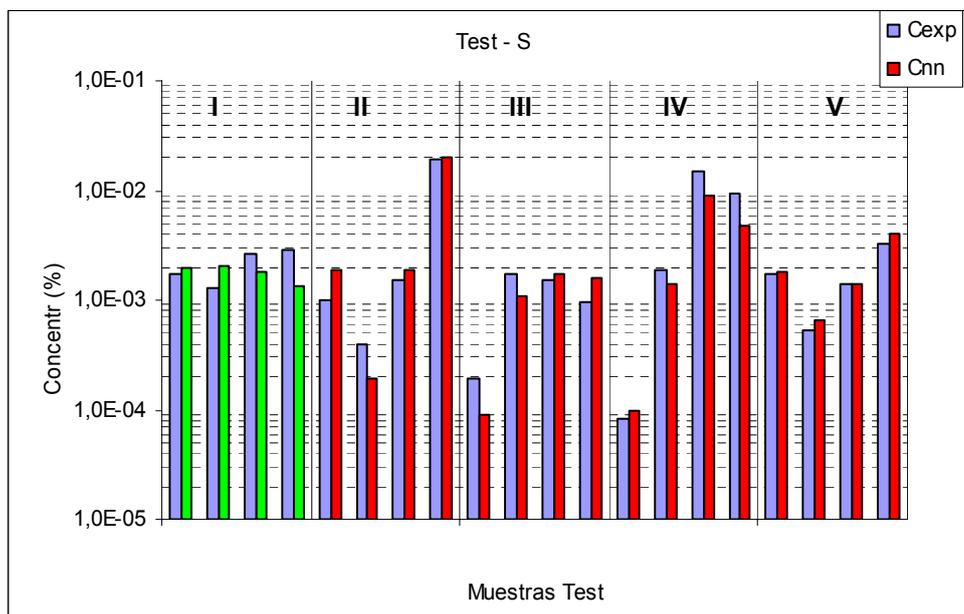
En la Figura 55 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie I). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada serie y en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 55 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 54. Azufre - S. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por el SN del S –  $C_{nn}$  (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test, determinadas por el SN del S para cada serie aplicada.

Tabla 9. Resultados obtenidos en la Serie I (mejor serie) para el S.

Azufre – S		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0478	0,0897	0,0909	0,1238	0,0627	0,1048	0,0944	0,04652	
3	0,0091	0,0631	0,0764	0,0502	0,0136	0,0096	0,0426	0,03349	
4	0,0040	0,0947	0,0942	0,0058	0,0122	0,0009	0,0416	0,03754	
5	0,0249	0,0990	0,0965	0,1238	0,0572	0,1048	0,0962	0,07137	
6	0,0909	0,0991	0,0971	0,1238	0,0570	0,1048	0,0964	0,00545	
7	0,0191	0,0690	0,0922	0,0124	0,0136	0,0010	0,0377	0,01853	
9	0,0813	0,0621	0,0744	0,1238	0,0786	0,1048	0,0887	0,00739	
10	0,0718	0,0974	0,0880	0,1238	0,0609	0,1048	0,0950	0,02320	
11	0,0718	0,0057	0,0590	0,0231	0,0715	0,0717	0,0462	0,02558	
13	0,0455	0,0492	0,0279	0,0000	0,0042	0,1048	0,0372	0,00822	
15	0,1053	0,1057	0,1061	0,1049	0,1061	0,1095	0,1065	0,00120	
16	0,0344	0,0379	0,0439	0,0390	0,0375	0,1052	0,0527	0,01825	
17	0,9091	0,9048	0,9093	0,9100	0,9072	0,9091	0,9081	0,00100	
18	0,7177	0,7175	0,7180	0,7180	0,7188	0,7178	0,7180	0,00033	
19	0,0670	0,1038	0,0664	0,0661	0,0665	0,1051	0,0816	0,01456	
20	0,4450	0,4454	0,4447	0,4443	0,4442	0,4448	0,4447	0,00031	
21	0,1531	0,1486	0,1531	0,1536	0,1541	0,1048	0,1428	0,01030	
22	0,4354	0,0932	0,0928	0,1222	0,4353	0,1048	0,1697	0,26574	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
2	0,0813	0,0902	0,0901	0,1238	0,0575	0,1048	0,0933	0,01194	
8	0,0622	0,0991	0,0968	0,1238	0,0571	0,1048	0,0963	0,03411	
12	0,1244	0,0856	0,0568	0,1238	0,0650	0,1048	0,0872	0,03722	
14	0,1388	0,0068	0,0771	0,0634	0,0685	0,1048	0,0641	0,07463	

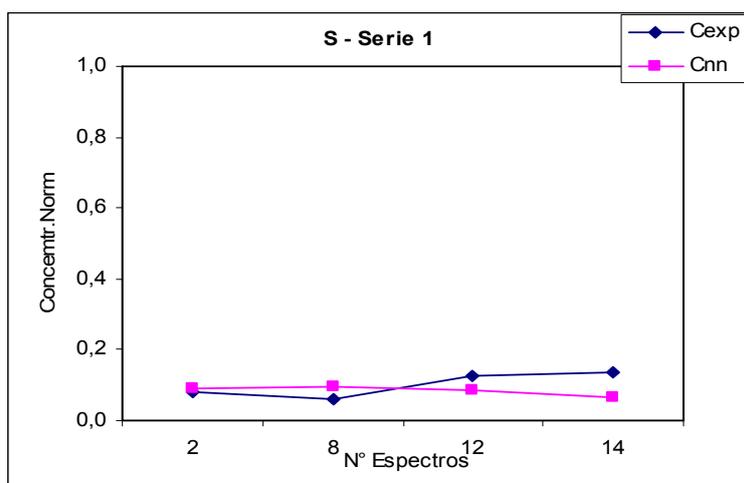


Figura 55. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie I para el S.

### c) Elemento Potasio – K

El elemento K presenta en forma similar al S, aunque en menor grado, la dificultad que la línea espectral que la identifica se traslapa en algunos casos con la del Ca, como es la situación de los espectros de muestras orgánicas de branquias (Figura 48). El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

Similar a la situación observada con el P y el S, se puede observar en la Figura 56 (a) que los valores de  $C_{mn}$  ubicados en el extremo superior de valores de  $C_{exp}$  se encuentran fuera del límite establecido en la relación (3.5) y esto se relaciona con el hecho de que la concentración de pares de entrenamiento en esa zona es muy baja.

En la Figura 56 (b), el par que muestra la mayor discrepancia corresponde a un espectro de muestra orgánica de branquia, los que se puede entender en el marco de lo explicado en el párrafo anterior.

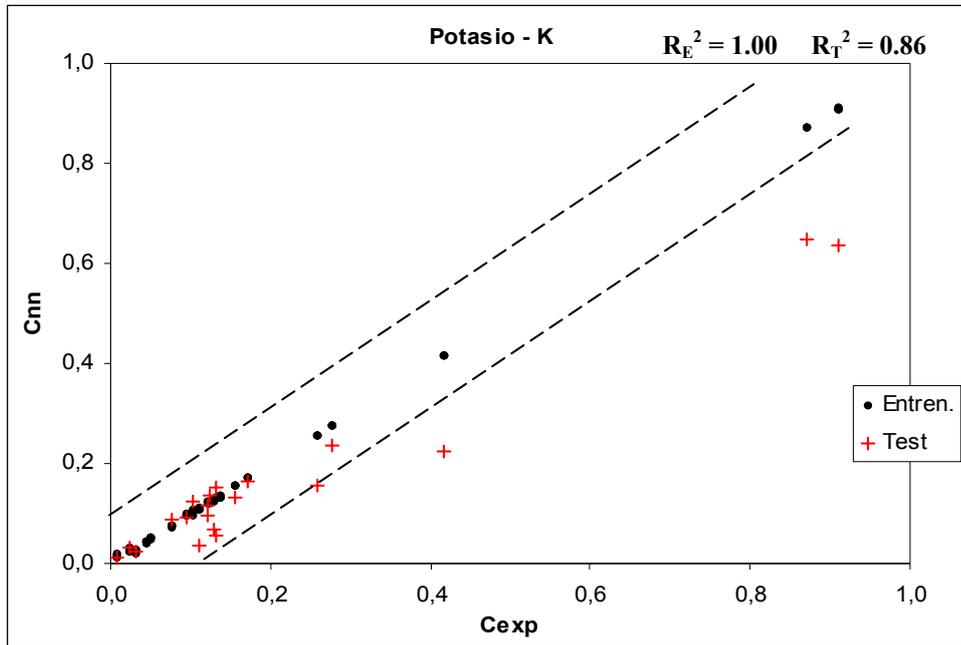
Hay que resaltar que los 3 ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con muestras diferentes y en distintas ejecuciones de la RN.

En la Tabla 10 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del K, tanto para el conjunto de entrenamiento como de test, que en este caso es la serie V. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

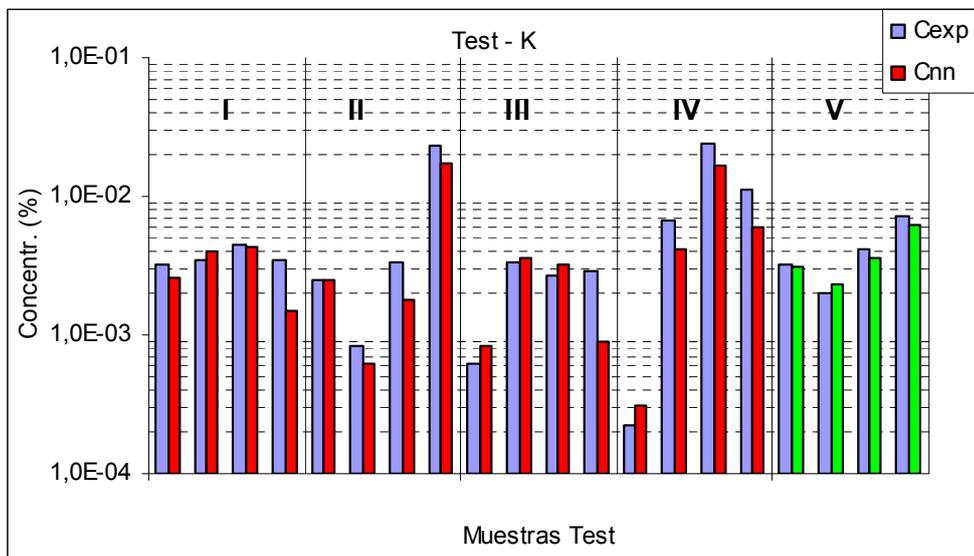
En la Figura 57 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{mn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie V). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada serie y en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 57 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 56. Potasio - K. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por el SN del K –  $C_{nn}$  (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test, determinadas por el SN del K para cada serie aplicada.

Tabla 10. Resultados obtenidos en la Serie V (mejor serie) para el K.

Potasio – K		Serie V							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,0947	0,0951	0,0960	0,1067	0,1067	0,0951	0,0999	0,00521	
3	0,0239	0,0239	0,0290	0,0368	0,0368	0,0239	0,0301	0,00620	
4	0,0083	0,0188	0,0124	0,0082	0,0082	0,0188	0,0133	0,00496	
6	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,00003	
7	0,0311	0,0226	0,0225	0,0217	0,0217	0,0226	0,0222	0,00885	
8	0,1326	0,1360	0,1315	0,1260	0,1260	0,1360	0,1311	0,00147	
9	0,1250	0,1250	0,1233	0,1107	0,1107	0,1250	0,1189	0,00605	
10	0,1023	0,1020	0,1013	0,1136	0,1136	0,1020	0,1065	0,00422	
11	0,1288	0,1293	0,1291	0,1208	0,1208	0,1293	0,1258	0,00295	
12	0,1705	0,1705	0,1704	0,1727	0,1727	0,1705	0,1713	0,00089	
13	0,1098	0,1098	0,1098	0,1129	0,1129	0,1098	0,1111	0,00121	
14	0,1326	0,1324	0,1326	0,1329	0,1329	0,1324	0,1326	0,00006	
15	0,1364	0,1361	0,1226	0,1280	0,1280	0,1361	0,1301	0,00623	
16	0,0492	0,0494	0,0492	0,0500	0,0500	0,0494	0,0496	0,00033	
17	0,8712	0,8712	0,8712	0,8713	0,8713	0,8712	0,8713	0,00005	
18	0,9091	0,9091	0,9091	0,9131	0,9131	0,9091	0,9107	0,00161	
20	0,4167	0,4167	0,4167	0,4160	0,4160	0,4167	0,4164	0,00026	
22	0,0455	0,0447	0,0454	0,0452	0,0452	0,0447	0,0450	0,00042	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
2	0,1212	0,1407	0,1023	0,1022	0,1022	0,1407	0,1176	0,00360	
5	0,0758	0,0947	0,0811	0,0809	0,0809	0,0947	0,0865	0,01071	
19	0,1553	0,0574	0,0963	0,2289	0,2289	0,0574	0,1338	0,02154	
21	0,2765	0,1947	0,2634	0,2686	0,2686	0,1947	0,2380	0,03852	

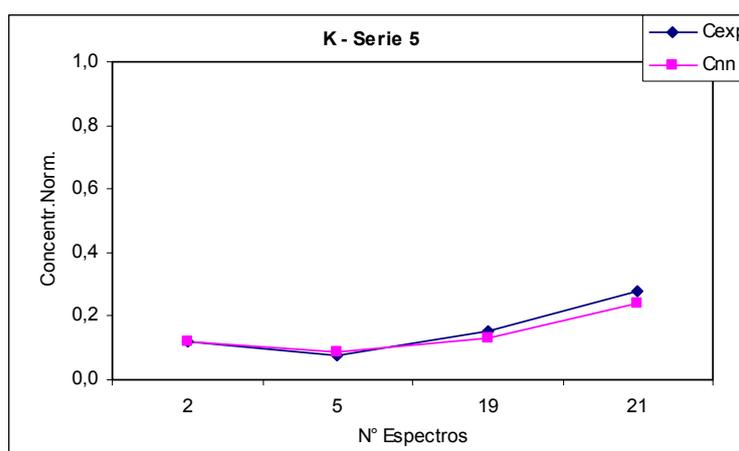


Figura 57. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie 5 para el K

#### d) Elemento Calcio – Ca

El Ca es un elemento cuya línea espectral se identifica claramente y en forma regular en todos los espectros de muestras orgánicas analizadas, lo que deriva en que las discrepancias entre los valores  $C_{nn}$  y los esperados  $C_{exp}$  en el conjunto de test sea más uniforme, como se aprecia en la Figura 58 (b). El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

Si bien el rango de valores de  $C_{exp}$  es alto, se puede observar en la Figura 58 (a) que los ejemplos de entrenamiento están distribuidos más uniformemente que para los elementos antes analizados. Esta es una razón para entender la mejor distribución de los valores  $C_{nn}$  del conjunto de test presentados en la Figura 58 (a) .

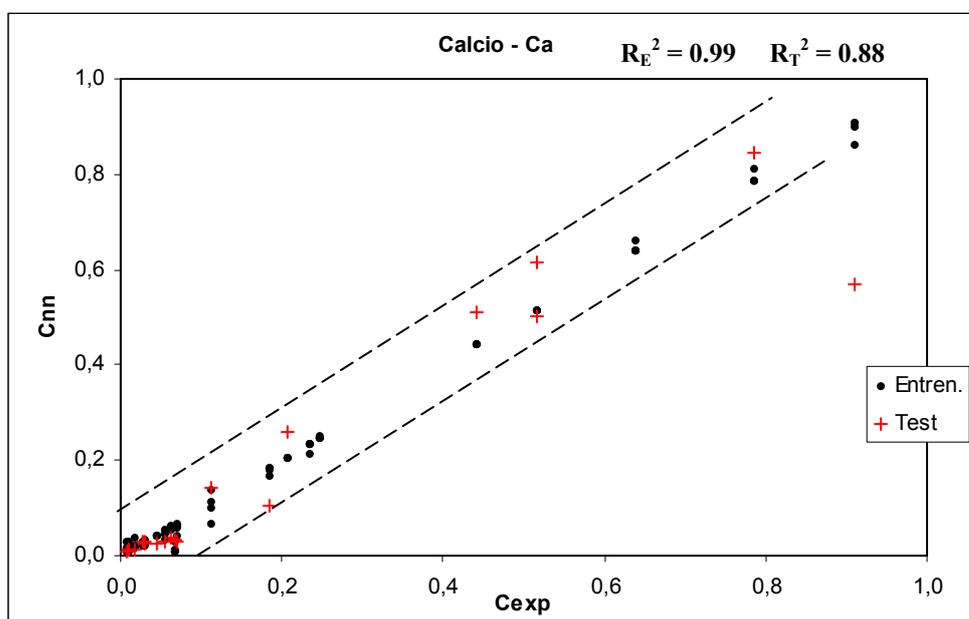
Hay que resaltar que un solo ejemplo del conjunto de test queda fuera de los márgenes aceptados, cuyo valor está cerca del límite del rango de valores en el entrenamiento.

En la Tabla 11 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del Ca, tanto para el conjunto de entrenamiento como de test, que en este caso es la serie IV. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

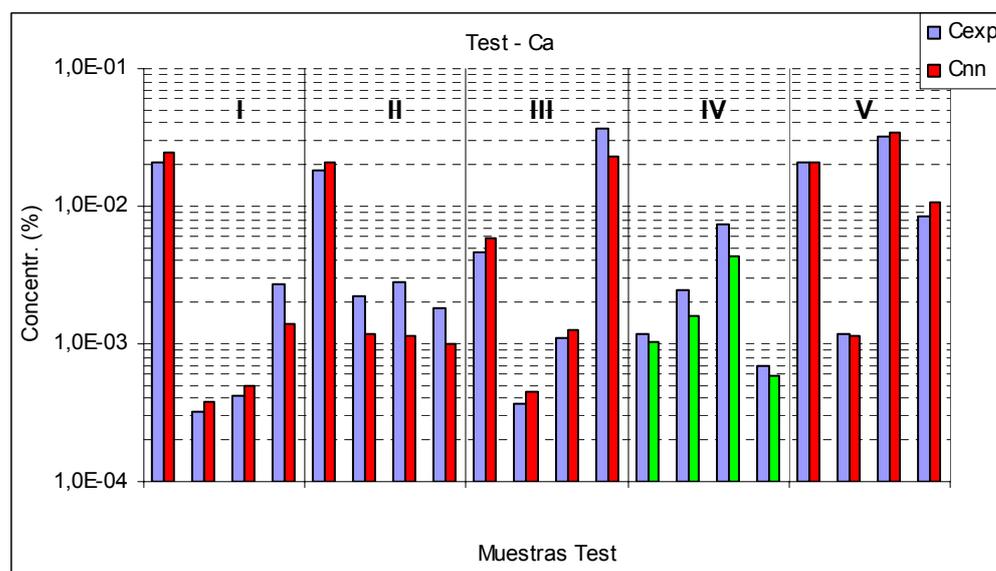
En la Figura 59 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie IV). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada serie y en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 59 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 58. Calcio - Ca. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por el SN del Ca –  $C_{nn}$  (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test, determinadas por el SN del Ca para cada serie aplicada.

Tabla 11. Resultados obtenidos en la Serie IV (mejor serie) para el Ca.

Calcio - Ca Serie IV		Salida							
Conjunto Entrenamiento		Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
Muestras									
1	0,4423	0,4417	0,4416	0,4416	0,4416	0,4416	0,4417	0,4417	0,00061
2	0,5160	0,5159	0,5159	0,5159	0,5159	0,5159	0,5158	0,5159	0,00005
3	0,1130	0,1130	0,1130	0,1129	0,1130	0,1130	0,1132	0,1130	0,00001
5	0,0295	0,0266	0,0261	0,0310	0,0306	0,0306	0,0196	0,0268	0,00269
7	0,0541	0,0530	0,0263	0,0528	0,0517	0,0517	0,0411	0,0450	0,00906
8	0,0079	0,0130	0,0263	0,0049	0,0053	0,0053	0,0075	0,0114	0,00354
9	0,0091	0,0109	0,0263	0,0133	0,0170	0,0170	0,0297	0,0194	0,01034
10	0,0270	0,0245	0,0262	0,0224	0,0136	0,0136	0,0196	0,0213	0,00577
11	0,0688	0,0683	0,0263	0,0680	0,0684	0,0684	0,0682	0,0598	0,00895
12	0,0103	0,0015	0,0262	0,0103	0,0110	0,0110	0,0201	0,0138	0,00349
13	0,9091	0,9071	0,9084	0,9082	0,9086	0,9086	0,9096	0,9084	0,00071
14	0,0663	0,0006	0,0263	0,0071	0,0103	0,0103	0,0004	0,0089	0,05739
15	0,6388	0,6387	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,00020
16	0,2457	0,2458	0,2456	0,2456	0,2455	0,2455	0,2455	0,2456	0,00010
17	0,0442	0,0432	0,0439	0,0437	0,0438	0,0438	0,0443	0,0438	0,00043
19	0,7862	0,7861	0,7861	0,7861	0,7862	0,7862	0,7862	0,7861	0,00010
21	0,2064	0,2065	0,2063	0,2064	0,2064	0,2064	0,2060	0,2063	0,00005
22	0,2334	0,2335	0,2334	0,2335	0,2334	0,2334	0,2334	0,2334	0,00003

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
4	0,0295	0,0354	0,0263	0,0239	0,0195	0,0202	0,0251	0,00443	
6	0,0614	0,0201	0,0256	0,0715	0,0797	0,0004	0,0395	0,02196	
18	0,1843	0,0115	0,1878	0,0501	0,0858	0,1968	0,1064	0,07785	
20	0,0172	0,0007	0,0525	0,0113	0,0053	0,0016	0,0143	0,00291	

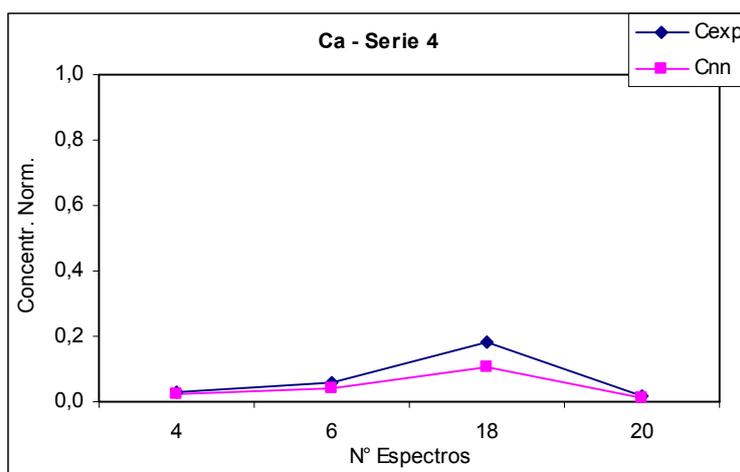


Figura 59. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie 4 para el Ca.

### e) Elemento Hierro – Fe

Como se puede ver en la Figura 48 la línea espectral del Fe es menos intensa que la de los elementos antes analizados, pero existe una ventaja comparativa importante que se relaciona con el hecho de que está en una zona espectral de bajo fondo, lo que permite que se pueda identificar bien. Las concentraciones de Fe en las muestras orgánicas analizadas son bajas y varias de ellas están en la zona BLD (bajo el límite de detección), lo que implica que en la determinación de  $C_{exp}$ , el error experimental asociado se espera que sea mayor y esto repercute en el proceso de entrenamiento del respectivo SN. El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

En la Figura 60 (b) se ve que la mayor discrepancia se produce para aquellos pares de concentraciones superiores donde densidad de valores usados en el proceso de entrenamiento es muy baja.

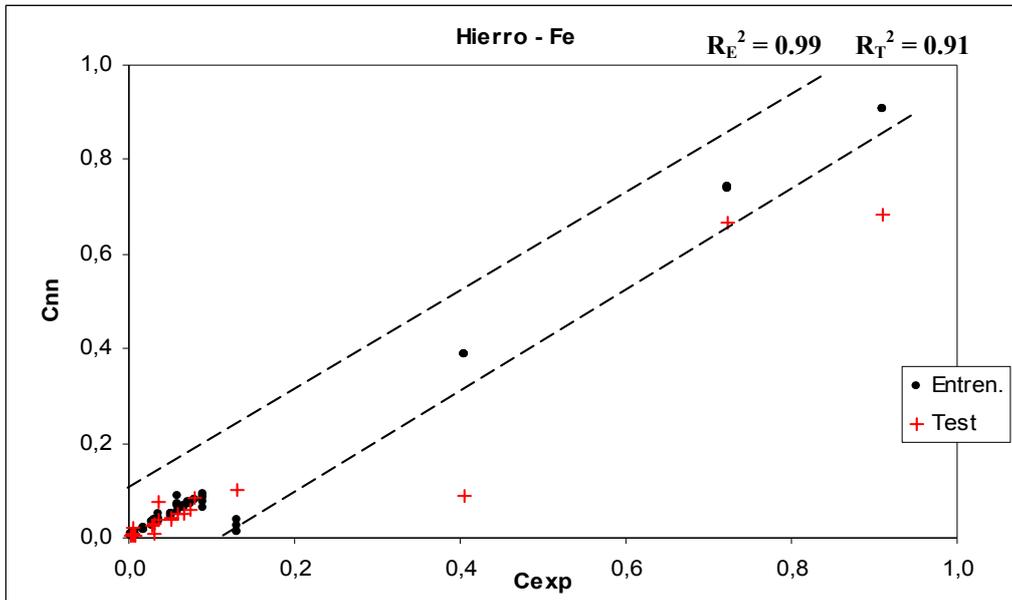
Hay que resaltar que los 2 ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

En la Tabla 12 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del Fe, tanto para el conjunto de entrenamiento como de test, que en este caso es la serie III. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

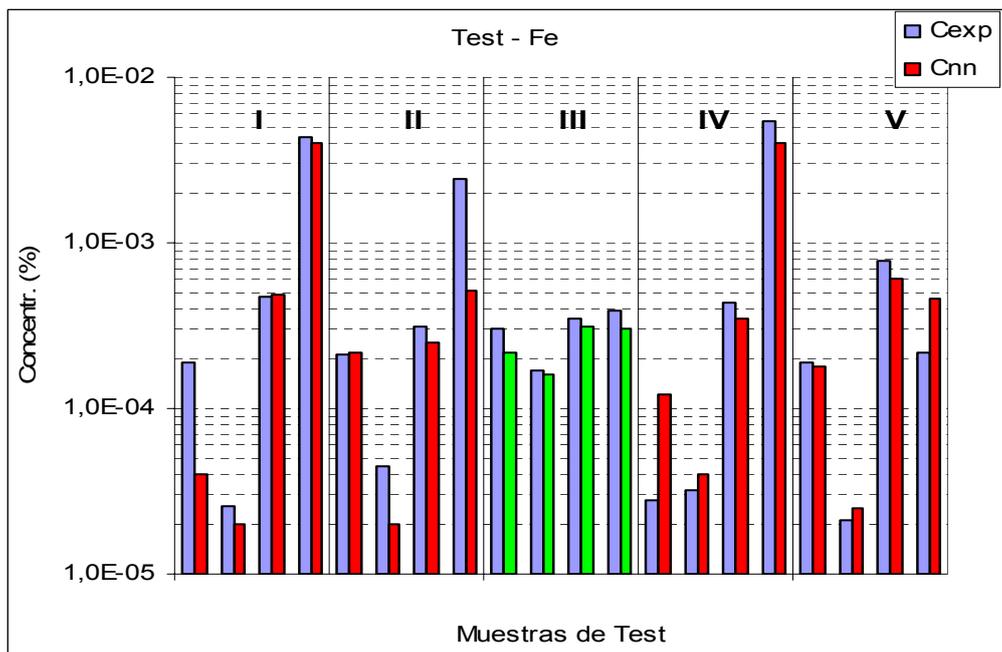
Y en la Figura 61 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie III). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada serie y en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 61 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 60. Hierro - Fe. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por el SN del Fe - Cnn (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test, determinadas por el SN del Fe para cada serie aplicada.

Tabla 12. Resultados obtenidos en la Serie III (mejor serie) para el Fe

Hierro - Fe Serie III		Salida							
Conjunto Entrenamiento		Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl
Muestras									
1	0,0354	0,0332	0,0416	0,0340	0,0483	0,0337	0,0381	0,00279	
2	0,0320	0,0342	0,0293	0,0337	0,0483	0,0316	0,0354	0,00343	
4	0,0047	0,0042	0,0091	0,0032	0,0051	0,0207	0,0085	0,00374	
5	0,0035	0,0024	0,0066	0,0051	0,0045	0,0118	0,0061	0,00253	
6	0,0054	0,0054	0,0057	0,0052	0,0045	0,0108	0,0063	0,00094	
7	0,0076	0,0089	0,0099	0,0082	0,0064	0,0207	0,0108	0,00327	
8	0,0044	0,0030	0,0066	0,0039	0,0045	0,0104	0,0057	0,00131	
11	0,0522	0,0525	0,0485	0,0525	0,0483	0,0221	0,0448	0,00741	
12	0,0791	0,0788	0,0783	0,0788	0,0788	0,0813	0,0792	0,00007	
14	0,7239	0,7404	0,7426	0,7404	0,7404	0,7406	0,7409	0,01697	
15	0,0909	0,0902	0,0480	0,0909	0,0545	0,0421	0,0652	0,02576	
16	0,0707	0,0721	0,0830	0,0707	0,0798	0,0705	0,0752	0,00451	
17	0,4040	0,3869	0,3875	0,3869	0,3867	0,3862	0,3868	0,01721	
18	0,0741	0,0736	0,0490	0,0736	0,0753	0,0815	0,0706	0,00350	
19	0,1313	0,0133	0,0520	0,0140	0,0131	0,0401	0,0265	0,10481	
20	0,9091	0,9091	0,9084	0,9091	0,9089	0,9082	0,9088	0,00034	
21	0,0370	0,0369	0,0483	0,0372	0,0379	0,0418	0,0404	0,00337	
22	0,0185	0,0205	0,0187	0,0199	0,0204	0,0227	0,0204	0,00192	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
3	0,0505	0,0348	0,0481	0,0328	0,0487	0,0224	0,0374	0,01313	
9	0,0286	0,0212	0,0239	0,0281	0,0428	0,0200	0,0272	0,00141	
10	0,0589	0,0320	0,0500	0,0431	0,0544	0,0810	0,0521	0,00684	
13	0,0657	0,0529	0,0465	0,0508	0,0564	0,0439	0,0501	0,01556	

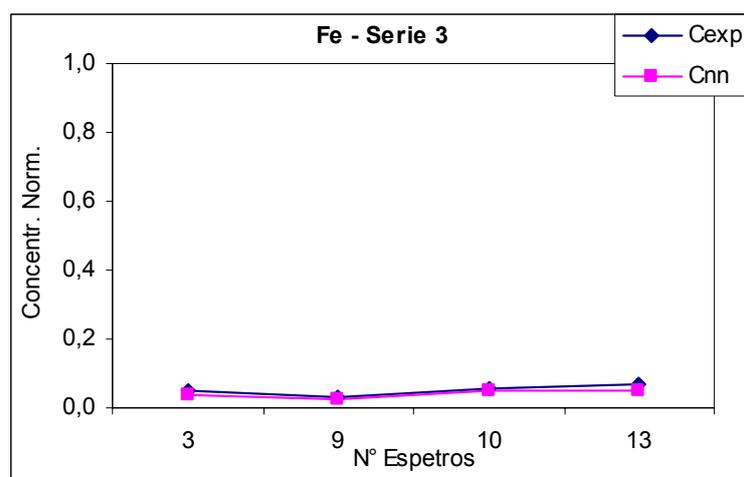


Figura 61. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie 3 para el Fe.

## f) Elemento Zinc – Zn

El Zn constituye el elemento más complicado en el presente análisis neuronal de muestras orgánicas debido a la baja intensidad de su línea espectral. En algunos casos, como en los espectros provenientes de branquias, su línea espectral es casi imperceptible. Muchas de las concentraciones en los conjuntos de entrenamiento y de test se encuentran en la zona BLD. Por esta situación es que se puede esperar un error experimental mayor que el normal y esto repercutirá en la respuesta de los SNs. El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

Sin embargo, si se observa las Figuras 62 (a) y (b) se puede concluir que, a pesar de las dificultades antes mencionadas, el SN del Zn adquiere una capacidad de generalizar luego de un proceso de entrenamiento y que dicha capacidad debería crecer si se toman medidas adecuadas para que el error experimental asociado no repercuta en la fase de entrenamiento.

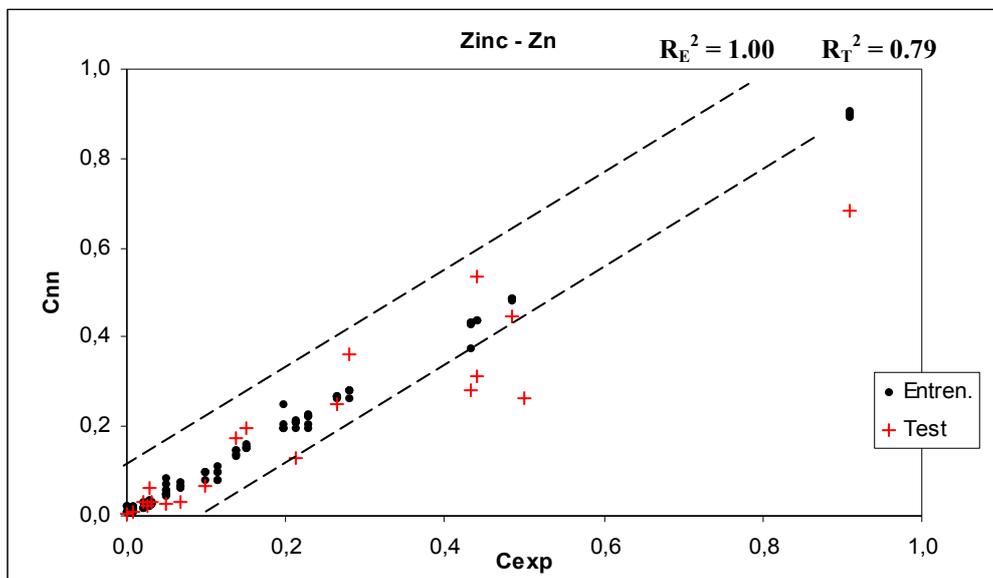
Hay que resaltar que los 3 ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

En la Tabla 13 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de la mejor serie de experimentos del SN del Zn, tanto para el conjunto de entrenamiento como de test, que en este caso es la serie III. Las demás series se incluyen en el apéndice I.

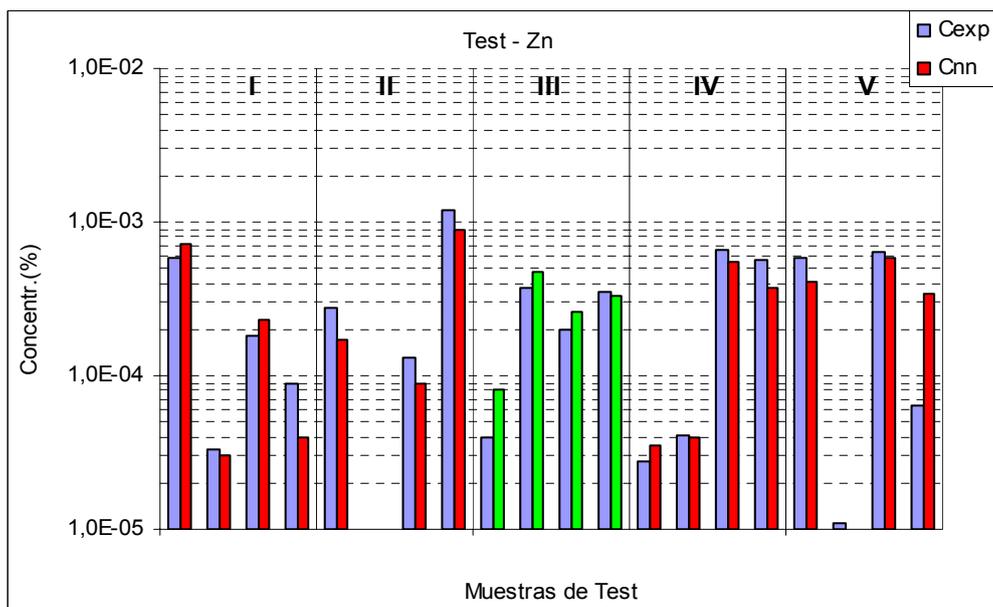
Y en la Figura 63 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test en la mejor serie (serie III). Se incluyen en el apéndice I las restantes series.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien siempre, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La Figura 63 muestra que en esta serie, no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por la RN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 62. Zinc - Zn. (a) Gráfico de correlación entre las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por el SN del Zn - Cnn (incluye resultados de las 5 series). (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$ , del conjunto de test, determinadas por el SN del Zn para cada serie aplicada.

Tabla 13. Resultados obtenidos en la Serie III (mejor serie) para el Zn.

Zinc - Zn Serie III									
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,2121	0,2174	0,2121	0,2189	0,2121	0,1318	0,1985	0,01364	
2	0,4394	0,4364	0,4371	0,4364	0,4371	0,4311	0,4356	0,00379	
4	0,0212	0,0447	0,0129	0,0068	0,0212	0,0091	0,0189	0,00227	
5	0,0083	0,0394	0,0144	0,0076	0,0189	0,0061	0,0173	0,00894	
6	0,0311	0,0447	0,0144	0,0348	0,0303	0,0258	0,0300	0,00106	
7	0,0008	0,0439	0,0136	0,0417	0,0053	0,0182	0,0245	0,02379	
8	0,0250	0,0409	0,0159	0,0227	0,0242	0,0318	0,0271	0,00212	
11	0,0985	0,0424	0,1015	0,0750	0,1030	0,0788	0,0802	0,01833	
12	0,1364	0,1280	0,1295	0,1371	0,1455	0,2030	0,1486	0,01227	
14	0,0674	0,0674	0,0667	0,0841	0,0886	0,0644	0,0742	0,00682	
15	0,2273	0,2295	0,2265	0,1417	0,1803	0,2129	0,1982	0,02909	
16	0,1970	0,1977	0,1970	0,3227	0,3227	0,2159	0,2512	0,05424	
17	0,9091	0,8985	0,8992	0,8727	0,8955	0,8947	0,8921	0,01697	
18	0,0500	0,0492	0,0576	0,0864	0,0515	0,0455	0,0580	0,00803	
19	0,4848	0,4833	0,4841	0,4841	0,4841	0,4652	0,4802	0,00470	
20	0,4318	0,4318	0,4311	0,2985	0,3015	0,4076	0,3741	0,05773	
21	0,0485	0,0462	0,0492	0,1159	0,0932	0,1197	0,0848	0,03636	
22	0,1136	0,0576	0,1167	0,0068	0,1038	0,1114	0,0792	0,03439	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
3	0,0295	0,0424	0,0697	0,0682	0,0227	0,0227	0,0452	0,01561	
9	0,2803	0,2523	0,4364	0,3583	0,3811	0,4682	0,3792	0,09894	
10	0,1515	0,2492	0,1364	0,2098	0,3129	0,1326	0,2082	0,05667	
13	0,2652	0,2295	0,2917	0,2561	0,2144	0,2864	0,2556	0,00955	

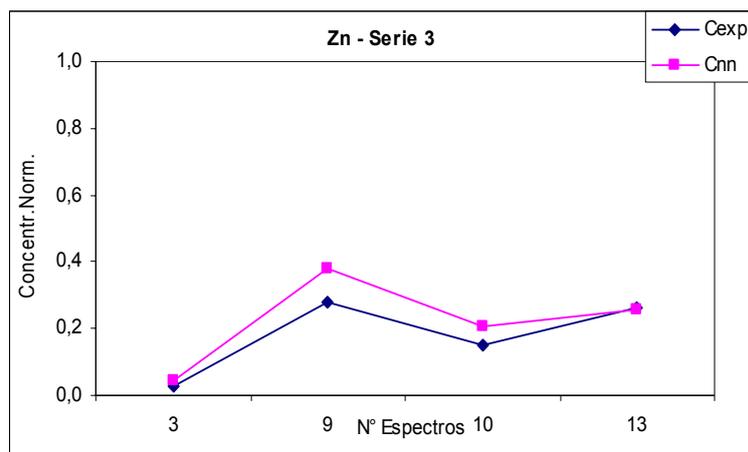


Figura 63. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie 3 para el Zn.

### 3.3.2) Comentarios adicionales

De acuerdo con el criterio de verificación planteado en la relación (3.5), y como se observa en las Tablas 7 – 13, se tiene que los SNs respectivos determinan correctamente las concentraciones del conjunto de entrenamiento y test, para todos los ejemplos de la mejor serie ejecutada. Y también es necesario destacar las siguientes situaciones:

- Todos los ejemplos del conjunto entrenamiento, en las 5 series ejecutadas para el P, aprenden correctamente. Y en los conjuntos de test sólo 3 ejemplos de un total de 20, como se aprecia en la Figura 52 (a) y en la respectiva tabla del Apéndice 1, aparecen fuera del rango estipulado para las respuestas correctas.
- El 100% de los ejemplos de entrenamiento y el 90% de los ejemplos de los conjuntos test aprende correctamente en las 5 series ejecutadas con el SN del S, de acuerdo al criterio planteado en la relación (3.5). En 3 de las 5 series los ejemplos de test aprenden correctamente y en las 2 restantes sólo un ejemplo por serie no aprende en el rango establecido.
- De las cinco series ejecutadas con el SN del elemento K hay 3 ejemplos de test pertenecientes a 2 series que no aprenden de acuerdo al criterio establecido. Es decir, el 100% de los elementos de entrenamiento responde correctamente, como también el 100% de elementos de test en 3 de las 5 series.
- Sólo un ejemplo de test no responde adecuadamente en las 5 ejecuciones del SN del Ca. Esto implica que el 100% de los ejemplos de entrenamiento y el 95% de los ejemplos de test responde correctamente.
- En el SN del Fe el 100% de los ejemplos de entrenamiento y el 90% de los ejemplos de los conjuntos test aprende correctamente en las 5 series ejecutadas, de acuerdo al rango establecido en la relación (3.5). En 3 de las 5 series los ejemplos de test aprenden correctamente y en las 2 restantes sólo un ejemplo por serie no responde adecuadamente..
- El SN del Zn responde correctamente en el 100% de los ejemplos de entrenamiento y en el 80% de los de test. La mejor serie presenta el 100% de respuestas correctas, tanto en el conjunto de test como de entrenamiento y cada

una de las 4 series restante tiene una sola respuesta incorrecta perteneciente al respectivo conjunto de test.

Se puede afirmar que los SNs determinaron en el rango de valores permitidos, casi todas (en torno al 90.%) las concentraciones  $C_{nn}$  pertenecientes al conjunto de test de los elementos investigados. En el caso del Zn esta cifra es menor debido a que hay más elemento con valores cercanos al BLDE (bajo el límite de detección experimental).

En general, para cada elemento, hay siempre una serie, o al menos una RN del SN que aprende suficientemente bien los ejemplos de entrenamiento y test.

El error en la determinación de las concentraciones por los SNs es mayor en aquellos elementos cuya presencia en la muestra, es decir su concentración, es menor. Esto es razonable ya que en estos casos el número de cuentas en el máximo de la línea espectral es considerablemente bajo, y esta variable es una entrada directa a la RN. En el caso del Fe se observan, en mayor número que para otros elementos, que algunos ejemplos del conjunto de test están fuera del intervalo considerado como respuesta adecuada y esto se puede comprender ya que el rango de valores de las concentraciones es mayor. Varios de esos casos son valores más alejados de los valores promedios y cercanos a los límites del rango. Y en el caso del Zn el coeficiente de correlación para el test muestra un grado de dependencia menor que para los otros elementos, respecto a los ejemplos de entrenamiento, y esto es explicable debido a que la presencia de este elemento en casi todas las muestras es cercano al límite de detección.

### 3.3.3) Tablas de errores relativos

En este apartado se presenta un conjunto de datos sobre el tratamiento de errores en la aplicación de la metodología neuronal diseñada para el análisis de espectros PIXE en sustancias orgánicas.

El error relativo  $ER(i)$  del ejemplo número  $i$  en el conjunto de entrenamiento y de test se define de la siguiente forma:

$$ER(i) = |C_{nn}(i) - C_{exp}(i)| / C_{exp}(i) \quad (3.6)$$

donde  $C_{nn}(i)$  y  $C_{exp}(i)$  son las concentraciones determinadas por el SN y por la metodología PIXE respectivamente, en el ejemplo número  $i$ .

El **EPR** (error promedio relativo sobre los elementos de entrenamiento) se determina de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\mathbf{EPR} = \sum_i \mathbf{ER(i)/n} \quad i = 1, \dots, 18 \quad (3.7)$$

En forma similar se define **EPRT** (error promedio relativo de elementos de test ) considerando la expresión (3.7) solo para los elementos de test en cada serie ( $i = 1, \dots, 4$ ).

Como un antecedente importante para el análisis de resultados se considera el error promedio relativo de test, en cada serie – **EPRT1**, eliminando el peor ejemplo.

En las tablas de errores relativos clasificados por elementos y por serie se consideran los tipos de error mencionados para estimar conclusiones sobre la capacidad de generalización de los SNs utilizadas.

Tabla 14. Errores relativos en la determinación de la concentración de P.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT1</b>
<b>Serie I</b>	0,14	0,40	0,29
<b>Serie II</b>	0,07	0,18	0,09
<b>Serie III</b>	0,07	0,23	0,12
<b>Serie IV</b>	0,07	0,16	0,12
<b>Serie V</b>	0,14	0,49	0,21

Tabla 15. Errores relativos en la determinación de la concentración de S.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT1</b>
<b>Serie I</b>	0,32	0,38	0,33
<b>Serie II</b>	0,27	0,44	0,28
<b>Serie III</b>	0,61	0,43	0,35
<b>Serie IV</b>	0,71	2,76	0,18
<b>Serie V</b>	0,37	0,50	0,12

Tabla 16. Errores relativos en la determinación de la concentración de K.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT2</b>
<b>Serie I</b>	0,07	0,25	0,14
<b>Serie II</b>	0,07	0,24	0,17
<b>Serie III</b>	0,09	0,32	0,20
<b>Serie IV</b>	0,02	0,39	0,37
<b>Serie V</b>	0,08	0,11	0,10

Tabla 17. Errores relativos en la determinación de la concentración de Ca.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT2</b>
<b>Serie I</b>	0,19	0,52	0,37
<b>Serie II</b>	0,40	0,40	0,34
<b>Serie III</b>	0,06	0,35	0,26
<b>Serie IV</b>	0,19	0,27	0,23
<b>Serie V</b>	0,23	0,14	0,04

Tabla 18. Errores relativos en la determinación de la concentración de Fe.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT2</b>
<b>Serie I</b>	0,17	0,23	0,05
<b>Serie II</b>	0,18	0,39	0,25
<b>Serie III</b>	0,23	0,17	0,13
<b>Serie IV</b>	0,21	0,98	0,22
<b>Serie V</b>	0,15	0,67	0,53

Tabla 19. Errores relativos en la determinación de la concentración de Zn.

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT2</b>
<b>Serie I</b>	0,11	1,01	0,24
<b>Serie II</b>	0,09	2,35	0,47
<b>Serie III</b>	0,50	0,32	0,25
<b>Serie IV</b>	0,73	0,31	0,22
<b>Serie V</b>	0,60	1,24	0,19

En las tablas anteriores se aprecia, en la mayoría de los casos, una correlación en las respuestas de los SNs a las consultas planteadas en los conjuntos de test y entrenamiento. Las inconsistencias y errores relativos mayores se observan en las series correspondientes a los elementos S y Zn, y también son los únicos elementos donde el mejor experimento de test no coincide con buenos resultados en el entrenamiento. En el caso del Zn esta falta de coherencia se explica debido a que la presencia de este elemento, como se argumentó en párrafos superiores, se encuentra cercana al límite de detección del instrumental utilizado, por tanto los datos experimentales utilizados en el proceso de entrenamiento aportan una mayor dosis de incertidumbre. Por otro lado, el S es un elemento difícil de analizar debido a que la línea espectral que lo identifica se encuentra sobre un fondo considerable y en algunos casos, como se ilustra en la Figura 48 en el espectro de Branquia, el área del pico espectral se traslapa con la respectiva del elemento P. Por ello, en estos dos casos se puede esperar que los propios datos espectrales experimentales con que fueron entrenadas las RNs, tengan una imprecisión mayor que en los otros elementos analizados.

En general se observa que en aquellos casos donde el EPRT es grande esto se debe principalmente a que hay un solo ejemplo del conjunto de test es el que no aprende. Por ello, el EPRT1 en estos casos es considerablemente menor que el EPRT, como sucede en la Serie IV del S, en la Serie IV del Fe y en las Series II y V del Zn.

### 3. 4) CLASIFICACIÓN DEL GRADO DE POLUCIÓN ELEMENTAL EN MUESTRAS ORGÁNICAS.

En diversos experimentos de análisis elemental de muestras se busca sólo detectar el grado de presencia de determinados elementos y las metodologías tradicionales de procesamiento espectral experimental demandan tiempo y trabajo. Por ello la utilización de los SNs en esta línea es un camino factible de automatización de este tipo de análisis. Los niveles clasificatorios que se mencionan más adelante son definidos de acuerdo a los objetivos experimentales planteados.

Con este objeto en este apartado se estudia la capacidad de los SNs para clasificar las concentraciones en 4 categorías que reflejan el grado de presencia de determinado elemento en la muestra. Las categorías planteadas se relacionan con los siguientes rangos de concentración ( $c$  – medida en %) de un elemento en determinada muestra:

- **BLD**            ( $c < 10^{-4}$ ): bajo el límite de detección.
- **Bajo**            ( $10^{-4} \leq c < 10^{-3}$ )
- **Medio**          ( $10^{-3} \leq c < 10^{-2}$ )
- **Alto**            ( $10^{-2} \leq c$ )

El resumen que se presenta en las tablas corresponde tanto a los ejemplos de entrenamiento como a los de test. Para cada elemento se presentan las clasificaciones considerando los ejemplos de cada una de las cinco series, es decir, si se considera que por serie hay 18 espectros para el entrenamiento y 4 de test se tiene que los casos analizados por elemento son 90 de entrenamiento y 20 de test.. La clasificación de las concentraciones realizada por los SNs ( $C_{nn}$ ) es comparada en cada categoría con la correspondiente clasificación de las concentraciones experimentales ( $C_{exp}$ ).

En este análisis se definen las siguientes cantidades:

$C_e^E$ ,  $C_e^T$ , representan la clasificación experimental de las concentraciones en los conjuntos de entrenamiento y test respectivamente, que sirven de referencia en el estudio de las clasificaciones realizadas por los SNs.

$C_{nn}^E$ ,  $C_{nn}^T$ : son las clasificaciones realizadas por los SNs de las concentraciones elementales en el conjunto de entrenamiento y test respectivamente. Las clasificaciones

incorrectas realizadas por los SNs se especifican en cada nivel con la expresión I(u) donde I es el número de fallas y u es la categoría donde se debería clasificar.

$\delta_E$ ,  $\delta_T$ , representan la discrepancia de la clasificación correcta dada por el SN y la experimental en la categoría especificada para los conjuntos de entrenamiento y test.

$R_E = C_{nn}^E / C_e^E$  y  $R_T = C_{nn}^T / C_e^T$ , representan las razones entre las clasificaciones correctas de los SNs y las experimentales son una medida de la capacidad de clasificación de los SNs tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de test. Por otro lado, el cociente  $R_T/R_E$  se puede considerar como una medida de la capacidad de generalización del SN con un entrenamiento específico, si se interpreta como un índice de la posibilidad de que el SN pueda representar lo realizado en el proceso de entrenamiento.

Tabla 20. Clasificación del grado de polución de P en muestras orgánicas.

P – Fósforo	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
(a)-BLD	0	0	0		0	0	0
(b)-Bajo	0	0	0		0	0	0
(c)-Medio	54	54	0		11	10 + 1(b)	1
(d)-Alto	36	36	0		9	8 + 1(c)	1
Nº de clasifcs.	<b>90</b>	<b>90</b>	<b>0</b>		<b>20</b>	<b>18 + (2)</b>	<b>2</b>
$R_E = 1.00$		$R_T = 0.9$		$R_T/R_E = 0.9$			

Tabla 21. Clasificación del grado de polución de S en muestras orgánicas.

S – Azufre	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
(a)-BLD	2	0	2		1	0 + 1(b)	1
(b)-Bajo	17	14+2(a)+1(c)	3		4	3 + 1(c)	1
(c)-Medio	63	62 + 3(b)	1		13	13	0
(d)-Alto	8	8	0		2	1 + 1(c)	1
Nº de clasifcs.	<b>90</b>	<b>84 + (6)</b>	<b>6</b>		<b>20</b>	<b>17 + (3)</b>	<b>3</b>
$R_E = 0.93$		$R_T = 0.85$		$R_T/R_E = 0.91$			

Tabla 22. Clasificación del grado de polución de K en muestras orgánicas.

<b>K – Potasio</b>	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	0	0	0		0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	12	12	0		3	3	0
<b>(c)-Medio</b>	66	66	0		14	13 +1(b)	1
<b>(d)-Alto</b>	12	12	0		3	2 + 1(c)	1
<b>N° de clasifics.</b>	<b>90</b>	<b>90</b>	<b>0</b>		<b>20</b>	<b>18 + (2)</b>	<b>2</b>
<b><math>R_E = 1.00</math></b>		<b><math>R_T = 0.9</math></b>		<b><math>R_T/R_E = 0.9</math></b>			

Tabla 23. Clasificación del grado de polución de Ca en muestras orgánicas.

<b>Ca - Calcio</b>	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	0	0	0		0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	16	13 + 3(c)	3		4	4	0
<b>(c)-Medio</b>	49	44 + 5(b)	5		11	9+1(b)+1(d)	2
<b>(d)-Alto</b>	25	25	0		5	5	0
<b>N° de clasifics.</b>	<b>90</b>	<b>90</b>	<b>8</b>		<b>20</b>	<b>18 + (2)</b>	<b>2</b>
<b><math>R_E = 0.91</math></b>		<b><math>R_T = 0.9</math></b>		<b><math>R_T/R_E = 0.99</math></b>			

Tabla 24. Clasificación del grado de polución de Fe en muestras orgánicas.

<b>Fe – Hierro</b>	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	20	20	0		5	4 + 1(b)	1
<b>(b)-Bajo</b>	58	56 + 2(a)	2		12	11+1(a)	1
<b>(c)-Medio</b>	12	12	0		3	2 + 1(b)	1
<b>(d)-Alto</b>	0	0	0		0	0	0
<b>N° de clasifics.</b>	<b>90</b>	<b>88 + (2)</b>	<b>2</b>		<b>20</b>	<b>17 + (3)</b>	<b>3</b>
<b><math>R_E = 0.98</math></b>		<b><math>R_T = 0.85</math></b>		<b><math>R_T/R_E = 0.87</math></b>			

Tabla 25. Clasificación del grado de polución de Zn en muestras orgánicas.

Zn – Zinc	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
(a)-BLD	36	34+2(b)	2		8	7 + 1(b)	1
(b)-Bajo	50	50	0		11	10 + 1(a)	1
(c)-Medio	4	4	0		1	0 + 1(b)	1
(d)-Alto	0	0	0		0	0	0
<b>N° de clasifcs.</b>	<b>90</b>	<b>88 +(2)</b>	<b>2</b>		<b>20</b>	<b>17 + (3)</b>	<b>3</b>
<b><math>R_E = 0.98</math></b>		<b><math>R_T = 0.9</math></b>		<b><math>R_T/R_E = 0.92</math></b>			

Tabla 26. Resumen de clasificación del grado de polución de los elementos investigados en muestras orgánicas analizadas.

Total	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
(a)-BLD	58	54 + 2(b)	2		14	11+3(b)	3
(b)-Bajo	153	145+4(a)+4(c)	8		34	31+1(c)+2(a)	3
(c)-Medio	248	240 + 8(b)	8		53	47+5(b)+1(d)	6
(d)-Alto	81	81	0		19	16+3(c)	3
<b>N° de clasifcs.</b>	<b>540</b>	<b>522+(18)</b>	<b>18</b>		<b>120</b>	<b>108+(15)</b>	<b>15</b>
<b><math>R_E = 0.97</math></b>		<b><math>R_T = 0.9</math></b>		<b><math>R_T/R_E = 0.93</math></b>			

Tabla 27. Relaciones de clasificación de los SNs para cada elemento en el conjunto de entrenamiento y de Test.

	$R_E$	$R_T$	$R_T/R_E$
<b>P – Fósforo</b>	1.00	0.90	0.90
<b>S – Azufre</b>	0.93	0.85	0.91
<b>K – Potasio</b>	1.00	0.90	0.90
<b>Ca – Calcio</b>	0.91	0.90	0.99
<b>Fe – Hierro</b>	0.98	0.85	0.87
<b>Zn - Zinc</b>	0.98	0.90	0.92

En la Tabla 27 se observa que el nivel de aciertos en la clasificación en el conjunto de test respecto al nivel de aciertos en el conjunto de entrenamiento de los SNs (que se ilustra en la columna  $R_T/R_E$ ) es superior al 90% en todos los casos excepto para el Fe, donde el rango, o dispersión, de los valores  $C_{exp}$  empleados en el conjunto de test es mayor que el de los otros elementos y por ello es de esperar una mayor dispersión de los resultados que entrega el respectivo SN. El error que se aprecia en la clasificación se encuentra en los rangos aceptables en este tipo de análisis en la física atómica y nuclear. En la Tabla 26 se ve que el nivel de aciertos sobre el total de elementos en el conjunto de entrenamiento es un 97% y en el conjunto de test es de 90% lo que refleja la capacidad de generalización de los SNs para clasificar las concentraciones en los niveles mencionados.

Por otro lado, en las Tablas 20 a 25 se puede ver que las clasificaciones incorrectas realizadas por los SNs siempre se insertan en grupos adyacentes al correcto, lo que constituye un argumento para implementar en el futuro una clasificación difusa.

Y en las Figuras 64 y 65 se presenta gráficamente el grado de coincidencia entre las clasificaciones experimentales y las clasificaciones correctas realizadas por los SNs de las concentraciones elementales en muestras orgánicas, tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de test.

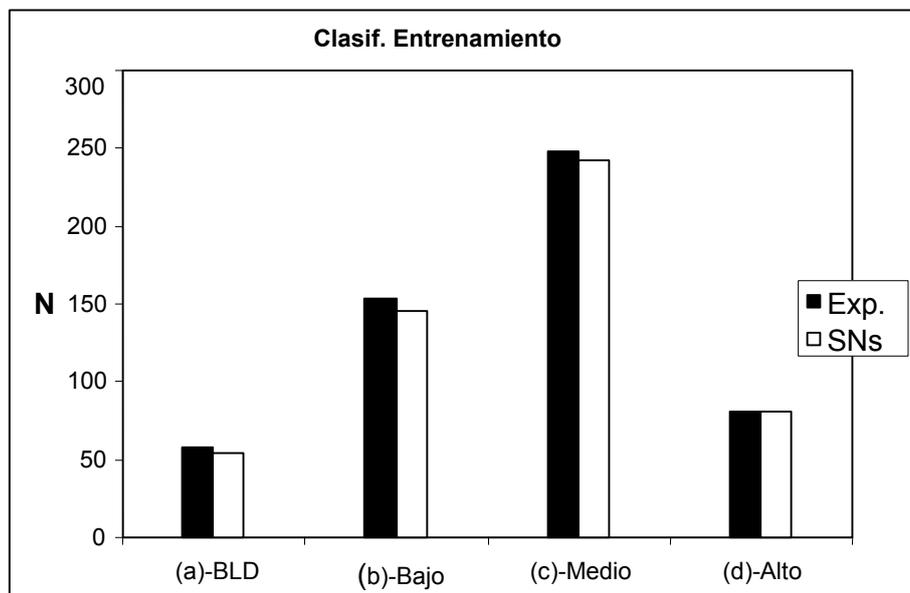


Figura 64. Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las clasificaciones correctas realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras orgánicas.

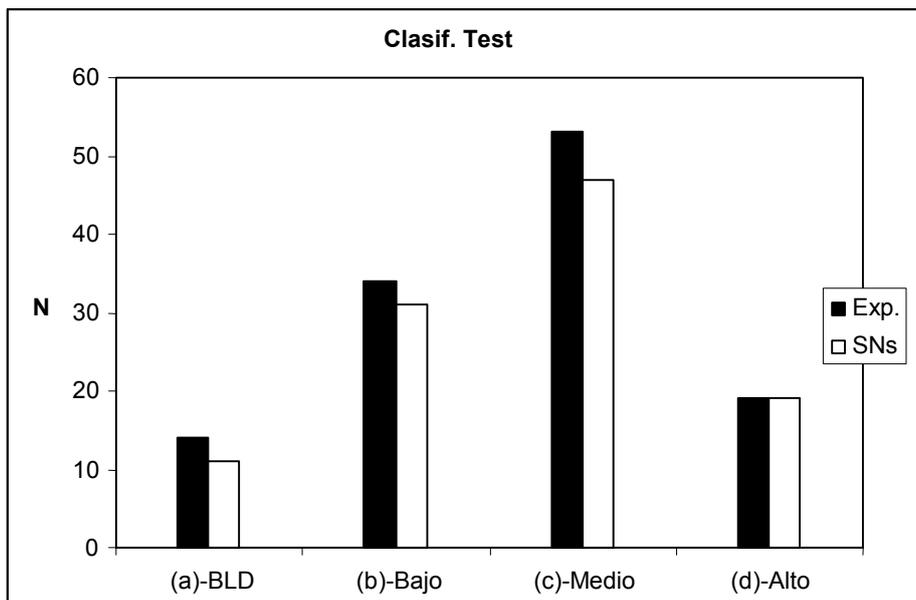


Figura 65. Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las clasificaciones correctas realizadas por los SNs en el conjunto de test de las muestras orgánicas.

## **CAPÍTULO IV.**

### **SISTEMAS NEURONALES PARA EL ANÁLISIS DE ESPECTROS PIXE DE MUESTRAS DE AEROSOL.**



El análisis de muestras de aerosoles presentes en el aire reviste gran importancia en el monitoreo de sustancias contaminantes y nocivas para la salud de la población, en particular, en grandes ciudades con altos índices de contaminación ambiental, como lo es Santiago de Chile. En general este análisis convencional se limita a los denominados “contaminantes regulados” (como los compuestos: CO, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> y material particulado PM) sobre los cuales se han determinados normas de riesgos y metodologías experimentales rápidas para medir su presencia. Estas normas no incluyen las sustancias químicas no reguladas, que en algunos casos pueden resultar peligrosas y tóxicas para la salud de la población.

En la presente aplicación se propone la metodología de RNAs para el análisis automático en línea de espectros PIXE obtenidos de la irradiación de muestras de aerosoles, obteniendo la concentración de los elementos definidos de interés.

Las muestras de aerosoles irradiadas y analizadas consisten en filtros especiales, contruidos en base a sustrato de Teflón, que se exponen a la contaminación ambiental y que recopilan aerosoles de aire en tiempos que varían de 1 a 6 horas. La exposición directa de las muestras se realizó en dos puntos geográficos diferente de Santiago.

Los elementos químicos investigados en la presente aplicación son: Al, S, Si, K y Fe, que se encontraron en cantidad superior en las muestras junto a otros elementos como

P, Cl, Ca, Ti, Cr, Mn, Cu, y Zn. La superficie de las muestras irradiadas varía en el intervalo: ( $5.9 \text{ cm}^2 - 11.9 \text{ cm}^2$ ), y el tiempo de exposición al haz de protones fluctúa entre los 10 y 15 minutos.

La metodología PIXE convencional para determinar las concentraciones de los elementos investigados presentes en cada muestra se fundamenta en la secuencia descrita en la sección 1.2) y la relación de las entradas a las RNAs con los diferentes momentos del procedimiento experimental se ilustra en la figura 66. En la figura 67 se presenta un típico espectro PIXE obtenido de la irradiación de una muestra, donde se pueden observar las líneas espectrales características de los elementos antes mencionados y presentes en la muestra. En la tabla 28 se muestran las energías de esas líneas ( $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ ), de los elementos investigados en la presente aplicación.

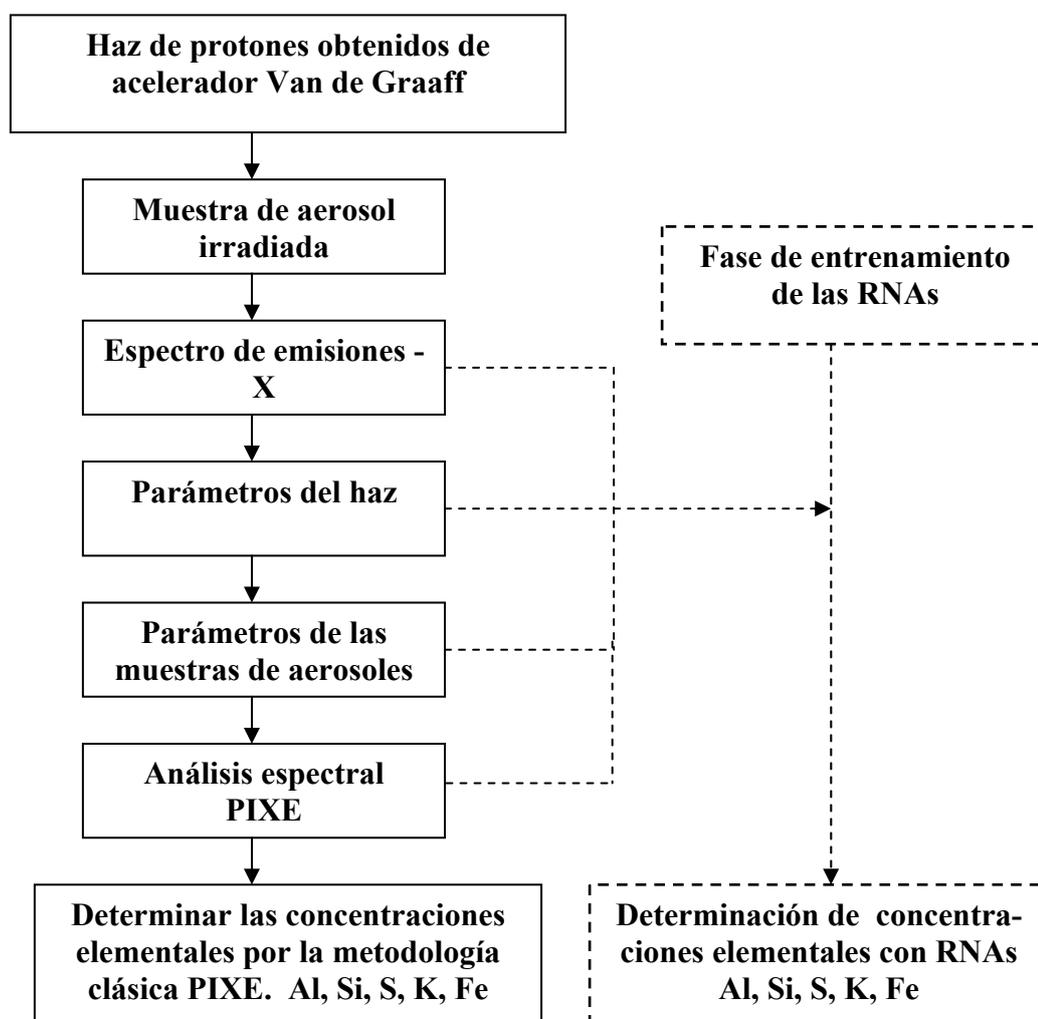
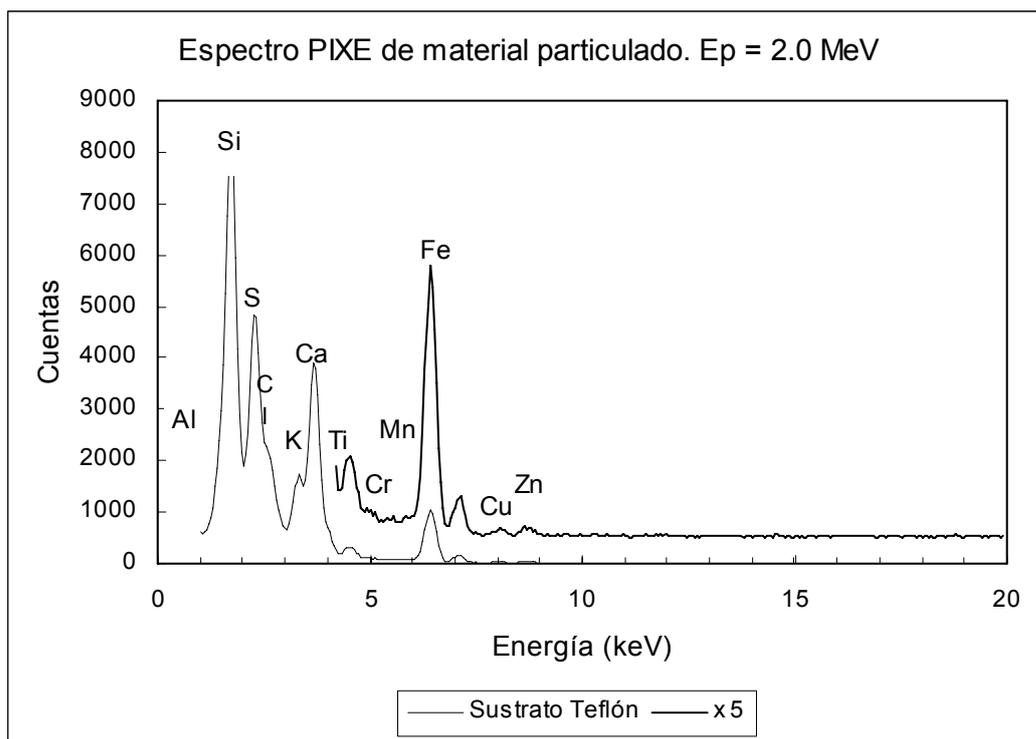
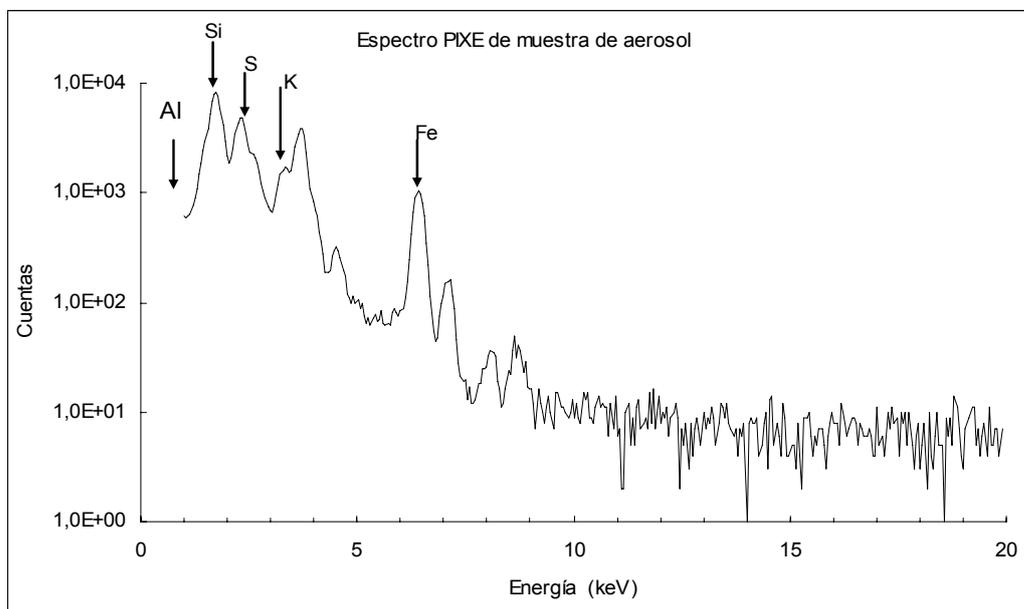


Figura 66. Esquema de procedimiento experimental y su relación con las RNAs para determinar las concentraciones de los elementos investigados



(a)



(b)

Figura 67. (a) Espectro PIXE de muestras de material particulado obtenido en la ciudad de Santiago de Chile. (b) Espectro PIXE de muestras de aerosoles que indica las líneas espectrales de los elementos investigados en esta Tesis.

#### 4. 1) SITUACIÓN EXPERIMENTAL Y DATOS ESPECTRALES.

Las 37 muestras utilizadas en la presente memoria están formadas por filtros colectores de aerosoles que fueron expuestos en la ciudad de Santiago de Chile, durante el año 2004, para detectar la polución del aire. Los filtros colectores de aerosoles usados fueron contruidos con sustratos de teflón y todas las muestras fueron idénticamente procesadas. Las superficies de las muestras están en el rango de (5.9 cm<sup>2</sup> – 11.9 cm<sup>2</sup>) y se irradian durante 15 minutos, siguiendo la secuencia explicada en la sección 1. 2), con un haz de protones de 2.0 MeV de energía, de 3.0 mm<sup>2</sup> de sección eficaz e intensidad 5.0 nA. Una vez que el haz pasa a través de la muestra, es captado por una caja de Faraday a 5.0 m detrás de ella. Los fotones de rayos X emitidos por la muestra irradiada se captan con un detector convencional de tipo Si(Li) (FWHM=180 eV a 5.9 keV). El detector se ubica en una posición a 90° respecto del haz incidente. A continuación se recopilan los datos espectrales mediante un analizador multicanal inserto en el respectivo montaje electrónico.

Los elementos investigados en la presente aplicación son: Al, Si, S, K y Fe, y en la tabla 28 se especifican las energías de las líneas espectrales de emisiones X características en los elementos mencionados, que pueden identificarse en el espectro PIXE tipo (ver figura 67) obtenido de una muestra de aerosol.

**Tabla 28. Líneas características de emisiones X ( $K_{\alpha}$ ,  $K_{\beta}$ ) de elementos investigados en muestras de aerosoles.**

<b>Elemento</b>	<b>N° Atómico Z</b>	<b><math>K_{\alpha}</math> (Kev)</b>	<b><math>K_{\beta}</math> ( KeV)</b>
<b>Aluminio – Al</b>	13	1.4867	1.4863
<b>Silicio – Si</b>	14	1.7399	1.7394
<b>Azufre – S</b>	16	2.3078	2.3066
<b>Potasio – K</b>	19	3.3138	3.3111
<b>Hierro – Fe</b>	26	6.4038	6.3908

En los espectros experimentales, las líneas  $K_\alpha$  y  $K_\beta$  para cada elemento aparecen superpuestas, pero esta situación debe considerarse en la calibración realizada, y no tiene mayor significado en el análisis en sí.

En este tipo de experimentos PIXE las líneas espectrales medidas son características y representan transiciones de átomos energéticamente excitados a estados de energía inferior y son específicas de cada elemento.

Las líneas identificadas en el espectro anterior corresponden a emisiones X, del tipo  $K_\alpha$  y  $K_\beta$ , para cada uno de los elementos mencionados, ya que son las más intensas en espectros de emisiones X.

#### **4. 2) DISEÑO DE LOS EXPERIMENTOS**

Para el análisis neuronal de un determinado espectro PIXE correspondiente a una muestra de aerosol, y para cada elemento químico considerado, se utilizan sistemas neuronales (SN) especializados, similares a los utilizados en el análisis de muestras orgánicas (capítulo 3) y que se describen en detalle en el apartado 3.2). La estructura global de la ejecución en paralelo de los SN, se indica en la figura 49, y en la figura 50 se presenta un esquema estructural del SN destinado a analizar la presencia de un elemento específico en la muestra en estudio. Cada SN responde a la respectiva consulta sobre determinado elemento, es decir, es un sistema especializado. La topología de las RNs en el interior de cada SN es la que se describe en 3.2) y se ilustra en la figura 51.

La estructura formal del Sistema para obtener la concentración de los elementos en las muestras de aerosoles, es como sigue:

- 5 SNs, uno por elemento, Al, Si, S, K y Fe, que se ejecutan en paralelo.
- Cada SN está formado por 5 RNs, todas con igual topología, que se ejecutan simultáneamente, con los mismos ejemplos y distintos pesos aleatorios iniciales.
- Las RNs son de propagación hacia delante con 4 neuronas de entrada, 4 neuronas ocultas y 1 neurona de salida, de acuerdo con la descripción que se ilustra esquemáticamente en la figura 51 (capítulo 3).

- Se utilizan 37 ejemplos experimentales disponibles, 29 para el entrenamiento y 8 para el test, con selección aleatoria.

Las entradas a las RNs son las mismas que en el caso de muestras orgánicas (capítulo 3), medidas sobre las muestras de aerosoles. Esto de nuevo permite poder analizar las concentraciones requeridas en tiempo real, una vez entrenada la RN. En el análisis PIXE clásico, en vez del número de emisiones X detectadas en el máximo de la línea espectral característica del elemento considerado,  $n$ , se utiliza el área efectiva bajo la línea espectral, es decir, se resta el fondo. Este proceso de determinación del área efectiva se realiza con el uso del código computacional AXIL, que permite restar el fondo mediante un ajuste funcional y determinar el área bajo la línea espectral, lo que requiere un tiempo computacional adicional que puede llegar a ser grande.

Para el ajuste de los pesos, la salida esperada es la concentración de los elementos considerados, obtenida en el laboratorio CEFEX, con el proceso PIXE clásico.

Tanto las entradas como las salidas esperadas se normalizaron siguiendo el procedimiento descrito en 3. 2). De nuevo, la implementación, vía software, se ha realizado utilizando MATLAB como base y la toolbox de Neural Nets específicamente.

También, para cada elemento se diseñó un SN compuesto por 5 RNs con el mismo conjunto de entrenamiento y test, pero entrenadas en forma independiente. Es decir, en cada una de las 5 series ejecutadas, se realizan 5 procesos de entrenamiento y verificación en forma independiente.

Las salidas obtenidas en cada SN, establecidas en el SD, son los valores promedios de las concentraciones determinadas por las respectivas redes.

También se analizan los valores del mejor experimento por SN, y esto hace posible un análisis más certero de la capacidad de generalización de cada RN entrenada y del SN respectivo. Luego estas redes entrenadas actúan en forma paralela al interior de cada SN, especializado en determinado elemento, entregando sus respuestas  $C_{ij}$  al SD. Los SNs, como se mencionó anteriormente, también actúan en forma paralela e independiente.

Se presentan los resultados de una de las series realizadas, en concreto la primera, completa con todos los elementos de interés, y los datos del resto de las series se presentan en el apéndice 2.

### 4. 3) RESULTADOS EXPERIMENTALES.

En la presente sección se ilustran los resultados obtenidos, en la primera serie, por la aplicación de los SNs en el análisis de espectros PIXE de muestras de aerosoles con el objeto de obtener respuesta a la consulta relativa a la determinación de la concentración de los elementos investigados en cada muestra (respuesta cuantitativa).

#### 4. 3. 1) Resultados para cada elemento.

Se presentan dos tipos de gráficos de resultados para cada elemento investigado: en primer lugar se presenta un gráfico de correlación entre las concentraciones experimentales ( $C_{exp}$ ) (calculadas por la metodología PIXE) y las concentraciones determinadas por los SNs respectivos ( $C_{nn}$ ). Y en segundo lugar se muestran gráficos de barra comparativos entre las  $C_{exp}$  y las  $C_{nn}$  correspondiente a los espectros utilizados en el conjunto de test.

En el gráfico de correlación se presentan las respuestas de las RNs,  $C_{nn}$ , y los valores normalizados  $C_{exp}$ , siguiendo el procedimiento explicado en el apartado 3. 3).

El gráfico de correlación de cada elemento presenta los resultados del entrenamiento y test de las RNs, mediante la relación del conjunto de pares:

$$[(C_{exp}^N; C_{nn}^N)_1, (C_{exp}^N; C_{nn}^N)_2, \dots, (C_{exp}^N; C_{nn}^N)_l] \quad (4.1)$$

donde  $l = 145$  en el conjunto de entrenamiento (29 pares por cada RN) y  $l = 40$  en el conjunto de test (8 pares por cada RN).

Se presentan gráficos comparativos de las  $C_{exp}$  y las  $C_{nn}$  del conjunto de test para las RNs de cada SN.

Se utiliza, como criterio de correcta determinación de la concentración por parte de las RNs al interior de los respectivos SNs, que la respuesta  $C_{nn}^N$  se encuentre en el intervalo planteado en la relación (3. 4). El número de ciclos en el proceso de entrenamiento es diferente para cada red, pero varía en el intervalo (5000 – 8000 ciclos).

## a) Elemento Aluminio – Al

Como se aprecia en la figura 67, el Al es un elemento que se encuentra en la parte espectral de energías bajas, donde el fondo es alto y la línea espectral aparece superpuesta con la del Si. En este sentido es posible que el error, tanto experimental como el asociado a las RNs sea más alto. En la figura 68 (a) se observa que la mayor dispersión de valores de  $C_{nn}$  se produce en la zona donde la densidad de pares de entrenamiento ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es más baja. Y debido al hecho de que el conjunto de test se seleccionó aleatoriamente varios pares de valores de este conjunto, están ubicados en la zona de baja densidad.

En la figura 68 (b) se observa que la distribución de valores de las concentraciones está en un rango amplio, entre 0,0001% y 0,1%, sin embargo la comparación de las concentraciones  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  en el conjunto de test muestra una buena coincidencia.

El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

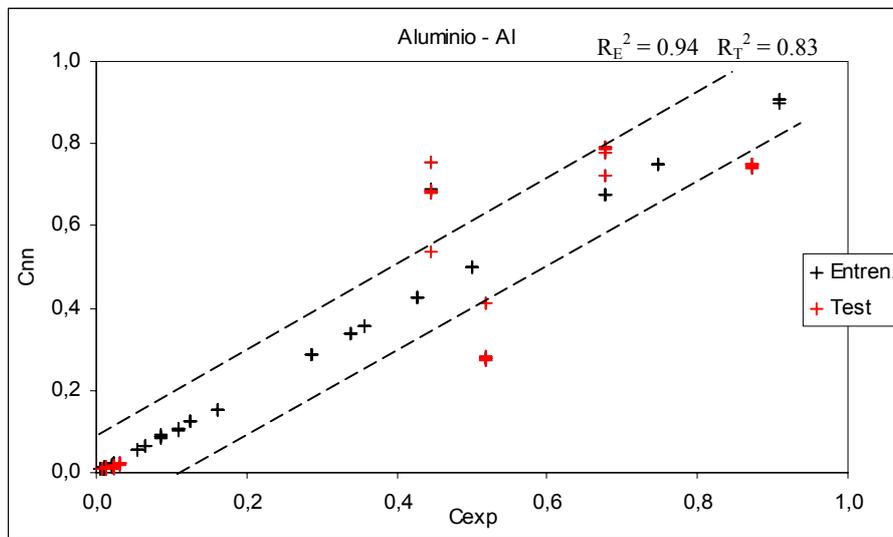
En la figura 68 (a) se observa que los valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5), son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamientos ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor.

Hay que resaltar que los ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

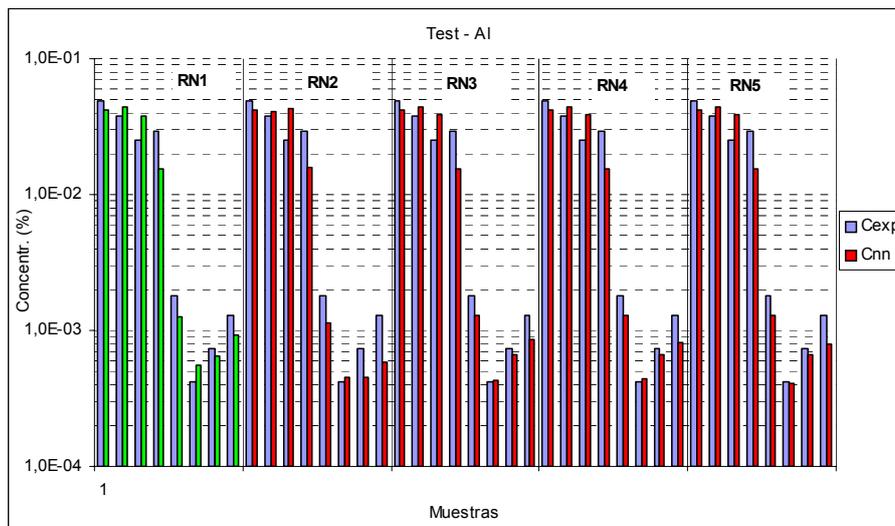
En la tabla 29 se presentan las concentraciones (en %) normalizadas, de las RNs del SN del Al y las del SN ( $C_{nn-Media}$ ) tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de test. En la figura 69 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La figura 69 muestra que no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por el SN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

**Figura 68 Aluminio–AI. (a) Gráfico de correlación de las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por las RNs del SN del AI –  $C_{nn}$ . (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test de las RNs para el AI.**

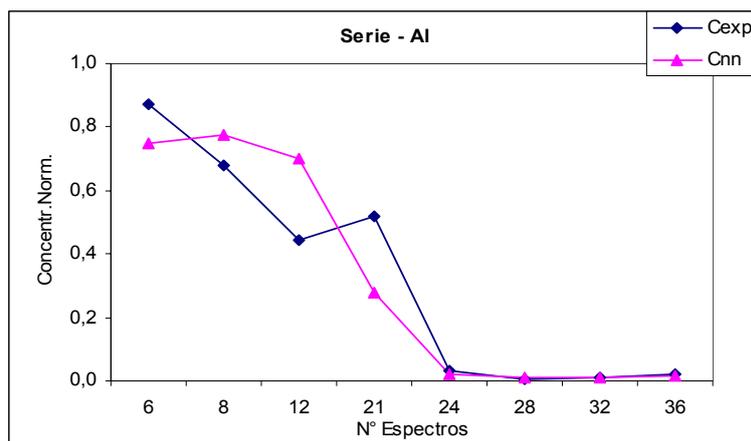
**Tabla 29. Resultados obtenidos en el SN del Al**

**Elemento Aluminio - Al  
Conjunto Entrenamiento**

	<b>Salida</b>							
	<b>C<sub>exp</sub></b>	<b>RN1</b>	<b>RN2</b>	<b>RN3</b>	<b>RN4</b>	<b>RN5</b>	<b>C<sub>nn-Media</sub></b>	<b>IC<sub>exp-CnnI</sub></b>
1	0,0535	0,0533	0,0539	0,0535	0,0534	0,0535	0,0535	0,00003
2	0,2852	0,2851	0,2851	0,2852	0,2852	0,2852	0,2851	0,00007
3	0,3387	0,3389	0,3388	0,3386	0,3386	0,3386	0,3387	0,00005
4	0,4278	0,4282	0,4271	0,4279	0,4278	0,4278	0,4278	0,00005
5	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
7	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
9	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
10	0,7487	0,7483	0,7486	0,7486	0,7486	0,7487	0,7485	0,00011
11	0,1248	0,1251	0,1249	0,1248	0,1248	0,1248	0,1249	0,00013
13	0,4991	0,4992	0,4989	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,00005
14	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
15	0,6774	0,6776	0,6777	0,6774	0,6774	0,6774	0,6775	0,00014
16	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
17	0,9091	0,9058	0,8984	0,9068	0,9070	0,9072	0,9050	0,00405
18	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
19	0,3565	0,3561	0,3571	0,3565	0,3565	0,3566	0,3566	0,00005
20	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
22	0,1604	0,1517	0,1515	0,1516	0,1516	0,1516	0,1516	0,00884
23	0,0232	0,0248	0,0249	0,0246	0,0245	0,0243	0,0246	0,00147
25	0,0642	0,0632	0,0629	0,0639	0,0639	0,0640	0,0636	0,00061
26	0,1087	0,1024	0,1085	0,1084	0,1085	0,1086	0,1073	0,00146
27	0,0856	0,0930	0,0853	0,0859	0,0857	0,0857	0,0871	0,00158
29	0,0082	0,0102	0,0085	0,0076	0,0073	0,0071	0,0082	0,00004
30	0,0137	0,0134	0,0082	0,0147	0,0149	0,0150	0,0132	0,00049
31	0,0050	0,0105	0,0082	0,0076	0,0073	0,0071	0,0081	0,00315
33	0,0196	0,0147	0,0195	0,0161	0,0163	0,0167	0,0167	0,00294
34	0,0098	0,0105	0,0083	0,0100	0,0100	0,0100	0,0098	0,00002
35	0,0109	0,0129	0,0140	0,0118	0,0115	0,0113	0,0123	0,00143
37	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011

**Conjunto Test**

	<b>Salida</b>							
	<b>C<sub>exp</sub></b>	<b>RN1</b>	<b>RN2</b>	<b>RN3</b>	<b>RN4</b>	<b>RN5</b>	<b>C<sub>nn-Media</sub></b>	<b>IC<sub>exp - CnnI</sub></b>
6	0,8734	0,7423	0,7449	0,7481	0,7479	0,7481	0,7463	0,12718
8	0,6774	0,7777	0,7201	0,7893	0,7900	0,7913	0,7737	0,09632
12	0,4456	0,6819	0,7565	0,6851	0,6867	0,6878	0,6996	0,25395
21	0,5169	0,2735	0,2805	0,2756	0,2758	0,2760	0,2763	0,24065
24	0,0321	0,0227	0,0201	0,0231	0,0231	0,0232	0,0224	0,00965
28	0,0075	0,0100	0,0081	0,0077	0,0075	0,0072	0,0081	0,00061
32	0,0130	0,0114	0,0082	0,0118	0,0119	0,0119	0,0110	0,00197
36	0,0232	0,0165	0,0104	0,0151	0,0145	0,0140	0,0141	0,00907



**Figura 69. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en el SN**

#### b) Elemento Silicio – Si

El Si es un elemento cuya línea espectral aparece bien identificada, pero su área, como se ve en la figura 67, está distorsionada por la superposición con las líneas de otros elementos, como por ejemplo el Al. En la figura 70 (b) se observa que la mejor concordancia de valores  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  se encuentra en la zona de concentraciones más bajas, cercanas al  $10^{-3}$  %, donde está la mayor cantidad de pares de entrenamiento ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ).

El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

En la figura 70 (a) se observa que los valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5), son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamientos ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor.

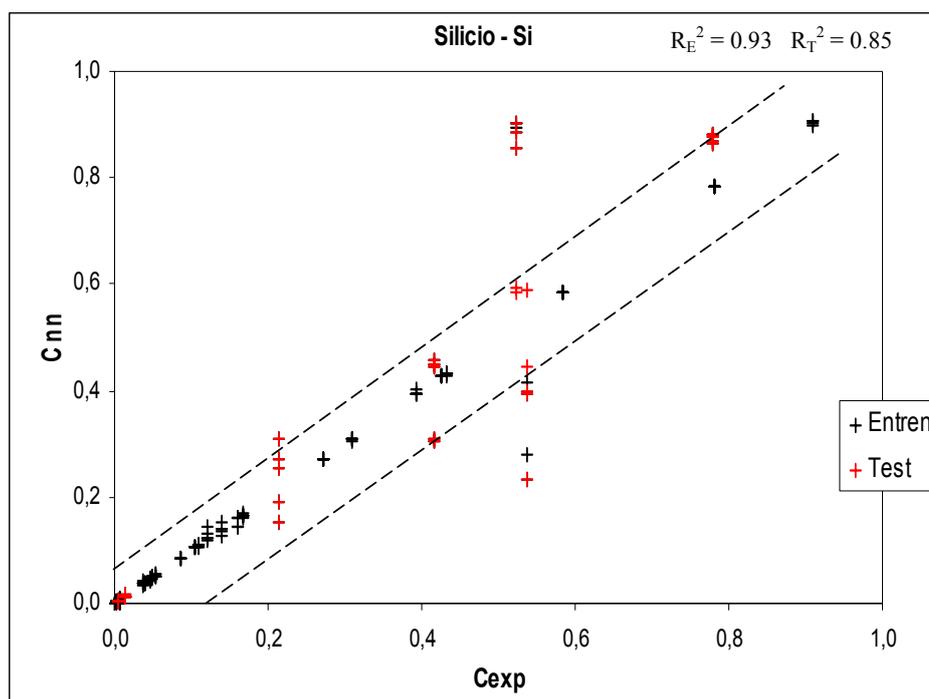
Hay que resaltar que los ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

En la tabla 30 se presentan las concentraciones (%) normalizadas, de las RNs del SN del Si y las del SN ( $C_{nn-Media}$ ) para el conjunto de entrenamiento y para el de test.

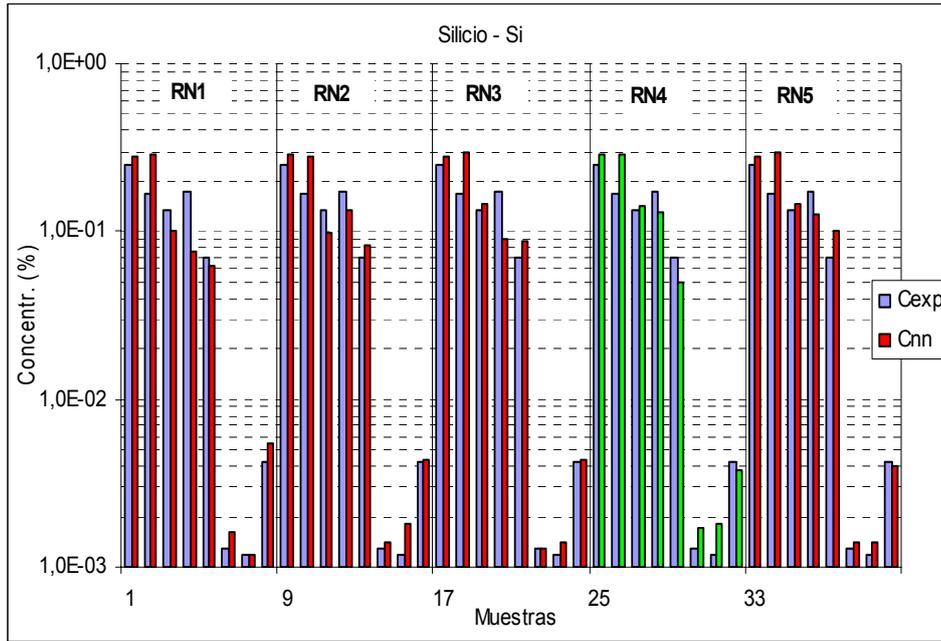
En la figura 71 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) del Si para los ejemplos de test.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto nos permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN usado en este proceso.

La figura 70 muestra que no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por el SN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 70. Silicio – Si. (a) Gráfico de correlación de las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por las RNs del SN del Si –  $C_{nn}$ . (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  v  $C_{nn}$  del conjunto de test de las RNs para el Si.

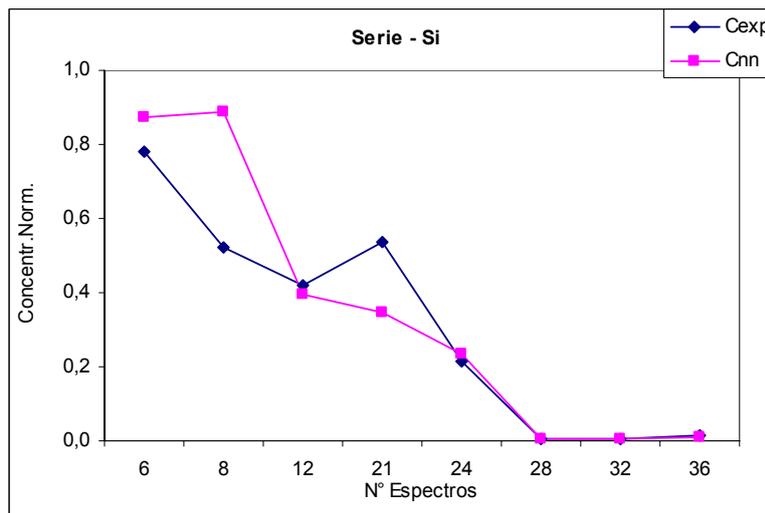


Figura 71. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en el SN para el Si.

**Tabla 30. Resultados obtenidos en el SN del Si**

<b>Elemento Silicio - Si</b>									
<b>Conjunto Entrenamiento</b>									
Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	<b>Salida</b>			$C_{nn-Media}$	$I_{C_{exp}-C_{nnI}}$	
				RN3	RN4	RN5			
1	0,0526	0,0538	0,0526	0,0526	0,0519	0,0532	0,0528	0,00025	
2	0,3092	0,3089	0,3092	0,3067	0,3089	0,3092	0,3086	0,00062	
3	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,00000	
4	0,3927	0,3921	0,3930	0,4014	0,3933	0,3927	0,3945	0,00179	
5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1054	0,1052	0,00006	
7	0,0495	0,0489	0,0492	0,0495	0,0473	0,0495	0,0489	0,00062	
9	0,1670	0,1685	0,1670	0,1667	0,1620	0,1670	0,1662	0,00074	
10	0,7823	0,7826	0,7823	0,7823	0,7823	0,7823	0,7824	0,00006	
11	0,1391	0,1289	0,1388	0,1419	0,1543	0,1339	0,1396	0,00043	
13	0,4329	0,4329	0,4329	0,4270	0,4326	0,4329	0,4317	0,00124	
14	0,0464	0,0458	0,0464	0,0464	0,0470	0,0464	0,0464	0,00000	
15	0,5844	0,5850	0,5844	0,5847	0,5847	0,5844	0,5847	0,00025	
16	0,1206	0,1425	0,1206	0,1209	0,1299	0,1246	0,1277	0,00711	
17	0,9091	0,8986	0,9048	0,9057	0,9026	0,9051	0,9033	0,00575	
18	0,1082	0,1095	0,1085	0,1073	0,1082	0,1076	0,1082	0,00000	
19	0,4267	0,4264	0,4264	0,4261	0,4267	0,4267	0,4265	0,00025	
20	0,1608	0,1453	0,1611	0,1592	0,1422	0,1623	0,1541	0,00674	
22	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0863	0,0866	0,0865	0,00006	
23	0,0015	0,1923	0,2542	0,2696	0,1531	0,3098	0,2358	0,23400	
25	0,0402	0,0421	0,0464	0,0464	0,0479	0,0464	0,0458	0,00563	
26	0,0464	0,0411	0,0371	0,0371	0,0346	0,0371	0,0374	0,00897	
27	0,0371	0,0049	0,0043	0,0040	0,0053	0,0043	0,0046	0,03250	
29	0,0037	0,0068	0,0071	0,0074	0,0096	0,0065	0,0075	0,00377	
30	0,0068	0,0022	0,0019	0,0040	0,0025	0,0043	0,0030	0,00383	
31	0,0015	0,0037	0,0056	0,0043	0,0056	0,0043	0,0047	0,00315	
33	0,0071	0,0043	0,0056	0,0046	0,0059	0,0046	0,0050	0,00210	
34	0,0043	0,0167	0,0000	0,0130	0,0118	0,0124	0,0108	0,00643	
35	0,0009	0,0062	0,0133	0,0059	0,0031	0,0049	0,0067	0,00575	
37	0,0059	0,0062	0,0133	0,0130	0,0118	0,0124	0,0113	0,00544	
<b>Conjunto Test</b>									
Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	<b>Salida</b>			$C_{nn-Media}$	$I_{C_{exp}-C_{nnI}}$	
				RN3	RN4	RN5			
6	0,7792	0,8769	0,8794	0,8704	0,8810	0,8643	0,8744	0,09520	
8	0,5226	0,8871	0,8568	0,9038	0,8921	0,9029	0,8886	0,36600	
12	0,4174	0,3108	0,3064	0,4561	0,4434	0,4471	0,3928	0,02470	
21	0,5380	0,2335	0,4156	0,2780	0,3992	0,3942	0,3441	0,19400	
24	0,2137	0,1923	0,2542	0,2696	0,1531	0,3098	0,2358	0,02210	
28	0,0040	0,0049	0,0043	0,0040	0,0053	0,0043	0,0046	0,00056	
32	0,0037	0,0037	0,0056	0,0043	0,0056	0,0043	0,0047	0,00099	
36	0,0130	0,0167	0,0000	0,0133	0,0118	0,0124	0,0108	0,00216	

### c) Elemento Azufre - S

En la figura 72 (a) se puede ver que la distribución de pares de valores ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) para los conjuntos de entrenamiento y test es más regular, que en los dos elementos antes mencionado, y esto deriva en un mejor resultado en la determinación de los factores de correlación  $R^2$  para cada conjunto. En los espectros de aerosoles la línea espectral del S se traslapa con la del Cloro (Cl) lo que dificulta su análisis experimental.

Si se observa la figura 72(b) se puede ver que la mayor discrepancia en la concentraciones  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  del conjunto de test en las RNs del SN del S, está en los valores más bajos cercanos al límite de detección experimental ( $10^{-4}\%$ ). Esto último es de esperar debido a que los errores experimentales asociados son superiores y estos se propagan en la determinación de las  $C_{exp}$  y por tanto repercute en el proceso de entrenamiento de las RNs.

En la figura 72 (b) se observa que la distribución de valores de las concentraciones está en un rango amplio, entre 0,0001% y 0,1%, sin embargo la comparación de las concentraciones  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  en el conjunto de test muestra una buena coincidencia en zonas donde  $C_{exp}$  es superior, o igual, a  $10^{-3}\%$

El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

La figura 72(a) muestra, igual que en los elementos ya analizados, que los valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5), son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamientos ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor. Hay que resaltar que los ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

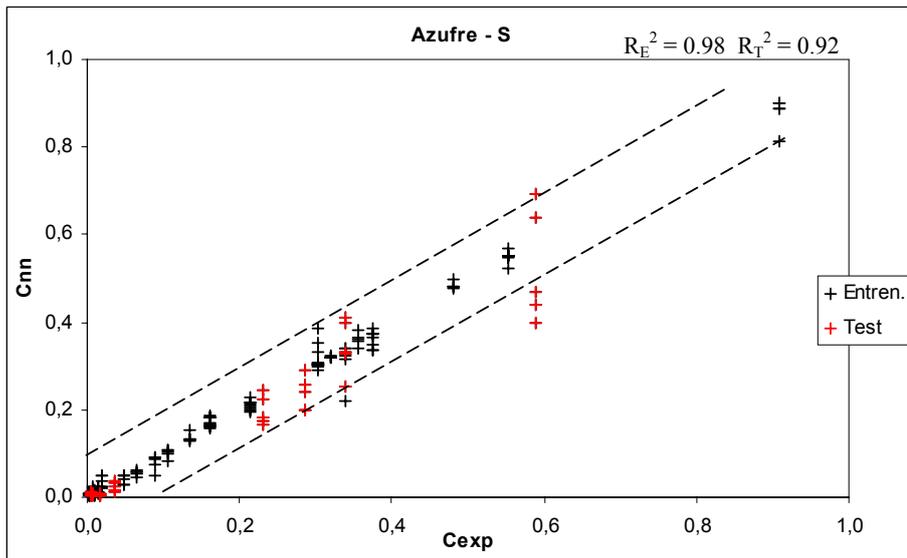
En la tabla 31 se presentan las concentraciones (%) normalizadas, de las RNs del SN del S y las del SN ( $C_{nn-Media}$ ) para el conjunto de entrenamiento y para el de test.

En la figura 73 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test.

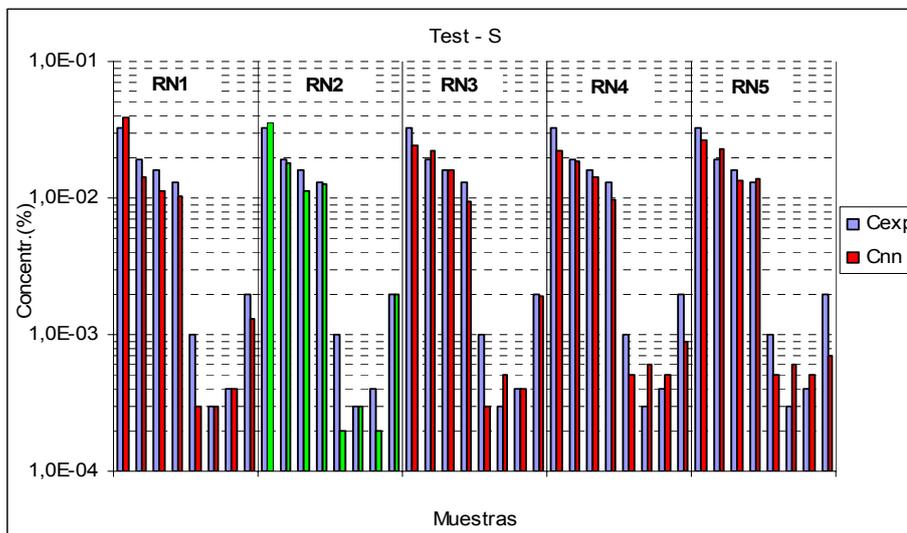
Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto permite asegurar que el uso de RN

en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La figura 73 muestra que no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por el SN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

**Figura 72. Azufre – S. (a) Gráfico de correlación de las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por las RNs del SN del S –  $C_{nn}$ . (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test de las RNs para el S.**

**Tabla 31. Resultados obtenidos en el SN del S**

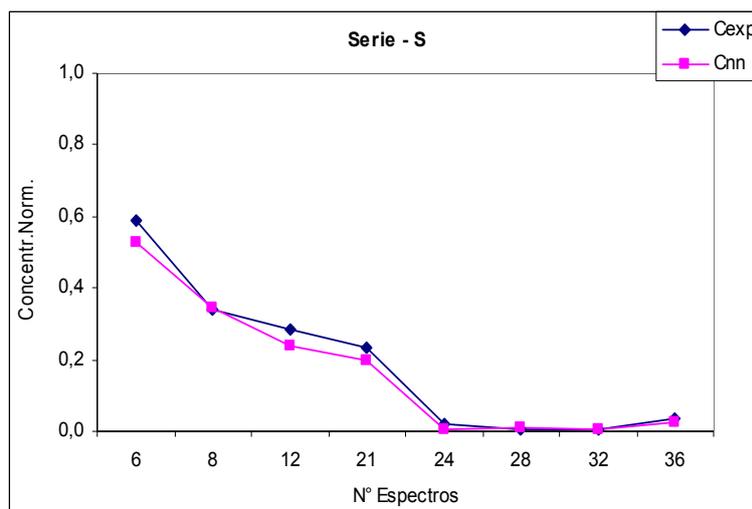
**Elemento Azufre - S**

**Conjunto Entrenamiento**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp - C<sub>nnl</sub></sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,1070	0,0820	0,1016	0,1070	0,1052	0,1070	0,1005	0,00642
2	0,1604	0,1818	0,1818	0,1586	0,1640	0,1711	0,1715	0,01105
3	0,5526	0,5686	0,5526	0,5508	0,5526	0,5526	0,5554	0,00285
4	0,2139	0,1943	0,2175	0,2103	0,2299	0,2050	0,2114	0,00250
5	0,9091	0,8146	0,8895	0,8984	0,8859	0,9002	0,8777	0,03137
7	0,4813	0,4759	0,4991	0,4813	0,4813	0,4813	0,4838	0,00250
9	0,5526	0,5241	0,5472	0,5508	0,5526	0,5526	0,5455	0,00713
10	0,3387	0,2193	0,3226	0,3405	0,3173	0,3405	0,3080	0,03066
11	0,3565	0,3797	0,3601	0,3672	0,3422	0,3565	0,3611	0,00463
13	0,3209	0,3209	0,3244	0,3209	0,3191	0,3209	0,3212	0,00036
14	0,3030	0,3084	0,2906	0,3084	0,3030	0,3012	0,3023	0,00071
15	0,3743	0,3494	0,3369	0,3725	0,3369	0,3743	0,3540	0,02032
16	0,2139	0,1996	0,2139	0,2139	0,2068	0,2139	0,2096	0,00428
17	0,3030	0,3868	0,3316	0,3048	0,3512	0,3030	0,3355	0,03244
18	0,3030	0,2995	0,3030	0,2977	0,3084	0,3030	0,3023	0,00071
19	0,1604	0,1872	0,1622	0,1640	0,1622	0,1622	0,1676	0,00713
20	0,3743	0,3725	0,3725	0,3672	0,3868	0,3743	0,3747	0,00036
22	0,0891	0,0731	0,0517	0,0891	0,0927	0,0909	0,0795	0,00963
23	0,0036	0,0053	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0068	0,00321
25	0,0481	0,0285	0,0481	0,0499	0,0303	0,0428	0,0399	0,00820
26	0,1337	0,1533	0,1319	0,1337	0,1337	0,1301	0,1365	0,00285
27	0,0660	0,0463	0,0535	0,0642	0,0570	0,0570	0,0556	0,01034
29	0,0071	0,0143	0,0178	0,0143	0,0196	0,0267	0,0185	0,01141
30	0,0143	0,0250	0,0214	0,0071	0,0232	0,0143	0,0182	0,00392
31	0,0018	0,0053	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0068	0,00499
33	0,0089	0,0053	0,0053	0,0071	0,0107	0,0107	0,0078	0,00107
34	0,0107	0,0107	0,0125	0,0071	0,0160	0,0125	0,0118	0,00107
35	0,0018	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,00178
37	0,0196	0,0517	0,0517	0,0214	0,0357	0,0232	0,0367	0,01711

**Conjunto Test**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
6	0,5882	0,6934	0,6399	0,4385	0,3975	0,4706	0,5280	0,06025
8	0,3387	0,2549	0,3262	0,3993	0,3316	0,4118	0,3447	0,00606
12	0,2852	0,1996	0,1979	0,2888	0,2567	0,2389	0,2364	0,04884
21	0,2317	0,1818	0,2246	0,1676	0,1729	0,2460	0,1986	0,03316
24	0,0178	0,0053	0,0036	0,0053	0,0089	0,0089	0,0064	0,01141
28	0,0053	0,0053	0,0053	0,0089	0,0107	0,0107	0,0082	0,00285
32	0,0071	0,0071	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0071	0,00000
36	0,0357	0,0232	0,0357	0,0339	0,0160	0,0125	0,0242	0,01141



**Figura 73. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en el SN para el S.**

#### **d) Elemento Potasio – K.**

El K también es un elemento complicado en el análisis con la metodología PIXE debido a que su línea espectral, como se ve en la figura 67, aparece superpuesta con la del Ca. Sin embargo, el máximo de la línea es claramente identificable, a diferencia de lo que sucede con el Al. Una razón de que el factor  $R^2$  es más bajo para el conjunto de test es que los pares ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) de este conjunto está en una zona de baja densidad de pares ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) del conjunto de entrenamiento, como se observa en la figura 74 (a). En la figura 74 (b) se aprecia una buena coincidencia para los valores  $C_{exp}$  y los  $C_{nn}$  determinados por las RNs. Además, las respuestas de las RNs, entrenadas en forma independiente, son coincidentes y esto implica que el diseño de éstas permite la generalización.

En la figura 74(b) se observa que la distribución de valores de las concentraciones está básicamente en un rango no tan amplio, entre 0,001% y 0,1%, y al comparar las concentraciones  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , lleva a una buena coincidencia en el conjunto de test.

El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

En la figura 74 (a) se observa que el número de valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5) es superior al de los elementos antes analizados, lo que se explica por el hecho ya mencionado sobre la dificultad de cálculo del área bajo la línea espectral. Y esto acrecienta el error experimental, lo que se propaga al resultado obtenido por el SN del K.

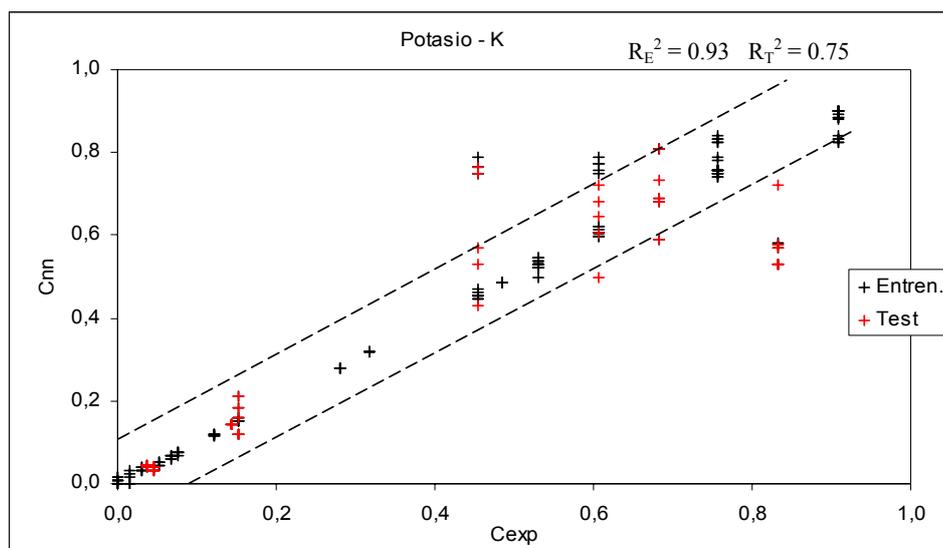
Se debe resaltar que los ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

En la tabla 32 se presentan las concentraciones (%) normalizadas, de las RNs del SN del K y las del SN ( $C_{nn-Media}$ ) para el conjunto de entrenamiento y para el de test.

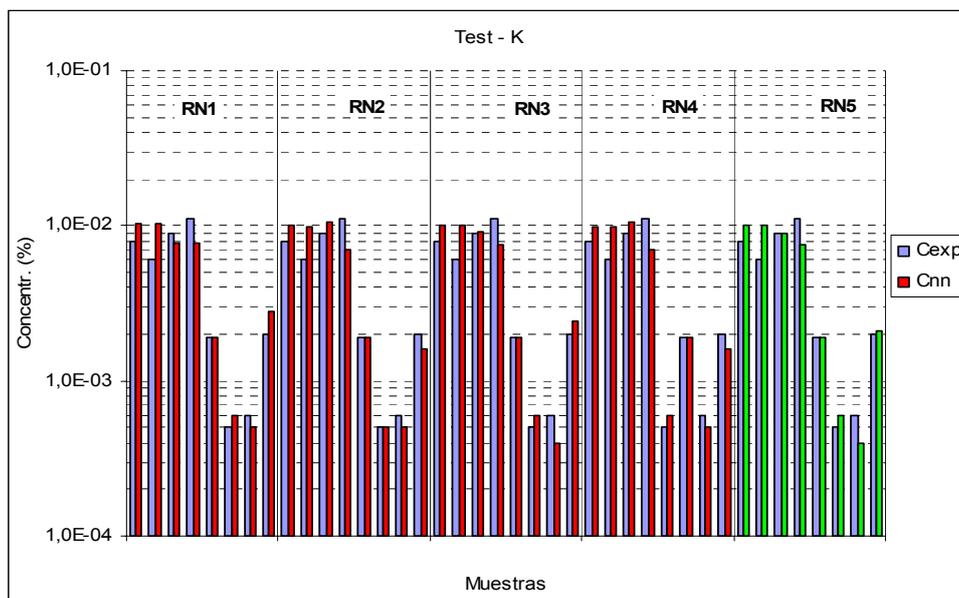
En la figura 75 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test.

Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto permite asegurar que el uso de RN en este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La figura 75 muestra que no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por el SN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 74. Potasio – K. (a) Gráfico de correlación de las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por las RNs del SN del K –  $C_{nn}$ . (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test de las RNs para el K.

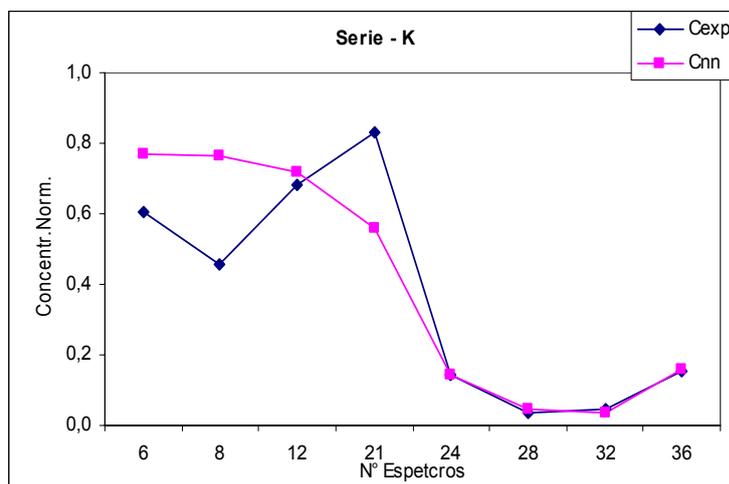


Figura 75. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en el SN para el K.

**Tabla 32. Resultados obtenidos en el SN del K**

**Elemento Potasio - K  
Conjunto Entrenamiento**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp</sub> - C <sub>nnI</sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,1515	0,1591	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1530	0,00152
2	0,5303	0,5227	0,5227	0,5303	0,5227	0,5379	0,5273	0,00303
3	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,00000
4	0,4545	0,4697	0,4621	0,4545	0,4545	0,4545	0,4591	0,00455
5	0,9091	0,8409	0,8258	0,8333	0,8258	0,8333	0,8318	0,07727
7	0,4545	0,4545	0,4545	0,4470	0,4545	0,4470	0,4515	0,00303
9	0,9091	0,8788	0,9015	0,8939	0,9015	0,8864	0,8924	0,01667
10	0,7576	0,7576	0,7424	0,7576	0,7424	0,7576	0,7515	0,00606
11	0,9091	0,8864	0,9015	0,9015	0,9015	0,9015	0,8985	0,01061
13	0,5303	0,5227	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5288	0,00152
14	0,6061	0,6212	0,6061	0,6136	0,6061	0,6212	0,6136	0,00758
15	0,7576	0,7500	0,7879	0,7500	0,7803	0,7500	0,7636	0,00606
16	0,5303	0,5000	0,5227	0,5303	0,5227	0,5303	0,5212	0,00909
17	0,7576	0,8409	0,8258	0,8333	0,8258	0,8333	0,8318	0,07424
18	0,5303	0,5455	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5333	0,00303
19	0,6061	0,5985	0,6061	0,5985	0,6061	0,5985	0,6015	0,00455
20	0,5303	0,5455	0,5379	0,5303	0,5379	0,5303	0,5364	0,00606
22	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,00000
23	0,0000	0,0152	0,0000	0,0076	0,0000	0,0076	0,0061	0,00606
25	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,00000
26	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,00000
27	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,00000
29	0,0303	0,0303	0,0379	0,0303	0,0379	0,0303	0,0333	0,00303
30	0,0682	0,0682	0,0606	0,0682	0,0606	0,0682	0,0652	0,00303
31	0,0152	0,0152	0,0303	0,0000	0,0227	0,0000	0,0136	0,00152
33	0,0758	0,0682	0,0758	0,0758	0,0758	0,0758	0,0742	0,00152
34	0,0530	0,0530	0,0455	0,0530	0,0455	0,0530	0,0500	0,00303
35	0,0000	0,0152	0,0076	0,0000	0,0076	0,0000	0,0061	0,00606
37	0,1212	0,1212	0,1136	0,1212	0,1136	0,1212	0,1182	0,00303

**Conjunto Test**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp</sub> - C <sub>nnI</sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
6	0,6061	0,7879	0,7576	0,7727	0,7500	0,7727	0,7682	0,16212
8	0,4545	0,7879	0,7500	0,7652	0,7500	0,7652	0,7636	0,30909
12	0,6818	0,5909	0,8106	0,6894	0,8106	0,6818	0,7167	0,03485
21	0,8333	0,5833	0,5303	0,5682	0,5303	0,5758	0,5576	0,27576
24	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,00000
28	0,0379	0,0455	0,0379	0,0455	0,0455	0,0455	0,0439	0,00606
32	0,0455	0,0379	0,0379	0,0303	0,0379	0,0303	0,0348	0,01061
36	0,1515	0,2121	0,1212	0,1818	0,1212	0,1591	0,1591	0,00758

### e) Elemento Hierro – Fe

La línea espectral del Fe está superpuesta con la del Mn, como se ve en la figura 67 (a) y su intensidad es menor que la de los otros elementos investigados. Pero el hecho positivo es que está en una zona de bajo fondo y por tanto su resolución es posible. En la figura 76 (a) se ve que los elementos del conjunto de test que presentan más inconsistencia están en los rangos de valores más alto de las concentraciones, donde el número de pares de entrenamiento ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor y esto deriva en una menor capacidad de generalización de las RNs en esta región.. En la figura 76 (b) se puede ver que el comportamiento de las RNs, entrenadas en forma independiente, es regular y que los ejemplos del conjunto de test donde se produce la mayor discrepancia se repiten en las RNs, como es el caso del 5º ejemplo que tiene una discrepancia similar en las cuatro primeras ejecuciones. La regularidad en el comportamiento de las RNs es un dato de su capacidad de aprender a partir de un entrenamiento definido. Esto debería robustecer, a su vez, la capacidad del SN de representar lo aprendido en el proceso de entrenamiento.

El uso del valor medio de las salidas calculadas por las 5 RNs entrenadas, está avalado por la Teoría de Errores en las mediciones físicas.

En la figura 76 (a) se observa que los valores de  $C_{nn}$  que no están en el intervalo definido por la relación (3.5), son valores cercanos al límite superior del rango de valores  $C_{exp}$  y donde la densidad de pares de entrenamientos ( $C_{exp}$ ,  $C_{nn}$ ) es menor.

Se debe destacar que los ejemplos que quedan fuera de los márgenes aceptados, se corresponden con elementos distintos y en distintas ejecuciones de la RN.

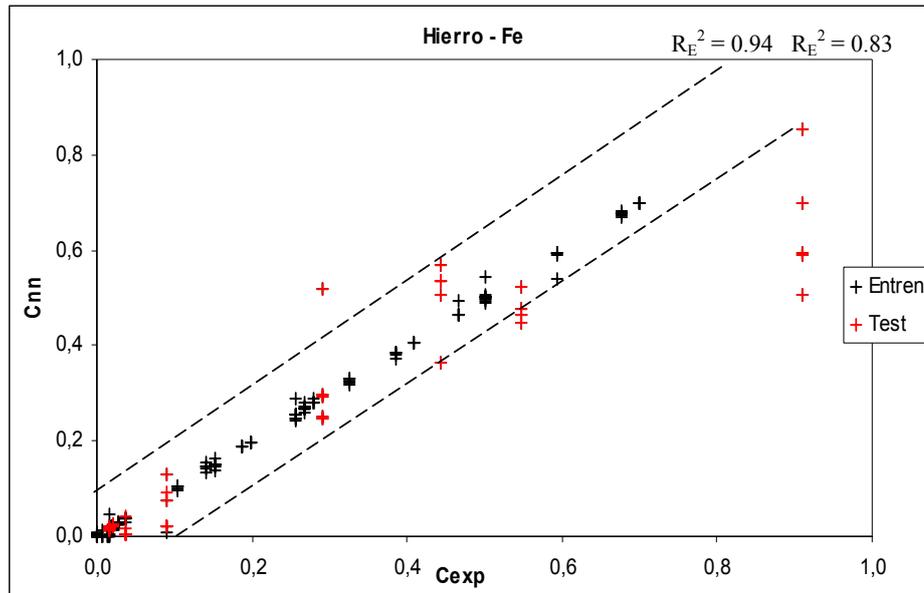
En la tabla 33 se presentan las concentraciones (%) normalizadas, de las RNs del SN del Fe y las del SN ( $C_{nn-Media}$ ) para el conjunto de entrenamiento y para el de test.

En la figura 77 se ilustra una comparación de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) para los ejemplos de test.

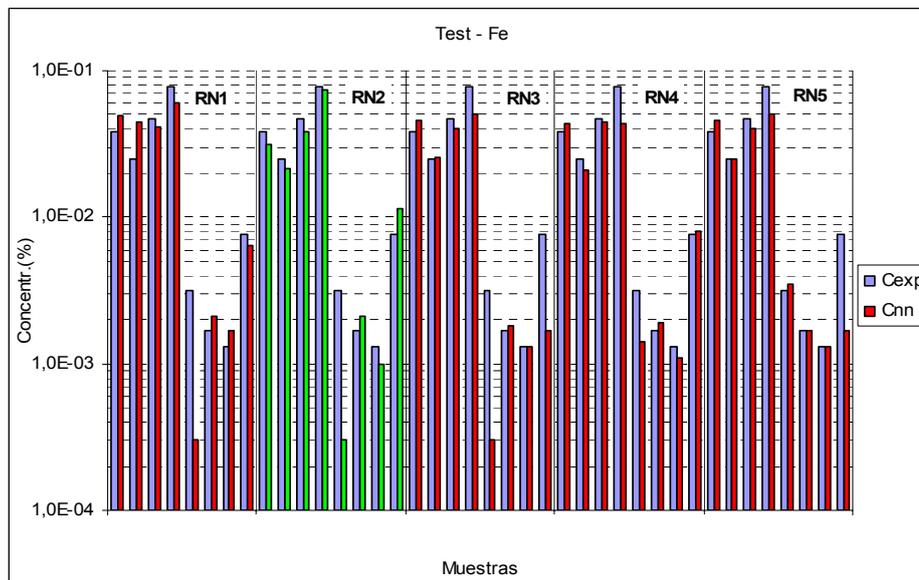
Los resultados indican que los ejemplos de entrenamiento se aprenden bien en cada RN entrenada, y para cada ejemplo de test, hay siempre alguna RN en cada serie, que lo aprende correctamente. Además, en general, salvo alguna excepción, los errores se producen en zonas de poca densidad de ejemplos. Esto permite asegurar que usar RNs en

este proceso es adecuado, y que con la disponibilidad de algunos ejemplos más para el entrenamiento, se podría mejorar la generalización del SN utilizado en este proceso.

La figura 77 muestra que no hay diferencias significativas entre los valores esperados y calculados por el SN para los ejemplos de test.



(a)



(b)

Figura 76. Hierro - Fe. (a) Gráfico de correlación de las concentraciones esperadas  $C_{exp}$  y las determinadas por las RNs del SN del Fe -  $C_{nn}$ . (b) Gráfico comparativo de las  $C_{exp}$  y  $C_{nn}$  del conjunto de test de las RNs para el Fe.

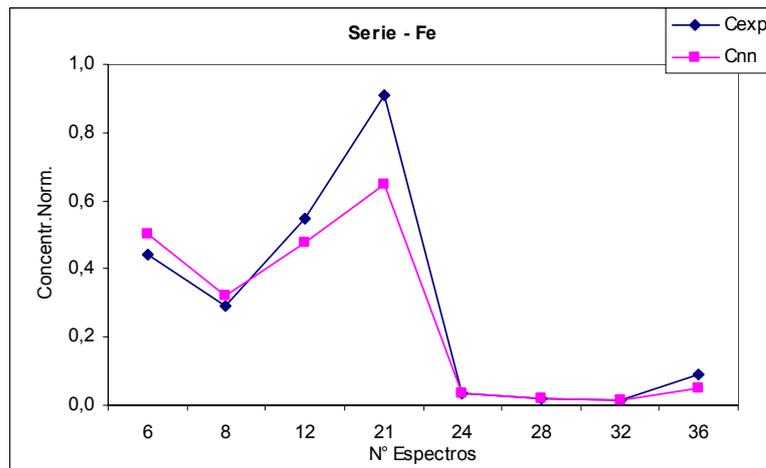
**Tabla 33. Resultados obtenidos en el SN del Fe**

**Elemento Hierro - Fe  
Conjunto Entrenamiento**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> - C <sub>nnl</sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,1049	0,1049	0,0956	0,1049	0,0991	0,1049	0,1019	0,00303
2	0,5012	0,4953	0,5023	0,5023	0,4883	0,5023	0,4981	0,00303
3	0,1865	0,1865	0,1876	0,1876	0,1900	0,1876	0,1879	0,00140
4	0,0000	0,0058	0,0000	0,0012	0,0093	0,0012	0,0035	0,00350
5	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,00000
7	0,1515	0,1643	0,1527	0,1457	0,1364	0,1469	0,1492	0,00233
9	0,3263	0,3263	0,3170	0,3298	0,3228	0,3287	0,3249	0,00140
10	0,5944	0,5909	0,5932	0,5932	0,5408	0,5932	0,5823	0,01212
11	0,2564	0,2564	0,2902	0,2471	0,2436	0,2483	0,2571	0,00070
13	0,4662	0,4627	0,4662	0,4662	0,4942	0,4662	0,4711	0,00490
14	0,1399	0,1329	0,1410	0,1457	0,1538	0,1445	0,1436	0,00373
15	0,5012	0,5082	0,5000	0,5012	0,5420	0,5000	0,5103	0,00909
16	0,2681	0,2681	0,2587	0,2716	0,2786	0,2704	0,2695	0,00140
17	0,6993	0,6981	0,7005	0,6993	0,6981	0,6993	0,6991	0,00023
18	0,2797	0,2809	0,2797	0,2821	0,2902	0,2821	0,2830	0,00326
19	0,6760	0,6807	0,6760	0,6748	0,6713	0,6760	0,6758	0,00023
20	0,3846	0,3846	0,3730	0,3846	0,3811	0,3846	0,3816	0,00303
22	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,00000
23	0,0000	0,0023	0,0012	0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,00070
25	0,2564	0,2552	0,2564	0,2564	0,2564	0,2564	0,2562	0,00023
26	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,00000
27	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,00000
29	0,0140	0,0140	0,0117	0,0000	0,0000	0,0000	0,0051	0,00886
30	0,0268	0,0303	0,0245	0,0280	0,0280	0,0280	0,0277	0,00093
31	0,0058	0,0128	0,0012	0,0000	0,0000	0,0000	0,0028	0,00303
33	0,0280	0,0233	0,0291	0,0233	0,0268	0,0233	0,0252	0,00280
34	0,0175	0,0198	0,0140	0,0198	0,0186	0,0198	0,0184	0,00093
35	0,0000	0,0023	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0005	0,00047
37	0,0163	0,0443	0,0000	0,0012	0,0000	0,0023	0,0096	0,00676

**Conjunto Test**

Muestras	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> - C <sub>nnl</sub>
	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
6	0,4429	0,5688	0,3625	0,5361	0,5047	0,5338	0,5012	0,05828
8	0,2914	0,5186	0,2529	0,2960	0,2471	0,2914	0,3212	0,02984
12	0,5478	0,4779	0,4487	0,4650	0,5233	0,4650	0,4760	0,07179
21	0,9091	0,7005	0,8543	0,5909	0,5047	0,5956	0,6492	0,25991
24	0,0373	0,0280	0,0385	0,0373	0,0361	0,0373	0,0354	0,00186
28	0,0198	0,0175	0,0221	0,0198	0,0186	0,0198	0,0196	0,00023
32	0,0152	0,0198	0,0117	0,0152	0,0128	0,0152	0,0149	0,00023
36	0,0897	0,0746	0,1317	0,0198	0,0093	0,0198	0,0510	0,03869



**Figura 77. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en el SN para el Fe.**

#### 4. 3. 2) Comentarios Adicionales.

De los datos expuestos se observa que los SNs determinaron las concentraciones  $C_{nn}$ , pertenecientes al conjunto de test de los elementos investigados, en el rango (88% - 95%) de valores permitidos. Una dificultad especial para el análisis se produce en el caso del Al esto debido al hecho de que su línea espectral está en la zona baja del espectro, donde hay un fondo mayor y está oculta bajo la del Si. Y también en el caso del K la línea espectral se traslapa con la del Ca, como se puede observar en la figura 67.

De acuerdo al criterio de verificación planteado en la relación (3.5), y como se observa en las tablas 29 – 33, se tiene que los SNs respectivos determinan correctamente las concentraciones del conjunto de entrenamiento y test, para todos los ejemplos de la mejor RN ejecutada en cada SN. Y también es necesario destacar las siguientes situaciones:

- Todos los ejemplos del conjunto entrenamiento excepto 1, en las 5 RNs ejecutadas en el SN del AL, aprenden correctamente. Y en los conjuntos de test sólo 4 ejemplos de un total de 40, como se aprecia en la figura 68 (a) y en la tabla 29, aparecen fuera del rango estipulado para las respuestas correctas.

- El 99% de los ejemplos de entrenamiento y el 90% de los ejemplos de los conjuntos test aprende correctamente en las 5 RNs ejecutadas del SN del Si, de acuerdo al criterio planteado en la relación (3.5), como se aprecia en la figura 70 (a) y en la tabla 30.
- De las cinco RNs ejecutadas en el SN del elemento S hay 1 solo ejemplo de entrenamiento y 3 de test que no aprenden de acuerdo al criterio establecido. Es decir, el 99% de los elementos de entrenamiento responde correctamente, como también el 93% de elementos de test de las 5 RNs. En la figura 73 se puede apreciar la buena coincidencia de las concentraciones  $C_{nn}$  con las  $C_{exp}$  para todos los elementos de test en el SN.
- Como se dijo, el análisis del elemento K en espectros de muestras de aerosoles es complicado debido a que el área de su línea espectral aparece cubierta por la del Ca que tiene un número de cuentas significativamente mayor. Por ello, es de esperar un error mayor tanto experimental como en las respuestas del SN tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de test y esto se ve en los indicadores para evaluar el comportamiento de los SNs estudiados, como en las figuras 74-75.
- En el SN del Fe el 100% de los ejemplos de entrenamiento y el 88% de los ejemplos de los conjuntos test aprende correctamente en las 5 RNs ejecutadas, de acuerdo al rango establecido en la relación (3.5). En la figura 76 (b) se ve que 3 de los ejemplos que no aprenden en el conjunto de test se repiten en las RNs y corresponden a concentraciones bajas cercanas al límite de detección. Y en la figura 77 se ve la coherencia de las respuestas del SN respecto de la referencia respectiva experimental.

Se puede afirmar que los SNs determinaron en el rango de valores permitidos, casi todas (en torno al 90.%) las concentraciones  $C_{nn}$  pertenecientes al conjunto de test de los elementos investigados, con excepción del potasio.

El error en la determinación de las concentraciones por los SNs es mayor en aquellos elementos cuya presencia en la muestra, es decir su concentración, es menor (como el caso del Fe), o bien se encuentra en la parte baja del espectro sobre un fondo considerable (como en el caso del K). En el caso del Fe se observan, en mayor número que para otros elementos, que algunos ejemplos del conjunto de test están fuera del intervalo considerado como respuesta adecuada y esto se puede comprender ya que el

rango de valores de las concentraciones es mayor. Varios de esos casos son valores más alejados de los valores promedios y cercanos a los límites del rango.

Las respuestas de los SNs, implementados en el análisis espectral de muestras de aerosoles, en el conjunto de test es coherente respecto al proceso de entrenamiento experimentado y se refleja en cada elemento químico analizado.

Se han presentado los resultados de la primera serie completa, pero como se puede ver en el apéndice 2, estos resultados se pueden mejorar. La serie I es la que mejores resultados presenta para el S y el Fe, pero para el Al y el K, la serie V presenta mejores resultados, y para el Si, la mejor es la serie III. En todo caso, se puede concluir que para todos los elementos considerados, siempre se puede obtener un SN, o al menos una RN, que aprende suficientemente bien, todos los elementos de entrenamiento y de test.

#### 4.3.3) Tablas de errores relativos.

En este apartado se presenta un conjunto de datos sobre el tratamiento de errores en la aplicación de la metodología neuronal diseñada para el análisis de espectros PIXE en muestras de aerosoles.

El error relativo **ER(i)** del ejemplo número **i** en el conjunto de entrenamiento y de test, para las RNs y para los SNs, se define de la siguiente forma:

$$\mathbf{ER(i)} = |C_{nn}(i) - C_{exp}(i)| / C_{exp}(i) \quad (4.2)$$

donde  $C_{nn}(i)$  y  $C_{exp}(i)$  son las concentraciones determinadas por la metodología neuronal y PIXE respectivamente, en el ejemplo número  $i$ .

El **EPR** (error promedio relativo sobre los elementos de entrenamiento) se determina de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\mathbf{EPR} = \sum_i \mathbf{ER(i)} / n \quad i = 1, \dots, n \text{ y } n = 29 \quad (4.3)$$

En forma similar se define **EPRT** (error promedio relativo en el test) considerando la expresión (4.3) solo para los elementos de test en cada RN, por tanto,  $i = 1, \dots, 8$ .

Como un antecedente importante para el análisis de resultados se considera el error promedio relativo de test, en cada RN – **EPRT1**, eliminando el peor ejemplo.

En las tablas 34 y 35 se presentan los errores relativos clasificados por elementos para cada RN al interior de un SN y luego se considera el resultado que arroja el SN para cada elemento. Se consideran los tipos de error mencionados que permitirán estimar conclusiones sobre la capacidad de generalización de los SNs utilizados.

**Tabla 34. Errores absolutos y relativos en la determinación con RNs de la concentración de los elementos investigados en muestras de aerosoles.**

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT1</b>
	0.12	0.29	0.26
	0.12	0.35	0.29
<b>Al</b>	0.12	0.26	0.22
	0.12	0.26	0.22
	0.12	0.26	0.22
	0.10	0.24	0.16
	0.14	0.31	0.24
<b>Si</b>	0.12	0.41	0.31
	0.15	0.28	0.22
	0.13	0.21	0.16
	0.15	0.22	0.14
	0.18	0.25	0.16
<b>S</b>	0.20	0.25	0.18
	0.15	0.32	0.21
	0.24	0.33	0.20
	0.05	0.30	0.23
	0.07	0.27	0.20
<b>K</b>	0.06	0.28	0.22
	0.06	0.28	0.22
	0.06	0.26	0.20
	0.19	0.32	0.19
	0.13	0.21	0.15
<b>Fe</b>	0.12	0.25	0.14
	0.14	0.30	0.18
	0.12	0.26	0.14

En las tablas se aprecia, en la mayoría de los casos, una correlación suficiente en las respuestas de los SNs a las consultas planteadas en los conjuntos de test y entrenamiento.

**Tabla 35. Errores absolutos y relativos en la determinación con SNs de la concentración de los elementos investigados en muestras de aerosoles.**

	<b>EPR</b>	<b>EPRT</b>	<b>EPRT1</b>
<b>Al</b>	0.09	0.24	0.20
<b>Si</b>	0,06	0.22	0.16
<b>S</b>	0,12	0.24	0.17
<b>K</b>	0.11	0.25	0.18
<b>Fe</b>	0.12	0.18	0.13

Las inconsistencias y errores relativos mayores se observan en las series correspondientes a los elementos Al y K. Esto se explica debido a que los elementos Al y el K son difícil de analizar ya que las respectivas líneas espectrales que los identifican se encuentra sobre un fondo considerable y en algunos casos, como se ilustra en la figura 67 el área de la línea espectral se traslapa con la respectiva del elemento Ca. Por ello, en estos dos casos se puede esperar que los propios datos espectrales experimentales con que fueron entrenadas las RNs, tengan una imprecisión mayor que en los otros elementos analizados. Esta dificultad no es fácil de soslayar con el número bajo de ejemplos disponibles para el entrenamiento.

En general se observa que en aquellos casos donde el EPRT es grande esto se debe principalmente a que hay un solo ejemplo del conjunto que no aprende. Por ello, el EPRT1 en estos casos es considerablemente menor que el EPRT, como sucede en algunas RNs entrenadas en el interior de los SNs del Al y S.

#### **4. 4) CLASIFICACIÓN DEL GRADO DE POLUCIÓN ELEMENTAL EN MUESTRAS DE MATERIAL PARTICULADO DE AEROSOLES.**

En este apartado se presenta un resumen de la capacidad de los SNs de clasificar las concentraciones en las 4 categorías que se definen a continuación.

Se definen 4 grados de nivel de concentración (medida en %) de un elemento en determinada muestra:

- **BLD**            ( $c < 10^{-4}$ ): bajo el límite de detección.
- **Bajo**            ( $10^{-4} \leq c < 10^{-3}$ )
- **Medio**          ( $10^{-3} \leq c < 10^{-2}$ )
- **Alta**            ( $10^{-2} \leq c$ )

El resumen que se presenta en las tablas corresponde a los ejemplos de entrenamiento y test para cada elemento. La clasificación correcta del SN en cada caso se relaciona con las concentraciones experimentales obtenidas en el respectivo nivel. Para este análisis se definen las siguientes cantidades, similares a las definidas en el capítulo 3:

$C_e^E, C_e^T$ : representan la clasificación experimental de las concentraciones en los conjuntos de entrenamiento y test respectivamente.  $C_{nn}^E, C_{nn}^T$ : son las clasificaciones dadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento y test. La expresión  $I(u)$  indica los fallos, donde  $I$  es el número de fallos y  $u$  es la categoría donde se debería clasificar.

$\delta_E, \delta_T$ : representan lo mismo que en el capítulo 3.

$R_E = C_{nn}^E / C_e^E$  y  $R_T = C_{nn}^T / C_e^T$ , representan las razones entre las clasificaciones correctas de los SNs y las experimentales, y miden la capacidad de clasificación de los SNs en el entrenamiento y en el test. El cociente  $R_T / R_E$  se puede ver como una medida de la capacidad de generalización del SN.

**Tabla 36. Clasificación del grado de polución con SN del Al, en muestras de aerosoles.**

SN – Al	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$	$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	0	0	0	0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	36	36	0	10	10	0
<b>(c)-Medio</b>	49	43+6(b)	6	10	5+5(b)	5
<b>(d)-Alto</b>	60	60	0	20	20	0
<b>Nº de clasifics.</b>	<b>145</b>	<b>139 + (6)</b>	<b>6</b>	<b>40</b>	<b>35 + (5)</b>	<b>5</b>

$$R_E = 0.96 \quad R_T = 0.88 \quad R_T/R_E = 0.92$$

Tabla 37. Clasificación con SN del grado de polución del elemento Si investigado en muestra de aerosoles.

SN – Si						
	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$	$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	0	0	0	0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	5	4+1(a)	1	0	0	0
<b>(c)-Medio</b>	31	30+1(b)	1	15	15	0
<b>(d)-Alto</b>	109	109	0	25	25	0
<b>N° de clasifics.</b>	<b>145</b>	<b>143 + (2)</b>	<b>2</b>	<b>40</b>	<b>40</b>	<b>0</b>
<b><math>R_E = 0.99</math></b>		<b><math>R_T = 1.00</math></b>		<b><math>R_T/R = 1.01</math></b>		

Tabla 38. Clasificación con SN del grado de polución del elemento S investigado en muestra de aerosoles.

SN – S						
	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$	$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	0	0	0	0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	30	25+5(c)	5	10	10	0
<b>(c)-Medio</b>	42	35+4(b)+3(d)	7	10	5+5(b)	5
<b>(d)-Alto</b>	73	71+2(c)	2	20	18+2(c)	2
<b>N° de clasifics.</b>	<b>145</b>	<b>131 + (14)</b>	<b>14</b>	<b>40</b>	<b>33 + (7)</b>	<b>7</b>

$$R_E = 0.90 \quad R_T = 0.83 \quad R_T/R_E = 0.92$$

**Tabla 39. Clasificación con SN del grado de polución del elemento K investigado en muestra de aerosoles.**

SN – K							
	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	7	7	0		0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	24	23+1(a)	1		10	10	0
<b>(c)-Medio</b>	82	78+4(d)	4		25	20+5(d)	5
<b>(d)-Alto</b>	32	28+4(c)	4		5	1+4(c)	4
<b>N° de clasifcs.</b>	<b>145</b>	<b>136 + (9)</b>	<b>9</b>		<b>40</b>	<b>31 + (9)</b>	<b>9</b>

$$R_E = 0.94 \quad R_T = 0.78 \quad R_T/R_E = 0.83$$

**Tabla 40. Clasificación con SN del grado de polución del elemento Fe investigado en muestra de aerosoles.**

SN – Fe							
	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$		$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	11	7+4(b)	4		0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	5	2+1(c)+2(a)	3		0	0	0
<b>(c)-Medio</b>	37	31+1(b)+5(d)	6		20	16+1(d)+3(b)	4
<b>(d)-Alto</b>	92	92	0		20	20	0
<b>N° de clasifcs.</b>	<b>145</b>	<b>132 + (13)</b>	<b>13</b>		<b>40</b>	<b>36 + (4)</b>	<b>4</b>

$$R_E = 0.91 \quad R_T = 0.90 \quad R_T/R_E = 0.99$$

**Tabla 41. Resumen de clasificación general con SNs del grado de polución de los elementos investigados en muestras de aerosoles analizadas en los conjuntos de entrenamiento y test.**

<b>Total</b>	$C_e^E$	$C_{nn}^E$	$\delta_E$	$C_e^T$	$C_{nn}^T$	$\delta_T$
<b>(a)-BLD</b>	18	14+4(b)	4	0	0	0
<b>(b)-Bajo</b>	100	90+4(a)+6(c)	10	30	30	0
<b>(c)-Medio</b>	241	217+12(b)+12(d)	24	80	61+13(b)+6(d)	19
<b>(d)-Alto</b>	366	360+6(c)	6	90	84+6(c)	6
<b>N° de clasifics.</b>	<b>725</b>	<b>681 + (44)</b>	<b>44</b>	<b>200</b>	<b>175</b>	<b>25</b>

$$R_E = 0.94 \quad R_T = 0.88 \quad R_T/R_E = 0.94$$

**Tabla 42. Relaciones de clasificación de los SNs para cada elemento en el conjunto de entrenamiento y de Test, para muestras de aerosoles.**

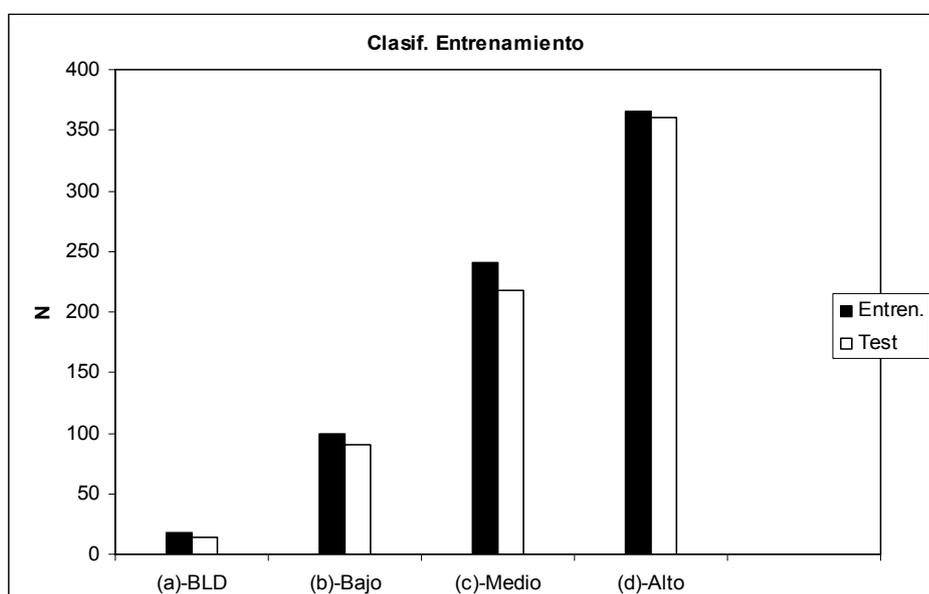
	$R_E$	$R_T$	$R_T/R_E$
<b>Al – Aluminio</b>	0.96	0.88	0.92
<b>Si – Silicio</b>	0.99	1.00	1.01
<b>S – Azufre</b>	0.90	0.83	0.92
<b>K – Potasio</b>	0.94	0.78	0.83
<b>Fe – Hierro</b>	0.91	0.90	0.99

En la tabla 42 se observa que el valor  $R_T / R_E$  de los SNs es superior al 92% en todos los casos excepto para el K, donde el pico espectral de la línea respectiva aparece superpuesto con la del Ca y esto puede inducir a un error mayor en los propios antecedentes experimentales que se utilizan como entradas a los SNs ya que uno de ellos

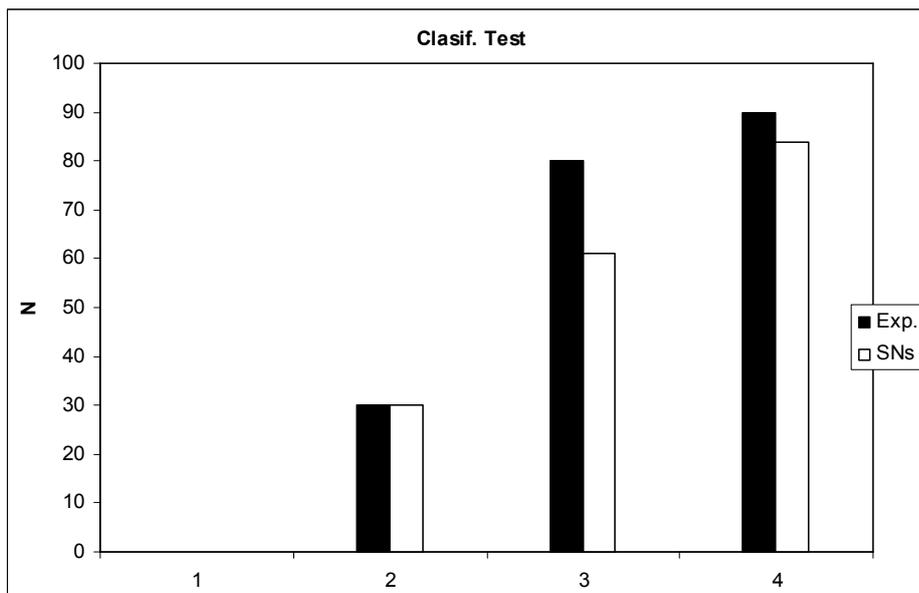
es el área efectiva bajo la curva, que se calcula restando el fondo presente, y como las líneas del K y Ca se traslapan es de esperar un error más alto en este dato de entrada lo que deriva en una salida con error mayor. La incerteza que se aprecia en la clasificación se encuentra en los rangos aceptables en este tipo de análisis en la física atómica y nuclear.

Por otro lado, en las tablas 23 a 27 se puede ver que las clasificaciones incorrectas realizadas por los SNs siempre se insertan en grupos adyacentes al correcto y por tanto la dispersión disminuye.

En las figuras 47 y 48 se presenta gráficamente el grado de coincidencia entre las clasificaciones experimentales y las de los SNs en muestras orgánicas y como es de esperar ésta es superior en el conjunto de entrenamiento. Y en la figura 48 que ilustra la clasificación en el conjunto de Test para aerosoles se ve que varias clasificaciones erróneas efectuadas como (b)-Bajo o (d)-Alto corresponderían al grupo contiguo (c)-Medio. Y estas se deben básicamente a los elemento K y S donde el rango de los valores experimentales es superior al resto de los elementos investigados y por ende se espera una dispersión de resultados más alta.



**Figura 78. Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras aerosoles.**



**Figura 79. Gráfico comparativo de las clasificaciones experimentales y las realizadas por los SNs en el conjunto de entrenamiento de las muestras de aerosoles.**



## **CAPÍTULO V.**

### **ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE RESULTADOS DE LA APLICACIÓN DE LOS SNs.**



En este capítulo se presenta un breve análisis estadístico de las aplicaciones de los SNs en el análisis de las muestras orgánicas y de aerosoles. El objetivo es estudiar el grado de relación y dependencia que se genera en el proceso de entrenamiento de los SNs entre las concentraciones elementales esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por los SNs ( $C_{nn}$ ).

Para esto se utiliza el método de regresión lineal simple y que comprende las siguientes etapas principales:

- En primer lugar se constata que existan las condiciones básicas que permiten realizar el análisis estadístico respectivo, para que las inferencias realizadas tengan validez.
- Se construye un gráfico de correlación entre las variables estudiadas y se calcula la ecuación de la recta que representa la línea de regresión.
- Finalmente, en base a la ecuación encontrada, se analizan las propiedades estadísticas que permiten establecer el grado de relación entre las variables. En este trabajo, la inferencia se realiza mediante el método de análisis de varianza.

El estudio de regresión se practica por separado a los conjuntos de entrenamiento y test en las aplicaciones realizadas en muestras orgánicas y aerosoles.

## 5. 1) ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LA DETERMINACIÓN POR LOS SNS DE LAS CONCENTRACIONES ELEMENTALES EN MUESTRAS ORGÁNICAS.

En el análisis estadístico de las aplicaciones de los SNS para el estudio de muestras orgánicas se han considerados los resultados obtenidos en las cinco series ejecutadas por cada elemento investigado: P, S, K, Ca, Fe y Zn. De esta forma, si se considera que en cada serie el conjunto de entrenamiento se compone de 18 ejemplos y el de test de 4 ejemplos, se obtienen 540 ( $6 \cdot 5 \cdot 18$ ) pares de valores en el conjunto de entrenamiento y 120 pares en el conjunto de Test.

La figura 80 ilustra el gráfico de correlación  $C_{nn}$  vs  $C_{exp}$  para todos los pares incluidos en los conjuntos de entrenamiento y test de los SNS para el análisis de las concentraciones elementales en las muestras orgánicas. También se presenta el factor de correlación  $R^2$  para cada conjunto.

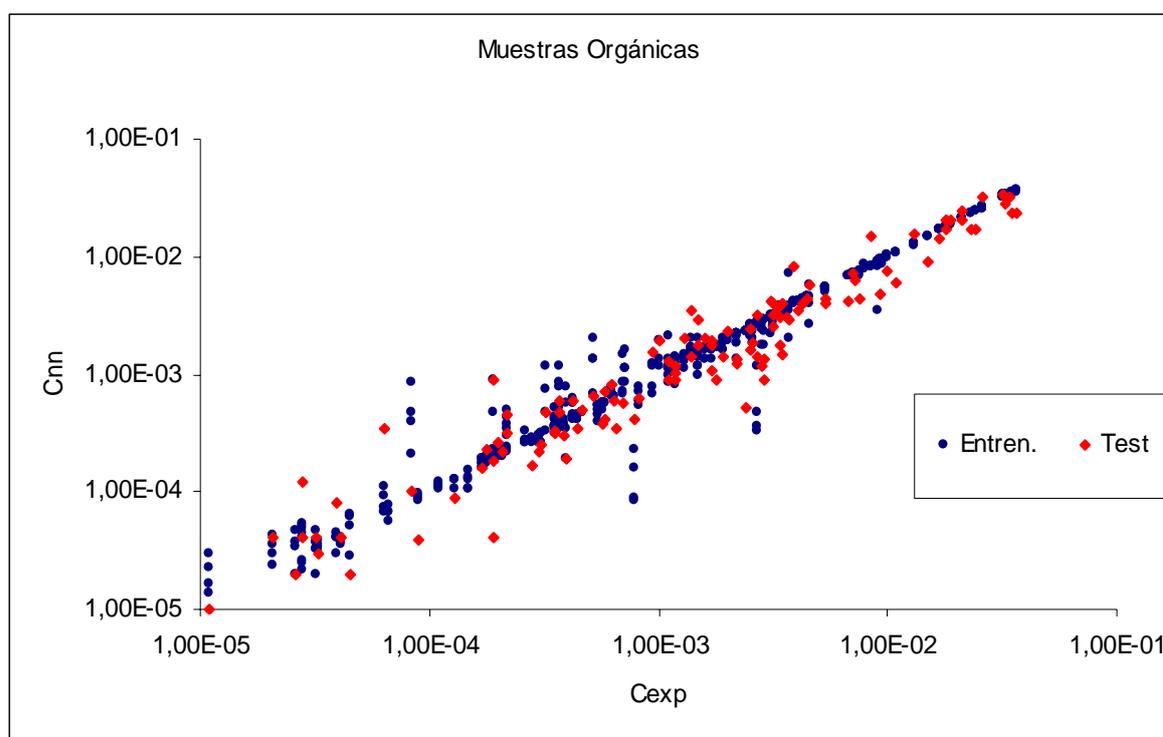


Figura 80. Gráfico de correlación de los resultados obtenidos por los SNS en el análisis de muestras orgánicas. Se incluyen los conjuntos de entrenamiento y test.

### 1. 1. 1) Conjunto de entrenamiento.

En este apartado se presentan los resultados del análisis de regresión aplicado al conjunto de entrenamiento en muestras orgánicas. En primer lugar se ilustra, en la figura 81, el ajuste lineal obtenido entre los valores  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  y se muestra la ecuación de la recta respectiva (especificada en rojo en el gráfico). También se muestra con las respectivas líneas azules, los rangos de la desviación típica calculada en torno a la línea de regresión.

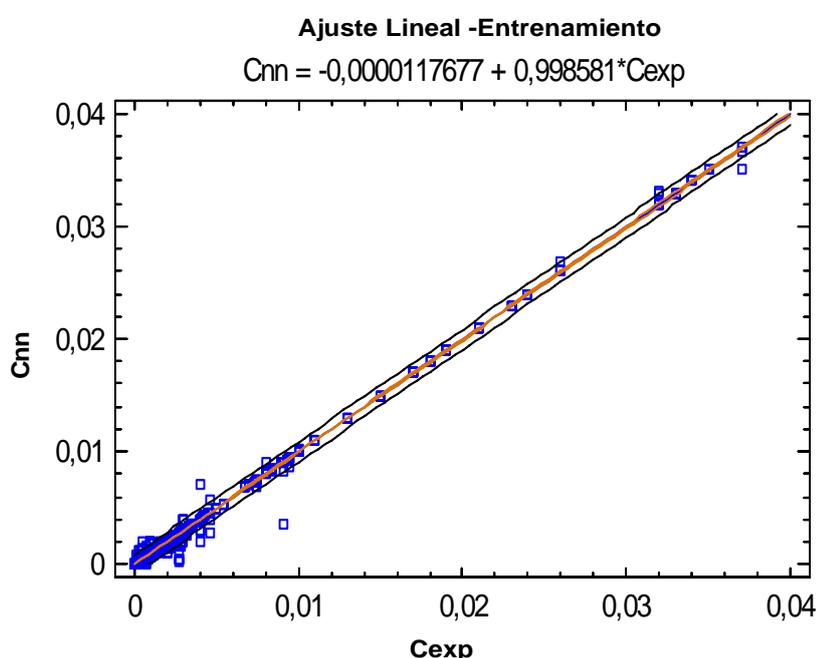


Figura 81. Gráfico de regresión lineal ( $G_{nn}$  vs  $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de entrenamiento en las muestras orgánicas.

En la figura 82 se muestra el gráfico de residuos que permite establecer que sólo algunos resultados están fuera del rango del nivel de confianza (preestablecido en el 95%), de acuerdo al método empleado.

Parámetros estadísticos relativos al conjunto de entrenamiento y que se desprenden de los gráficos de regresión en las Figuras 50 y 51 son los siguientes:

- Coeficiente de correlación R: = 0.9986
- $R^2$  = 99.72%

- Error típico de estimación =  $4.5 \times 10^{-4}$
- Error absoluto medio =  $1.71 \times 10^{-4}$

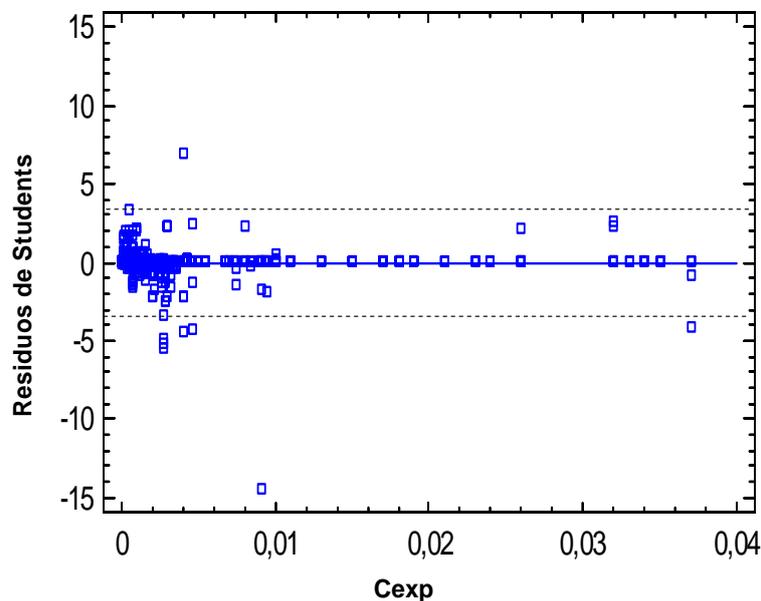


Figura 82. Gráfico de residuos basado en la t de Student de las concentraciones elementales del conjunto de entrenamiento en las muestras orgánicas.

De acuerdo a estos datos estadísticos desprendidos de la regresión lineal realizada se puede establecer una fuerte relación estadística entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , lo que indica que el modelo usado puede considerarse predictivo en los márgenes establecidos por la desviación estándar.

Por otra parte, al realizar un análisis ANOVA (análisis de varianza) se obtiene que el valor-p (significancia) es 0.001, y al ser menor que 0.05 indica que existe una significativa relación lineal entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , con un grado de confiabilidad del 95%.

De acuerdo con el método de residuos basados en la t de Student, se observa que solo 10 valores son superiores a 3, de un total 540, que representarían aquellos valores que no responden al método predictivo analizado.

Se calcula el factor de Durbin – Watson, que tiene un valor 2.41, lo que es indicativo de ausencia de autocorrelación.

### 5. 1. 2) Conjunto de test.

En este apartado se presentan los resultados obtenidos del análisis de regresión aplicado al conjunto de test en muestras orgánicas. En la figura 83, se presenta el ajuste lineal obtenido entre los valores  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  y se muestra la ecuación de la recta respectiva (especificada en rojo en el gráfico). También se muestra con las respectivas líneas azules, los rangos de la desviación típica calculada en torno a la línea de regresión.

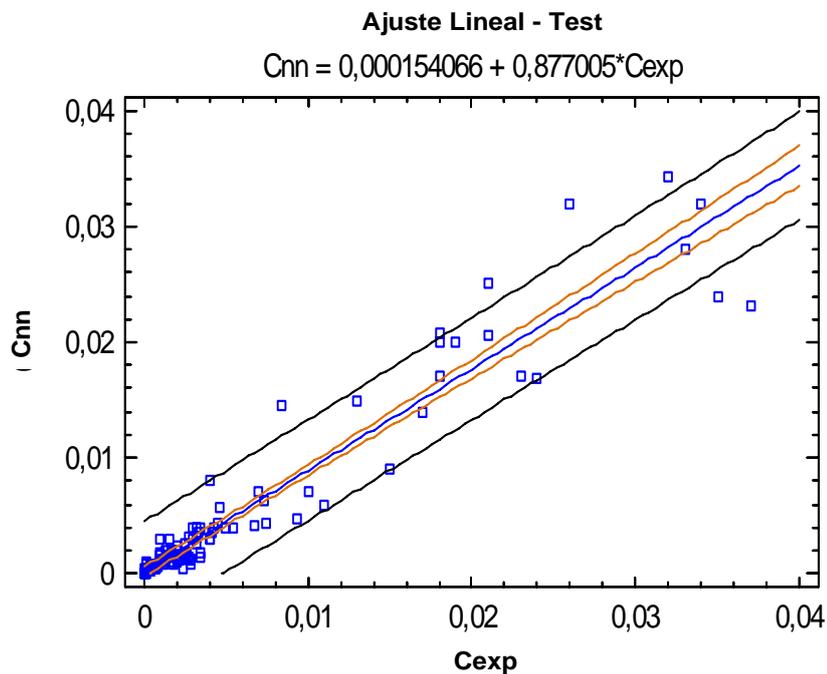


Figura 83. Gráfico de regresión lineal ( $C_{nn}$  vs  $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de test en las muestras orgánicas.

En la figura 84 se muestra el gráfico de residuos que permite establecer que sólo algunos resultados están fuera del rango del nivel de confianza (preestablecido en el 95%), de acuerdo al método empleado.

Parámetros estadísticos del conjunto de test y que se desprenden del análisis de los gráficos de regresión simple en las figuras 52 y 53 son los siguientes:

- Coeficiente de correlación - R: = 0.9589
- $R^2$  = 91.95%

- Error estándar de estimación =  $2.2 \times 10^{-3}$
- Error absoluto medio =  $1.2 \times 10^{-3}$

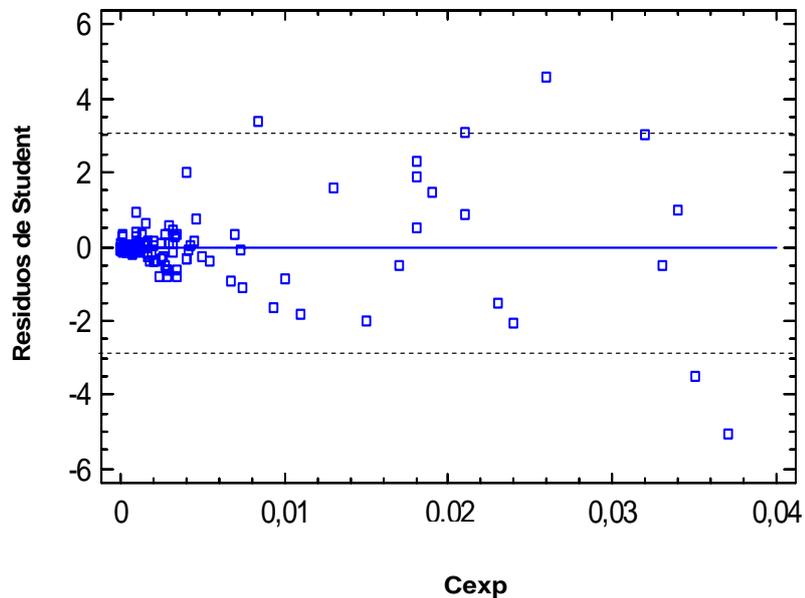


Figura 84. Gráfico de residuos basado en la t de Student en las concentraciones elementales del conjunto de test en las muestras orgánicas.

De acuerdo a estos datos estadísticos desprendidos de la regresión lineal realizada se puede establecer una fuerte relación entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , lo que indica que el modelo usado es predictivo en los márgenes establecidos por la desviación estándar.

Por otra parte, al realizar un análisis ANOVA se obtiene que el valor-p es 0.003, y como es menor que 0.05 indica que existe una significativa relación lineal entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , con un grado de confiabilidad del 95%.

De acuerdo con el método de residuos basados en la t de Student, se observa que solo 6 valores son superiores a 3, de un total de 120, y que representan aquellos valores que no responden al método predictivo analizado.

Se calcula el factor de Durbin – Watson el cual tiene un valor 1.53, que indica ausencia de autocorrelación.

## 5. 2) ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LA DETERMINACIÓN POR LOS SNS DE LAS CONCENTRACIONES ELEMENTALES EN MUESTRAS DE AEROSOLES.

En el análisis estadístico de las aplicaciones de los SNS en el estudio de muestras de aerosoles se han considerados los resultados obtenidos en los SNS para cada elemento investigado: Al, S, Si, K y Fe. De esta forma, si se considera que en cada SN el conjunto de entrenamiento se compone de 29 ejemplos y el de test de 8 ejemplos, se obtienen 725 ( 29 \*5 \*5) pares de valores en el conjunto de entrenamiento y 200 (8 \*5 \*5) pares en el conjunto de Test.

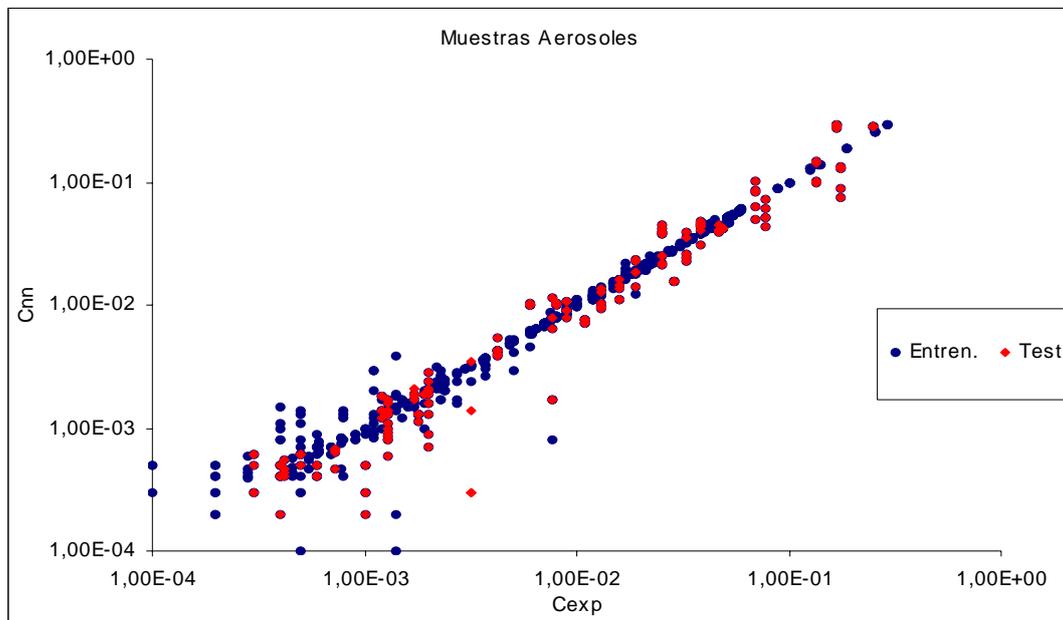


Figura 85. Gráfico de correlación de los resultados obtenidos por los SNS. Se incluyen los conjuntos de entrenamiento y test de las muestras de aerosoles.

La figura 85 ilustra el gráfico de correlación  $C_{nn}$  vs  $C_{exp}$  para todos los pares incluidos en los conjuntos de entrenamiento y test de los SNS para el análisis de las concentraciones elementales en las muestras de aerosoles. Y se presenta el factor de correlación  $R^2$  para cada conjunto.

### 5. 2. 1) Conjunto Entrenamiento.

En este apartado se presentan los resultados obtenidos del análisis de regresión aplicado al conjunto de entrenamiento en muestras de aerosoles. En la figura 86 se ilustra el ajuste lineal obtenido entre los valores  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  y se muestra la ecuación de la recta respectiva (especificada en rojo en el gráfico). También se muestra los rangos de la desviación típica calculada en torno a la línea de regresión.

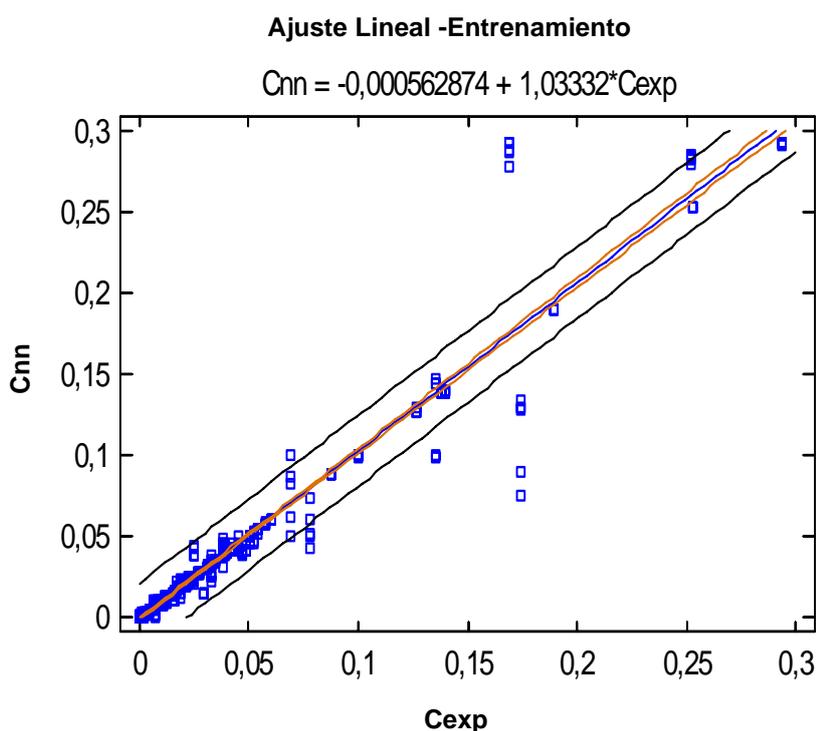


Figura 86. Gráfico de regresión lineal  $G_{nn}$  vs  $C_{exp}$ ) para las concentraciones elementales en el conjunto de entrenamiento en las muestras de aerosoles.

En la figura 87 se muestra el gráfico de residuos que permite establecer que sólo algunos resultados están fuera del rango del nivel de confianza (95%), de acuerdo al método empleado.

Parámetros estadísticos del conjunto de entrenamiento en aerosoles y que se desprenden del análisis de los gráficos en las figuras 86 y 87 son los siguientes:

- Coeficiente de correlación - R: = 0.9735
- $R^2$  = 94.77%

- Error estándar de estimación =  $1.1 \times 10^{-2}$
- Error absoluto medio =  $2.8 \times 10^{-3}$

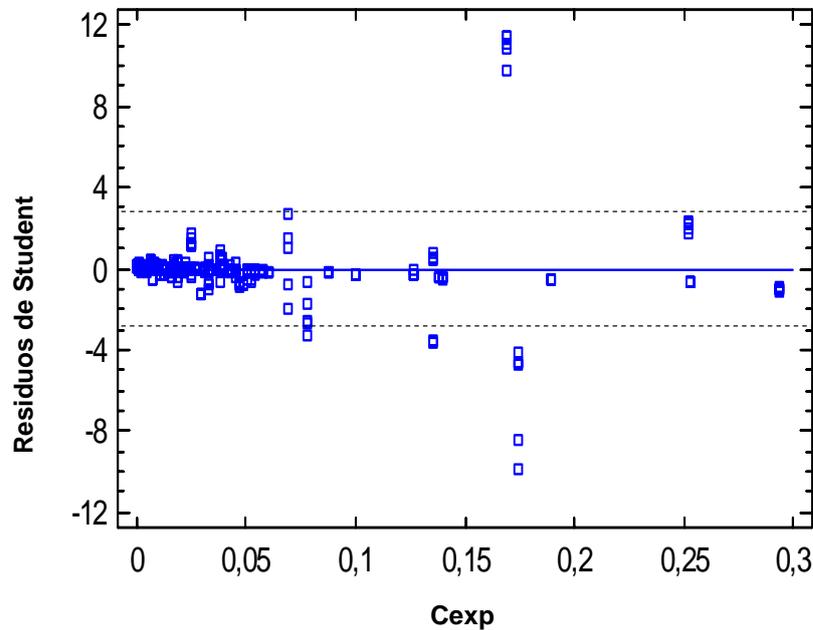


Figura 87. Gráfico de residuos basado en la t de Student en las concentraciones elementales del conjunto de entrenamiento en las muestras de aerosoles.

De acuerdo a estos datos estadísticos desprendidos de la regresión lineal realizada se puede establecer una fuerte relación entre  $C_{mn}$  y  $C_{exp}$ , lo que indica en que el modelo usado es predictivo en los márgenes establecidos por la desviación estándar.

Por otra parte, al realizar el análisis ANOVA, se obtiene que el valor-p es 0.001 y al ser menor que 0.05 que indica que existe una significativa relación lineal entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , con un grado de confiabilidad de 95%.

De acuerdo al método de residuos basados en la t de Student se observa que solo 13 valores son superiores a 3 de un total de 725, y que representarían aquellos valores que no responden al método predictivo analizado en el rango de confiabilidad establecida.

Se calcula el factor de Durbin – Watson el cual tiene un valor cercano 1.98, que es indicativo de ausencia de autocorrelación.

### 5. 2. 2) Conjunto de Test.

En este apartado se presentan los resultados obtenidos del análisis de regresión aplicado al conjunto de test en muestras de aerosoles. En la figura 88 se ilustra el ajuste lineal obtenido entre los valores  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$  y se muestra la ecuación de la recta respectiva. Se muestra los rangos de la desviación típica calculada en torno a la línea de regresión.

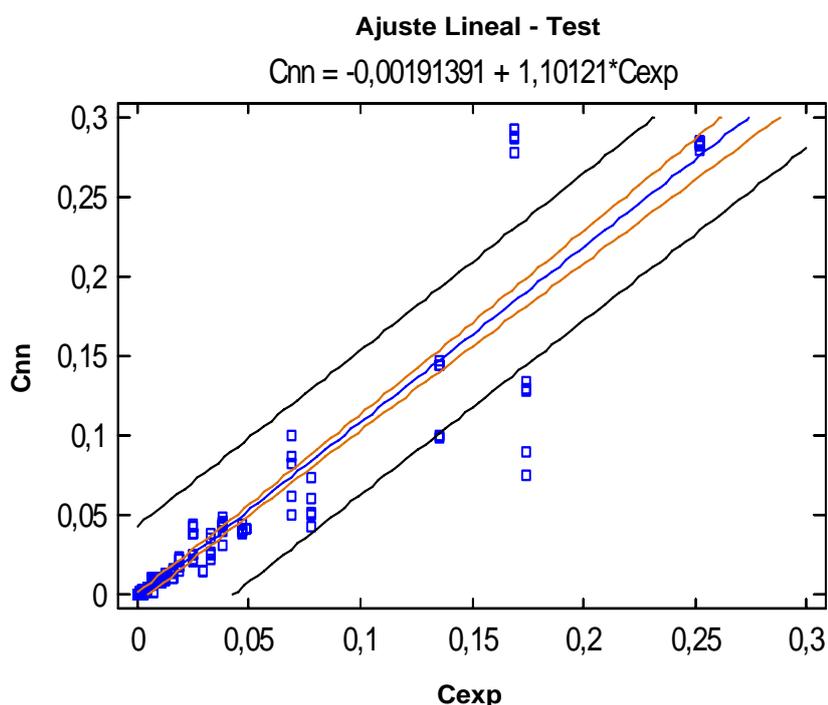


Figura 88. Gráfico de regresión lineal Gnn vs Cexp) para las concentraciones elementales en el conjunto de test en las muestras de aerosoles.

En la figura 89 se muestra el gráfico de residuos que permite establecer que sólo algunos resultados están fuera del rango del nivel de confianza (95%), de acuerdo al método empleado.

Parámetros estadísticos de las muestras de aerosoles en el conjunto de test y que se desprenden del análisis de los gráficos en las Figuras 57 y 58 son los siguientes:

- Coeficiente de correlación - R: = 0.9373
- $R^2$  = 87.86%

- Error estándar de estimación =  $2.2 \times 10^{-2}$
- Error absoluto medio =  $9.5 \times 10^{-3}$

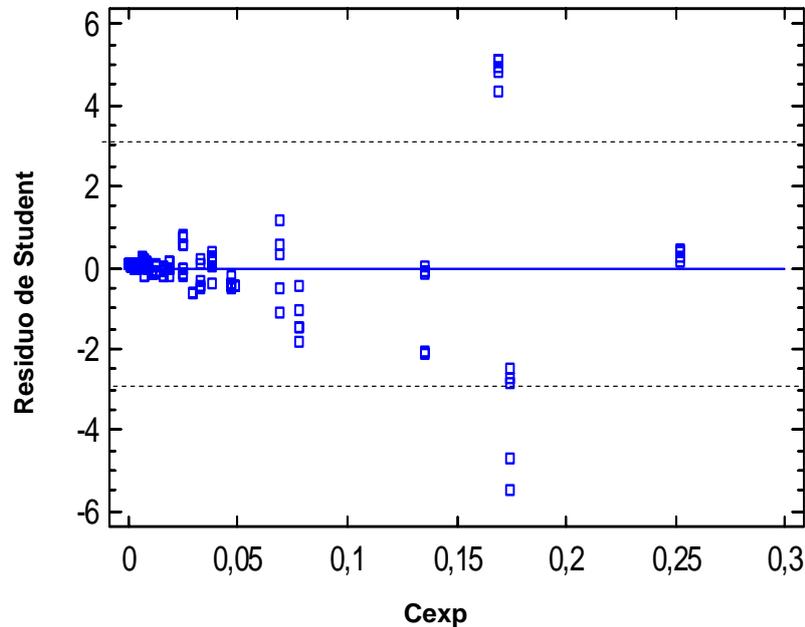


Figura 89. Gráfico de residuos basado en la t de Student en las concentraciones elementales del conjunto de test en las muestras de aerosoles.

De acuerdo a estos datos estadísticos desprendidos de la regresión lineal realizada se puede establecer una fuerte relación entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , lo que indica en que el modelo usado es predictivo en los márgenes establecidos por la desviación estándar.

Por otra parte, al realizar un análisis ANOVA ( análisis de varianza) se obtiene que el valor-p es 0.004, y por tanto menor que 0.05, lo que indica que existe una significativa relación lineal entre  $C_{nn}$  y  $C_{exp}$ , con un grado de confiabilidad de 95%.

De acuerdo al método de residuos basados en la t de Student se observa que solo 7 valores son superiores a 3 de un total de 200, y que representarían aquellos valores que no responden al método predictivo analizado en el rango de confiabilidad establecido.

Se calcula el factor de Durbin – Watson el cual tiene un valor cercano a 1.92, lo que es indicativo de ausencia de autocorrelación.

En la tabla 43 se muestra un resumen de los estadísticos obtenidos en los procesos de regresión lineal aplicados tanto a los conjuntos de entrenamiento y test en las muestras

orgánicas y de aerosoles. Sus valores indican el grado de fuerte relación estadística que se genera en el proceso de entrenamiento de los SNs, entre las respuestas esperadas y las entregadas por los SNs.

Tabla 43: Antecedentes estadísticos del análisis realizado en muestras orgánicas y aerosoles.

	Muestras Orgánicas		Muestras de Aerosoles	
	Entrenam.	Test	Entrenam.	Test
valor – p (ANOVA)	0.001	0.003	0.001	0.004
R <sup>2</sup>	99.71%	91.95%	94.77%	87.86%
Error estándar estimación	4.5 x 10 <sup>-4</sup>	2.1 x 10 <sup>-3</sup>	1.1 x 10 <sup>-2</sup>	2.2 x 10 <sup>-2</sup>
Error absoluto medio	1.7 x 10 <sup>-4</sup>	1.6 x 10 <sup>-3</sup>	2.8 x 10 <sup>-3</sup>	8.9 x 10 <sup>-3</sup>
Factor Durbin - Watson	2.41	1.53	1.98	1.92

## **CAPITULO VI.**

### **CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS**



En este capítulo, se presentan las conclusiones más importantes de la memoria, así como las aportaciones realizadas en la misma, de acuerdo con las experiencias realizadas. También se incluyen algunos trabajos futuros que complementarán los resultados obtenidos.

Se incluyen además, las publicaciones realizadas que tienen como base los resultados de las experiencias realizadas y desarrolladas en la memoria.

## **6. 1) CONCLUSIONES**

La idea central de la presente Tesis es avanzar en el proceso de automatización del análisis espectral en el ámbito de la física atómica y nuclear, utilizando herramientas propias de la inteligencia artificial para permitir significativas reducciones en los costos y tiempos de investigación, lo que repercutirá en un desarrollo creciente de aplicaciones en el campo especificado.

En particular, se ha implementado una aplicación neuronal para el análisis de espectros PIXE obtenidos de muestras orgánicas y de aerosoles. En el diseño de estas

aplicaciones específicas se tuvo presente el hecho de que el número de muestras, y por ende de espectros, obtenidos tanto de sustancias orgánicas como de aerosoles era reducido, se diseñó una estructura neuronal donde el número de parámetros a definir estuviese acorde con el número de ejemplos disponibles para el entrenamiento.

Además, se ha realizado un importante estudio del estado del arte en la aplicación de Redes Neuronales Artificiales, en la Ingeniería y Ciencia Nuclear.

### **6. 1. 1) Diseño de sistemas neuronales (SNs) para el análisis de espectros PIXE.**

Elemento central de la aportación de esta memoria, es la aplicación diseñada con los sistemas neuronales (SNs), compuestos de un número específico (en nuestro caso 5) de RNs de propagación hacia delante, con igual topología y que se entrenan en forma independiente con el algoritmo de retropropagación del error. Las entradas al SN son las mismas entradas de cada RN, que son procesadas en forma paralela, y cuyas respuestas se analizan en el sistema de decisión (SD) que mediante un mecanismo matemático predeterminado (en esta memoria, el valor medio de las respuestas de las RNs) entrega la respuesta del SN a la consulta realizada. Cada SN se especializa en determinado elemento, es decir, se construyen tantos SNs como elementos químicos se investigan y actúan en forma paralela e independiente uno de otro.

Las entradas a los SNs la constituyen antecedentes experimentales previamente determinadas y sólo una entrada proviene del espectro recopilado, que es el máximo de cuentas en la línea espectral del elemento investigado. En la metodología clásica PIXE se utiliza el área efectiva de la línea espectral en vez del máximo de cuentas, y esto implica un procesamiento computacional adicional previo de dicha entrada. Sin embargo el resultado obtenido no debería ser considerablemente distinto debido al hecho de que el fondo, o ruido, presente en las líneas espectrales de cada elemento se puede considerar casi constante en todos los espectros. Con la aportación descrita en esta memoria, puede obviarse el cálculo del área efectiva facilitando la rapidez del proceso de automatización en línea y tiempo real. Los resultados obtenidos, mostrados en los capítulos 3 y 4 ratifican la citada propuesta.

La topología de las RNs (propagación hacia delante) se obtuvo experimentalmente.

**a) Resultados obtenidos por los SNs en el análisis de espectros PIXE de sustancias orgánicas y aerosoles.**

Para constituir los conjuntos de entrenamiento y test se contó con 22 espectros de muestras orgánicas (18 para el entrenamiento y 4 para test) y 37 espectros de muestras de aerosoles (29 para el entrenamiento y 8 para el test). Se desarrollaron SNs especializados en el análisis de los elementos de interés en la investigación y así se entrenaron y verificaron tantos SNs como elementos químicos de interés se analizaron en las muestras: P, S, K, Ca, Fe y Zn en las muestras orgánicas y Al, S, Si, K y Fe en las de aerosoles.

Los SNs se entrenaron y verificaron en forma independiente y en el interior de los SNs, cada RN fue entrenada y testada en forma independiente, con el objetivo de robustecer las respuestas y capacidad de generalización de los SNs. La topología y el mecanismo de entrenamiento de las RNs en el interior de los SNs fue el mismo: se diseñaron RNs de propagación hacia delante con 4 neuronas de entrada, 4 ocultas y 1 de salida ( 4 – 4 – 1 ) en muestras orgánicas y ( 4 – 4- 1 ) en las muestras de aerosoles, y todas las RNs fueron entrenadas con el algoritmo de retro propagación del error.

El objeto de hacer depender las entradas a los SNs del conjunto del proceso experimental, tiene como objetivo facilitar la rapidez y reducción de costos y tiempos de proceso y por otro lado robustecer su entrenamiento y capacidad de generalización y así superar la insuficiencia de contar con un reducido grupo de espectros experimentales para el entrenamiento. Esta es una idea novedosa que hace más atractivo el uso de metodologías neuronales en el análisis espectral, ya que simplifica los procesos de entrenamiento y facilita su aplicación en línea y tiempo real.

La salida de las RNs es la concentración en la muestra analizada del elemento investigado, es decir es un valor numérico. Las salidas de las RNs del interior del SN se combinan mediante alguna operación algebraica o lógica para generar la salida del SN. En el presente trabajo se procesan en el SD de cada SN dos tipos de salida: una que clasifica el nivel de presencia elemental en cada muestra analizada y otra que indica la concentración elemental, en %, de cada elemento presente en ella.

De acuerdo a los resultados expuestos en los capítulos 3 y 4, y su análisis estadístico en el capítulo 5 (aportaciones de la presente memoria), se observa que el nivel de confiabilidad de las aplicaciones realizadas es significativo y por tanto constituye un

aporte científico al desarrollo de la investigación en el ámbito del uso de las metodologías neuronales en el área de la física atómica y nuclear, y en particular en el análisis espectral.

Los experimentos realizados ponen de manifiesto que a pesar de las dificultades debidas al solapamiento de los espectros de algunos elementos, y al escaso número de elementos para el entrenamiento, los SNs diseñados permiten aprender con suficiente eficacia el procedimiento PIXE, posibilitando realizar el reconocimiento de los elementos definidos en tiempo real.

En definitiva, se puede concluir, como resumen de las aportaciones descritas en los capítulos 3, 4 y 5, que las Redes Neuronales constituyen una importante e interesante alternativa a los métodos clásicos de análisis de espectros PIXE, para determinar la presencia y/o las concentraciones de elementos químicos en muestras de diferentes tipos.

#### **b) Revisión literaria y estudio del estado del arte en el ámbito de la ingeniería y ciencia nuclear.**

Otra importante aportación de la Tesis, ha sido el desarrollo de un estudio sobre el estado del arte de las aplicaciones de RNs en el ámbito de la ciencia nuclear y física de las partículas, considerando cuatro tópicos principales: análisis espectral, reactores nucleares y plantas de energía nuclear, dosimetría y física de neutrones y física de partículas de altas energías. A través de una revisión literaria que abarca un período desde 1989 al 2006, se clasifican las aplicaciones según las áreas mencionadas y los tipos de redes neuronales más usados. La importancia de la aportación realizada radica en el hecho de que en base a este estudio realizado, se facilitará la labor de futuros investigadores interesados en estos temas.

Por otro lado, se constata el interés creciente que existe en estas áreas de investigación fundamental y tecnológica por el uso de las nuevas tecnologías de información en el ámbito de la inteligencia artificial, y en particular por las RNs en sí, o bien, como parte de sistemas híbridos.

De acuerdo con la sistemática presentada se concluye que las RNs de propagación hacia delante son las más usadas, ya sea en forma individual o como parte de sistemas inteligentes más complejos. También existe un número significativo de modelos particulares de sistemas inteligentes con RNs dependientes del problema concreto que se

pretende abordar. En esta línea se presenta una relación cada vez más estrecha entre el desarrollo de aplicaciones nucleares e investigaciones fundamentales en el área de la inteligencia artificial.

### **c) Publicaciones realizadas sobre el contenido de la tesis.**

En este apartado, se relacionan las publicaciones en revistas y congresos de nivel nacional o internacional que se han realizado, sobre los resultados obtenidos y descritos en la presente memoria:

#### **Publicaciones en Revistas con Índice de Impacto**

- R. Correa, M.A. Chesta, J.R. Morales, M.I. Dinator, I. Requena and I. Vila. Artificial neural networks applied to quantitative elemental analysis of organic material using PIXE. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Volume 248, Issue 2, August 2006, Pages 324-328*
- Rafael Correa, Ignacio Requena. Analysis of aerosol and organic substance samples, using pixe spectral and artificial neural networks. *Neural Computing and Applications. Sometido en Agosto 2006.*

#### **Contribuciones a congresos nacionales e internacionales**

- R. Correa, I Requena. Aplicaciones de Redes Neuronales en Ciencia e Ingeniería Nuclear. *Actas de. ESTYLF'04, Jaén, España. Septiembre 2004. pp 25-30.*
- R. Correa, M.A. Chesta, M.I. Dinator, I.Vila, I. Requena, J.R. Morales. Análisis de espectros PIXE de muestras orgánicas con redes neuronales artificiales. *IX Semin. Latinoamericano de Técnicas de Rayos X (SARX 2004), Córdoba, Argentina.*
- R. Correa, M.A. Chesta, M.I. Dinator, I.Vila, I. Requena, J.R. Morales. Análisis de espectros PIXE con redes neuronales artificiales. *XIV Simposio de la Sociedad Chilena de Física (SOCHIFI 2004), Antofagasta, Chile*
- R. Correa, I. Requena. Neural Networks to detect chemical elements from raw PIXE spectra of organic substance. *World Congress on Fuzzy Logic, Soft Computing and Computational Intelligence - IFSA 2005. Beijing, China.*

## **6. 2) LÍNEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN .**

A continuación se describen algunas líneas de investigación futura, que se desprenden de forma natural, del trabajo desarrollado en la presente memoria. Se presentan proyectos de actuación futura en tres caminos.

### **a) Optimización de los SNs.**

En esta línea, se busca optimizar en forma individual los distintos componentes de los SNs y la relación entre ellos.

El análisis de los componentes en forma individual comprende esencialmente los siguientes aspectos:

- Generar mecanismos de selección de las entradas al SN y a las RNs que permitan obtener la mejor capacidad de aprendizaje y generalización de los SNs. Se trata de experimentar con diferentes variables como entradas que mejoren los resultados de entrenamiento, para soslayar los problemas encontrados, como el solapamiento de algunas líneas espectrales.
- Considerando que generalmente en este tipo de aplicaciones los ejemplos disponibles para los conjuntos de entrenamiento y tests son escasos, se deben desarrollar nuevos procedimientos de selección optimizada de los ejemplos para el entrenamiento, tal que deriven en un mejor rendimiento del proceso de entrenamiento y validación de los SNs.
- Probar otros modelos de RN a usar en el interior del SN, como por ejemplo las RBF, y diseñar la topología más adecuada de las RNs componentes.

En lo que respecta a la relación entre las RNs componentes de un SN nos proponemos investigar el diseño de un sistema de decisión (SD) neuro difuso con el objeto de aumentar la capacidad de generalización del SN y de clasificación del nivel de presencia elemental en las muestras, ya que al usar mecanismos de decisión tradicionales

los errores de clasificación se encontraron en valores cercanos a los límites de los rangos en los respectivos niveles.

**b) Aplicación de la metodología diseñada a otros materiales y elementos.**

Considerar la aplicación de la experiencia realizada, a otros tipos de materiales o sustancias en los que se utiliza la técnica PIXE, como por ejemplo restos encontrados en yacimientos arqueológicos.

También será interesante ampliar el estudio a otros elementos químicos que suelen estar presentes en las muestras analizadas.

**c) Ampliar el análisis neuronal a otros tipos de espectros.**

En la memoria se presenta el diseño de aplicaciones al análisis de emisiones X inducidas por protones (PIXE). Será interesante en el futuro, desarrollar experimentos relacionados con espectros de emisiones X inducidas por haces de electrones (BIXE), y también inducidas por radiación gamma (GIXE). La ampliación de esta línea de aplicación deriva a potenciar el uso de tecnologías neuronales en el campo de la ingeniería y ciencia nuclear, en el tópico de análisis espectral.



## **BIBLIOGRAFIA**



- [1] S.M. Abel-Halim et al. The characteristics of proton and induced neutron-emulsion high energy interactions. *Chaos, Solitons Fractals* 16,2003, 691–697.
- [2] Abu-Mahfouz I . Drill flank wear estimation using supervised vector quantization neural networks. *Neural Computing & Applications* 14 (3): 167-175 Sep 2005.
- [3] Adeli H, Jiang XM. Dynamic fuzzy wavelet neural network model for structural system identification. *Journal Of Structural Engineering-Asce* 132 (1): 102-111 Jan 2006
- [4] Adler C et.al. Electron/pion identification with ALICE TRD prototypes using a neural network algorithm. *Nuclear Instruments & Methods In Physics Research Section A - 552* (3): 364-371 Nov. 1 - 2005.
- [5] Alkan A, Koklukaya E, Subasi A. Automatic seizure detection in EEG using logistic regression and artificial. *Journal Of Neuroscience Methods* 148 (2): 167-176 Oct 30 2005
- [6] M. Ambriola et al. Supervised algorithms for particle classification by a transition radiation detector. *Nuclear Instr. Methods Phys. Res., A* 510 (2003) 362–370
- [7] Amenomori M et.al. (Tibet ASGamma Collaboration). Are protons still dominant at the knee of the cosmic-ray energy spectrum?. *Physics Letters B* 632 (1): 58-64 Jan 5 2006

- [8] W. S. Andrews, B. J. Lewis, D. S. Cox. Artificial neural networks models for volatile fission product release during severe accident conditions. *Journal of Nuclear Materials* 270 (1999) 74 – 86.
- [9] Aristodemou E, Pain C, de Oliveira C, Umpleby A, Goddard T, Harris C. Energy Group optimization for forward and inverse problems in nuclear engineering: application to downwell-logging problems. *Geophysical Prospecting* 54 (2): 99-120 Mar 2006.
- [10] Aristodemou E, Pain C, de Oliveira C, Goddard T, Harris C. Inversion of nuclear well-logging data using neural networks. *Geophysical Prospecting* 53 (1): 103-120 Jan 2005.
- [11] I.K. Attieh et al. Pattern recognition techniques for transient detection to enhance nuclear reactor's operational safety. D. Nuclear Eng, U. Tennessee, Knoxville. 1996
- [12] C.C. Braga, M.S. Dias. Neural networks for unfolding neutron spectra measured by means of bonner spheres. *Nuclear Inst. Meth. Phys. R., A* 476 (2002) 252–255.
- [13] H. Bischof, R. Fruhwirth. Recent developments in pattern recognition applications in high energy physics. *Nuclear Inst. Meth. Phys. R., A* 419 (1998) 259 – 269.
- [14] M. Bonesini, et al.. Application of artificial neural nets to Shashlik calorimetry .*Nuclear Instruments Methods Physics Research A* 389 (1997) 148 –153.
- [15] E. Boos, L. Dudko, D. Smirnov. Optimized NN search of Higgs boson production with the Tevatron. *Nuclear Instrum. Methods Phys. Research, A* 502 (2003) 486–488.
- [16] M. Boroushaki et al. An intelligent nuclear reactor core controller for load following operations, using recurrent NN and fuzzy systems. *Annals Nuclear Energy* 30 (2003) 63 – 80.
- [17] Boroushaki M, Ghofrani MB, Lucas C. Simulation of nuclear reactor core kinetics using multilayer 3-D cellular neural networks. *IEEE Transactions On Nuclear Science* 52 (3): 719-728 Part 2, Jun 2005.
- [18] Borsaru M, Zhou B, Aizawa T, Karashima H, Hashimoto T.. Automated lithology prediction from PGNAA and other geophysical logs. *Applied Radiation And Isotopes* 64 (2): 272-282 Feb 2006.

- [19] S.Brosse, J.L. Giraudel, S. Lek. Utilisation of non-supervised neural networks and principal components analysis to study fish assemblages. *Ecological Modelling* 146 (2001) 159 - 166
- [20] K. Brudzewski, S. Osowski. Ga analysis system composed of a solid-state sensor array and hybrid neural network structure. *Sensors and Actuators B* 55 (1999) 38 – 46
- [21] P. Busson, R. Nobrega, J. Varela. Modular neural networks for online event classification in high energy physics. *Nucl. Inst. Meth. Phys. R., A* 410 (98) 273– 283
- [22] Z. Cao, L.F. Miller, M. Buckner. Implementation of dynamic bias for neutron–photons pulse shape discrimination by using neural network classifiers. *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. A* 416 (1998) 438 – 445.
- [23] T. Carli, B. Koblitz. A multi variate discrimination technique based on range searching. *Nuclear Inst. Meth. Phys. Res., A* 501 (2003) 576 – 588
- [24] MA Chesta, TS Plivelic, R. Mainardi. Characteristic X-rays Induced by electrons and positrons from beta-emitting radio-isotopes *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B* 1998; 145: 459-468. 9
- [25] Y.J. Choi et al. Hybrid accident simulation methodology using artificial neural networks for nuclear power plants. *Information Sciences*, 160, 2003, pp 207-224.
- [26] C. Citterio et al.. Function approximation – A fast convergence neural approach based on spectral analysis. *IEEE T. Neural Net*, 10, 4, 725-740. 99
- [27] C. Citterio et al.. Spectral approximation of functions by using three layered feed forward neural network. *Dep. Electronics Inform., Politecnico Milano*. 1996.
- [28] Ch. Cleva, C. Cachet, D. Cabrol-Blass, Th. P. Forrest. Advantages of a hierarchical system of neural networks for the interpretation of infrared spectra in structure determination. *Analytica Chimica Acta* 348 (1997) 255-265
- [29] R. Correa, I Requena. *Neural Networks Application in Nuclear Science and Engineering. Proc. of ESTYLF'04, Jaén, Spain. 2004. 25-30 (in spanish).*
- [30] R. Correa, M.A. Chesta, M.I. Dinator, I.Vila, I. Requena, J.R. Morales. Análisis de espectros PIXE de muestras orgánicas con redes neuronales artificiales. IX Seminario Latinoamericano por Técnicas de Rayos X (SARX 2004), Córdoba, Argentina.

- [31] R. Correa, M.A. Chesta, M.I. Dinator, I.Vila, I. Requena, J.R. Morales. Análisis de espectros PIXE con redes neuronales artificiales. XIV Simposio de la Sociedad Chilena de Física (SOCHIFI 2004), Antofagasta, Chile
- [32] R. Correa, I. Requena. Neural Networks to detect chemical elements from raw PIXE spectra of organic substance. World Congress – Fuzzy Logic, Soft Computing and Computational Intelligence - IFSA 2005. Tsinghua University. Beijing, China.
- [33] E. Couto. Separation of gamma and muon particles using multilayer neural networks. Internal Report. Stanford Univ., 2001
- [34] Diego Andina de la Fuente. Tutorial de Redes Neuronales Artificiales. Universidad Politécnica de Madrid UPM. – 2005.
- [35] B. Denby. Neural networks and cellular automata in experimental high energy physics. *Computer Physics Communications*, 49 (1988) 429.
- [36] B. Denby. A bat's ear view of neural nets in physics. *Nuclear Instru. Methods Phys. Res. A* 399 (97) 8–11.
- [37] B. Denby. Neural networks in high energy physics: a ten years perspective. *Computer Physics Communications*, 119 (1999) 219 – 231.
- [38] B. Denby. Neural network tutorial for high energy physics. Int. Workshop of Software Engineering, Artif. Intelligence Expert Systems for High Energy and Nuclear Physics, Lyon, France, March – 1990.
- [39] Dinator MI , Morales JR (1990) Characterization of Color Pigments in Pre-Columbian Chilean Potteries by Pixe Elemental Analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry-Articles* 140 (1): 133-139.
- [40] L. Dolmatova et al. Hierarchical NN modeling for infrared spectra interpretation modified starches. *J. Chemometry Inf. C. Science*, 39 (1999) 1027–1036
- [41] D. Dorfan et al. Gamma/hadron separation with neural networks. Internal report SCIPP 00/31. Univ. California, Santa Cruz, 2000.
- [42] B.P. Dubey, S.K. Kataria, A.K. Mohanty. Neural networks fits to neutron induced reactions using weighted least – mean – squares. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 397 (1997) 426 – 439

- [43] B.P. Dubey, V. Jagannathan, S.K. Kataria. Quick and reliable estimation of power distribution in PHWR by ANN. *Annals Nuclear Energy* 25 (1998) 567–579.
- [44] M.Y. El-Bakry, K.A. El-Metwally. Neural network model for proton – proton collision at high energy. *Chaos, Solitons Fractals* 16 (2003) 279 – 285.
- [45] M. Embrechts, S. Benedek. Hybrid identification of unlabeled nuclear power plant transients with artificial neural networks. D. Decision Scie. Engi. Systems, Rensselaer Polytechnic Inst., N. Y., 1998.
- [46] E. Eryurek, B. R. Upadhyaya. Sensor validation for power plant using adaptive backpropagation NN. *IEEE Tra. Nuclear Science*, 37, 2, 1040–1047, 1990
- [47] Evsukoff A, Gentil S. Recurrent neuro-fuzzy system for fault detection and isolation in nuclear reactors. *Advanced Engineering Informatics* 19 (1): 55-66 Jan 2005
- [48] I. Facchin, C. Mello, M. Bueno, R. Poppi. Neural networks for simultaneous determination of sulfur and lead by X-Ray energy dispersive fluorescence X-Ray Spectrom. 1999; 28: 173-177. 7
- [49] E. Fernandes, C. Pereira. Nuclear fuel loading pattern optimisation using a neural network. *Annals of Nuclear Energy* 30 (2003) 603 – 613
- [50] P.H. Fidencio, R.J. Poppi, J.C. de Andrade. Determination of organic matter in soils using radial basis function networks and near infrared spectroscopy. *Analytica Chimica Acta* 453 (2002) 125 – 134
- [51] James A. Freeman, David M. Skapura. *Redes Neuronales – Algoritmos, aplicaciones y técnicas de propagación*. Addison Wesley Iberoamericana – Ed. Diaz de Santos, 1993.
- [52] Goes AGD, Alvarenga MAB, Melo RFE. A neural network-based advanced operator support system for the assessment of systems reliability. *Reliability Engineering & System Safety* 87 (2): 149-161 Feb 2005
- [53] Jose M. Gozalvez, Serkan Yilmaz, Fatih Alim, Kostadin Ivanov, and Samuel H. Levine. Sensitivity study on determining an efficient set of fuel assembly parameters in training data for designing of neural networks in hybrid genetic algorithms. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 33, Issue 5, March 2006, Pages 457-465.

- [54] Hai-feng Sang, Fu-li Wang, Lin-mao Liu and Hai-jun Sang. Detection of element content in coal by pulsed neutron method based on an optimized back-propagation neural network. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. Volume 239, Issue 3, September 2005, Pages 202-208
- [55] M.T. Hagan, M.B. Menhaj. Training feedforward neural networks with Marquardt algorithm. *IEEE Trans. Neural Networks* 6 (1994)
- [56] Jiang YG, Guo P. Mixture of experts for stellar data classification. *Advances In Neural Networks - Issn 2005, Pt 2, Proceedings Lecture Notes In Computer Science* 3497: 310-315 2005
- [57] Kenan Genel. Use of artificial neural network for prediction of ion nitrided case depth in Fe – Cr alloys. *Materials and Design* 24 (2003) 203 – 207
- [58] Edwin A.Hernández-Caraballo, Lué M. Marcó-Parra. Direct analysis of blood serum by total reflection and application of an artificial neural network approach for cancer diagnosis. *Spectrochimics Acta Part B* 58 (2003) 2205 – 2213
- [59] D. Horn. Neural computation methods and applications: Summary talk of the AI session. *Nuclear In. Meth. Phys. Res., A* 389,1997 381 – 387
- [60] P. Inakollu et al. Effectiveness of using artificial neural networks for elemental concentrations from LIBS data. *XV Int. C. Computer Appl. Indus. Eng.*, San Diego. USA. 2002. pp 658-662
- [61] S. Iwasaki, H.Fukuda, M. Kitamura. High-speed Analysis Technique for Gamma-ray and X-ray Spectra Using an Associative Neural Network. *Internat. J. PIXE* 1993; 3: 267-273. 11
- [62] S. Iwasaki, H. Fukuda, M. Kitamura. Training Strategy of Linear Associative Network as a Basic Tool for Gamma Ray Spectroscopy. *Proc. Intelli. Engin. System Through Artificial Neural Networks*. St. Louis Usa. 1993; 3: pp. 199-205.
- [63] S. A. E. Johansson, J. L. Campbell. *PIXE: A Novel Technique for Elemental Analysis*. John Wiley & Sons, 1988.
- [64] L.J. Kangas et al. Alpha Spectral Analysis via Artificial Neural Networks. *IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conf. Norfolk. USA.* 1, pp 346-350. 1994.

- [65] P.E. Keller, R.T. Kouzes. Gamma Spectral Analysis via Neural Networks. IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conf. Norfolk. USA, 1: 341-345. 1994.
- [66] P.E. Keller et al. Nuclear Spectral Analysis via Artificial Neural Networks for Waste Handling. IEEE Tran. Nuclear Science 42, 4, 1995. 709-715
- [67] S. Kelly et al. Parametric Models and Spectral Analysis for Classification in Brain Computer Interfaces. Proc. 14<sup>a</sup> Int. C. Design Signal Proc., Santorini, Greece, July 2002. 1,pp 307-310
- [68] Kemp R, Cottrell GA, Bhadeshia HKDH, Odette GR, Yamamoto T, Kishimoto H. Neural-network analysis of irradiation hardening in low-activation steels. Journal Of Nuclear Materials 348 (3): 311-328 Feb 1 2006
- [69] S. Keyban, X. Song, M. Kelly. Nuclear fuel pellet inspection using artificial neural networks. Jour. Nuclear Materials 264 (1999) 141– 154
- [70] Kim D. Classification Of Ultrasonic NDE Signals Using The EM And LMS Algorithms. Materials Letters 59 (27): 3352-3356 Nov 2005.
- [71] Koltay E, Rajta I, Morales JR , Borbely-Kiss I, Kiss AZ (1999) Characterization of individual aerosol particles from the eruption of Lonquimay volcano in Chile. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 150 (1-4): 375-383.
- [72] C.C. Ku, K.Y. Lee, R.M. Edwards. Neural network for adapting nuclear power plant control for wide rang operation. Transaction American Nuclear Soc., 63, 114–115, 1991
- [73] C.C. Ku et al.. Improved nuclear reactor temperature control using diagonal recurrent neural networks. IEEE Trans. on Nuclear Science, Vol. 30, N°6, pp 2298-2309, 1992.
- [74] C.C. Ku, K.Y. Lee. Diagonal recurrent neural network for dynamic systems control. IEEE, Trans. on Neural Networks, 6, pp 144-156. 1995.
- [75] Kwon YK, Moon BR, Hong SD. Critical heat flux function approximation using genetic algorithms. IEEE Transactions On Nuclear Science 52 (2): 535-545 Apr 2005.
- [76] R. Lanouette, J. Thibault, J.L. Valade. Process modeling with neural networks using small experimental datasets. Computers and Chemical Engineering 23 (1999) 1167 – 1176.

- [77] Lee MR, Lee JH, Kim JT . Condition monitoring of a nuclear power plant check valve based on acoustic emission and a neural network. *Journal Of Pressure Vessel Technology-Transactions Of The Asme* 127 (3): 230-236 Aug 2005.
- [78] S.Y. Lee, J.L.Kim, K.J. Lee. Feasibility of using neural networks to unfold the response of multi-element TLD – for mixed field dosimetry. Internal report. Korea Atomic Energy Research Institute, Taejon – Korea. 2000
- [79] S.Y. Lee, B.H. Kim, K.Y. Lee. An application of artificial neural intelligence for personal dose assessment using a multi-area OSL dosimetry system. *Radiation Measuremen.*, 33,2001, 293–304.
- [80] J. Loskiewics, J. Swakon, K. Kulczykowska. Estimation of thermal neutron absorption cross-section from K, U, Th concentrations for Miocene rocks from Piedmont in Poland using artificial neural networks. *Applied Radiation and Isotopes* 52 (2000) 1459 – 1465
- [81] RT Mainardi, MA Chesta, M. Caffaro. Elemental analysis by high-energy electron excitation. *X-Ray Spectrom.* 2004; 33: 112-116. 10
- [82] B. Majorovits, H.V. Klapdor-Kleingrothaus. Digital Pulse shape analysis by neural networks for the Heidelberg-Moscow double beta decay experiment. *Europ. Phys. J. A* 6 (1999) 4, 463-469
- [83] M. Marseguerra et al. Artificial neural networks applied to multiple signals in nuclear technology. *Progress Nuclear Energy*, 27, 4, pp 297–304, 1992.
- [84] Damián Jorge Mattich. *Redes Neuronales Artificiales. – Conceptos Básicos y Aplicaciones.* Universidad Tecnológica Nacional, Rosario, Argentina – 2001.
- [85] M. Milek, P. Patel. Neural network tagging in toy model. *Nuclear Instrum. Methods Physic Research.*, A 425 (1999) 577–588
- [86] A.C.A. Mol, A.S. Martínez, R. Schirru. A neural model for transient identification in dynamic processes with don't known response. *Annals of Nuclear Energy* 30 (2003) 1365 – 1381
- [87] Morales JR, Dinator MI, Llona F, Romokroeger C (1993) Major Components of Aerosols Emitted by the Lonquimay Volcano , Chile. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry-Articles* 172 (1): 181-192.

- [88] Morales JR, Dinator MI, Llona F, Saavedra J, Falabella F (1994) Sample Preparation of Archaeological Materials for Pixe Analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry-Letters* 187 (1): 79-89.
- [89] J.R. Morales, M. I. Dinator. Characterization of color pigments in pre-columbian chilean potteries by PIXE elemental analysis. *J. Radioanalytical Nuclear Chemistry*, V. 140 N° 1 (1990) 133 – 139 .
- [90] J.R. Morales et al. Sample preparation of archaeological materials for PIXE análisis. *J. Radio-analytical Nuclear Chemistry*, V. 187 N° 1 (1994) 79 – 89
- [91] Morales JR, Chesta MA, Cancino SA, Miranda PA, Dinator MI , Avila MJ (2005) Application of PIXE in the determination of the production cross section of a radionuclide decaying by electron capture. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research. Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 227 (3): 385-390.
- [92] U. Muller. Artificial intelligence – applications in high energy and nuclear physics. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 502 (2003) 811 – 814 2
- [93] K. Nabeshima et al. Nuclear reactor monitoring with the combination of neural network and expert system. *Math. Comp. Simul.* 60 (2002) 233-244
- [94] Nils J. Nilson. *Inteligencia Artificial*. Editorial Mc Graw Hill, España – 2000.
- [95] Nour MH, Smith DW, El-Din MG, Prepas EE. The application of artificial neural networks to flow and phosphorus dynamics in small streams on the Boreal Plain, with emphasis on the role of wetlands. *Ecological Modelling* 191 (1): 19-32 Sp. Iss. Si, Jan 27 2006.
- [96] WV Nunes al. Explosives detection using prompt- gamma neutron activation and neural networks. *Applied Radiation and Isotopes* 56 (2002) 937– 943
- [97] R. Odorico. Learning vector quantization with training count .*Neural Netwo.* 10, 6, 1083-1088, 97.
- [98] Qin Z, Chen JY, Liu Y, Lu J. Evolving RBF neural networks for pattern classification. *Computational Intelligence And Security, Pt 1, Proceedings Lecture Notes In Artificial Intelligence* 3801: 957-964 2005

- [99] J.J. Ortiz, I. Requena. Using neural networks to predict core parameters in BWR. Nuclear Science and Engineering. 143 (2003) 1 – 14. 1
- [100] J.J. Ortiz, I. Requena. Order Coding Genetic Algorithms to Optimize Fuel Reload in a Nuclear Boiling Water Reactor. Nuclear Science Engineering, 146, 1, 2004. pp 88-98
- [101] J.J. Ortiz, I Requena. Using a Multi-State Recurrent NN to Optimize Loading Patterns in BWRs. Annals Nuclear Energy, 31, 7. 2004. pp 789-803
- [102] J.J. Ortiz, J.L. Montes, I. Requena, R. Perusquía. Searching for full power control rod patterns in a boiling water reactor using genetic algorithms. Annals Nuclear Energy, 31, 16. 2004. 1939-1954
- [103] M. Panda. The Spectral Support System: A Software Product with Embedded Artificial Neural Networks in the Analysis of LIBS Spectral Data. Master Project Report, Mississippi State University, Aug 1998
- [104] C. Pereira, C. Lapa. Coarse-grained parallel genetic algorithm applied to nuclear reactor core design optimization problem. Annals Nuclear Ener. 30 (2003) 555–565.
- [105] L.L. Perlovsky, et.al. Einsteinian NN for Spectrum Estimation. Neural Netwo., 10, 9, 1541–1546, 1997
- [106] A.L. Perrone et al. Offline analysis of HEP events by dynamic perceptron neural network. Nuclear Inst. Methods Physics Res., A 389, 1997, 210–213
- [107] T. Philip et al. Application of Artificial Neural Networks in the Analysis of LIBS Spectral Data. XI Inter. C. Computer Applic. Industry Engineering, 1998. pp 789-793
- [108] V. Pilato et al. Application of Neural Networks to Quantitative Spectrometry Análisis. Nuclear Instr. Meth. Physics Res., A 422,1-3, 423-427, 1999
- [109] H.F.R. Pinho, A. Vieira, N.R. Nené and N.P. Barradas. Artificial neural network analysis of multiple IBA spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. Volume 228, Issues 1-4 , January 2005, Pages 383-387
- [110] S. Pozzi, F.J. Segovia. Application of Stochastic and Artificial Intelligence Mtehdos for Nuclear Material Identification. Tutorial. D. Nuclear Engineering, Polyt. Milan, 1999

- [111] Pulkkinen J, Hakkinen AM, Lundbom N, Paetau A, Kauppinen RA, Hiltunen Y. Independent component analysis to proton spectroscopic imaging data of human brain tumours. *European Journal Of Radiology* 56 (2): 160-164 Nov 2005.
- [112] Ignacio Requena . Neurocomputación – Redes Neuronales Artificiales. Dpto. Computación e Inteligencia Artificial – UGR, España.
- [113] Byron P. Roe, Hai-Jun Yang , Ji Zhu, Yong Liu, Ion Stancu and Gordon McGregor. Boosted decision trees as an alternative to artificial neural networks for particle identification. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. Volume 543, Issues 2-3 , 11 May 2005, Pages 577-584
- [114] D. Roverso. Soft computing tools for transient classification. *Inform. Science* 127 (2000) 137–156
- [115] M. Sadighi, S. Setayashi, A.A. Salehi. PWR fuel management optimization using neural networks. *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002) 41 – 51
- [116] Salam PA, Bhattacharya SC. A comparative hydrodynamic study of two types of spouted bed reactor designs. *Chemical Engineering Science* 61 (6): 1946-1957 Mar 2006.
- [117] Sang HF, Wang FL, Liu LM, Sang HJ. Detection of element content in coal by pulsed neutron method based on an optimized back-propagation neural network. *Nuclear Instruments & Methods In Physics Research Section B*. 239 (3): 202-208 Sep 2005
- [118] Santos VO, Oliveira FCC, Lima DG, Petry AC, Garcia E, Suarez PAZ, Rubim JC. A comparative study of diesel analysis by FTIR, FTNIR and FT-Raman spectroscopy using PLS and artificial neural network analysis. *Analytica Chimica Acta* 547 (2): 188-196 Aug 22 2005.
- [119] H.T. Siegelmann, E. Nissan, A. Galperin. A novel neural/symbolic hybrid approach to heuristically optimized fuel allocation automated revision of heuristic nuclear engineering. *Adv. Engin Softw.* 28 (97) 581–592
- [120] Sunde C, Avdic S, Pazsit I. Classification of two-phase flow regimes via image analysis and a neuro-wavelet approach. *Progress In Nuclear Energy* 46 (3-4): 348-358 2005.
- [121] R. Tagliaferri et al. Spectral Análisis of Stellar Light Curves by Means of Neural Networks. *Astronomy Astrophysics Supp. Series* 137 (2) 391–405. 1999

- [122] T. Tambouratzis, M. Antonopoulos. Instability localization with artificial neural networks. *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002) 235 – 253
- [123] V. Tchistiakov et al. Neural network modelling for very small spectral data sets : reduction of the spectra and hierarchical approach. *Chemometry Intell. Laborat. Systems*, 54 (2000) 93– 10.
- [124] Tsuji M, Michishita H, Shimazu Y. Stability monitoring for BWR based on singular value decomposition method using artificial neural network. *Journal Of Nuclear Science And Technology* 42 (12): 1054-1066 Dec 2005.
- [125] R.E. Uhrig. Potential application of neural networks to the operation of nuclear power plants. *Nuclear Safety*, Vol. 32, N° 1, 68 – 79, 1991
- [126] B. Vekemans, et al. Analysis of X-ray spectra by iterative least squares (AXIL): new developments *X-Ray Spectrom.* 1994; 23: 278-285. 15
- [127] T. Vasiljevic, A. Onjia, D. Cokes, M. Lausevic. Optimization of artificial neural network for retention modeling in high performance liquid chromatography. *Talanta* 64 (2004) 785 - 790
- [128] A.Vaiciulis. Support vector machines in analysis of top quark production. *Nuclear Instru. d Methods Phys. Research A* 502 (2003) 492 – 494
- [129] Héctor René Vega-Carrillo, et.al.. Neutron spectrometry using artificial neural networks *Radiation Measurements* Volume 41, Issue 4 , April 2006, Pages 425-431
- [130] J.J. Vega, and R. Reynoso. Application of neural networks to pulse-shape analysis of Bragg curves. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. Volume* 243, Issue 1 , January 2006, Pages 232-240.
- [131] E.F. Vieira, J.D. Ponz. Automated Spectral Classification Using Neural Networks. *Astronom. Data Analysis Softw. Systems VII, ASP Conf Series*, 145, 1998, pp 712-717
- [132] V. Vigneron et al. Statistical Modelling of NN in Gamma-Spectrometry. *Nuclear Instr. Meth. in Physics Research – A* 369 (2 - 3) 642 – 647. 1996

- [133] J. Wang, P.Guo, X.Li, J Zhu, T.Reinert, J.Heitmann, D. Spermann, J.Vogt, R.H.Flagmeyer, T.Butz. Identification of air pollution sources by single aerosol particle fingerprints – micro – PIXE spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 161 – 163 (2000) 830-835.
- [134] M. Weerasinghe, J.B. Gomm, D. Williams. Neural networks for fault diagnosis of a nuclear fuel processing plant at different operating points. Control Engineering Practice 6 (1998) 281 – 289 .
- [135] D.O. Whiteson, N.A. Neumann. Support vector regression as a signal discriminator in high energy physics. Neurocomputing, 55, 2003, pp. 251-264
- [136] P.C. Womble et al. Detection of explosives PELAN system. American Inst. Physics 0-7354-0015(2001)
- [137] J. Walter, H. Ritter. Rapid Learning with parametrized self-organizing maps. Neurocomputing 12 (1996) 131 - 153
- [138] Marcin Wolter. Measurement of physical quantities in the Bayesian framework using neural networks. Institute of Nuclear Physics, Krakow, Poland.
- [139] E. Yoshida et al. Application of NN for the analysis of gamma-ray spectra measured with Ge spectrometer. Nuclear Inst. Meth. Physics Res.A 484 (2002) 557-563.
- [140] Yu ML, Zhang KS, Liu LS. Application of artificial neural network to the identification of quark and gluon jets . International Journal Of Modern Physics A 20 (32): 7603-7611 DEC 30 2005
- [141] H. Zhu, S. Vaithyanatham, M.V. Joshi. Topic learning from few examples. IBM Almaden Research Center, San José, CA, USA (2003)
- [142] J. Zimmermann, C. Kiesling, P. Holl. Class separation and parameter estimation with NN for the XEUS wide field imager. Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A 2003; 502: 507-510.



## **APÉNDICES**



## **A. 1) RESULTADOS DE SERIES EJECUTADAS POR LOS SNs EN ANALISIS DE SUSTANCIAS ORGANICAS**

En las páginas siguientes, se muestran todos los resultados obtenidos en las ejecuciones de las 5 series de los SNs, utilizados para el análisis de sustancias orgánicas de peces.

Para cada elemento en estudio, y cada serie ejecutada, se muestra una tabla con las salidas de las 5 RNs integrantes del SN, y la salida del propio SN (en nuestro caso, la media de las salidas de las 5 RNs). Se incluyen las salidas esperadas (datos experimentales obtenidos con el proceso PIXE clásico) y se comparan las salidas esperadas y las calculadas por el SN. Cada fila de la tabla recoge la salida correspondiente para un ejemplo, separando los ejemplos usados para el entrenamiento y los correspondientes al conjunto de test.

Además, para cada elemento y serie ejecutada, se incluye un gráfico comparativo entre salidas esperadas y calculadas, para los ejemplos de test.

Tabla 44. Resultados obtenidos en la Serie I para el P

Fósforo - P		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,4416	0,4411	0,4412	0,4413	0,4412	0,4412	0,4412	0,00035	
3	0,1403	0,1343	0,1375	0,1355	0,1366	0,1380	0,1364	0,00388	
4	0,0286	0,0538	0,0541	0,0428	0,0540	0,0542	0,0518	0,02319	
5	0,0364	0,0523	0,0532	0,0635	0,0529	0,0533	0,0550	0,01869	
6	0,0961	0,0529	0,0535	0,0646	0,0533	0,0536	0,0556	0,04051	
7	0,0571	0,0588	0,0575	0,0436	0,0578	0,0573	0,0550	0,00215	
9	0,0883	0,0919	0,0909	0,0928	0,0913	0,0907	0,0915	0,00318	
10	0,0935	0,0939	0,0925	0,0933	0,0929	0,0925	0,0930	0,00048	
11	0,1844	0,1858	0,1846	0,1882	0,1850	0,1845	0,1856	0,00122	
13	0,8831	0,8827	0,8827	0,8783	0,8827	0,8827	0,8818	0,00130	
15	0,8312	0,8312	0,8313	0,8317	0,8313	0,8313	0,8314	0,00018	
16	0,2052	0,2048	0,2048	0,2045	0,2048	0,2048	0,2047	0,00045	
17	0,8571	0,8574	0,8574	0,8558	0,8575	0,8574	0,8571	0,00005	
18	0,6753	0,6751	0,6751	0,6757	0,6751	0,6751	0,6752	0,00009	
19	0,9091	0,9090	0,9091	0,9261	0,9090	0,9091	0,9125	0,00336	
20	0,3377	0,3376	0,3376	0,3406	0,3376	0,3376	0,3382	0,00051	
21	0,2597	0,2599	0,2599	0,2567	0,2600	0,2599	0,2593	0,00045	
22	0,2364	0,2375	0,2373	0,2366	0,2373	0,2372	0,2372	0,00082	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
2	0,4675	0,4439	0,4429	0,4461	0,4431	0,4428	0,4437	0,02379	
8	0,0416	0,0521	0,0531	0,0634	0,0528	0,0532	0,0549	0,01335	
12	0,1013	0,2072	0,2227	0,0001	0,2174	0,2259	0,1746	0,07335	
14	0,0805	0,1302	0,0974	0,1745	0,1051	0,0941	0,1203	0,03974	

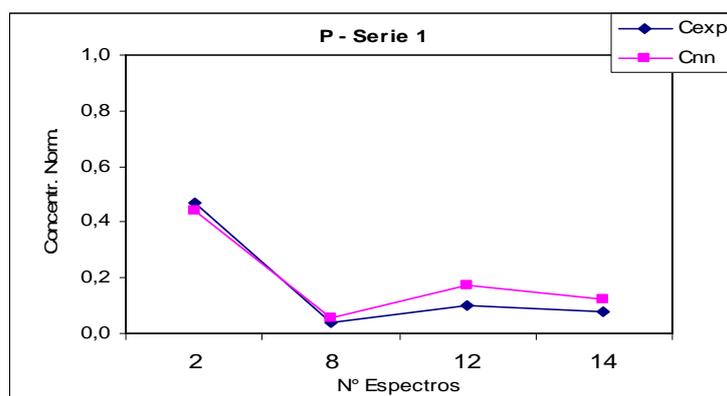


Figura 90. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el P en el conjunto de Test

Tabla 45. Resultados obtenidos en la Serie II para el P

Fósforo - P Conjunto Entrenamiento	Serie II		Salida					Cnn-Media	ICexp-Cnnl
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
	2	0,4675	0,4675	0,4675	0,4678	0,4665	0,4679	0,4674	0,00009
	3	0,1403	0,1380	0,1375	0,1225	0,1399	0,1322	0,1340	0,00625
	4	0,0286	0,0243	0,0289	0,0314	0,0294	0,0544	0,0337	0,00512
	5	0,0364	0,0399	0,0390	0,0241	0,0404	0,0392	0,0365	0,00017
	6	0,0961	0,0958	0,0956	0,0958	0,1002	0,0961	0,0967	0,00060
	8	0,0416	0,0386	0,0432	0,0385	0,0146	0,0411	0,0352	0,00637
	9	0,0883	0,0919	0,0938	0,1098	0,0876	0,0772	0,0921	0,00376
	10	0,0935	0,0917	0,0940	0,0967	0,0943	0,0711	0,0896	0,00393
	12	0,1013	0,1026	0,1033	0,0987	0,1023	0,1242	0,1062	0,00493
	13	0,8831	0,8818	0,8776	0,8829	0,8791	0,8816	0,8806	0,00250
	14	0,0805	0,0805	0,0721	0,0801	0,0043	0,0766	0,0627	0,01782
	15	0,8312	0,8323	0,8326	0,8321	0,9347	0,8320	0,8527	0,02157
	16	0,2052	0,2882	0,2041	0,2051	0,2062	0,2049	0,2217	0,01650
	18	0,6753	0,6758	0,6766	0,6748	0,6729	0,6748	0,6750	0,00034
	19	0,9091	0,9064	0,9091	0,9090	0,9051	0,9091	0,9077	0,00135
	20	0,3377	0,2993	0,3377	0,3377	0,3406	0,3380	0,3306	0,00701
	21	0,2597	0,2980	0,2599	0,2601	0,2595	0,2604	0,2676	0,00782
	22	0,2364	0,2365	0,2362	0,2359	0,2362	0,2372	0,2364	0,00007

Conjunto Test	Muestras	Cexp	Salida					Cnn-Media	ICexp-Cnnl
			RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
	1	0,4416	0,5653	0,2516	0,2001	0,4863	0,3442	0,3695	0,07205
	7	0,0571	0,0370	0,0403	0,0145	0,0162	0,0694	0,0355	0,02166
	11	0,1844	0,3176	0,0083	0,0805	0,0624	0,4579	0,1854	0,00095
	17	0,8571	0,8581	0,7461	0,6692	0,7704	0,7532	0,7594	0,09774

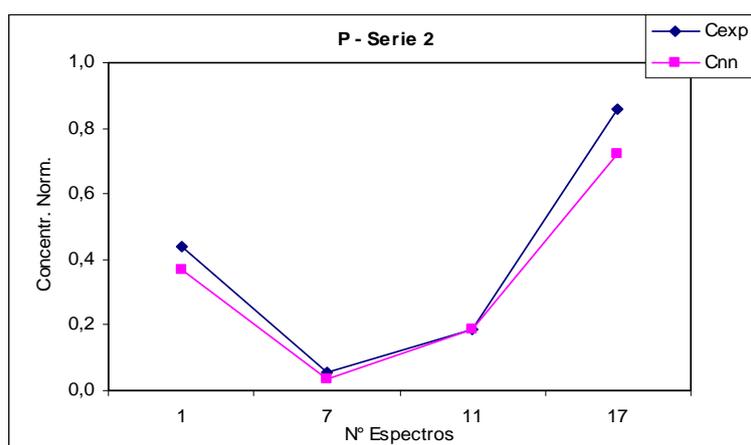


Figura 91. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el P en el conjunto de Test

Tabla 46. Resultados obtenidos en la Serie III para el P

Fósforo - P Conjunto Entrenamiento	Serie III		Salida					Cnn-Media	ICexp-Cnnl
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
	1	0,4416	0,4415	0,4413	0,4413	0,4412	0,4439	0,4419	0,00030
	2	0,4675	0,4675	0,4678	0,4676	0,4676	0,4639	0,4669	0,00064
	4	0,0286	0,0303	0,0286	0,0479	0,0344	0,0296	0,0342	0,00558
	5	0,0364	0,0389	0,0171	0,0556	0,0466	0,0449	0,0406	0,00425
	6	0,0961	0,0830	0,0960	0,0561	0,0963	0,0919	0,0846	0,01145
	7	0,0571	0,0518	0,0680	0,0434	0,0442	0,0523	0,0519	0,00521
	8	0,0416	0,0455	0,0442	0,0561	0,0357	0,0424	0,0448	0,00322
	11	0,1844	0,1839	0,1803	0,1845	0,1844	0,1846	0,1835	0,00088
	12	0,1013	0,1020	0,1027	0,1012	0,1030	0,1019	0,1022	0,00085
	14	0,0805	0,0919	0,0726	0,0803	0,0806	0,0803	0,0811	0,00061
	15	0,8312	0,8322	0,8295	0,8322	0,8321	0,8323	0,8317	0,00048
	16	0,2052	0,2048	0,2099	0,2048	0,2049	0,2048	0,2058	0,00064
	17	0,8571	0,8571	0,8586	0,8574	0,8572	0,8581	0,8577	0,00054
	18	0,6753	0,6752	0,6738	0,6751	0,6749	0,6746	0,6747	0,00060
	19	0,9091	0,9083	0,9192	0,9089	0,9085	0,9044	0,9099	0,00077
	20	0,3377	0,3370	0,3394	0,3375	0,3379	0,3373	0,3378	0,00017
	21	0,2597	0,2604	0,2590	0,2600	0,2596	0,2598	0,2598	0,00002
	22	0,2364	0,2365	0,2357	0,2364	0,2359	0,2376	0,2364	0,00007

Conjunto Test			Salida					Cnn-Media	ICexp-Cnnl
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
	3	0,1403	0,1402	0,1442	0,0393	0,2476	0,1255	0,1394	0,00090
	9	0,0883	0,0991	0,0760	0,0465	0,2323	0,0948	0,1097	0,02142
	10	0,0935	0,0908	0,0849	0,0536	0,0906	0,0889	0,0818	0,01174
	13	0,8831	0,2988	0,1934	0,3789	0,8421	0,3354	0,4097	0,47340

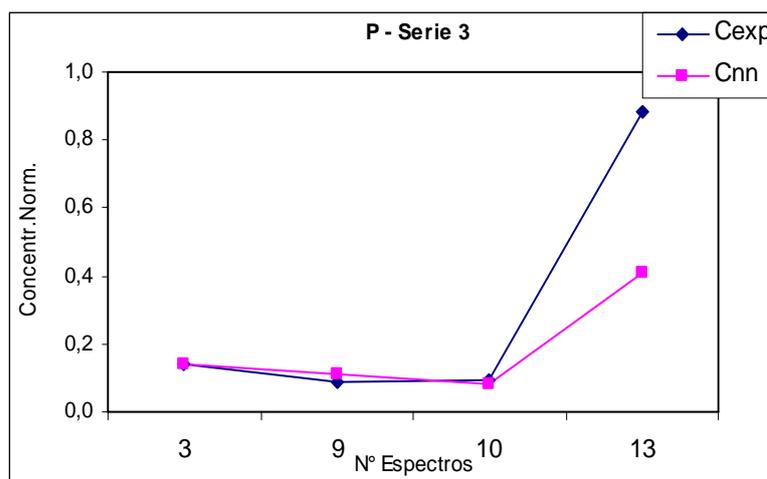


Figura 92. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el P en el conjunto de Test

Tabla 47. Resultados obtenidos en la Serie IV para el P

Fósforo - P Conjunto Entrenamiento	SerieIV					Cnn-Media	ICexp-CnnI		
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3			RN4	RN5
	1	0,4416	0,4488	0,4461	0,4488	0,4436	0,4436	0,4462	0,00462
	2	0,4675	0,4619	0,4629	0,4600	0,4669	0,4669	0,4637	0,00383
	3	0,1403	0,1401	0,1358	0,1402	0,1225	0,1225	0,1322	0,00804
	5	0,0364	0,0314	0,0406	0,0385	0,0531	0,0531	0,0434	0,00699
	7	0,0571	0,0574	0,0507	0,0473	0,0571	0,0571	0,0539	0,00326
	8	0,0416	0,0461	0,0400	0,0383	0,0277	0,0277	0,0360	0,00559
	9	0,0883	0,0886	0,0935	0,0923	0,1074	0,1074	0,0978	0,00953
	10	0,0935	0,0954	0,0935	0,1052	0,0897	0,0897	0,0947	0,00116
	11	0,1844	0,1844	0,1856	0,1683	0,1797	0,1797	0,1795	0,00488
	12	0,1013	0,0987	0,1010	0,1744	0,1038	0,1038	0,1163	0,01503
	13	0,8831	0,8820	0,8832	0,8788	0,8784	0,8784	0,8802	0,00294
	14	0,0805	0,0801	0,0805	0,0803	0,0801	0,0801	0,0802	0,00029
	15	0,8312	0,8321	0,8321	0,8321	0,8324	0,8324	0,8322	0,00104
	16	0,2052	0,2057	0,2045	0,2053	0,2047	0,2047	0,2050	0,00020
	17	0,8571	0,8574	0,8576	0,8575	0,8589	0,8589	0,8580	0,00090
	19	0,9091	0,9088	0,9094	0,9187	0,9242	0,9242	0,9171	0,00798
	21	0,2597	0,2602	0,2599	0,2599	0,2600	0,2600	0,2600	0,00028
	22	0,2364	0,2338	0,2365	0,1709	0,2362	0,2362	0,2227	0,01366

Conjunto Test	Salida					Cnn-Media	ICexp-CnnI		
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3			RN4	RN5
	4	0,0286	0,0334	0,0421	0,0415	0,0081	0,0081	0,0267	0,00192
	6	0,0961	0,1101	0,0491	0,0391	0,0741	0,0741	0,0693	0,02683
	18	0,6753	0,9178	0,5689	0,8920	0,8959	0,8959	0,8341	0,15877
	20	0,3377	0,4388	0,3530	0,1657	0,4068	0,4068	0,3542	0,01655

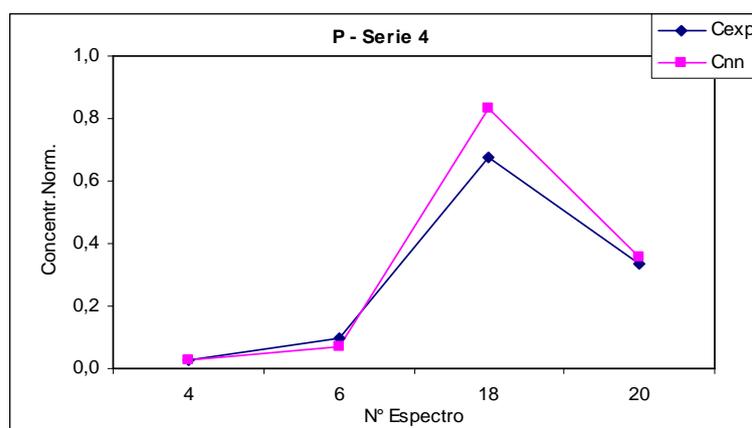


Figura 93. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el P en el conjunto de Test

Tabla 48. Resultados obtenidos en la Serie V para el P

Fósforo - P Conjunto Entrenamiento	SerieV					Salida			
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl
	1	0,4416	0,4415	0,4415	0,4415	0,4413	0,4413	0,4414	0,00014
	3	0,1403	0,1394	0,1398	0,0819	0,1395	0,1395	0,1280	0,01224
	4	0,0286	0,0288	0,0293	0,0819	0,0300	0,0300	0,0400	0,01143
	6	0,0961	0,0903	0,0875	0,0453	0,2775	0,2775	0,1556	0,05951
	7	0,0571	0,0572	0,0545	0,0828	0,0563	0,0563	0,0614	0,00428
	8	0,0416	0,0419	0,0487	0,0320	0,0416	0,0416	0,0411	0,00042
	9	0,0883	0,0970	0,0903	0,0819	0,0885	0,0885	0,0893	0,00095
	10	0,0935	0,0889	0,0850	0,0958	0,0931	0,0931	0,0912	0,00233
	11	0,1844	0,1842	0,1845	0,1827	0,1846	0,1846	0,1841	0,00029
	12	0,1013	0,1037	0,1047	0,1032	0,1010	0,1010	0,1027	0,00140
	13	0,8831	0,8831	0,8819	0,8571	0,8824	0,8824	0,8774	0,00574
	14	0,0805	0,0804	0,0804	0,0827	0,0804	0,0804	0,0809	0,00037
	15	0,8312	0,8322	0,8321	0,8602	0,8322	0,8322	0,8378	0,00661
	16	0,2052	0,2048	0,2050	0,2042	0,2048	0,2048	0,2047	0,00049
	17	0,8571	0,8571	0,8580	0,8573	0,8574	0,8574	0,8574	0,00028
	18	0,6753	0,6751	0,6751	0,6752	0,6752	0,6752	0,6752	0,00015
	20	0,3377	0,3375	0,3377	0,3380	0,3375	0,3375	0,3376	0,00003
	22	0,2364	0,2361	0,2366	0,2360	0,2368	0,2368	0,2364	0,00007

Conjunto Test	Salida								
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl
	2	0,4675	0,5043	0,4889	0,7678	0,3279	0,3279	0,4834	0,01582
	5	0,0364	0,0896	0,0948	0,0819	0,0961	0,0961	0,0917	0,05532
	19	0,9091	0,8199	0,8810	0,7348	0,0220	0,0220	0,4960	0,41314
	21	0,2597	0,0626	0,3265	0,1334	0,2542	0,2542	0,2062	0,05357

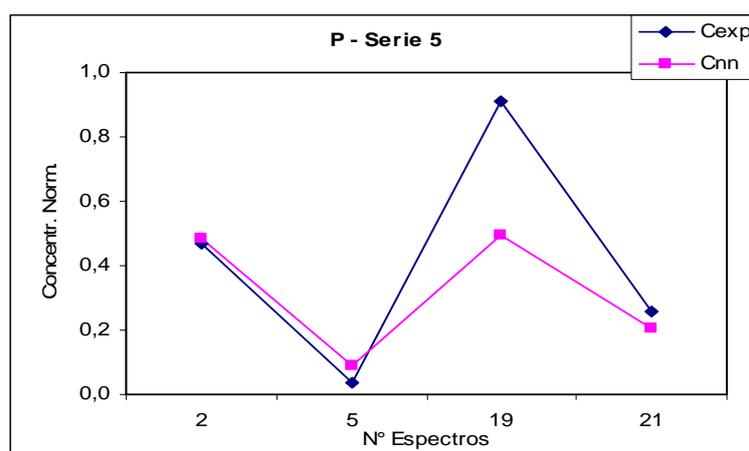


Figura 94. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el P en el conjunto de Test

Tabla 49. Resultados obtenidos en la Serie I para el S

Azufre - S		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,0478	0,0897	0,0909	0,1238	0,0627	0,1048	0,0944	0,04652	
3	0,0091	0,0631	0,0764	0,0502	0,0136	0,0096	0,0426	0,03349	
4	0,0040	0,0947	0,0942	0,0058	0,0122	0,0009	0,0416	0,03754	
5	0,0249	0,0990	0,0965	0,1238	0,0572	0,1048	0,0962	0,07137	
6	0,0909	0,0991	0,0971	0,1238	0,0570	0,1048	0,0964	0,00545	
7	0,0191	0,0690	0,0922	0,0124	0,0136	0,0010	0,0377	0,01853	
9	0,0813	0,0621	0,0744	0,1238	0,0786	0,1048	0,0887	0,00739	
10	0,0718	0,0974	0,0880	0,1238	0,0609	0,1048	0,0950	0,02320	
11	0,0718	0,0057	0,0590	0,0231	0,0715	0,0717	0,0462	0,02558	
13	0,0455	0,0492	0,0279	0,0000	0,0042	0,1048	0,0372	0,00822	
15	0,1053	0,1057	0,1061	0,1049	0,1061	0,1095	0,1065	0,00120	
16	0,0344	0,0379	0,0439	0,0390	0,0375	0,1052	0,0527	0,01825	
17	0,9091	0,9048	0,9093	0,9100	0,9072	0,9091	0,9081	0,00100	
18	0,7177	0,7175	0,7180	0,7180	0,7188	0,7178	0,7180	0,00033	
19	0,0670	0,1038	0,0664	0,0661	0,0665	0,1051	0,0816	0,01456	
20	0,4450	0,4454	0,4447	0,4443	0,4442	0,4448	0,4447	0,00031	
21	0,1531	0,1486	0,1531	0,1536	0,1541	0,1048	0,1428	0,01030	
22	0,4354	0,0932	0,0928	0,1222	0,4353	0,1048	0,1697	0,26574	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
2	0,0813	0,0902	0,0901	0,1238	0,0575	0,1048	0,0933	0,01194	
8	0,0622	0,0991	0,0968	0,1238	0,0571	0,1048	0,0963	0,03411	
12	0,1244	0,0856	0,0568	0,1238	0,0650	0,1048	0,0872	0,03722	
14	0,1388	0,0068	0,0771	0,0634	0,0685	0,1048	0,0641	0,07463	

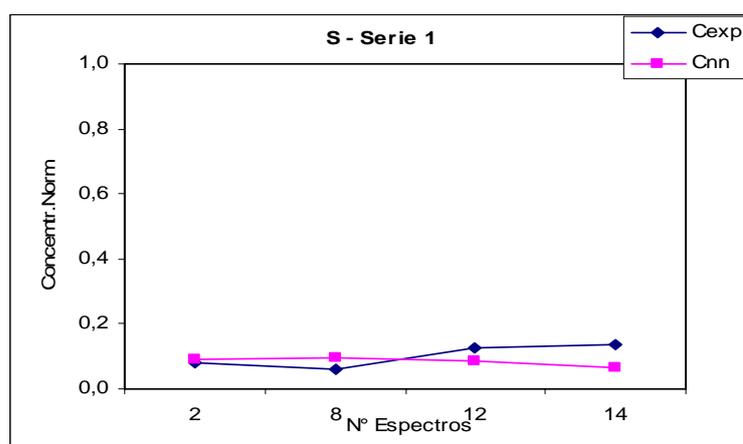


Figura 95. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el S en el conjunto de Test

Tabla 50. Resultados obtenidos en la Serie II para el S

Azufre - S		Serie II							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
2	0,0813	0,0766	0,0765	0,0884	0,0766	0,0657	0,0768	0,00458	
3	0,0091	0,0081	0,0092	0,0115	0,0088	0,0079	0,0091	0,00004	
4	0,0040	0,0085	0,0102	0,0118	0,0092	0,0102	0,0100	0,00598	
5	0,0249	0,0766	0,0765	0,0263	0,0766	0,0657	0,0643	0,03944	
6	0,0909	0,0766	0,0765	0,0883	0,0766	0,0656	0,0767	0,01419	
8	0,0622	0,0766	0,0765	0,0639	0,0766	0,0656	0,0718	0,00963	
9	0,0813	0,0766	0,0765	0,0821	0,0766	0,0809	0,0785	0,00284	
10	0,0718	0,0766	0,0766	0,0689	0,0766	0,0682	0,0734	0,00160	
12	0,1244	0,0766	0,0765	0,1222	0,0766	0,1244	0,0952	0,02916	
13	0,0455	0,0252	0,0216	0,0444	0,0231	0,0455	0,0320	0,01349	
14	0,1388	0,1387	0,1387	0,1397	0,1388	0,1385	0,1389	0,00011	
15	0,1053	0,1059	0,1058	0,1014	0,1060	0,1052	0,1049	0,00040	
16	0,0344	0,0447	0,0447	0,0326	0,0451	0,0351	0,0404	0,00600	
18	0,7177	0,7168	0,7167	0,7172	0,7167	0,7177	0,7170	0,00068	
19	0,0670	0,0683	0,0681	0,0666	0,0684	0,0672	0,0677	0,00073	
20	0,4450	0,4456	0,4456	0,4461	0,4456	0,4450	0,4456	0,00059	
21	0,1531	0,1528	0,1524	0,1532	0,1526	0,1531	0,1528	0,00031	
22	0,4354	0,4354	0,4353	0,4350	0,4354	0,4355	0,4353	0,00009	

Conjunto de Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,0478	0,0766	0,0766	0,1316	0,0766	0,0980	0,0919	0,04404	
7	0,0191	0,0081	0,0092	0,0117	0,0088	0,0078	0,0091	0,01005	
11	0,0718	0,0090	0,0099	0,0111	0,0097	0,0307	0,0141	0,05770	
17	0,9091	0,3726	0,3594	0,1657	0,3619	0,1233	0,2766	0,63251	

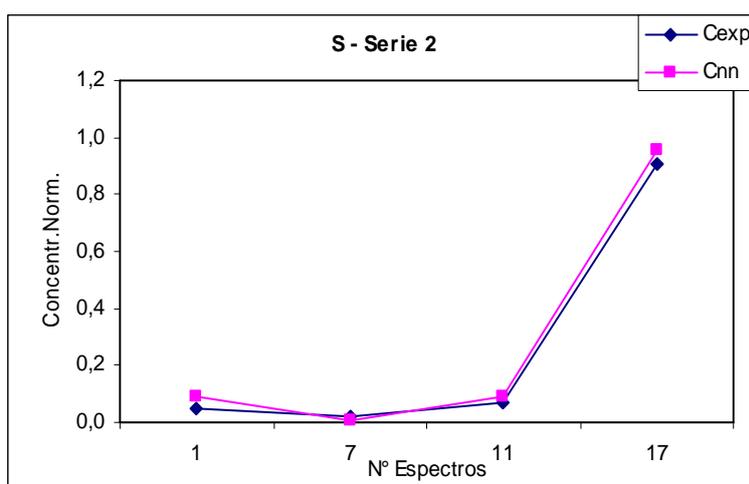


Figura 96. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie II para el S en el conjunto de Test

Tabla 51. Resultados obtenidos en la Serie III para el S

Azufre - S Conjunto Entrenamiento		Serie III Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0478	0,2222	0,0719	0,0539	0,0487	0,0539	0,0901	0,04225	
2	0,0813	0,0960	0,0726	0,0807	0,0673	0,0799	0,0793	0,00203	
4	0,0040	0,0001	0,0371	0,0327	0,0348	0,0327	0,0275	0,02348	
5	0,0249	0,0350	0,0719	0,0771	0,0553	0,0772	0,0633	0,03841	
6	0,0909	0,1449	0,0720	0,0790	0,0744	0,0790	0,0899	0,00105	
7	0,0191	0,0190	0,0387	0,0326	0,0372	0,0326	0,0320	0,01287	
8	0,0622	0,0306	0,0723	0,0790	0,0722	0,0790	0,0666	0,00443	
11	0,0718	0,0718	0,0752	0,0330	0,0462	0,0330	0,0518	0,01994	
12	0,1244	0,0981	0,0727	0,0750	0,1242	0,0750	0,0890	0,03541	
14	0,1388	0,0857	0,0333	0,0792	0,0734	0,0792	0,0702	0,06857	
15	0,1053	0,1036	0,1054	0,1051	0,1045	0,1053	0,1048	0,00048	
16	0,0344	0,0868	0,0624	0,0828	0,0982	0,0828	0,0826	0,04815	
17	0,9091	0,9091	0,9066	0,9087	0,9060	0,9090	0,9079	0,00122	
18	0,7177	0,7186	0,7167	0,7178	0,7176	0,7179	0,7177	0,00001	
19	0,0670	0,0670	0,0960	0,0681	0,0672	0,0678	0,0732	0,00625	
20	0,4450	0,4449	0,4461	0,4448	0,4462	0,4449	0,4454	0,00038	
21	0,1531	0,1544	0,1272	0,1508	0,1404	0,1507	0,1447	0,00841	
22	0,4354	0,2502	0,4348	0,4355	0,4338	0,4352	0,3979	0,03751	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
3	0,0091	0,0056	0,0714	0,0330	0,2979	0,0330	0,0882	0,07909	
9	0,0813	0,0587	0,0724	0,0330	0,0742	0,0330	0,0542	0,02709	
10	0,0718	0,1251	0,0722	0,0789	0,1158	0,0789	0,0942	0,02242	
13	0,0455	0,0901	0,0383	0,0803	0,0916	0,0803	0,0761	0,03068	

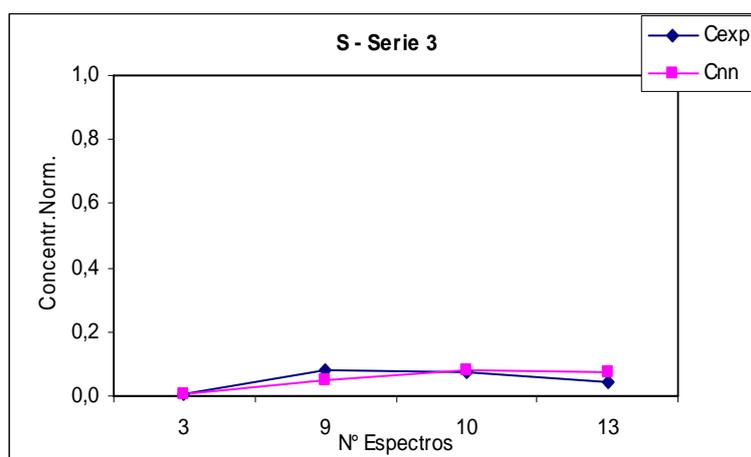


Figura 97. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el S en el conjunto de Test

Tabla 52. Resultados obtenidos en la Serie IV para el S

Azufre - S		Serie IV								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
1	0,0478	0,0635	0,2222	0,0591	0,0603	0,0535	0,0917	0,04388		
2	0,0813	0,0827	0,0960	0,0815	0,0853	0,0837	0,0858	0,00451		
3	0,0091	0,0236	0,0056	0,0090	0,0299	0,0110	0,0158	0,00673		
5	0,0249	0,0377	0,0350	0,0327	0,0393	0,0250	0,0339	0,00905		
7	0,0191	0,0158	0,0190	0,0169	0,0128	0,0193	0,0168	0,00235		
8	0,0622	0,0455	0,0306	0,0459	0,0450	0,0622	0,0459	0,01634		
9	0,0813	0,0800	0,0587	0,0791	0,0782	0,0847	0,0762	0,00519		
10	0,0718	0,0717	0,1251	0,0720	0,0714	0,0614	0,0803	0,00856		
11	0,0718	0,0526	0,0718	0,0723	0,0494	0,0711	0,0634	0,00833		
12	0,1244	0,1243	0,0981	0,1148	0,1244	0,1244	0,1172	0,00718		
13	0,0455	0,0751	0,0901	0,0460	0,0748	0,0456	0,0663	0,02088		
14	0,1388	0,1387	0,0857	0,1389	0,1387	0,1389	0,1282	0,01058		
15	0,1053	0,1054	0,1036	0,1148	0,1059	0,1037	0,1067	0,00143		
16	0,0344	0,0756	0,0868	0,0349	0,0757	0,0350	0,0616	0,02717		
17	0,9091	0,9091	0,9091	0,9088	0,9091	0,9091	0,9090	0,00005		
19	0,0670	0,0751	0,0670	0,0670	0,0747	0,0672	0,0702	0,00321		
21	0,1531	0,0751	0,1544	0,1531	0,0749	0,1532	0,1221	0,03098		
22	0,4354	0,4355	0,2502	0,4352	0,4353	0,4354	0,3983	0,03708		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
4	0,0040	0,0881	0,0001	0,0077	0,1244	0,0104	0,0462	0,04214		
6	0,0909	0,0753	0,1449	0,0497	0,0718	0,0622	0,0808	0,01013		
18	0,7177	0,9484	0,7186	0,0079	0,9207	0,1828	0,5557	0,16203		
20	0,4450	0,0232	0,4449	0,0067	0,4545	0,8148	0,3488	0,09615		

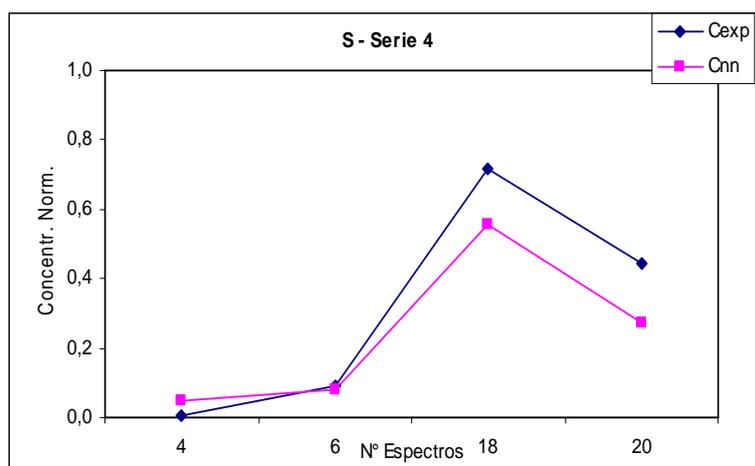


Figura 98. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Cnn) en la Serie IV para el S en el conjunto de Test

Tabla 53. Resultados obtenidos en la Serie V para el S

Azufre - S		Serie V								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
1	0,0478	0,0475	0,0588	0,0785	0,0492	0,0486	0,0565	0,00865		
3	0,0091	0,0094	0,0113	0,0109	0,0110	0,0111	0,0107	0,00163		
4	0,0040	0,0557	0,0105	0,0093	0,0084	0,0084	0,0185	0,01445		
6	0,0909	0,0909	0,0589	0,0813	0,0793	0,0792	0,0779	0,01299		
7	0,0191	0,0192	0,0099	0,0088	0,0040	0,0047	0,0093	0,00983		
8	0,0622	0,0622	0,0583	0,0625	0,0773	0,0772	0,0675	0,00531		
9	0,0813	0,0814	0,0000	0,0813	0,0816	0,0821	0,0653	0,01605		
10	0,0718	0,0723	0,0588	0,0785	0,0666	0,0669	0,0686	0,00315		
11	0,0718	0,0718	0,0717	0,0717	0,0716	0,0715	0,0717	0,00009		
12	0,1244	0,1142	0,1244	0,0779	0,1246	0,1244	0,1131	0,01128		
13	0,0455	0,0557	0,0596	0,0813	0,0456	0,0456	0,0576	0,01212		
14	0,1388	0,0557	0,1387	0,0803	0,1389	0,1388	0,1105	0,02830		
15	0,1053	0,1151	0,1053	0,1061	0,1053	0,1053	0,1074	0,00213		
16	0,0344	0,0560	0,0589	0,0772	0,0349	0,0351	0,0524	0,01798		
17	0,9091	0,9089	0,9091	0,9098	0,9090	0,9090	0,9092	0,00009		
18	0,7177	0,7177	0,7177	0,7171	0,7176	0,7176	0,7175	0,00016		
20	0,4450	0,4450	0,4450	0,4449	0,4450	0,4450	0,4450	0,00001		
22	0,4354	0,4354	0,4354	0,4353	0,4353	0,4354	0,4354	0,00004		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
2	0,0813	0,1150	0,0556	0,0774	0,0886	0,0890	0,0851	0,00376		
5	0,0249	0,0032	0,0006	0,0283	0,0613	0,0611	0,0309	0,00602		
19	0,0670	0,0557	0,0718	0,0819	0,0769	0,0750	0,0723	0,00527		
21	0,4354	0,4354	0,4354	0,4353	0,4353	0,4354	0,4354	0,00004		

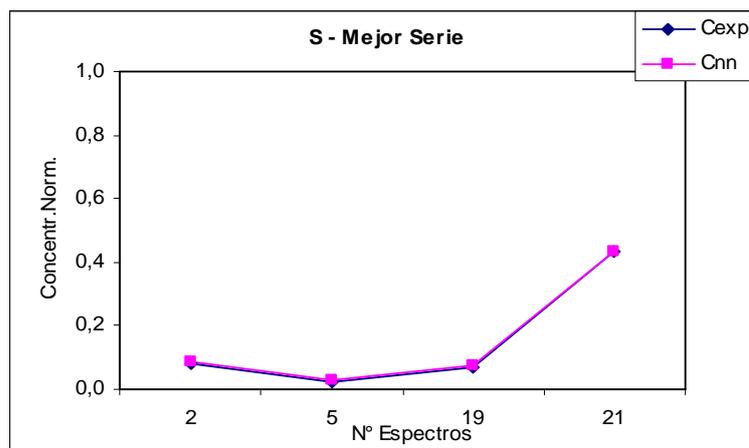


Figura 99. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el S en el conjunto de Test

Tabla 54. Resultados obtenidos en la Serie I para el K

Potasio - K Conjunto	Entrenamiento		Serie I Salida					Cnn-Media	ICexp-CnnI
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
	1	0,0947	0,0986	0,0921	0,0927	0,0944	0,0995	0,0955	0,00077
	3	0,0239	0,0254	0,0229	0,0265	0,0240	0,0296	0,0257	0,00180
	4	0,0083	0,0102	0,0177	0,0170	0,0166	0,0110	0,0145	0,00617
	5	0,0758	0,0726	0,0803	0,0734	0,0758	0,0740	0,0752	0,00052
	6	0,2576	0,2575	0,2575	0,2576	0,2575	0,2574	0,2575	0,00005
	7	0,0311	0,0174	0,0138	0,0236	0,0217	0,0250	0,0203	0,01076
	9	0,1250	0,1250	0,1272	0,1249	0,1250	0,1209	0,1246	0,00040
	10	0,1023	0,1033	0,0971	0,1061	0,1018	0,1039	0,1024	0,00016
	11	0,1288	0,1250	0,1295	0,1284	0,1274	0,1287	0,1278	0,00101
	13	0,1098	0,1101	0,1098	0,1096	0,1103	0,1079	0,1096	0,00030
	15	0,1364	0,1339	0,1368	0,1360	0,1316	0,1367	0,1350	0,00138
	16	0,0492	0,0525	0,0512	0,0495	0,0497	0,0548	0,0515	0,00230
	17	0,8712	0,8711	0,8711	0,8711	0,8707	0,8697	0,8707	0,00047
	18	0,9091	0,9091	0,9091	0,9091	0,9110	0,9093	0,9095	0,00042
	19	0,1553	0,1556	0,1552	0,1550	0,1557	0,1552	0,1553	0,00002
	20	0,4167	0,4156	0,4163	0,4167	0,4165	0,4164	0,4163	0,00035
	21	0,2765	0,2765	0,2769	0,2764	0,2759	0,2767	0,2765	0,00005
	22	0,0455	0,0450	0,0457	0,0455	0,0466	0,0445	0,0455	0,00002

Conjunto Test	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
	2	0,1212	0,1103	0,0805	0,0986	0,1073	0,0873	0,0968	0,02444
	8	0,1326	0,1161	0,1141	0,2022	0,2847	0,0352	0,1504	0,01786
	12	0,1705	0,3377	0,1779	0,1588	0,1292	0,1117	0,1831	0,01261
	14	0,1326	0,0257	0,0148	0,0513	0,0518	0,1355	0,0558	0,07674

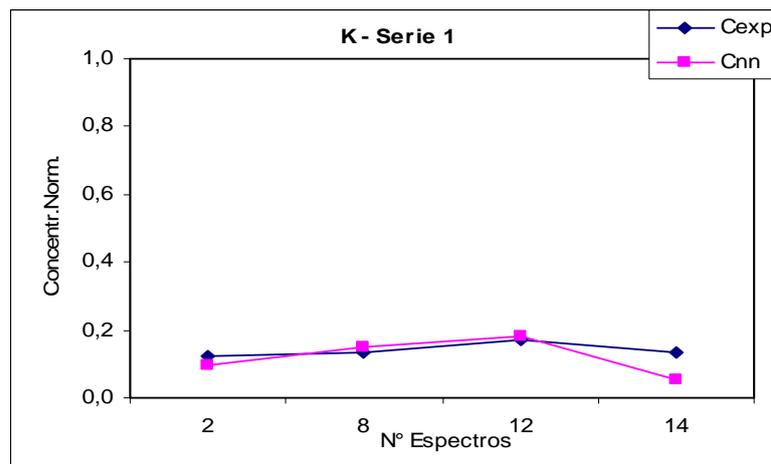


Figura 100. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el K en el conjunto de Test

Tabla 55. Resultados obtenidos en la Serie II para el K

Potasio - K		Serie II						
Conjunto Entrenamiento		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
2	0,1212	0,1235	0,1171	0,1211	0,1244	0,1257	0,1223	0,00114
3	0,0239	0,0268	0,0289	0,0192	0,0300	0,0289	0,0267	0,00288
4	0,0083	0,0175	0,0172	0,0159	0,0153	0,0153	0,0162	0,00789
5	0,0758	0,0752	0,0751	0,0758	0,0693	0,0737	0,0738	0,00193
6	0,2576	0,2574	0,2576	0,2575	0,2574	0,2574	0,2575	0,00012
8	0,1326	0,1315	0,1320	0,1311	0,1303	0,1364	0,1323	0,00030
9	0,1250	0,1244	0,1230	0,1252	0,1248	0,1236	0,1242	0,00083
10	0,1023	0,1014	0,1075	0,1018	0,1030	0,0999	0,1027	0,00046
12	0,1705	0,1706	0,1707	0,1710	0,1702	0,1704	0,1706	0,00014
13	0,1098	0,1095	0,1099	0,1027	0,1099	0,1091	0,1082	0,00164
14	0,1326	0,1322	0,1302	0,1332	0,1311	0,1323	0,1318	0,00076
15	0,1364	0,1370	0,1361	0,1360	0,1350	0,1364	0,1361	0,00025
16	0,0492	0,0502	0,0506	0,0598	0,0514	0,0496	0,0523	0,00307
18	0,9091	0,9063	0,9089	0,9074	0,9122	0,9067	0,9083	0,00079
19	0,1553	0,1566	0,1556	0,1556	0,1548	0,1559	0,1557	0,00041
20	0,4167	0,4180	0,4167	0,4167	0,4160	0,4177	0,4170	0,00033
21	0,2765	0,2739	0,2761	0,2765	0,2769	0,2755	0,2758	0,00072
22	0,0455	0,0389	0,0455	0,0450	0,0434	0,0386	0,0423	0,00320

Conjunto Test		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
1	0,0947	0,0741	0,0997	0,1017	0,1012	0,0912	0,0936	0,00111
7	0,0311	0,0267	0,0284	0,0305	0,0206	0,0135	0,0239	0,00711
11	0,1288	0,0478	0,0051	0,1014	0,0685	0,1181	0,0682	0,06061
17	0,8712	0,4354	0,7638	0,8991	0,7742	0,3720	0,6489	0,22232

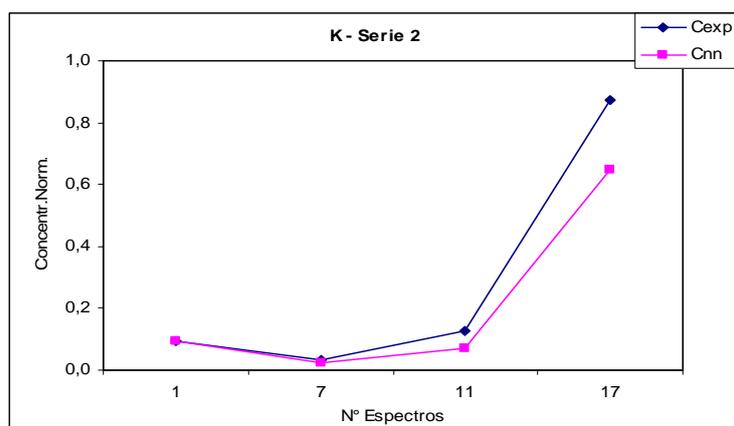


Figura 101. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el K en el conjunto de Test

Tabla 56. Resultados obtenidos en la Serie III para el K

Potasio - K		Serie III							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0947	0,0927	0,0953	0,0939	0,0926	0,0957	0,0941	0,00064	
2	0,1212	0,1232	0,1208	0,1220	0,1266	0,1214	0,1228	0,00161	
4	0,0083	0,0272	0,0100	0,0195	0,0184	0,0196	0,0190	0,01062	
5	0,0758	0,0751	0,0745	0,0756	0,0722	0,0751	0,0745	0,00126	
6	0,2576	0,2573	0,2573	0,2577	0,2578	0,2576	0,2576	0,00002	
7	0,0311	0,0284	0,0242	0,0256	0,0293	0,0266	0,0268	0,00426	
8	0,1326	0,1334	0,1289	0,1299	0,1483	0,1294	0,1340	0,00139	
11	0,1288	0,1248	0,1282	0,1280	0,1269	0,1276	0,1271	0,00169	
12	0,1705	0,1701	0,1702	0,1706	0,1704	0,1705	0,1704	0,00009	
14	0,1326	0,1332	0,1317	0,1323	0,1322	0,1325	0,1324	0,00021	
15	0,1364	0,1360	0,1342	0,1289	0,1251	0,1349	0,1318	0,00455	
16	0,0492	0,0495	0,0583	0,0506	0,0501	0,0491	0,0515	0,00228	
17	0,8712	0,8713	0,8724	0,8711	0,8712	0,8713	0,8714	0,00023	
18	0,9091	0,9091	0,9099	0,9094	0,9091	0,9091	0,9093	0,00024	
19	0,1553	0,1553	0,1544	0,1551	0,1555	0,1553	0,1551	0,00020	
20	0,4167	0,4166	0,4138	0,4164	0,4165	0,4167	0,4160	0,00066	
21	0,2765	0,2766	0,2778	0,2767	0,2765	0,2766	0,2768	0,00030	
22	0,0455	0,0285	0,0491	0,0441	0,0428	0,0411	0,0411	0,00433	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0239	0,0148	0,0315	0,0332	0,0456	0,0315	0,0313	0,00746	
9	0,1250	0,1516	0,0521	0,1216	0,1939	0,1566	0,1351	0,01014	
10	0,1023	0,0998	0,0978	0,0988	0,1861	0,1314	0,1228	0,02051	
13	0,1098	0,0477	0,0202	0,0143	0,0519	0,0357	0,0340	0,07589	

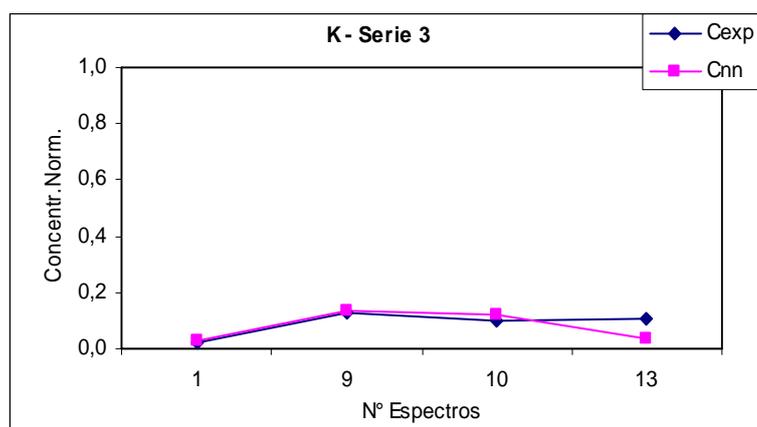


Figura 102. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el K en el conjunto de Test

Tabla 57. Resultados obtenidos en la Serie IV para el K

Potasio - K		Serie IV							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0947	0,0946	0,0934	0,0922	0,0971	0,0947	0,0944	0,00030	
2	0,1212	0,1182	0,1193	0,1232	0,1257	0,1207	0,1214	0,00020	
3	0,0239	0,0148	0,0284	0,0301	0,0283	0,0234	0,0250	0,00114	
5	0,0758	0,0764	0,0780	0,0734	0,0766	0,0759	0,0760	0,00028	
7	0,0311	0,0318	0,0303	0,0276	0,0261	0,0305	0,0293	0,00179	
8	0,1326	0,1339	0,1305	0,1279	0,1307	0,1323	0,1311	0,00152	
9	0,1250	0,1220	0,1308	0,1236	0,1241	0,1249	0,1251	0,00007	
10	0,1023	0,1020	0,1019	0,1047	0,0933	0,1023	0,1008	0,00146	
11	0,1288	0,1305	0,1267	0,1278	0,1270	0,1282	0,1281	0,00073	
12	0,1705	0,1705	0,1686	0,1701	0,1721	0,1704	0,1703	0,00011	
13	0,1098	0,1091	0,1052	0,1053	0,1095	0,1098	0,1078	0,00207	
14	0,1326	0,1322	0,1329	0,1327	0,1314	0,1325	0,1324	0,00022	
15	0,1364	0,1345	0,1347	0,1217	0,1350	0,1342	0,1320	0,00435	
16	0,0492	0,0550	0,0572	0,0573	0,0502	0,0496	0,0539	0,00464	
17	0,8712	0,8696	0,8694	0,8709	0,8711	0,8711	0,8704	0,00079	
19	0,1553	0,1551	0,1559	0,1556	0,1555	0,1553	0,1555	0,00018	
21	0,2765	0,2761	0,2762	0,2766	0,2766	0,2764	0,2764	0,00014	
22	0,0455	0,0488	0,0448	0,0458	0,0439	0,0461	0,0459	0,00041	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
4	0,0083	0,0077	0,0093	0,0109	0,0223	0,0087	0,0118	0,00343	
6	0,2576	0,1208	0,1120	0,1725	0,2495	0,1300	0,1570	0,10060	
18	0,9091	0,8572	0,2317	0,2860	0,9422	0,8651	0,6364	0,27265	
20	0,4167	0,2681	0,1619	0,1783	0,2411	0,2821	0,2263	0,19034	

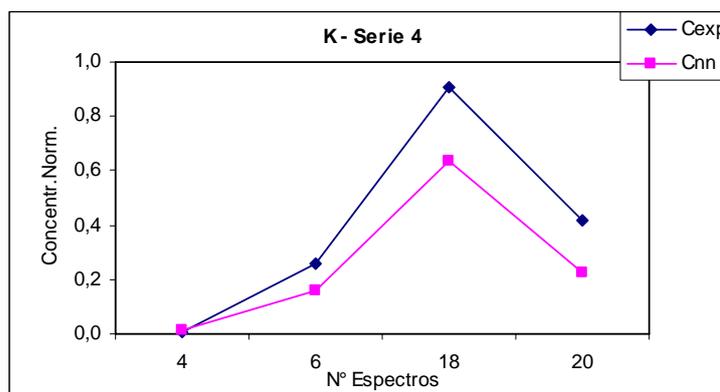


Figura 103. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el K en el conjunto de Test

Tabla 58. Resultados obtenidos en la Serie V para el K

Potasio - K		Serie V							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,0947	0,0951	0,0960	0,1067	0,1067	0,0951	0,0999	0,00521	
3	0,0239	0,0239	0,0290	0,0368	0,0368	0,0239	0,0301	0,00620	
4	0,0083	0,0188	0,0124	0,0082	0,0082	0,0188	0,0133	0,00496	
6	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,2576	0,00003	
7	0,0311	0,0226	0,0225	0,0217	0,0217	0,0226	0,0222	0,00885	
8	0,1326	0,1360	0,1315	0,1260	0,1260	0,1360	0,1311	0,00147	
9	0,1250	0,1250	0,1233	0,1107	0,1107	0,1250	0,1189	0,00605	
10	0,1023	0,1020	0,1013	0,1136	0,1136	0,1020	0,1065	0,00422	
11	0,1288	0,1293	0,1291	0,1208	0,1208	0,1293	0,1258	0,00295	
12	0,1705	0,1705	0,1704	0,1727	0,1727	0,1705	0,1713	0,00089	
13	0,1098	0,1098	0,1098	0,1129	0,1129	0,1098	0,1111	0,00121	
14	0,1326	0,1324	0,1326	0,1329	0,1329	0,1324	0,1326	0,00006	
15	0,1364	0,1361	0,1226	0,1280	0,1280	0,1361	0,1301	0,00623	
16	0,0492	0,0494	0,0492	0,0500	0,0500	0,0494	0,0496	0,00033	
17	0,8712	0,8712	0,8712	0,8713	0,8713	0,8712	0,8713	0,00005	
18	0,9091	0,9091	0,9091	0,9131	0,9131	0,9091	0,9107	0,00161	
20	0,4167	0,4167	0,4167	0,4160	0,4160	0,4167	0,4164	0,00026	
22	0,0455	0,0447	0,0454	0,0452	0,0452	0,0447	0,0450	0,00042	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
2	0,1212	0,1407	0,1023	0,1022	0,1022	0,1407	0,1176	0,00360	
5	0,0758	0,0947	0,0811	0,0809	0,0809	0,0947	0,0865	0,01071	
19	0,1553	0,0574	0,0963	0,2289	0,2289	0,0574	0,1338	0,02154	
21	0,2765	0,1947	0,2634	0,2686	0,2686	0,1947	0,2380	0,03852	

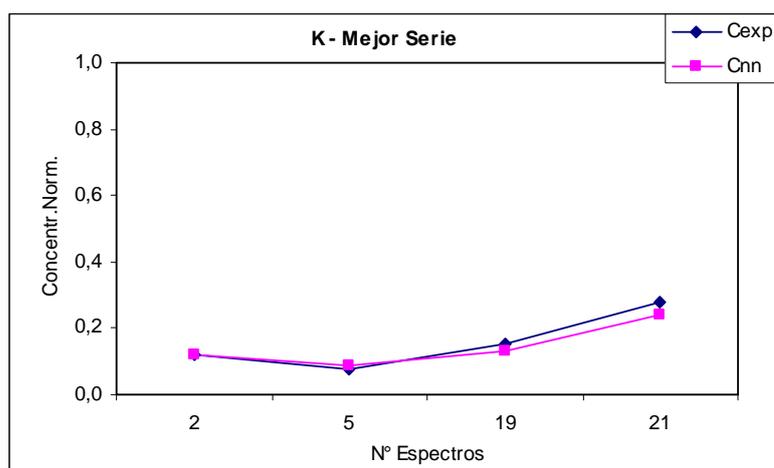


Figura 104. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el K en el conjunto de Test

Tabla 59. Resultados obtenidos en la Serie I para el Ca

Calcio - Ca		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,4423	0,4415	0,4416	0,4416	0,4427	0,4438	0,4423	0,00001	
3	0,1130	0,1157	0,1131	0,1130	0,1821	0,1750	0,1398	0,02678	
4	0,0295	0,0322	0,0275	0,0242	0,0050	0,0108	0,0199	0,00957	
5	0,0295	0,0246	0,0276	0,0291	0,0494	0,0399	0,0341	0,00464	
6	0,0614	0,0573	0,0603	0,0606	0,0501	0,0402	0,0537	0,00771	
7	0,0541	0,0573	0,0543	0,0400	0,0050	0,0108	0,0335	0,02058	
9	0,0091	0,0071	0,0098	0,0311	0,0050	0,0108	0,0127	0,00364	
10	0,0270	0,0287	0,0286	0,0240	0,0232	0,0309	0,0271	0,00006	
11	0,0688	0,0624	0,0674	0,0683	0,0051	0,0109	0,0428	0,02599	
13	0,9091	0,9098	0,9083	0,9085	0,8017	0,7862	0,8629	0,04619	
15	0,6388	0,6386	0,6386	0,6386	0,6810	0,7110	0,6616	0,02276	
16	0,2457	0,2457	0,2456	0,2456	0,2512	0,2620	0,2500	0,00429	
17	0,0442	0,0438	0,0439	0,0433	0,0382	0,0390	0,0416	0,00260	
18	0,1843	0,1826	0,1839	0,1840	0,1796	0,1661	0,1792	0,00503	
19	0,7862	0,7870	0,7862	0,7861	0,8114	0,8953	0,8132	0,02696	
20	0,0172	0,0233	0,0173	0,0168	0,0483	0,0759	0,0363	0,01913	
21	0,2064	0,2060	0,2063	0,2064	0,2057	0,1919	0,2033	0,00313	
22	0,2334	0,2337	0,2334	0,2334	0,1822	0,1752	0,2116	0,02183	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
2	0,5160	0,4827	0,3942	0,4477	0,8868	0,8590	0,6141	0,09811	
8	0,0079	0,0141	0,0176	0,0238	0,0013	0,0022	0,0118	0,00393	
12	0,0103	0,0157	0,0184	0,0241	0,0050	0,0108	0,0148	0,00450	
14	0,0663	0,0000	0,0000	0,0004	0,0054	0,0113	0,0034	0,06290	

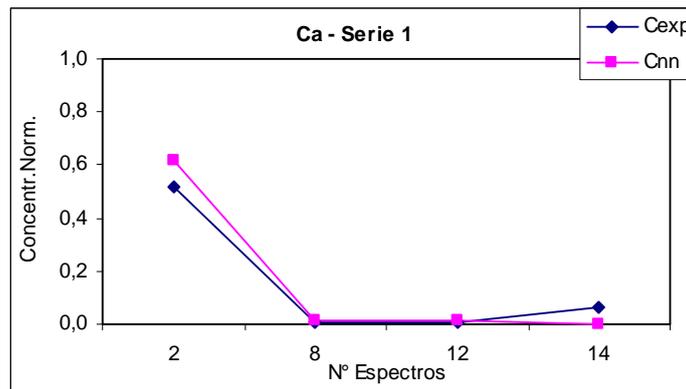


Figura 105. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Ca en el conjunto de Test

Tabla 60. Resultados obtenidos en la Serie II para el Ca

Calcio - Ca		Serie II								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
2	0,5160	0,5162	0,5159	0,5160	0,5161	0,5159	0,5160	0,00005		
3	0,1130	0,0365	0,1126	0,1129	0,0385	0,0286	0,0658	0,04718		
4	0,0295	0,0352	0,0125	0,0215	0,0332	0,0288	0,0262	0,00325		
5	0,0295	0,0371	0,0267	0,0215	0,0389	0,0289	0,0306	0,00114		
6	0,0614	0,0605	0,0610	0,0215	0,0607	0,0604	0,0528	0,00861		
8	0,0079	0,0371	0,0169	0,0215	0,0389	0,0290	0,0287	0,02081		
9	0,0091	0,0366	0,0204	0,0215	0,0381	0,0287	0,0291	0,01999		
10	0,0270	0,0315	0,0142	0,0215	0,0267	0,0289	0,0246	0,00247		
12	0,0103	0,0095	0,0099	0,0215	0,0083	0,0285	0,0155	0,00522		
13	0,9091	0,9078	0,9083	0,9085	0,9079	0,9087	0,9082	0,00085		
14	0,0663	0,0009	0,0050	0,0215	0,0010	0,0290	0,0115	0,05486		
15	0,6388	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,00022		
16	0,2457	0,2456	0,2455	0,2457	0,2456	0,2455	0,2456	0,00012		
18	0,1843	0,1835	0,1833	0,1837	0,1838	0,1839	0,1836	0,00063		
19	0,7862	0,7862	0,7863	0,7861	0,7864	0,7861	0,7862	0,00001		
20	0,0172	0,0198	0,0246	0,0231	0,0183	0,0174	0,0206	0,00343		
21	0,2064	0,2064	0,2063	0,2064	0,2063	0,2063	0,2063	0,00006		
22	0,2334	0,2332	0,2332	0,2334	0,2334	0,2335	0,2333	0,00008		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
1	0,4423	0,4822	0,4300	0,4092	0,4820	0,5072	0,4621	0,01985		
7	0,0541	0,0362	0,0241	0,0215	0,0368	0,0288	0,0295	0,02457		
11	0,0688	0,0257	0,0339	0,0223	0,0302	0,0287	0,0282	0,04063		
17	0,0442	0,0091	0,0157	0,0324	0,0086	0,0430	0,0218	0,02245		

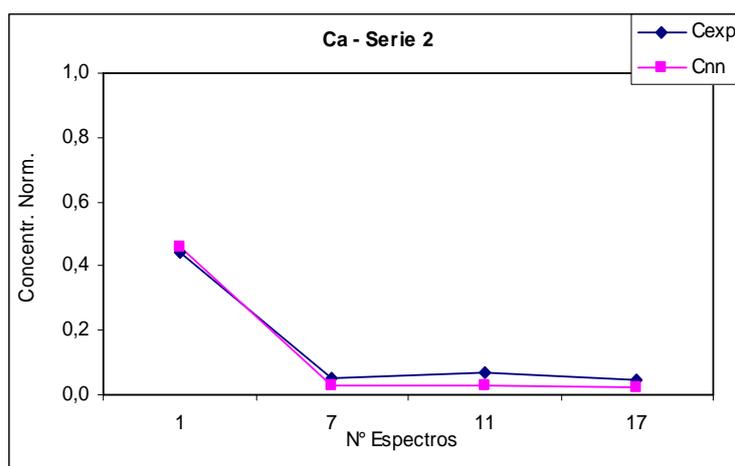


Figura 106. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Ca en el conjunto de Test

Tabla 61. Resultados obtenidos en la Serie III para el Ca

Calcio - Ca		Serie III							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,4423	0,4416	0,4416	0,4416	0,4416	0,4419	0,4417	0,00057	
2	0,5160	0,5159	0,5159	0,5159	0,5159	0,5157	0,5159	0,00006	
4	0,0295	0,0289	0,0287	0,0291	0,0289	0,0396	0,0311	0,00158	
5	0,0295	0,0290	0,0290	0,0291	0,0290	0,0218	0,0276	0,00191	
6	0,0614	0,0606	0,0605	0,0607	0,0606	0,0611	0,0607	0,00073	
7	0,0541	0,0534	0,0532	0,0531	0,0534	0,0577	0,0542	0,00011	
8	0,0079	0,0074	0,0070	0,0080	0,0074	0,0109	0,0081	0,00027	
11	0,0688	0,0682	0,0682	0,0682	0,0682	0,0538	0,0653	0,00347	
12	0,0103	0,0102	0,0071	0,0081	0,0102	0,0157	0,0103	0,00002	
14	0,0663	0,0072	0,0086	0,0071	0,0072	0,0102	0,0081	0,05828	
15	0,6388	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6384	0,6386	0,00025	
16	0,2457	0,2456	0,2455	0,2456	0,2456	0,2460	0,2457	0,00004	
17	0,0442	0,0439	0,0439	0,0439	0,0439	0,0430	0,0437	0,00049	
18	0,1843	0,1839	0,1838	0,1839	0,1839	0,1833	0,1838	0,00049	
19	0,7862	0,7861	0,7861	0,7861	0,7861	0,7861	0,7861	0,00015	
20	0,0172	0,0157	0,0181	0,0170	0,0157	0,0189	0,0171	0,00012	
21	0,2064	0,2064	0,2063	0,2063	0,2064	0,2064	0,2064	0,00000	
22	0,2334	0,2334	0,2335	0,2334	0,2334	0,2335	0,2334	0,00003	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
3	0,1130	0,1399	0,2338	0,1225	0,1399	0,0731	0,1418	0,02882	
9	0,0091	0,0120	0,0070	0,0228	0,0120	0,0205	0,0148	0,00575	
10	0,0270	0,0525	0,0070	0,0197	0,0525	0,0234	0,0310	0,00398	
13	0,9091	0,5204	0,4946	0,5866	0,5204	0,7347	0,5714	0,33772	

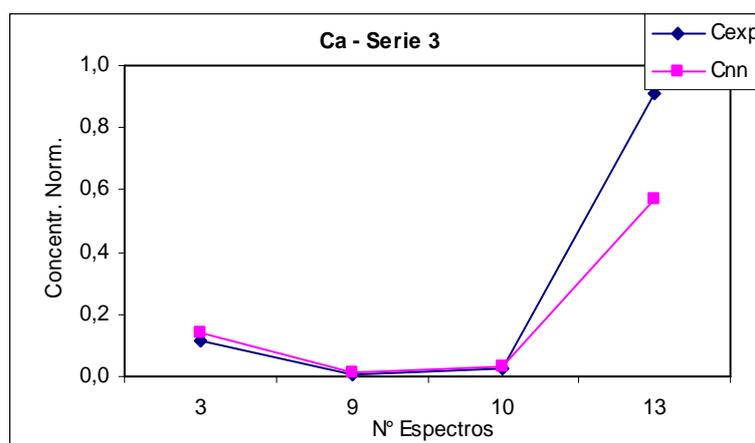


Figura 107. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Ca en el conjunto de Test

Tabla 62. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Ca

Calcio - Ca		Serie IV							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
1	0,4423	0,4417	0,4416	0,4416	0,4416	0,4417	0,4417	0,00061	
2	0,5160	0,5159	0,5159	0,5159	0,5159	0,5158	0,5159	0,00005	
3	0,1130	0,1130	0,1130	0,1129	0,1130	0,1132	0,1130	0,00001	
5	0,0295	0,0266	0,0261	0,0310	0,0306	0,0196	0,0268	0,00269	
7	0,0541	0,0530	0,0263	0,0528	0,0517	0,0411	0,0450	0,00906	
8	0,0079	0,0130	0,0263	0,0049	0,0053	0,0075	0,0114	0,00354	
9	0,0091	0,0109	0,0263	0,0133	0,0170	0,0297	0,0194	0,01034	
10	0,0270	0,0245	0,0262	0,0224	0,0136	0,0196	0,0213	0,00577	
11	0,0688	0,0683	0,0263	0,0680	0,0684	0,0682	0,0598	0,00895	
12	0,0103	0,0015	0,0262	0,0103	0,0110	0,0201	0,0138	0,00349	
13	0,9091	0,9071	0,9084	0,9082	0,9086	0,9096	0,9084	0,00071	
14	0,0663	0,0006	0,0263	0,0071	0,0103	0,0004	0,0089	0,05739	
15	0,6388	0,6387	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,6386	0,00020	
16	0,2457	0,2458	0,2456	0,2456	0,2455	0,2455	0,2456	0,00010	
17	0,0442	0,0432	0,0439	0,0437	0,0438	0,0443	0,0438	0,00043	
19	0,7862	0,7861	0,7861	0,7861	0,7862	0,7862	0,7861	0,00010	
21	0,2064	0,2065	0,2063	0,2064	0,2064	0,2060	0,2063	0,00005	
22	0,2334	0,2335	0,2334	0,2335	0,2334	0,2334	0,2334	0,00003	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl	
4	0,0295	0,0354	0,0263	0,0239	0,0195	0,0202	0,0251	0,00443	
6	0,0614	0,0201	0,0256	0,0715	0,0797	0,0004	0,0395	0,02196	
18	0,1843	0,0115	0,1878	0,0501	0,0858	0,1968	0,1064	0,07785	
20	0,0172	0,0007	0,0525	0,0113	0,0053	0,0016	0,0143	0,00291	

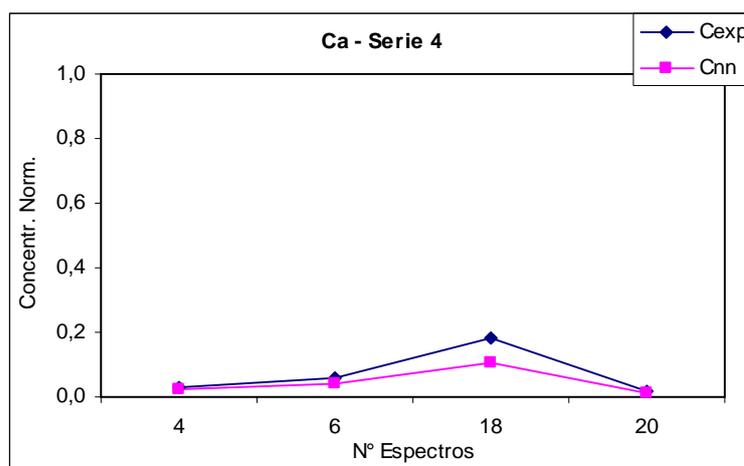


Figura 108. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Ca en el conjunto de Test

Tabla 63. Resultados obtenidos en la Serie V para el Ca

Calcio - Ca		Serie V								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
1	0,4423	0,4416	0,4416	0,4429	0,4416	0,4397	0,4415	0,00078		
3	0,1130	0,0433	0,1127	0,1137	0,1130	0,1129	0,0991	0,01392		
4	0,0295	0,0386	0,0145	0,0270	0,0337	0,0300	0,0288	0,00072		
6	0,0614	0,0508	0,0573	0,0614	0,0603	0,0598	0,0579	0,00350		
7	0,0541	0,0382	0,0508	0,0270	0,0526	0,0547	0,0447	0,00939		
8	0,0079	0,0394	0,0105	0,0261	0,0077	0,0060	0,0180	0,01010		
9	0,0091	0,0384	0,0166	0,0272	0,0086	0,0144	0,0211	0,01196		
10	0,0270	0,0425	0,0275	0,0206	0,0223	0,0239	0,0274	0,00033		
11	0,0688	0,0378	0,0722	0,0680	0,0683	0,0648	0,0623	0,00655		
12	0,0103	0,0411	0,0120	0,0101	0,0054	0,0015	0,0141	0,00373		
13	0,9091	0,9036	0,9066	0,8964	0,9076	0,8796	0,8988	0,01032		
14	0,0663	0,0250	0,0106	0,0280	0,0073	0,0745	0,0291	0,03726		
15	0,6388	0,6390	0,6389	0,6388	0,6387	0,6396	0,6390	0,00018		
16	0,2457	0,2459	0,2459	0,2459	0,2456	0,2549	0,2476	0,00194		
17	0,0442	0,0223	0,0441	0,0271	0,0436	0,0722	0,0419	0,00237		
18	0,1843	0,1848	0,1837	0,1852	0,1839	0,0958	0,1667	0,01760		
20	0,0172	0,0262	0,0029	0,0202	0,0175	0,0202	0,0174	0,00022		
22	0,2334	0,2337	0,2334	0,2330	0,2334	0,2335	0,2334	0,00000		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
2	0,5160	0,4489	0,4082	0,3850	0,5046	0,7721	0,5038	0,01221		
5	0,0295	0,0403	0,0508	0,0269	0,0084	0,0163	0,0285	0,00094		
19	0,7862	0,9297	0,9119	0,9078	0,6520	0,8145	0,8432	0,05691		
21	0,2064	0,4266	0,1349	0,5661	0,0731	0,2690	0,2940	0,08756		

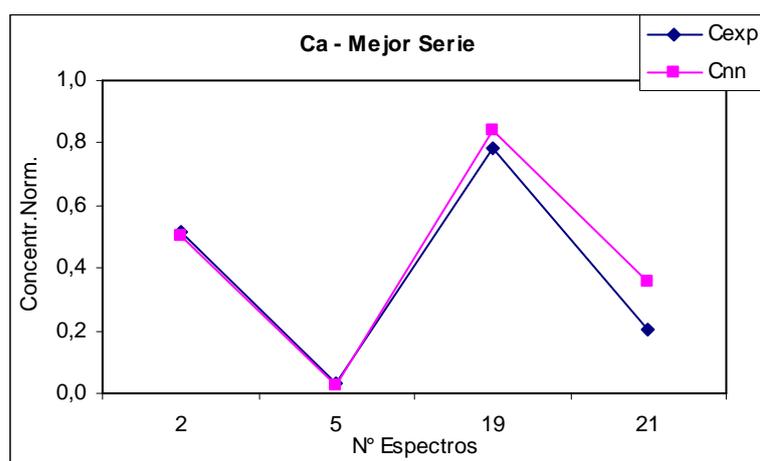


Figura 109. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Ca en el conjunto de Test

Tabla 64. Resultados obtenidos en la Serie I para el Fe

Hierro - Fe Conjunto Entrenamiento		Serie I					Salida			
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
1	0,0354	0,0365	0,0364	0,0360	0,0357	0,0365	0,0362	0,00088		
3	0,0505	0,0493	0,0492	0,0503	0,0476	0,0493	0,0492	0,00135		
4	0,0047	0,0089	0,0082	0,0086	0,0069	0,0089	0,0083	0,00360		
5	0,0035	0,0037	0,0027	0,0040	0,0057	0,0037	0,0040	0,00044		
6	0,0054	0,0061	0,0047	0,0045	0,0057	0,0061	0,0054	0,00003		
7	0,0076	0,0049	0,0039	0,0049	0,0057	0,0049	0,0048	0,00273		
9	0,0286	0,0286	0,0295	0,0288	0,0473	0,0286	0,0326	0,00394		
10	0,0589	0,1061	0,0891	0,0833	0,0557	0,1061	0,0880	0,02912		
11	0,0522	0,0539	0,0534	0,0525	0,0473	0,0539	0,0522	0,00000		
13	0,0657	0,0574	0,0646	0,0653	0,0655	0,0574	0,0621	0,00360		
15	0,0909	0,0909	0,0909	0,0909	0,0911	0,0909	0,0909	0,00003		
16	0,0707	0,0774	0,0714	0,0709	0,0705	0,0774	0,0735	0,00283		
17	0,4040	0,3869	0,3869	0,3869	0,3869	0,3869	0,3869	0,01717		
18	0,0741	0,0709	0,0737	0,0737	0,0739	0,0709	0,0726	0,00145		
19	0,1313	0,0180	0,0131	0,0130	0,0114	0,0180	0,0147	0,11660		
20	0,9091	0,9086	0,9091	0,9091	0,9091	0,9086	0,9089	0,00020		
21	0,0370	0,0379	0,0382	0,0377	0,0375	0,0379	0,0378	0,00081		
22	0,0185	0,0168	0,0170	0,0175	0,0197	0,0168	0,0176	0,00094		

Conjunto Test		Serie I					Salida			
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
2	0,0320	0,0067	0,0061	0,0104	0,0061	0,0067	0,0072	0,02478		
8	0,0044	0,0039	0,0029	0,0045	0,0057	0,0039	0,0042	0,00020		
12	0,0791	0,0869	0,0768	0,0823	0,0758	0,0869	0,0817	0,00259		
14	0,7239	0,6776	0,5980	0,4380	0,9433	0,6776	0,6669	0,05700		

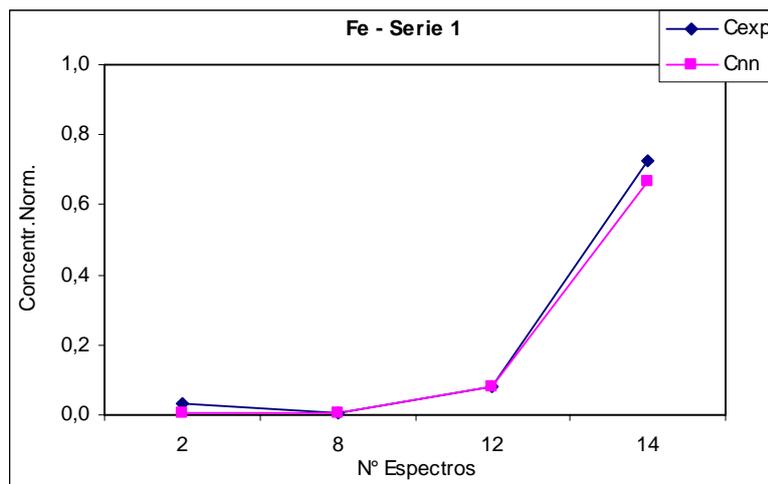


Figura 110. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Fe en el conjunto de Test

Tabla 65. Resultados obtenidos en la Serie II para el Fe

Hierro - Fe		Serie II								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
2	0,0320	0,0421	0,0323	0,0315	0,0416	0,0323	0,0360	0,00397		
3	0,0505	0,0409	0,0503	0,0465	0,0409	0,0503	0,0458	0,00471		
4	0,0047	0,0093	0,0051	0,0096	0,0088	0,0051	0,0075	0,00283		
5	0,0035	0,0067	0,0034	0,0051	0,0067	0,0034	0,0051	0,00152		
6	0,0054	0,0020	0,0056	0,0013	0,0020	0,0056	0,0033	0,00209		
8	0,0044	0,0013	0,0040	0,0064	0,0012	0,0040	0,0034	0,00098		
9	0,0286	0,0293	0,0283	0,0473	0,0298	0,0283	0,0326	0,00397		
10	0,0589	0,0670	0,0786	0,0505	0,0662	0,0786	0,0682	0,00926		
12	0,0791	0,0785	0,0788	0,0761	0,0786	0,0788	0,0781	0,00098		
13	0,0657	0,0657	0,0694	0,0631	0,0655	0,0694	0,0666	0,00094		
14	0,7239	0,7404	0,7404	0,7404	0,7404	0,7404	0,7404	0,01650		
15	0,0909	0,0909	0,0892	0,0923	0,0909	0,0892	0,0905	0,00040		
16	0,0707	0,0709	0,0754	0,0709	0,0709	0,0754	0,0727	0,00199		
18	0,0741	0,0736	0,0657	0,0739	0,0736	0,0657	0,0705	0,00360		
19	0,1313	0,0135	0,0133	0,0160	0,0135	0,0133	0,0139	0,11741		
20	0,9091	0,9091	0,9091	0,9093	0,9091	0,9091	0,9091	0,00003		
21	0,0370	0,0360	0,0389	0,0362	0,0360	0,0389	0,0372	0,00017		
22	0,0185	0,0178	0,0204	0,0209	0,0178	0,0204	0,0195	0,00094		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
1	0,0354	0,0399	0,0391	0,0296	0,0354	0,0354	0,0359	0,00051		
2	0,0076	0,0042	0,0034	0,0042	0,0076	0,0076	0,0054	0,00219		
3	0,0522	0,0360	0,0426	0,0483	0,0522	0,0522	0,0463	0,00593		
4	0,4040	0,1532	0,0690	0,0024	0,4040	0,4040	0,2065	0,19751		

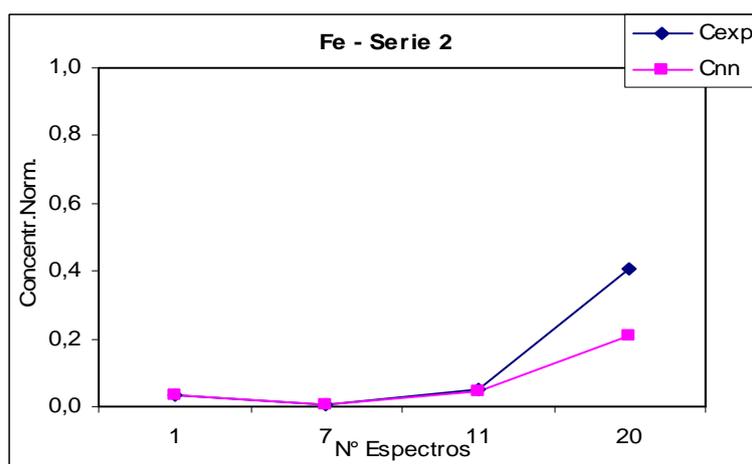


Figura 111. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Fe en el conjunto de Test

Tabla 66. Resultados obtenidos en la Serie III para el Fe

Hierro - Fe Conjunto Entrenamiento		Serie III			Salida			Cnn-Media	ICexp-Cnnl
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
1	0,0354	0,0332	0,0416	0,0340	0,0483	0,0337	0,0381	0,00279	
2	0,0320	0,0342	0,0293	0,0337	0,0483	0,0316	0,0354	0,00343	
4	0,0047	0,0042	0,0091	0,0032	0,0051	0,0207	0,0085	0,00374	
5	0,0035	0,0024	0,0066	0,0051	0,0045	0,0118	0,0061	0,00253	
6	0,0054	0,0054	0,0057	0,0052	0,0045	0,0108	0,0063	0,00094	
7	0,0076	0,0089	0,0099	0,0082	0,0064	0,0207	0,0108	0,00327	
8	0,0044	0,0030	0,0066	0,0039	0,0045	0,0104	0,0057	0,00131	
11	0,0522	0,0525	0,0485	0,0525	0,0483	0,0221	0,0448	0,00741	
12	0,0791	0,0788	0,0783	0,0788	0,0788	0,0813	0,0792	0,00007	
14	0,7239	0,7404	0,7426	0,7404	0,7404	0,7406	0,7409	0,01697	
15	0,0909	0,0902	0,0480	0,0909	0,0545	0,0421	0,0652	0,02576	
16	0,0707	0,0721	0,0830	0,0707	0,0798	0,0705	0,0752	0,00451	
17	0,4040	0,3869	0,3875	0,3869	0,3867	0,3862	0,3868	0,01721	
18	0,0741	0,0736	0,0490	0,0736	0,0753	0,0815	0,0706	0,00350	
19	0,1313	0,0133	0,0520	0,0140	0,0131	0,0401	0,0265	0,10481	
20	0,9091	0,9091	0,9084	0,9091	0,9089	0,9082	0,9088	0,00034	
21	0,0370	0,0369	0,0483	0,0372	0,0379	0,0418	0,0404	0,00337	
22	0,0185	0,0205	0,0187	0,0199	0,0204	0,0227	0,0204	0,00192	

Conjunto Test		Serie III			Salida			Cnn-Media	ICexp-Cnnl
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
1	0,0505	0,0348	0,0481	0,0328	0,0487	0,0224	0,0374	0,01313	
2	0,0286	0,0212	0,0239	0,0281	0,0428	0,0200	0,0272	0,00141	
3	0,0589	0,0320	0,0500	0,0431	0,0544	0,0810	0,0521	0,00684	
4	0,0657	0,0529	0,0465	0,0508	0,0564	0,0439	0,0501	0,01556	

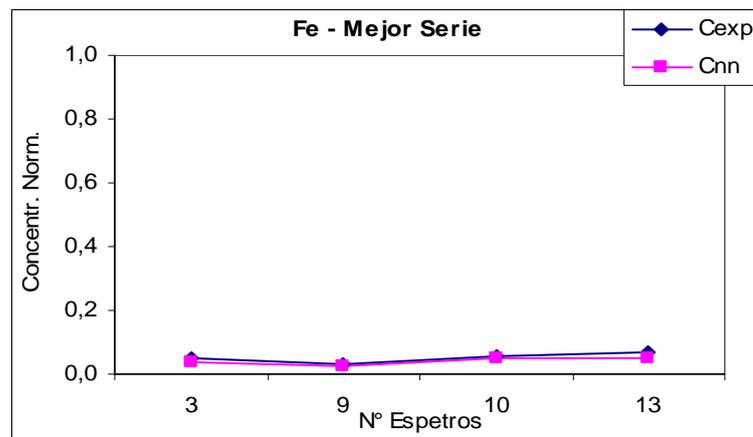


Figura 112. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Fe en el conjunto de Test

Tabla 67. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Fe

Hierro - Fe		Serie IV								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
1	0,0354	0,0333	0,0343	0,0352	0,0343	0,0332	0,0341	0,00128		
2	0,0320	0,0401	0,0332	0,0325	0,0330	0,0291	0,0336	0,00158		
3	0,0505	0,0517	0,0414	0,0418	0,0401	0,0488	0,0447	0,00576		
5	0,0035	0,0195	0,0039	0,0039	0,0042	0,0052	0,0073	0,00380		
7	0,0076	0,0204	0,0072	0,0071	0,0099	0,0061	0,0101	0,00256		
8	0,0044	0,0091	0,0047	0,0045	0,0059	0,0069	0,0062	0,00185		
9	0,0286	0,0278	0,0283	0,0283	0,0286	0,0347	0,0295	0,00091		
10	0,0589	0,0791	0,0837	0,1167	0,0598	0,0271	0,0733	0,01434		
11	0,0522	0,0481	0,0416	0,0423	0,0392	0,0527	0,0448	0,00741		
12	0,0791	0,0779	0,0786	0,0788	0,0779	0,0790	0,0785	0,00067		
13	0,0657	0,0663	0,0660	0,0655	0,0692	0,0522	0,0638	0,00182		
14	0,7239	0,7416	0,7404	0,7404	0,7406	0,7404	0,7407	0,01677		
15	0,0909	0,0631	0,0901	0,0906	0,0852	0,0508	0,0760	0,01495		
16	0,0707	0,0793	0,0709	0,0709	0,0709	0,0751	0,0734	0,00269		
17	0,4040	0,3857	0,3867	0,3869	0,3872	0,3867	0,3866	0,01741		
19	0,1313	0,0170	0,0416	0,0419	0,0411	0,0497	0,0382	0,09306		
21	0,0370	0,0532	0,0465	0,0448	0,0527	0,0502	0,0495	0,01242		
22	0,0185	0,0121	0,0207	0,0202	0,0204	0,0197	0,0186	0,00010		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI		
1	0,0047	0,0396	0,0172	0,0178	0,0187	0,0067	0,0200	0,01529		
2	0,0054	0,0093	0,0024	0,0020	0,0052	0,0135	0,0065	0,00108		
3	0,0741	0,0556	0,0571	0,0581	0,0611	0,0613	0,0586	0,01545		
4	0,9091	0,7604	0,8476	0,8870	0,7374	0,1785	0,6822	0,22690		

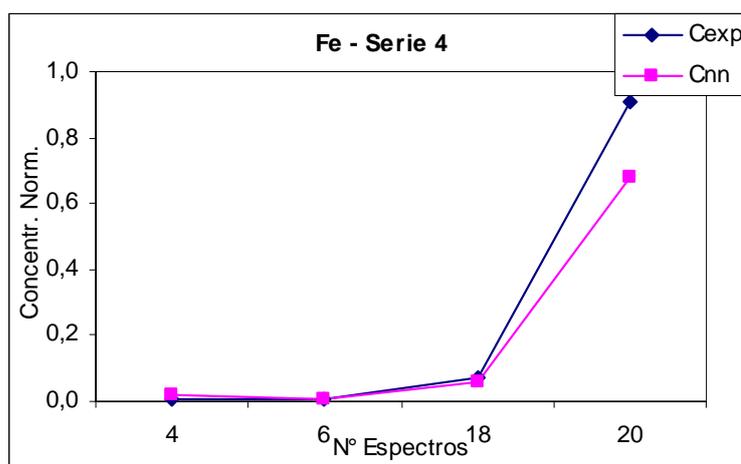


Figura 113. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Fe en el conjunto de Test

Tabla 68. Resultados obtenidos en la Serie V para el Fe

Hierro - Fe Conjunto Entrenamiento	Serie V								
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	Salida			Cnn-Media	ICexp-CnnI
					RN3	RN4	RN5		
	1	0,0354	0,0359	0,0338	0,0328	0,0360	0,0407	0,0359	0,00051
	3	0,0505	0,0508	0,0508	0,0512	0,0503	0,0512	0,0509	0,00037
	4	0,0047	0,0072	0,0056	0,0162	0,0077	0,0077	0,0089	0,00418
	6	0,0054	0,0059	0,0052	0,0160	0,0045	0,0069	0,0077	0,00232
	7	0,0076	0,0062	0,0054	0,0165	0,0049	0,0093	0,0085	0,00088
	8	0,0044	0,0057	0,0052	0,0160	0,0052	0,0067	0,0078	0,00340
	9	0,0286	0,0258	0,0290	0,0308	0,0285	0,0207	0,0269	0,00168
	10	0,0589	0,0077	0,0667	0,0561	0,0564	0,0771	0,0528	0,00613
	11	0,0522	0,0527	0,0529	0,0524	0,0527	0,0530	0,0527	0,00054
	12	0,0791	0,0788	0,0788	0,0788	0,0788	0,0778	0,0786	0,00054
	13	0,0657	0,0722	0,0739	0,0653	0,0653	0,0705	0,0695	0,00380
	14	0,7239	0,7404	0,7404	0,7404	0,7404	0,7402	0,7404	0,01646
	15	0,0909	0,0719	0,0737	0,0909	0,0909	0,0884	0,0832	0,00774
	16	0,0707	0,0778	0,0776	0,0710	0,0710	0,0709	0,0737	0,00296
	17	0,4040	0,3867	0,3869	0,3869	0,3869	0,3869	0,3868	0,01721
	18	0,0741	0,0791	0,0756	0,0737	0,0737	0,0722	0,0749	0,00081
	20	0,9091	0,9088	0,9089	0,9091	0,9091	0,9091	0,9090	0,00010
	22	0,0185	0,0214	0,0205	0,0192	0,0187	0,0133	0,0186	0,00010

Conjunto Test	Salida								
	Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
	1	0,0320	0,0081	0,0325	0,0337	0,0184	0,0577	0,0301	0,00192
	2	0,0035	0,0057	0,0052	0,0160	0,0047	0,0045	0,0072	0,00370
	3	0,1313	0,0727	0,0736	0,1010	0,0820	0,0125	0,0684	0,06296
	4	0,0370	0,0722	0,0736	0,1005	0,1103	0,0311	0,0775	0,04051

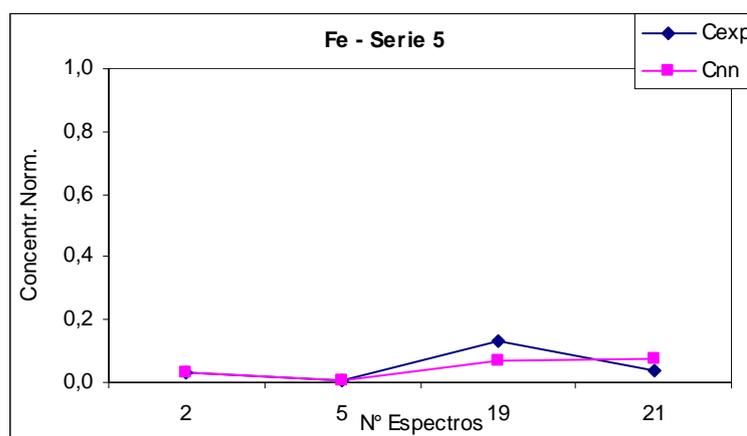


Figura 114. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Fe en el conjunto de Test

Tabla 69. Resultados obtenidos en la Serie I para el Zn

Zinc - Zn		Serie I							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,2121	0,2197	0,2121	0,2121	0,2121	0,1955	0,2103	0,00182	
3	0,0295	0,0212	0,0015	0,0303	0,0303	0,0303	0,0227	0,00682	
4	0,0212	0,0242	0,0197	0,0205	0,0212	0,0129	0,0197	0,00152	
5	0,0083	0,0227	0,0091	0,0076	0,0000	0,0121	0,0103	0,00197	
6	0,0311	0,0273	0,0311	0,0311	0,0311	0,0326	0,0306	0,00045	
7	0,0008	0,0220	0,0045	0,0030	0,0015	0,0068	0,0076	0,00682	
9	0,2803	0,2765	0,2803	0,2803	0,2803	0,2811	0,2797	0,00061	
10	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1720	0,1556	0,00409	
11	0,0985	0,0977	0,0985	0,0985	0,0977	0,0985	0,0982	0,00030	
13	0,2652	0,2856	0,2652	0,2652	0,2652	0,2667	0,2695	0,00439	
15	0,2273	0,2038	0,2273	0,2273	0,2273	0,2265	0,2224	0,00485	
16	0,1970	0,1992	0,1977	0,1970	0,1970	0,1962	0,1974	0,00045	
17	0,9091	0,8924	0,9053	0,9068	0,9076	0,9030	0,9030	0,00606	
18	0,0500	0,0508	0,0500	0,0500	0,0500	0,0500	0,0502	0,00015	
19	0,4848	0,4833	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4845	0,00030	
20	0,4318	0,4189	0,4318	0,4318	0,4318	0,4318	0,4292	0,00258	
21	0,0485	0,0886	0,0492	0,0485	0,0485	0,0485	0,0567	0,00818	
22	0,1136	0,0371	0,1136	0,1136	0,1136	0,1091	0,0974	0,01621	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
2	0,4394	0,2280	0,2826	0,5924	0,6644	0,9083	0,5352	0,09576	
8	0,0250	0,0235	0,0235	0,0409	0,0000	0,0129	0,0202	0,00485	
12	0,1364	0,0470	0,1841	0,1879	0,3470	0,1189	0,1770	0,04061	
14	0,0674	0,4303	0,2318	0,6432	0,0417	0,1114	0,2917	0,22424	

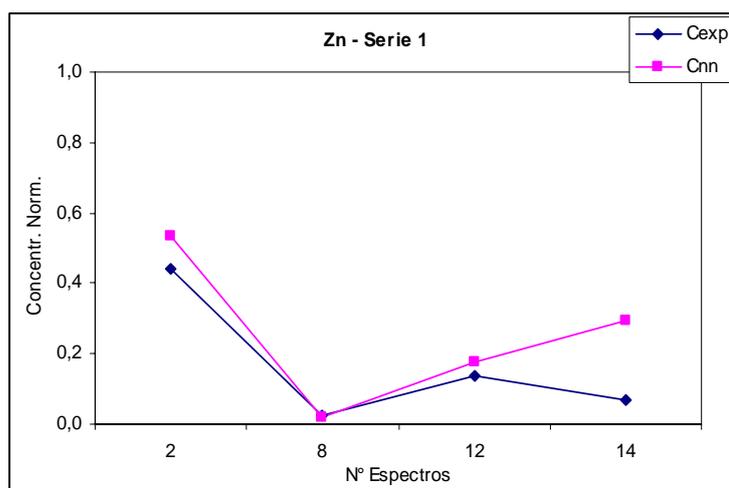


Figura 115. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Zn en el conjunto de Test

Tabla 70. Resultados obtenidos en la Serie II para el Zn

Zinc - Zn		Serie II								
Conjunto Entrenamiento		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
2	0,4394	0,4371	0,4364	0,4364	0,4364	0,4364	0,4365	0,00288		
3	0,0295	0,0280	0,0538	0,0280	0,0227	0,0402	0,0345	0,00500		
4	0,0212	0,0258	0,0538	0,0250	0,0235	0,0250	0,0306	0,00939		
5	0,0083	0,0023	0,0129	0,0098	0,0235	0,0129	0,0123	0,00394		
6	0,0311	0,0265	0,0273	0,0311	0,0205	0,0318	0,0274	0,00364		
8	0,0250	0,0280	0,0250	0,0242	0,0280	0,0220	0,0255	0,00045		
9	0,2803	0,2780	0,2795	0,2803	0,2803	0,2795	0,2795	0,00076		
10	0,1515	0,1417	0,1530	0,1530	0,1515	0,1568	0,1512	0,00030		
12	0,1364	0,1485	0,1371	0,1364	0,1371	0,1341	0,1386	0,00227		
13	0,2652	0,2667	0,2652	0,2652	0,2652	0,2833	0,2691	0,00394		
14	0,0674	0,0689	0,0682	0,0674	0,0644	0,0530	0,0644	0,00303		
15	0,2273	0,2258	0,2273	0,2265	0,2273	0,2114	0,2236	0,00364		
16	0,1970	0,1970	0,1970	0,1970	0,1992	0,1977	0,1976	0,00061		
18	0,0500	0,0492	0,0500	0,0508	0,0015	0,0621	0,0427	0,00727		
19	0,4848	0,4841	0,4848	0,4848	0,4841	0,4841	0,4844	0,00045		
20	0,4318	0,4318	0,4318	0,4326	0,4311	0,4273	0,4309	0,00091		
21	0,0485	0,0508	0,0477	0,0492	0,0500	0,0530	0,0502	0,00167		
22	0,1136	0,1129	0,0561	0,1114	0,1129	0,1083	0,1003	0,01333		

Conjunto Test		Salida								
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl		
1	0,2121	0,1250	0,0833	0,2614	0,1515	0,1621	0,1567	0,05545		
7	0,0008	0,0053	0,0054	0,0197	0,0033	0,0020	0,0071	0,00636		
11	0,0985	0,0674	0,0553	0,0629	0,0591	0,1326	0,0755	0,02303		
17	0,9091	0,1152	0,0705	0,1129	0,0424	0,0811	0,0844	0,82470		

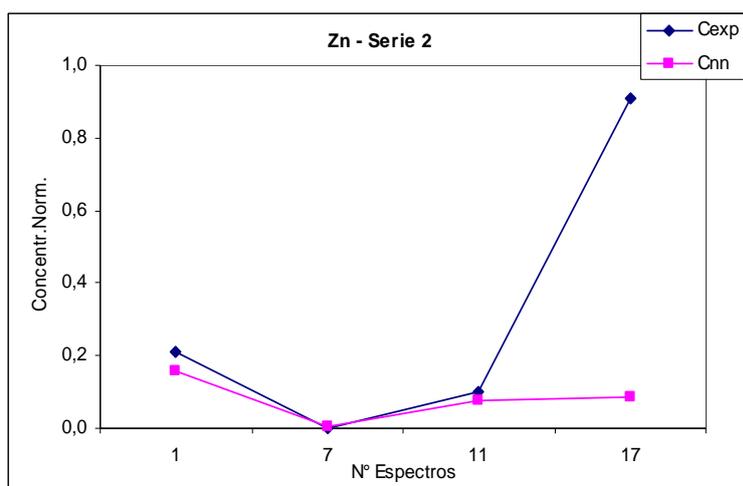


Figura 116. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Zn en el conjunto de Test

Tabla 71. Resultados obtenidos en la Serie III para el Zn

Zinc - Zn		Serie III							
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
1	0,2121	0,2174	0,2121	0,2189	0,2121	0,1318	0,1985	0,01364	
2	0,4394	0,4364	0,4371	0,4364	0,4371	0,4311	0,4356	0,00379	
4	0,0212	0,0447	0,0129	0,0068	0,0212	0,0091	0,0189	0,00227	
5	0,0083	0,0394	0,0144	0,0076	0,0189	0,0061	0,0173	0,00894	
6	0,0311	0,0447	0,0144	0,0348	0,0303	0,0258	0,0300	0,00106	
7	0,0008	0,0439	0,0136	0,0417	0,0053	0,0182	0,0245	0,02379	
8	0,0250	0,0409	0,0159	0,0227	0,0242	0,0318	0,0271	0,00212	
11	0,0985	0,0424	0,1015	0,0750	0,1030	0,0788	0,0802	0,01833	
12	0,1364	0,1280	0,1295	0,1371	0,1455	0,2030	0,1486	0,01227	
14	0,0674	0,0674	0,0667	0,0841	0,0886	0,0644	0,0742	0,00682	
15	0,2273	0,2295	0,2265	0,1417	0,1803	0,2129	0,1982	0,02909	
16	0,1970	0,1977	0,1970	0,3227	0,3227	0,2159	0,2512	0,05424	
17	0,9091	0,8985	0,8992	0,8727	0,8955	0,8947	0,8921	0,01697	
18	0,0500	0,0492	0,0576	0,0864	0,0515	0,0455	0,0580	0,00803	
19	0,4848	0,4833	0,4841	0,4841	0,4841	0,4652	0,4802	0,00470	
20	0,4318	0,4318	0,4311	0,2985	0,3015	0,4076	0,3741	0,05773	
21	0,0485	0,0462	0,0492	0,1159	0,0932	0,1197	0,0848	0,03636	
22	0,1136	0,0576	0,1167	0,0068	0,1038	0,1114	0,0792	0,03439	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI	
3	0,0295	0,0424	0,0697	0,0682	0,0227	0,0227	0,0452	0,01561	
9	0,2803	0,2523	0,4364	0,3583	0,3811	0,4682	0,3792	0,09894	
10	0,1515	0,2492	0,1364	0,2098	0,3129	0,1326	0,2082	0,05667	
13	0,2652	0,2295	0,2917	0,2561	0,2144	0,2864	0,2556	0,00955	

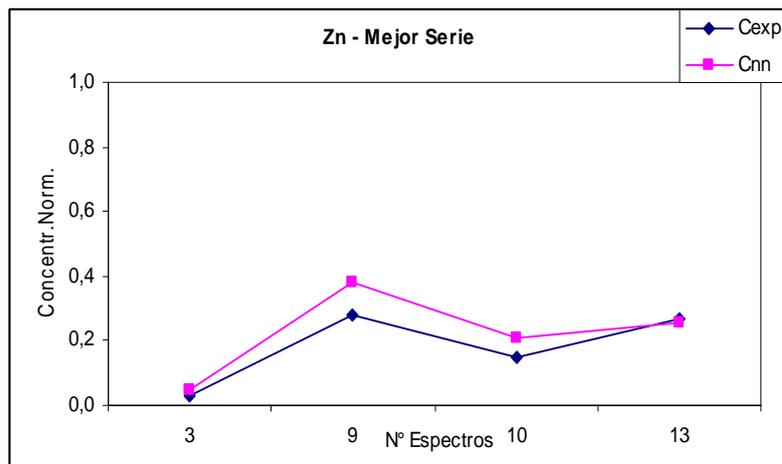


Figura 117. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Zn en el conjunto de Test

Tabla 72. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Zn

Zinc - Zn		Serie IV						
Conjunto Entrenamiento		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
1	0,2121	0,2144	0,2144	0,2114	0,2121	0,2121	0,2129	0,00076
2	0,4394	0,4348	0,4364	0,4364	0,4364	0,4364	0,4361	0,00333
3	0,0295	0,0318	0,0303	0,0303	0,0326	0,0295	0,0309	0,00136
5	0,0083	0,0318	0,0030	0,0356	0,0348	0,0091	0,0229	0,01455
7	0,0008	0,0318	0,0038	0,0356	0,0348	0,0106	0,0233	0,02258
8	0,0250	0,0318	0,0250	0,0356	0,0348	0,0197	0,0294	0,00439
9	0,2803	0,2826	0,2803	0,2803	0,2795	0,2795	0,2805	0,00015
10	0,1515	0,1515	0,1447	0,1515	0,1515	0,1530	0,1505	0,00106
11	0,0985	0,0985	0,0970	0,0977	0,0985	0,0985	0,0980	0,00045
12	0,1364	0,1235	0,1424	0,1364	0,1364	0,1333	0,1344	0,00197
13	0,2652	0,2765	0,2652	0,2758	0,2652	0,2303	0,2626	0,00258
14	0,0674	0,0652	0,0697	0,0742	0,0674	0,0674	0,0688	0,00136
15	0,2273	0,1917	0,2258	0,1523	0,2265	0,2288	0,2050	0,02227
16	0,1970	0,2045	0,1970	0,1977	0,1977	0,2311	0,2056	0,00864
17	0,9091	0,8788	0,8985	0,8985	0,9038	0,9045	0,8968	0,01227
19	0,4848	0,4894	0,4841	0,4841	0,4848	0,4848	0,4855	0,00061
21	0,0485	0,0856	0,0485	0,1197	0,0545	0,0485	0,0714	0,02288
22	0,1136	0,0318	0,1144	0,0356	0,0356	0,1894	0,0814	0,03227

Conjunto Test		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-CnnI
4	0,0212	0,0318	0,0288	0,0356	0,0348	0,0114	0,0285	0,00727
6	0,0311	0,0326	0,0402	0,0356	0,0379	0,0205	0,0333	0,00227
18	0,0500	0,3030	0,0455	0,4591	0,0773	0,4386	0,2647	0,21470
20	0,4318	0,3447	0,2644	0,4977	0,3265	0,2318	0,3330	0,09879

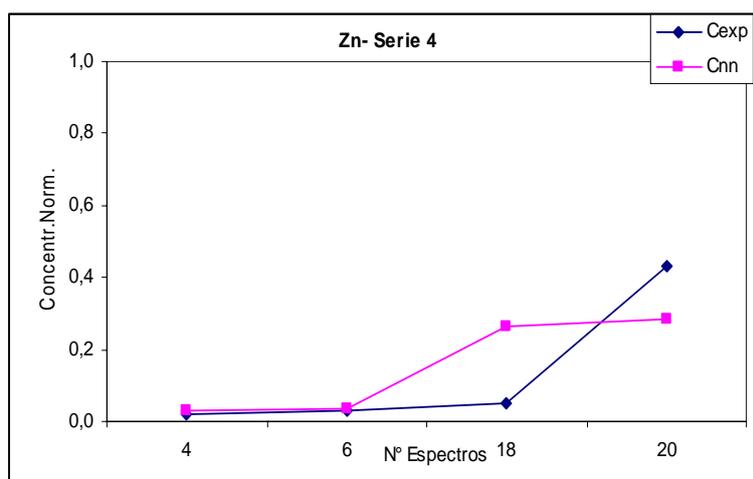


Figura 118. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Zn en el conjunto de Test

Tabla 73. Resultados obtenidos en la Serie V para el Zn

Zinc - Zn		Serie V						
Conjunto Entrenamiento		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl
1	0,2121	0,1939	0,2129	0,2121	0,2121	0,2121	0,2086	0,00348
3	0,0295	0,0318	0,0280	0,0371	0,0295	0,0295	0,0312	0,00167
4	0,0212	0,0152	0,0265	0,0129	0,0098	0,0167	0,0162	0,00500
6	0,0311	0,0167	0,0295	0,0333	0,0295	0,0318	0,0282	0,00288
7	0,0008	0,0121	0,0038	0,0121	0,0091	0,0053	0,0085	0,00773
8	0,0250	0,0311	0,0265	0,0144	0,0280	0,0250	0,0250	0,00000
9	0,2803	0,1955	0,2795	0,2795	0,2803	0,2803	0,2630	0,01727
10	0,1515	0,1955	0,1508	0,1515	0,1523	0,1515	0,1603	0,00879
11	0,0985	0,0977	0,0985	0,0962	0,0985	0,0992	0,0980	0,00045
12	0,1364	0,1947	0,1371	0,1371	0,1364	0,1364	0,1483	0,01197
13	0,2652	0,2659	0,2674	0,2659	0,2659	0,2773	0,2685	0,00333
14	0,0674	0,0674	0,0674	0,0659	0,0674	0,0674	0,0671	0,00030
15	0,2273	0,2273	0,2273	0,2273	0,2273	0,2205	0,2259	0,00136
16	0,1970	0,1977	0,1977	0,1970	0,1970	0,1939	0,1967	0,00030
17	0,9091	0,9068	0,9023	0,9045	0,9038	0,9045	0,9044	0,00470
18	0,0500	0,0508	0,0477	0,0500	0,0508	0,0508	0,0500	0,00000
20	0,4318	0,4318	0,4311	0,4318	0,4318	0,4288	0,4311	0,00076
22	0,1136	0,1129	0,1114	0,1129	0,1136	0,1129	0,1127	0,00091

Conjunto Test		Salida						
Muestras	Cexp	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	Cnn-Media	ICexp-Cnnl
2	0,4394	0,1955	0,5644	0,3091	0,2750	0,1977	0,3083	0,13106
5	0,0083	0,0114	0,0167	0,0121	0,0083	0,0015	0,0100	0,00167
19	0,4848	0,6977	0,2076	0,0023	0,7311	0,5962	0,4470	0,03788
21	0,0485	0,3985	0,1659	0,0098	0,3386	0,3894	0,2605	0,21197

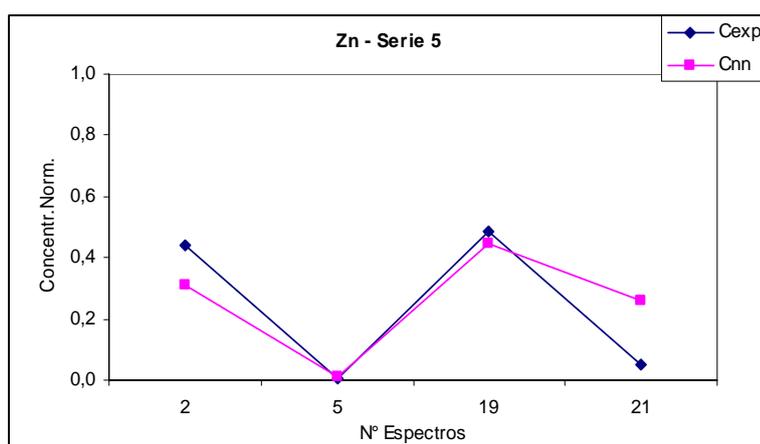


Figura 119. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie V para el Zn en el conjunto de Test



## **A. 2) RESULTADOS DE SERIES EJECUTADAS POR LOS SNs EN ANALISIS DE AEROSOLES**

En las páginas siguientes, se muestran todos los resultados obtenidos en las ejecuciones de las 5 series de los SNs, utilizados para el análisis de Aerosoles de polución en Santiago de Chile.

Para cada elemento en estudio, y cada serie ejecutada, se muestra una tabla con las salidas de las 5 RNs integrantes del SN, y la salida del propio SN (en nuestro caso, la media de las salidas de las 5 RNs). Se incluyen las salidas esperadas (datos experimentales obtenidos con el proceso PIXE clásico) y se comparan las salidas esperadas y las calculadas por el SN. Cada fila de la tabla recoge la salida correspondiente para un ejemplo, separando los ejemplos usados para el entrenamiento y los correspondientes al conjunto de test.

Además, para cada elemento y serie ejecutada, se incluye un gráfico comparativo entre salidas esperadas y calculadas, para los ejemplos de test.

Tabla 74. Resultados obtenidos en la Serie I para el Al en aerosoles

Elemento Aluminio - Al		Salida							IC <sub>exp-Cnnl</sub>
Conjunto Entrenamiento		C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	C <sub>nn-Media</sub>	
Muestras									
1		0,0535	0,0533	0,0539	0,0535	0,0534	0,0535	0,0535	0,00003
2		0,2852	0,2851	0,2851	0,2852	0,2852	0,2852	0,2851	0,00007
3		0,3387	0,3389	0,3388	0,3386	0,3386	0,3386	0,3387	0,00005
4		0,4278	0,4282	0,4271	0,4279	0,4278	0,4278	0,4278	0,00005
5		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
7		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
9		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
10		0,7487	0,7483	0,7486	0,7486	0,7486	0,7487	0,7485	0,00011
11		0,1248	0,1251	0,1249	0,1248	0,1248	0,1248	0,1249	0,00013
13		0,4991	0,4992	0,4989	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,00005
14		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
15		0,6774	0,6776	0,6777	0,6774	0,6774	0,6774	0,6775	0,00014
16		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
17		0,9091	0,9058	0,8984	0,9068	0,9070	0,9072	0,9050	0,00405
18		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
19		0,3565	0,3561	0,3571	0,3565	0,3565	0,3566	0,3566	0,00005
20		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
22		0,1604	0,1517	0,1515	0,1516	0,1516	0,1516	0,1516	0,00884
23		0,0232	0,0248	0,0249	0,0246	0,0245	0,0243	0,0246	0,00147
25		0,0642	0,0632	0,0629	0,0639	0,0639	0,0640	0,0636	0,00061
26		0,1087	0,1024	0,1085	0,1084	0,1085	0,1086	0,1073	0,00146
27		0,0856	0,0930	0,0853	0,0859	0,0857	0,0857	0,0871	0,00158
29		0,0082	0,0102	0,0085	0,0076	0,0073	0,0071	0,0082	0,00004
30		0,0137	0,0134	0,0082	0,0147	0,0149	0,0150	0,0132	0,00049
31		0,0050	0,0105	0,0082	0,0076	0,0073	0,0071	0,0081	0,00315
33		0,0196	0,0147	0,0195	0,0161	0,0163	0,0167	0,0167	0,00294
34		0,0098	0,0105	0,0083	0,0100	0,0100	0,0100	0,0098	0,00002
35		0,0109	0,0129	0,0140	0,0118	0,0115	0,0113	0,0123	0,00143
37		0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,00011
Conjunto Test		Salida							IC <sub>exp-Cnnl</sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	C <sub>nn-Media</sub>		
6	0,8734	0,7423	0,7449	0,7481	0,7479	0,7481	0,7463	0,12700	
8	0,6774	0,7777	0,7201	0,7893	0,7900	0,7913	0,7737	0,09630	
12	0,4456	0,6819	0,7565	0,6851	0,6867	0,6878	0,6996	0,25400	
21	0,5169	0,2735	0,2805	0,2756	0,2758	0,2760	0,2763	0,24100	
24	0,0321	0,0227	0,0201	0,0231	0,0231	0,0232	0,0224	0,00965	
28	0,0075	0,0100	0,0081	0,0077	0,0075	0,0072	0,0081	0,00061	
32	0,0130	0,0114	0,0082	0,0118	0,0119	0,0119	0,0110	0,00197	
36	0,0232	0,0165	0,0104	0,0151	0,0145	0,0140	0,0141	0,00907	

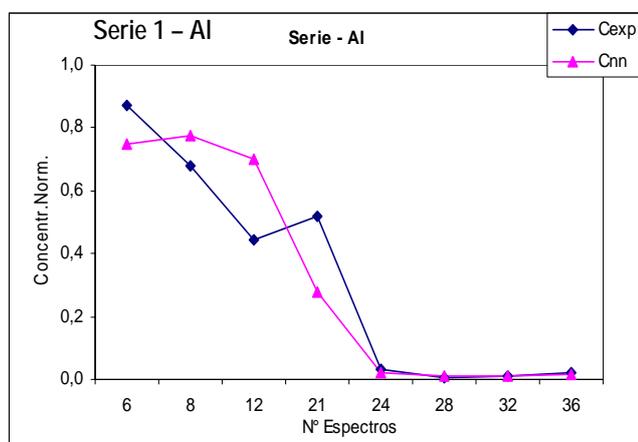


Figura 120. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie I para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 75. Resultados obtenidos en la Serie II para el Al en aerosoles

Elemento Aluminio - Al  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	Salida					$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,0535	0,0534	0,0534	0,0535	0,0535	0,0534	0,0535	0,00003
2	0,2852	0,2852	0,3208	0,2852	0,2852	0,2851	0,2923	0,00710
3	0,3387	0,3387	0,3386	0,3386	0,3387	0,3386	0,3386	0,00005
5	0,0000	0,0000	0,0001	0,0002	0,0001	0,0002	0,0001	0,00012
6	0,8734	0,8734	0,8738	0,8738	0,8735	0,8730	0,8735	0,00007
7	0,0000	0,0000	0,0001	0,0004	0,0001	0,0002	0,0002	0,00017
9	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,00010
10	0,7487	0,7486	0,7486	0,7486	0,7486	0,7487	0,7486	0,00004
12	0,4456	0,4457	0,4457	0,4457	0,4456	0,4458	0,4457	0,00004
13	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4990	0,4990	0,4991	0,00005
14	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,00010
15	0,6774	0,6774	0,6773	0,6773	0,6775	0,6775	0,6774	0,00004
16	0,0000	0,0000	0,0001	0,0002	0,0001	0,0000	0,0001	0,00008
17	0,9091	0,9074	0,9046	0,9058	0,9059	0,9059	0,9059	0,00317
18	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000	0,00005
19	0,3565	0,3566	0,3209	0,3566	0,3565	0,3565	0,3494	0,00710
20	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0001	0,0000	0,0000	0,00005
22	0,1604	0,1516	0,1516	0,1516	0,1515	0,1515	0,1516	0,00887
23	0,0232	0,0232	0,0232	0,0227	0,0270	0,0251	0,0242	0,00105
24	0,0321	0,0319	0,0324	0,0322	0,0263	0,0309	0,0307	0,00136
26	0,1087	0,1087	0,1087	0,1088	0,1088	0,1087	0,1087	0,00001
28	0,0075	0,0048	0,0122	0,0067	0,0075	0,0069	0,0076	0,00014
29	0,0082	0,0092	0,0122	0,0088	0,0089	0,0082	0,0095	0,00128
30	0,0137	0,0001	0,0120	0,0142	0,0150	0,0143	0,0111	0,00258
31	0,0050	0,0061	0,0124	0,0033	0,0053	0,0054	0,0065	0,00151
33	0,0196	0,0197	0,0119	0,0187	0,0192	0,0196	0,0178	0,00176
34	0,0098	0,0002	0,0121	0,0110	0,0072	0,0088	0,0078	0,00196
36	0,0232	0,0232	0,0144	0,0235	0,0248	0,0234	0,0219	0,00132
37	0,0000	0,0000	0,0001	0,0003	0,0001	<u>0,0002</u>	0,0001	0,00014

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	Salida					$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
4	0,4278	0,4044	0,3173	0,1839	0,0465	0,4056	0,2716	0,15600
8	0,6774	0,8848	0,8770	0,8865	0,8849	0,8774	0,8821	0,20500
11	0,1248	0,2586	0,3211	0,2595	0,2752	0,1735	0,2576	0,13300
21	0,5169	0,2762	0,3210	0,2934	0,2782	0,2797	0,2897	0,22700
25	0,0642	0,0715	0,0163	0,0094	0,0436	0,0665	0,0414	0,02270
27	0,0856	0,4122	0,1192	0,2902	0,1088	0,0380	0,1937	0,10800
32	0,0130	0,0003	0,0120	0,0152	0,0114	0,0148	0,0107	0,00228
35	0,0109	0,0138	0,0153	0,0393	0,0249	0,0205	0,0228	0,01190

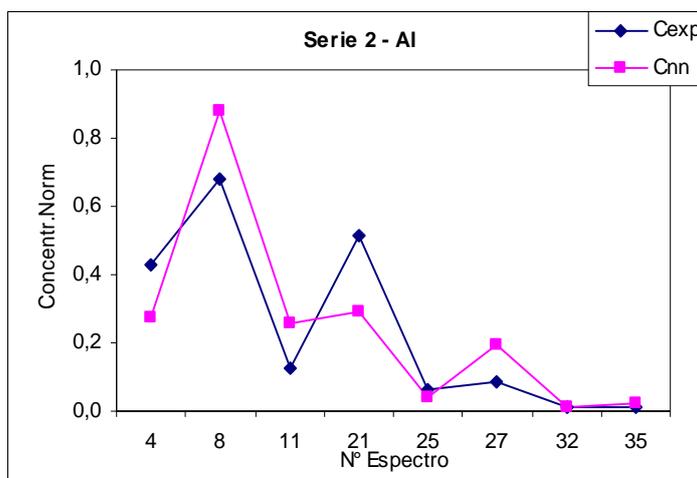


Figura 121. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie II para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 76. Resultados obtenidos en la Serie III para el AI en aerosoles

Elemento Aluminio - AI  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
				RN3	RN4	RN5		
1	0,0535	0,0535	0,0234	0,0535	0,0535	0,0535	0,0474	0,00604
2	0,2852	0,2851	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,00004
4	0,4278	0,4278	0,4278	0,4278	0,4278	0,4278	0,4278	0,00000
5	0,0000	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,00018
7	0,0000	0,0000	0,0003	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,00018
8	0,6774	0,6775	0,6774	0,6774	0,6771	0,6774	0,6774	0,00002
9	0,0000	0,0000	0,0000	0,0003	0,0007	0,0002	0,0002	0,00024
10	0,7487	0,7485	0,7486	0,7486	0,7487	0,7487	0,7486	0,00003
12	0,4456	0,4456	0,4456	0,4457	0,4457	0,4456	0,4456	0,00000
13	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,00003
14	0,0000	0,0000	0,0006	0,0001	0,0001	0,0003	0,0002	0,00022
15	0,6774	0,6773	0,6773	0,6774	0,6776	0,6774	0,6774	0,00003
16	0,0000	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,00018
17	0,9091	0,9043	0,9054	0,9056	0,9055	0,9055	0,9053	0,00381
18	0,0000	0,0005	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,00024
20	0,0000	0,0000	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0001	0,00014
21	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5170	0,5168	0,5169	0,00003
22	0,1604	0,1515	0,1515	0,1516	0,1516	0,1516	0,1516	0,00888
23	0,0232	0,0238	0,0264	0,0233	0,0290	0,0233	0,0252	0,00198
24	0,0321	0,0314	0,0322	0,0321	0,0261	0,0320	0,0307	0,00134
25	0,0642	0,0643	0,0237	0,0642	0,0638	0,0641	0,0560	0,00817
27	0,0856	0,0855	0,0855	0,0855	0,0856	0,0855	0,0856	0,00000
29	0,0082	0,0108	0,0234	0,0099	0,0072	0,0087	0,0120	0,00381
30	0,0137	0,0097	0,0234	0,0099	0,0129	0,0127	0,0137	0,00001
31	0,0050	0,0098	0,0234	0,0100	0,0058	0,0035	0,0105	0,00550
32	0,0130	0,0099	0,0234	0,0099	0,0125	0,0126	0,0137	0,00065
34	0,0098	0,0096	0,0234	0,0099	0,0116	0,0112	0,0131	0,00332
36	0,0232	0,0228	0,0233	0,0231	0,0232	0,0233	0,0231	0,00004
37	0,0000	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0004	0,0002	0,00022

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
				RN3	RN4	RN5		
3	0,3387	0,3997	0,7274	0,5483	0,6589	0,6753	0,6019	0,26300
6	0,8734	0,6984	0,6938	0,6967	0,6740	0,6824	0,6891	0,18400
11	0,1248	0,2586	0,3211	0,2595	0,2752	0,1735	0,2576	0,13300
19	0,3565	0,0390	0,0572	0,4711	0,1636	0,3726	0,2207	0,13600
26	0,1087	0,1119	0,0291	0,0470	0,0733	0,0648	0,0652	0,04350
28	0,0075	0,0099	0,0234	0,0099	0,0086	0,0079	0,0120	0,00447
33	0,0196	0,0123	0,0234	0,0099	0,0135	0,0129	0,0144	0,00524
35	0,0109	0,0138	0,0233	0,0349	0,0020	0,0082	0,0165	0,00558

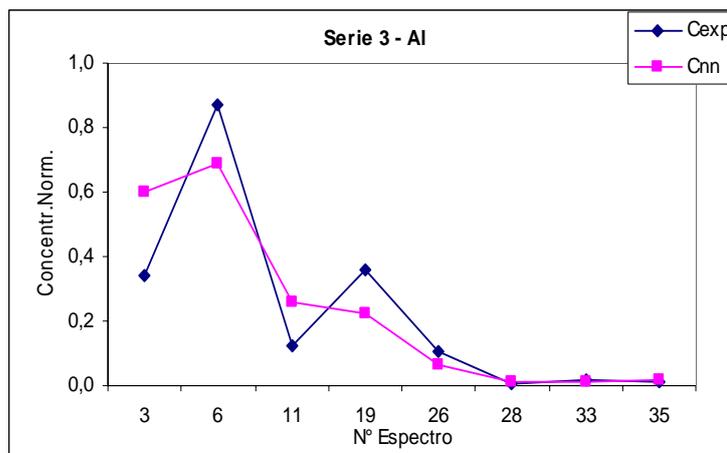


Figura 122. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie III para el AI en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 77. Resultados obtenidos en la Serie IV para el AI en aerosoles

Elemento Aluminio - AI  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	Salida					$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,0535	0,0535	0,0535	0,0535	0,0534	0,0534	0,0535	0,00001
3	0,3387	0,3387	0,3386	0,3386	0,3386	0,3387	0,3387	0,00003
5	0,0000	0,0005	0,0001	0,0002	0,0005	0,0001	0,0003	0,00028
6	0,8734	0,8735	0,8733	0,8735	0,8733	0,8715	0,8730	0,00041
7	0,0000	0,0000	0,0002	0,0001	0,0004	0,0002	0,0002	0,00018
8	0,6774	0,6773	0,6774	0,6773	0,6774	0,6775	0,6774	0,00002
9	0,0000	0,0005	0,0001	0,0003	0,0003	0,0006	0,0004	0,00036
11	0,1248	0,1248	0,1248	0,1248	0,1248	0,1251	0,1249	0,00009
12	0,4456	0,4456	0,4456	0,4457	0,4456	0,4460	0,4457	0,00006
13	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4991	0,4990	0,4991	0,00003
14	0,0000	0,0005	0,0001	0,0001	0,0004	0,0002	0,0003	0,00026
16	0,0000	0,0002	0,0001	0,0007	0,0001	0,0002	0,0003	0,00026
18	0,0000	0,0005	0,0000	0,0006	0,0004	0,0002	0,0003	0,00034
20	0,0000	0,0005	0,0001	0,0001	0,0004	0,0001	0,0001	0,00010
21	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,00003
22	0,1604	0,1515	0,1516	0,1516	0,1515	0,1512	0,1515	0,00896
23	0,0232	0,0283	0,0242	0,0259	0,0277	0,0232	0,0259	0,00268
24	0,0321	0,0269	0,0321	0,0297	0,0275	0,0317	0,0296	0,00251
25	0,0642	0,0640	0,0642	0,0642	0,0642	0,0637	0,0640	0,00012
27	0,0856	0,0853	0,0856	0,0856	0,0856	0,0855	0,0855	0,00007
28	0,0075	0,0062	0,0069	0,0087	0,0079	0,0099	0,0079	0,00042
29	0,0082	0,0114	0,0076	0,0069	0,0086	0,0099	0,0089	0,00068
30	0,0137	0,0132	0,0148	0,0120	0,0118	0,0101	0,0124	0,00131
31	0,0050	0,0047	0,0066	0,0054	0,0041	0,0102	0,0062	0,00121
32	0,0130	0,0134	0,0145	0,0132	0,0126	0,0099	0,0127	0,00029
33	0,0196	0,0202	0,0199	0,0195	0,0196	0,0100	0,0178	0,00176
35	0,0109	0,0115	0,0127	0,0119	0,0110	0,0183	0,0131	0,00221
36	0,0232	0,0223	0,0195	0,0225	0,0232	0,0179	0,0211	0,00208
37	0,0000	0,0005	0,0007	0,0000	0,0004	0,0002	0,0004	0,00036

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	Salida					$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
2	0,2852	0,5573	0,5201	0,5167	0,4775	0,6825	0,5508	0,26600
4	0,4278	0,8020	0,6715	0,4992	0,8075	0,8769	0,7314	0,30400
10	0,7487	0,5940	0,8841	0,8218	0,7921	0,8944	0,7973	0,04860
15	0,6774	0,5640	0,8822	0,8560	0,0360	0,8392	0,6354	0,04190
17	0,9091	0,4385	0,3186	0,6511	0,4343	0,2222	0,4129	0,49600
19	0,3565	0,7017	0,3277	0,5071	0,8091	0,0346	0,4760	0,12000
26	0,1087	0,0392	0,0853	0,0521	0,0977	0,0281	0,0605	0,04830
30	0,0137	0,0132	0,0148	0,0120	0,0118	0,0101	0,0124	0,00131

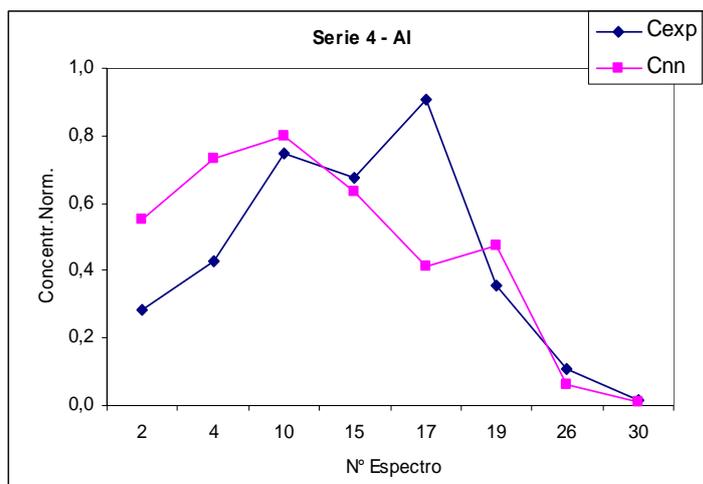


Figura 123. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie IV para el AI en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 78. Resultados obtenidos en la Serie V para el Al en aerosoles

Elemento Aluminio - Al									
Conjunto Entrenamiento		Salida							
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-CnnI</sub>	
2	0,2852	0,2854	0,2851	0,2851	0,2852	0,2852	0,2852	0,00001	
3	0,3387	0,3386	0,3386	0,3386	0,3386	0,3386	0,3386	0,00004	
4	0,4278	0,4279	0,4279	0,4278	0,4278	0,4278	0,4279	0,00004	
5	0,0000	0,0002	0,0006	0,0000	0,0002	0,0003	0,0003	0,00026	
6	0,8734	0,8735	0,8735	0,8736	0,8735	0,8736	0,8735	0,00009	
7	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0004	0,0005	0,0002	0,00024	
8	0,6774	0,6774	0,6774	0,6774	0,6774	0,6774	0,6774	0,00003	
9	0,0000	0,0001	0,0003	0,0001	0,0004	0,0001	0,0002	0,00020	
10	0,7487	0,7485	0,7485	0,7486	0,7486	0,7485	0,7486	0,00010	
11	0,1248	0,1246	0,1248	0,1248	0,1248	0,1248	0,1248	0,00000	
14	0,0000	0,0005	0,0001	0,0003	0,0002	0,0004	0,0003	0,00030	
15	0,6774	0,6773	0,6774	0,6773	0,6774	0,6774	0,6774	0,00000	
16	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0003	0,0002	0,00016	
17	0,9091	0,9059	0,9079	0,9068	0,9074	0,9061	0,9068	0,00227	
18	0,0000	0,0002	0,0000	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,00014	
19	0,3565	0,3564	0,3566	0,3566	0,3566	0,3565	0,3565	0,00003	
20	0,0000	0,0001	0,0004	0,0001	0,0003	0,0003	0,0002	0,00024	
21	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,5169	0,00003	
22	0,1604	0,1517	0,1515	0,1516	0,1516	0,1515	0,1516	0,00886	
24	0,0321	0,0321	0,0321	0,0301	0,0323	0,0321	0,0317	0,00036	
26	0,1087	0,1088	0,1087	0,1086	0,1087	0,1087	0,1087	0,00001	
27	0,0856	0,0855	0,0855	0,0857	0,0855	0,0855	0,0855	0,00004	
28	0,0075	0,0078	0,0075	0,0075	0,0115	0,0101	0,0089	0,00137	
30	0,0137	0,0147	0,0145	0,0147	0,0145	0,0119	0,0141	0,00033	
32	0,0130	0,0132	0,0132	0,0122	0,0133	0,0123	0,0128	0,00019	
33	0,0196	0,0178	0,0196	0,0195	0,0197	0,0200	0,0193	0,00030	
35	0,0109	0,0093	0,0162	0,0195	0,0145	0,0112	0,0142	0,00328	
36	0,0232	0,0235	0,0175	0,0163	0,0153	0,0232	0,0192	0,00401	
37	0,0000	0,0001	0,0007	0,0001	0,0002	0,0003	0,0003	0,00028	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-CnnI</sub>	
1	0,0535	0,0908	0,0908	0,0473	0,0739	0,0899	0,0786	0,02510	
12	0,4456	0,5252	0,6250	0,6297	0,5798	0,2293	0,5178	0,07210	
13	0,4991	0,2131	0,4570	0,4820	0,6065	0,3329	0,4183	0,08080	
23	0,0232	0,0282	0,0243	0,0376	0,0140	0,0008	0,0210	0,00217	
25	0,0642	0,0859	0,0089	0,1217	0,0135	0,0553	0,0571	0,00710	
29	0,0082	0,0011	0,0084	0,0082	0,0116	0,0119	0,0082	0,00003	
31	0,0050	0,0502	0,0047	0,0079	0,0113	0,0096	0,0167	0,01170	
34	0,0098	0,0012	0,0110	0,0073	0,0123	0,0100	0,0084	0,00143	

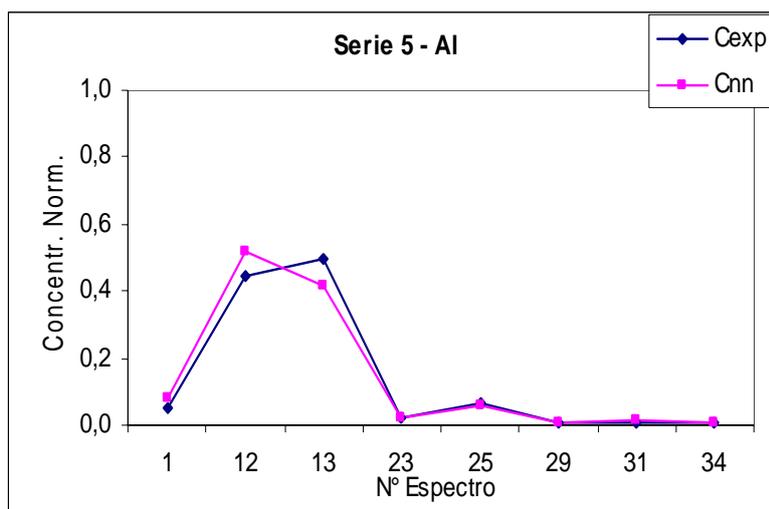


Figura 124. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (S<sub>nn</sub>) en la Serie V para el Al en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 79. Resultados obtenidos en la Serie I para el Si en aerosoles

Elemento Silicio - Si		Salida					C <sub>nn</sub> -Media	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
Muestras	C <sub>exp</sub>							
1	0,0526	0,0538	0,0526	0,0526	0,0519	0,0532	0,0528	0,00025
2	0,3092	0,3089	0,3092	0,3067	0,3089	0,3092	0,3086	0,00062
3	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,00000
4	0,3927	0,3921	0,3930	0,4014	0,3933	0,3927	0,3945	0,00179
5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1054	0,1052	0,00006
7	0,0495	0,0489	0,0492	0,0495	0,0473	0,0495	0,0489	0,00062
9	0,1670	0,1685	0,1670	0,1667	0,1620	0,1670	0,1662	0,00074
10	0,7823	0,7826	0,7823	0,7823	0,7823	0,7823	0,7824	0,00006
11	0,1391	0,1289	0,1388	0,1419	0,1543	0,1339	0,1396	0,00043
13	0,4329	0,4329	0,4329	0,4270	0,4326	0,4329	0,4317	0,00124
14	0,0464	0,0458	0,0464	0,0464	0,0470	0,0464	0,0464	0,00000
15	0,5844	0,5850	0,5844	0,5847	0,5847	0,5844	0,5847	0,00025
16	0,1206	0,1425	0,1206	0,1209	0,1299	0,1246	0,1277	0,00711
17	0,9091	0,8986	0,9048	0,9057	0,9026	0,9051	0,9033	0,00575
18	0,1082	0,1095	0,1085	0,1073	0,1082	0,1076	0,1082	0,00000
19	0,4267	0,4264	0,4264	0,4261	0,4267	0,4267	0,4265	0,00025
20	0,1608	0,1453	0,1611	0,1592	0,1422	0,1623	0,1541	0,00674
22	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0863	0,0866	0,0865	0,00006
23	0,0015	0,1923	0,2542	0,2696	0,1531	0,3098	0,2358	0,23400
25	0,0402	0,0421	0,0464	0,0464	0,0479	0,0464	0,0458	0,00563
26	0,0464	0,0411	0,0371	0,0371	0,0346	0,0371	0,0374	0,00897
27	0,0371	0,0049	0,0043	0,0040	0,0053	0,0043	0,0046	0,03250
29	0,0037	0,0068	0,0071	0,0074	0,0096	0,0065	0,0075	0,00377
30	0,0068	0,0022	0,0019	0,0040	0,0025	0,0043	0,0030	0,00383
31	0,0015	0,0037	0,0056	0,0043	0,0056	0,0043	0,0047	0,00315
33	0,0071	0,0043	0,0056	0,0046	0,0059	0,0046	0,0050	0,00210
34	0,0043	0,0167	0,0000	0,0130	0,0118	0,0124	0,0108	0,00643
35	0,0009	0,0062	0,0133	0,0059	0,0031	0,0049	0,0067	0,00575
37	0,0059	0,0062	0,0133	0,0130	0,0118	0,0124	0,0113	0,00544
Conjunto Test		Salida					C <sub>nn</sub> -Media	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
6	0,7792	0,8769	0,8794	0,8704	0,8810	0,8643	0,8744	9,52E-02
8	0,5226	0,8871	0,8568	0,9038	0,8921	0,9029	0,8886	3,66E-01
12	0,4174	0,3108	0,3064	0,4561	0,4434	0,4471	0,3928	2,47E-02
21	0,5380	0,2335	0,4156	0,2780	0,3992	0,3942	0,3441	1,94E-01
24	0,2137	0,1923	0,2542	0,2696	0,1531	0,3098	0,2358	2,21E-02
28	0,0040	0,0049	0,0043	0,0040	0,0053	0,0043	0,0046	5,57E-04
32	0,0037	0,0037	0,0056	0,0043	0,0056	0,0043	0,0047	9,89E-04
36	0,0130	0,0167	0,0000	0,0133	0,0118	0,0124	0,0108	2,16E-03

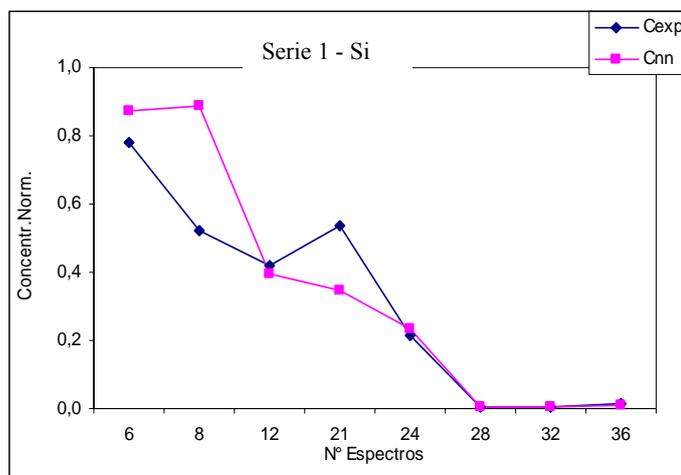


Figura 125. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (C<sub>nn</sub>) en la Serie I para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 80. Resultados obtenidos en la Serie II para el Si en aerosoles

Elemento Silicio - Si  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	C <sub>exp</sub>	Salida					C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
1	0,0526	0,1017	0,0204	0,0489	0,0996	0,0455	0,0632	1,06E-02
2	0,3092	0,3092	0,3092	0,3092	0,3089	0,3092	0,3092	6,18E-05
3	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2709	0,2721	0,2719	2,47E-04
5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1048	0,1051	0,1051	6,18E-05
6	0,7792	0,7792	0,7771	0,7792	0,7313	0,7805	0,7694	9,77E-03
7	0,0495	0,0495	0,0380	0,0442	0,0207	0,0455	0,0396	9,89E-03
9	0,1670	0,1017	0,1694	0,1682	0,0949	0,0455	0,1160	5,10E-02
10	0,7823	0,7823	0,7842	0,7829	0,8012	0,7811	0,7863	4,02E-03
12	0,4174	0,4174	0,4174	0,4174	0,4177	0,4174	0,4175	6,18E-05
13	0,4329	0,4329	0,4338	0,4329	0,4212	0,4329	0,4307	2,16E-03
14	0,0464	0,0464	0,0507	0,0501	0,0711	0,0458	0,0528	6,43E-03
15	0,5844	0,5844	0,5853	0,5850	0,6283	0,5844	0,5935	9,09E-03
16	0,1206	0,1017	0,1184	0,1197	0,0996	0,0455	0,0970	2,36E-02
17	0,9091	0,9066	0,9063	0,9035	0,8822	0,9069	0,9011	7,98E-03
18	0,1082	0,1017	0,0207	0,1175	0,0993	0,0455	0,0769	3,13E-02
19	0,4267	0,4267	0,4249	0,4261	0,4264	0,4267	0,4262	5,57E-04
20	0,1608	0,1017	0,1599	0,1543	0,0993	0,0455	0,1121	4,87E-02
22	0,0866	0,0866	0,0866	0,0857	0,0875	0,0866	0,0866	1,39E-17
23	0,0015	0,1017	0,0176	0,0019	0,0989	0,0455	0,0531	5,16E-02
24	0,2137	0,1014	0,1577	0,2424	0,0993	0,0455	0,1293	8,44E-02
26	0,0464	0,0464	0,0473	0,0464	0,0479	0,0464	0,0469	4,95E-04
28	0,0040	0,0087	0,0204	0,0043	0,0093	0,0455	0,0176	1,36E-02
29	0,0037	0,0087	0,0204	0,0040	0,0099	0,0455	0,0177	1,40E-02
30	0,0068	0,0087	0,0204	0,0118	0,0080	0,0455	0,0189	1,21E-02
31	0,0015	0,0040	0,0204	0,0037	0,0087	0,0455	0,0165	1,49E-02
33	0,0071	0,0087	0,0204	0,0096	0,0127	0,0455	0,0194	1,22E-02
34	0,0043	0,0087	0,0204	0,0062	0,0077	0,0455	0,0177	1,34E-02
36	0,0130	0,0077	0,0204	0,0148	0,0093	0,0458	0,0196	6,62E-03
37	0,0059	0,0065	0,0235	0,0080	0,0077	0,0458	0,0183	1,24E-02

Conjunto Test

Muestras	C <sub>exp</sub>	Salida					C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
4	0,3927	0,9057	0,4382	0,4669	0,5510	0,4437	0,5611	1,68E-01
8	0,5226	0,7294	0,9054	0,5649	0,8145	0,7885	0,7605	2,38E-01
11	0,1391	0,1017	0,0529	0,1738	0,0993	0,0455	0,0946	4,45E-02
21	0,5380	0,0155	0,0207	0,1345	0,3306	0,0451	0,1093	4,29E-01
25	0,0402	0,0083	0,0204	0,0127	0,0300	0,0455	0,0234	1,68E-02
27	0,0371	0,0473	0,0448	0,0216	0,2313	0,0470	0,0784	4,13E-02
32	0,0037	0,0087	0,0204	0,0056	0,0077	0,0455	0,0176	1,39E-02
35	0,0009	0,1014	0,0829	0,0037	0,0223	0,0458	0,0512	5,03E-02

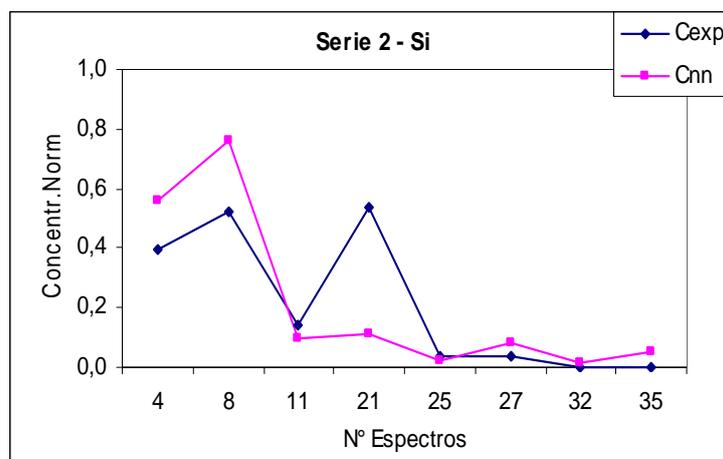


Figura 126. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 81. Resultados obtenidos en la Serie III para el Si en aerosoles

Elemento Silicio - Si		Salida						C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nnl</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
Muestras	C <sub>exp</sub>								
1	0,0526	0,0526	0,0136	0,0473	0,0455	0,0266	0,0371	1,55E-02	
2	0,3092	0,3089	0,3095	0,3089	0,3086	0,3089	0,3090	2,47E-04	
4	0,3927	0,3927	0,3927	0,3726	0,3927	0,3930	0,3887	3,96E-03	
5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1058	0,1053	1,24E-04	
7	0,0495	0,0507	0,0495	0,1101	0,0495	0,0414	0,0602	1,08E-02	
8	0,5226	0,5226	0,5226	0,5195	0,5226	0,5229	0,5220	5,57E-04	
9	0,1670	0,1667	0,1670	0,0878	0,0489	0,1670	0,1275	3,95E-02	
10	0,7823	0,7823	0,7823	0,7863	0,7823	0,7820	0,7831	7,42E-04	
12	0,4174	0,4171	0,4174	0,4048	0,4174	0,4184	0,4150	2,41E-03	
13	0,4329	0,4332	0,4329	0,4440	0,4329	0,4314	0,4349	1,98E-03	
14	0,0464	0,0445	0,0464	0,0835	0,0603	0,0485	0,0566	1,03E-02	
15	0,5844	0,5847	0,5844	0,6948	0,5844	0,5847	0,6066	2,22E-02	
16	0,1206	0,1206	0,1187	0,0866	0,0458	0,1209	0,0985	2,21E-02	
17	0,9091	0,9045	0,9075	0,7857	0,9060	0,9051	0,8818	2,73E-02	
18	0,1082	0,1092	0,0683	0,0782	0,0458	0,1104	0,0824	2,59E-02	
20	0,1608	0,1608	0,1660	0,0869	0,0458	0,1596	0,1238	3,70E-02	
21	0,5380	0,5383	0,5374	0,5346	0,5383	0,5380	0,5374	6,80E-04	
22	0,0866	0,0866	0,0977	0,0875	0,0863	0,0863	0,0889	2,29E-03	
23	0,0015	0,0046	0,0028	0,0594	0,0458	0,0040	0,0233	2,18E-02	
24	0,2137	0,0238	0,0210	0,0943	0,0464	0,0288	0,0429	1,71E-01	
25	0,0402	0,0108	0,0387	0,0049	0,0467	0,0235	0,0249	1,53E-02	
27	0,0371	0,0368	0,0371	0,0000	0,0371	0,0371	0,0296	7,48E-03	
29	0,0037	0,0087	0,0105	0,0000	0,0458	0,0006	0,0131	9,40E-03	
30	0,0068	0,0090	0,0353	0,0000	0,0461	0,0003	0,0181	1,13E-02	
31	0,0015	0,0083	0,0102	0,0000	0,0458	0,0161	0,0161	1,45E-02	
32	0,0037	0,0087	0,0111	0,0000	0,0458	0,0003	0,0132	9,46E-03	
34	0,0043	0,0087	0,0118	0,0000	0,0458	0,0003	0,0133	8,97E-03	
36	0,0130	0,0118	0,0247	0,0049	0,0489	0,0244	0,0229	9,96E-03	
37	0,0059	0,0118	0,0133	0,0006	0,0485	0,0232	0,0195	1,36E-02	
Conjunto Test		Salida						C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nnl</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN3	RN3	RN4	RN5			
3	0,2721	0,1138	0,2130	0,9091	0,0155	0,1169	0,2737	1,55E-03	
6	0,7792	0,7140	0,7709	0,6255	0,7474	0,8132	0,7342	4,50E-02	
11	0,1391	0,1657	0,1704	0,0872	0,0461	0,0943	0,1127	2,64E-02	
19	0,4267	0,6240	0,0776	0,4675	0,2121	0,4218	0,3606	6,61E-02	
26	0,0464	0,0705	0,0532	0,0003	0,0498	0,4447	0,1237	7,73E-02	
28	0,0040	0,0087	0,0108	0,0000	0,0458	0,0003	0,0131	9,09E-03	
33	0,0071	0,0090	0,0362	0,0000	0,0458	0,0003	0,0182	1,11E-02	
35	0,0009	0,0043	0,0025	0,0043	0,0479	0,0071	0,0132	1,23E-02	

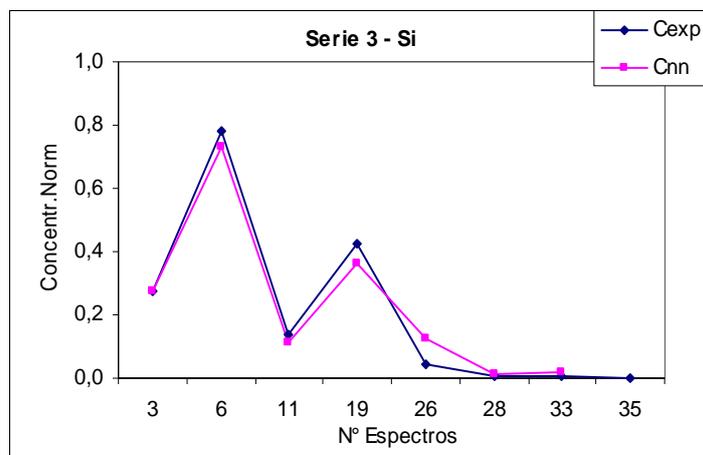


Figura 127. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 82. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Si en aerosoles

Elemento Silicio - Si		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
Conjunto Entrenamiento		Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
		1	0,0526	0,0535	0,0532	0,0532	0,0513	0,0445	0,0511	1,42E-03
		3	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2737	0,2724	3,09E-04
		5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1061	0,1053	1,86E-04
		6	0,7792	0,7792	0,7792	0,7792	0,7792	0,7835	0,7801	8,66E-04
		7	0,0495	0,0569	0,0523	0,0498	0,0498	0,0541	0,0526	3,09E-03
		8	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,5195	0,5220	6,18E-04
		9	0,1670	0,1190	0,0538	0,1630	0,1664	0,1153	0,1235	4,35E-02
		11	0,1391	0,1197	0,0532	0,1407	0,1521	0,1172	0,1166	2,26E-02
		12	0,4174	0,4174	0,4174	0,4174	0,4174	0,4168	0,4173	1,24E-04
		13	0,4329	0,4329	0,4329	0,4332	0,4329	0,4329	0,4330	6,18E-05
		14	0,0464	0,0365	0,0433	0,0455	0,0470	0,0464	0,0437	2,66E-03
		16	0,1206	0,1181	0,0532	0,1283	0,1234	0,1113	0,1069	1,37E-02
		18	0,1082	0,1194	0,0532	0,1027	0,1116	0,1048	0,0983	9,89E-03
		20	0,1608	0,1194	0,0532	0,1608	0,1429	0,1160	0,1184	4,24E-02
		21	0,5380	0,5380	0,5380	0,5380	0,5380	0,5371	0,5378	1,86E-04
		22	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0049	0,0703	1,63E-02
		23	0,0015	0,0111	0,0031	0,0065	0,0046	0,0470	0,0145	1,29E-02
		24	0,2137	0,1197	0,0532	0,0229	0,0223	0,1262	0,0688	1,45E-01
		25	0,0402	0,0068	0,0532	0,0390	0,0402	0,0272	0,0333	6,93E-03
		27	0,0371	0,0374	0,0371	0,0371	0,0371	0,0006	0,0299	7,24E-03
		28	0,0040	0,0068	0,0532	0,0028	0,0019	0,0034	0,0136	9,59E-03
		29	0,0037	0,0068	0,0532	0,0028	0,0019	0,0031	0,0135	9,83E-03
		31	0,0015	0,0068	0,0535	0,0028	0,0019	0,0022	0,0134	1,19E-02
		32	0,0037	0,0068	0,0532	0,0025	0,0022	0,0040	0,0137	1,00E-02
		33	0,0071	0,0071	0,0532	0,0127	0,0015	0,0306	0,0210	1,39E-02
		34	0,0043	0,0068	0,0532	0,0025	0,0056	0,0053	0,0147	1,03E-02
		35	0,0009	0,0080	0,0043	0,0015	0,0019	0,0087	0,0049	3,96E-03
		36	0,0130	0,0130	0,0532	0,0062	0,0127	0,0189	0,0208	7,79E-03
		37	0,0059	0,0077	0,0535	0,0022	0,0019	0,0065	0,0143	8,47E-03
Conjunto Test		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
		Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
		2	0,3092	0,3865	0,8704	0,5529	0,0724	0,0019	0,3768	6,76E-02
		4	0,3927	0,3655	0,8605	0,6694	0,0306	0,0009	0,3854	7,30E-03
		10	0,7823	0,7152	0,8748	0,8998	0,6868	0,8401	0,8033	2,10E-02
		15	0,5844	0,3231	0,6521	0,3933	0,6175	0,6827	0,5338	5,06E-02
		17	0,9091	0,3194	0,7638	0,1732	0,2938	0,1373	0,3375	5,72E-01
		19	0,4267	0,0049	0,0928	0,8442	0,4617	0,0009	0,2809	1,46E-01
		26	0,0464	0,0383	0,0322	0,1543	0,5986	0,0006	0,1648	1,18E-01
		30	0,0068	0,0077	0,0532	0,0148	0,0043	0,0328	0,0226	1,58E-02

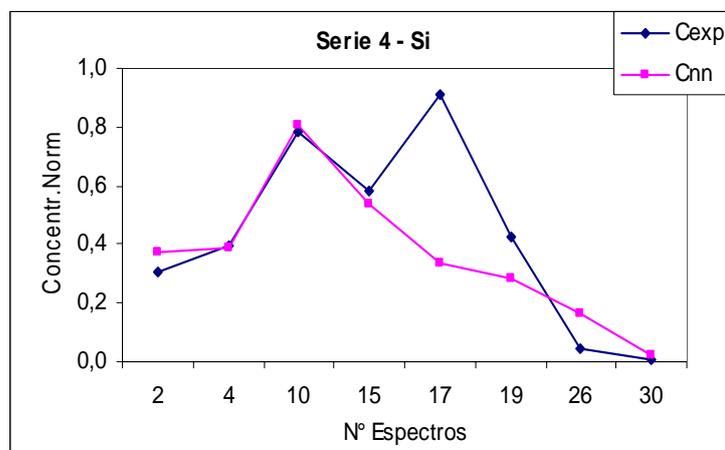


Figura 128. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie IV para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 83. Resultados obtenidos en la Serie V para el Si en aerosoles

Elemento Silicio - Si		Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
Muestras	2	0,3092	0,3092	0,3092	0,3092	0,3098	0,3095	0,3094	0,00019
	3	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,2721	0,00000
	4	0,3927	0,3927	0,3927	0,3927	0,3927	0,3927	0,3927	0,00000
	5	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,1051	0,00000
	6	0,7792	0,7789	0,7789	0,7786	0,7805	0,7792	0,7792	0,00000
	7	0,0495	0,0495	0,0495	0,0495	0,0498	0,0498	0,0496	0,00012
	8	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,5226	0,00000
	9	0,1670	0,1691	0,1691	0,1694	0,1642	0,0813	0,1506	0,01630
	10	0,7823	0,7826	0,7826	0,7829	0,7811	0,7823	0,7823	0,00000
	11	0,1391	0,1466	0,1466	0,0547	0,1246	0,0813	0,1108	0,02840
	14	0,0464	0,0464	0,0464	0,0464	0,0464	0,0516	0,0474	0,00105
	15	0,5844	0,5847	0,5847	0,5847	0,5847	0,5844	0,5847	0,00025
	16	0,1206	0,1243	0,1243	0,0541	0,0983	0,0813	0,0965	0,02410
	17	0,9091	0,9045	0,9045	0,9066	0,9060	0,9088	0,9061	0,00303
	18	0,1082	0,1064	0,1064	0,0532	0,1336	0,0813	0,0962	0,01210
	19	0,4267	0,4267	0,4267	0,4267	0,4261	0,4267	0,4266	0,00012
	20	0,1608	0,1497	0,1497	0,0541	0,1011	0,0813	0,1072	0,05360
	21	0,5380	0,5380	0,5380	0,5377	0,5380	0,5377	0,5379	0,00012
	22	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0866	0,0863	0,0865	0,00006
	24	0,2137	0,0083	0,0083	0,0557	0,0962	0,0813	0,0500	0,16400
	26	0,0464	0,0464	0,0464	0,0464	0,0492	0,0473	0,0471	0,00074
	27	0,0371	0,0374	0,0374	0,0371	0,0223	0,0359	0,0340	0,00309
	28	0,0040	0,0077	0,0077	0,0529	0,0028	0,0034	0,0149	0,01090
	30	0,0068	0,0083	0,0083	0,0529	0,0195	0,0074	0,0193	0,01250
	32	0,0037	0,0074	0,0074	0,0529	0,0028	0,0037	0,0148	0,01110
	33	0,0071	0,0087	0,0087	0,0529	0,0068	0,0068	0,0168	0,00965
	35	0,0009	0,0071	0,0071	0,0015	0,0046	0,0813	0,0203	0,01940
	36	0,0130	0,0080	0,0080	0,0532	0,0040	0,0816	0,0310	0,01800
	37	0,0059	0,0077	0,0077	0,0529	0,0037	0,0816	0,0307	0,02490
Conjunto Test		Salida						C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
	1	0,0526	0,0275	0,0275	0,0529	0,1110	0,0813	0,0600	0,00748
	12	0,4174	0,0850	0,0850	0,5031	0,1033	0,1014	0,1756	0,24200
	13	0,4329	0,0937	0,0937	0,4174	0,3349	0,1889	0,2257	0,20700
	23	0,0015	0,0337	0,0337	0,0012	0,0823	0,0813	0,0464	0,04490
	25	0,0402	0,0083	0,0083	0,0529	0,0037	0,0816	0,0310	0,00921
	29	0,0037	0,0074	0,0074	0,0529	0,0031	0,0371	0,0216	0,01790
	31	0,0015	0,0894	0,0894	0,0529	0,0034	0,0612	0,0592	0,05770
	34	0,0043	0,0077	0,0077	0,0529	0,0028	0,0037	0,0150	0,01060

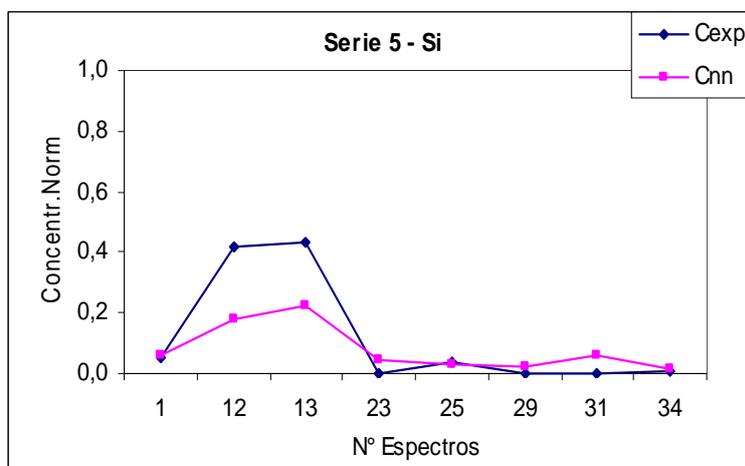


Figura 129. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (C<sub>nn</sub>) en la Serie V para el Si en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 84. Resultados obtenidos en la Serie I para el S en aerosoles

Elemento Azufre - S

Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
				RN3	RN4	RN5		
1	0,1070	0,0820	0,1016	0,1070	0,1052	0,1070	0,1005	0,00642
2	0,1604	0,1818	0,1818	0,1586	0,1640	0,1711	0,1715	0,01110
3	0,5526	0,5686	0,5526	0,5508	0,5526	0,5526	0,5554	0,00285
4	0,2139	0,1943	0,2175	0,2103	0,2299	0,2050	0,2114	0,00250
5	0,9091	0,8146	0,8895	0,8984	0,8859	0,9002	0,8777	0,03140
7	0,4813	0,4759	0,4991	0,4813	0,4813	0,4813	0,4838	0,00250
9	0,5526	0,5241	0,5472	0,5508	0,5526	0,5526	0,5455	0,00713
10	0,3387	0,2193	0,3226	0,3405	0,3173	0,3405	0,3080	0,03070
11	0,3565	0,3797	0,3601	0,3672	0,3422	0,3565	0,3611	0,00463
13	0,3209	0,3209	0,3244	0,3209	0,3191	0,3209	0,3212	0,00036
14	0,3030	0,3084	0,2906	0,3084	0,3030	0,3012	0,3023	0,00071
15	0,3743	0,3494	0,3369	0,3725	0,3369	0,3743	0,3540	0,02030
16	0,2139	0,1996	0,2139	0,2139	0,2068	0,2139	0,2096	0,00428
17	0,3030	0,3868	0,3316	0,3048	0,3512	0,3030	0,3355	0,03240
18	0,3030	0,2995	0,3030	0,2977	0,3084	0,3030	0,3023	0,00071
19	0,1604	0,1872	0,1622	0,1640	0,1622	0,1622	0,1676	0,00713
20	0,3743	0,3725	0,3725	0,3672	0,3868	0,3743	0,3747	0,00036
22	0,0891	0,0731	0,0517	0,0891	0,0927	0,0909	0,0795	0,00963
23	0,0036	0,0053	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0068	0,00321
25	0,0481	0,0285	0,0481	0,0499	0,0303	0,0428	0,0399	0,00820
26	0,1337	0,1533	0,1319	0,1337	0,1337	0,1301	0,1365	0,00285
27	0,0660	0,0463	0,0535	0,0642	0,0570	0,0570	0,0556	0,01030
29	0,0071	0,0143	0,0178	0,0143	0,0196	0,0267	0,0185	0,01140
30	0,0143	0,0250	0,0214	0,0071	0,0232	0,0143	0,0182	0,00392
31	0,0018	0,0053	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0068	0,00499
33	0,0089	0,0053	0,0053	0,0071	0,0107	0,0107	0,0078	0,00107
34	0,0107	0,0107	0,0125	0,0071	0,0160	0,0125	0,0118	0,00107
35	0,0018	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,00178
37	0,0196	0,0517	0,0517	0,0214	0,0357	0,0232	0,0367	0,01710

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
				RN3	RN4	RN5		
6	0,5882	0,6934	0,6399	0,4385	0,3975	0,4706	0,5280	0,06020
8	0,3387	0,2549	0,3262	0,3993	0,3316	0,4118	0,3447	0,00606
12	0,2852	0,1996	0,1979	0,2888	0,2567	0,2389	0,2364	0,04880
21	0,2317	0,1818	0,2246	0,1676	0,1729	0,2460	0,1986	0,03320
24	0,0178	0,0053	0,0036	0,0053	0,0089	0,0089	0,0064	0,01140
28	0,0053	0,0053	0,0053	0,0089	0,0107	0,0107	0,0082	0,00285
32	0,0071	0,0071	0,0036	0,0071	0,0089	0,0089	0,0071	0,00000
36	0,0357	0,0232	0,0357	0,0339	0,0160	0,0125	0,0242	0,01140

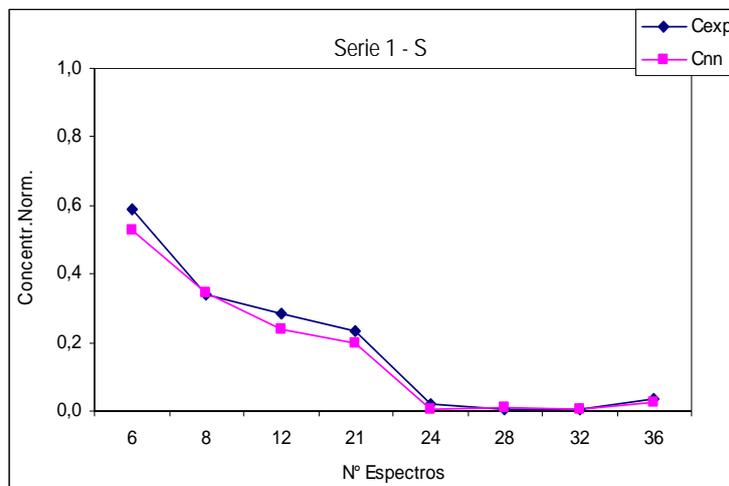


Figura 130. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie I para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 85. Resultados obtenidos en la Serie II para el S en aerosoles

Elemento Azufre - S		Salida							$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
Conjunto Entrenamiento		RN1	RN2	RN3	RN4	RN4	RN4			
Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN4	RN4	$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$	
1	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1052	0,1016	0,1055	0,00143		
2	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,00000		
3	0,5526	0,5579	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5537	0,00107		
5	0,9091	0,9002	0,9073	0,8984	0,9055	0,8752	0,8973	0,01176		
6	0,5882	0,4421	0,5882	0,5882	0,5882	0,5954	0,5604	0,02781		
7	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4688	0,4788	0,00250		
9	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000		
10	0,3387	0,4278	0,3387	0,3387	0,3387	0,3369	0,3561	0,01747		
12	0,2852	0,2745	0,2852	0,2852	0,2852	0,2692	0,2799	0,00535		
13	0,3209	0,3155	0,3209	0,3209	0,3209	0,3565	0,3269	0,00606		
14	0,3030	0,3030	0,3030	0,3048	0,3030	0,3137	0,3055	0,00250		
15	0,3743	0,4314	0,3743	0,3743	0,3743	0,3119	0,3733	0,00107		
16	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,00000		
17	0,3030	0,3155	0,3030	0,3030	0,3030	0,3458	0,3141	0,01105		
18	0,3030	0,2995	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3023	0,00071		
19	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,1604	0,1622	0,1608	0,00036		
20	0,3743	0,3761	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,3747	0,00036		
22	0,0891	0,0873	0,0891	0,0891	0,0909	0,0873	0,0888	0,00036		
23	0,0036	0,0036	0,0196	0,0018	0,0036	0,0000	0,0057	0,00214		
24	0,0178	0,0178	0,0178	0,0018	0,0178	0,0000	0,0111	0,00677		
26	0,1337	0,1337	0,1337	0,0267	0,0267	0,0535	0,0749	0,05882		
28	0,0053	0,0036	0,0071	0,0267	0,0267	0,0000	0,0128	0,00749		
29	0,0071	0,0107	0,0071	0,0267	0,0267	0,0053	0,0153	0,00820		
30	0,0143	0,0018	0,0089	0,0267	0,0267	0,0535	0,0235	0,00927		
31	0,0018	0,0036	0,0089	0,0267	0,0267	0,0000	0,0132	0,01141		
33	0,0089	0,0071	0,0107	0,0267	0,0267	0,0535	0,0250	0,01604		
34	0,0107	0,0018	0,0089	0,0267	0,0267	0,0125	0,0153	0,00463		
36	0,0357	0,0357	0,0196	0,0178	0,0339	0,0321	0,0278	0,00784		
37	0,0196	0,0232	0,0196	0,0267	0,0196	0,0000	0,0178	0,00178		

Conjunto Test		Salida					$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
4	0,2139	0,0392	0,0820	0,3084	0,3333	0,2745	0,2075	0,00642
8	0,3387	0,3672	0,2709	0,2424	0,1943	0,8324	0,3815	0,04278
11	0,3565	0,4082	0,3832	0,0802	0,0285	0,3102	0,2421	0,11444
21	0,2317	0,0481	0,2335	0,0250	0,0606	0,1034	0,0941	0,13761
25	0,0481	0,0606	0,2941	0,1943	0,0963	0,0731	0,1437	0,09554
27	0,0660	0,0998	0,0357	0,0267	0,0267	0,0463	0,0471	0,01889
32	0,0071	0,0036	0,0071	0,0267	0,0267	0,0535	0,0235	0,01640
35	0,0018	0,0339	0,0107	0,0232	0,0250	0,0000	0,0185	0,01676

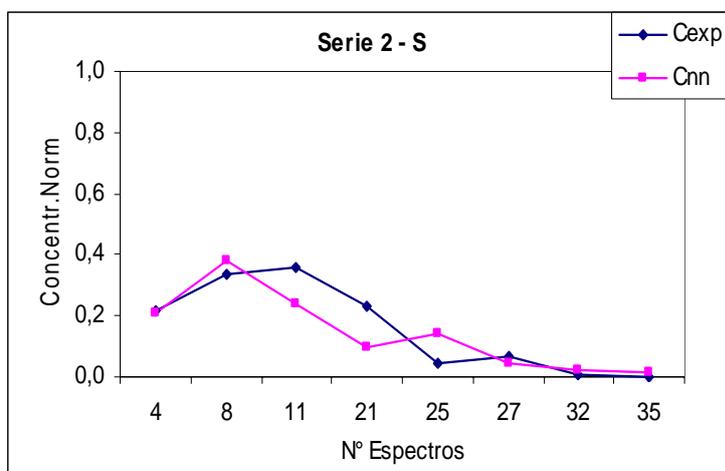


Figura 131. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie II para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 86. Resultados obtenidos en la Serie III para el S en aerosoles

Elemento Azufre - S

Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	Salida		$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
					RN4	RN5		
1	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,00000
2	0,1604	0,1604	0,1622	0,1640	0,1604	0,1604	0,1615	0,00107
4	0,2139	0,2139	0,2157	0,2139	0,2139	0,2139	0,2143	0,00036
5	0,9091	0,9055	0,9073	0,9055	0,9055	0,9020	0,9052	0,00392
7	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,00000
8	0,3387	0,3387	0,3494	0,3422	0,3387	0,3316	0,3401	0,00143
9	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000
10	0,3387	0,3387	0,3529	0,3369	0,3387	0,3422	0,3419	0,00321
12	0,2852	0,2852	0,3084	0,2852	0,2870	0,2852	0,2902	0,00499
13	0,3209	0,3209	0,3084	0,3209	0,3209	0,3209	0,3184	0,00250
14	0,3030	0,3030	0,3030	0,3048	0,3030	0,3030	0,3034	0,00036
15	0,3743	0,3743	0,3333	0,3743	0,3743	0,3743	0,3661	0,00820
16	0,2139	0,2139	0,2139	0,2121	0,2139	0,2139	0,2135	0,00036
17	0,3030	0,3030	0,3102	0,3012	0,3012	0,3066	0,3045	0,00143
18	0,3030	0,3030	0,3030	0,3119	0,3030	0,3030	0,3048	0,00178
20	0,3743	0,3743	0,3743	0,3672	0,3743	0,3743	0,3729	0,00143
21	0,2317	0,2317	0,2299	0,2282	0,2317	0,2317	0,2307	0,00107
22	0,0891	0,0891	0,0820	0,0891	0,0891	0,0891	0,0877	0,00143
23	0,0036	0,0125	0,0107	0,0071	0,0053	0,0053	0,0082	0,00463
24	0,0178	0,0125	0,0232	0,0178	0,0178	0,0178	0,0178	0,00000
25	0,0481	0,0481	0,0570	0,0463	0,0481	0,0481	0,0496	0,00143
27	0,0660	0,0660	0,0250	0,0660	0,0232	0,0232	0,0406	0,02531
29	0,0071	0,0125	0,0285	0,0071	0,0125	0,0232	0,0168	0,00963
30	0,0143	0,0125	0,0125	0,0143	0,0232	0,0036	0,0132	0,00107
31	0,0018	0,0125	0,0196	0,0071	0,0018	0,0232	0,0128	0,01105
32	0,0071	0,0125	0,0125	0,0089	0,0232	0,0053	0,0125	0,00535
34	0,0107	0,0125	0,0125	0,0125	0,0232	0,0143	0,0150	0,00428
36	0,0357	0,0125	0,0232	0,0374	0,0357	0,0357	0,0289	0,00677
37	0,0196	0,0196	0,0196	0,0178	0,0196	0,0232	0,0200	0,00036

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	Salida		$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
					RN4	RN5		
3	0,5526	0,1640	0,1408	0,3066	0,2727	0,4938	0,2756	0,27701
6	0,5882	0,3779	0,3494	0,3066	0,3066	0,3529	0,3387	0,24955
11	0,3565	0,3993	0,3690	0,5169	0,3262	0,4314	0,4086	0,05205
19	0,1604	0,1979	0,1105	0,0053	0,1087	0,1070	0,1059	0,05455
26	0,1337	0,1408	0,0232	0,0285	0,0232	0,0214	0,0474	0,08627
28	0,0053	0,0125	0,0250	0,0089	0,0125	0,0232	0,0164	0,01105
33	0,0089	0,2050	0,0143	0,3779	0,0232	0,0018	0,1244	0,11551
35	0,0018	0,0125	0,0196	0,0214	0,0232	0,0214	0,0196	0,01783

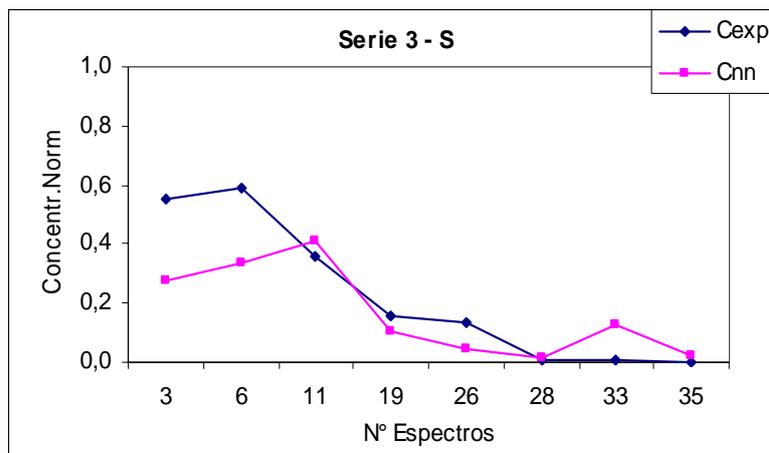


Figura 132. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie III para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 87. Resultados obtenidos en la Serie IV para el S en aerosoles

Elemento Azufre - S		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nnl</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
Muestras										
1	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,1070	0,00000	
3	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000	
5	0,9091	0,9073	0,9037	0,9073	0,9055	0,9037	0,9055	0,9055	0,00357	
6	0,5882	0,5882	0,5882	0,5882	0,5882	0,5882	0,5882	0,5882	0,00000	
7	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,4813	0,00000	
8	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,00000	
9	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000	
11	0,3565	0,3565	0,3565	0,3565	0,3565	0,3565	0,3565	0,3565	0,00000	
12	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,2852	0,00000	
13	0,3209	0,3209	0,3209	0,3209	0,3209	0,3209	0,3209	0,3209	0,00000	
14	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,00000	
16	0,2139	0,2139	0,2139	0,2121	0,2139	0,2139	0,2135	0,2135	0,00036	
18	0,3030	0,3030	0,3030	0,3048	0,3030	0,3030	0,3034	0,3034	0,00036	
20	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,3743	0,00000	
21	0,2317	0,2317	0,2317	0,2317	0,2317	0,2317	0,2317	0,2317	0,00000	
22	0,0891	0,0891	0,0891	0,0891	0,0891	0,0891	0,0891	0,0891	0,00000	
23	0,0036	0,0160	0,0107	0,0107	0,0089	0,0018	0,0096	0,0096	0,00606	
24	0,0178	0,0125	0,0107	0,0160	0,0160	0,0178	0,0146	0,0146	0,00321	
25	0,0481	0,0481	0,0463	0,0481	0,0499	0,0481	0,0481	0,0481	0,00000	
27	0,0660	0,0660	0,0660	0,0143	0,0660	0,0660	0,0556	0,0556	0,01034	
28	0,0053	0,0036	0,0053	0,0143	0,0071	0,0036	0,0068	0,0068	0,00143	
29	0,0071	0,0089	0,0053	0,0143	0,0107	0,0071	0,0093	0,0093	0,00214	
31	0,0018	0,0036	0,0053	0,0143	0,0036	0,0036	0,0061	0,0061	0,00428	
32	0,0071	0,0071	0,0053	0,0143	0,0089	0,0107	0,0093	0,0093	0,00214	
33	0,0089	0,0125	0,0053	0,0143	0,0071	0,0178	0,0114	0,0114	0,00250	
34	0,0107	0,0071	0,0053	0,0143	0,0071	0,0053	0,0078	0,0078	0,00285	
35	0,0018	0,0107	0,0089	0,0196	0,0071	0,0125	0,0118	0,0118	0,00998	
36	0,0357	0,0214	0,0357	0,0196	0,0250	0,0160	0,0235	0,0235	0,01212	
37	0,0196	0,0196	0,0178	0,0214	0,0196	0,0214	0,0200	0,0200	0,00036	
Conjunto Test		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nnl</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5				
2	0,1604	0,2210	0,1640	0,2317	0,5383	0,2032	0,2717	0,2717	0,11123	
4	0,2139	0,3512	0,3975	0,3725	0,3832	0,3405	0,3690	0,3690	0,15508	
10	0,3387	0,5633	0,3761	0,2995	0,4670	0,5971	0,4606	0,4606	0,12193	
15	0,3743	0,5437	0,4670	0,4367	0,6453	0,4171	0,5020	0,5020	0,12763	
17	0,3030	0,1480	0,8966	0,6952	0,4403	0,2371	0,4834	0,4834	0,18039	
19	0,1604	0,2781	0,3280	0,8538	0,2264	0,4759	0,4324	0,4324	0,27201	
26	0,1337	0,0196	0,0071	0,0143	0,0303	0,1462	0,0435	0,0435	0,09020	
30	0,0143	0,0071	0,0053	0,0143	0,0071	0,0143	0,0096	0,0096	0,00463	

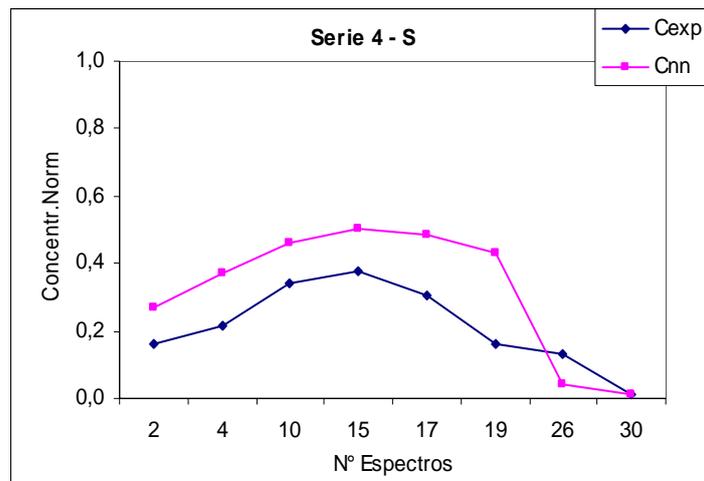


Figura 133. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (C<sub>nn</sub>) en la Serie IV para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 88. Resultados obtenidos en la Serie V para el S en aerosoles

Elemento Azufre - S

Conjunto Entrenamiento

Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	Salida			C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-CnnI</sub>
				RN3	RN4	RN5		
2	0,1604	0,1676	0,1515	0,1640	0,1961	0,1604	0,1679	0,00749
3	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000
4	0,2139	0,2139	0,2157	0,2103	0,1854	0,2139	0,2078	0,00606
5	0,9091	0,9020	0,9055	0,9037	0,9037	0,8984	0,9027	0,00642
6	0,5882	0,5882	0,5829	0,5882	0,5865	0,5882	0,5868	0,00143
7	0,4813	0,4813	0,4831	0,4813	0,4813	0,4813	0,4816	0,00036
8	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,3387	0,00000
9	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,5526	0,00000
10	0,3387	0,3387	0,3422	0,3387	0,3422	0,3387	0,3401	0,00143
11	0,3565	0,3565	0,3565	0,3672	0,3583	0,3565	0,3590	0,00250
14	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,00000
15	0,3743	0,3743	0,3761	0,3743	0,3743	0,3743	0,3747	0,00036
16	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,2139	0,00000
17	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,3030	0,00000
18	0,3030	0,3030	0,3048	0,3030	0,3030	0,3030	0,3034	0,00036
19	0,1604	0,1604	0,1622	0,1604	0,1783	0,1604	0,1643	0,00392
20	0,3743	0,3743	0,3725	0,3654	0,3725	0,3743	0,3718	0,00250
21	0,2317	0,2282	0,2353	0,2317	0,2050	0,2317	0,2264	0,00535
22	0,0891	0,0891	0,0909	0,1123	0,0891	0,0891	0,0941	0,00499
24	0,0178	0,0178	0,0178	0,0125	0,0178	0,0178	0,0168	0,00107
26	0,1337	0,1337	0,1337	0,1105	0,1337	0,0392	0,1102	0,02353
27	0,0660	0,0660	0,0660	0,0660	0,0660	0,0392	0,0606	0,00535
28	0,0053	0,0107	0,0053	0,0071	0,0053	0,0392	0,0135	0,00820
30	0,0143	0,0089	0,0089	0,0107	0,0000	0,0392	0,0135	0,00071
32	0,0071	0,0089	0,0125	0,0107	0,0000	0,0392	0,0143	0,00713
33	0,0089	0,0089	0,0107	0,0107	0,0089	0,0392	0,0157	0,00677
35	0,0018	0,0018	0,0053	0,0143	0,0000	0,0089	0,0061	0,00428
36	0,0357	0,0357	0,0339	0,0357	0,0357	0,0357	0,0353	0,00036
37	0,0196	0,0107	0,0160	0,0125	0,0000	0,0160	0,0111	0,00856

Conjunto Test

Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN3	Salida			C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-CnnI</sub>
				RN4	RN5	RN6		
1	0,1070	0,1230	0,8948	0,3779	0,1765	0,4029	0,3950	0,28806
12	0,2852	0,2531	0,0107	0,4866	0,0053	0,3137	0,2139	0,07130
13	0,3209	0,2620	0,2371	0,2210	0,1836	0,2175	0,2242	0,09661
23	0,0036	0,0036	0,0089	0,0089	0,5134	0,0588	0,1187	0,11515
25	0,0481	0,0143	0,0446	0,0107	0,1729	0,0053	0,0496	0,00143
29	0,0071	0,0143	0,0125	0,0036	0,0053	0,0392	0,0150	0,00784
31	0,0018	0,0089	0,0071	0,0125	0,0053	0,0392	0,0146	0,01283
34	0,0107	0,0089	0,0125	0,0036	0,0000	0,0392	0,0128	0,00214

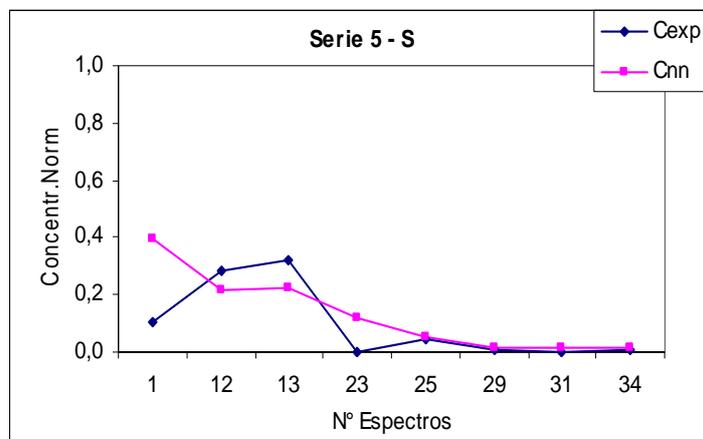


Figura 134. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (S<sub>nn</sub>) en la Serie V para el S en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 89. Resultados obtenidos en la Serie I para el K en aerosoles

Elemento Potasio - K

Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
1	0,1515	0,1591	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1530	0,00152
2	0,5303	0,5227	0,5227	0,5303	0,5227	0,5379	0,5273	0,00303
3	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,00000
4	0,4545	0,4697	0,4621	0,4545	0,4545	0,4545	0,4591	0,00455
5	0,9091	0,8409	0,8258	0,8333	0,8258	0,8333	0,8318	0,07727
7	0,4545	0,4545	0,4545	0,4470	0,4545	0,4470	0,4515	0,00303
9	0,9091	0,8788	0,9015	0,8939	0,9015	0,8864	0,8924	0,01667
10	0,7576	0,7576	0,7424	0,7576	0,7424	0,7576	0,7515	0,00606
11	0,9091	0,8864	0,9015	0,9015	0,9015	0,9015	0,8985	0,01061
13	0,5303	0,5227	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5288	0,00152
14	0,6061	0,6212	0,6061	0,6136	0,6061	0,6212	0,6136	0,00758
15	0,7576	0,7500	0,7879	0,7500	0,7803	0,7500	0,7636	0,00606
16	0,5303	0,5000	0,5227	0,5303	0,5227	0,5303	0,5212	0,00909
17	0,7576	0,8409	0,8258	0,8333	0,8258	0,8333	0,8318	0,07424
18	0,5303	0,5455	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5333	0,00303
19	0,6061	0,5985	0,6061	0,5985	0,6061	0,5985	0,6015	0,00455
20	0,5303	0,5455	0,5379	0,5303	0,5379	0,5303	0,5364	0,00606
22	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,00000
23	0,0000	0,0152	0,0000	0,0076	0,0000	0,0076	0,0061	0,00606
25	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,00000
26	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,00000
27	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,00000
29	0,0303	0,0303	0,0379	0,0303	0,0379	0,0303	0,0333	0,00303
30	0,0682	0,0682	0,0606	0,0682	0,0606	0,0682	0,0652	0,00303
31	0,0152	0,0152	0,0303	0,0000	0,0227	0,0000	0,0136	0,00152
33	0,0758	0,0682	0,0758	0,0758	0,0758	0,0758	0,0742	0,00152
34	0,0530	0,0530	0,0455	0,0530	0,0455	0,0530	0,0500	0,00303
35	0,0000	0,0152	0,0076	0,0000	0,0076	0,0000	0,0061	0,00606
37	0,1212	0,1212	0,1136	0,1212	0,1136	0,1212	0,1182	0,00303

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nnI}}$
6	0,6061	0,7879	0,7576	0,7727	0,7500	0,7727	0,7682	0,16212
8	0,4545	0,7879	0,7500	0,7652	0,7500	0,7652	0,7636	0,30909
12	0,6818	0,5909	0,8106	0,6894	0,8106	0,6818	0,7167	0,03485
21	0,8333	0,5833	0,5303	0,5682	0,5303	0,5758	0,5576	0,27576
24	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,00000
28	0,0379	0,0455	0,0379	0,0455	0,0455	0,0455	0,0439	0,00606
32	0,0455	0,0379	0,0379	0,0303	0,0379	0,0303	0,0348	0,01061
36	0,1515	0,2121	0,1212	0,1818	0,1212	0,1591	0,1591	0,00758

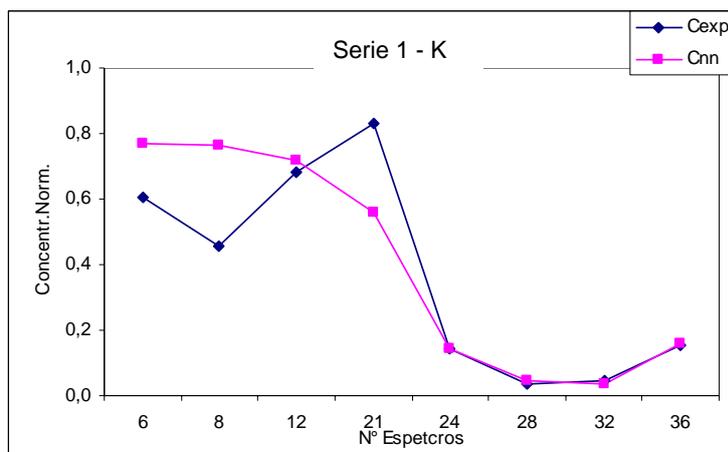


Figura 135. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie I para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 90. Resultados obtenidos en la Serie II para el K en aerosoles

Elemento Potasio - K  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$ C_{exp}-C_{nn} $
				RN3	RN5	RN5		
1	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1591	0,1591	0,1545	0,00303
2	0,5303	0,5379	0,5303	0,5379	0,5303	0,5303	0,5333	0,00303
3	0,6061	0,6136	0,6061	0,6136	0,6061	0,6061	0,6091	0,00303
5	0,9091	0,8561	0,8864	0,8561	0,8485	0,8333	0,8561	0,05303
6	0,6061	0,6818	0,6061	0,6818	0,6667	0,6818	0,6636	0,05758
7	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4394	0,4515	0,00303
9	0,9091	0,9015	0,9015	0,9015	0,9015	0,9091	0,9030	0,00606
10	0,7576	0,7348	0,7576	0,7348	0,6970	0,7348	0,7318	0,02576
12	0,6818	0,6818	0,6818	0,6818	0,6894	0,6591	0,6788	0,00303
13	0,5303	0,5379	0,5303	0,5379	0,5379	0,5758	0,5439	0,01364
14	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,00000
15	0,7576	0,6818	0,7652	0,6818	0,7121	0,6818	0,7045	0,05303
16	0,5303	0,5303	0,5227	0,5303	0,5303	0,5227	0,5273	0,00303
17	0,7576	0,8561	0,7652	0,8561	0,8485	0,8333	0,8318	0,07424
18	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,00000
19	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6136	0,6136	0,6091	0,00303
20	0,5303	0,5303	0,5379	0,5303	0,5303	0,5303	0,5318	0,00152
22	0,7576	0,7424	0,7576	0,7424	0,7500	0,7576	0,7500	0,00758
23	0,0000	0,0076	0,0000	0,0076	0,0000	0,0076	0,0045	0,00455
24	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1364	0,1439	0,1424	0,00152
26	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,00000
28	0,0379	0,0455	0,0379	0,0455	0,0530	0,0455	0,0455	0,00758
29	0,0303	0,0303	0,0303	0,0303	0,0303	0,0303	0,0303	0,00000
30	0,0682	0,0682	0,0682	0,0682	0,0530	0,0682	0,0652	0,00303
31	0,0152	0,0076	0,0152	0,0076	0,0000	0,0076	0,0076	0,00758
33	0,0758	0,0758	0,0758	0,0758	0,0758	0,0682	0,0742	0,00152
34	0,0530	0,0530	0,0530	0,0530	0,0530	0,0530	0,0530	0,00000
36	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,00000
37	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1136	0,1197	0,00152

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$ C_{exp}-C_{nn} $
				RN3	RN4	RN5		
4	0,4545	0,5909	0,3561	0,5909	0,6439	0,5303	0,5424	0,08788
8	0,4545	0,6742	0,5076	0,6742	0,6364	0,6667	0,6318	0,17727
11	0,9091	0,7273	0,6591	0,7273	0,6742	0,7045	0,6985	0,21061
21	0,8333	0,6591	0,5303	0,6591	0,7576	0,6288	0,6470	0,18636
25	0,2803	0,3182	0,1061	0,3182	0,5985	0,5455	0,3773	0,09697
27	0,3182	0,2273	0,8561	0,2273	0,1364	0,0303	0,2955	0,02273
32	0,0455	0,0379	0,1061	0,0379	0,0530	0,0909	0,0652	0,01970
35	0,0000	0,2803	0,0000	0,2803	0,0000	0,0076	0,1136	0,11364

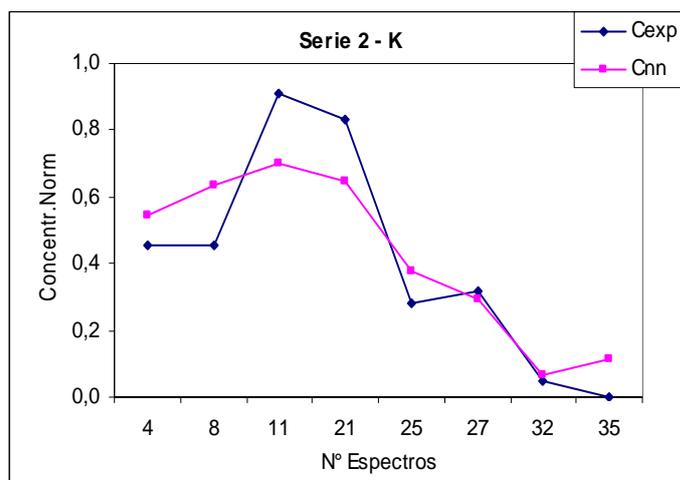


Figura 136. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie II para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 91. Resultados obtenidos en la Serie III para el K en aerosoles

Elemento Potasio - K  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	Salida			C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
				RN3	RN4	RN5		
1	0,1515	0,1515	0,1515	0,1061	0,1515	0,1591	0,1439	0,00758
2	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5379	0,5318	0,00152
4	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4621	0,4561	0,00152
5	0,9091	0,8939	0,8712	0,8409	0,9015	0,8106	0,8636	0,04545
7	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4394	0,4515	0,00303
8	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,6515	0,4939	0,03939
9	0,9091	0,9091	0,9091	0,9091	0,9015	0,9015	0,9061	0,00303
10	0,7576	0,7576	0,7652	0,7576	0,7576	0,6439	0,7364	0,02121
12	0,6818	0,6818	0,6818	0,6894	0,6818	0,7424	0,6955	0,01364
13	0,5303	0,5303	0,5303	0,5227	0,5303	0,5227	0,5273	0,00303
14	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6136	0,6076	0,00152
15	0,7576	0,7576	0,7500	0,7576	0,7576	0,6439	0,7333	0,02424
16	0,5303	0,5303	0,5227	0,5303	0,5379	0,5303	0,5303	0,00000
17	0,7576	0,7576	0,7727	0,8030	0,7576	0,8106	0,7803	0,02273
18	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,00000
20	0,5303	0,5303	0,5379	0,5303	0,5227	0,5303	0,5303	0,00000
21	0,8333	0,8333	0,8333	0,8333	0,8333	0,8258	0,8318	0,00152
22	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7652	0,7591	0,00152
23	0,0000	0,0076	0,0000	0,0152	0,0000	0,0379	0,0121	0,01212
24	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1364	0,1424	0,00152
25	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,00000
27	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,1212	0,3182	0,2788	0,03939
29	0,0303	0,0303	0,0379	0,0303	0,0303	0,0303	0,0318	0,00152
30	0,0682	0,0682	0,0682	0,1061	0,1212	0,0682	0,0864	0,01818
31	0,0152	0,0152	0,0152	0,0152	0,0000	0,0227	0,0136	0,00152
32	0,0455	0,0455	0,0455	0,0227	0,1212	0,0227	0,0515	0,00606
34	0,0530	0,0455	0,0455	0,0530	0,1212	0,0227	0,0576	0,00455
36	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1364	0,1485	0,00303
37	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1364	0,1242	0,00303

Conjunto Test

Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	Salida			C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
				RN3	RN4	RN5		
3	0,6061	0,4848	0,0076	0,6818	0,7727	0,6136	0,5121	0,09394
6	0,6061	0,4015	0,6970	0,5227	0,7576	0,6439	0,6045	0,00152
11	0,9091	0,6364	0,4167	0,9091	0,8939	0,5530	0,6818	0,22727
19	0,6061	0,4394	0,3409	0,9091	0,5530	0,1364	0,4758	0,13030
26	0,4848	0,4167	0,0606	0,1061	0,1212	0,2652	0,1939	0,29091
28	0,0379	0,0455	0,0455	0,1515	0,1212	0,0227	0,0773	0,03939
33	0,0758	0,3712	0,1061	0,1061	0,1212	0,2121	0,1833	0,10758
35	0,0000	0,0682	0,0076	0,0152	0,0000	0,4470	0,1076	0,10758

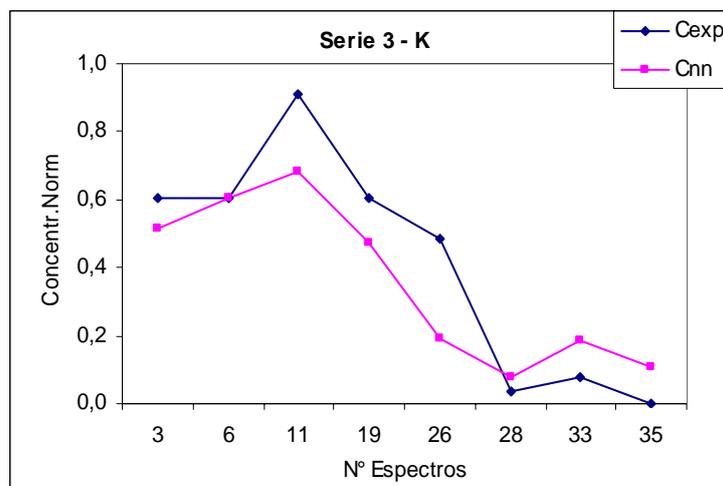


Figura 137. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie III para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 92. Resultados obtenidos en la Serie IV para el K en aerosoles

Elemento Potasio - K  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	Salida		$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
					RN4	RN5		
1	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,00000
3	0,6061	0,6061	0,6061	0,5682	0,4773	0,6061	0,5727	0,03333
5	0,9091	0,8561	0,9015	0,9015	0,8030	0,9015	0,8727	0,03636
6	0,6061	0,6364	0,5530	0,5455	0,6364	0,6061	0,5955	0,01061
7	0,4545	0,4545	0,4470	0,4394	0,4773	0,4545	0,4545	0,00000
8	0,4545	0,4394	0,5000	0,5455	0,5606	0,4545	0,5000	0,04545
9	0,9091	0,8939	0,8939	0,9091	0,9091	0,9091	0,9030	0,00606
11	0,9091	0,8939	0,8939	0,8939	0,9015	0,9015	0,8970	0,01212
12	0,6818	0,6894	0,6818	0,6818	0,6970	0,6818	0,6864	0,00455
13	0,5303	0,5227	0,5303	0,5379	0,5455	0,5303	0,5333	0,00303
14	0,6061	0,6061	0,6136	0,6061	0,6136	0,6061	0,6091	0,00303
16	0,5303	0,5303	0,5227	0,5379	0,5379	0,5303	0,5318	0,00152
18	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,00000
20	0,5303	0,5303	0,5379	0,5227	0,5227	0,5303	0,5288	0,00152
21	0,8333	0,8182	0,8409	0,8333	0,8182	0,8333	0,8288	0,00455
22	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,00000
23	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0152	0,0000	0,0030	0,00303
24	0,1439	0,1439	0,1439	0,1439	0,1364	0,1439	0,1424	0,00152
25	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,2803	0,00000
27	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,00000
28	0,0379	0,0455	0,0379	0,0379	0,0379	0,0530	0,0424	0,00455
29	0,0303	0,0303	0,0303	0,0227	0,0303	0,0303	0,0288	0,00152
31	0,0152	0,0152	0,0000	0,0227	0,0000	0,0000	0,0076	0,00758
32	0,0455	0,0455	0,0379	0,0530	0,0000	0,0530	0,0379	0,00758
33	0,0758	0,0758	0,0758	0,0606	0,0682	0,0530	0,0667	0,00909
34	0,0530	0,0379	0,0455	0,0530	0,0530	0,0530	0,0485	0,00455
35	0,0000	0,0000	0,0076	0,0076	0,0000	0,0000	0,0030	0,00303
36	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1288	0,1515	0,1470	0,00455
37	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1515	0,1212	0,1273	0,00606

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	Salida		$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
					RN4	RN5		
2	0,5303	0,8106	0,8485	0,8030	0,5606	0,7348	0,7515	0,22121
4	0,4545	0,8258	0,7576	0,5152	0,6136	0,4015	0,6227	0,16818
10	0,7576	0,6136	0,6818	0,5379	0,6212	0,3258	0,5561	0,20152
15	0,7576	0,9015	0,7197	0,5530	0,7879	0,8636	0,7652	0,00758
17	0,7576	0,8258	0,9015	0,9015	0,7652	0,9091	0,8606	0,10303
19	0,6061	0,0530	0,8712	0,8939	0,4773	0,0909	0,4773	0,12879
26	0,4848	0,1288	0,7727	0,0227	0,8485	0,3258	0,4197	0,06515
30	0,0682	0,0530	0,0530	0,0606	0,0530	0,0530	0,0545	0,01364

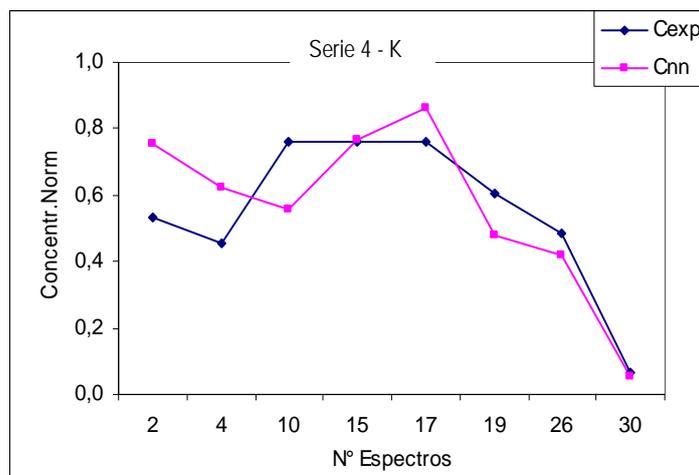


Figura 138. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie IV para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 93. Resultados obtenidos en la Serie V para el K en aerosoles

Elemento Potasio - K  
Conjunto Entrenamiento

Muestras	C <sub>exp</sub>	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
		RN1	RN2	RN3	RN4	RN4	RN4		
2	0,5303	0,5303	0,5303	0,5227	0,5379	0,6818	0,5606	0,03030	
3	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6136	0,6076	0,00152	
4	0,4545	0,4545	0,4621	0,4545	0,4470	0,4773	0,4591	0,00455	
5	0,9091	0,8939	0,8106	0,8333	0,8333	0,8333	0,8409	0,06818	
6	0,6061	0,6061	0,6136	0,5303	0,5303	0,5909	0,5742	0,03182	
7	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4545	0,4621	0,4561	0,00152	
8	0,4545	0,4545	0,5606	0,5379	0,5379	0,4545	0,5091	0,05455	
9	0,9091	0,8939	0,9091	0,8939	0,8788	0,9091	0,8970	0,01212	
10	0,7576	0,7576	0,6288	0,7500	0,7424	0,7652	0,7288	0,02879	
11	0,9091	0,9015	0,8939	0,9091	0,8864	0,8636	0,8909	0,01818	
14	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,00000	
15	0,7576	0,7576	0,8182	0,7576	0,7576	0,7576	0,7697	0,01212	
16	0,5303	0,5379	0,5152	0,5379	0,5455	0,5227	0,5318	0,00152	
17	0,7576	0,7576	0,7803	0,8333	0,8333	0,8106	0,8030	0,04545	
18	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5303	0,5379	0,5318	0,00152	
19	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,6061	0,00000	
20	0,5303	0,5227	0,5379	0,5227	0,5227	0,5303	0,5273	0,00303	
21	0,8333	0,8333	0,8485	0,8409	0,8864	0,6667	0,8152	0,01818	
22	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7576	0,7500	0,7561	0,00152	
24	0,1439	0,0606	0,1439	0,1439	0,0530	0,1439	0,1091	0,03485	
26	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,4848	0,00000	
27	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,3182	0,00000	
28	0,0379	0,0379	0,0379	0,0455	0,0530	0,0000	0,0348	0,00303	
30	0,0682	0,0682	0,0682	0,0682	0,0530	0,0682	0,0652	0,00303	
32	0,0455	0,0606	0,0455	0,0379	0,0530	0,0000	0,0394	0,00606	
33	0,0758	0,0758	0,0682	0,0758	0,0758	0,0682	0,0727	0,00303	
35	0,0000	0,0606	0,0000	0,0000	0,0530	0,0000	0,0227	0,02273	
36	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1364	0,1515	0,1485	0,00303	
37	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1364	0,1136	0,1227	0,00152	

Conjunto Test

Muestras	C <sub>exp</sub>	Salida						C <sub>nn-Media</sub>	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
		RN1	RN2	RN3	RN5	RN6			
1	0,1515	0,0076	0,3409	0,0000	0,0076	0,2955	0,1303	0,02121	
12	0,6818	0,8561	0,9015	0,8333	0,8333	0,1667	0,7182	0,03636	
13	0,5303	0,7121	0,8409	0,4091	0,5152	0,3712	0,5697	0,03939	
23	0,0000	0,0606	0,0606	0,0000	0,0530	0,6591	0,1667	0,16667	
25	0,2803	0,5152	0,0833	0,0758	0,1364	0,9091	0,3439	0,06364	
29	0,0303	0,0455	0,7879	0,0379	0,0530	0,0000	0,1848	0,15455	
31	0,0152	0,0758	0,3939	0,0000	0,0530	0,0000	0,1045	0,08939	
37	0,1212	0,1212	0,1212	0,1212	0,1364	0,1136	0,1227	0,00152	

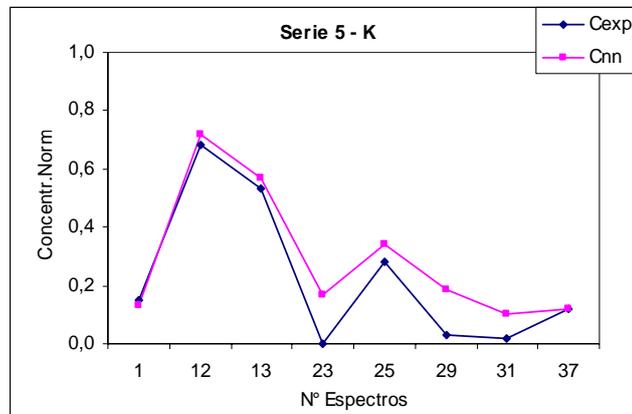


Figura 139. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (C<sub>nn</sub>) en la Serie V para el K en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 94. Resultados obtenidos en la Serie I para el Fe en aerosoles

Elemento Hierro - Fe

Conjunto Entrenamiento

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
				RN3	RN4	RN5		
1	0,1049	0,1049	0,0956	0,1049	0,0991	0,1049	0,1019	0,00303
2	0,5012	0,4953	0,5023	0,5023	0,4883	0,5023	0,4981	0,00303
3	0,1865	0,1865	0,1876	0,1876	0,1900	0,1876	0,1879	0,00140
4	0,0000	0,0058	0,0000	0,0012	0,0093	0,0012	0,0035	0,00350
5	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,00000
7	0,1515	0,1643	0,1527	0,1457	0,1364	0,1469	0,1492	0,00233
9	0,3263	0,3263	0,3170	0,3298	0,3228	0,3287	0,3249	0,00140
10	0,5944	0,5909	0,5932	0,5932	0,5408	0,5932	0,5823	0,01212
11	0,2564	0,2564	0,2902	0,2471	0,2436	0,2483	0,2571	0,00070
13	0,4662	0,4627	0,4662	0,4662	0,4942	0,4662	0,4711	0,00490
14	0,1399	0,1329	0,1410	0,1457	0,1538	0,1445	0,1436	0,00373
15	0,5012	0,5082	0,5000	0,5012	0,5420	0,5000	0,5103	0,00909
16	0,2681	0,2681	0,2587	0,2716	0,2786	0,2704	0,2695	0,00140
17	0,6993	0,6981	0,7005	0,6993	0,6981	0,6993	0,6991	0,00023
18	0,2797	0,2809	0,2797	0,2821	0,2902	0,2821	0,2830	0,00326
19	0,6760	0,6807	0,6760	0,6748	0,6713	0,6760	0,6758	0,00023
20	0,3846	0,3846	0,3730	0,3846	0,3811	0,3846	0,3816	0,00303
22	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,00000
23	0,0000	0,0023	0,0012	0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,00070
25	0,2564	0,2552	0,2564	0,2564	0,2564	0,2564	0,2562	0,00023
26	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,1981	0,00000
27	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,00000
29	0,0140	0,0140	0,0117	0,0000	0,0000	0,0000	0,0051	0,00886
30	0,0268	0,0303	0,0245	0,0280	0,0280	0,0280	0,0277	0,00093
31	0,0058	0,0128	0,0012	0,0000	0,0000	0,0000	0,0028	0,00303
33	0,0280	0,0233	0,0291	0,0233	0,0268	0,0233	0,0252	0,00280
34	0,0175	0,0198	0,0140	0,0198	0,0186	0,0198	0,0184	0,00093
35	0,0000	0,0023	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0005	0,00047
37	0,0163	0,0443	0,0000	0,0012	0,0000	0,0023	0,0096	0,00676

Conjunto Test

Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	Salida			$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
				RN3	RN4	RN5		
6	0,4429	0,5688	0,3625	0,5361	0,5047	0,5338	0,5012	0,05828
8	0,2914	0,5186	0,2529	0,2960	0,2471	0,2914	0,3212	0,02984
12	0,5478	0,4779	0,4487	0,4650	0,5233	0,4650	0,4760	0,07179
21	0,9091	0,7005	0,8543	0,5909	0,5047	0,5956	0,6492	0,25991
24	0,0373	0,0280	0,0385	0,0373	0,0361	0,0373	0,0354	0,00186
28	0,0198	0,0175	0,0221	0,0198	0,0186	0,0198	0,0196	0,00023
32	0,0152	0,0198	0,0117	0,0152	0,0128	0,0152	0,0149	0,00023
36	0,0897	0,0746	0,1317	0,0198	0,0093	0,0198	0,0510	0,03869

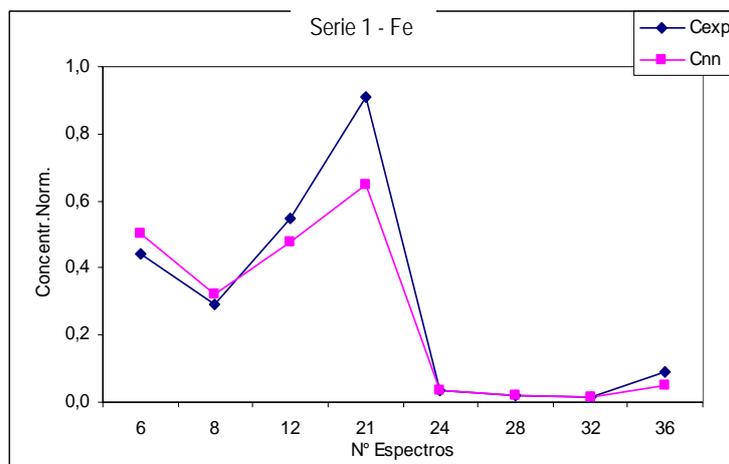


Figura 140. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie I para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 95. Resultados obtenidos en la Serie II para el Fe en aerosoles

Elemento Hierro - Fe		Salida					C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
Muestras	C <sub>exp</sub>							
1	0,1049	0,1049	0,1049	0,1049	0,1049	0,1096	0,1058	0,00093
2	0,5012	0,5023	0,5012	0,5012	0,5023	0,4942	0,5002	0,00093
3	0,1865	0,1865	0,1865	0,1865	0,1865	0,1876	0,1867	0,00023
5	0,2681	0,2646	0,2681	0,2681	0,2681	0,2669	0,2671	0,00093
6	0,4429	0,4522	0,4429	0,4452	0,4452	0,4441	0,4459	0,00303
7	0,1515	0,1538	0,1480	0,1515	0,1457	0,1527	0,1503	0,00117
9	0,3263	0,3298	0,3275	0,3263	0,3252	0,3263	0,3270	0,00070
10	0,5944	0,5932	0,5944	0,5921	0,5921	0,5816	0,5907	0,00373
12	0,5478	0,5082	0,5478	0,5490	0,5466	0,5023	0,5308	0,01702
13	0,4662	0,5035	0,4662	0,4650	0,4662	0,4988	0,4800	0,01375
14	0,1399	0,1340	0,1434	0,1399	0,1469	0,1399	0,1408	0,00093
15	0,5012	0,5047	0,5012	0,5012	0,5000	0,5315	0,5077	0,00653
16	0,2681	0,2669	0,2669	0,2681	0,2692	0,2657	0,2674	0,00070
17	0,6993	0,6900	0,6993	0,6993	0,7005	0,6993	0,6977	0,00163
18	0,2797	0,2797	0,2797	0,2786	0,2786	0,2797	0,2793	0,00047
19	0,6760	0,6737	0,6760	0,6760	0,6760	0,6760	0,6755	0,00047
20	0,3846	0,3834	0,3846	0,3858	0,3846	0,3846	0,3846	0,00000
22	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,00000
23	0,0000	0,0000	0,0047	0,0023	0,0047	0,0082	0,0040	0,00396
24	0,0373	0,0408	0,0373	0,0373	0,0373	0,0093	0,0324	0,00490
26	0,1981	0,1981	0,0443	0,1981	0,1981	0,1981	0,1674	0,03077
28	0,0198	0,0221	0,0443	0,0163	0,0198	0,0210	0,0247	0,00490
29	0,0140	0,0140	0,0443	0,0140	0,0117	0,0163	0,0200	0,00606
30	0,0268	0,0268	0,0443	0,0186	0,0245	0,0478	0,0324	0,00559
31	0,0058	0,0047	0,0443	0,0012	0,0117	0,0105	0,0145	0,00862
33	0,0280	0,0280	0,0443	0,0315	0,0315	0,0478	0,0366	0,00862
34	0,0175	0,0093	0,0443	0,0198	0,0105	0,0082	0,0184	0,00093
36	0,0897	0,0897	0,0897	0,0897	0,0897	0,0478	0,0814	0,00839
37	0,0163	0,0175	0,0163	0,0000	0,0117	0,0117	0,0114	0,00490
Conjunto Test		Salida					C <sub>nn-Media</sub>	IC <sub>exp-C<sub>nnl</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5		
4	0,0000	0,0000	0,0047	0,0000	0,0117	0,1655	0,0364	0,03636
8	0,2914	0,1527	0,3019	0,2331	0,4266	0,4044	0,3037	0,01235
11	0,2564	0,2599	0,3182	0,2879	0,2949	0,4219	0,3166	0,06014
21	0,9091	0,6247	0,6748	0,8986	0,7704	0,4953	0,6928	0,21632
25	0,2564	0,4930	0,8998	0,5140	0,2599	0,1364	0,4606	0,20420
27	0,1515	0,1643	0,0443	0,1818	0,0431	0,0140	0,0895	0,06200
32	0,0152	0,0082	0,0443	0,0163	0,0105	0,0093	0,0177	0,00256
35	0,0000	0,2121	0,0186	0,0012	0,0117	0,0117	0,0510	0,05105

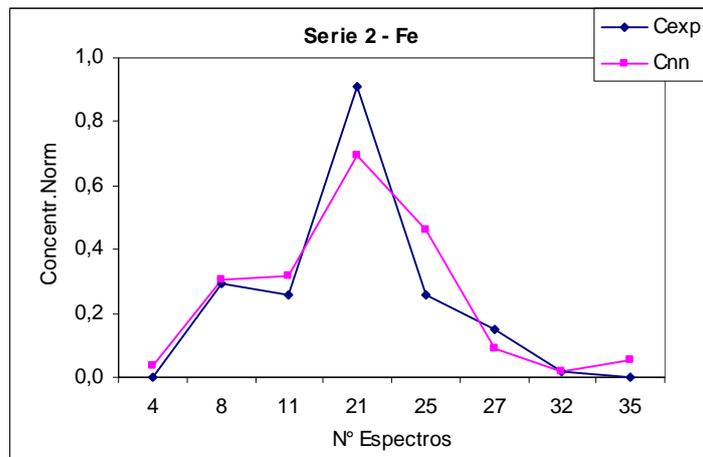


Figura 141. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (Cexp) y las determinadas por el SN (Snn) en la Serie II para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 96. Resultados obtenidos en la Serie III para el Fe en aerosoles

Elemento Hierro - Fe							Salida		
Conjunto Entrenamiento		$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$
Muestras									
1	0,1049	0,1049	0,1049	0,1061	0,1037	0,1049	0,1049	0,1049	0,00000
2	0,5012	0,5012	0,5012	0,5012	0,5594	0,5012	0,5128	0,01166	
4	0,0000	0,0012	0,0000	0,0023	0,0152	0,0047	0,0047	0,00466	
5	0,2681	0,2681	0,2681	0,2681	0,2704	0,2681	0,2685	0,00047	
7	0,1515	0,1515	0,1503	0,1538	0,1515	0,1515	0,1517	0,00023	
8	0,2914	0,2914	0,2914	0,2914	0,2890	0,2914	0,2909	0,00047	
9	0,3263	0,3263	0,3263	0,3263	0,3252	0,3263	0,3261	0,00023	
10	0,5944	0,5944	0,5956	0,5944	0,5921	0,5944	0,5942	0,00023	
12	0,5478	0,5490	0,5548	0,5478	0,5303	0,5478	0,5459	0,00186	
13	0,4662	0,4580	0,4580	0,4662	0,4464	0,4662	0,4590	0,00723	
14	0,1399	0,1399	0,1399	0,1387	0,1410	0,1399	0,1399	0,00000	
15	0,5012	0,5070	0,5058	0,5012	0,5991	0,5012	0,5228	0,02168	
16	0,2681	0,2681	0,2681	0,2692	0,2622	0,2681	0,2671	0,00093	
17	0,6993	0,6981	0,6935	0,6993	0,6445	0,6993	0,6869	0,01235	
18	0,2797	0,2797	0,2797	0,2786	0,2786	0,2797	0,2793	0,00047	
20	0,3846	0,3846	0,3846	0,3846	0,3904	0,3846	0,3858	0,00117	
21	0,9091	0,9021	0,9079	0,9056	0,7914	0,9079	0,8830	0,02611	
22	0,4079	0,4103	0,4079	0,4079	0,4033	0,4079	0,4075	0,00047	
23	0,0000	0,0023	0,0058	0,0023	0,0000	0,0152	0,0051	0,00513	
24	0,0373	0,0361	0,0047	0,0443	0,0373	0,0350	0,0315	0,00583	
25	0,2564	0,2564	0,2564	0,2576	0,2587	0,2564	0,2571	0,00070	
27	0,1515	0,0385	0,1492	0,1515	0,1515	0,1515	0,1284	0,02308	
29	0,0140	0,0385	0,0163	0,0128	0,0152	0,0093	0,0184	0,00443	
30	0,0268	0,0385	0,0361	0,0268	0,0256	0,0280	0,0310	0,00420	
31	0,0058	0,0385	0,0070	0,0058	0,0000	0,0117	0,0126	0,00676	
32	0,0152	0,0385	0,0093	0,0035	0,0093	0,0093	0,0140	0,00117	
34	0,0175	0,0385	0,0105	0,0035	0,0175	0,0070	0,0154	0,00210	
36	0,0897	0,0897	0,0862	0,0839	0,0874	0,0897	0,0874	0,00233	
37	0,0163	0,0000	0,0268	0,0117	0,0000	0,0082	0,0093	0,00699	

Conjunto Test		Salida							
Muestras	$C_{exp}$	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5	$C_{nn-Media}$	$IC_{exp-C_{nn}}$	
3	0,1865	0,0070	0,0093	0,0431	0,0175	0,0152	0,0184	0,16807	
6	0,4429	0,5128	0,5629	0,4452	0,5886	0,4347	0,5089	0,06597	
11	0,2564	0,3077	0,2587	0,3147	0,3543	0,0315	0,2534	0,00303	
19	0,6760	0,2308	0,8974	0,9079	0,3998	0,0023	0,4876	0,18834	
26	0,1981	0,0385	0,4138	0,0268	0,0501	0,7005	0,2459	0,04779	
28	0,0198	0,0385	0,0303	0,0035	0,0268	0,6993	0,1597	0,13986	
33	0,0280	0,0385	0,1131	0,0268	0,0245	0,0256	0,0457	0,01772	
35	0,0000	0,0000	0,0093	0,0012	0,0000	0,0117	0,0044	0,00443	

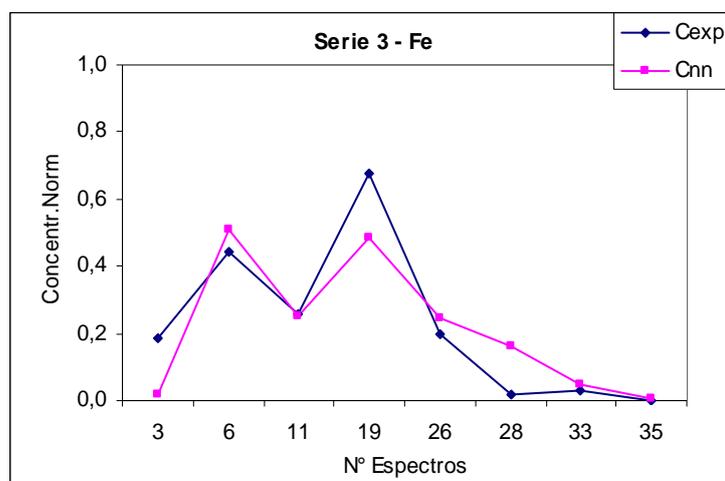


Figura 142. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas ( $C_{exp}$ ) y las determinadas por el SN ( $C_{nn}$ ) en la Serie III para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 97. Resultados obtenidos en la Serie IV para el Fe en aerosoles

Elemento Hierro - Fe		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
Conjunto Entrenamiento		C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
Muestras										
1	0,1049	0,1037	0,1061	0,1072	0,1061	0,1049	0,1056	0,00070		
3	0,1865	0,1865	0,1865	0,1935	0,1818	0,1876	0,1872	0,00070		
5	0,2681	0,2681	0,2681	0,2716	0,2669	0,2657	0,2681	0,00000		
6	0,4429	0,4429	0,4429	0,4429	0,4394	0,4429	0,4422	0,00070		
7	0,1515	0,1515	0,1515	0,1329	0,1538	0,1515	0,1483	0,00326		
8	0,2914	0,2914	0,2902	0,2914	0,2972	0,2937	0,2928	0,00140		
9	0,3263	0,3263	0,3263	0,3263	0,3298	0,3263	0,3270	0,00070		
11	0,2564	0,2564	0,2552	0,2576	0,2529	0,2564	0,2557	0,00070		
12	0,5478	0,5478	0,5478	0,5256	0,5117	0,5478	0,5361	0,01166		
13	0,4662	0,4662	0,4662	0,4872	0,5047	0,4662	0,4781	0,01189		
14	0,1399	0,1399	0,1399	0,1434	0,1340	0,1399	0,1394	0,00047		
16	0,2681	0,2681	0,2692	0,2681	0,2681	0,2681	0,2683	0,00023		
18	0,2797	0,2797	0,2797	0,2786	0,2797	0,2797	0,2795	0,00023		
20	0,3846	0,3846	0,3846	0,3846	0,3858	0,3846	0,3848	0,00023		
21	0,9091	0,9009	0,9044	0,8986	0,8834	0,9033	0,8981	0,01096		
22	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,4079	0,00000		
23	0,0000	0,0058	0,0163	0,0000	0,0117	0,0035	0,0075	0,00746		
24	0,0373	0,0361	0,0256	0,0373	0,0291	0,0373	0,0331	0,00420		
25	0,2564	0,2564	0,2564	0,2564	0,2552	0,2564	0,2562	0,00023		
27	0,1515	0,1515	0,1515	0,1503	0,1503	0,0664	0,1340	0,01748		
28	0,0198	0,0256	0,0198	0,0233	0,0221	0,0664	0,0315	0,01166		
29	0,0140	0,0210	0,0245	0,0175	0,0280	0,0268	0,0235	0,00956		
31	0,0058	0,0058	0,0047	0,0152	0,0105	0,0012	0,0075	0,00163		
32	0,0152	0,0186	0,0163	0,0163	0,0163	0,0152	0,0166	0,00140		
33	0,0280	0,0221	0,0291	0,0280	0,0303	0,0664	0,0352	0,00723		
34	0,0175	0,0210	0,0210	0,0175	0,0163	0,0186	0,0189	0,00140		
35	0,0000	0,0035	0,0058	0,0000	0,0012	0,0012	0,0023	0,00233		
36	0,0897	0,0897	0,0886	0,0886	0,0897	0,0897	0,0893	0,00047		
37	0,0163	0,0152	0,0175	0,0000	0,0023	0,0163	0,0103	0,00606		
Conjunto Test		Salida							C <sub>nn-Media</sub>	C <sub>exp</sub> -C <sub>nn</sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN5				
2	0,5012	0,6678	0,7867	0,8986	0,8671	0,9009	0,8242	0,32308		
4	0,0000	0,4557	0,0490	0,2587	0,0000	0,3217	0,2170	0,21702		
10	0,5944	0,5524	0,6480	0,5420	0,4790	0,6585	0,5760	0,01841		
15	0,5012	0,5699	0,4231	0,5455	0,5082	0,6678	0,5429	0,04172		
17	0,6993	0,4044	0,4207	0,3497	0,4499	0,5897	0,4429	0,25641		
19	0,6760	0,9021	0,8252	0,9091	0,8986	0,8904	0,8851	0,20909		
26	0,1981	0,1643	0,0210	0,1550	0,8497	0,0664	0,2513	0,05315		
30	0,0268	0,0198	0,0734	0,0198	0,0221	0,0664	0,0403	0,01352		

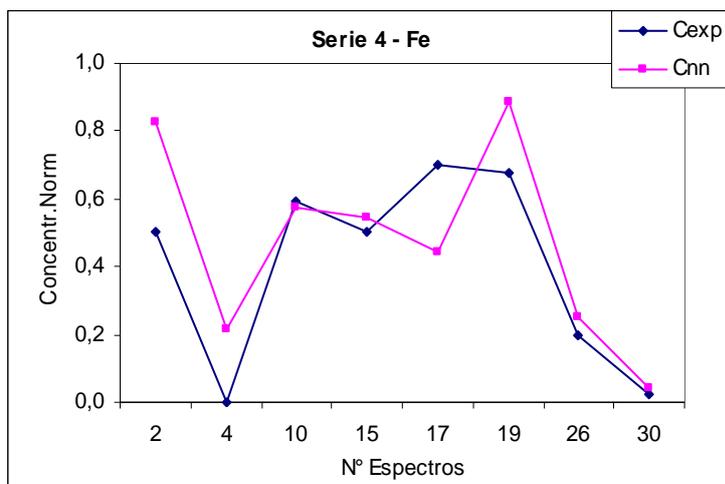


Figura 143. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (S<sub>nn</sub>) en la Serie IV para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

Tabla 98. Resultados obtenidos en la Serie V para el Fe en aerosoles

Elemento Hierro - Fe		Salida						C <sub>nn</sub> -Media	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
Conjunto Entrenamiento		RN1	RN2	RN3	RN4	RN5			
Muestras	C <sub>exp</sub>								
2	0,5012	0,5012	0,5012	0,5326	0,5012	0,5012	0,5075	0,00629	
3	0,1865	0,1876	0,1853	0,1853	0,1865	0,1865	0,1862	0,00023	
4	0,0000	0,0012	0,0023	0,0012	0,0047	0,0105	0,0040	0,00396	
5	0,2681	0,2681	0,2692	0,3077	0,2669	0,2681	0,2760	0,00793	
6	0,4429	0,4441	0,4510	0,4441	0,4429	0,4441	0,4452	0,00233	
7	0,1515	0,1515	0,1585	0,1457	0,1445	0,1503	0,1501	0,00140	
8	0,2914	0,2902	0,2879	0,2809	0,2914	0,2914	0,2883	0,00303	
9	0,3263	0,3263	0,3275	0,3217	0,3263	0,3263	0,3256	0,00070	
10	0,5944	0,5944	0,5897	0,4988	0,5944	0,5944	0,5744	0,02005	
11	0,2564	0,2552	0,2564	0,2564	0,2587	0,2494	0,2552	0,00117	
14	0,1399	0,1399	0,1329	0,1492	0,1457	0,1422	0,1420	0,00210	
15	0,5012	0,5012	0,5012	0,5897	0,5012	0,5012	0,5189	0,01772	
16	0,2681	0,2681	0,2692	0,2716	0,2669	0,2727	0,2697	0,00163	
17	0,6993	0,6993	0,6970	0,6480	0,6993	0,6981	0,6883	0,01096	
18	0,2797	0,2797	0,2821	0,2832	0,2797	0,2797	0,2809	0,00117	
19	0,6760	0,6760	0,6760	0,6737	0,6760	0,6772	0,6758	0,00023	
20	0,3846	0,3846	0,3834	0,3823	0,3834	0,3846	0,3837	0,00093	
21	0,9091	0,9021	0,8974	0,9091	0,9056	0,9021	0,9033	0,00583	
22	0,4079	0,4079	0,4079	0,4068	0,4079	0,4079	0,4077	0,00023	
24	0,0373	0,0175	0,0058	0,0361	0,0373	0,0373	0,0268	0,01049	
26	0,1981	0,0816	0,1981	0,1981	0,0734	0,1981	0,1499	0,04825	
27	0,1515	0,1515	0,1515	0,1527	0,0734	0,1515	0,1361	0,01538	
28	0,0198	0,0256	0,0186	0,0047	0,0734	0,0291	0,0303	0,01049	
30	0,0268	0,0828	0,0268	0,0117	0,0734	0,0175	0,0424	0,01562	
32	0,0152	0,0175	0,0186	0,0012	0,0734	0,0000	0,0221	0,00699	
33	0,0280	0,0839	0,0280	0,0233	0,0734	0,0256	0,0469	0,01888	
35	0,0000	0,0175	0,0000	0,0012	0,0047	0,0035	0,0054	0,00536	
36	0,0897	0,0909	0,0012	0,0897	0,0897	0,0886	0,0720	0,01772	
37	0,0163	0,0175	0,0082	0,0035	0,0163	0,0152	0,0121	0,00420	

Conjunto Test		Salida						C <sub>nn</sub> -Media	I <sub>C<sub>exp</sub>-C<sub>nn</sub></sub>
Muestras	C <sub>exp</sub>	RN1	RN2	RN3	RN4	RN6			
1	0,1049	0,0932	0,0548	0,0315	0,1713	0,0361	0,0774	0,02751	
12	0,5478	0,1002	0,7098	0,6748	0,1457	0,3706	0,4002	0,14755	
13	0,4662	0,1305	0,5070	0,6177	0,2331	0,1270	0,3231	0,14312	
23	0,0000	0,0175	0,0000	0,0012	0,0618	0,0000	0,0161	0,01608	
25	0,2564	0,4977	0,0012	0,8135	0,6841	0,7821	0,5557	0,29930	
29	0,0140	0,0175	0,0035	0,1876	0,0734	0,0000	0,0564	0,04242	
31	0,0058	0,0175	0,0058	0,2028	0,0734	0,0000	0,0599	0,05408	
34	0,0175	0,0175	0,0256	0,0012	0,0734	0,0000	0,0235	0,00606	

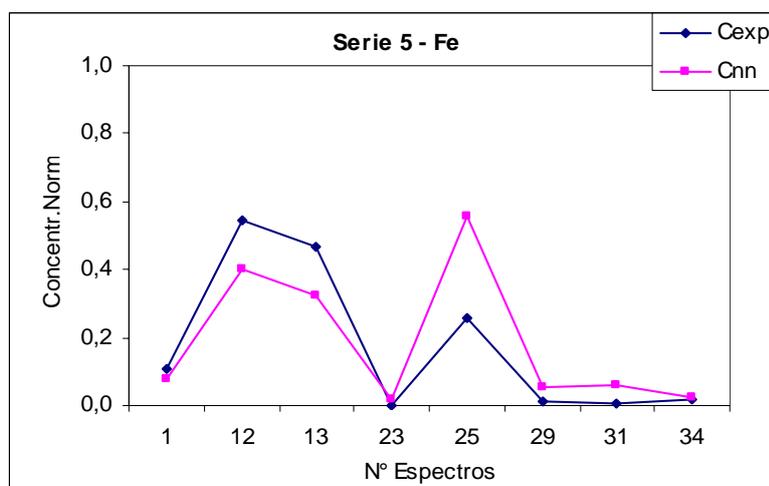


Figura 144. Gráfico comparativo de las concentraciones esperadas (C<sub>exp</sub>) y las determinadas por el SN (S<sub>nn</sub>) en la Serie V para el Fe en el conjunto de Test de muestras de aerosoles.

