

A TABELA PERIÓDICA DOS ELEMENTOS QUÍMICOS PREVISTA POR REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS DE KOHONEN

Maurício Ruv Lemes*

Departamento de Engenharia, Faculdade Comunitária de Taubaté – Anhanguera Educacional, Av. José Olegário de Barros, 46/58, Vila das Graças, 12060-400 Taubaté - SP, Brasil

Arnaldo Dal Pino Júnior

Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Pça Marechal do Ar Eduardo Gomes, 50, 12228-900 São José dos Campos - SP, Brasil

Recebido em 18/7/07; aceito em 30/11/07 publicado na web em 8/7/08

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS IN THE PERSPECTIVE OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS. Although several chemical elements were not known by end of the 18th century, Mendeleev came up with an astonishing achievement: the periodic table of elements. He was not only able to predict the existence of (then) new elements but also to provide accurate estimates of their chemical and physical properties. This is certainly a relevant example of the human intelligence. Here, we intend to shed some light on the following question: Can an artificial intelligence system yield a classification of the elements that resembles, in some sense, the periodic table? To achieve our goal, we have fed a self-organized map (SOM) with information available at Mendeleev's time. Our results show that similar elements tend to form individual clusters. Thus, SOM generates clusters of halogens, alkaline metals and transition metals that show a similarity with the periodic table of elements.

Keywords: periodic table, neural networks, Kohonen neural network.

INTRODUÇÃO

Em 1869 Mendeleev¹ apresentou à comunidade científica a sua lei periódica dos elementos. Mendeleev conhecia pouco mais de 60 elementos e algumas de suas propriedades, tais como peso atômico, reação do elemento com o oxigênio, raio de ligação, raio atômico e ponto de fusão.² Sentindo-se muito seguro da validade de sua classificação, deixou posições vazias na sua tabela, dedicada a elementos que, segundo ele, ainda seriam descobertos.

O trabalho desenvolvido por Mendeleev foi surpreendente, pois suas pesquisas foram desenvolvidas em uma época em que muitos elementos naturais eram desconhecidos como, por exemplo, os gases nobres. Não se conhecia a estrutura atômica e os números atômicos que são utilizados na organização dos elementos da tabela atual. Somente em 1913, Mosely estabeleceu o conceito de número atômico;³ porém essa descoberta provocou apenas pequenos rearranjos na classificação dos elementos feita por Mendeleev.

Possivelmente, o maior triunfo da tabela periódica dos elementos foi prever a existência e propriedades de elementos desconhecidos em sua época. Por exemplo, Mendeleev não postulou apenas a existência do elemento eka-silício, hoje conhecido como germânio, mas também suas propriedades e reações com cloro e oxigênio com considerável precisão.

A tabela periódica identifica semelhanças entre dois ou mais elementos e os agrupa sob a forma de períodos e famílias. Essas semelhanças se repetem em intervalos, sempre relacionadas ao número atômico. Na tabela, os elementos estão arranjados horizontalmente, em seqüência numérica, de acordo com seus números atômicos, resultando no aparecimento de sete linhas horizontais (ou períodos). Cada período, à exceção do primeiro, começa com um metal e termina com um gás nobre. Os períodos diferem em

comprimento, variando de 2 elementos no mais curto até 32 elementos no mais longo. As linhas verticais são formadas por elementos cujas estruturas eletrônicas externas são similares. Estas colunas são denominadas grupos. Em alguns deles, os elementos estão relacionados tão intimamente que são denominados de famílias. Por exemplo, o grupo 2 é a família dos metais alcalino-terrosos (berílio, magnésio, cálcio, estrôncio, bário e rádio).

Este grande sucesso da inteligência humana fornece um campo fértil para a investigação da capacidade de sistemas artificiais inteligentes produzirem classificações semelhantes. As redes de Kohonen⁴ e outras técnicas de inteligência artificial vêm sendo muito utilizadas em trabalhos de classificação. Por exemplo, em problemas de espectrometria,⁵ modelamento,⁶ problemas de otimização,⁷ aglomerados de silício,^{8,9} problemas químicos^{10,11} e outros.¹²⁻¹⁵

A proposta central deste trabalho foi investigar a capacidade de um sistema artificial inteligente classificar os elementos químicos. Para tanto fornecemos às redes de Kohonen (RK) informações conhecidas no final do século XIX, de forma análoga ao que Mendeleev fez em sua época (1869). Em outras palavras, buscamos determinar o que um sistema artificial inteligente poderia ter previsto caso estivesse na mesma situação que os químicos do final do século XIX. Mostramos que a RK posiciona os elementos de tal forma a respeitar muitas propriedades apresentadas na tabela periódica de Mendeleev.

A RK utilizada neste trabalho foi composta por uma rede 8x8; mostramos que os elementos químicos se separaram segundo propriedades químicas não treinadas, o que reforça a eficiência do método. Mostramos também que alguns elementos são tão semelhantes que acabam compartilhando a mesma célula. Uma discussão dos diferentes tipos de arquitetura será objeto de um trabalho futuro.

Nos próximos itens mostramos um estudo sobre as propriedades da tabela periódica, a escolha dessas propriedades para utilização em redes neurais, a escolha da rede mais apropriada e, por último, o mapeamento da rede para os elementos treinados e também para

*e-mail: ruvlemes@terra.com.br

alguns elementos que não estavam presentes no treinamento.

REDES AUTO ORGANIZÁVEIS DE KOHONEN

As redes neurais foram desenvolvidas,¹⁶ originalmente na década de 40, pelo neurofisiologista Warren McCulloch, do MIT, e pelo matemático Walter Pitts, da Universidade de Illinois. Eles propuseram um modelo simples de neurônio que se mostrou um poderoso dispositivo computacional. Provaram que um arranjo sincronizado desses neurônios é capaz, em princípio, de computação universal. Isto significa que uma rede neural artificial pode realizar qualquer cálculo que um computador digital ordinário possa. As redes, em essência, formam uma tecnologia de processamento de informações que se inspira no funcionamento do cérebro humano.

Uma Rede Neural Artificial (RNA) é composta por várias unidades de processamento cujo funcionamento individual é bastante simples. Essas unidades são conectadas por canais de comunicação que estão associados a determinados pesos. As unidades fazem operações apenas sobre seus dados locais, que são entradas recebidas pelas suas conexões. O comportamento inteligente de uma RNA é um efeito global que se explica pelas interações entre as unidades de processamento da rede. Existem dois tipos de RNA de acordo com o esquema de aprendizado: supervisionado e não-supervisionado. Neste trabalho faremos uso de um tipo bem conhecido de rede de aprendizado não-supervisionado chamada Rede de Kohonen.¹⁷

Também as RK's são formadas por um conjunto de elementos simples organizados em estruturas mais complexas, que funcionam em conjunto. Cada neurônio é uma unidade de processamento que recebe estímulos (de fora do sistema ou de outros neurônios), e produz uma resposta (para outros neurônios ou para fora do sistema). Analogamente à estrutura do cérebro, os neurônios das redes neurais artificiais estão interligados entre si por ramificações através das quais os estímulos são propagados. O processo de aprendizado consiste em reforçar as ligações que levem o sistema a produzir respostas mais eficientes.

O objetivo de uma RK é mapear padrões de entrada de dimensão arbitrária N para um arranjo geométrico discreto de duas dimensões, conforme Figura 1. O que distingue as redes de Kohonen das demais é uma estrutura em duas camadas: uma de entrada e outra de processamento, onde se forma o mapa. A camada de processamento é formada por um arranjo geométrico de neurônios conectados apenas aos seus vizinhos imediatos.

Os objetos a serem agrupados para subsequente segmentação (por exemplo, os elementos químicos) são apresentados, um por vez, aos neurônios de entrada. A cada apresentação, os estímulos gerados pelo objeto (por exemplo, peso atômico, raio atômico, densidade, temperatura de fusão etc.) são capturados pela camada de entrada e transmitidos igualmente a todos os neurônios da camada do mapa.

Na rede, o neurônio que reagir mais fortemente aos estímulos

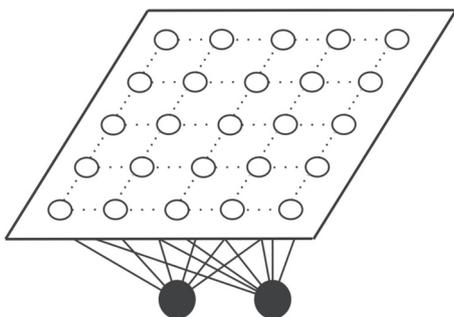


Figura 1. Arquitetura das Redes de Kohonen

do objeto apresentado ganha-o para si. Além disso, reforça suas ligações com os vizinhos próximos, sensibilizando-os um pouco mais às características do objeto capturado. Chamamos de época a apresentação de todos os objetos de entrada para a rede neural e a atualização dos pesos para cada objeto apresentado.

Numa nova época, quando um objeto parecido for apresentado ao mapa, toda a região sensibilizada reagirá um pouco mais intensamente. Por outro lado, como os neurônios vizinhos são diferentes do neurônio ganhador, cada um reagirá mais intensamente a um objeto um pouco diferente.

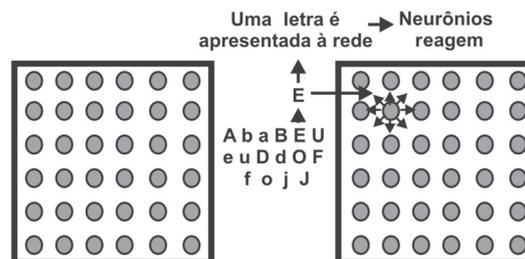


Figura 2. Letras maiúsculas, minúsculas, vogais e consoantes formam o grupo a ser classificado. O neurônio que reage mais fortemente "ganha" (Vizinhos são sensibilizados)

A cada nova apresentação de um objeto ao mapa, o perfil de sensibilidade dos neurônios vai se alterando. Isto é o que chamamos de treinamento da rede (Figura 2). Estas alterações, no entanto, são cada vez menores, de forma que a configuração do mapa converge para uma disposição estável. Quando isto acontece, dizemos que o mapa aprendeu a classificar indivíduos.

O resultado do processamento de uma rede treinada é que cada neurônio se torna dono de um certo número de objetos (Figura 3), parecidos com os capturados pelos neurônios vizinhos. Desta maneira, os indivíduos semelhantes vão sendo posicionados próximos entre si, formando um gradiente de características.

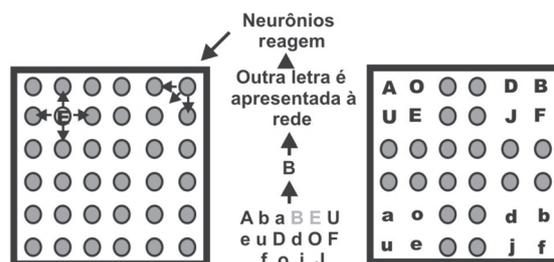


Figura 3. O neurônio que reage mais fortemente "ganha" (Ligações com vizinhos são reforçadas). Primeira Letra é capturada. Letras Organizadas (no lado direito)

As RK's podem designar-se redes auto-organizáveis, cujo método de aprendizagem sem supervisão se insere quer no interior dos algoritmos de estimulação pela entrada ou de aprendizagem associativa quer no interior dos algoritmos de aprendizagem competitiva.

O processo de aprendizagem utiliza um conjunto de elementos conhecidos e suas propriedades para determinar os valores ótimos das conexões entre os neurônios representadas pelos pesos w 's.

Matematicamente o processo de aprendizagem de uma RK pode ser descrito por:

$$w_{ij}(k+1) = w_{ij}(k) + \Delta w_{ij}(k)$$

$$\Delta w_{ij}(k) = \eta e^{-d(i,j)/\sigma} (\chi_i - w_{ij}(k))$$

onde: η é chamada de taxa de aprendizagem; σ é o fator de vizinhança, quanto maior o valor de σ , menos a vizinhança será afetada; χ_i representa a i -ésima propriedade de treinamento; w_{ij} são os pesos a serem treinados; l e j são índices que caracterizam as células l e j ; $d(l,j)$ é a distância entre as células l e j .

Os pesos são inicializados a partir de valores aleatórios e submetidos a treinamento. O processo é iterativo, isto é, os pesos obtidos na iteração $k+1$, são calculados a partir dos valores da iteração k , até que os valores $w(k+1)$ e $w(k)$ permaneçam praticamente inalterados. Cada uma dessas iterações é chamada de época.

É importante mencionar que durante nossa RK possui propriedades periódicas de contorno.

Os valores de χ_i são normalizados, ou seja, na entrada da rede se tornam valores entre 0 e 1. Isso é feito para garantir a homogeneidade dos dados de entrada, já que utilizamos propriedades variadas com ordens de grandezas diferentes.

TREINAMENTO E PREVISÃO

Neste trabalho utilizamos, para treinamento das RK, as seguintes propriedades já conhecidas por Mendeleev: peso atômico, raio de ligação, raio atômico, ponto de fusão e reação com oxigênio.

Após o treinamento realizamos uma investigação sobre o comportamento de propriedades diferentes das treinadas. A saber: ponto de ebulição, número atômico, potencial de ionização, eletronegatividade e densidade. As RK foram capazes de mapear também as características que não fizeram parte do treinamento.

A lista de todos os 69 elementos estudados neste trabalho é fornecida na Tabela 1.

Dentre os elementos para o treinamento foram escolhidos aleatoriamente 41 elementos químicos e para o treinamento das redes neurais foram usadas 5 propriedades citadas anteriormente.

Por questão de conveniência utilizamos uma RK de arquitetura quadrada, cujos lados eram compostos por 8 neurônios. O treina-

Tabela 1. Os 69 elementos utilizados neste trabalho e os 41 elementos escolhidos para o treinamento da RNA estão indicados por (*)

Elementos		
H	Ca*	Y*
Li	Zn*	In*
Na*	Sr*	La*
K*	Cd*	Er
Cu*	Ba	Tl
Rb*	Hg	C
Ag*	Be	Si
Cs	B	Ti*
Au	Al*	Zr*
Be	Sc*	Sn*
Mg*	Ga*	Nb*
Ce*	N*	Sb
Hf	P*	Ta
Pb	V*	Bi
Th	As*	F*
O*	Mo*	Cl*
S*	Te*	Mn*
Cr*	W	Br*
Se*	U	Ru*
Tc	Co	Rh*
I	Ni*	Pd*
Fe	Cu*	Ir
Pt	Os	Ag*

mento foi realizado em 5000 épocas para todos os testes. Através da variação sistemática dos parâmetros de aprendizado ($0,04 \leq \eta \leq 0,2$) e de vizinhança ($0,7 \leq \sigma \leq 1,5$) determinamos que a rede 8×8 que apresentava o maior número de células preenchidas com um único elemento era obtida quando $\sigma = 1,4$ e $\eta = 0,09$.

RESULTADOS

A RK após o processo de treinamento é apresentada na Tabela 2. Por inspeção da Tabela 2, notamos que: reconheceu e agrupou elementos com alta eletronegatividade. Os elementos Flúor, Cloro, Bromo, Oxigênio e Nitrogênio ocupam células vizinhas entre si; os Metais de transição também foram agrupados. Prata e Paládio; Níquel e Cobre; Manganês (Mn), Cromo (Cr), Vanádio (V) e Titânio (Ti); tivemos agrupamento de metais alcalinos como: Rubídio (Rb), Potássio (K) e Estrôncio (Sr). Outro agrupamento em linha foi o Potássio (K), o Cálcio (Ca) e o Escândio (Sc). Ainda temos em linha o Estrôncio (Sr), Ítrio (Y) e Zircônio (Zr); na família 5A temos agrupados o Fósforo (P) e o Nitrogênio (N).

Tabela 2. Mapa Encontrado - (1) Metais de Transição, (2) Metais Alcalinos Terrosos, (3) Metais Alcalinos, (4) Outros Metais, (5) Lantanídeos e (6) Não Metais

In (4)	La (1)	Sr (2)	Rb (3)	K (3)	Na (3)	-	Mg (2)
Sn (4)	Ce (5)	Y (1)	-	Ca (2)	-	-	-
Te (6)	-	Zr (1)	-	Sc (1)	Al (4)	P (6)	N (6)
Ag (1)	-	Mo (1)	-	Ti (1)	-	-	O (6)
Pd (1)	Ru (1)	-	V (1)	-	-	-	F (6)
-	-	Cr (1)	-	-	-	S (6)	Cl (6)
Ni (1)	Mn (1)	-	-	-	-	-	Br (6)
Cu (1)	-	-	Ag (1)	Zn (1)	Ga (4)	As (6)	Se (6)

Utilizando os w 's treinados, descobrimos quais eram as células a serem ocupadas pelos os elementos Érbio (Er), Platina (Pt), Ouro (Au) e Hidrogênio (H). Na Tabela 3 mostramos esse resultado. Note que a posição prevista pelas RK's, colocando o Er junto do Ce, o Hidrogênio na mesma célula que o Flúor, a Platina e o Ouro caíram juntos também.

Tabela 3. Mapa com as previsões

In (4)	La (1)	Sr (2)	Rb (3)	K (3)	Na (3)	-	Mg (2)
Sn (4)	Ce (5)	Y (1)	-	Ca (2)	-	-	-
-	-	Er	-	-	-	-	-
Te (6)	-	Zr (1)	-	Sc (1)	Al (4)	P (6)	N (6)
Ag (1)	Pt - Au	Mo (1)	-	Ti (1)	-	-	O (6)
Pd (1)	Ru (1)	-	V (1)	-	-	-	F - H
-	-	Cr (1)	-	-	-	S (6)	Cl (6)
Ni (1)	Mn (1)	-	-	-	-	-	Br (6)
Cu (1)	-	-	Ag (1)	Zn (1)	Ga (4)	As (6)	Se (6)

Comparando com a tabela periódica atual, pode-se notar que o Érbio e o Cério que estão juntos são lantanídeos. A Platina e o Ouro são metais e estão próximos da Prata, Mobilidênio e Rutênio. Já o Hidrogênio que foi previsto junto ao Flúor também é um não-metal.

Os resultados apresentados mostram 33 células ocupadas por um elemento e apenas 4 delas foram ocupadas por 2 elementos cada uma. Os átomos de Cádmi (Cd) e Índio (In), Cobre (Cu) e Prata (Ag), Ródio (Rh) e Paládio (Pd), Nióbio (Nb) e Molibdênio (Mo).

A Tabela 4 apresenta as propriedades utilizadas para o treina-

Tabela 4. Propriedades Não Treinadas, valores reais e normalizados

Elemento	Peso Atômico(u.m.a.)		Raio de Ligação		Raio Atômico		Ponto de Fusão (K)		Calor Específico		RxO	
Nb	92,91	0,45	1,34	0,55	2,08	0,59	2740	0,70	0,26	0,11	2,5	0,61
Mo	95,94	0,46	1,3	0,53	2,01	0,57	2890	0,73	0,25	0,11	3	0,74
Cd	112,41	0,52	1,48	0,61	1,71	0,47	594,18	0,23	0,23	0,11	1,2	0,23
In	114,82	0,53	1,44	0,60	2	0,56	429,76	0,19	0,23	0,11	1,5	0,36
Cu	63,546	0,34	1,17	0,48	1,57	0,42	1357,6	0,40	0,38	0,12	0,5 e 4	0,1
Ag	107,868	0,51	1,34	0,55	1,75	0,48	1234	0,37	0,235	0,11	0,5 e 4	0,1
Rh	102,9	0,49	1,25	0,51	1,83	0,51	2236	0,60	0,242	0,11	4	1
Pd	106,4	0,50	1,28	0,52	1,79	0,50	1825	0,50	0,24	0,11	4	1

mento dos elementos e os elementos que compartilharam a mesma célula.

O par, Nióbio e Molibdênio, apresenta todas as propriedades treinadas com valores semelhantes. O par Cádmi e Índio apresenta peso atômico, raio de ligação e raios atômicos muito semelhantes e difere em apenas 20% no ponto de fusão. Situação semelhante ocorre para o par Ródio e Paládio. O par Cobre e Prata apresenta peso atômico diferente, mas as demais propriedades treinadas são semelhantes. A rede mostra com isso que o peso atômico não é a característica mais importante para a classificação dos elementos.

Tabela 5. Propriedades não treinadas

Elemento	Número Atômico	Potencial Ionização	Eletroneg.	Ponto de Ebulição (K)	Densidade (g/cm ³)
Cd	48	8,993	1,69	1040	8,65
In	49	5,786	1,78	2346	7,31
Cu	29	7,726	1,9	2836	8,96
Ag	47	7,576	1,93	2436	10,5
Rh	45	7,46	2,28	3970	12,4
Pd	46	8,34	2,2	3237	12
Nb	41	6,88	1,6	5017	8,55
Mo	42	7,099	2,16	4912	10,2

A Tabela 5 apresenta algumas propriedades não utilizadas no treinamento.

O par Cádmi e Índio apresenta número atômico e eletronegatividade muito semelhantes. O par Cobre e Prata apresenta número atômico diferente, mas as demais propriedades não treinadas são semelhantes. O par Ródio e Paládio apresenta potencial de ionização diferente, mas as demais propriedades são semelhantes. O par Nióbio e Molibdênio apresenta densidades diferentes, mas as outras propriedades não treinadas são semelhantes.

CONCLUSÕES

Utilizando informações conhecidas na época de Mendeleev testamos um sistema artificial inteligente e classificamos elementos químicos. Mostramos que as RK's ao mapear os elementos químicos foram capazes de organizá-los em várias propriedades treinadas e também não treinadas. As RK's organizaram metais alcalinos, metais de transição e até mesmo propriedades que não estavam presentes no treinamento como, por exemplo, a eletronegatividade. Utilizando a arquitetura 8x8 o sistema se mostrou eficiente e conseguiu mapear vários aspectos diferentes dos elementos. No mapeamento podemos notar que alguns elementos químicos ocuparam a mesma célula, por se tratarem de elementos muito parecidos em relação às suas propriedades gerais. O fato de alguns elementos terem compartilhado a mesma célula sugere que outras arquiteturas sejam testadas, procedimento que está em desenvolvimento e será publicado em trabalho futuro.

REFERÊNCIAS

- Mendeleev, D.; *Journal of the Russian Chemical Society* **1869**, *1*, 60.
- Mendeleev, D.; *Zeitschrift für Chemie* **1869**, *12*, 405.
- Moseley, H. G. J.; *Phil. Mag.* **1913**, 1024.
- Kohonen, T.; *Biological Cybernetics* **1982**, *43*, 56.
- Vander Heyden, Y.; Vankeerberghen, P.; Novic, M.; Zupan, J.; Massart, D. L.; *Talanta* **2000**, *51*, 455.
- Tusar, M.; Zupan, J.; Gasteiger, J.; *J. Chem. Phys.* **1992**, *89*, 1517.
- Favata, F.; Walker, R.; *Biological Cybernetics* **1991**, *64*, 463.
- Lemes, M. R.; Pino, Jr. A. D.; *Quim. Nova* **2002**, *25*, 539.
- Lemes, M. R.; Marim, L. R.; Pino, Jr. A. D.; *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* **2002**, *66*, 23203.
- Zupan, J.; Gasteiger, J.; *Anal. Chim. Acta* **1991**, *248*, 1.
- Zupan, J.; Gasteiger, J.; *Neural Networks for Chemists*, VCH: New York, 1993.
- Lambert, J. M.; *Proceedings of the 5-th ICNN*, **1991**.
- Mhaskar, H. N.; Hahn, N.; *Neural Computation* **1997**, *9*, 144.
- Suzuki, Y.; *IEEE Trans. On Neural Networks* **1995**, *6*.
- Haykin, S.; Li, L. *Em Applications of Neural Networks to Telecommunications*; Alspecter, J.; Goodman, R., eds.; Laurence Elbaum: New Jersey, 1993.
- McCulloch, W.; Pitts, W.; *A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity*, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, Springer, 1943.
- Kohonen, T.; *Self-Organizing and Associative Memory*, 3rd ed., Springer Verlag: Berlin, 1989.