

Estimación adaptativa de parámetros en un sistema dinámico no lineal

Yuriria Cortés Poza

Universidad Nacional Autónoma de México
yuriria@ciencias.unam.mx

Resumen. En este trabajo se construye una red neuronal, entrenada mediante un algoritmo genético, capaz de estimar los parámetros de un sistema dinámico no lineal con comportamiento caótico, a partir de una serie de tiempo de las variables del sistema. Se tomó como caso de estudio un *ratchet* determinista, un sistema de una partícula en un potencial periódico asimétrico, sobre la cual actúa una fuerza externa armónica. Este sistema complejo, altamente no lineal y no integrable, es de sumo interés tanto por sus aplicaciones biológicas como por la dinámica que presenta. La red estima de manera eficiente y confiable los parámetros en este sistema, tanto en los casos en los que la partícula en el potencial exhibe un comportamiento periódico, como en los casos en donde el comportamiento es caótico.

1 Introducción

En un sistema dinámico existen parámetros que caracterizan su comportamiento. Frecuentemente estos parámetros son desconocidos y no pueden ser medidos directamente, por lo cual, el monitoreo debe de llevarse a cabo mediante observación del sistema. Estas observaciones son cantidades medibles que dependen de los parámetros. El objetivo entonces es determinar el valor de estos parámetros, a partir de una serie de tiempo de alguna variable del sistema. El problema de la *estimación de parámetros*, requiere, en la mayoría de los casos la solución de un problema de optimización [Bard 74, Beck 77, Gallant 87]. Cuando el sistema dinámico que se está modelando es no lineal, el problema de estimación de parámetros se vuelve complicado, y el desempeño de métodos tradicionales que existen en la literatura puede ser bastante pobre. La estimación de parámetros en sistemas no lineales es un problema computacional importante con aplicaciones en diversas áreas, tanto científicas como tecnológicas [Jorgensen 01, Park, Froment, 98, Whigham, Rehnagel 98].

La técnica que aplicamos nosotros en este trabajo, combina las redes neuronales con la teoría de algoritmos genéticos, utilizando un criterio de mínimos cuadrados para determinar la convergencia. El método encuentra el valor de los parámetros de un sistema dinámico no lineal de forma eficiente y confiable. La información que requiere para la estimación son únicamente las mediciones tomadas del comportamiento del sistema, es decir, una serie de tiempo de las variables importantes.

me conocimiento alguno del operador de estimación como lo hacen métodos lacionales, y siempre se converge a un óptimo global.

método que proponemos se examina bajo diferentes condiciones aplicándolo a sistema dinámico no lineal, con comportamiento caótico, que en los últimos años despertado un gran interés [Cortés 2000, Magnasco 93, Sarmiento, Larralde 99]. bajamos con una partícula en un potencial periódico asimétrico en el que actúa fuerza externa armónica dependiente del tiempo. Este sistema, llamado *Ratchet* gran interés por sus propiedades dinámicas, ya que la fuerza externa aplicada, combinación con la asimetría del potencial, producen direccionalidad en el flujo partículas, comportamiento que depende sensiblemente de los parámetros del ema (la masa de la partícula, la fricción, y la amplitud y la frecuencia de la fuer- externa aplicada). Este problema es altamente no lineal y para ciertos valores de parámetros presenta un comportamiento caótico. Entre las aplicaciones que tie- los ratchets esta el entender el transporte unidireccional de motores moleculares, buscar nuevos métodos para la separación de partículas, entre otros [Reimann 2].

Ratchet determinista

que en algunos trabajos se considera la presencia de ruido, muy recientemente, habido motivaciones para entender con detalle las propiedades de transporte de ratchets determinísticos [Jung 1996, Mateos 00, 02]. Estos ratchets tienen en general dinámica caótica clásica que determina las propiedades de transporte. En este racho no se toma en cuenta ningún tipo de ruido, por lo que la dinámica es deter- ista. La ecuación de movimiento está dada por:

$$m(d^2x/dt^2) + \gamma(dx/dt) + dV(x)/dx = F_0 \cos(\omega t) \quad (1)$$

m es la masa de la partícula, γ el coeficiente de fricción, $V(x)$ el potencial periódico asimétrico externo, F_0 la amplitud de la fuerza externa aplicada, y ω la frecuencia de la fuerza. El potencial del ratchet está dado por (Fig.1):

$$V(x) = V_1 - V_0 \text{sen}[2\pi(x-x_0)/L] - (V_0/4) \text{sen}[4\pi(x-x_0)/L] \quad (2)$$

L es la periodicidad del potencial, V_0 la amplitud y V_1 una constante arbitra- El potencial se desplaza una cantidad x_0 de tal forma que el mínimo se encuentre en el origen. Ya que la ecuación de movimiento es no lineal, obtendremos órbitas periódicas y caóticas dependiendo del valor de los parámetros: m, F_0 y ω .



Fig. 1. Potencial asimétrico dado por la ecuación (2).

3 Sistema computacional

El problema que resolveremos consiste en encontrar los parámetros m y F_0 *ratchet* determinista, a partir de una serie de tiempo de la velocidad y la posición de la partícula. Resolveremos esto utilizando una red neuronal entrenada mediante un algoritmo genético. A continuación (Fig 2) se muestra el funcionamiento del sistema.

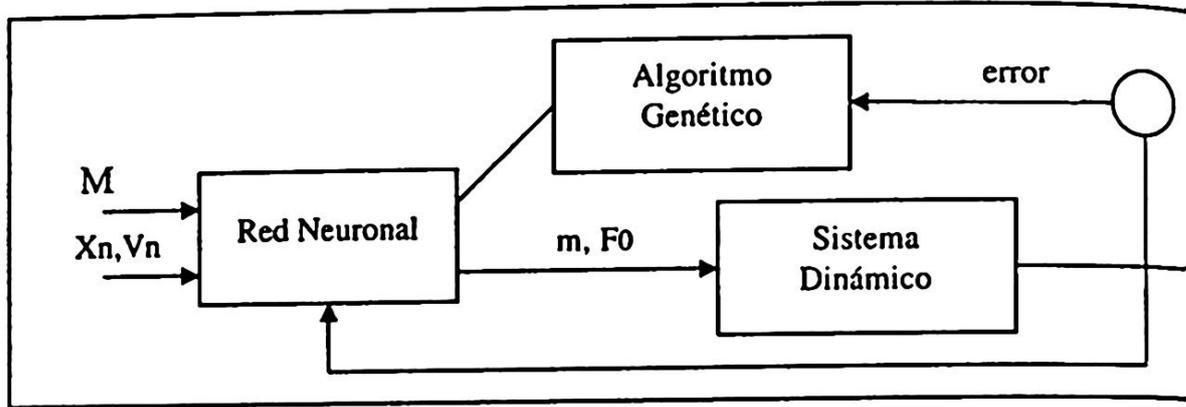


Fig. 2. Funcionamiento del Sistema. Donde $X_n=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ es la posición de la partícula, $V_n=(v_1, v_2, \dots, v_n)$ es la velocidad. M es la matriz de pesos de la red, la salida de la red son los parámetros estimados.

3.1 Red neuronal

3.1.1 Estructura de la red

La red neuronal que utilizamos está compuesta por tres capas: 1) la capa inicial tendrá en este caso 10 neuronas (nodos). Cada nodo de esta capa recibirá entrada un valor de la posición de la partícula en el tiempo t . Elegimos 10 neuronas para esta capa, por ser un número mediante el cual obtenemos suficiente información del sistema para trabajar sin que disminuya la eficiencia. 2) la capa media tendrá 4 neuronas. El encontrar el número óptimo de neuronas para la capa media, en general se hace de forma muy empírica. Si son demasiadas neuronas, la velocidad del proceso disminuye, ya que el número de operaciones que se deben de llevar a cabo aumenta. Si el número de neuronas es muy poco el sistema tardará más en converger. 3) la capa final, compuesta por 2 neuronas. Cada neurona de esta capa, producirá una salida, que eventualmente debe de ser la solución buscada, i.e., los dos metros estimados. Así, tendremos una matriz de pesos de U de 10×4 entre la capa inicial y la capa media y una de V de 4×2 entre la capa media y la capa final. Inicialmente los pesos se generan aleatoriamente y son un número real $p \in [0, 1]$. Durante el entrenamiento, ambas matrices, tendrán que ajustarse para producir la salida deseada. La función de activación utilizada es la función sigmoide: $\sigma(x) = 1 / (1 + \exp(-x))$ [Hertz, Krogh, Palmer 91].

Propagación de la señal

partir de una matriz de pesos y un vector de entrada, la red neuronal debe de calcular un vector de salida. Esto se hace de la siguiente forma:

Sea $X=[x_1, x_2, \dots, x_{10}]$ el vector de entrada y $U_{10 \times 4}$ y $V_{4 \times 2}$ las matrices de pesos de la capa inicial y la media y la media y la final respectivamente. La salida de las neuronas de la capa inicial es la entrada de la capa media. Como primer paso vamos a calcular la salida de las neuronas de la capa media, $Y=[y_1, \dots, y_4]$ que está por:

$$Y_j = \sigma \left(\sum_i x_i u_{ij} \right)$$

de $i=1, 2, \dots, 10$, y $j=1, 2, \dots, 4$, u_{ij} es el elemento i, j de la matriz U y $\sigma(x) = 1/(1+e^{-x})$.

La salida de la capa final $Z=[z_1, z_2]$ se calcula de la manera similar, sin utilizar la función de activación:

$$Z_j = \sum_i y_i v_{ij}$$

de $i=1, \dots, 4$, y $j=1, 2$ y v_{ij} es el elemento i, j de la matriz V .

La salida Z son los parámetros estimados:

$$a = z_1, \quad w = z_2$$

de $i=1, \dots, 4$, y $j=1, 2$ y v_{ij} es el elemento i, j de la matriz V .

Entrenamiento

La forma en que entrenaremos la red neuronal será mediante algoritmos genéticos [Goldberg 89]. A este tipo de red se le suele llamar Red Neuro-Genética. Los individuos, o posibles soluciones, con los que va a trabajar el algoritmo genético, son los valores de pesos de la red neuronal, cada una de las cuales, junto con la entrada de entrenamiento, producirá una salida diferente de la red. Los pasos que se siguen son los siguientes:

Inicialización

Se genera una población inicial aleatoriamente, es decir, se crea un cierto número determinado de individuos los cuales son posibles matrices de pesos para la red. En este caso, cada dato en vez de ser un bit (como es usual en los algoritmos genéticos) será un elemento de matriz.

Evaluación

Una vez inicializada la población, se calcula la salida que va a producir la red neuronal con cada matriz de pesos, y la entrada de entrenamiento. La salida de la red se compara con los dos parámetros estimados. Para poder evaluar al individuo en cuestión, se genera una serie de tiempo de la posición y la velocidad de la partícula utilizando los nuevos parámetros estimados en la ecuación de movimiento. Calculamos el error entre las dos series utilizando mínimos cuadrados. En base a este error le asignamos al individuo o matriz de pesos correspondiente una medida de desempeño (fitness). Este procedimiento se repite para cada individuo de la población.

3.2.3 Selección con elitismo

Cuando ya ha sido evaluada la población y cada individuo tiene asignado un fitness, se lleva a cabo una selección. En este trabajo aplicamos el método de la ruleta, método de selección estándar proporcional. Mediante este procedimiento se genera una nueva población con el mismo número de individuos que la población anterior. Cada individuo tendrá una probabilidad de ser elegido proporcional a su medida de desempeño, de esta manera, los mejores individuos tendrán más probabilidad de ser elegidos, sin embargo, los peores individuos también pueden llegar a ser elegidos evitando de esta manera caer en un óptimo local y permitiendo una mayor diversidad. El mejor individuo de la población actual siempre pasará a la siguiente.

3.2.4 Cruza y mutación

A la nueva población seleccionada se le van a aplicar los operadores de cruce y mutación. Para el cruce, se seleccionan dos individuos de la nueva población. Se elige un punto de cruce pc , que será un renglón y una columna de la matriz. Se dividen ambos individuos, y se concatena el principio del primero con el final del segundo viceversa. Para la mutación, se elige uno o dos puntos de mutación, que serán también un renglón i y una columna j de la matriz. El dato a_{ij} será sustituido por $k \cdot a_{ij}$, donde k es un valor elegido aleatoriamente dentro de un rango generalmente $(0,1)$. De la población total, un porcentaje PC de individuos será cruzado y un porcentaje PM de individuos será mutado. Un porcentaje de mutación PM , es muy grande, puede provocar que se pierda información histórica sobre los individuos, si es muy pequeño, puede caerse en un óptimo local, ya que los individuos producidos por cruzamiento, no producen información nueva. En esta implementación elegimos $PC=80\%$ y $PM=20\%$, ya que fueron valores que produjeron los mejores resultados.

Una vez producida una nueva generación, se evalúa, y se vuelven a aplicar los operadores de cruce y mutación. Esto se repite hasta que se encuentre un individuo que produzca una salida satisfactoria.

4 Resultados

Hicimos un número grande de pruebas de nuestro sistema para diferentes valores de los parámetros. Se observó que el sistema es confiable y eficiente tanto para órbitas periódicas como para órbitas caóticas.

Graficando el comportamiento de la evolución del desempeño de la red genética a través de las generaciones (Fig. 3), se observa, como es característico de los algoritmos genéticos, una mejora dramática en las primeras generaciones, posteriormente una aproximación más lenta al 1, siguiendo un comportamiento de saturación. En general, en todas las ejecuciones realizadas se alcanza una medida de desempeño mayor a 0.999 en las primeras 100 generaciones.

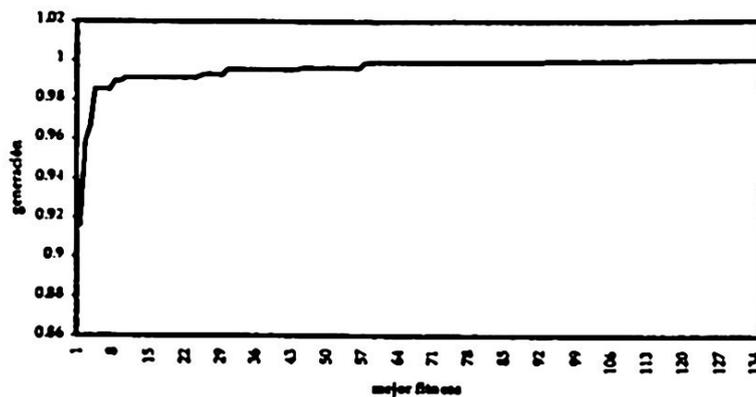


Fig. 3. Medida de desempeño del sistema (fitness) a través de las generaciones.

Conclusiones

Como era de esperarse, las trayectorias caóticas reales se separan de las trayectorias simuladas utilizando los parámetros estimados, que generalmente tienen un error del orden de 10^{-6} . Esto es debido a la alta sensibilidad que tienen los sistemas caóticos a perturbaciones en las condiciones iniciales o los parámetros en este caso [Grebogi y 92, Ott 92, Peitgen 92]. El tiempo que las trayectorias permanecen juntas aumenta si disminuimos el error en la estimación, lo que se logrará con un mayor número de iteraciones del programa. Dependiendo de la aplicación que se le dé al problema, se decide la precisión que se necesita, tomando en cuenta que mientras más preciso sea el resultado el tiempo de ejecución será más largo.

Consideramos que la contribución de este trabajo, es: por un lado, la creación de un sistema computacional útil para resolver el problema de estimación de parámetros. Se muestra de esta manera la gran utilidad de las redes neuronales y los algoritmos genéticos, como una herramienta computacional, capaz de superar otras técnicas computacionales con mucha ventaja. Por otro lado el trabajo contribuye a abrir camino en la difícil tarea de caracterizar la dinámica de los ratchets, donde, a pesar del gran auge que ha tenido la investigación en el tema en los últimos años, queda mucho por hacer, y dadas las múltiples aplicaciones que tienen los ratchets consideramos que las contribuciones que se puedan hacer en este campo, por medio de nuestro enfoque pueden resultar de suma importancia.

Referencias

- Goldberg, D. E. Genetic algorithms in search, optimization and machine learning. Addison-Wesley Publishing Company. NY 1989
- Fitchell, M. An introduction to genetic algorithms: complex adaptive systems. MIT Press. EEUU 1998

3. Poli, R., Langdon, W. Foundations of genetic programming, *Springer Verlag*, NY
4. Bard, Y. Nonlinear Parameter Estimation. *Academic Press*, NY, 1974
5. Beck, J.V. , Arnold, K.J. Parameter estimation in engineering and science. *series in probability and mathematical statistics*. J. Wiley, NY, 1977
6. Gallant, A.R., Nonlinear statistical models. *Wiley*, NY, 1987
7. Jorgesen, S.E., Fundamentals of Ecological Modelling 2da ed. *Elsevier*, Amsterdam 1994
8. Park, T., Froment, G. "A hybrid genetic algorithm for the estimation of parameters detailed kinetic models", *Computers chem. Engng.* 22, 1998
9. Whigham, P.A., Rechner, F. "Predicting chlorophyll-a in fresh water lakes by using process-based models and genetic algorithms. *Ecological Modeling*, 146, 200
10. Astumian, R.D., Hänggi, P., "Brownian Motors", *Physics Today*, Nov. 2002.
12. Cortés, E., "Ratchet motion induced by a correlated stochastic force". *Physica A* 2000
13. Jung, P., Kissner, J.G., Hänggi, P., "Regular and chaotic transport in asymmetric periodic potentials: inertia ratchets". *Phys. Rev. Lett*, 76, 1996
14. Hänggi, P., Bartussek, P., Nonlinear Physics of Complex Systems, *Lecture Notes in Physics*, 476, Berlin 1996.
15. Magnasco M.M., Forced Thermal Ratchets, *Physical Review Letters*, 71-10, 1993.
16. Mateos, J.L., "Current reversals in deterministic ratchets: points and dimers", *D*, 168, 2002
17. Mateos, J.L., "Chaotic Transport and Current Reversal in Deterministic Ratchet", *Physical Review Letters*, 84-2, 2000
18. Reimann, P., "Brownian motors: noisy transport far from equilibrium", *Phys. Rep* 361, 2002.
19. Sarmiento A., Hernán Larralde, "Deterministic transport in ratchets", *Physical E*, 59-5, 1999
20. Fausett L., Fundamentals of Neural Networks: Architectures, Algorithms and Applications, *Prentice Hall*, NJ 1994
21. Hetz, J., Krogh, A., Palmer, R., Introduction to the theory on neural computation. *Wiley*, NY, 1991
22. Kohonen, T., Self-Organization and Associative Memory, 2da. ed., *Springer-Berlin*, 1984
23. Rojas, R. Neural Networks. A Systematic Introduction. *Springer Verlag*. Berlin 1
24. Rumelhart, D.E., McClelland, J.L., Parallel Distributed Processing, *MIT Press*, Cambridge, 1986
25. Tenorio, M.F., Lee, W.T. "Self organizing network for optimum supervised learning", *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1, 1990
26. Devaney, R.L. Chaotic dynamical systems, *Addison Wesley*, NY, 1992
27. Grebogi, C., Ott, E., Yorke, J.A., "Chaos, strange attractors, and fractal basin boundaries in nonlinear dynamics", *Science*, 238, 1987
28. Ott, E. Chaos in Dynamical Systems, *Cambridge University Press*, NY, 1993
29. Peitgen, H.O., Jürgens, H., Saupe, D. Chaos and Fractals: New Frontiers of Science, *Springer-Verlag*, NY, 1992
30. Rasband, S.N., Chaotic dynamics of nonlinear systems, *John Wiley & Sons*, NY,