



Diseño y optimización de una red neuronal artificial para el modelado del proceso de obtención de jarabe a partir del germen de maíz desgrasado

Design and optimization of an artificial neural network for modeling syrup production process from defatted corn germ

FÉLIX MILLÁN¹

fmillan@usb.ve

Universidad Simón Bolívar

LISBETH GIL²

lisbethdgm@hotmail.com

Universidad Simón Bolívar

Departamento de Tecnología

de Procesos Biológicos y Bioquímicos

Recibido: 16/11/2010

Aceptado: 07/04/2011

Resumen

El propósito de este trabajo fue desarrollar una red neuronal artificial para el modelado predictivo del proceso de obtención de jarabe a partir del germen desgrasado de maíz. Se consideraron como parámetros de entrenamiento de la red el número de capas ocultas de neuronas, el número de neuronas por capa oculta, la tasa de aprendizaje y los factores de incremento y

¹ Profesor asociado. PPI nivel I. 13 publicaciones en RACI. Universidad Simón Bolívar.

² Ingeniero Químico. Universidad Simón Bolívar.



disminución de la misma, los cuales se optimizaron mediante un diseño de superficie de respuesta Box-Behnken. Luego de entrenar la red mediante un algoritmo de retro-propagación del error, se obtuvo como resultado del análisis del diseño estadístico un modelo conformado por una capa oculta de seis neuronas, operando con una tasa de aprendizaje de 0,05 y factores de incremento y disminución de la misma en el orden de 1,5 y 0,04 respectivamente, permitiendo, mediante datos de validación, el reconocimiento de 99,78% de la variabilidad de los datos experimentales para las condiciones tecnológicas empleadas en la obtención de carbohidratos fermentables a partir del germen desgrasado de maíz.

Palabras clave: redes neuronales artificiales, metodología de superficie de respuesta, diseño Box Behnken, germen de maíz desgrasado.

Abstract

The purpose of this work was to develop an artificial neural network for predictive modeling of syrup production from defatted corn germ. The training parameters of the network were the number of hidden neuron layers, the number of neurons inside each hidden layer, the learning rate and the factors for increase and decrease the learning rate. These parameters were optimized through a response surface design Box Behnken. Once the network was trained using a back-propagation algorithm and after the statistical design analysis, a model composed by one hidden layer of six neurons, operating with a learning rate of 0.05 and factors for increase and decrease the learning rate of 1.5 and 0.04 respectively, let, through validation data, the recognition of 99.78% of experimental data variability under technological conditions employed for obtaining fermentable carbohydrates from defatted corn germ.

Keywords: artificial neural networks, response surface methodology, Box Behnken design, defatted corn germ.

Introducción

El maíz constituye uno de los cereales de mayor importancia en Venezuela y el mundo, debido a su aporte energético para la nutrición humana y por ser materia prima fundamental en la obtención industrial de



almidón, edulcorantes, aceite, harina y alcohol. Además, su empleo en la formulación de alimentos balanceados para animales le permite desempeñar un rol principal en la producción de carne, leche y huevos. Sin embargo, sólo entre 65 y 70% del grano de maíz es transformado durante el procesamiento de alimentos en producto final. El resto se transforma en subproductos que son mayoritariamente destinados a la producción de alimentos para animales (Hebeda, 1987; Harwood, 1992; Fennema, 1993).

En Venezuela, uno de los mayores subproductos es el germen de maíz desgrasado, que se origina de la extracción con hexano del material extraíble del germen para la obtención de aceite, siendo el germen, a su vez, un subproducto proveniente de la producción de harina precocida de maíz (Benson, 1987; Torres *et al*, 2009).

Son diversas las propuestas realizadas para el aprovechamiento del germen de maíz desgrasado. La que se plantea en el presente trabajo se fundamenta en la importante proporción de almidón contenido en el subproducto, lo cual permitiría la producción de jarabes ricos en maltosa que a su vez podrían ser utilizados como estabilizantes, debido a su baja tendencia a la cristalización, y como agentes reguladores de la actividad de agua en la industria de la confitería y la formulación de alimentos congelados (Norman, 1980).

Las variables involucradas en la obtención de jarabes de maltosa a partir del germen desgrasado, pueden agruparse y estructurarse en un modelo neuronal artificial a fin de poder realizar un modelado predictivo del proceso que permita predecir las condiciones de salida del mismo, en función de fluctuaciones en las condiciones de procesamiento.

La conformación de una red neuronal artificial contempla la definición de las variables o parámetros de entrenamiento del modelo. En ese sentido, gran parte de las investigaciones consideran la necesidad de realizar un tanteo y error a fin de determinar las mejores condiciones de los parámetros de entrenamiento (número de capas ocultas de neuronas, número de neuronas por capa oculta, tasas de aprendizaje, momento y

algoritmos de entrenamiento), que mejor se adecuen a un determinado sistema o proceso. En vista de ello, el presente trabajo tiene como objetivo, diseñar una arquitectura neuronal de retropropagación del error mediante el diseño estadístico de experimentos, a fin de modelar el proceso de obtención de jarabe de maltosa a partir de un subproducto de la industria nacional como lo es el germen desgrasado de maíz.

Procedimiento experimental

Procesamiento de la materia prima y obtención de hidrolizados

Las muestras de germen desgrasado fueron suministradas por la empresa Remavenca, ubicada en el estado Aragua. Para la obtención de los hidrolizados se procedió a la molienda de las muestras en un molino de disco con separación de 0,2 mm entre discos y posterior mezcla con agua destilada de acuerdo con las proporciones establecidas en el diseño experimental. Se ajustó el pH de las muestras a $5,3 \pm 0,2$ con ácido sulfúrico al 10% p/v, el cual está dentro del rango de acción de las enzimas de licuefacción y sacarificación (Guzmán y Paredes, 1995). Las muestras acondicionadas se colocaron en un baño térmico durante 20 minutos, una vez alcanzada la temperatura de 80 °C, para garantizar la gelatinización del almidón. Luego se incrementó la temperatura a 95 °C y se dosificó la enzima de licuefacción α -amilasa termoestable (Sigma-Aldrich, EE.UU). Al término del proceso de licuefacción se disminuyó la temperatura del baño hasta 60 °C y se dosificó la enzima de sacarificación α -amilasa maltogénica de *Bacillus stearothermophilus* (Maltogenase®. Novozymes, Dinamarca) El hidrolizado resultante se filtró mediante papel filtro N° 53 (Ederol).

Determinación de sólidos solubles en los hidrolizados

Se tomaron 20 mililitros de los hidrolizados resultantes y se estabilizó su temperatura a 20 °C. Posteriormente se determinaron los sólidos solubles mediante el equipo Antón Paar.



Diseño experimental

Las variables de procesamiento de la materia prima: concentración de la enzima α -amilasa termoestable, concentración de la enzima α -amilasa maltogénica, concentración de sólidos, tiempo de licuefacción y tiempo de sacarificación, se combinaron en un diseño factorial fraccionario de resolución V (2^{5-1} , Tabla 1). Este diseño permitió disminuir el número de experimentos, al mismo tiempo que se garantizó que los efectos principales y las interacciones de bajo orden no fueran altas entre sí. El diseño se replicó tres veces; las dos primeras réplicas se utilizaron para entrenar la arquitectura neuronal y la tercera réplica para validar su desempeño (Myers y Montgomery, 2002). Es importante destacar que dado que el diseño empleado sólo considera dos niveles por factor, se asume que la respuesta es aproximadamente lineal cuando los factores pasan del nivel bajo al alto. Esta suposición es razonable por cuanto el diseño no está siendo empleado con fines de interpolación.

Desarrollo del modelo neuronal

El modelo neuronal desarrollado consta de cinco neuronas en la capa de entrada, conformadas por los factores contemplados en el diseño factorial fraccionario (Tabla 1). A los niveles de los factores o estímulos de la red, se les asignó un peso de conexión de poca magnitud a fin de propiciar la transmisión del impulso a la primera capa de neuronas ocultas. Así, la entrada neta de la j -ésima neurona de la capa oculta puede representarse con la ecuación (1):

$$\text{net}_{pj}^h = \sum_{i=1}^N w_{ji}^h x_{pi} + \theta_j^h \quad (1)$$

Donde x_{pi} es la entrada o estímulo que recibe la i -ésima neurona de entrada, w_{ji}^h y θ_j^h son los pesos de conexión y los términos de tendencia, respectivamente, asociados a toda neurona h de la capa oculta. La

TABLA 1
DISEÑO FACTORIAL FRACCIONARIO 2_V^{5-1} PARA LAS VARIABLES DEL PROCESO
DE HIDROLIZADO DEL ALMIDÓN DEL GERMEN DESGRASADO DE MAÍZ

Tiempo de licuefacción (min)	Tiempo de sacarificación (h)	Sólidos % (p/p)	Enzima de licuefacción % (p/p)	Enzima de sacarificación % (p/p)
30	2	15	0,02	0,05
30	2	15	0,04	0,03
30	2	20	0,02	0,03
30	2	20	0,04	0,05
30	6	15	0,02	0,03
30	6	15	0,04	0,05
30	6	20	0,02	0,05
30	6	20	0,04	0,03
90	2	15	0,02	0,03
90	2	15	0,04	0,05
90	2	20	0,02	0,05
90	2	20	0,04	0,03
90	6	15	0,02	0,05
90	6	15	0,04	0,03
90	6	20	0,02	0,03
90	6	20	0,04	0,05

información se transfiere a la capa de neuronas de salida mediante una función de transferencia f_j^h como la tangente hiperbólica, donde la salida neta de las neuronas de la capa oculta puede representarse con la ecuación (2):



$$y_{pj} = f_j^h(\text{net}_{pj}^h) \quad (2)$$

Donde y_{pj} es la salida neta de cada j -ésima neurona de la capa oculta. Finalmente, la información se transfiere a la capa de neuronas de salida, constituida por la concentración de carbohidratos fermentables (g/L). La entrada neta de cada k -ésima neurona de la capa oculta puede representarse mediante la ecuación (3).

$$\text{net}_{pk} = \sum_{j=1}^L w_{kj}^o y_{pj} + \theta_k^o \quad (3)$$

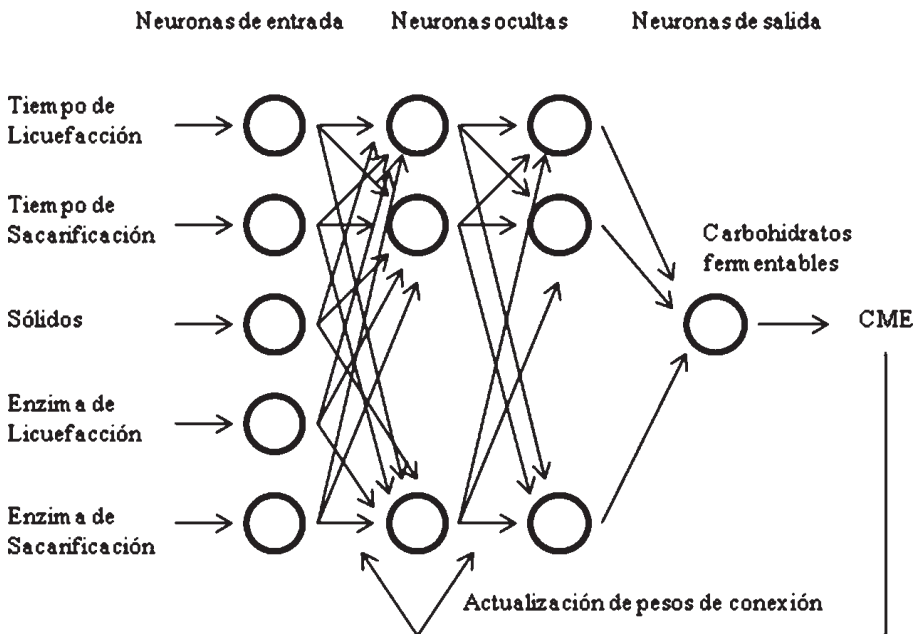
Donde W_{kj}^o representa los pesos de conexión entre la j -ésima neurona de la capa oculta y la k -ésima neurona de la capa de salida. En las ecuaciones (1), (2) y (3), el subíndice p representa el vector de entrenamiento de la red, el cual está constituido por la concentración de carbohidratos fermentables obtenidos en las dos primeras réplicas del diseño factorial fraccionario. Se consideró como función de salida de la arquitectura neuronal el cuadrado medio del error expresado en la ecuación (4), (Teo y Sim, 1995; Kim y Yum, 2004).

$$\text{CME} = \sqrt{\frac{\sum_1^N (\delta_E(E)_i^{\text{Red}} - \delta_E(E)_i^{\text{Experimental}})^2}{N}} \quad (4)$$

Donde $\delta_E(E)_i^{\text{Red}}$ es el vector de salida de la red y $\delta_E(E)_i^{\text{Experimental}}$ constituye el vector de entrenamiento; N representa el número de iteraciones de la red. Durante el proceso de entrenamiento se busca minimizar la función de error mediante la actualización continua en cada iteración de los pesos de conexión (Reed y Marks II, 1999). El diagrama de entrenamiento puede visualizarse en la Figura 1. Usualmente, los

parámetros de entrenamiento de las redes artificiales de neuronas son establecidos por ensayo y error. En el presente trabajo se ha querido plantear un abordaje desde el punto de vista del diseño estadístico de experimentos. Para ello se consideraron cinco factores o variables de entrenamiento: número de neuronas en la primera capa oculta (A), número de neuronas en la segunda capa oculta (B), tasa de aprendizaje de la red (C), factor de incremento de la tasa de aprendizaje (D) y el factor de disminución de la tasa de aprendizaje (E), manteniendo constante la matriz inicial de los pesos iniciales de conexión. Los factores se combinaron en un diseño Box-Behnken para generar $40 + n_c = 6$ tratamientos experimentales, donde cada tratamiento representa una red neuronal y n_c representa la condición central de los parámetros de

FIGURA 1
DIAGRAMA GENERAL DE LA ARQUITECTURA NEURONAL





entrenamiento, la cual se replicó seis veces para obtener una estimación independiente del error aleatorio y para evaluar la bondad de ajuste de las superficies de respuesta del cuadrado medio del error, como función de los parámetros de entrenamiento. El diseño, en sus variables codificadas, se muestra en la Tabla 2.

TABLA 2
DISEÑO BOX-BEHNKEN PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL

Parámetros de entrenamiento				
A	B	C	D	E
±1	±1	0	0	0
±1	0	±1	0	0
±1	0	0	±1	0
0	0	0	0	±1
0	±1	±1	0	0
0	±1	0	±1	0
0	±1	0	0	±
0	0	±1	±1	0
0	0	±1	0	±1
0	0	0	±1	±1
0	0	0	0	0

A: -1: 5 neuronas; +1: 7 neuronas. B: -1: 1 neurona; +1: 9 neuronas. C: -1: 0,001; +1: 0,3. D: -1: 1; +1: 1,5. E: -1: 0,001; +1: 0,1

Resultados y discusión

En la tabla 3 se muestra el análisis de varianza del diseño Box-Behnken para la optimización de los parámetros de entrenamiento de la red, el cual se realizó previa comprobación del supuesto de normalidad de los datos experimentales. El modelo matemático planteado a partir del diseño experimental puede representarse de acuerdo con la ecuación (5):

$$y = \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i < j} \sum \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon \quad (5)$$

TABLA 3

ANÁLISIS DE VARIANZA DEL DISEÑO BOX-BEHNKEN PARA LOS PARÁMETROS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F	p
A	0,0184	1	0,0184	1,35	0,2981
B	0,1402	1	0,1402	10,27	0,0239*
C	0,0038	1	0,0038	0,28	0,6204
D	0,1399	1	0,1399	10,25	0,0240*
E	0,0280	1	0,0280	2,05	0,2114
CD	0,0853	1	0,0853	6,25	0,0545**
DD	0,0648	1	0,0648	4,75	0,0813**
EE	0,0601	1	0,0601	4,40	0,0900**
Falta de ajuste	0,5908	20	0,0295	2,16	0,2004
Error puro	0,0682	5	0,0136		

* Significativo con probabilidad de error tipo I $\alpha = 0,05$

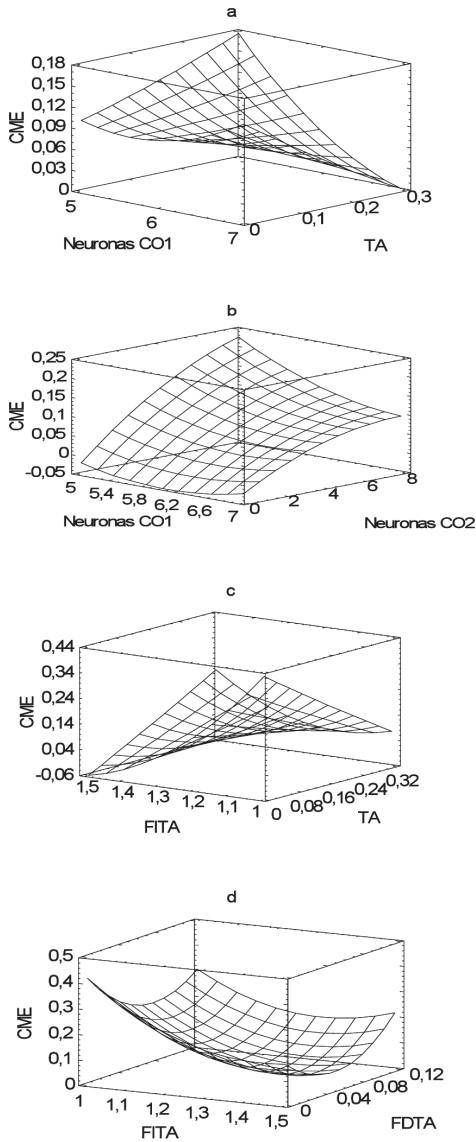
** Significativo con probabilidad de error tipo I $\alpha = 0,10$



El término de *error total* en el análisis de varianza del modelo, se descompuso en un término de error puramente aleatorio y el error debido a la falta de ajuste del modelo de superficie. En ese sentido, la probabilidad asociada a la falta de ajuste resultó mayor a la probabilidad de error tipo I planteada originalmente en el estudio ($p > 0,05$), por lo que la superficie de respuesta resultó adecuada para explorar la relación funcional entre el cuadrado medio del error o función de error a la salida de los modelos neuronales y los parámetros de entrenamiento. Como efectos principales, el número de neuronas de la segunda capa oculta (CO2) y el factor de incremento de la tasa de aprendizaje (FITA) resultaron estadísticamente significativos ($p = 0,0239$ y $p = 0,0240$, respectivamente). En cuanto a los términos de segundo orden del modelo, la interacción entre la tasa de aprendizaje (TA) y el FITA, también resultaron de importancia ($p = 0,0545$), así como los efectos cuadráticos puros del FITA y del factor de disminución de la tasa de aprendizaje (FDTA). En la Figura 2 se muestran algunas superficies generadas por el modelo, que sirvieron de base para optimizar los parámetros de entrenamiento. La utilización de una sola capa de neuronas ocultas constituida por seis neuronas de procesamiento de información, en combinación con una TA en el orden de 0,3 contribuyó a disminuir significativamente la función de error (Figura 2a). Por el contrario, la utilización de una segunda capa oculta de neuronas, independientemente del número de neuronas ocultas de la primera capa, no contribuyó en ningún momento a mejorar la habilidad del modelo neuronal para disminuir la función de error (Figura 2b).

Sin embargo, más que la magnitud de la TA por sí sola, el FITA resultó determinante, aun en magnitudes de TA en el orden de 0,05, para disminuir el cuadrado medio del error (Figura 2c). Por último, la constitución del modelo neuronal con un FDTA en el orden de 0,05, siempre que se utilice un FITA entre 1,4 y 1,5, resultó adecuada para minimizar la función de error e incrementar la velocidad de aprendizaje de la red (Figura 2d). En este sentido, se logró minimizar la función de error a valores entre 10^{-14} y 10^{-15} en sólo 20 iteraciones o ciclos de aprendizaje de la red. En la Figura 3 se presenta la habilidad predictiva del modelo neuronal finalmente constituido por una sola capa oculta de seis neuronas, una tasa

FIGURA 2
SUPERFICIES DE RESPUESTA DE LOS PARÁMETROS DE ENTRENAMIENTO
DE LA ARQUITECTURA NEURONAL

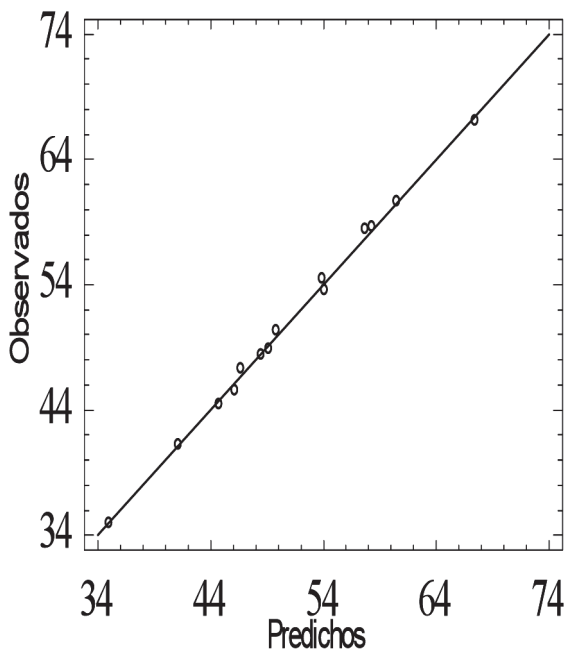




de aprendizaje de 0,05 y factores de incremento y disminución de la TA en el orden de 1,5 y 0,04, respectivamente. Se pone de manifiesto la habilidad del modelo neuronal desarrollado ($R^2_{ajustado} = 99,78\%$), en el modelado predictivo del proceso de obtención de jarabe de azúcares fermentables a partir del germen desgrasado de maíz. Con respecto al proceso de obtención de jarabe, la mayor conversión del almidón a carbohidratos fermentables predicha por la red y validada con los datos experimentales de la Figura 3, se logró al incrementar la concentración de sólidos a 20% (p/p) en el inicio de la licuefacción y a concentraciones de 0,04% (p/p) de la enzima alfa-amilasa termoestable y tiempos de sacarificación de seis horas. Sólo fue necesario utilizar la enzima de sacarificación en una concentración de 0,03% (p/p) y un tiempo de licuefacción de 30 minutos para obtener la mayor concentración de car-

FIGURA 3

RELACIÓN ENTRE CARBOHIDRATOS FERMENTABLES (G/L) OBSERVADOS Y PREDICHOS PARA LA VALIDACIÓN DEL MODELO NEURONAL



Observados	Predichos
34,9	35,0308
41,2	41,1766
44,4	44,75
45,5	46,1613
47,3	46,7118
48,4	48,4935
48,8	49,1442
50,3	49,8548
53,5	54,0688
54,5	53,8686
58,4	57,6923
58,6	58,2728
60,6	60,4949
67,1	67,4715

bohidratos fermentables. En conclusión, el uso de experimentos estadísticamente diseñados constituye una valiosa tecnología para la optimización de los parámetros de entrenamiento de una red neuronal de retropropagación del error, destinada al modelado de un proceso de obtención de jarabe, en contraposición al enfoque tradicional de ensayo y error para la selección del modelo neuronal apropiado.

Referencias

- BENSON, G.; PEARCE, R. (1987). "Corn perspective and culture", en: *Corn: Chemistry and Technology*. EE.UU.: American Association of Cereal Chemists, Inc.
- FENNEMA, Owen R. (1993). "Características de los tejidos vegetales comestibles", en: *Química de los alimentos*. España: Editorial Acribia.
- GUZMÁN, H. y PAREDES, O. (1995). "Amylolytic enzymes and product derived from starch". *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* 35(5), 373-403.
- HARWOOD, John P. (1992). *Technology of corn wet milling and associated processes*. Holanda: Elsevier Science Publishers.
- HEBEDA, Ronald E. (1987). "Corn sweeteners", en: *Corn: Chemistry and technology*. EE.UU.: American Association of Cereal Chemists, Inc.
- KIM, Y. y YUM, B. (2004). "Robust design of multilayer feedforward neural networks: an experimental approach". *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 17 (3), 249-263.
- MYERS, H. y MONTGOMERY, D. (2002). *Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments*. EE.UU.: Wiley Series in Probability and Statistics.
- NORMAN, Borlaug E. (1980). "New developments in starch syrup technology", en: *Enzymes and food processing*. Inglaterra: Applied Science Publishers, LTD.
- TORRES, A.; RODRÍGUEZ, M.; GUERRA, M. y GRANITO, M. (2009). "Factibilidad tecnológica de incorporar germen desgrasado de maíz en la elaboración de pasta corta". *Anales Venezolanos de Nutrición* 22 (1), 25-31.
- REED, R. y MARKS II, R. (1999). *Neural smithing: supervised learning in feedforward artificial neural networks*. EE.UU.: Massachusetts Institute of Technology Press.
- TEO, M. y SIM, S. (1995). "Training the neocognitron network using design of experiments". *Artificial Intelligence in Engineering*, 9 (2), 85-94.