

MODELACIÓN DE LA CORROSIÓN ATMOSFÉRICA DE METALES Y ALEACIONES UTILIZANDO REDES NEURONALES

1 Definición de red neuronal artificial

Una neurona biológica de la siguiente forma: a través de las dendritas recibe impulsos de otras neuronas (debida a algún estímulo) y estos impulsos se suman. Si se sobrepasa cierto umbral (que es variable) entonces la neurona dispara su propio impulso.

La definición de una neurona artificial se inspira en el comportamiento de una neurona biológica y su estructura general se basa en la interacción de las siguientes variables (ver Figura 1):

1) Entradas: S_1, S_2, \dots, S_n ; 2) Pesos: $w_{1j}, w_{2j}, \dots, w_{nj}$; 3) Función de transferencia: f ; 4) Sesgo o bias: θ ; 5) Respuesta o salida: $z_j = f(\sum_i S_i w_{ij} + \theta)$.

La información de la neurona artificial se almacena en un conjunto de pesos $w_{1j}, w_{2j}, \dots, w_{nj}$, los cuales se deben adaptar (entrenamiento de la red) según los requerimientos del diseño, que ponderan las entradas S_1, S_2, \dots, S_n . La función de transferencia f sirve para acotar la respuesta de la neurona artificial y generalmente viene dada según la interpretación específica que queramos darle a dicha respuesta. Algunas de las funciones de transferencia más utilizadas son: 1) las funciones lineales, 2) las funciones sigmoideas y 3) las funciones de base radial. El sesgo o bias θ asociado a la neurona artificial es una constante que se utiliza para fijar el valor inicial de respuesta de la neurona (esta constante puede obviarse según los requerimientos del diseño). Finalmente la respuesta o salida de la neurona artificial viene dada por:

$$z_j = f\left(\sum_i S_i w_{ij} + \theta\right) \quad (1)$$

Las redes neuronales artificiales (RNA) se definen como un conjunto de neuronas artificiales dispuestas según una arquitectura y una topología determinadas. En la Figura 2 se puede observar una estructura de red neuronal artificial con una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida.

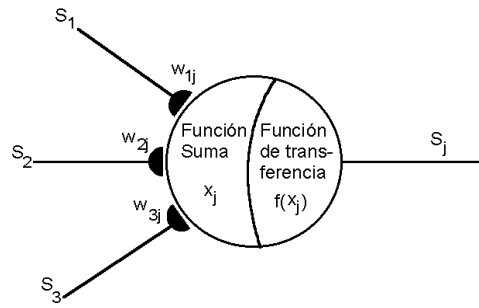


Figure 1: Estructura de una neurona artificial.

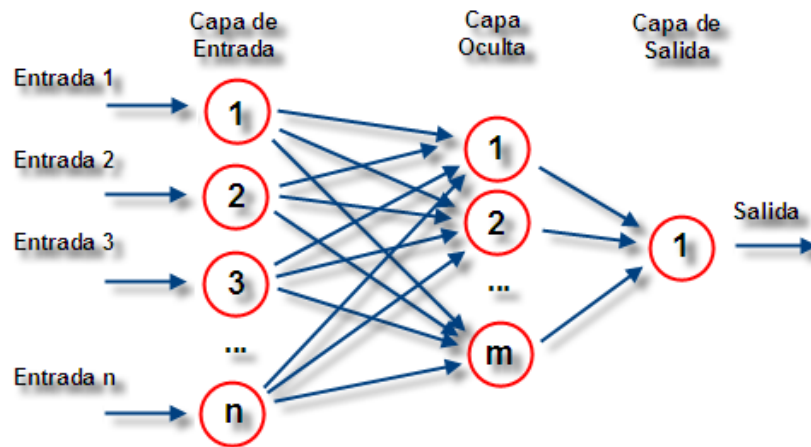


Figure 2: RNA multicapa.

Algunas características importantes de las redes neuronales que las hacen potentes y atractivas herramientas de modelación, en diferentes disciplinas, son las siguientes:

- La información de la RNA se almacena en el conjunto de pesos, los cuales se van adaptando (entrenamiento de la red) según los requerimientos del diseño.
- Las RNA muestran tolerancia al ruido: pequeños cambios en la entrada no afecta drásticamente la salida de la red.
- Las RNA pueden generalizar los conjunto de entrenamiento y así tratar con casos no conocidos.
- Las RNA son buenas para tareas perceptuales y asociaciones. Justamente con lo que se topa la computación tradicional.

1.1 RNA de base radial

Las RNA de base radial son una clase de redes neuronales cuya respuesta o salida es función de la distancia a un punto denominado centro. Las redes de base radial se utilizan fundamentalmente para aproximar funciones no lineales. Las RNA de base radial tienen una estructura de 2 capas: una capa oculta y una capa de salida. Todas las conexiones de esta red de 2 capas son hacia delante. Además mientras que las neuronas de la capa oculta poseen funciones de transferencia radiales y no lineales, las neuronas de la capa de salida realizan combinaciones lineales de las correspondientes activaciones de las neuronas en la capa oculta. Es importante destacar que con este tipo de redes se pueden construir aproximaciones de funciones que son combinaciones lineales de múltiples funciones locales no lineales, lo que claramente las convierte en una potente herramienta de aproximación de funciones de varias variables no lineales. La arquitectura de las RNA de base radial consiste en:

- Una capa oculta que realiza una transformación no lineal, a través de funciones de transferencia radiales, de las señales de entrada.
- Una capa de salida que realiza una combinación, utilizando funciones de transferencia lineal, de las señales provenientes de la capa oculta.

Entre las aplicaciones de las RNA de base radial se pueden mencionar el análisis de series de tiempo, técnicas de procesamiento de imágenes, ajuste de funciones, diagnósticos médicos, etc.

Las elecciones más comunes para las funciones de transferencia en la capa oculta son las siguientes:

- Funciones gaussianas: $f(x) = \exp(-(ax)^2)$.
- Funciones spline poliarmónicas: $f(x) = x^k, k = 1, 3, 5, \dots$; $f(x) = x^k \ln(x), k = 2, 4, 6, \dots$.
- Funciones multicuadráticas: $f(x) = (1 + (ax)^2)^{1/2}$.

2 Modelos matemáticos de corrosión del acero utilizando RNA

En este trabajo se presentan modelos de entrada-salida para estimar y predecir la velocidad de corrosión de metales y aleaciones (V_c) (en $\mu m/año$), en diferentes estaciones de experimentación (se obtiene un modelo diferente para cada estación analizada), en función de:

- El tiempo de exposición D (medido en días)
- La concentración de SO_2 atmosférico (medida en mg/m^2 día)
- La concentración de cloruro atmosférico Cl^- (medida en mg/m^2 día)
- La humedad relativa HR (en porcentaje)
- La temperatura ambiental T (medida en grados centígrados)
- La cantidad de lluvia caída Ll (medida en mm de agua caída)

$$V_c = \mathbf{f}(D, SO_2, Cl^-, HR, T, Ll) \quad (2)$$

donde \mathbf{f} es una función matricial altamente no lineal que describe la interacción entre las variables de entrada, descritas más arriba, y la velocidad de corrosión utilizando la topología de una RNA.

Otro posible modelo (equivalente al anterior) considerando la variable tiempo de humidificación (TDH) en lugar de las variables temperatura ambiental y humedad relativa es

$$V_c = \mathbf{g}(D, SO_2, Cl^-, TDH, Ll) \quad (3)$$

Los modelos desarrollados se basan en el entrenamiento de una Red Neuronal Artificial (RNA) de base radial para ajustar de manera precisa los datos conocidos u observados. Una vez que se han fijado los valores de los pesos, asociados a las respectivas RNA, en base al entrenamiento antes mencionado, es posible estimar y/o predecir valores para la velocidad de corrosión de metales y aleaciones en función de las variables de entrada descritas más arriba.

Es importante hacer notar que en este informe sólo se presentan resultados de simulación para modelos basados en la ecuación (2).

Consideraremos que cada red tiene r entradas (para el modelo de la ecuación (2) se tendría que $r = 6$), que cada capa oculta contiene s_1 neuronas y que cada capa de salida tiene s_2 neuronas. Los parámetros de diseño de cada red vendrán dados por las matrices (entre paréntesis se indica su dimensión) \mathcal{I}_W ($s_1 \times r$) y \mathcal{L}_W ($s_2 \times s_1$), y por los vectores (entre paréntesis se indica su dimensión) \mathbf{b}_1 ($s_1 \times 1$) y \mathbf{b}_2 ($s_2 \times 1$). Definamos el vector de entradas \mathbf{x} , cuya dimensión es $r \times 1$,

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} D \\ SO_2 \\ Cl^- \\ HR \\ T \\ Ll \end{pmatrix}, \quad (4)$$

y el vector auxiliar \mathbf{y} , de dimensión $s_1 \times 1$,

$$\mathbf{y} = (\mathcal{I}_W \cdot \mathbf{x}) \cdot * \mathbf{b}_1 \quad (5)$$

donde “.” representa el clásico producto escalar entre matrices y vectores, es decir

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}z_1 + a_{12}z_2 \\ a_{21}z_1 + a_{22}z_2 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

y “.*” es el producto componente a componente, es decir

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \cdot * \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1v_1 \\ u_2v_2 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

Entonces la correspondiente salida del modelo viene dada por la siguiente ecuación matricial:

$$V_c = \mathcal{L}_W \cdot \exp(-\mathbf{y} \cdot * \mathbf{y}) + \mathbf{b}_2. \quad (8)$$

Es importante destacar que la identificación de los parámetros de diseño de cada red se logra entrenando la red con las rutinas de entrenamiento del toolbox de redes neuronales (Neural Network Toolbox) de MATLAB.

3 Resultados numéricos

Los modelos desarrollados se basan en el entrenamiento de RNA de base radial para ajustar de manera precisa los datos conocidos u observados. Las estaciones analizadas fueron las siguientes:

- Arica, Putre, Antofagasta, Huasco, Valparaíso, Isla de Pascua, Quintero, Coronel, Valdivia, Antártica.

A continuación se presentan 4 ejemplos numéricos, en donde se muestran algunos de los modelos RNA desarrollados, para los 4 metales (y aleaciones) analizados en este informe.

3.1 Estación Arica: Cobre

Por ejemplo para la estación de Arica, en el caso del Cobre, se obtuvieron (después del entrenamiento de la red) los siguientes parámetros de diseño con $r = 6$, $s_1 = 7$ y $s_2 = 1$:

$$\mathcal{I}_W = \begin{pmatrix} 185.0000 & 2.3000 & 89.3300 & 65.0000 & 18.4000 & 0 \\ 458.0000 & 10.6100 & 94.5700 & 67.0000 & 18.3000 & 0 \\ 735.0000 & 1.2300 & 163.4050 & 65.0000 & 18.8000 & 0.4000 \\ 643.0000 & 1.7000 & 56.3400 & 61.0000 & 22.9000 & 0 \\ 92.0000 & 4.1100 & 85.8300 & 69.0000 & 14.8000 & 0 \\ 281.0000 & 2.6900 & 103.4600 & 58.0000 & 24.6000 & 0 \\ 559.0000 & 7.5450 & 166.9100 & 59.0000 & 22.2000 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\mathcal{L}_W = (-0.4489 \quad 0.8455 \quad 0.4412 \quad 0.0752 \quad 4.3592 \quad 1.8592 \quad -0.1615), \quad (10)$$

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

y $\mathbf{b}_2 = 7.2557$.

Los resultados obtenidos, de la velocidad de corrosión del cobre, para esta estación se muestran en la Figura 3.

3.2 Estación Putre: Acero

Por ejemplo para la estación de Putre, en el caso del Acero, se obtuvieron (después del entrenamiento de la red) los siguientes parámetros de diseño con $r = 6$, $s_1 = 8$ y $s_2 = 1$:

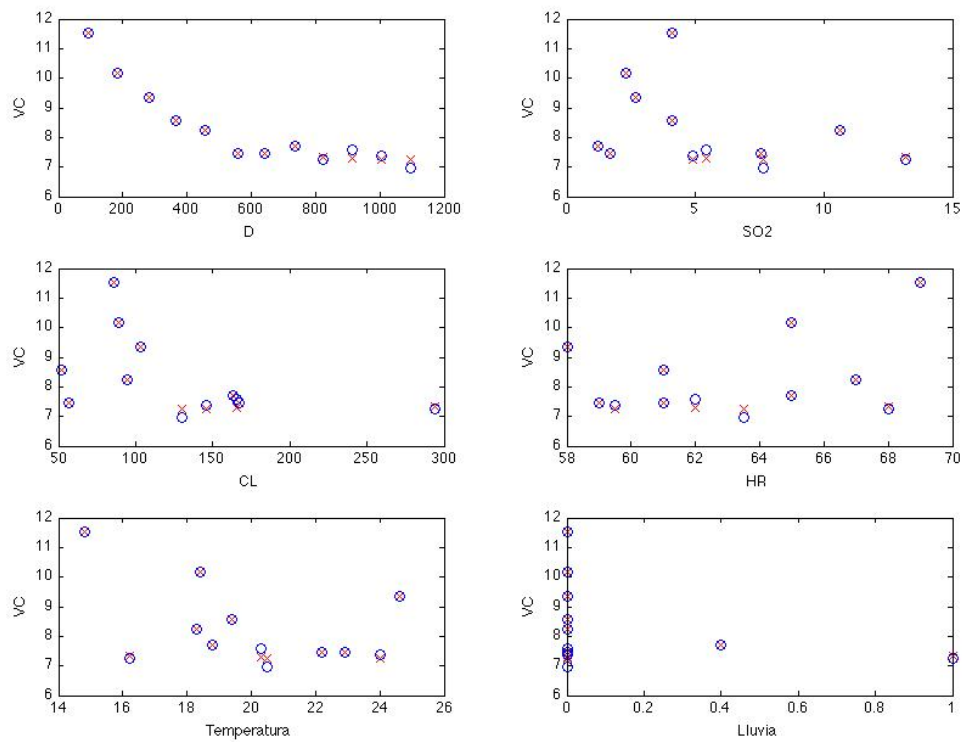


Figure 3: Velocidad de corrosión (V_c) en función de las variables de entrada. O: Valor conocido u observado, X: Valor obtenido con modelo RNA.

$$\mathcal{I}_W = \begin{pmatrix} 92.0000 & 5.3900 & 4.5800 & 58.0000 & 13.2000 & 0 \\ 184.0000 & 1.8900 & 12.1000 & 65.0000 & 11.5000 & 0 \\ 280.0000 & 2.3000 & 26.1200 & 87.0000 & 9.6000 & 0 \\ 365.0000 & 10.6600 & 3.2450 & 38.0000 & 13.6000 & 0 \\ 458.0000 & 17.8600 & 1.1700 & 55.0000 & 13.2000 & 0 \\ 558.0000 & 8.1050 & 0.8150 & 69.0000 & 21.4000 & 0 \\ 642.0000 & 6.3500 & 0.3500 & 68.0000 & 20.1000 & 141.0000 \\ 734.0000 & 6.1900 & 1.1500 & 50.0000 & 18.0000 & 1.0000 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$\mathcal{L}_W = (21.1027 \quad -7.8173 \quad 6.6654 \quad -0.2003 \quad 1.3010 \quad -0.9967 \quad 0.7283 \quad 0), \quad (13)$$

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

y $\mathbf{b}_2 = 6.1051$.

Los resultados obtenidos, de la velocidad de corrosión del acero, para esta estación, se muestran en la Figura 4.

3.3 Estación Quintero: Acero Galvanizado

Por ejemplo para la estación de Quintero, en el caso del Acero Galvanizado, se obtuvieron (después del entrenamiento de la red) los siguientes parámetros de diseño con $r = 6$, $s_1 = 8$ y $s_2 = 1$:

$$\mathcal{I}_W = \begin{pmatrix} 93.0000 & 13.6800 & 133.6600 & 87.0000 & 11.3000 & 73.1000 \\ 185.0000 & 13.4300 & 172.9500 & 85.0000 & 10.9000 & 25.8900 \\ 275.0000 & 49.3400 & 204.3500 & 82.0000 & 15.0000 & 0.2500 \\ 365.0000 & 44.7600 & 76.2750 & 83.0000 & 14.9000 & 0.2500 \\ 457.0000 & 32.0800 & 17.4000 & 85.0000 & 11.3000 & 67.0100 \\ 559.0000 & 27.4050 & 39.8650 & 86.0000 & 13.0000 & 0.2500 \\ 651.0000 & 14.0400 & 85.4400 & 82.0000 & 17.6000 & 0 \\ 742.0000 & 23.3600 & 18.0100 & 86.0000 & 13.8000 & 1.5200 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\mathcal{L}_W = (0 \quad -3.0863 \quad 0.9950 \quad 0.9094 \quad 5.8541 \quad 3.4630 \quad -2.0965 \quad -0.3828), \quad (16)$$

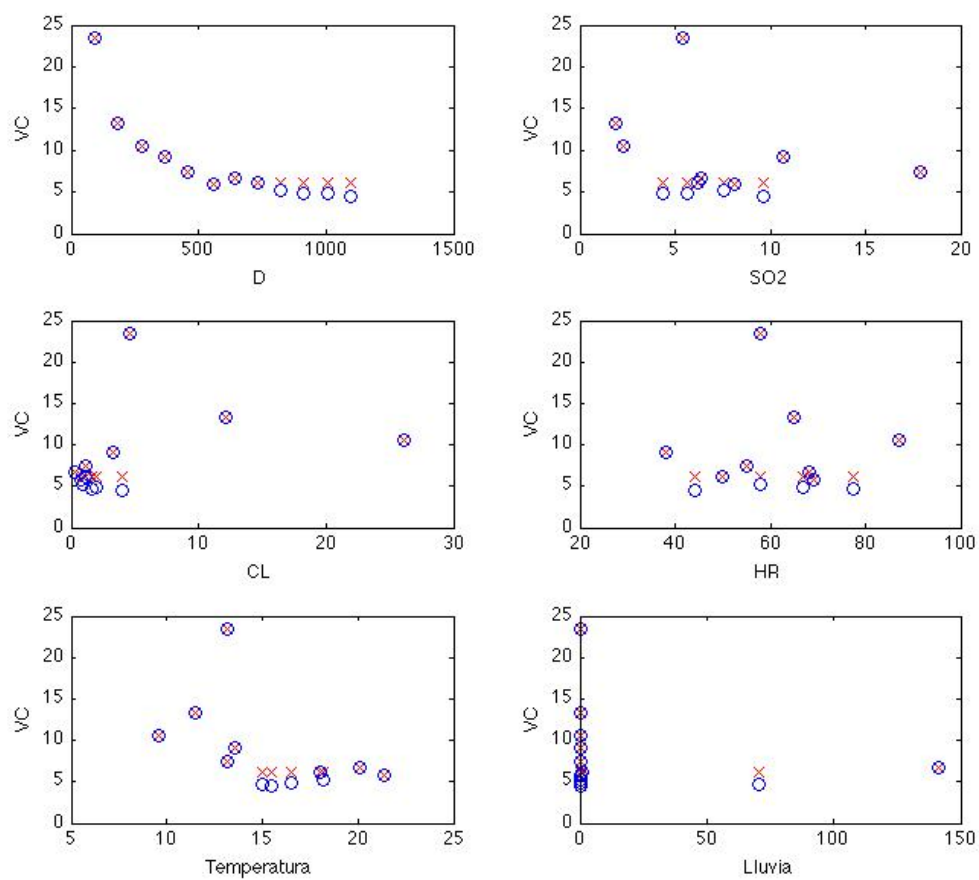


Figure 4: Velocidad de corrosión (V_c) en función de las variables de entrada. O: Valor conocido u observado, X: Valor obtenido con modelo RNA.

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

y $\mathbf{b}_2 = 9.1534$.

Los resultados obtenidos, de la velocidad de corrosión del acero galvanizado, para esta estación, se muestran en la siguiente Figura 5.

3.4 Estación Coronel: Aluminio

Por ejemplo para la estación de Coronel, en el caso del Aluminio, se obtuvieron (después del entrenamiento de la red) los siguientes parámetros de diseño con $r = 6$, $s_1 = 6$ y $s_2 = 1$:

$$\mathcal{I}_W = \begin{pmatrix} 366.0000 & 19.4400 & 3.2900 & 88.0000 & 12.1000 & 14.7000 \\ 183.0000 & 14.9200 & 22.7700 & 86.0000 & 12.1000 & 50.5200 \\ 456.0000 & 12.2200 & 4.0950 & 82.0000 & 11.8000 & 137.1000 \\ 275.0000 & 3.3250 & 7.7500 & 88.0000 & 16.4000 & 13.7100 \\ 93.0000 & 13.5650 & 20.9000 & 81.0000 & 9.3000 & 265.8000 \\ 550.0000 & 18.3800 & 1.8000 & 77.0000 & 15.7000 & 1.5000 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$\mathcal{L}_W = (0.1550 \quad 0.1450 \quad 0.1150 \quad 0.0950 \quad 0.0750 \quad 0.0550), \quad (19)$$

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \\ 0.0083 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

y $\mathbf{b}_2 = 0.3250$.

Es necesario hacer notar que el valor 0.0083 que aparece en el vector \mathbf{b}_1 es un coeficiente de normalización de unidades. Por lo tanto en todos los casos considerados tendrá el mismo valor. Es decir el vector \mathbf{b}_1 será un vector (con las dimensiones correspondientes según el caso) en cuyas componentes tendrá sólo el valor 0.0083.

Los resultados obtenidos, de la velocidad de corrosión del aluminio, para esta estación, se muestran en la Figura 6.

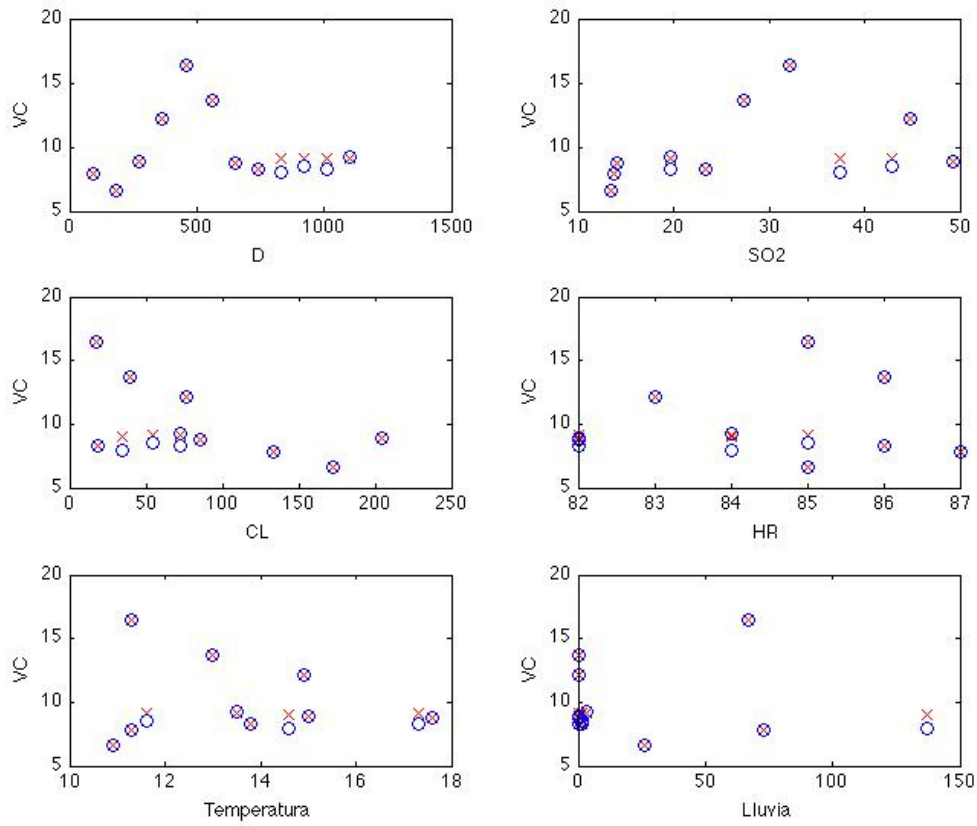


Figure 5: Velocidad de corrosión (V_c) en función de las variables de entrada. O: Valor conocido u observado, X: Valor obtenido con modelo RNA.

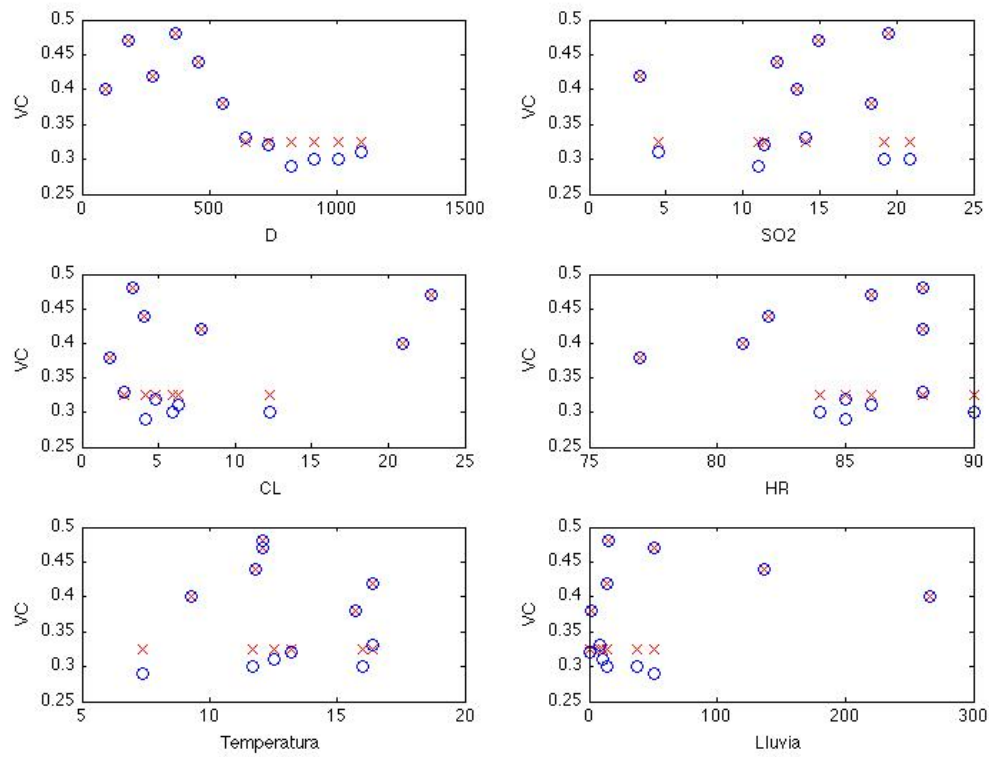


Figure 6: Velocidad de corrosión (V_c) en función de las variables de entrada. O : Valor conocido u observado, \times : Valor obtenido con modelo RNA.

3.5 Resumen de los otros resultados obtenidos

También se realizaron simulaciones de las velocidades de corrosión del Acero, del Cobre, del Acero Galvanizado y del Aluminio para todas las estaciones antes mencionadas. Los coeficientes de correlación de todos los resultados obtenidos se presentan en la tabla 1. En la tabla 2 se presentan los valores del coeficiente \mathbf{b}_2 de las ecuaciones matriciales para cada modelo RNA considerado. Es importante hacer notar que el valor de este coeficiente \mathbf{b}_2 nos entrega una primera aproximación (en el caso que es diferente de 0.0000) del orden de valores que tomará la velocidad de corrosión en cada metal (o en cada aleación) considerado. Por ejemplo es claro que en la estación Quintero la velocidad de corrosión del acero estará por sobre los valores estimados para el resto de las estaciones y para el resto de los metales y aleaciones. Además es claro, según la tabla 2, que la corrosión afecta en una mayor medida al acero que al resto de los metales (o aleaciones) considerados.

Estación	Acero	Cobre	Galvanizado	Aluminio
Arica	0.9767	0.9955	0.8969	0.9762
Putre	0.9940	0.9690	0.9892	0.9369
Antofagasta	0.9965	0.9842	0.9843	0.9797
Huasco	0.9970	0.9916	0.9135	0.9406
Valparaíso	0.9960	0.9657	0.9841	0.8685
Isla de Pascua	0.9866	0.9895	0.9895	0.9876
Quintero	0.9908	0.9877	0.9909	0.9350
Coronel	0.9972	0.9856	0.9040	0.9886
Valdivia	0.9951	0.9711	0.9393	0.9750
Antártica	0.9950	0.9889	0.9987	0.7945

Table 1: Coeficientes de correlación ρ entre los datos conocidos u observados de la velocidad de corrosión y los valores obtenidos con el modelo RNA.

Estación	Acero	Cobre	Galvanizado	Aluminio
Arica	50.9496	7.2557	0.000	1.6048
Putre	6.1051	0.5225	0.4166	0.1897
Antofagasta	15.8088	2.7220	1.5375	2.2600
Huasco	44.5991	1.3381	2.5796	0.9567
Valparaíso	0.0000	0.0000	1.4187	0.7623
Isla de Pascua	44.6832	1.5803	2.1185	0.3395
Quintero	236.2700	1.7956	9.1534	17.2400
Coronel	49.8456	0.0000	12.4953	0.3250
Valdivia	21.7118	0.7710	0.6327	0.2918
Antártica	31.7799	2.3838	0.6528	0.5133

Table 2: Coeficientes \mathbf{b}_2 de las ecuaciones matriciales correspondientes a los modelos RNA.

Es importante destacar que en todos los casos, con la excepción de la estación de la Antártica, se trabajó con 36 meses de datos (12 datos medidos con una frecuencia de 3 meses), de los cuales 24

meses (8 datos) fueron utilizados para el entrenamiento de las redes y los 12 meses restantes (4 datos) fueron utilizados con el objetivo de evaluar el desempeño predictivo de cada modelo RNA desarrollado.

En el caso de la estación de la Antártica se debió trabajar con una menor cantidad de datos, principalmente por la ausencia de estimaciones para los valores de SO_2 y Cl^- . En este caso sólo se trabajó con 18 meses de datos (6 datos), de los cuales 15 meses de datos (5 datos) fueron utilizados para entrenamiento y 3 meses de datos (1 dato) para predicción.

4 Conclusiones

- En este trabajo se presentan modelos matemáticos de entrada-salida, utilizando Redes Neuronales Artificiales de base radial, para estudiar el fenómeno de corrosión atmosférica en diferentes metales y aleaciones.
- Los resultados de velocidad de corrosión obtenidos, con cada modelo RNA, se ajustan, en casi todos las estaciones analizadas, muy bien a los datos conocidos u observados (ver Tabla 1).
- Se espera que con una mayor cantidad de datos se puedan obtener modelos de estimación cada vez más precisos.