



# **Simulación mediante modelos predictivos del comportamiento a tensión del UHPFRC.**

**Juan José Del Carmen Ortega Guzmán**

Escuela Colombiana de ingeniería Julio Garavito

Facultad de ingeniería civil

Bogotá, Colombia

2020



# **Simulación mediante modelos predictivos del comportamiento a tensión del UHPFRC.**

**Juan José Del Carmen Ortega Guzmán**

**Director:**

M.Sc. Ing. Joaquín Abellán García

**Énfasis en estructuras**

Línea de investigación:

Materiales para estructuras en ingeniería civil

Grupo de investigación:

Centro de estudios de estructuras, materiales y construcción

Escuela Colombiana de ingeniería Julio Garavito

Facultad de ingeniería civil

Bogotá, Colombia

2020



# Resumen

Los concretos de ultra altas prestaciones reforzados con fibras (UHPFRC por sus siglas en inglés) han sido objeto de muchas investigaciones debido a las características superiores que presentan frente a concretos convencionales. Entre sus aplicaciones se encuentra la rehabilitación y el reforzamiento de estructuras. Por sus características mecánicas es ideal para estructuras expuestas a cargas que necesitan un alto grado de ductilidad como en sismos y explosiones. Además, es usado para el sistema acelerado de construcción de puentes, aplicación en la que es determinante la capacidad del UHPFRC de resistir esfuerzos de tracción. Teniendo en cuenta lo anterior se hace necesario la medición de propiedades como el comportamiento a tracción para poder analizar los efectos que aportan materiales como las fibras y comprar su desempeño. Sin embargo, la complejidad de los ensayos desde un punto de vista técnico y financiero, tanto como las restricciones en tiempo y espacio, condicionan estas campañas experimentales. En la presente investigación mediante el uso de modelos predictivos de redes neuronales y regresión multivariable se predijo el esfuerzo máximo que resisten a tensión los UHPFRC, su deformación asociada y se evaluó el desempeño de estos modelos. Para el entrenamiento de los modelos se usaron un total de 934 datos.

Se determinó un desempeño óptimo de los modelos basados en redes neuronales. Estos presentan una predicción muy precisa del comportamiento a tracción y de la deformación asociada de los UHPFRC, obteniendo coeficientes de correlación más cercanos a la unidad, una desviación estándar menor y una mejor alineación de los puntos sobre la recta de 45°, con un rango más estrecho de error estándar. Esta predicción se debe al hecho de haber seleccionado el número de neuronas en la capa oculta en función del menor RMSE, de haber escogido parámetros mediante el modelo LASSO y al buen funcionamiento del entrenamiento en la validación cruzada tipo *k-fold*, utilizada para el ajuste de los parámetros de ambos modelos. Los resultados fueron evaluados mediante los siguientes parámetros estadísticos: la raíz del error cuadrático medio (RMSE), el error medio en valor absoluto (MAE), la desviación estándar (RSR), el coeficiente de eficiencia de Nash-Sutcliffe (E), el error del sesgo medio normalizado (NMBE) y coeficiente de determinación ( $R^2$ ). Los resultados para el parámetro  $R^2$ , en el modelo de redes neuronales fueron 0.8632, 0.9008, 0.8581 y 0.8576 para los datos de entrenamiento y testeo para las variables de esfuerzo máximo y deformación asociada respectivamente.

**Palabras clave:** Concreto, UHPC, UHPFRC, regresión tipo LASSO, ANN, resistencia máxima a tensión, alargamiento unitario bajo resistencia máxima.

# Contenido

Página:

<b>Resumen.....</b>	<b>V</b>
<b>Lista de Figuras .....</b>	<b>VIII</b>
<b>Lista de tablas .....</b>	<b>VIII</b>
<b>Introducción.....</b>	<b>10</b>
<b>1. Marco teórico .....</b>	<b>11</b>
<b>1.1. Concreto de ultra altas prestaciones con y sin fibras .....</b>	<b>11</b>
<b>1.2. Modelos matemáticos aplicados a concreto: .....</b>	<b>15</b>
<b>2. Estado del arte .....</b>	<b>16</b>
<b>2.1. Estudio de propiedades del concreto utilizando regresiones polinómicas.....</b>	<b>16</b>
<b>2.2. Estudio de propiedades del concreto utilizando regresiones tipo LASSO.....</b>	<b>17</b>
<b>2.3. Estudio de propiedades del concreto utilizando redes neuronales;Error! Marcador no definido.</b>	
<b>3. Objetivos .....</b>	<b>18</b>
<b>3.1. Objetivo general.....</b>	<b>18</b>
<b>3.2. Objetivos específicos:.....</b>	<b>18</b>
<b>4. Metodología .....</b>	<b>18</b>
<b>4.1. Bases de datos.....</b>	<b>18</b>
<b>4.1.1. Recopilación de datos .....</b>	<b>18</b>
<b>4.1.2. Tratamiento de datos anómalos.....</b>	<b>21</b>
<b>4.1.3. Normalización de datos.....</b>	<b>21</b>
<b>4.1.4. División de las bases de datos .....</b>	<b>22</b>
<b>4.2. Desarrollo analítico .....</b>	<b>23</b>
<b>4.2.1. Regresión tipo LASSO .....</b>	<b>23</b>
<b>4.2.2. Redes neuronales artificiales .....</b>	<b>23</b>
<b>4.2.3. Índices estadísticos empleados en la validación de los modelos .....</b>	<b>25</b>
<b>5. Resultados.....</b>	<b>27</b>
<b>5.1. Regresión tipo LASSO .....</b>	<b>27</b>
<b>5.1.1. Modelos .....</b>	<b>27</b>
<b>5.1.2. Evaluación de los modelos LASSO.....</b>	<b>28</b>

<b>5.2. Redes neuronales .....</b>	<b>29</b>
<b>5.2.1. Modelos .....</b>	<b>29</b>
<b>5.2.2. Evaluación de los modelos de redes neuronales.....</b>	<b>30</b>
<b>6. Conclusiones.....</b>	<b>32</b>
<b>7. Recomendaciones.....</b>	<b>33</b>
<b>8. Bibliografía .....</b>	<b>34</b>

## **Lista de Figuras**

<b>Figura 1.1 - Cuerpo de prueba dogbone para ensayo de tracción directa conforme a JSCE-08 [1][2] .....</b>	<b>13</b>
<b>Figura 1.2 - Diagrama esfuerzo-alargamiento unitario de un UHPFRC con comportamiento de endurecimiento por deformación [2].....</b>	<b>14</b>
<b>Figura 4.3 - Esquema de la validación cruzada tipo k-fold utilizada en el entrenamiento de los modelos de regresión [6]. .....</b>	<b>22</b>

## **Lista de Tablas**

<b>Tabla 3.1 – Propiedades de los UHPFRC recopiladas en la base de datos .....</b>	<b>19</b>
<b>Tabla 3.2 – Variables respuesta.....</b>	<b>20</b>

# Introducción

En los últimos años, la necesidad de desarrollar concretos avanzados con un mejor desempeño para responder a las exigencias de obras civiles en comportamiento estructural, ha llevado a que el concreto de ultra alto desempeño reforzado con fibras (UHPRFC por sus siglas en inglés) sea objeto de numerosas investigaciones. Este material nació de agregarle fibras al concreto UHPC para alcanzar parámetros de ductilidad aceptables en función de la aplicación deseada.

Este concreto presenta propiedades elevadas gracias a la sinergia de sus componentes, como las fibras que se encargan de sellar las fisuras, evitando su propagación y finalmente contribuyendo a una resistencia más elevada a la tracción que los concretos convencionales, lo cual se traduce en una mayor ductilidad, que es una de las características más importantes de este tipo de material. Los UHPRFC se componen, en general, de cemento tipo Portland, arena fina como agregado, humo de sílice que es uno de los materiales más importantes y de más alto costo de la composición, aditivos superplastificantes, necesarios para alcanzar las bajas relaciones a/c características de estos concretos y que afectan la manejabilidad, y fibras.

La función principal de las fibras consiste en aportar ductilidad al UHPRFC, llegándose incluso a obtener un material capaz de disipar energía a tracción directa. En un concreto convencional, el esfuerzo de tracción máximo es  $\sigma_{cc}$  y  $\epsilon_{cc}$  la deformación asociada. Toda vez que se alcanza este esfuerzo  $\sigma_{cc}$  aparece la primera fisura y fallarían las muestras. Sin embargo, cuando se incorporan fibras, estas tratan de “sellar” la fisura crítica permitiendo al concreto producir más fisuras mientras alcanza un esfuerzo mayor  $\sigma_{pc}$  junto a una deformación mayor  $\epsilon_{pc}$ . El fenómeno descrito anteriormente se conoce como multifisuración. Por lo anterior una de las aplicaciones importantes de los UHPRFC consiste en la extensión de la vida en servicio de estructuras expuestas a acciones extremas, con altos requerimientos de ductilidad, como sismos y explosiones.

En términos generales los UHPRFC presenta resistencias de hasta siete veces más a compresión, son cinco veces más resistentes a flexión y a tracción directa. Teniendo en cuenta lo anterior se hace necesario la medición de propiedades como el comportamiento a tracción para poder analizar los efectos que aportan materiales como las fibras y comparar su desempeño. Estos ensayos pueden ser complejos desde un punto de vista financiero y técnico, sumado a esto las restricciones existentes de tiempo y de espacio condicionan aún más estas campañas experimentales. Es por esto por lo que se recurre a modelos predictivos del comportamiento de propiedades de este material en función de una serie de datos y parámetros preestablecidos. Este trabajo tiene como objetivo hacer uso de modelos predictivos de redes neuronales y regresión



multivariable para predecir el esfuerzo máximo que resisten a tensión los UHPFRC, su deformación asociada y comparar su desempeño.

## 1.Marco teórico

### 1.1. Concreto de ultra altas prestaciones con y sin fibras

**Concreto de ultra-altas Prestaciones (UHPC):** Los concretos de ultra altas prestaciones (UHPC) han tenido gran impacto en los últimos años debido a la necesidad de crear concretos con características mejoradas. Estos tienen propiedades mecánicas como la resistencia a tracción y compresión muy superiores en comparación a los concretos convencionales y de alta resistencia. Para entender lo que permite que estos concretos tengan comportamientos mejorados, es necesario adentrarse un poco al empaquetamiento de partículas a nivel micro. Las partículas de cemento dejan entre ellas unos vacíos con aire. Los concretos de ultras altas prestaciones tratan de disminuir estos vacíos mediante materiales como el humo de sílice (SF), cuyo tamaño de partícula es mucho menor a la del resto de los materiales cementantes. Es decir, aumentan el empaquetamiento de las partículas a nivel micro, reduciendo la porosidad y consecuentemente disminuyen patologías en el concreto como ataques de agentes químicos aumentando su durabilidad y propiedades mecánicas. En la figura 1 se muestran los vacíos del cemento y como se tratan de disminuir con diferentes materiales [1].

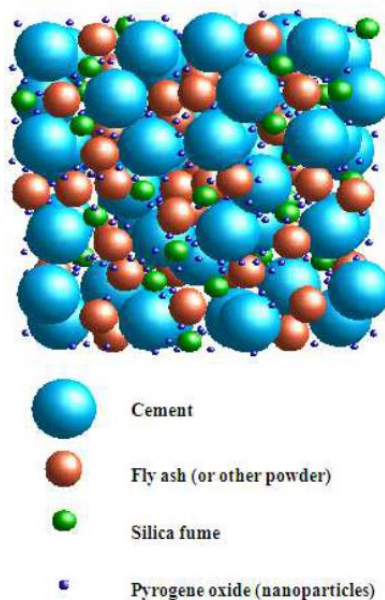


Figura 1.1 – Análisis microscópico del concreto [1].

En general, los concretos UHPC tienen los mismos materiales que los concretos convencionales. La principal diferencia entre éstos son las dosificaciones de cada uno.

Como material cementante se utiliza cemento hidráulico con dos características importantes: alta finura y bajo contenido de C3A. Además, como se mencionó antes, se adicionan materiales como el humo de sílice, cuyo tamaño de partícula es el menor de entre los materiales cementante (0.15 micras), con el objetivo de disminuir los vacíos y consecuentemente brindar mejores propiedades mecánicas y de durabilidad al concreto. Como agregado se utilizan arenas finas debido a que su tamaño favorece la homogeneidad de la mezcla y un mejor funcionamiento con las fibras. Finalmente, la relación agua/cemento es uno de los parámetros más importantes. Relaciones bajas conllevan concretos más resistentes, sin embargo, menos trabajables. Se puede decir que la trabajabilidad del concreto es directamente proporcional a la relación a/c, mientras que, por el contrario, la resistencia a desarrollar es inversamente proporcional a esta relación. Se debe tener cuidado debido a que una presencia mínima de agua en la mezcla no permitirá a las partículas hidratarse bien y no se cumplirá la función de aglomerante. Por otro lado, un exceso de este fluido causa en el concreto aumento de la porosidad y pérdida de resistencia. Por lo anterior es importante obtener una relación óptima. Para el caso de los concretos UHPC se utiliza una relación a/c baja. Esto nos lleva a que este concreto desarrollará mayores resistencias, sin embargo, el concreto tendrá muy baja trabajabilidad. Para contrarrestar el efecto de la trabajabilidad se utilizan aditivos superplastificantes. Estos mejoran la manejabilidad del concreto sin afectar sus propiedades mecánicas.

**Concreto de ultra-altas prestaciones reforzado con fibras (UHPRFC):** El concreto de ultra-altas prestaciones reforzado con fibras es un tipo de material que se ha venido desarrollando en las dos últimas décadas, a partir de adición de fibras al concreto tipo UHPC. Este material surge como alternativa en el mundo de la construcción debido a sus excelentes propiedades mecánicas. Entre éstas se encuentra la ductilidad, que es su característica más importante. Es decir, su gran capacidad de disipación de energía. Esta propiedad es consecuencia directa de añadir fibras tanto de acero como de otros materiales. Las fibras, bajo la dosificación adecuada, evitan que una fisura se vuelva crítica “cosiéndola”. Esto conlleva a que se generen más fisuras, fenómeno que se conoce como “multifisuración”. Básicamente consiste en que el material sea capaz de absorber energía antes de la falla.

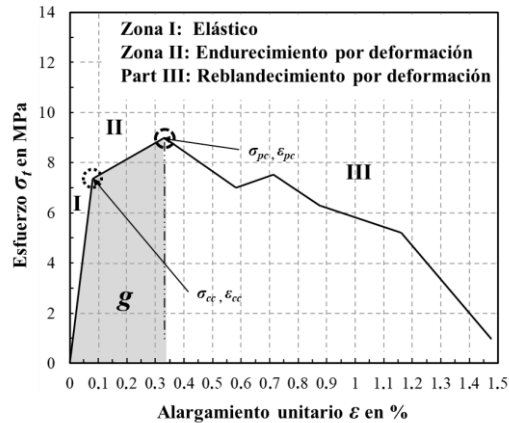
Como ya se ha mencionado, su composición es análoga a la de los concretos UHPC con la excepción de que a los concretos UHPRFC se le agregan fibras. Dicho lo anterior, este tipo de concretos son una alternativa útil para la construcción de estructuras donde se necesite disipación de energía, como en las aplicaciones sísmo resistentes.

**Comportamiento a tracción directa del (UHPFRC):** Los concretos UHPFRC presentan elevados valores de resistencia a tracción directa. Investigaciones han demostrado que estos concretos presentan cerca de 5 veces más resistencia a tracción directa que los concretos convencionales. Este aumento de resistencia se debe a un fenómeno conocido como endurecimiento por deformación o *strain hardening*. La figura 1.1 muestra los cuerpos de prueba (*dogbone*) para el ensayo de tracción directa acorde a la recomendación de la asociación japonesa de ingeniería civil (JSCE-08)[2]



**Figura 1.2** - Cuerpo de prueba *dogbone* para ensayo de tracción directa conforme a JSCE-08 [2][3]

La figura 1.2 describe el comportamiento del UHPFRC a tracción directa. La zona I corresponde al rango elástico, donde gobierna un régimen lineal y no hay fisuras. Esta zona va hasta el esfuerzo de fisuración  $\sigma_{cc}$  y su deformación asociada  $\varepsilon_{cp}$ , describiendo el punto del gráfico donde se produce la primera fisura. Luego inicia el fenómeno de multifisuración, resultado de la actuación de las fibras al tratar de sellar las fisuras antes de que se vuelvan críticas. La zona II es donde se presenta el fenómeno, llegando hasta que se alcanza el esfuerzo  $\sigma_{pc}$  y fallan los *dogbone*. El valor de este esfuerzo esta gobernado principalmente por el tipo de fibra y su cantidad dentro del concreto.  $\varepsilon_{pc}$  es la deformación asociada para el máximo esfuerzo. Finalmente se tiene la zona III la cual está caracterizada por una disminución en el esfuerzo. Se trata de la zona de reblandecimiento por deformación, donde se produce el arrancamiento de la fibra en la fisura crítica, lo que lleva a la falla del *dogbone*.



**Figura 1.3 - Diagrama esfuerzo-alargamiento unitario de un UHPFRC con comportamiento de endurecimiento por deformación [3]**

**Aplicaciones del concreto UHPFRC:** La necesidad de desarrollar concretos avanzados con un mejor desempeño para responder a las exigencias de obras civiles o de situaciones naturales ha llevado al desarrollo de concretos como el UHPFRC.

El concreto UHPFRC es una alternativa útil para construcciones que deban soportar cargas extremas como accidentes, explosiones, sismos, huracanes, entre otros. Esto debido a su buena capacidad de disipación de energía y gran resistencia. Un gran campo de aplicación, muy importante, consiste en el refuerzo y rehabilitación de estructuras existentes. En varios países, se creó una norma donde se regula y se establecen parámetros para que toda construcción sea segura. En Colombia, la NSR es la norma que regula esto y su primera edición data cerca de 1986. Es decir, que antes de esta fecha las construcciones no eran regidas por una norma en particular y no han sido diseñadas para soportar sismos, aumento de cargas, grandes impactos, etc. Por ejemplo, en Bogotá, capital del país suramericano, cerca del 70% de las casas de comunidades de escasos recursos no cumplen con la norma. Esto hace esta población aún más vulnerable, a esto se le suma que, en Colombia, gran parte del país está clasificado como una zona de riesgo intermedio. Todo esto nos lleva a rehabilitar estas estructuras, de forma que puedan disipar gran cantidad de energía antes de la rotura. Para ello los concretos UHPFRC son una más que prometedora alternativa, ya que no solo poseen gran resistencia sino también ductilidad y durabilidad. Otras aplicaciones son la rehabilitación de tableros de puentes, pantallas y pavimentos, la construcción de puentes peatonales, mobiliario urbano, dovelas para túneles excavados con tuneladora y fachadas de edificaciones.



**Figura 1.4** – Rehabilitación de pantallas, concreto UHPFRC

## **1.2. Modelos matemáticos aplicados a concreto:**

Un modelo matemático es una representación que mediante cálculos expone resultados y estudia comportamientos de sistemas complejos de observar en la realidad. Estos son utilizados para analizar la relación entre variables y entender y predecir fenómenos naturales, sociales, físicos, etc.

**Regresiones polinómicas:** Es una regresión en la que la relación entre  $x$  y  $y$ , o la variable independiente y dependiente es modelada como un polinomio. Es utilizada para describir fenómenos no lineales como la progresión de carbono Isotopos en sedimentos de un lago. El objetivo de análisis es modelar o predecir un valor esperado en términos de una variable independiente o muchas.

**Regresión tipo LASSO (*least absolute shrinkage and selection operator*):** Introducido por Robert Tibshurani en 1996, es un modelo matemático que le resta importancia a algunos parámetros haciéndolos cero para mejor exactitud e interpretación del modelo.

**Regresión con modelos de redes neuronales:** Considerados los nuevos paradigmas estadísticos, permiten describir un fenómeno real, sin necesitar el cumplimiento de supuestos teóricos. El modelo del Perceptrón es el modelo más sencillo de redes neuronales, compuesto por dos nodos de la capa de entrada, una única neurona en la capa oculta y un nodo de salida. Para casos complejos, se puede utilizar el perceptrón multicapa, en el que el modelo incorpora varias capas ocultas y neuronas en cada capa.

## 2. Estado del arte

A continuación, se presentan los resultados de los estudios más recientes y relevantes relacionados con el estudio de propiedades del concreto utilizando modelos matemáticos de regresión. Los estudios han sido realizados por el ingeniero Joaquín Abellán García, el cual ha sido un pionero en las investigaciones de concretos tipo UHPC y UHPFRC utilizando estos modelos.

### 2.1. Estudio de propiedades del concreto utilizando regresiones polinómicas

Abellán-García et al. [4]determinaron, utilizando regresiones polinómicas, el efecto de usar residuo de craqueo catalítico (FC3R) en sustitución parcial del cemento y humo de sílice en un UHPC con vidrio reciclado creando un material viable económicamente y amigable con el medio ambiente. Sus resultados demostraron que remplazando aproximadamente entre un 15 y 11% del peso del cemento con FC3R se consiguen después de 28 días resistencias superiores a 150 Mpa. Sin embargo, la adición del FC3R también generó una caída notable en los valores de flujo con respecto a la muestra de referencia y mientras que para la edad de 1 día tuvo un efecto positivo en el esfuerzo a compresión. Sus resultados también muestran que la relación agua-aglutinante tiene un efecto positivo en las propiedades reológicas y negativo en el esfuerzo de compresión para todas las edades. Otras de sus conclusiones fue que el contenido de policarboxilato tiene un efecto negativo en el esfuerzo desarrollado a edades tempranas pero positivo luego de 28 días. Finalmente, encuentran viable esta alternativa que reduce el contenido de Clinker en el cemento, disminuyendo el contenido de  $CO_2$ , haciéndolo más amigable con el medio ambiente.

En otra investigación, Abellán-García et al. [5]estudiaron el efecto de usar metacaolín como un sustituto parcial del cemento utilizando herramientas estadísticas y regresiones polinómicas. Se utilizaron varios tipos de materiales cementantes. La investigación consistió en determinar el efecto de la sustitución parcial de cemento por metacaolín en una mezcla de UHPC previamente optimizada que incluía carbonato cálcico y polvo de vidrio reciclado en su dosificación. Los resultados encontrados arrojan un aumento de resistencia a edades tempranas, entre 1 y 7 días al incorporar metacaolín en la dosificación, lo que puede ser útil para construcciones aceleradas de puentes. Sin embargo, no se evidenció un aumento importante en la resistencia después de 28 días. Además, el metacaolín causó una disminución importante en la trabajabilidad de la mezcla.

## 2.2. Estudio de propiedades del concreto utilizando regresiones tipo LASSO y redes neuronales

Abellán-García [6] determinó en su trabajo de investigación “Comparación de modelación por inteligencia artificial y regresión multivariable del comportamiento a flexión del UHPFRC” la viabilidad de utilizar este tipo de modelos en la predicción del comportamiento a flexión de los concretos UHPFRC. Para la regresión tipo LASSO obtuvo valores del coeficiente de correlación  $R^2$  en un rango aceptable, por lo que se demostró su buena precisión en la predicción de los parámetros de comportamiento. Por otro lado, los modelos de regresión basados en redes neuronales obtuvieron un valor mejorado de  $R^2$ , muy próximos a la unidad.

Por otro lado, Abellán-García [7] en su trabajo de investigación titulado “*Four-layer perceptron approach for strength prediction of UHPC*” utilizó un modelo de perceptrón de cuatro capas MLP (*multi-layer-perceptron*) para predecir el esfuerzo de compresión de los concretos UHPC a 28 días, usando diferentes combinaciones de materiales cementantes y considerando diferentes rangos de tamaño máximo de agregado para entrenar el modelo. Como resultado obtuvo que este tipo de modelos pueden ser muy útiles para predecir propiedades mecánicas como la resistencia a compresión del UHPC. Este tipo de modelos se puede considerar como un paso inicial para darse una idea del comportamiento del material, disminuyendo costos, esfuerzos y tiempo que conllevaría un estudio experimental en laboratorio. Además, los resultados mostraron una correlación coherente con resultados de varias investigaciones registradas.

Finalmente, Abellán-García et al. [8], mediante el artículo “*Properties prediction of environmentally friendly ultra-high-performance concrete using artificial neural networks*” determinaron a través de la construcción de 4 modelos analíticos basados en redes neuronales artificiales (ANN) la resistencia a compresión para 1, 7 y 28 días de los UHPC además de su trabajabilidad mediante flujo estático. Para la investigación se reemplazó parcialmente el cemento Portland y humo de sílice por polvo de vidrio reciclado para diferente tamaño de partícula, residuo craqueo catalítico fluido (FC3R) y diferentes tamaños de carbonato cálcico. Los modelos de ANN predijeron los parámetros de la resistencia a compresión y asentamiento para 1 y 7 días con un error de cerca de 2,5 MPa y 7,245 mm aproximadamente. En base con los resultados anteriores, determinaron la eficiencia de los modelos desarrollados para la predicción del asentamiento y esfuerzo a compresión de los UHPC al incorporar humo de sílice, carbonato cálcico, polvo de vidrio reciclado y FC3R.

## **3. Objetivos**

### **3.1. Objetivo general**

Hacer uso de modelos predictivos de redes neuronales y regresión multivariable para predecir el esfuerzo máximo que resisten a tensión los UHPFRC, su deformación asociada y comparar su desempeño.

### **3.2. Objetivos específicos:**

- a) Desarrollar modelos predictivos del comportamiento a tensión de los UHPFRC.
- b) Comparar el desempeño de modelos de regresión en la predicción de comportamiento a tensión e los UHPFRC.
- c) Analizar las respuestas obtenidas para los máximos esfuerzos a tracción y sus deformaciones asociada para los UHPFRC.

## **4. Metodología**

Este proyecto está enmarcado en la investigación llevada a cabo por el ingeniero Joaquín Abellán García sobre Optimización de concretos de altas prestaciones reforzados con fibras y aplicaciones sismo resistentes. En este trabajo la metodología consistirá en la simulación mediante modelos predictivos la resistencia máxima a tracción directa y su deformación unitaria asociada.

### **4.1. Bases de datos**

#### **4.1.1. Recopilación de datos**



Para el entrenamiento de los modelos predictivos se utilizaron 934 datos del comportamiento a tracción directa del UHPFRC con información sobre los parámetros  $\sigma_{pc}$  y  $\varepsilon_{pc}$ . Es relevante destacar que esta base de datos contiene tanto dosificaciones con un solo tipo de fibra (fibra 1), como mezclas de UHPFRC con mezclas binarias de fibra (indicadas en la base de datos como fibra 1y fibra 2). Las bases de datos consideradas corresponden a la investigación doctoral del ing. Joaquin Abellán.

También es relevante resaltar es la presencia de variables cualitativas dentro de la base de datos, específicamente relacionadas con el tipo de fibra. Estas variables son incorporadas en los modelos matemáticos mediante variables tipo *dummy* o dicotómicas.

Las variables de entrada a los modelos, recopiladas en la base de datos, así como su codificación, se muestran en la Tabla 3.1.

**Tabla 3.1 – Propiedades de los UHPFRC recopiladas en la base de datos**

Variable	Descripción	Variable	Descripción
X1	Contenido de cemento (kg/m <sup>3</sup> )	X31	Diámetro de la fibra 2 en mm
X2	Contenido de humo de sílice (kg/m <sup>3</sup> )	X32	Relación $l_f/d_f$ de la fibra 2
X3	Otros materiales cementantes (kg/m <sup>3</sup> )	X33	Contenido de la fibra 2 en kg/m <sup>3</sup>
X4	Agua (kg/m <sup>3</sup> )	X34	Contenido de la fibra 2 en porcentaje sobre el volumen total del concreto
X5	HRWR (kg/m <sup>3</sup> )	X35	Factor fibra ( $\chi_f$ ) de la fibra 2
X6	Harina de cuarzo (kg/m <sup>3</sup> )	X36	Contenido de binder (cemento, humo de sílice y materiales cementantes) en kg/m <sup>3</sup>
X7	Contenido total de fibras en porcentaje sobre el volumen total	X37	Tamaño máximo del agregado en mm
X8	Factor fibra total	X38	Volumen de la pasta (cemento, humo de sílice, materiales cementantes, agua y aditivos) respecto del volumen total del concreto
X9	Contenido total de fibras en kg/m <sup>3</sup>	X39	Relación agua/cemento en peso
X10	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es metálica recta y 0 en caso contrario	X40	Relación agua/binder en peso
X11	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es metálica acabada en ganchos y 0 en caso contrario	X41	Relación agua/polvos totales (binder + harina de cuarzo) en peso
X12	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es metálica retorcida y 0 en caso contrario	X42	Contenido de arena en kg/m <sup>3</sup>
X13	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es de polietileno y 0 en caso contrario	X43	Polvos totales (kg/m <sup>3</sup> )

Variable	Descripción	Variable	Descripción
X14	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es de polipropileno y 0 en caso contrario	X44	Agregados y fibra en % sobre el volumen total
X15	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 1 es de polivinilo de alcohol y 0 en caso contrario	X45	Agregados sobre polvos totales en volumen
X16	Resistencia a la tracción del material de la fibra 1 en MPa	X46	Agregados y fibra sobre polvos totales en volumen
X17	Longitud de la fibra 1 en mm	X47	Arena y harina de cuarzo sobre cemento en peso
X18	Diámetro de la fibra 1 en mm	X48	Arena y harina de cuarzo sobre binder en peso
X19	Relación $l_f/d_f$ de la fibra 1	X49	Arena, harina de cuarzo y fibra sobre binder en peso
X20	Contenido de la fibra 1 en kg/m <sup>3</sup>	X50	Arena y harina de cuarzo sobre cemento en peso
X21	Contenido de la fibra 1 en porcentaje sobre el volumen total del concreto	X51	Agregados y harina de cuarzo sobre binder en peso
X22	Factor fibra ( $\chi_f$ ) de la fibra 1	X52	Agregados, harina de cuarzo y fibra sobre binder en peso
X23	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es metálica recta y 0 en caso contrario	X53	Tipos de fibra utilizados
X24	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es metálica acabada en ganchos y 0 en caso contrario	X54	Número de componentes del binder
X25	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es metálica retorcida y 0 en caso contrario	X55	Número de materiales no reactivos incluyendo harina de cuarzo
X26	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es de polietileno y 0 en caso contrario	X56	Numero de tipos de agregado
X27	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es de polipropileno y 0 en caso contrario	X57	Resistencia a compresión en MPa
X28	Variable tipo dummy cuyo valor es 1 si la fibra 2 es de polivinilo de alcohol y 0 en caso contrario	X58	Ancho del espécimen sometido a tracción directa en mm
X29	Resistencia a la tracción del material de la fibra 2 en MPa	X59	Espesor del espécimen sometido a tracción directa en mm
X30	Longitud de la fibra 2 en mm	X60	Longitud del vástago del espécimen sometido a tracción directa en mm

Por otro lado, las variables que se van a estudiar, es decir, las variables respuestas de los modelos de regresión se presentan en la Tabla 3.2.

**Tabla 3.2 – Variables respuesta**

Variable	Descripción
Y3	Resistencia máxima a tracción directa en MPa ( $\sigma_{pc}$ )
Y4	Alargamiento unitario bajo resistencia máxima en % ( $\epsilon_{pc}$ )

Variable	Descripción
$\widehat{Y}_{3\text{LASSO}}$	Estimación de Y3 mediante regresión tipo LASSO
$\widehat{Y}_{4\text{LASSO}}$	Estimación de Y4 mediante regresión tipo LASSO
$\widehat{Y}_{3\text{ANN}}$	Estimación de Y3 mediante redes neuronales
$\widehat{Y}_{4\text{ANN}}$	Estimación de Y4 mediante redes neuronales

### 4.1.2. Tratamiento de datos anómalos

La detección y tratamiento de valores atípicos es un paso obligatorio para construir un modelo preciso con resultados adecuados, debido a que estos datos anómalos pueden influir mucho en el modelo resultante [9]. Debido a esto, se realizó un análisis estadístico, mediante diagramas *bagplot*, de cada variable frente a cada variable respuesta (Y3 y Y4) para identificar y eliminar los valores atípicos [10]. El diagrama *bagplot* es un diagrama de dispersión basado en el diagrama "Box and whisker plot" de Tukey [11].

Al final de este proceso, se eliminaron 196 observaciones de la base de datos, dejando 738 para entrenamiento y testeo de los modelos de regresión (LASSO y redes neuronales).

### 4.1.3. Normalización de datos

Con el objetivo de que la magnitud de una variable no tenga una mayor influencia en los resultados y teniendo en cuenta que se están manejando una cantidad considerable de datos de magnitudes diferentes es necesario normalizar la base de datos. Este proceso consiste en asignar una escala lineal en un rango específico, para así poder comparar variables con dimensiones diferentes. Normalizar datos permite eliminar o reducir la posibilidad de sesgo de modelos matemáticos y es un procedimiento utilizado en muchas investigaciones.

Para la normalización del trabajo de investigación se utilizó un rango [0,1] y el valor normalizado se calculó mediante la ecuación (1):

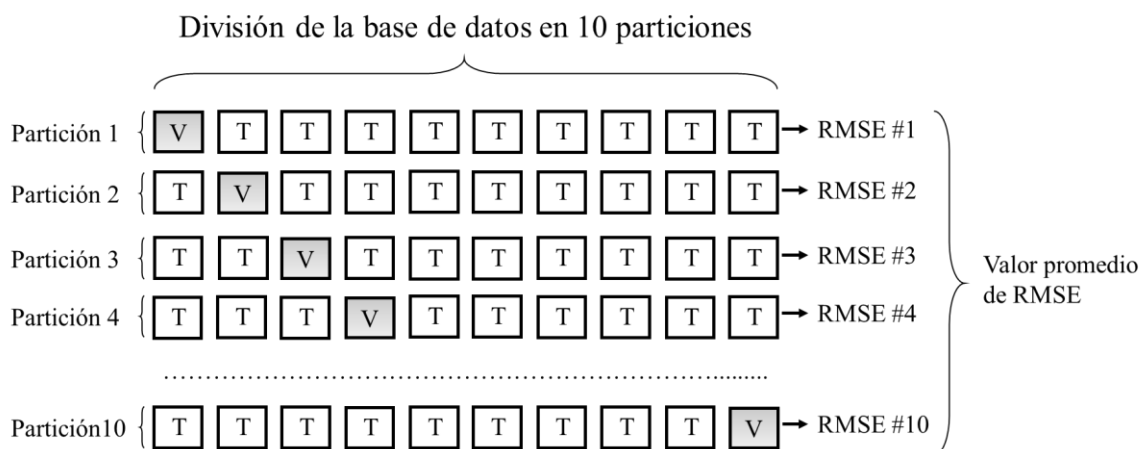
$$x_{normalizado} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (1)$$

Donde  $x_{min}$  y  $x_{max}$  representan los valores mínimos y máximos de la variable  $x$  en la base de datos respectivamente.

#### 4.1.4. División de las bases de datos

La base de datos para el entrenamiento y testeo de los modelos matemáticos de predicción fue dividida al azar en dos conjuntos: datos de entrenamiento y testeo. Al primer grupo se le asignó el 75% de los datos. Por su parte, el grupo de testeo quedó con el 25% restante. Ambos subconjuntos contenían todos los componentes/propiedades posibles en el concreto. Tal y como la denominación de estos subconjuntos indica, los datos de entrenamiento se utilizaron para entrenar los modelos predictivos, mientras que los datos de testeo fueron usados para la validación de estos modelos. Sin embargo, existe el riesgo de que los puntajes de validación puedan cambiar mucho dependiendo de qué datos se seleccionen para cada subgrupo, es decir, la variación de los puntajes de validación está en función de la división de datos. Esto nos lleva a una evaluación poco confiable de los modelos.

Una buena práctica en este tipo de situaciones es utilizar la validación cruzada tipo *k-fold* (Ver figura 4.1) basada en la división de las observaciones disponibles en *k* particiones, entrenado cada modelo en *k-1* particiones mientras se verifica en la partición restante [12]. Para el ajuste de los modelos considerados (*LASSO* y *redes neuronales*) se utilizó el procedimiento de validación cruzada *k-fold* con *k=10*. Es decir, los datos de entrenamiento se dividen a su vez en una partición en un conjunto de prueba y validación, durante la fase de ajuste del modelo. Esto consiste en realizar una división de la base de datos en 10 particiones, de las cuales 9 se utilizan para entrenar el modelo para que finalmente 1 lo compruebe. De todas las particiones realizadas para cada modelo se selecciona el puntaje promedio de las *k* validaciones. Además, para el puntaje de validación se utilizó la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE por sus siglas en inglés) promedio de las *k* modelaciones, conforme se observa en la Fig. 4.1.



**Figura 4.1** - Esquema de la validación cruzada tipo *k-fold* utilizada en el entrenamiento de los modelos de regresión [6].

## 4.2. Desarrollo analítico

### 4.2.1. Regresión tipo LASSO

Cuando se tiene un modelo con un sin número de variables, encontrar un método el cual nos ayude a decidir qué variables son significativas y cuáles no, puede suponer un desafío. El método Lasso (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator), combina un método de análisis de regresión con una manera de contracción de algunos predictores o parámetros hacia cero mediante una selección de variables y regulación para mejorar la exactitud de modelos estadísticos. Introducido por Tibshirani en 1996 [13], sus aplicaciones abarcan desde las regresiones polinómicas hasta la inteligencia artificial y el aprendizaje automático [13,14].

La regresión LASSO hace que aquellos coeficientes o parámetros que no son de gran importancia sobre la variable dependiente converjan a cero. La estimación de los coeficientes son la solución al siguiente problema de optimización presentado en la ecuación (2):

$$RSS_{\lambda}(\beta) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \sum_{j=1}^{p-1} X_i \beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j| \quad (2)$$

Donde  $\lambda$  es el parámetro que controla la penalización sobre la suma de los valores absolutos de las estimaciones, consiguiendo que algunos de los coeficientes de poca influencia sean cero. Es decir, el método actúa como selector de variables y la interpretación del modelo se facilita al crear modelos más simples. Todo esto nos lleva a que la selección del parámetro de penalización  $\lambda$ , debe ser apropiada. Una alternativa simple, expuesta con anterioridad, es utilizar la validación cruzada tipo *k-fold*. Durante la fase de entrenamiento, se eligen una serie de valores para  $\lambda$  y se calcula el RMSE de validación de cada valor. Se selecciona el valor de  $\lambda$  para el cual el error haya sido menor. Finalmente se reajusta el modelo con todas las observaciones disponibles con el valor de  $\lambda$  escogido [13,14].

### 4.2.2. Redes neuronales artificiales

Inspiradas en la biología, son un modelo computacional formadas por elementos que se comportan de manera análoga a las neuronas. Un modelo de redes neuronales artificiales (ANN) consiste en un conjunto de neuronas artificiales, interconectadas y trabajando, recibiendo y enviando información [15,16].

El perceptrón, creado por Frank Rosenblatt [17], es la arquitectura más simple de una ANN, consiste en una neurona con dos entradas y una salida, se distinguen cuatro componentes fundamentales del perceptrón: sensores que reciben los valores de entrada; pesos que afectan la magnitud de los valores de entrada; una función recolecta los datos afectados por sus pesos para producir una medida propia del impacto del fenómeno observado; y una función de activación que aporta la transformación no

lineal para producir la salida.

Las redes neuronales son modelos algorítmicos que, utilizando una función matemática no lineal conocida como función de activación, pretenden modelar matemáticamente el proceso que aprenden. Cada entrada a la neurona ( $x_i$ ) tiene asociado un “peso” ( $w_i$ ) que es un parámetro interno de la red. La función suma calcula la entrada neta que recibe la neurona mediante la siguiente expresión (ecuación 3)

$$v_k = \sum_{i=1}^n w_{ik} * x_i + b \quad (3)$$

Donde  $v_k$  representa la regla de propagación, que es la suma que recibe la  $k$ -ésima neurona de la capa precedente;  $w_i$  es el peso asignado por la  $k$ -ésima neurona al vínculo formado con la  $i$ -ésima neurona;  $x_i$  es el valor de entrada que la  $i$ -ésima neurona transmite y  $b$  es un valor ajustado [7,18]. El siguiente paso es el proceso de la regla de propagación, mediante una función no lineal. Esta función es llamada función de activación o de transferencia, la cual, a partir de la suma de los elementos de entrada ponderados por el peso, determina el valor de salida de la  $j$ -ésima neurona entregará a las de la capa siguiente con las cuales esté conectada.

La estructura más usada en *redes neuronales artificiales* es la red multicapa con alimentación hacia adelante (*feed forward*). Este modelo, consiste en una capa de entrada, una o varias capas ocultas con una función de activación y una capa de salida. Para arquitecturas sencillas la función de activación más usada es la sigmoide binaria, aunque existen otras como la función rectilínea uniforme (ReLU), lineal y tangente hiperbólica. La presente investigación utilizó la función de activación sigmoide binaria, descrita a continuación en la ecuación (4):

$$y_j = \frac{1}{1+e^{-(cv_j)}} \quad (4)$$

Donde  $C$  es una constante usada para controlar la región semi lineal.

Previamente a su operación, las redes neuronales necesitan calibrar elementos de su arquitectura a través de *la fase de entrenamiento* [7,8,15,19]. En este proceso se ajustan los pesos de la red para producir una determinada salida. El objetivo de este proceso es determinar valores óptimos que maximicen la aproximación del conjunto de salidas de datos predichos mediante la ANN con los valores reales de la variable respuesta. El entrenamiento realizado mediante algoritmos de aprendizaje consiste en dos pasos principales: en el primero se asignan pesos aleatorios a todas las conexiones entre las neuronas y se genera un flujo hacia adelante de la señal desde la capa de entrada hasta la de salida. El resultado de esta última capa es comparado con los valores reales de la variable respuesta. En el siguiente paso, los pesos y *bias* en las capas ocultas se modifican en un flujo hacia atrás con el objetivo de reducir el error. El algoritmo de aprendizaje de *back propagation*, conocido como algoritmo de propagación hacia atrás o de retro propagación (BP por sus siglas en inglés), es el método clásico para el entrenamiento de las ANN [20]. Este algoritmo está basado en el entrenamiento de ANN mediante la aplicación del método del gradiente descendente sobre la función costo. En los últimos años se han desarrollado otros algoritmos de aprendizaje, como la *retropropagación* resiliente (Rprop)[21]. Este nuevo algoritmo de aprendizaje tiene dos

ventajas fundamentales sobre el algoritmo de *back propagation*: el entrenamiento suele ser más eficiente en términos de velocidad y el Rprop elimina la influencia negativa del tamaño de la derivada de error parcial en el ajuste de los pesos, en oposición al algoritmo de propagación hacia atrás que necesita asignar un valor para la tasa de aprendizaje [21].

En este trabajo, los modelos ANN se entrenaron utilizando la *retropropagación* resiliente como algoritmo de aprendizaje.

Como variables de entrada de cada modelo ANN, se consideró la selección previa realizada por el método LASSO. Por último, mediante la validación cruzada tipo *k-fold*, expuesta anteriormente, se determinó el número de neuronas en la capa oculta.

### 4.2.3. Índices estadísticos empleados en la validación de los modelos

Los modelos matemáticos, entrenados mediante validación cruzada *k-fold*, fueron evaluados empleando subconjunto de testeo. En el presente trabajo, se han empleado seis parámetros estadísticos diferentes para medir la precisión predictiva del modelo, raíz del error cuadrático medio (RMSE), error absoluto medio (MAE), desviación estándar de los datos medidos (RSR), coeficiente de eficiencia o coeficiente de Nash-Sutcliffe (E), error de sesgo medio normalizado (NMBE) y coeficiente de determinación múltiple ( $R^2$ ), cuya formulación puede observar en las ecuaciones. (5) – (10) respectivamente.

RMSE – raíz del error cuadrático medio

El error cuadrático medio, mide la cantidad de error que hay entre dos conjuntos de datos. Es decir, compara un valor predicho y un valor observado o conocido. Es uno de los parámetros más utilizados en estadística. El valor óptimo del RMSE es cero, lo que indica un ajuste perfecto [18].

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (a_i - \hat{a}_i)^2}{n}} \quad (5)$$

MAE – Error medio en valor absoluto

Diferencia entre cada una de las medidas y ese valor tomado como exacto (media aritmética). Este indicador cuantifica la precisión de una técnica de predicción comparando valores predictivos frente a observados. Un sistema predictivo perfecto tiene un MAE=0. Es decir, cero es el valor óptimo de este parámetro estadístico [22].

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |a_i - \hat{a}_i| \quad (6)$$

### RSR - Desviación estándar de los datos medidos

Medida de la dispersión de los datos. Si se tiene un modelo predictivo perfecto o todos los datos son iguales, la desviación estándar sería de los datos medidos cero. Este indicador cuantifica la dispersión alrededor de la media aritmética [23].

$$RSR = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_i - \hat{a}_i)^2} \quad (7)$$

### E - Coeficiente de eficiencia o coeficiente de Nash-Sutcliffe

La eficiencia de Nash-Sutcliffe (E) es una estadística normalizada que determina la magnitud relativa de la varianza residual en comparación con la varianza de los datos medidos. La eficiencia de Nash-Sutcliffe indica que tan bien la gráfica de datos observados versus predichos por el modelo se ajusta a la línea 1:1. Para un ajuste perfecto el valor de E es 1 [24].

$$E = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (a_i - \hat{a}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (a_i - \bar{a})^2} \quad (8)$$

### NMBE - Error de sesgo medio normalizado

Es una función del sesgo. El NMBE es un estimador que mide el promedio de los errores al cuadrado, es decir, la diferencia entre la predicción y el valor real. Proporciona información sobre el sesgo medio en las estimaciones de un modelo. Un valor negativo indica una predicción excesiva. Por el contrario, un valor positivo indica una predicción insuficiente para el modelo [20].

$$NMBE(\%) = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_i - \hat{a}_i)^2}{\bar{a}} \times 100 \quad (9)$$

### R<sup>2</sup> - Coeficiente de determinación

Es un valor comprendido en un rango entre 0 y 1 que refleja la fracción de puntos que siguen la línea de ajuste por regresión de un conjunto de datos con dos variables. Compara la precisión de un modelo de referencia con el modelo estudiado. En ocasiones puede proporcionar resultados sesgados cuando esta relación no-lineal o cuando se encuentran muchos valores anómalos. Un valor de R<sup>2</sup> igual a 1 indica una asociación perfecta entre los valores observados y predichos [25].



$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (a_i - \hat{a}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (\hat{a}_i)^2} \quad (10)$$

En los parámetros estadísticos anteriores,  $a$  corresponde al objeto o valor medido experimentalmente,  $\hat{a}$  es la salida del modelo,  $n$  el número de datos y  $\bar{a}$  la media del objetivo.

## 5. Resultados

Se presenta a continuación los resultados obtenidos mediante los modelos predictivos.

### 5.1. Regresión tipo LASSO

#### 5.1.1. Modelos

Los modelos obtenidos para las variables Y3 y Y4, ajustados mediante el uso de la validación cruzada tipo *k-fold* se observan en la tabla 5.1.

**Tabla 5.1 – Modelos tipo LASSO**

	Modelo			Modelo			Modelo	
Término	$\bar{Y}_{3\text{LASSO}}$	$\bar{Y}_{4\text{LASSO}}$	Término	$\bar{Y}_{3\text{LASSO}}$	$\bar{Y}_{4\text{LASSO}}$	Término	$\bar{Y}_{3\text{LASSO}}$	$\bar{Y}_{4\text{LASSO}}$
Indepen.	-2,20504	0,39639	X21	13,54948		X42		
X1			X22			X43	0,00647	
X2	0,01704	0,00338	X23	0,93484	-1,02050	X44		
X3			X24	0,66774	0,05552	X45	1,11454	
X4		-0,00375	X25	0,85305	0,00816	X46	1,49296	
X5	0,03113		X26	-2,41564	-1,55348	X47		
X6	-0,00050		X27	-0,92705	-3,16250	X48		
X7	316,48194	0,42228	X28	-7,78690	-1,10003	X49	2,27641	
X8	0,00430	0,36690	X29	0,00026		X50	0,91755	
X9	0,00838	0,00779	X30	0,20950		X51		
X10	1,18146	-0,00271	X31	-18,54169		X52	0,00150	
X11	1,22815	0,02930	X32		0,00048	X53	-0,95381	
X12	1,02263	0,00429	X33			X54	0,43568	
X13	-1,97733	-0,01154	X34			X55		
X14	-2,17507	-0,06691	X35		0,00241	X56		
X15	-7,77858	-1,29362	X35			X57	0,01376	-0,00002
X16	0,00029		X37	-0,00138		X58	-0,08880	-0,00944
X17	0,20888		X38			X59		-0,00155
X18	-20,56805		X39	-12,38177	0,66319	X60	-0,01299	
X19		0,00074	X40	6,38146		$\lambda$	0,03931	0,07073
X20			X41					

### 5.1.2. Evaluación de los modelos LASSO

Los valores obtenidos de los parámetros estadísticos utilizados para la evaluación de los modelos tipo LASSO se presentan en la Tabla 5.2.

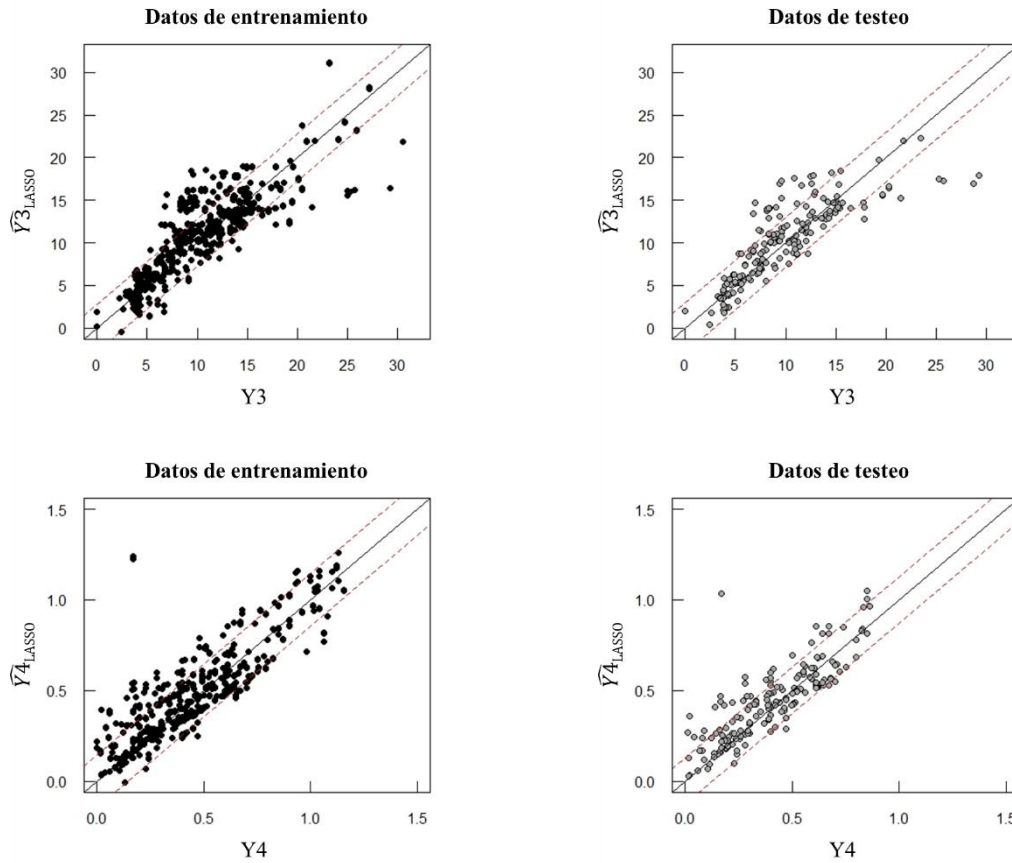
**Tabla 5.2 – Evaluación de los modelos tipo LASSO**

Modelo	Conjunto	RMSE	MAE	RSR	E	NMBE	R <sup>2</sup>
$\widehat{Y}_3$ <sub>LASSO</sub>	Entrenamiento	2,76738	1,99347	0,55132	0,69605	-4,295%	0,71841
	Testeo	2,87976	2,02226	0,55352	0,69361	-2,570%	0,69885
$\widehat{Y}_4$ <sub>LASSO</sub>	Entrenamiento	0,14495	0,09961	0,54284	0,70532	-6,898%	0,73488
	Testeo	0,12737	0,08879	0,59200	0,64953	-9,952%	0,70299

En la tabla 5.2, para  $\widehat{Y}_3$ <sub>LASSO</sub> se evidencia que, el parámetro estadístico RMSE presenta valores muy superiores a cero, lo que nos indica que el error entre los dos conjuntos de datos es considerable. Por el contrario, para  $\widehat{Y}_4$ <sub>LASSO</sub>, que corresponde al alargamiento unitario bajo resistencia máxima en % ( $\epsilon_{pc}$ ), al ser cercano a cero nos indica un error mínimo. Por otro lado, el MAE para  $\widehat{Y}_3$ <sub>LASSO</sub>, nos indica una precisión baja al tener valores alejados del cero, para  $\widehat{Y}_4$ <sub>LASSO</sub> indica una buena precisión. La RSR muestra que hay muy poca dispersión en los datos para los dos parámetros, mientras que el E nos indica que hay un ajuste aceptable al ser cercano a 1 en ambos casos. El NMBE al ser negativo se interpreta como una predicción excesiva. Finalmente, el coeficiente de determinación  $R^2$  nos muestra un valor aceptable al ser cercano a 1.

Los resultados obtenidos se deben a que el comportamiento a tracción directa varía en función del tipo de fibra utilizada y es muy difícil de predecir porque está en función de muchas variables. Por otro lado, se tiene el ruido estadístico generado al hacer uso de datos de otras investigaciones, parámetros como la composición del cemento, materiales plastificantes complementarios, vibrado de probetas, diferencia en granulometría, entre otros, son variables que pudieron afectar los resultados. La partición de la base de datos en 10 tipo *k-fold*, permitió seleccionar el modelo con el menor error y hacer de cierta manera que los resultados sean aceptables.

La Figura 5.1 muestra la comparativa entre los valores reales y los predichos por los modelos tipo LASSO para los subconjuntos de entrenamiento y testeo. Las líneas rojas punteadas indican el intervalo del error estándar de la predicción para cada conjunto de datos a ambos lados de la recta principal a 45°.



**Figura 5.1** – Gráficos de valores reales versus predichos por los modelos tipo LASSO.

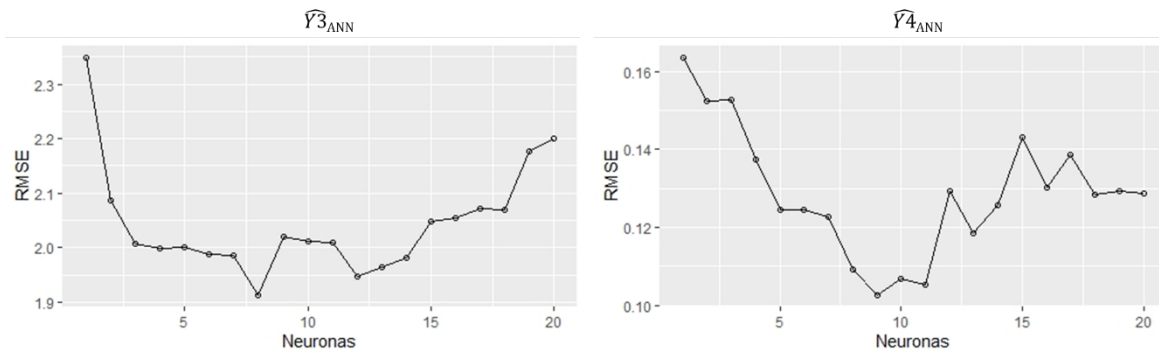
En las graficas anteriores se evidencia la eficiencia del modelo. Si bien no son los mejores resultados, son aceptables y permitirán obtener una idea más clara del comportamiento de estos concretos. Como se esperaba, en ambos casos, para los datos de entrenamiento se obtiene valores muy alejados del rango, es decir, una mayor dispersión. Sin embargo, luego de entrenar el modelo, en la fase de testeo se evidencia una dispersión menor, con datos mas cercanos al rango. Como se evidencia en las graficas y en los parámetros estadísticos, el modelo realizó una mejor predicción para el alargamiento unitario.

## 5.2. Redes neuronales

### 5.2.1. Modelos

Las variables de entrada son las seleccionadas por el modelo LASSO. Se consideran de 1 a 20 neuronas en la capa oculta. Se selecciona aquel número de neuronas que presente menor error en la validación cruzada tipo *k-fold*.

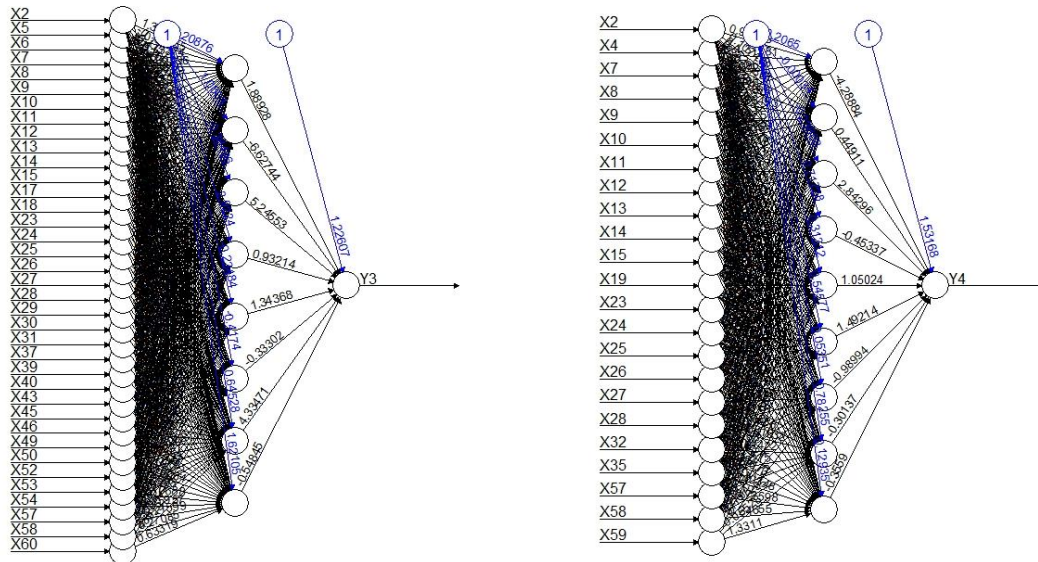
En la Figura 5.2. se pueden observar los resultados de la validación cruzada para diferentes números de neuronas en la capa oculta de los diferentes modelos de redes neuronales artificiales.



**Figura 5.2** – Promedio de la raíz del error cuadrático medio (RMSE) versus el número de neuronas en la capa oculta usando validación cruzada tipo *k-fold*.

El número de neuronas en la capa oculta que se van a utilizar, corresponde a las que presente el mínimo RMSE. En este caso, para la variable  $\widehat{Y}_{3\text{LASSO}}$  8 neuronas y para  $\widehat{Y}_{4\text{LASSO}}$  se tienen 9 neuronas, esto se puede corroborar en la figura 5.3.

En la Figura 5.3. se pueden observar los modelos de redes neuronales considerados en la presente investigación.



**Figura 5.3** – Modelos de redes neuronales considerados.

### 5.2.2. Evaluación de los modelos de redes neuronales

Los valores obtenidos de los parámetros estadísticos utilizados para la evaluación de los modelos tipo LASSO se presentan en la Tabla 5.3.

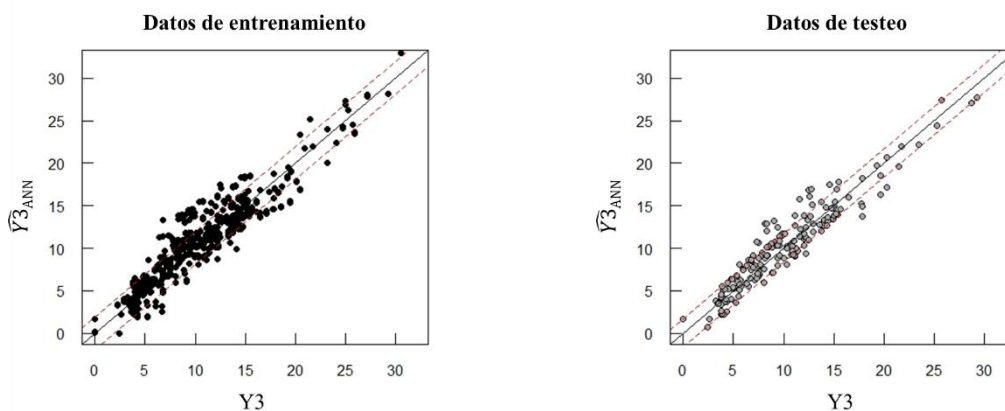
**Tabla 5.3 – Evaluación de los modelos de redes neuronales**

Modelo	Conjunto	RMSE	MAE	RSR	E	NMBE	R <sup>2</sup>
$\widehat{Y}_{3\text{ANN}}$	Entrenamiento	1,91300	1,45907	0,38111	0,85476	-3,347%	0,86320
	Testeo	1,65131	1,33641	0,31740	0,89926	-1,585%	0,90084
$\widehat{Y}_{4\text{ANN}}$	Entrenamiento	0,10268	0,07915	0,38453	0,85214	-4,395%	0,85812
	Testeo	0,08443	0,06447	0,39244	0,84599	-5,957%	0,85763

En la tabla 5.3, para  $\widehat{Y}_{3\text{LASSO}}$  se evidencia que, el parámetro estadístico RMSE presenta valores muy superiores a cero, lo que nos indica que el error entre los dos conjuntos de datos es considerable. Por el contrario, para  $\widehat{Y}_{4\text{LASSO}}$ , que corresponde al alargamiento unitario bajo resistencia máxima en % ( $\epsilon_{pc}$ ), al ser cercano a cero nos indica un error mínimo. Por otro lado, el MAE para  $\widehat{Y}_{3\text{LASSO}}$ , nos indica una precisión baja al tener valores alejados del cero, para  $\widehat{Y}_{4\text{LASSO}}$  indica una buena precisión. La RSR muestra que hay muy poca dispersión en los datos para los dos parámetros, mientras que el E nos indica que hay un buen ajuste al ser cercano a 1 en ambos casos. El NMBE al ser negativo se interpreta como una predicción excesiva y finalmente, el coeficiente de determinación  $R^2$  indica una predicción precisa al ser muy cercano a la unidad.

El modelo matemático de ANN constituye una herramienta precisa para la predicción del comportamiento a tracción de los UHPFRC, esto se debe a que los parámetros son seleccionados por *LASSO*, al hecho de haber entrenado el modelo con una parte de los datos y probarlo con la otra fracción (validación cruzada tipo *k-fold*), lo que se traduce como un buen funcionamiento del entrenamiento en la validación cruzada.

La Figura 5.4 muestra la comparativa entre los valores reales y los predichos por los modelos de redes neuronales para los subconjuntos de entrenamiento y testeo. Las líneas rojas punteadas indican el intervalo del error estándar de la predicción para cada conjunto de datos a ambos lados de la recta principal a 45°.



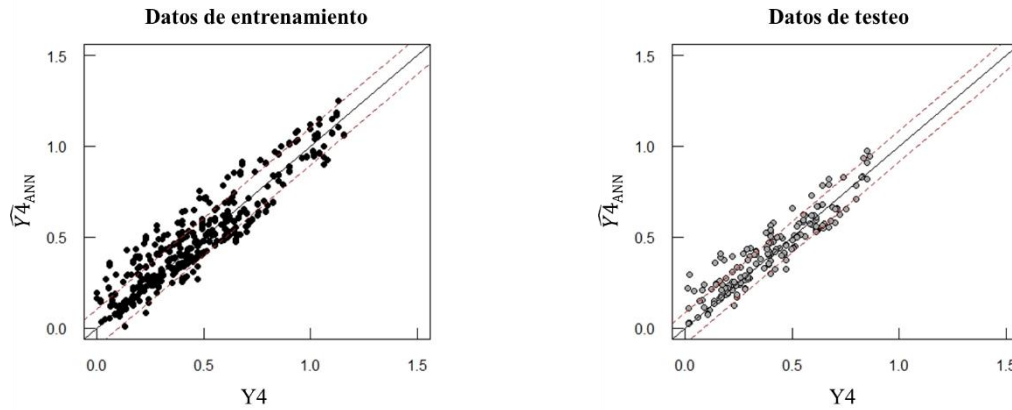


Figura 5.4 – Gráficos de valores reales versus predichos por los modelos de redes neuronales.

Los gráficos en la figura 5.4 muestran una mejora significativa frente a los obtenidos por *LASSO*. Se evidencia que el “rango” en este caso, correspondiente a las rectas paralelas a la recta de 45° es más cerrado, hay menos dispersión y hay una mejor alineación de los puntos sobre la recta de 45°.

## 6. Conclusiones

De la investigación realizada mediante modelos predictivos de redes neuronales y regresión multivariable (*LASSO*) para predecir el esfuerzo máximo que resisten a tensión los UHPFRC, su deformación asociada y el desempeño de estos modelos, se presentan las siguientes conclusiones:

- El modelo matemático de redes neuronales presenta un desempeño óptimo al predecir el esfuerzo máximo a tensión y la deformación asociada, dado la proximidad del parámetro estadístico  $R^2$  o coeficiente de correlación a la unidad.
- Los modelos de regresión tipo *LASSO* mostraron resultados aceptables en la predicción de la deformación asociada al esfuerzo máximo a tensión, esto debido a que los parámetros estadísticos obtenidos se encontraban muy cerca a los valores óptimos para esta variable.
- El hecho de haber entrenado el modelo de redes neuronales mediante validación cruzada tipo *k-fold*, hace que los coeficientes de correlación  $R^2$ , del grupo de entrenamiento y testeo sean similares, obteniendo 0,8581 y 0,8576 respectivamente para la variable  $\epsilon_{pc}$ .
- Los modelos de redes neuronales frente a los modelos tipo *LASSO* tuvieron un mayor desempeño, debido a su eminente naturaleza no-lineal. Esta eficiencia

en la predicción de los modelos de redes neuronales también se puede evidenciar en la figura 5.4, donde se evidencian datos menos dispersos, lo que se traduce en una desviación menor, rangos más cerrados y consecuentemente un menor error.

## 7. Recomendaciones

A toda persona que desee realizar un trabajo de investigación relacionado con la predicción de las propiedades del UHPFRC mediante cualquier tipo de regresión se le realizan las siguientes recomendaciones:

- Indiscutiblemente, una de las variables que influyo de manera importante en los resultados de la investigación corresponde a la validación tipo *k-fold*, un buen entrenamiento mediante este método permite tener resultados aceptables o de muy buena precisión.
- Utilizar modelos predictivos es una buena herramienta para la medición de propiedades de los UHPFRC. Los resultados pueden ser utilizados como un punto de partida para un análisis más profundo de estos materiales o para una idea general de lo que sería su comportamiento final, teniendo en cuenta la complejidad de los ensayos de laboratorio desde el punto de vista financiero y técnico, sumado a restricciones de tiempo.
- Una de las variables que más afectó los resultados en LASSO, corresponde a los datos utilizados. Se recomienda preferiblemente, utilizar datos propios, medidos en laboratorio mediante condiciones controladas similares a la de las condiciones que se quieren predecir.

## 8. Bibliografía

- [1] Korpa, A., Kowald, T., Trettin, R., Principles of development, phase composition and nanostructural features of multiscale Ultra High Performance Concrete modified with pyrogenic nanoparticles – A review article, *Am. J. Mater. Sci. Appl.* 2 (2014) 17–30.
- [2] Yokota, H., Rokugo, K., Sakata, N., (JSCE-2008) Recommendations for Design and Construction of High Performance Fiber Reinforced Cement Composites with Multiple Fine Cracks (HPFRCC), (2008). doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.dci.2010.01.003>.
- [3] Abellán-García, J., Fernández-Gómez, J., Torres-Castellanos, N., Núñez-López, A., Tensile behavior of normal strength steel fiber green UHPFRC, *ACI Mater. J.* (n.d.).
- [4] Abellán-García, J., Núñez-López, A., Torres-Castellanos, N., Fernández-Gómez, J., Effect of FC3R on the properties of ultra-high-performance concrete with recycled glass, *Dyna.* 86 (2019) 84–92. doi:10.15446/dyna.v86n211.79596.
- [5] Abellan-Garcia, J., Santofimo-Vargas, M.A., Torres-Castellanos, N., Analysis of metakaolin as partial substitution of ordinary Portland cement in Reactive Powder Concrete, *Adv. Civ. Eng. Mater.* 9 (2020) 368–386. doi:10.1520/ACEM20190224.
- [6] Abellán-García, J., Comparison of artificial intelligence and multivariate regression in modeling the flexural behavior of UHPFRC, *Dyna.* 87 (2020) 239–248. doi:<http://doi.org/10.15446/dyna.v87n214.86172>.
- [7] Abellán-García, J., Four-layer perceptron approach for strength prediction of UHPC, *Constr. Build. Mater.* 256 (2020). doi:10.1016/j.conbuildmat.2020.119465.
- [8] Abellán-García, J., Fernández-Gómez, J., Torres-Castellanos, N., Properties prediction of environmentally friendly ultra-high-performance concrete using artificial neural networks, *Eur. J. Environ. Civ. Eng.* 0 (2020) 1–25. doi:10.1080/19648189.2020.1762749.
- [9] Atkinson, A., Riani, M., *Robust Diagnostic Regression Analysis*, Springer US, New York, 2000.
- [10] Härdle, W.K., Simar, L., *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Springer-Verlag GmbH, Berlin, 2012.
- [11] Everitt, B., Hothorn, T., *MVA: An Introduction to Applied Multivariate Analysis with R*, (2015).
- [12] Chollet, F., Allaire, J.J., *Deep Learning with R*, Manning Publications Co., New Jersey, 2018.
- [13] Friedman, J., Hastie, T., Tibshirani, R., Regularization Paths for Generalized Linear Models via Coordinate Descent, *J. Stat. Softw.* 33 (2010) 1–22. doi:10.1016/j.expneurol.2008.01.011.
- [14] James, G., Witten, D., Hastie, T., Tibshirani, R., *An Introduction to Statistical Learning with Applications in R*, 2007. doi:10.1016/j.peva.2007.06.006.
- [15] Abellán-García, J., Fernández-Gómez, J.A., Torres-Castellanos, N., MACHINE



- LEARNING PREDICTION OF FLEXURAL BEHAVIOR OF UHPFRC, in: BEFIB 2020, Valencia, Spain, 2020: pp. 1–12.
- [16] Beck, M.W., NeuralNetTools: Visualization and analysis tools for neural networks, *J. Stat. Softw.* 85 (2018) 1–20. doi:10.18637/jss.v085.i11.
- [17] Rosenblatt, F., The Perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, *Cornell Aeronaut. Lab.* 65 (1958) 386–408.
- [18] Chandwani, V., Agrawal, V., Nagar, R., Modeling slump of ready mix concrete using genetic algorithms assisted training of Artificial Neural Networks, *Expert Syst. Appl.* 42 (2015) 885–893. doi:10.1016/j.eswa.2014.08.048.
- [19] Bharathi, S.D., Manju, R., Premalatha, J., Prediction of Compressive Strength for Self- Compacting Concrete ( SCC ) using Artificial Intelligence and Regression Analysis, *Int. J. ChemTech Res.* 10 (2017) 263–275.
- [20] Srinivasulu, S., Jain, A., A comparative analysis of training methods for artificial neural network rainfall – runoff models, *Appl. Soft Comput.* 6 (2006) 295–306. doi:10.1016/j.asoc.2005.02.002.
- [21] Mushgil, H.M., Alani, H.A., George, L.E., Comparison between Resilient and Standard Back Propagation Algorithms Efficiency in Pattern Recognition, *Int. J. Sci. Eng. Res.* 6 (2015) 773–778.
- [22] Aderaw, M., Muse, S., Abiero, Z.C., Artificial neural network based modelling approach for strength prediction of concrete incorporating agricultural and construction wastes, *Constr. Build. Mater.* 190 (2018) 517–525. doi:10.1016/j.conbuildmat.2018.09.097.
- [23] Moriasi, D.N., Arnold, J.G., Liew, M.W. Van, Bingner, R.L., Harmel, R.D., Veith, T.L., MODEL EVALUATION GUIDELINES FOR SYSTEMATIC QUANTIFICATION OF ACCURACY IN WATERSHED SIMULATIONS, *Am. Soc. Agric. Biol. Eng.* 50 (2007) 885–900.
- [24] Nash, E., Sutcliffe, V., RIVER FLOW FORECASTING THROUGH CONCEPTUAL MODELS. PART I- A DISCUSSION OF PRINCIPLES \*, *J. Hydrol.* 10 (1970) 282–290.
- [25] Gupta, S., Using Artificial Neural Network to Predict the Compressive Strength of Concrete containing Nano-silica, *Civ. Eng. Archit.* 1 (2013) 96–102. doi:10.13189/cea.2013.010306.

