



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO
TERMOGRAVIMÉTRICO DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN
DE LOS RESIDUOS CÁSCARA DE PAPA (*Solanum tuberosum*).**

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: MICHEL ABIGAIL JARA ROMERO

DIRECTOR: Ing. LUIS SANTIAGO CARRERA ALMENDÁRIZ

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Michel Abigail Jara Romero.

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Michel Abigail Jara Romero, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 07 de septiembre de 2021

Michel Abigail Jara Romero




060461082-4

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo: propuesta tecnológica. **PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO TERMOGRAVIMÉTRICO DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN DE LOS RESIDUOS CÁSCARA DE PAPA (*Solanum tuberosum*)**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: DARIO FERNANDO GUAMAN LOZADA	2021-09-07
Ing. Luis Santiago Carrera Almendáriz DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	 Firmado electrónicamente por: LUIS SANTIAGO CARRERA ALMENDARIZ	2021-09-07
Ing. Marlene Jacqueline García Veloz MIEMBRO DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: MARLENE JACQUELINE GARCIA VELOZ	2021-09-07

DEDICATORIA

El presente trabajo de integración curricular le dedico a mis padres, por ser quienes hacen posible cada sueño y anhelo en mi vida, ya que con su esfuerzo y apoyo incondicional he podido llegar a esta instancia de mi vida, gracias a sus principios, valores, cimientos para la construcción de mi vida profesional, basado en la responsabilidad y deseos de superación. También, mi trabajo de integración curricular va dedicado a mi familia quienes siempre han estado presentes a lo largo de mi vida, con todo el amor y apoyo incondicional para cumplir cada una de mis metas.

Michel

AGRADECIMIENTO

Mi agradecimiento se dirige en primer lugar a mi Madre Dolorosa quien es mi guía en cada paso de mi vida, a mis padres: María del Carmen y Ángel Raúl, quienes son mis pilares fundamentales y apoyo incondicional en mi formación como persona y mi formación académica; a mi hermana Cristina Fernanda quien es mi compañera de vida y soporte en cada escalón por alcanzar; a mis abuelitos Marianita Azucena y Ángel Antonio quienes con su amor velan por mi bienestar y mi felicidad; y a mi familia en general que con sus aportes son invaluableles en el desarrollo de mi vida.

A mis docentes, personas de gran sabiduría que me han formado para llegar al punto en el que me encuentro, agradeciendo siempre por las ganas de transmitir sus conocimientos y dedicación en su trabajo.

Michel

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS	xiii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	xiv
RESUMEN.....	xv
SUMMARY	xvi

CAPÍTULO I

1	INTRODUCCIÓN.....	1
1.1	Antecedentes	1
1.2	Planteamiento del problema	2
1.3	Objetivos	3
1.3.1	<i>Objetivo General</i>	3
1.3.2	<i>Objetivos Específicos</i>	3
1.4	Justificación del proyecto.....	4
1.5	Alcance	5

CAPÍTULO II

2	MARCO TEÓRICO.....	6
2.1	Estado del arte	6
2.2	Bases Teóricas.....	7
2.2.1	<i>Biomasa</i>	7
2.2.2	<i>Análisis termogravimétrico (TGA)</i>	8

2.2.2.1	<i>Principio de funcionamiento del análisis</i>	8
2.2.3	<i>Modelos cinéticos</i>	9
2.2.4	<i>Energía de activación en biomasa</i>	10
2.2.5	<i>Redes neuronales artificiales</i>	10
2.2.5.1	<i>Arquitectura de una red neuronal artificial</i>	10
2.2.5.2	<i>Entrenamiento de una red neuronal artificial</i>	11
2.2.5.3	<i>Diseño de redes neuronales artificiales en Matlab</i>	12

CAPÍTULO III

3	METODOLOGÍA	13
3.1	Localización del proyecto	14
3.2	Determinación de las variables de estudio	14
3.2.1	<i>Operacionalización de variables</i>	15
3.2.1.1	<i>Selección de variables</i>	15
3.2.1.2	<i>Operación de variables</i>	15
3.3	Análisis termogravimétrico (TGA)	16
3.4	Establecimiento de la base de datos	16
3.5	Diseño de la red neuronal artificial	17
3.5.1	<i>Entradas y salidas en la red neuronal artificial</i>	17
3.5.2	<i>Normalización de datos</i>	17
3.5.3	<i>Desarrollo de la red neuronal artificial</i>	17
3.6	Entrenamiento de la red neuronal artificial	18
3.7	Validación de la red neuronal artificial por análisis estadístico	22
3.8	Desarrollo de la interfaz gráfica de usuario	23

CAPÍTULO IV

4	GESTIÓN DEL PROYECTO	24
4.1	Cronograma.....	24
4.2	Presupuesto.....	25
4.3	Recursos humanos y materiales	25
4.3.1	<i>Recursos humanos</i>	<i>25</i>
4.3.2	<i>Recursos materiales</i>	<i>25</i>
4.4	Resultados	26
4.4.1	<i>Análisis termogravimétrico</i>	<i>26</i>
4.4.2	<i>Cálculos de la energía de activación</i>	<i>27</i>
4.4.3	<i>Base de datos para desarrollar la red neuronal artificial</i>	<i>27</i>
4.4.4	<i>Desarrollo de la red neuronal artificial.....</i>	<i>27</i>
4.4.4.1	<i>Normalización de los datos</i>	<i>27</i>
4.4.4.2	<i>Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial.....</i>	<i>27</i>
4.4.5	<i>Validación de la red neuronal artificial</i>	<i>27</i>
4.4.5.1	<i>Análisis estadístico de los datos predichos.....</i>	<i>28</i>
4.4.6	<i>Desarrollo de la interfaz gráfica de usuario</i>	<i>30</i>
	CONCLUSIONES.....	31
	RECOMENDACIONES.....	32
	GLOSARIO	
	BIBLIOGRAFÍA	
	ANEXOS	

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Modelos cinéticos	9
Tabla 1-3. Características geográficas del cantón Guano	14
Tabla 2-3. Modelos cinéticos	15
Tabla 3-3. Operación de variables	15
Tabla 4-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial	17
Tabla 5-3. Ensayos realizados ensayos realizados durante el entrenamiento de la red.	19
Tabla 6-3. Ejemplo de tabla ANOVA	22
Tabla 1-4. Cronograma de la propuesta tecnológica.....	24
Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto.....	25
Tabla 3-4. Recursos materiales utilizados en el proyecto	25
Tabla 4-4. Especificaciones del ensayo	26
Tabla 5-4. Análisis de Medias para la energía de activación real y predicha.....	28
Tabla 6-4. Análisis ANOVA para la energía de activación real y predicha.....	28
Tabla 7-4. Prueba de rangos múltiples para la energía de activación real y predicha	29

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Termograma	9
Figura 2-2. Estructura de una RNA: (a) tradicional, (b) profunda	11
Figura 1-3. Metodología del trabajo	13
Figura 2-3. Ubicación geográfica del cantón Guano	14
Figura 3-3. Ventana Neural Net Fitting, la aplicación para redes neuronales en Matlab	18
Figura 4-3. Selección de entradas y salidas normalizadas	18
Figura 5-3. Arquitectura de la red neuronal artificial	20
Figura 6-3. Selección del algoritmo de entrenamiento	21
Figura 7-3. Proceso de entrenamiento de la red	22
Figura 8-3. Asistente de creación de la interfaz gráfica.....	23
Figura 9-3. Panel para diseñar la interfaz gráfica	23
Figura 1-4. Interfaz gráfica de usuario para la red neuronal artificial.....	30

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-4. Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 5°C/min	26
Gráfico 2-4. Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 15°C/min...	26
Gráfico 3-4. Energía de activación real y predicha por la red neuronal artificial.....	28
Gráfico 4-4. Gráfico Anova para la energía de activación.....	29
Gráfico 5-4. Gráfico de Medias para la energía de activación.....	29

ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A.** Preparación de la muestra de biomasa conformada por cáscara de papa
- ANEXO B.** Análisis TGA en laboratorio de investigación de la UCE
- ANEXO C.** Resultados del análisis Termogravimétrico
- ANEXO D.** Energía de activación calculada por diferentes métodos cinéticos
- ANEXO E.** Base de datos de entrenamiento para diseñar la red neuronal artificial
- ANEXO F.** Base de datos para validar la red neuronal artificial
- ANEXO G.** Script de la normalización de los datos de entrenamiento
- ANEXO H.** Script de la normalización de los datos de validación
- ANEXO I.** Diseño y entrenamiento de la red neuronal artificial
- ANEXO J.** Entrenamiento de la red modificando la cantidad de neuronas en la capa oculta
- ANEXO K.** Resultados predichos por la red neuronal artificial en el entrenamiento
- ANEXO L.** Script de validación de la red neuronal artificial
- ANEXO M.** Resultados predichos por la red en la validación
- ANEXO N.** Script de la interfaz gráfica de usuario

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

TGA	Análisis termogravimétrico
t	tiempo
s	segundos
T	Temperatura
°C	Centígrados
K	Kelvin
P	Peso
mg	miligramos
Ea	Energía de activación
kJ/mol	Kilojulio por mol
FWO	Flynn-Wall-Ozawa
KAS	Kissinger-Akahira-Sunose
RNA	Red neuronal artificial
V_N	Valor normalizado
V	Valor a normalizar
V_{max}	Valor máximo
V_{min}	Valor mínimo
MSE	Error cuadrático medio
R	Coefficiente de correlación de Pearson
F	Razón en análisis ANOVA
LM	Levenberg-Marquardt
BR	Regularización bayesiana
SCG	Scaled Conjugate Gradient
GUI	Interfaz gráfica de usuario

RESUMEN

El objetivo de este trabajo fue desarrollar una red neuronal artificial capaz de predecir el comportamiento termogravimétrico de la energía de activación en los residuos de cáscara de papa (*Solanum tuberosum*) del cantón Guano. Los datos experimentales del análisis termogravimétrico y cálculos mediante los modelos cinéticos propuestos por Flynn-Wall-Ozawa, Kissinger-Akahira-Sunose y Friedman para la energía de activación se han utilizado al establecer una base de 100 datos en el modelo de predicción. El desarrollo de la red se llevó a cabo en el software Matlab con tres variables de entrada, diferente cantidad de neuronas en la capa oculta, una variable de salida y los algoritmos de entrenamiento de Levenberg Marquardt, Regularización Bayesiana y Scaled Conjugate Gradient. El tiempo, la temperatura y el peso de la muestra del análisis termogravimétrico se han seleccionado como variables de entrada; mientras que, la energía de activación calculada por el método cinético de Flynn Wall Ozawa como variables de salida. Un coeficiente de correlación de Pearson de 1 y error cuadrático medio de $2,327E-09$ evidencian el buen desempeño la red durante su entrenamiento con 375 neuronas en la capa oculta y el algoritmo de regularización bayesiana. Un valor-P mayor que 0,05 permite validar con un 95% de confianza el modelo de predicción, confirmando estadísticamente, que no existe una diferencia significativa entre la energía de activación real y predicha por la red neuronal artificial. Los resultados indican que la red neuronal artificial demuestra ser eficiente para predecir la energía de activación de los residuos de cáscara de papa analizados por termogravimetría empleando tasas de calentamiento de 5 y 15 °C/min en atmósfera inerte con inyección de nitrógeno a 20 mL/min. Se recomienda emplear el modelo de predicción en aquellos proyectos encaminados hacia la pirólisis o gasificación de la biomasa conformada por residuos de cáscara de papa.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA>, <CÁSCARA DE PAPA>, <ANÁLISIS TERMOGRAVIMÉTRICO>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <ENERGÍA DE ACTIVACIÓN>, <MODELOS CINÉTICOS>, <FLYNN-WALL-OZAWA>



Firmado electrónicamente por:
**LUIS ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**



0730-DBRAI-UPT-2021

SUMMARY

The objective of this study was to develop an artificial neural network capable of predicting the thermogravimetric behaviour of the activation energy in the residues of potato peel (*Solanum tuberosum*) from the Guano canton. The experimental data of the thermogravimetric analysis and calculations using the kinetic models proposed by Flynn-Wall-Ozawa, Kissinger-Akahira-Sunose and Friedman for the activation energy have been used when establishing a base of 100 data in the prediction model. The development of the network was carried out in the Matlab software with three input variables, the different number of neurons in the hidden layer, an output variable and the Levenberg Marquardt, Bayesian Regularization and Scaled Conjugate Gradient training algorithms. The time, temperature and weight of the sample from the thermogravimetric analysis have been selected as input variables, while the activation energy calculated by the kinetic method of Flynn Wall Ozawa as output variables. A Pearson correlation coefficient of 1 and a mean square error of 2.327E-09 show the good performance of the network during its training with 375 neurons in the hidden layer and the Bayesian regularization algorithm. A P-value greater than 0.05 allows the prediction model to be validated with 95% confidence, statistically confirming that there is no significant difference between the real and predicted activation energy by the artificial neural network. The results indicate that the artificial neural network proves to be efficient in predicting the activation energy of potato peel residues analysed by thermogravimetry using heating rates of 5 and 15 °C / min in an inert atmosphere with nitrogen injection at 20 mL/min. It is recommended to use the prediction model in those projects aimed at pyrolysis or gasification of biomass made up of potato peel residues.

Keywords: <CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <POTATO PEEL>, <THERMOGRAVIMETRIC ANALYSIS>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <ACTIVATION ENERGY>, <KINETIC MODELS>, <FLYN-KINETIC MODELS>, <FLYN OZAWA>

CAPÍTULO I

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Para los países en desarrollo, la consecuencia de la escasez de energía puede resultar en la desaceleración de la industrialización y el crecimiento económico. Para satisfacer las crecientes demandas de energía, se pueden considerar recursos renovables más baratos y no convencionales como la biomasa para complementar el suministro de energía (Naqvi et al., 2019, p.131). En este sentido, las RNA se han aplicado en los últimos años para modelar la descomposición de la biomasa considerando la complejidad de los datos térmicos. En la literatura, es posible encontrar variedad de estudios en los que las RNA se han aplicado como una herramienta alternativa de modelado, dependiendo del tipo de proceso de conversión térmica (Ozge et al. 2018, p.535).

Se han utilizado redes neuronales artificiales para la predicción de parámetros cinéticos de biomasa. Por ejemplo, en el proceso de pirólisis y gasificación de biomasa destacan investigaciones como la de Puig-Arnavat et al. (2013) donde aplicaron redes neuronales artificiales para modelar el proceso de gasificación de biomasa en reactores de lecho fluidizado. Karaci et al. (2016) estudiaron la predicción del gas hidrógeno a partir de pirólisis de materiales de desecho considerados contaminantes ambientales mediante RNA. Sunphorka et al. (2017) predice mediante RNA parámetros cinéticos como el factor pre exponencial, la energía de activación y el orden de reacción en la pirólisis de diferentes biomasa a partir de sus componentes y análisis TGA. De manera similar, Naqvi et al. (2018) utilizando TGA y redes neuronales artificiales realizaron un estudio cinético basado en el modelado predictivo de pirólisis de lodos de aguas residuales con alto contenido de cenizas.

Aunque la utilización del modelo RNA sigue siendo escasa para predecir la energía de activación de biomasa a partir de residuos orgánicos. Un análisis de predicción de la energía de activación utilizando residuos de biomasa fue realizado por Ozge et al. (2018). El presente trabajo de titulación también intenta explorar el potencial de uso de RNA en este campo.

1.2 Planteamiento del problema

Debido al desgaste de combustibles fósiles tanto a nivel mundial como en Ecuador y otras causas más como cambios repentinos de su precio en el mercado y su impacto negativo en el medio ambiente, obligan a países a tomar medidas tanto en el campo investigativo como tecnológico en la utilización de fuentes provenientes del sector agropecuario y residuos del mismo como potentes generadores de energía, en este contexto Ecuador no ha generado investigación ni avances tecnológicos en el aprovechamiento y valoración energética de los residuos tanto agrícolas como desperdicios generados por los productos provenientes de este.

En Ecuador existen alrededor de 50 mil hectáreas de sembríos de la papa, de las cuales, 300 mil toneladas forman parte del sustento y alimentación familiar. Se estima que, en el país, cada persona consume 30 Kg de papa por año, y en promedio, los residuos generados por persona corresponden a 0,6 Kg; considerando así la cáscara como residuo principal del consumo de papa. La falta de manejo y desarrollo investigativo han hecho de este residuo una materia prima poco valorada lo que ha traído como consecuencias la generación de gases tipo metano debido a su descomposición, afectando al ecosistema (MAGAP, 2020).

El TGA o análisis termogravimétrico se ha convertido en un procedimiento de mucho interés al momento de analizar el comportamiento térmico de diferentes materiales en este caso de los residuos de cáscara de la papa, proporcionando información importante para el análisis cinético como es la pérdida de masa de la biomasa en cuestión con respecto a diferentes intervalos de tiempo y temperatura. Hoy en día, se están llevando a cabo varios métodos computacionales para la predicción de datos térmicos, reduciendo el número de procedimientos y análisis de laboratorio (Ozge et al., 2018, p.535). La red neuronal artificial (RNA) tiene una capacidad integral para establecer una relación entre los datos de entrada y salida debido a su capacidad de aproximación para conjuntos de datos arbitrarios no lineales. Por ello, las redes neuronales artificiales se ajustan para modelar la descomposición de la biomasa y predecir la energía de activación de los residuos de cáscara de papa considerando la complejidad de los datos térmicos obtenidos por TGA. En literatura, es posible encontrar variedad de estudios en los que la RNA se aplica como una herramienta alternativa de modelado, dependiendo del tipo de proceso térmico como pirólisis, gasificación y combustión (Kumar y Selvarajo, 2015, p.1282).

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Elaborar un modelo de predicción del comportamiento termogravimétrico de la energía de activación de los residuos de cáscara de papa (*Solanum tuberosum*) mediante el uso de redes neuronales artificiales.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Elaborar una base de datos en función de los resultados obtenidos por el análisis termogravimétrico a diferentes tasas de calentamiento para el cálculo de la energía de activación.
- Diseñar la estructura de la red neuronal artificial que permita obtener resultados con la mayor precisión respecto a la energía de activación a diferentes tasas de calentamiento.
- Validar los resultados predichos de energía de activación por la red neuronal con los calculados por métodos matemáticos consecutivos mediante análisis estadístico
- Desarrollar una interfaz gráfica de usuario para interactuar fácilmente con el modelo de predicción.

1.4 Justificación del proyecto

En vista de la problemática por la búsqueda de alternativas viables que suplanten a los combustibles de origen fósil y que no impacten negativamente al ecosistema en el que nos desarrollamos, el aprovechamiento de la biomasa proveniente del sector agrícola ha ido tomando lugar a nivel internacional, pero este no es el caso de Ecuador por ello desarrollar temas investigativos y de carácter tecnológico es muy necesario para el fortalecimiento de este dentro del país. Siendo así la provincia de Chimborazo el escenario más propicio para llevar a cabo el trabajo investigativo-tecnológico con miras a la generación de energía limpia debido a la gran producción del tubérculo papa cuya producción en Chimborazo bordea las 113.588 toneladas métricas por hectárea (ha). La provincia tiene una superficie cosechada de 7.241 ha y un rendimiento del cultivo promedio de 15,3 toneladas métricas por hectárea. Esto la convierte en una de las principales productoras del tubérculo en el país, junto a Tungurahua, Carchi y Sucumbíos. En Chimborazo se cultiva la papa en los nueve cantones, especialmente en Riobamba, Colta y Guamote (MAGAP, 2020).

La determinación de datos como son el tiempo de degradación y pérdida de masa a diferentes intervalos de temperatura resulta de gran importancia ya que estos permiten calcular variables importantes dentro del proceso de degradación térmica como es la energía de activación, constate de reacción y orden de la misma, fundamentada en el uso de métodos o ecuaciones isoconversionales, por ello para evitar cálculos consecutivos y tiempos largos de procedimiento en laboratorio, se hará uso de inteligencia artificial que permita la predicción de la energía de activación a diferentes tasas de calentamiento.

1.5 Alcance

El presente proyecto pretende beneficiar principalmente a los comerciantes de papa en el Cantón Guano, puesto que, la presente propuesta al implementar redes neuronales artificiales brinda las herramientas necesarias para predecir una correcta valoración de los residuos de cáscara de papa y el aprovechamiento energético de los mismos como biomasa. Permitiendo disminuir la cantidad de residuos relacionados con la papa; que representan un desperdicio constante en el Cantón.

El proyecto también puede beneficiar a los agricultores y productores del cantón a través de sus desperdicios de cáscara de papa. Además, la metodología de esta investigación podrá ser aplicada no solo en diferentes residuos agrícola, también con diferentes residuos orgánicos domésticos.

Adicionalmente, se puede ver beneficiado el estudiante cuyo interés investigativo este enfocado en el aprovechamiento de recursos agrícolas como fuentes potenciales de generación de energía, dado que el modelo de predicción de la energía de activación puede servir como referencia para el estudio con diferentes biomásas.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Estado del arte

Las redes neuronales artificiales pueden ser herramientas muy útiles para la predicción de los datos térmicos. Aunque es posible encontrar estudios sobre la aplicación de RNA en la predicción de datos térmicos, estos se han centrado principalmente en materiales que tienen rutas de descomposición más predecibles, como los polímeros y compuestos. Por ejemplo, Conesa et al. (2004) utilizó RNA para determinar la cinética de reacción de diferentes materiales poliméricos mediante datos basados en el análisis TGA a varias velocidades de calentamiento. Bezerra et al. (2008) utilizaron RNA para la determinación de los parámetros cinéticos de compuestos de carbono reforzado con fibra de carbono (CRFC).

Chen et al. (2011) desarrolló una red neuronal de retro propagación con impulso agregado que proporcionó una predicción eficiente sobre las energías de activación en biomasa celulósica, lo que evitó muchos procesos de modelado convencionales y brindó orientación para la tecnología de conversión térmica de biomasa.

En otro estudio, Burgaz et al. (2014) empleó el método RNA para la predicción de la estabilidad térmica, cristalinidad y propiedades termoquímicas de nanocompuestos de óxido de poli (óxido de etileno) / arcilla examinando el efecto de la composición y la temperatura de la arcilla sobre la estabilidad térmica, la cristalinidad y las propiedades termomecánicas del poli (óxido de etileno) con base en experimentos de análisis mecánico dinámico (DMA), calorimetría de barrido diferencial (DSC) y análisis termogravimétrico (TGA).

Yildiz et al. (2016) utilizó los datos térmicos obtenidos por análisis termogravimétrico (TGA) desde la temperatura ambiente hasta 1000 °C a diferentes velocidades de calentamiento en el aire para estudiar la co-combustión de las mezclas de cáscara de avellana / lignito. La velocidad de calentamiento, la relación de mezcla y la temperatura se utilizaron en el análisis RNA para predecir las curvas TG de las mezclas como parámetros que afectan el comportamiento térmico

durante la combustión. La concordancia entre los datos experimentales y los valores predichos confirmó la precisión de la predicción por la RNA.

Ozge et al. (2016) desarrollaron un modelo RNA para predecir los comportamientos térmicos del combustible derivado de residuos (CDR) evaluando los efectos de los parámetros de la red, como el número de capas ocultas, el número de neuronas en las capas ocultas y el tipo de función de transferencia. El CDR se produce a partir de residuos sólidos urbanos (RSU) a través de varios procesos. La fracción mayoritaria de CDR es papel, cartón, madera, plásticos y textiles.

Ozge et al. (2018) analizan el rendimiento de predicción de datos térmicos de RNA para algunos residuos forestales lignocelulósicos y residuos de aceite de oliva como materias primas de biomasa. Adicionalmente, se aplicaron los datos predichos para calcular las energías de activación en base a tres modelos cinéticos convencionales (Friedman, Flynn-Wall-Ozawa y Kissinger-Akahira-Sunose); los resultados se compararon con los calculados utilizando datos térmicos experimentales; concluyendo que los datos térmicos experimentales se ajustaban bastante bien a los datos predichos por la RNA ($R^2 > 0,99$). Demostrando que, los datos predichos pueden ser aplicables para investigaciones posteriores, como en el cálculo de las energías de activación utilizando diferentes modelos.

Como se puede evidenciar, se ha encontrado información referente a predicción de datos térmicos en residuos agroindustriales, mediante investigación, revisión de artículos científicos mismos que se encuentran publicados en páginas web, tesis libros y demás material bibliográfico. Una vez realizada las investigaciones respectivas se concluye que “Predicción del comportamiento termogravimétrico de la energía de activación de los residuos cáscara de papa (*Solanum tuberosum*) mediante el uso redes neuronales artificiales”, es un tema que aún no se ha desarrollado en el país, para el aprovechamiento de los residuos que genera la agroindustria con miras a la generación de combustibles u otro derivado de este.

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Biomasa

Aunque en general se acepta que la biomasa se forma a partir de especies vivas, como plantas y animales, que están vivas o que vivieron hace poco tiempo, su definición legal no es tan sencilla. Es necesaria una definición legal en algunos países donde se establecen disposiciones financieras especiales para productos o energía a base de biomasa (Basu, 2018, p.497).

Una definición general y científica de biomasa la estableció la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (CMNUCC) para calcular el crédito de carbono negociable bajo el mecanismo de desarrollo limpio (MDL). Define como biomasa al material orgánico no fosilizado y biodegradable procedente de plantas, animales y microorganismos. Esto también incluirá productos, subproductos, residuos y desechos de la agricultura, silvicultura e industrias relacionadas, así como las fracciones orgánicas no fosilizadas y biodegradables de desechos industriales y municipales. La biomasa también incluye gases y líquidos recuperados de la descomposición de material orgánico no fosilizado y biodegradable (Basu, 2018, p.498).

2.2.2 Análisis termogravimétrico (TGA)

El análisis termogravimétrico (TGA) mide los cambios de peso en un material en función de la temperatura (o el tiempo) en una atmósfera controlada mediante un equipo especializado denominado termobalanza (Finkelstein et al, 2015, p.3).

El análisis termogravimétrico es una técnica rápida y precisa para determinar la pérdida de masa de una muestra a lo largo del tiempo y evaluar su descomposición térmica de sólidos y su cinética. Es así que el método ha sido criticado por ser limitado para la determinación cinética, ya que solo permite que el análisis se realice a velocidades de calentamiento relativamente lentas. Estos resultados a menudo se extrapolan a velocidades de calentamiento de pirólisis rápidas que son considerablemente más altas, lo que conduce a resultados inexactos y altamente engañosos (Cortés y Bridgwater, 2015, p.185).

2.2.2.1 Principio de funcionamiento del análisis

Un análisis de TGA se realiza elevando gradualmente la temperatura de una muestra en horno a medida que se mide su peso en una balanza analítica que permanece fuera del horno. En el análisis TGA, se observa pérdida de masa si un evento térmico implica la pérdida de un componente volátil. Las reacciones químicas, como la combustión, implican pérdidas de masa, mientras que los cambios físicos, como la fusión, no. El peso de la muestra se representa frente a la temperatura o el tiempo para ilustrar las transiciones térmicas en el material (ver Figura 1-2), como la pérdida de disolvente y plastificantes en polímeros, agua de hidratación en materiales inorgánicos y, finalmente, descomposición del material. A la representación gráfica de la variación de la masa en función de la temperatura, o el tiempo, se le denomina termograma (PhotoMetrics, 2010).

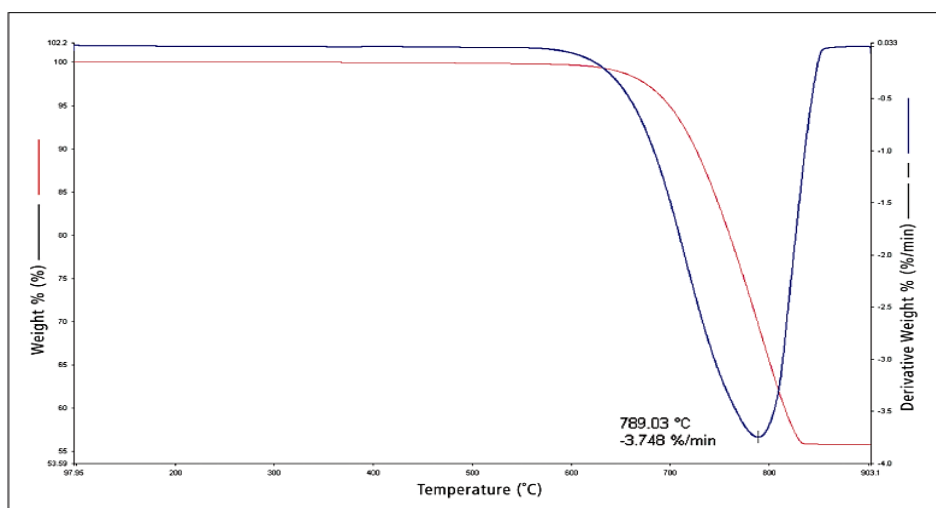


Figura 1-2. Termograma

Fuente: Finkelstein et al, 2015, p.15

2.2.3 Modelos cinéticos

La cinética es el análisis teórico que permite obtener mecanismos de reacción y parámetros de ajuste para cada uno de ellos como, por ejemplo, energía de activación y factor de frecuencia mismos que se fundamentan en el análisis termogravimétrico. Los parámetros cinéticos generalmente se calculan a partir de dos análisis termogravimétricos diferentes, es decir con distintas tasas de calentamiento que permitan obtener los suficientes datos para el estudio e interpretación de los mismos (Cortés y Bridgwater, 2015, p.187).

Se han desarrollados múltiples modelos cinéticos, como el modelo de reacción global de un solo paso, de múltiples pasos, semi-global y el modelo de energía de activación distribuida (DAEM) el que se considera un enfoque más preciso y versátil para modelar el proceso (Chen et al., 2017, p.540).

Tabla 1-2. Modelos cinéticos

Nombre del método	Ecuación
Arrhenius	$k = k_0 \frac{-E_a}{RT}$
ASTM-E698	$\beta \frac{da}{dt} = k_0 e^{\left(\frac{-E_a}{RT}\right)} (1 - a)$
Flynn-Wall-Ozawa (FWO)	$\ln \beta = \ln \left(\frac{k_0 E_a}{R g(a)} \right) - 5.331 - 1.052 \frac{E_a}{RT}$
Kissinger-Akahira-Sunose(KAS)	$\frac{\ln \beta}{T^2} = \ln \left(\frac{k_0 R}{E_a g(a)} \left(1 - \frac{2RT}{E_a} \right) \right) - \frac{E_a}{RT}$
Friedman	$\ln \beta \frac{da}{dT} = \ln [k_0 f(a)] - \frac{E_a}{RT}$

Fuente: (Osman et al., 2020, p.17579)

El modelado matemático para predecir las cualidades del gas del producto durante la gasificación y pirólisis requiere el conocimiento de la cinética de reacción de la volatilización de la biomasa y las reacciones posteriores. El análisis termogravimétrico (TGA) es muy útil para determinar la cinética de reacción de gasificación y pirólisis. Se ha utilizado ampliamente para la caracterización de diversas materias primas (Kumar y Selvarajo, 2015, p.1683).

2.2.4 *Energía de activación en biomasa*

La energía de activación que es la mínima energía requerida por los reactivos para transformarse en productos. Es decir que, al analizar el potencial energético de una biomasa para ser utilizada como fuente de energía en un proceso de conversión térmica; inicialmente, la energía de activación nos indicará cuál es la energía mínima necesaria para llevar a cabo un efecto de cambio en la composición de la muestra. Obtener estos valores es posible gracias a un análisis TGA, mismo que nos ayuda a conocer de manera exacta cual es la variación de la masa en relación a la temperatura en una muestra. Una vez obtenidos estos datos se pueden utilizar modelos cinéticos para calcular la energía de activación (Gómez et al., 2019, p.2).

2.2.5 *Redes neuronales artificiales*

El interés de los académicos en la idea de que el aprendizaje artificial y automático puede reemplazar a actividades del ser humano, para asumir roles en el lugar de trabajo y remodelar el proceso organizacional existente ha ido creciendo constantemente (Haefner et al. 2020, p.5).

Las redes neuronales artificiales son una herramienta de inteligencia artificial que pertenecen al campo del aprendizaje automático, las RNA se imitan los sistemas neuronales biológicos, ya que el sistema nervioso humano está compuesto por una serie de neuronas o nodos que están conectados entre sí. Cada neurona recibe información de una o varias señales de entrada externa, luego la procesa a través de una función de transferencia después de la cual se genera la señal de salida transformada. La señal de salida contiene la información aprendida por la red. La principal ventaja de RNA es la capacidad de modelar procesos a partir de datos sin ningún requisito de una descripción matemática de los mecanismos físicos o químicos involucrados. Además, las RNA tienen una alta capacidad de aprendizaje, ya que pueden adaptarse a los sistemas y actualizarse (Sunphorka et al., 2017, p.2).

2.2.5.1 *Arquitectura de una red neuronal artificial*

Las RNA se diseñan a partir de una serie de capas (entrada, oculta y salida) y cada capa comprende muchas "neuronas". Cada neurona acepta un valor de entrada de la capa anterior y lo asigna a una función no lineal. La salida de esta función se utiliza como entrada para la siguiente capa en la RNA, hasta llegar a la última capa, donde la salida corresponde al objetivo que se va a predecir.

Además, un parámetro ajustable, el "peso" (o coeficiente) de cada función de la neurona se ajusta en el diseño de este modelo para minimizar el error del valor predicho, un proceso conocido como "entrenamiento" de la red neuronal.

1. *Capa de entrada (Input layer)*: la capa de entrada esta capa alberga las neuronas que reciben información del exterior y son consideradas como las variables iniciales.
2. *Capas ocultas (Hidden layer)*: las capas ocultas se encargan de relacionar las neuronas de las capas de entrada con las neuronas de la capa de salida.
3. *Capa de salida (Output Layer)*: la capa de salida contiene neuronas cuya salida representa la predicción (López et al., 2007; citado en Rosario, 2020, p.29).

En la Figura 2-2a se observa una representación esquemática de una red neuronal artificial feedforward tradicional (RNA) con una capa oculta. Cada neurona denotada como círculos acepta una serie de n valores de entrada y la asigna a una salida usando una función no lineal, con un término de sesgo (es decir, salida de la red neuronal cuando tiene entrada cero) aplicado a todas las neuronas en la capa oculta. Mientras que la Figura 2-2b muestra una red neuronal profunda (RNP), difiere de la RNA por tener múltiples ($n > 3$) capas ocultas como se muestra en el diagrama esquemático, el término de sesgo se omite aquí por simplicidad (Goh et al., 2017, p.1290).

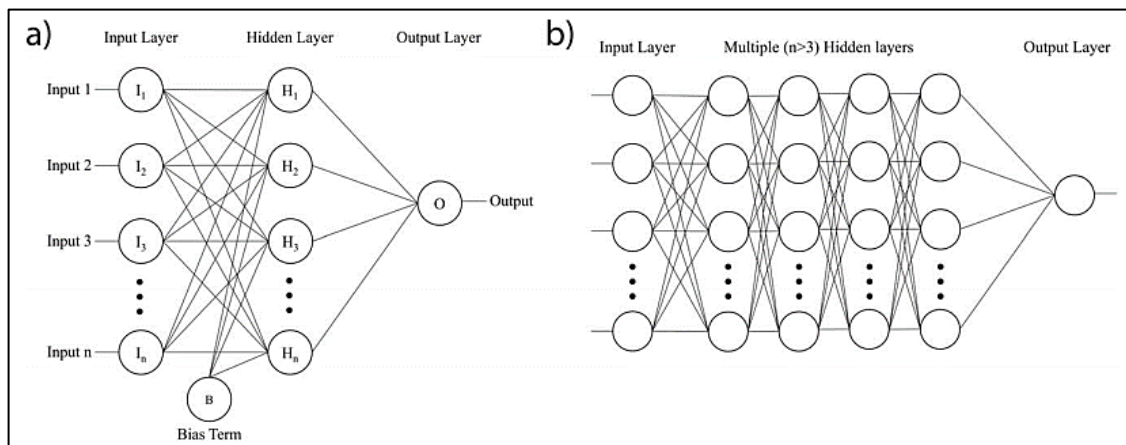


Figura 2-2. Estructura de una RNA: (a) tradicional, (b) profunda.

Fuente: Goh et al., 2017, p.1292.

2.2.5.2 Entrenamiento de una red neuronal artificial

Existen algunos tipos de aprendizaje para una red neuronal, entre todos destacan dos métodos de aprendizaje clave en las tareas de procesamiento de datos de una RNA, son el aprendizaje supervisado y el no supervisado (Lecun et al., 2015, p.430).

- *Aprendizaje supervisado*

El aprendizaje supervisado consiste en aprender a través de un conjunto de entradas y salidas preestablecidas, que actúan como objetivos. Para el entrenamiento, habrá un conjunto de valores

de entrada (vectores) y uno o más valores de salida asociados. El objetivo de esta forma de entrenamiento es reducir el error de predicción general de los modelos, mediante el cálculo correcto del valor de salida (Lecun et al., 2015, p.430).

- *Aprendizaje no supervisado*

El aprendizaje no supervisado no requiere ningún conocimiento de los respectivos resultados o salidas deseadas. El éxito de la red dependerá de su capacidad para organizarse cuando existen particularidades entre los elementos que componen el conjunto muestral completo, identificando subconjuntos que presenten similitudes. Sin embargo, es importante tener en cuenta que la mayoría de las tareas de reconocimiento de patrones centradas en bases de datos generalmente dependen del entrenamiento mediante el aprendizaje supervisado (Lecun et al, 2015, p.430).

- *Algoritmos de entrenamiento*

Usualmente el proceso de entrenamiento es iterativo, actualizándose los pesos una y otra vez hasta lograr la mejor predicción. Los algoritmos que emplea Matlab durante el entrenamiento de redes neuronales son los siguientes:

1. Levenberg-Marquardt
2. Bayesian Regularization
3. Scaled Conjugate Gradient (Jaiswal et al., 2018, p.5).

2.2.5.3 *Diseño de redes neuronales artificiales en Matlab*

El desarrollo de una red neuronal artificial en Matlab se puede realizar empleando tres de sus funciones o herramientas (Quintana, 2015, citado en Rosario, 2020, p.34).

- 1) Desarrollando una red desde el espacio de trabajo, en la línea de comandos o script.
- 2) Utilizando la aplicación Neural Net Fitting del toolbox.
- 3) Usando la interfaz gráfica de usuario para redes neuronales artificiales mediante el comando “*nntool*” (*Neural Network Toolbox*)” (MathWorks, 2020).

CAPÍTULO III

3 METODOLOGÍA

El trabajo de integración curricular se fundamenta en la predicción, se busca principalmente calcular mediante una red neuronal artificial la energía de activación de los residuos de cáscara de papa a partir de su análisis termogravimétrico. En la Figura 1-3 se describe mediante fases, la metodología empleada para desarrollar el trabajo.

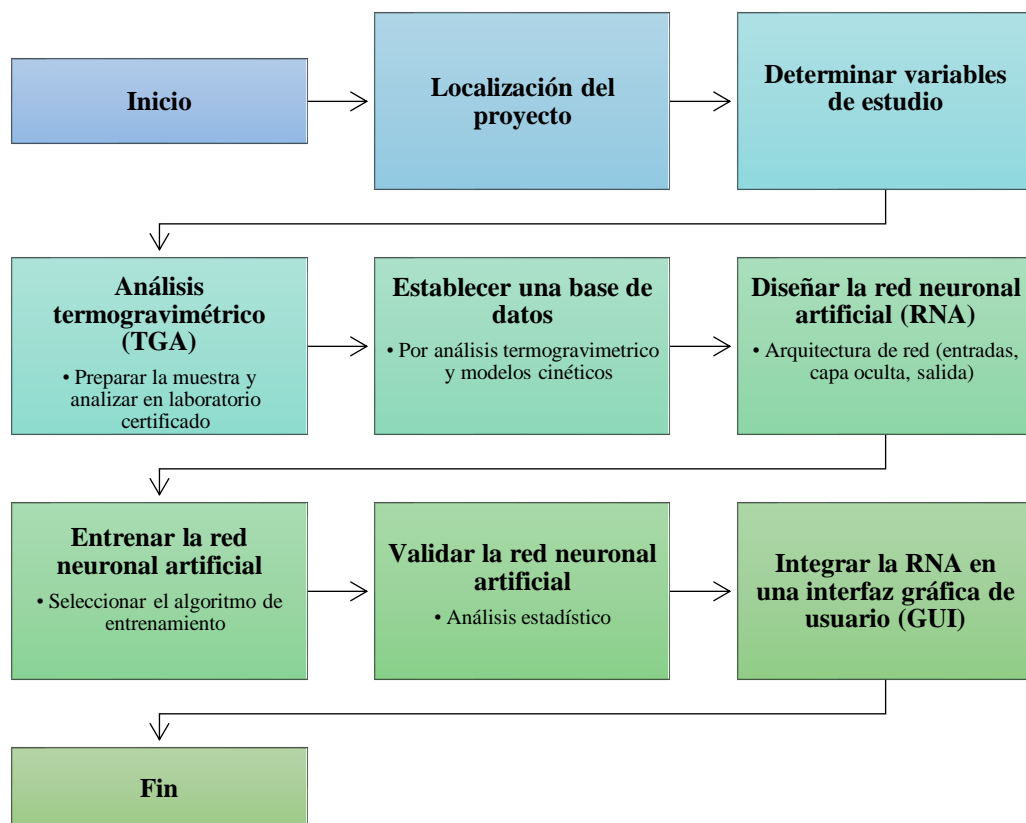


Figura 1-3. Metodología del trabajo

Realizado por: Jara, Michel, 2021

El trabajo también tiene un enfoque cuantitativo, debido que, una vez realizado el análisis termogravimétrico a diferentes tasas de calentamiento $5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ y $15\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$, se obtienen datos de pérdida de masa con respecto a intervalos de tiempo y temperatura; datos que se utilizan para calcular la energía de activación mediante diferentes modelos cinéticos. Se obtiene un total de 100 datos para entrenar a la red neuronal artificial y predecir los datos de la energía de activación en la cáscara de papa.

Finalmente, realizando un análisis estadístico comparativo se interpretarán y validarán los resultados cuantitativos predichos por la red neuronal artificial con los datos calculados de forma convencional por modelos cinéticos, evaluando de esta manera el rendimiento de la red.

3.1 Localización del proyecto

El Trabajo de integración curricular pretende ser implementado en el cantón Guano de la provincia de Chimborazo cuyas características geográficas se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 2-3. Características geográficas del cantón Guano

UBICACIÓN	Cantón Guano. Limita al norte con Tungurahua, al Sur y al Oeste limita con el Cantón Riobamba y una pequeña parte de la Provincia de Bolívar, y el Este con el río Chambo.
LATITUD	1°36'28" S
LONGITUD	78°37'51" O
ALTITUD	2666 m.s.n.m
CLIMA	Varía de 7 °C a 19 °C generalmente
	Punto mínimo menos de 5 °C, punto máximo a más de 21 °C.

Fuente: Weather Spark, 2020



Figura 2-3. Ubicación geográfica del cantón Guano

Fuente: Obtenido en Google Maps, 2021

3.2 Determinación de las variables de estudio

La energía de activación (E_a) es una propiedad que permite valorar el potencial energético de los residuos de cáscara de papa como posible fuente de energía en procesos de conversión térmica de biomasa para la obtención de combustibles.

En Osman et al. (2020) se menciona la posibilidad de emplear ecuaciones de diferentes modelos cinéticos (ver Tabla 2-3) para calcular la energía de activación en función de análisis termogravimétrico (tiempo, temperatura y peso). Es importante mencionar que las variables

obtenidas por análisis termogravimétrico están sujetas a cálculos antes de reemplazar en los modelos cinéticos para calcular la energía de activación, como se detallará en un apartado posterior.

Tabla 3-3. Modelos cinéticos

Nombre del método	Ecuación
Arrhenius	$k = k_0 \frac{-E_a}{RT}$
ASTM-E698	$\beta \frac{da}{dt} = k_0 e^{\left(\frac{-E_a}{RT}\right)} (1 - a)$
Flynn-Wall-Ozawa (FWO)	$\ln \beta = \ln \left(\frac{k_0 E_a}{R g(a)} \right) - 5.331 - 1.052 \frac{E_a}{RT}$
Kissinger-Akahira-Sunose(KAS)	$\frac{\ln \beta}{T^2} = \ln \left(\frac{k_0 R}{E_a g(a)} \left(1 - \frac{2RT}{E_a} \right) \right) - \frac{E_a}{RT}$
Friedman	$\ln \beta \frac{da}{dT} = \ln [k_0 f(a)] - \frac{E_a}{RT}$

Fuente: (Osman et al., 2020, p.17579)

3.2.1 Operacionalización de variables

3.2.1.1 Selección de variables

- Variables independientes
 - Tiempo
 - Temperatura
 - Peso
- Variables dependientes
 - Energía de activación

3.2.1.2 Operación de variables

Tabla 4-3. Operación de variables

Tipos de variables	Variables		Unidades
Independientes	Tiempo	t	s
	Temperatura	T	K
	Peso	P	mg
Dependiente	Energía de activación	Ea	KJ/mol

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

3.3 Análisis termogravimétrico (TGA)

Antes de enviar la muestra a ser analizada en un laboratorio certificado es necesario prepararla, de la siguiente manera:

a) Obtención y recolección de la cáscara de papa:

Las cáscaras de papa se recolectan en los sitios de expendio de este residuo y en los restaurantes del Cantón Guano.

b) Limpieza de la cáscara de papa

Se lavó y separó mediante métodos mecánicos para que no exista pérdida de materia prima, conservando su estructura.

c) Cortado de la cáscara de papa

Se realiza el cortado de la cáscara de papa con el fin de disminuir su longitud y aumentar la superficie de contacto en la termobalanza.

d) Envío de la muestra

Se envió una muestra con 85,127g de cáscara de papa seca a temperatura ambiente para ser analizada en la termobalanza y obtener datos de degradación de la muestra en función de la temperatura y el tiempo.

3.4 Establecimiento de la base de datos

Se estableció una base de datos en Microsoft Excel a partir de la información proporcionada por dos análisis termogravimétricos, luego, la energía de activación se calculó mediante modelos cinéticos no estacionarios (isoconversionales) (Ver Tabla 3-3); puesto que estos varían en función de la tasa de calentamiento, detallado esto se procedió con el cálculo de los parámetros cinéticos en base a los modelos propuestos donde el modelo de Flynn-Wall-Ozawa (FWO) presentó menor desviación en sus datos 12,98 y 12,62 en sus diferentes tasas de calentamiento 5°C/min y 15°C/min respectivamente, hay que tomar en cuenta que la energía de activación resulta de la pendiente de la recta formada por el $\ln\beta$ vs $1/T$ donde la tasa de calentamiento (β) representa la derivada de la temperatura con respecto al tiempo, llevado a cabo esto se procede a analizar a la recta por puntos para obtener la energía de activación en cada uno de ellos, este análisis permitió conseguir la base de datos de energía de activación como salidas de la red propuesta.

3.5 Diseño de la red neuronal artificial

3.5.1 Entradas y salidas en la red neuronal artificial

Antes de diseñar la red primero se seleccionan los variables en la capa de entrada y salida de la red, en este estudio se establecen 3 variables en la capa de entrada y 1 variable en la capa de salida, correspondientes a tiempo, temperatura, peso del TGA y energía de activación como se indica en la siguiente tabla.

Tabla 5-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial

Capa	Variables		Unidades
Entradas	Tiempo	t	s
	Temperatura	T	K
	Peso	P	mg
Salidas	Energía de activación	Ea	KJ/mol

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

3.5.2 Normalización de datos

Para diseñar la red neuronal artificial se importa la base de datos desde Microsoft Excel hacia el espacio de trabajo de Matlab. Antes de desarrollar la red neuronal se normalizan los datos importados para las entradas y salida con la finalidad de evitar la redundancia en los datos; lo que conllevará una mejora en el proceso de entrenamiento y predicción de la red, mediante siguiente ecuación:

$$V_N = \frac{V - V_{\min}}{V_{\max} - V_{\min}} \quad \text{Ec. 1-3}$$

Donde:

V_N = valor normalizado

V = valor a normalizar

V_{\min} = valor mínimo

V_{\max} = valor máximo

3.5.3 Desarrollo de la red neuronal artificial

Con los datos normalizados, se utiliza la aplicación Neural Net Fitting (*nftool*) de la caja de herramientas de Matlab. Seleccionada la opción, se iniciará el asistente de diseño de la red neuronal artificial como se muestra en la Figura 3-3.

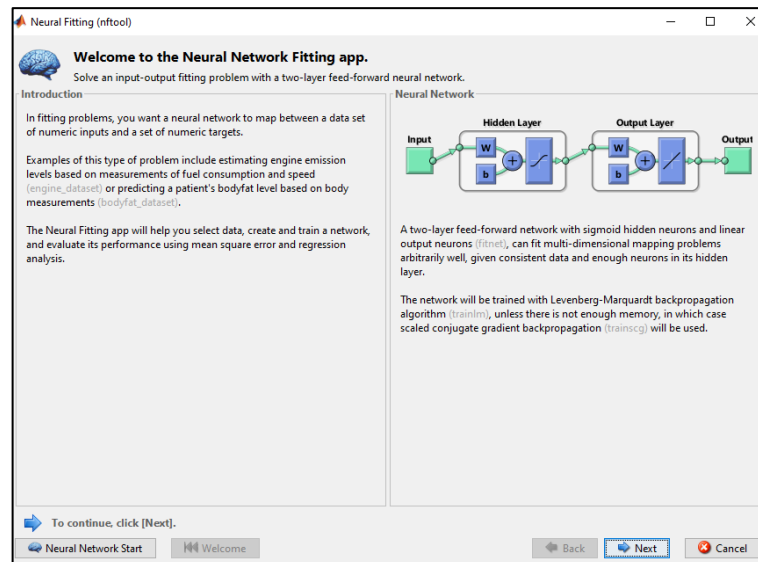


Figura 3-3. Ventana Neural Net Fitting, la aplicación para redes neuronales en Matlab

Realizado por: Jara, Michel, 2021

En la ventana del asistente de diseño de red se seleccionan las entradas y salidas normalizadas como se observa en la Figura 4-3.

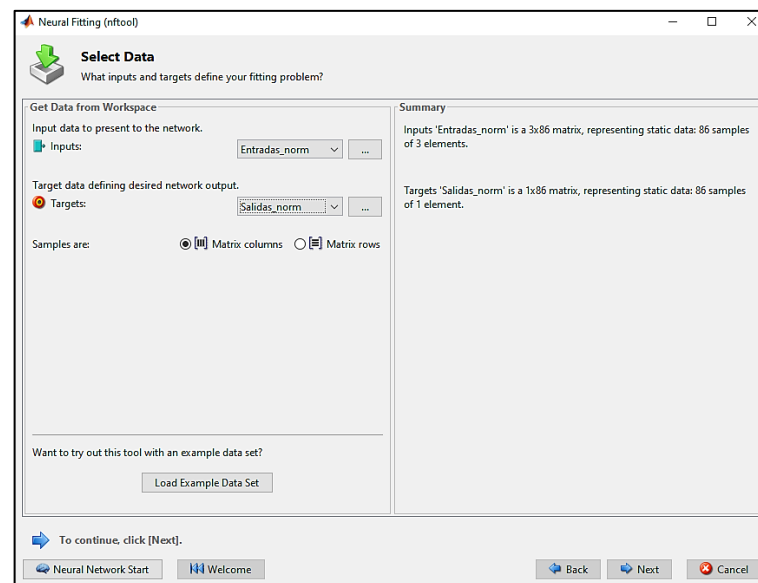


Figura 4-3. Selección de entradas y salidas normalizadas

Realizado por: Jara, Michel, 2021

3.6 Entrenamiento de la red neuronal artificial

Durante el entrenamiento de la red neurona artificial resulta necesario determinar el número óptimo de neuronas en la capa oculta y seleccionar el algoritmo de entrenamiento. Las neuronas en la capa oculta se determinan en función del error cuadrático medio (MSE) y la correlación lineal (R) que presenta la red neuronal durante su entrenamiento. Para entrenar la red se establecen

inicialmente 7 neuronas en la capa oculta y en base al MSE y la correlación (R) obtenido con esta cantidad de neuronas, se irá aumentando progresivamente el número de neuronas en la capa oculta. Se selecciona el número óptimo de neuronas en función del menor MSE y el R más cercano a 1.

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n (y'y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2]}} \quad \text{Ec. 2-3}$$

Donde:

R = coeficiente de correlación

y = datos reales por análisis termogravimétrico (TGA)

y' = datos predichos por la RNA

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2 \quad \text{Ec. 3-3}$$

Donde:

n = cantidad de experimentaciones.

y_t = datos reales por análisis termogravimétrico (TGA)

y'_t = datos predichos por la RNA

En la Tabla 6-3, se presentan los diferentes ensayos realizados durante el entrenamiento de la red para la seleccionar el número de neuronas en la capa oculta y el algoritmo de entrenamiento en función de valores correspondientes de la correlación lineal (R) y el error cuadrático medio (MSE) obtenido para varias topologías de red. Para cada uno de los ensayos realizados, los resultados de la correlación y del error se pueden obtener de los gráficos entregados por Matlab en el entrenamiento.

Tabla 6-3. Ensayos realizados ensayos realizados durante el entrenamiento de la red.

Topologías de red	Levenberg-Marquardt		Bayesin Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
Entrada-Nº neuronas-Salida-						
3-7-1	2,903E-02	0,68587	3,496E-06	0,57305	1,48E-04	0,76769
3-15-1	1,190E-05	0,77809	7,669E-03	0,76637	5,24E-03	0,66846
3-23-1	2,158E-04	0,76310	2,157E-04	0,77054	1,17E-04	0,77913
3-44-1	6,541E-10	0,92426	8,030E-03	0,77084	3,49E-04	0,77112
3-55-1	5,635E-02	0,74815	2,780E-03	0,75744	2,29E-02	0,58437
3-67-1	9,966E-05	0,84495	7,957E-03	0,76367	1,57E-03	0,40323
3-77-1	1,084E-03	0,76233	8,131E-03	0,76378	1,89E-03	0,70658
3-91-1	5,971E-04	0,72604	8,190E-03	0,76426	8,19E-04	0,74302
3-103-1	2,008E-04	0,75107	8,199E-03	0,76445	5,16E-03	0,66011
3-115-1	1,742E-02	0,93345	8,223E-03	0,76653	1,06E-02	0,24612

3-128-1	1,544E-02	0,94775	2,647E-03	0,76509	3,74E-03	0,54047
3-140-1	9,034E-04	0,79312	1,241E-09	0,52041	3,08E-02	0,56760
3-152-1	6,502E-04	0,59353	8,222E-03	0,76603	5,66E-03	0,70161
3-165-1	4,984E-02	0,74584	7,871E-03	0,77613	3,21E-02	0,60275
3-177-1	1,190E-04	0,89208	8,139E-03	0,76708	1,59E-03	0,73837
3-189-1	4,212E-04	0,83754	7,852E-03	0,77898	7,44E-03	0,70896
3-202-1	1,349E-04	0,92651	7,404E-03	0,77962	4,54E-03	0,70878
3-214-1	1,013E-01	0,67599	8,202E-03	0,76670	2,32E-02	0,52741
3-227-1	3,810E-04	0,60888	7,631E-03	0,78466	8,24E-04	0,76455
3-300-1	7,407E-02	0,69348	2,550E-03	0,79050	2,76E-03	0,67214
3-365-1	1,646E-03	0,82313	3,065E-08	0,99999	2,24E-03	0,53497
3-370-1	2,650E-04	0,82678	1,156E-09	0,99999	5,00E-03	0,72070
3-375-1	2,220E-03	0,83480	2,327E-09	1,00000	4,76E-03	0,32321

Realizado por: Jara, Michel, 2021

De los ensayos presentados en la Tabla 5-3 se puede identificar que la mejor arquitectura de red (ver Figura 5-3) consta de los siguientes parámetros:

- 3 neuronas de entrada correspondiente a tiempo, temperatura y peso.
- 375 neuronas en la capa oculta (Cantidad de neuronas que presentó un MSE bajo y la mejor correlación R)
- 1 neurona en la capa de salida correspondientes a la energía de activación predicha.

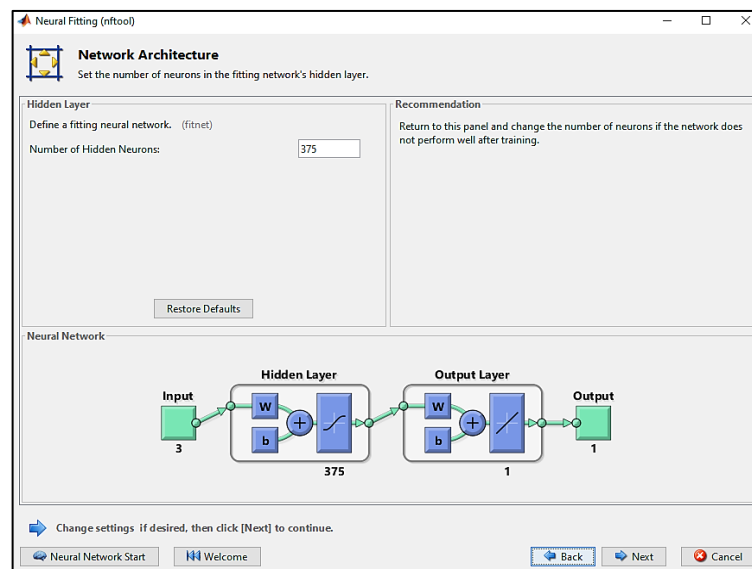


Figura 5-3. Arquitectura de la red neuronal artificial

Realizado por: Jara, Michel, 2021

Para seleccionar el algoritmo de entrenamiento es importante tener en cuenta que durante el entrenamiento la red debe obtener una buena generalización de los datos, lo que resulta en una buena predicción. Durante el entrenamiento las RNA se presenta un problema frecuente relacionado con el sobreajuste de los resultados. Por lo tanto, para entrenar la red neuronal

artificial, se opta por el algoritmo de regularización bayesiana. Este algoritmo ayuda a evitar el problema de sobreajuste logrando resultados de estimación más precisos al actualizar los pesos y los valores de sesgo para minimizar el error de predicción (Baghirli, 2015, citado en Rosario, 2020, p.48).

La Tabla 5-3, permite determinar la arquitectura de red y evidencia que el algoritmo de regularización bayesiana tiene la correlación lineal más cercana a 1 y menor error cuadrático medio que los algoritmos de Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient. En la Figura 7-3 se observa que durante el entrenamiento de la red el algoritmo Bayesian Regularization se identifica con el comando “*trainbr*”.

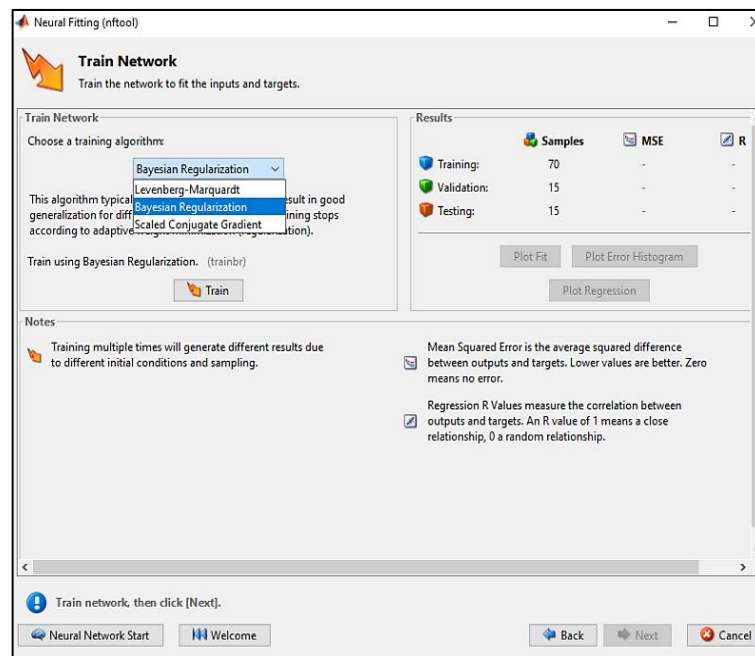


Figura 6-3. Selección del algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Jara, Michel, 2021.



Figura 7-3. Proceso de entrenamiento de la red
Realizado por: Jara, Michel, 2021.

3.7 Validación de la red neuronal artificial por análisis estadístico

En la validación de la red neuronal artificial, se compara los resultados obtenidos por la red con los resultados obtenidos por análisis TGA y modelos cinéticos; empleando un nuevo conjunto de 10 datos. Esta validación permitirá evaluar el rendimiento de la red neuronal artificial mediante un análisis de la varianza (ANOVA). Para este análisis se establecen dos hipótesis:

- Hipótesis nula: las medias de las variables son iguales o aproximadamente iguales.
- Hipótesis alternativa: al menos una de las medias dentro del conjunto de datos a analizar es diferentes.

Tabla 7-3. Ejemplo de tabla ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00776574	1	0,00776574	0,000254299	0,686
Intra grupos	549,681	18	30,5378		
Total (Corr.)	549,689	19			

Realizado por: Jara, Michel, 2021

El valor a analizar en la tabla ANOVA. Si en la tabla ANOVA las medias entre las variables reales y predichas arrojan valores-P mayores que 0,05; se aceptará la hipótesis nula y por ende se concluirá que no existe una diferencia estadística entre las medias de las variables analizadas.

3.8 Desarrollo de la interfaz gráfica de usuario

La interfaz gráfica de usuario se desarrolla digitando el comando *guide* en el espacio de trabajo de Matlab; Se abrirá la ventana del asistente para la creación de una interfaz gráfica de usuario (Figura 8-3), donde se selecciona la opción *Blank GUI (Default)* para empezar a crear el panel con todos los botones y características necesarias para que el usuario pueda manejar con facilidad la red neuronal artificial (Figura 9-3).

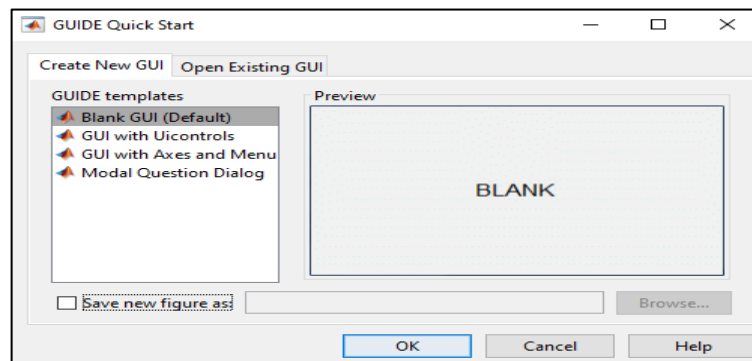


Figura 8-3. Asistente de creación de la interfaz gráfica

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

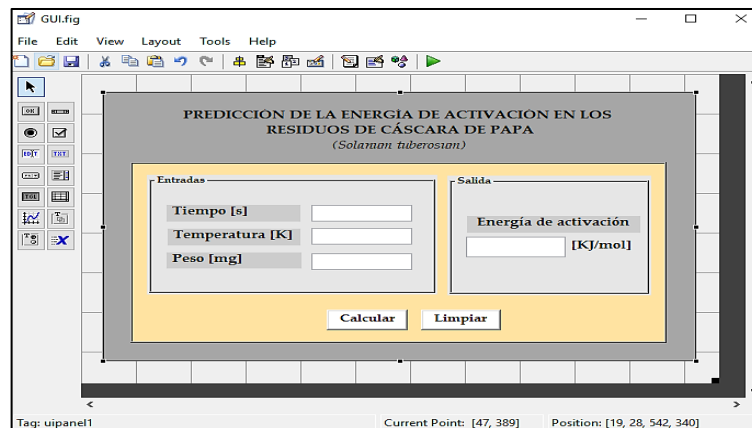


Figura 9-3. Panel para diseñar la interfaz gráfica

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

CAPÍTULO IV

4 GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1 Cronograma

Tabla 1-4. Cronograma de la propuesta tecnológica

ACTIVIDAD	MESES																			
	Noviembre				Diciembre				Enero				Febrero				Marzo			
	SEMANAS																			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Estudio bibliográfico	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Desarrollo del anteproyecto				■	■	■	■	■												
Operación de variables						■	■	■												
Análisis TGA								■	■	■	■	■								
Recopilación de variables de entrada y salida para la RNA									■	■	■	■								
Diseño de la red neuronal en Matlab									■	■	■	■	■	■	■	■				
Estudio técnico y económico									■	■	■	■	■	■	■	■				
Validación de la RNA mediante análisis estadístico									■	■	■	■	■	■	■	■				
Redacción del trabajo final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Análisis de costos				■	■	■	■	■					■	■	■	■				
Revisión del documento final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Auditoria Académica																	■	■		
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

4.2 Presupuesto

Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Análisis termogravimétrico	\$160	x	
Clases asistidas para Matlab	\$100	x	
Impresión del documento final	\$30	x	
Copias e Impresiones	\$50	x	
Empastados	\$50	x	
Contratiempos	\$20	x	
TOTAL	\$410		

Realizado por: Jara, Michel. 2021

4.3 Recursos humanos y materiales

4.3.1 Recursos humanos

Estudiante que realiza la propuesta tecnológica: Michel Jara.

Docentes de apoyo: Ing. Santiago Carrera, Ing. Marlene García.

4.3.2 Recursos materiales

Tabla 3-4. Recursos materiales utilizados en el proyecto

Equipo y software	Descripción	Uso
Termobalanza	Equipo / máquina: Mettler Toledo TGA-1 del área de investigación en la UCE	Análisis termogravimétrico de la biomasa conformada por cáscara de papa
Computadora	Procesador Intel (R) Core (TM) i7-8565U CPU con 8 GB de RAM y sistema operativo de 64 bits con Microsoft Windows 10 Home.	Simulación, diseño de la red neuronal artificial y análisis estadístico
Matlab	Software simulador de redes neuronales artificiales	Diseñar la red neuronal artificial
SPSS y Statgraphics	Software de análisis estadístico	Validar los resultados de la red neuronal artificial

Realizado por: Jara, Michel, 2021

4.4 Resultados

4.4.1 Análisis termogravimétrico

Tabla 4-4. Especificaciones del ensayo

Muestra	Biomasa
Descripción	Cáscara de papa
Tipo de ensayo	Termogravimetría
Equipo / máquina	Mettler Toledo TGA-1
Descripción del método	<ul style="list-style-type: none">• 2 rampas de calentamiento distintas 5 y 15 °C/min• Programa de 25 a 900 °C• Atmósfera inerte (N₂) 20 ml/min• Resultados de TGA y dTGA (200 puntos)

Realizado por: Jara, Michel, 2021

Fuente: Laboratorio de investigación UCE

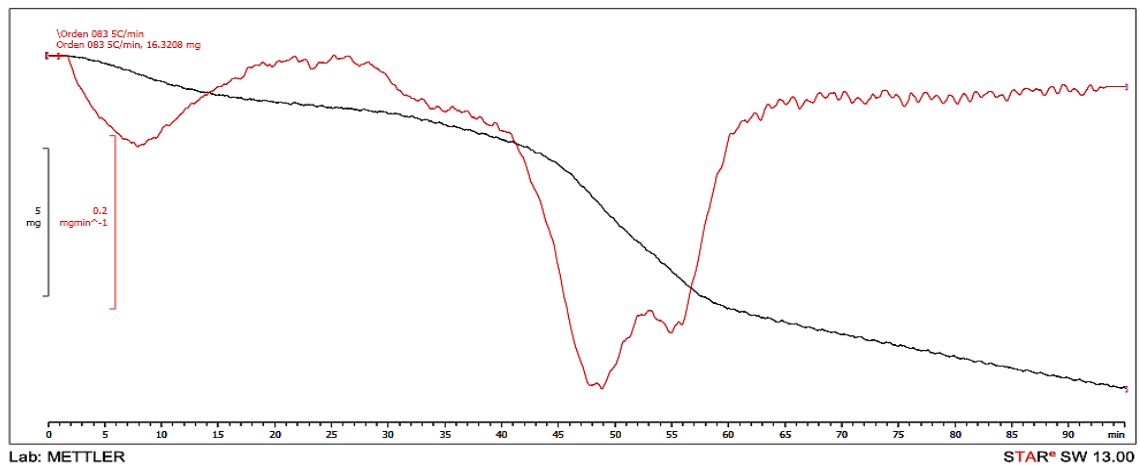


Gráfico 1-4. Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 5°C/min

Fuente: Laboratorio de investigación UCE

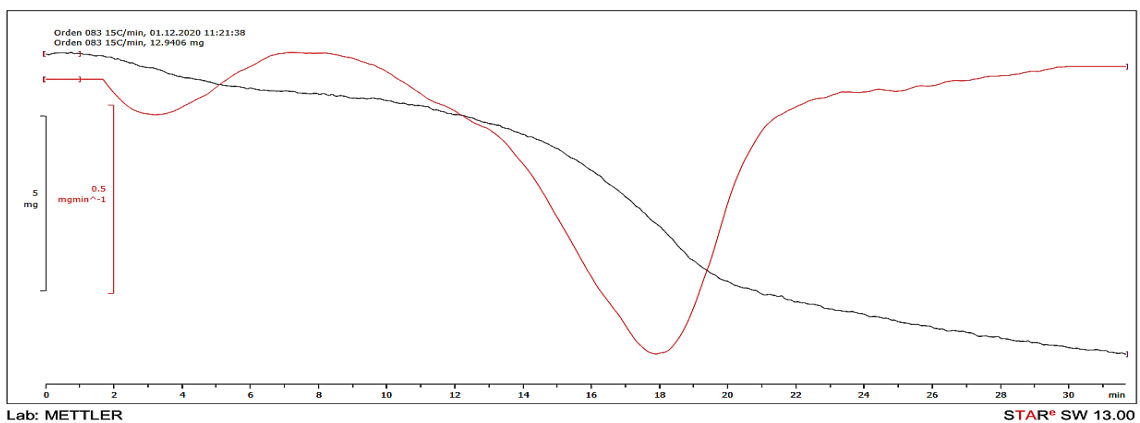


Gráfico 2-4. Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 15°C/min

Fuente: Laboratorio de investigación UCE

4.4.2 Cálculos de la energía de activación

Empleando las ecuaciones presentadas en la Tabla 3-3 se calculó la energía de activación a partir de los datos TGA. Los resultados de la energía de activación por los métodos de Flynn-Wall-Ozawa (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose (KAS) y Friedman se describen en el ANEXO D. Es importante destacar que la energía de activación calculada por el método de Friedman obtuvo una desviación estándar de 49,87; el método de KAS de 14,22 y el método de FWO de 12,63. Por lo tanto, para diseñar la red neuronal artificial se emplearon los datos de la energía de activación calculada por el método de Flynn-Wall-Ozawa (FWO).

4.4.3 Base de datos para desarrollar la red neuronal artificial

La tabla de datos que se indica en el ANEXO E corresponde al conjunto de datos empleados para entrenar la red neuronal artificial y el conjunto de datos descritos en el ANEXO F son los datos empleados en la validación de la red neuronal artificial.

4.4.4 Desarrollo de la red neuronal artificial

4.4.4.1 Normalización de los datos

Utilizando la ecuación descrita en el capítulo 3 para la Normalización de datos en Matlab, se normalizan tanto los datos de las variables de entrada y como los datos de salida de la red neuronal artificial. En el ANEXO G se describe la normalización de los datos de entrenamiento y en el ANEXO H la normalización de los datos de validación.

4.4.4.2 Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial

Luego de normalizar los datos, se desarrolla la red neuronal artificial como se observa en el script del ANEXO I. En el script del diseño de la red existe un comando denominado “hiddenLayerSize”, un parámetro importante cuando se desea modificar e identificar el número óptimo de neuronas en la capa oculta para la red neuronal. Estimadores de rendimiento como la correlación lineal y el error cuadrático medio permiten determinar que una arquitectura de red que consta de 375 neuronas en la capa oculta es idónea para un correcto aprendizaje de la red y que permita predecir la energía de activación. Algunos de los resultados obtenidos luego de modificar el número de neuronas en la capa oculta se resumen en el ANEXO J. Los datos predichos durante el entrenamiento de la red neuronal se presentan en el ANEXO K.

4.4.5 Validación de la red neuronal artificial

Empleado los datos de validación descritos en la tabla del ANEXO F, se realiza un nuevo código con la finalidad de validar la red neuronal y evaluar la predicción de la energía de activación de

los residuos de cáscara de papa en función del aprendizaje de la red neuronal artificial durante su entrenamiento. Dentro del script del ANEXO L, la variable “net” contiene los parámetros aprendidos por la red neuronal y que permitirán calcular la energía de activación a partir de nuevos datos de entrada que no estaban disponibles durante el entrenamiento. Los datos predichos en la validación de la red neuronal artificial se observan en el ANEXO M.

4.4.5.1 Análisis estadístico de los datos predichos

Para terminar de validar los datos predichos por la red neuronal es necesario apoyarse de un análisis estadístico que tome en cuenta los datos reales y predichos para la energía de activación.

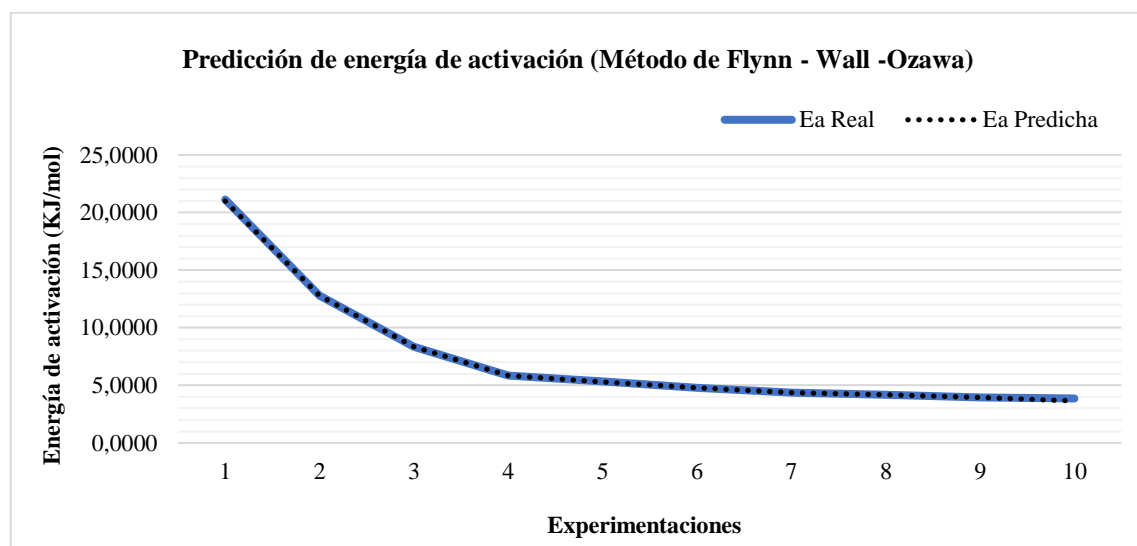


Gráfico 3-4. Energía de activación real y predicha por la red neuronal artificial

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

a) Análisis de la varianza Anova

Tabla 5-4. Análisis de Medias para la energía de activación real y predicha

Variable	Casos	Media	Límite Inferior	Límite Superior
Ea Real	10	7,45406	4,858	10,0501
Ea Predicha	10	7,41465	4,81859	10,0107
Total	20	7,43436		

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

Tabla 6-4. Análisis ANOVA para la energía de activación real y predicha

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00776574	1	0,00776574	0,000254299	0,9875
Intra grupos	549,681	18	30,5378		
Total (Corr.)	549,689	19			

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

En el Gráfico 4-4 puede igualmente observarse el valor P de la tabla Anova y los intervalos de las medias, pueden apreciarse en el Gráfico 5-4. En la prueba de rangos múltiples, estos intervalos se usan para determinar cuáles medias son significativamente diferentes de otras.

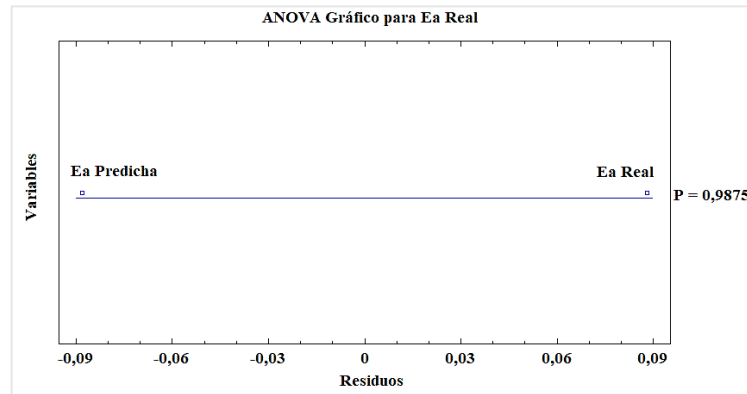


Gráfico 4-4. Gráfico Anova para la energía de activación

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

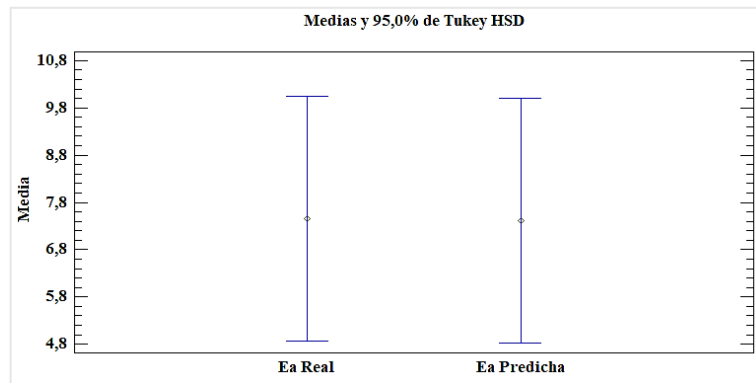


Gráfico 5-4. Gráfico de Medias para la energía de activación

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

b) Prueba de rangos múltiples

Tabla 7-4. Prueba de rangos múltiples para la energía de activación real y predicha

Variables	Casos	Media	Semejanza entre variables	Diferencia	+/- Límites
Ea Predicha	10	7,41465	X	0,03941	5,19212
Ea Real	10	7,45406	X		

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

Un análisis de rangos múltiples permite analizar la igualdad entre las medias de las variables a comparar, y mediante la alineación de las “X” se identificarán a aquellas variables que no

presenten una diferencia estadística significativa. El método empleado para discriminar entre las medias es el procedimiento de diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher.

La Tabla 5-4 y el Gráfico 5-4, describe las medias de los datos reales y predichos de la energía de activación, mientras que, la Tabla 6-4 y el Gráfico 4-4 describen un valor-P mayor a 0,05; por tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y los predichos por la red neuronal para la energía de activación con un 95,0% de confianza. Adicionalmente, mediante la prueba de rangos múltiples presentada en la Tabla 7-4, se observa que los datos de la energía de activación real y predicha presentan una media homogénea.

4.4.6 Desarrollo de la interfaz gráfica de usuario

Usando el comando “guide” para diseñar la interfaz gráfica, Matlab automáticamente desarrolla un espacio de trabajo con el script para la interfaz donde será posible agregar la codificación de la red neuronal artificial. En el script descrito en el ANEXO N se detalla la programación de la interfaz gráfica de usuario.

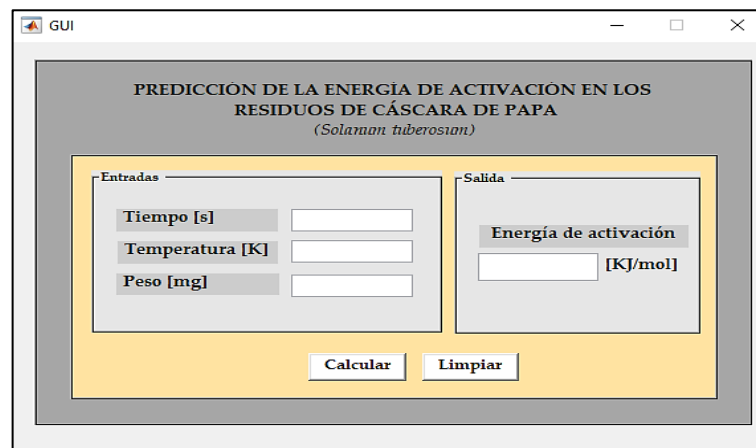


Figura 1-4. Interfaz gráfica de usuario para la red neuronal artificial

Realizado por: Jara, Michel, 2021.

CONCLUSIONES

- El modelo de predicción se basa en una red neuronal prealimentada (Feedforward Neural Networks) de aprendizaje supervisado que emplea datos experimentales del análisis termogravimétrico y cinético realizado en los residuos de cáscara de papa (*Solanum tuberosum*) para calcular la energía de activación.
- La base de datos se elaboró primordialmente con los resultados TGA de la variación del peso de la muestra en función del tiempo y temperatura seleccionando la tasa de calentamiento de 15 °C/min en atmosfera inerte con inyección de N₂ a 20 mL/min; debido a que el termograma no presenta una diferencia significativa con la tasa de calentamiento de 5°C/min, además proporciona mayor cantidad de datos para luego calcular la energía de activación mediante modelos cinéticos establecidos por Flynn-Wall-Ozawa (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose (KAS) y Friedman, sin embargo, el método FWO con $\sigma = 12,623$; es el método con menor desviación estándar y por ende el mejor modelo cinético para calcular la energía de activación en los residuos de cáscara de papa del cantón Guano.
- La red neuronal artificial se diseñó en el software Matlab y está conformada por 3 neuronas de entrada correspondiente a tiempo, temperatura y peso de la muestra de cáscara de papa en el TGA, 375 neuronas en la capa oculta y 1 neurona de salida que corresponde a la energía de activación predicha; además, la red se entrenó con el algoritmo de regularización bayesiana obteniendo un coeficiente de correlación de 1 y error cuadrático medio de 2,327E-09.
- Los resultados predichos por la red neuronal para la energía de activación se compararon estadísticamente con los resultados calculados por el modelo cinético de Flynn-Wall-Ozawa (FWO); un valor P mayor a 0,05 demuestra que no existe diferencias significativas entre la media de los datos experimentales y los predichos por la red; adicionalmente, la prueba de rangos múltiples identifica como grupos homogéneos a la energía de activación real y predicha.
- La interfaz gráfica permite al usuario interactuar con la red neuronal artificial ingresando datos de tiempo, temperatura y peso de una muestra de cáscara de papa para calcular la energía de activación de estos residuos; brindando la posibilidad de realizar un análisis previo de estos residuos para ser utilizados como fuente de biomasa en procesos de conversión térmica.

RECOMENDACIONES

- Comparar el modelo de predicción con otras redes neuronales que empleen diferentes tasas de calentamiento en el análisis termogravimétrico de los residuos de cáscara de papa.
- Basarse en el modelo de predicción desarrollado para predecir no sólo la energía de activación, también otros parámetros importantes en el estudio cinético de la biomasa que son posibles de calcular a partir de un análisis termogravimétrico.
- Aplicar la metodología desarrollada para diseñar redes neuronales que permitan calcular la energía de activación de otras biomásas.
- Emplear el modelo de predicción en proyectos enfocados en la pirólisis o gasificación de la biomasa conformada por residuos de cáscara de papa.

GLOSARIO

Algoritmo de entrenamiento: un algoritmo inteligente que puede obtener sensibilidad de un conjunto proporcionado de datos de entrenamiento (Kim et al., 2015, p.103).

Algoritmo de Levenberg-Marquardt: Es una técnica iterativa que localiza el mínimo de una función multivariante que se expresa como la suma de cuadrados de funciones no lineales de valor real. Se ha convertido en una técnica estándar para problemas de mínimos cuadrados no lineales, ampliamente adoptada en un amplio espectro de disciplinas, como las RNA. El algoritmo de Levenberg-Marquardt actúa como un método de descenso de gradiente cuando los parámetros están lejos de su valor óptimo, y actúa como el método iterativo de Gauss-Newton cuando los parámetros están cerca de su valor óptimo (Lourakis, 2005, p.2).

Algoritmo de regularización bayesiana: Es un algoritmo robusto ya que elimina la necesidad de una validación cruzada prolongada durante el entrenamiento de la red. La regularización bayesiana es un proceso matemático que convierte una regresión no lineal en un problema estadístico "bien planteado" a la manera de una regresión de cresta. Este algoritmo permite que la RNA no se sobreentrene, ya que los procedimientos de evidencia proporcionan un criterio bayesiano objetivo para detener el entrenamiento (Burden y Winkler, 2008, p.25).

Algoritmo de Scaled Conjugate Gradient: es un algoritmo de aprendizaje iterativo para redes neuronales artificiales que destaca por su velocidad de convergencia. Esto se debe a que utiliza derivadas de segundo orden (Roodschild et al., 2019, p.116).

Análisis termogravimétrico: La termogravimetría se ocupa de la rama del análisis térmico que investiga el cambio de peso de una sustancia en función del tiempo o la temperatura (Loganathan et al. 2017, p.68). El análisis termogravimétrico es una técnica analítica que se utiliza para determinar la estabilidad térmica de un material y su fracción de componentes volátiles al monitorear el cambio de peso que ocurre cuando una muestra se calienta a una velocidad constante (Rajisha et al., 2011, p.262).

Arquitectura de red: organización particular de neuronas artificiales y conexiones entre ellas en una red neuronal artificial (Peng y Magoulas, 2011, p.1415).

Energía de activación: El término de energía de activación fue introducido en 1889 por Svante Arrhenius. Modela y la define como la energía mínima que debe estar disponible en un sistema químico con reactivos potenciales para producir una reacción química (Dhlamini et al. 2019, p.2). Es decir, la energía de activación, es la energía mínima requerida para iniciar una reacción química.

Entrenamiento de red: Es un procedimiento que permite ajustar los pesos de conexión de una red neuronal artificial. En el entrenamiento supervisado, la salida deseada (correcta) para cada vector de entrada de un conjunto de entrenamiento se presenta a la red, y pueden ser necesarias muchas iteraciones a través de los datos de entrenamiento para ajustar los pesos. En el entrenamiento no supervisado, los pesos se ajustan sin especificar la salida correcta para ninguno de los vectores de entrada (Peng y Magoulas, 2011, p.1411).

Interfaz gráfica de usuario: herramienta visual de interacción con una computadora a través de representaciones visuales (mosaicos, menús, iconos y otros) (Shalin, 2020, p.111).

Red neuronal artificial: Es un método de aprendizaje automático desarrollado a partir de la idea de simular el cerebro humano (Zou et al., 2008, p.15). Las RNA son una serie de técnicas matemáticas que se pueden utilizar para el procesamiento, pronóstico y agrupamiento de señales, denominadas técnicas de regresión paralela no lineales, de múltiples capas. Además, se afirma que el modelado de redes neuronales consiste en ajustar una línea, plano o hiperplano a través de cualquier conjunto de datos para definir las relaciones que pueden existir entre (lo que el usuario elige) las entradas y las salidas; o se puede adaptar para identificar una representación de los datos en una escala más pequeña (Shanmuganathan, 2016, p.4).

BIBLIOGRAFÍA

BASU, P. Definition of Biomass. *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction*. Canadá: Elsevier Inc, pp. 497-499, 2018. ISBN 9780128129920.

BEZERRA, E; et al. "Artificial neural network (ANN) prediction of kinetic parameters of (CRFC) composites". *Computational Materials Science* [en línea], 2008, 44, pp. 656-663. [Consulta: 11 enero 2021]. ISSN 09270256. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.05.002>.

BURDEN, F. & WINKLER, D. "Bayesian regularization of neural networks". *Methods in Molecular Biology* [en línea], 2008, 458, pp. 25-44. ISSN 10643745. DOI 10.1007/978-1-60327-101-1_3.

BURGAZ, E; et al. "Prediction of thermal stability, crystallinity and thermomechanical properties of poly(ethylene oxide)/clay nanocomposites with artificial neural networks". *Thermochimica Acta* [en línea], 2014, 575, pp. 159-166. [Consulta: 11 enero 2021]. ISSN 00406031. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tca.2013.10.032>.

CHEN, H; et al. "Experimental research on cellulosic biomass pyrolysis and BP neural network prediction". *PEAM 2011 - Proceedings: 2011 IEEE Power Engineering and Automation Conference* [en línea], 2011, 1, pp. 26-29. DOI 10.1109/PEAM.2011.6134787.

CHEN, N; et al. "Kinetics of coffee industrial residue pyrolysis using distributed activation energy model and components separation of bio-oil by sequencing temperature-raising pyrolysis". *Bioresource Technology* [en línea], 2017, 161, pp. 435-760. [Consulta: 12 noviembre 2021]. ISSN 18732976. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.062>.

CONESA, J; et al. "Artificial neural network for modelling thermal decompositions". *Analytical and Applied Pyrolysis* [en línea], 2004, 71, pp. 343-352. ISSN 01652370. DOI 10.1016/S0165-2370(03)00093-7.

CORTÉS, A, & BRIDGWATER, A. "Kinetic study of the pyrolysis of miscanthus and its acid hydrolysis residue by thermogravimetric analysis." *Fuel Processing Technology* [en línea], 2015, 138, pp. 184–193. DOI 10.1016/j.fuproc.2015.05.013.

DHLAMINI, M; et al. "Activation energy and binary chemical reaction effects in mixed convective nanofluid flow with convective boundary conditions". *Computational Design and Engineering* [en línea], 2019, 6, pp. 149-158. [Consulta: 23 febrero 2021]. ISSN 22885048. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jcde.2018.07.002>.

FINKELSTEIN, D; et al. "A Beginner's Guide to Thermogravimetric Analysis". *Technometrics* [en línea], 2015, 47, p. 522-522. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 0040-1706. Disponible en: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1198/tech.2005.s328>.

GOH, G; et al. "Deep learning for computational chemistry". *Computational Chemistry* [en línea], 2017, 38, pp. 1291-1307. ISSN 1096987X. DOI 10.1002/jcc.24764.

GÓMEZ, A; et al. *Arrhenius y el cálculo de la energía de activación* [en línea], 2019. México: Universidad Nacional Autónoma de México. [Consulta: 11 diciembre 2020]. Disponible en: https://www.feriadelasciencias.unam.mx/anteriores/feria23/feria105_04_arrhenius_y_el_calculo_de_la_energia_de_activacion.pdf.

HAEFNER, N; et al. "Artificial intelligence and innovation management: A review, framework". *Technological Forecasting and Social Change* [en línea], 2021, 162, p. 120392. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 00401625. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2020.120392>.

JAIWAL, P; et al. " Estudio comparativo de varios algoritmos de entrenamiento de redes neuronales artificiales [en línea], 2018, pp. 1087-1191. DOI 10.1109/ICACCCN.2018.8748660.

KARACI, A; et al. "The pyrolysis process verification of hydrogen rich gas (H-rG) production by artificial neural network (ANN)". *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], 2016, 41, pp. 4570-4578. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 03603199. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.094>.

KIM, D; et al. "Nonlinear Vibration Control of 3D Irregular Structures Subjected to Seismic Loads" *International Journal of System Dynamics Applications* [en línea], 2015 , pp. 103-119. DOI 10.4018/978-1-4666-9479-8.ch003.

KUMAR, A, & SELVARAJU, A. "Feedforward neural network modeling of biomass pyrolysis process for biochar production". *Chemical Engineering Transactions* [en línea], 2015, 45, pp. 1681-1686. ISSN 22839216. DOI 10.3303/CET1545281.

LECUN, Y; et al. "Deep learning". *Nature* [en línea], 2015, 521, pp. 436-444. ISSN 14764687. DOI 10.1038/nature14539.

LOGANATHAN, S; et al. *Thermogravimetric Analysis for Characterization of Nanomaterials* [en línea], 2017. S.l.: Elsevier Inc. [Consulta: 22 febrero 2021]. ISBN 9780323461450. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-323-46139-9.00004-9>.

LOURAKIS, M. "A Brief Description of the Levenberg-Marquardt Algorithm Implemented by levmar". *Matrix* [en línea], 2005, 3, p. 2. [Consulta: 23 febrero 2021]. ISSN 02684012. Disponible en: <http://www.ics.forth.gr/~lourakis/>.

MAGAP. Ecuador se proyecta a ser exportador de papa. *Ministerio de Agricultura, Ganadería, Acuacultura y Pesca* [en línea], 2020. [Consulta: 10 noviembre 2020]. Disponible en: <https://www.agricultura.gob.ec/ecuador-se-proyecta-a-ser-exportador-de-papa/>.

MATHWORKS. Redes neuronales artificiales. [en línea] 2020. [Consulta: 15 diciembre 2020]. Disponible en: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html>.

NAQVI, S; et al. "Synergistic effect on co-pyrolysis of rice husk and sewage sludge by thermal behavior, kinetics, thermodynamic parameters and artificial neural network". *Waste Management* [en línea], 2019, 85, pp. 131-140. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 18792456. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2018.12.031>.

NAQVI, S; et al. "Pirólisis de lodos de depuradora con alto contenido de cenizas: Estudio termocinético utilizando TGA y redes neuronales artificiales". *Fuel* [en línea], 2018, 233, pp. 529-538. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 00162361. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.06.089>.

OSMAN, A; et al. "Physicochemical Characterization and Kinetic Modeling concerning Combustion of Waste Berry Pomace". *ACS Sustainable Chemistry and Engineering* [en línea], 2020, 8, pp. 17573-17586. ISSN 21680485. DOI 10.1021/acssuschemeng.0c07390.

OZGE, C; et al. "A study to predict pyrolytic behaviors of refuse-derived fuel (RDF): Artificial neural network application". *Analytical and Applied Pyrolysis* [en línea], 2016, 122, pp. 84-94. ISSN 01652370. DOI 10.1016/j.jaap.2016.10.013.

OZGE, C; et al. "Activation energy prediction of biomass wastes based on different neural network topologies". *Fuel* [en línea], 2018, 220, pp. 535-545. ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2018.02.045.

PENG, C, & MAGOULAS, G. "Sequence Processing with Recurrent Neural Networks". *Encyclopedia of Artificial Intelligence* [en línea], 2011, pp. 1411-1417. DOI 10.4018/9781599048499.ch207.

PHOTOMETRICS. Thermogravimetric Analysis (TGA). [en línea], 2010. [Consulta: 12 enero 2021]. Disponible en: <https://photometrics.net/thermogravimetric-analysis-tga/>.

PUIG-ARNAVAT, M; et al. " Modelos de redes neuronales artificiales para la gasificación de biomasa en gasificadores de lecho fluidizado ". *Biomass and Bioenergy* [en línea], 2013, 49, pp. 279-289. ISSN 09619534. DOI 10.1016/j.biombioe.2012.12.012.

RAJISHA, K; et al. "Thermomechanical and spectroscopic characterization of natural fibre composites". *Interface Engineering of Natural Fibre Composites for Maximum Performance* [en línea], 2011, pp. 241-274. DOI 10.1533/9780857092281.2.241.

ROODSCHILD, M; et al. "Optimización de Scaled Conjugate Gradient para Froog Neural Networks". *Simposio Argentino de Inteligencia Artificial* [en línea], 2019, pp. 116-122. [Consulta: 23 febrero 2021]. ISSN 2451-7585. Disponible en: <http://170.210.201.137/pdfs/asai/ASAI-12.pdf>.

ROSARIO, Brayan. Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2020.

SHALIN, H. Orientation, Functions, Navigation, and Experiences: User Interface Designs and Wireframes. *IGI Global* [en línea], 2020, pp. 84-115. DOI 10.4018/978-1-7998-3946-0.ch004.

SHANMUGANATHAN, S. "Studies in Computational Intelligence. *Artificial Neural Network Modelling* [en línea], 2016, pp. 145-159. [Consulta: 23 febrero 2021]. Disponible en: <http://www.springer.com/series/7092>.

SUNPHORKA, S; et al. "Application of artificial neural network for kinetic parameters prediction of biomass oxidation from biomass properties". *Energy Institute* [en línea], 2017, 90, pp. 51-61. [Consulta: 12 enero 2021]. ISSN 17460220. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.joei.2015.10.007>.

YILDIZ, Z; et al. "Application of artificial neural networks to co-combustion of hazelnut husk-lignite coal blends". *Bioresource Technology* [en línea], 2016, 200, pp. 42-47. ISSN 18732976. DOI 10.1016/j.biortech.2015.09.114.

ZOU, J, HAN, Y, & SO, S. "Overview of artificial neural networks". *Methods in Molecular Biology* [en línea], 2008, 458, pp. 15-23. ISSN 10643745. DOI 10.1007/978-1-60327-101-1_2.

ANEXOS

ANEXO A. Preparación de la muestra de biomasa conformada por cáscara de papa



NOTAS:	CATEGORÍA DEL DIAGRAMA:	ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO FACULTAD DE CIENCIAS ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA ELABORADO POR: Michel Abigail Jara Romero	PREPARACIÓN DE BIOMASA CONFORMADA POR CÁSCARA DE PAPA		
a) Secado de la muestra b) Pesaje de la muestra c) Empaquetado y etiquetado de la muestra	<input type="checkbox"/> Aprobado <input type="checkbox"/> Preliminar <input type="checkbox"/> Certificado <input type="checkbox"/> Por aprobar <input checked="" type="checkbox"/> Información <input type="checkbox"/> Por calificar				
			1	1:1	2020/11/13

ANEXO B. Análisis TGA en laboratorio de investigación de la UCE



UNIVERSIDAD CENTRAL DEL ECUADOR
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
ÁREA DE INVESTIGACIÓN



REPORTE DE RESULTADOS DE LABORATORIO

ORDEN 083 y ORDEN 085

Lugar y fecha: Quito, 3 de diciembre de 2020

1. Datos del solicitante:

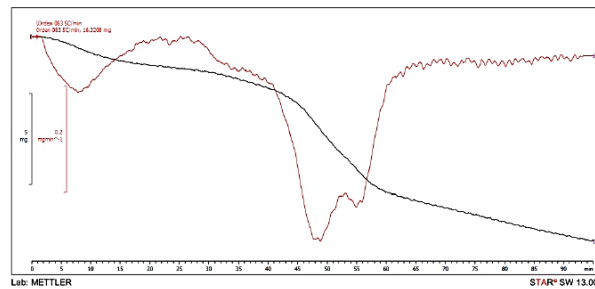
Nombre: Michel Abigail Jara Romero
Dirección: Riobamba
Cédula / Pasaporte / RUC: 604610824
Teléfono: 0987175008
Persona de contacto: Michel Abigail Jara Romero Teléfono: 0987175008

2. Especificaciones del ensayo

Muestra: Biomasa
Descripción: Cáscara de papa
Tipo de ensayo: Termogravimetría
Equipo / máquina: Mettler Toledo TGA-1
Analista: Ing. Pablo Londoño
Descripción del método: <ul style="list-style-type: none">• 2 rampas de calentamiento distintas 5 y 15 °C/min• Programa de 25 a 900 °C• Atmósfera inerte (N₂) 20 ml/min• Resultados de TGA y dTGA (200 puntos)
Observaciones:

3. Resultados

Rampa 5°C/min

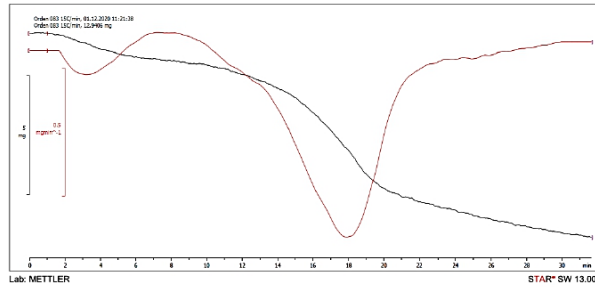




UNIVERSIDAD CENTRAL DEL ECUADOR
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
ÁREA DE INVESTIGACIÓN



Rampa 15°C/min



Los resultados en detalle han sido enviados al correo electrónico del cliente.

Ing. Pablo Londoño Larrea
Analista de Laboratorio Universitario 3

ANEXO C. Resultados del análisis Termogravimétrico

Title

23.06.2020 11:20

Title

Evaluation Categories:

Curve Name:

Orden 068-1, 23.06.2020 10:03:44

Performed 23.06.2020 10:03:43

Curve Values:

Index	t [s]	Ts [°C]	Tr [°C]	Value [mg]
0	0	25	25	14,3483
20	20	30	30	14,3538
40	40	35	35	14,3231
60	60	40	40	14,3095
80	80	45	45	14,2524
100	100	50	50	14,1825
120	120	55	55	14,0714
140	140	60	60	13,9851
160	160	65	65	13,84
180	180	70	70	13,7046
200	200	75	75	13,5717
220	220	80	80	13,4361
240	240	85	85	13,3498
260	260	90	90	13,2287
280	280	95	95	13,117
300	300	100	100	13,0546
320	320	105	105	12,9918
340	340	110	110	12,926
360	360	115	115	12,8564
380	380	120	120	12,8048
400	400	125	125	12,7558
420	420	130	130	12,7178
440	440	135	135	12,6531
460	460	140	140	12,6462
480	480	145	145	12,6
500	500	150	150	12,555
520	520	155	155	12,5153
540	540	160	160	12,477
560	560	165	165	12,4636
580	580	170	170	12,4365
600	600	175	175	12,3729
620	620	180	180	12,3628
640	640	185	185	12,3303

660	660	190	190	12,3405
680	680	195	195	12,2919
700	700	200	200	12,2761
720	720	205	205	12,2484
740	740	210	210	12,222
760	760	215	215	12,2146
780	780	220	220	12,151
800	800	225	225	12,1085
820	820	230	230	12,051
840	840	235	235	11,9599
860	860	240	240	11,8981
880	880	245	245	11,8187
900	900	250	250	11,7135
920	920	255	255	11,5593
940	940	260	260	11,4053
960	960	265	265	11,2215
980	980	270	270	10,9961
1000	1000	275	275	10,7374
1020	1020	280	280	10,4445
1040	1040	285	285	10,148
1060	1060	290	290	9,86799
1080	1080	295	295	9,55774
1100	1100	300	300	9,23919
1120	1120	305	305	8,89678
1140	1140	310	310	8,5933
1160	1160	315	315	8,24999
1180	1180	320	320	7,92955
1200	1200	325	325	7,5983
1220	1220	330	330	7,34785
1240	1240	335	335	7,1413
1260	1260	340	340	6,98425
1280	1280	345	345	6,85585
1300	1300	350	350	6,7391
1320	1320	355	355	6,65895
1340	1340	360	360	6,57425
1360	1360	365	365	6,45839
1380	1380	370	370	6,40109
1400	1400	375	375	6,32534
1420	1420	380	380	6,23415
1440	1440	385	385	6,173
1460	1460	390	390	6,0995
1480	1480	395	395	6,03584
1500	1500	400	400	5,95649
1520	1520	405	405	5,87729

1540	1540	410	410	5,79224
1560	1560	415	415	5,77024
1580	1580	420	420	5,67215
1600	1600	425	425	5,6063
1620	1620	430	430	5,556
1640	1640	435	435	5,4756
1660	1660	440	440	5,40725
1680	1680	445	445	5,31194
1700	1700	450	450	5,26054
1720	1720	455	455	5,17019
1740	1740	460	460	5,09695
1760	1760	465	465	5,05363
1780	1780	470	470	4,98975
1800	1800	475	475	4,91776
1820	1820	480	480	4,862
1840	1840	485	485	4,7906
1860	1860	490	490	4,73295
1880	1880	495	495	4,66098
1900	1900	500	500	4,6133

Results:

Texts:

Orden 068-1, 23.06.2020 10:03:44

Orden 068-1, 14.3483 mg

Sample:

Orden 068-1, 14.3483 mg

Method:

Orden 068

Adjustment:

From 0.00 to 31.67 min

RTyp, adjusted 27.07.2015 12:26:06

Tc : 25.00 °C

dTc(T) : $6.3238 + 3.6462e-03*T + 0.0000*T^2$ °C

Balance:

Type : XP5

adjusted: 04.02.2016 10:59:30

External Adjust.: No

Sample Holder:

Alumina 70ul

Weight : 0

Material: Ceramic

Curve Name:

\Orden 068-1

Curve Values:

Index	t [s]	Ts [°C]	Tr [°C]	Value [mg]
0	0	25	25	-0,00400833
20	20	30	30	-0,00400833
40	40	35	35	-0,00400833
60	60	40	40	-0,00400833
80	80	45	45	-0,00400833
100	100	50	50	-0,00400833
120	120	55	55	-0,00476836
140	140	60	60	-0,00538634
160	160	65	65	-0,00578077
180	180	70	70	-0,0060121
200	200	75	75	-0,00600577
220	220	80	80	-0,00578078
240	240	85	85	-0,0053368
260	260	90	90	-0,00489415
280	280	95	95	-0,00444993
300	300	100	100	-0,00401599
320	320	105	105	-0,00359166
340	340	110	110	-0,00324502
360	360	115	115	-0,00288368
380	380	120	120	-0,00261456
400	400	125	125	-0,00245925
420	420	130	130	-0,00230461
440	440	135	135	-0,00213464
460	460	140	140	-0,00202066
480	480	145	145	-0,00192491
500	500	150	150	-0,00190611
520	520	155	155	-0,00181897
540	540	160	160	-0,00174833
560	560	165	165	-0,00162353
580	580	170	170	-0,00142166
600	600	175	175	-0,0013182
620	620	180	180	-0,00122234
640	640	185	185	-0,00117619
660	660	190	190	-0,00115663
680	680	195	195	-0,00114284
700	700	200	200	-0,00127223
720	720	205	205	-0,00147656
740	740	210	210	-0,00172456

760	760	215	215	-0,00211301
780	780	220	220	-0,00241707
800	800	225	225	-0,002807
820	820	230	230	-0,00327951
840	840	235	235	-0,00390072
860	860	240	240	-0,00461077
880	880	245	245	-0,00544195
900	900	250	250	-0,00642325
920	920	255	255	-0,00763997
940	940	260	260	-0,0089164
960	960	265	265	-0,010297
980	980	270	270	-0,0115577
1000	1000	275	275	-0,0126856
1020	1020	280	280	-0,0136676
1040	1040	285	285	-0,0145392
1060	1060	290	290	-0,0151234
1080	1080	295	295	-0,0155352
1100	1100	300	300	-0,0157808
1120	1120	305	305	-0,015948
1140	1140	310	310	-0,0157694
1160	1160	315	315	-0,0152303
1180	1180	320	320	-0,0142835
1200	1200	325	325	-0,013011
1220	1220	330	330	-0,0115261
1240	1240	335	335	-0,00996912
1260	1260	340	340	-0,00838412
1280	1280	345	345	-0,0069839
1300	1300	350	350	-0,0058106
1320	1320	355	355	-0,00505856
1340	1340	360	360	-0,00455972
1360	1360	365	365	-0,00425416
1380	1380	370	370	-0,00402644
1400	1400	375	375	-0,00388809
1420	1420	380	380	-0,0037979
1440	1440	385	385	-0,00375056
1460	1460	390	390	-0,00369161
1480	1480	395	395	-0,00365616
1500	1500	400	400	-0,00356948
1520	1520	405	405	-0,00352747
1540	1540	410	410	-0,00349693
1560	1560	415	415	-0,00344724
1580	1580	420	420	-0,0034174
1600	1600	425	425	-0,00341501
1620	1620	430	430	-0,00345001

1640	1640	435	435	-0,00353701
1660	1660	440	440	-0,00355689
1680	1680	445	445	-0,00356139
1700	1700	450	450	-0,00355643
1720	1720	455	455	-0,00353538
1740	1740	460	460	-0,0034543
1760	1760	465	465	-0,00335568
1780	1780	470	470	-0,00324824
1800	1800	475	475	-0,00314906
1820	1820	480	480	-0,00314418
1840	1840	485	485	-0,00314418
1860	1860	490	490	-0,00314418
1880	1880	495	495	-0,00314418
1900	1900	500	500	-0,00314418

Results:

\Orden 068-1

Orden 068-1, 14.3483 mg

Sample:

Orden 068-1, 14.3483 mg

Method:

Orden 068

Adjustment:

From 0.00 to 31.67 min

RTyp, adjusted 27.07.2015 12:26:06

Tc : 25.00 °C

dTc(T) : $6.3238 + 3.6462e-03*T + 0.0000*T^2$ °C

Balance:

Type : XP5

adjusted: 04.02.2016 10:59:30

External Adjust.: No

Sample Holder:

Alumina 70ul

Weight : 0

Material: Ceramic

User:

METTLER

Not signed

STARe SW 13.00

ANEXO D. Energía de activación calculada por diferentes métodos cinéticos

t [s]	T [K]	P [mg]	dT/dt	ln(dT/dt)	1/T	Pendiente	Ea(FWO)	T^2	(B/T^2)	Ln(B/T^2)	Pendiente	Ea(KAS)	conversión	da/dt	B*da/dt	ln(B*da/dt)	pendiente	Ea(Friedman)
0	298,15	12,9641	0	0	0,0034	0	0	88893,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	303,15	12,9628	15,158	2,7185	0,0033	12644,53	-99,9302	91899,92	4594,996	8,4327	1,23E+04	-102,5855	0,0002	0,00001	0,000115	-9,072	-28486,19	236,8342
40	308,15	12,9406	7,704	2,0417	0,0032	7514,61	-59,3883	94956,42	2373,911	7,7723	7,20E+03	-59,8938	0,0027	0,00007	0,000527	-7,548	38439,46	-319,5857
60	313,15	12,957	5,219	1,6523	0,0032	5416,64	-42,8079	98062,92	1634,382	7,3990	5,10E+03	-42,4097	0,0008	0,00001	0,000072	-9,539	-28716,87	238,7520
80	318,15	12,9116	3,977	1,3805	0,0031	4267,65	-33,7274	101219,42	1265,243	7,1430	3,95E+03	-32,8155	0,0061	0,00008	0,000304	-8,098	-362,89	3,0171
100	323,15	12,8819	3,232	1,1729	0,0031	3541,10	-27,9855	104425,92	1044,259	6,9511	3,22E+03	-26,7334	0,0096	0,00010	0,000310	-8,081	-7137,29	59,3394
120	328,15	12,8009	2,735	1,0060	0,0030	3039,81	-24,0238	107682,42	897,354	6,7994	2,71E+03	-22,5241	0,0190	0,00016	0,000433	-7,744	-1626,82	13,5254
140	333,15	12,7284	2,380	0,8670	0,0030	2672,95	-21,1244	110988,92	792,778	6,6755	2,34E+03	-19,4324	0,0275	0,00020	0,000467	-7,670	-2586,73	21,5061
160	338,15	12,6239	2,113	0,7483	0,0030	2392,78	-18,9102	114345,42	714,659	6,5718	2,05E+03	-17,0615	0,0396	0,00025	0,000524	-7,555	396,74	-3,2985
180	343,15	12,547	1,906	0,6452	0,0029	2171,80	-17,1638	117751,92	654,177	6,4834	1,83E+03	-15,1827	0,0486	0,00027	0,000515	-7,572	1243,71	-10,3402
200	348,15	12,4823	1,741	0,5543	0,0029	1993,02	-15,7509	121208,42	606,042	6,4069	1,64E+03	-13,6548	0,0561	0,00028	0,000489	-7,624	-1000,90	8,3214
220	353,15	12,3655	1,605	0,4733	0,0028	1845,41	-14,5844	124714,92	566,886	6,3402	1,49E+03	-12,3860	0,0697	0,00032	0,000509	-7,583	506,99	-4,2151
240	358,15	12,2756	1,492	0,4003	0,0028	1721,47	-13,6048	128271,42	534,464	6,2813	1,36E+03	-11,3139	0,0802	0,00033	0,000499	-7,603	2011,67	-16,7250
260	363,15	12,2265	1,397	0,3341	0,0028	1615,91	-12,7706	131877,92	507,223	6,2290	1,25E+03	-10,3948	0,0859	0,00033	0,000462	-7,681	1667,75	-13,8657
280	368,15	12,1713	1,315	0,2737	0,0027	1524,94	-12,0517	135534,42	484,052	6,1822	1,15E+03	-9,5969	0,0924	0,00033	0,000434	-7,743	441,31	-3,6691
300	373,15	12,0805	1,244	0,2182	0,0027	1445,72	-11,4256	139240,92	464,136	6,1402	1,07E+03	-8,8967	0,1030	0,00034	0,000427	-7,759	1623,14	-13,4948
320	378,15	12,0275	1,182	0,1670	0,0026	1376,12	-10,8755	142997,42	446,867	6,1023	9,95E+02	-8,2764	0,1091	0,00034	0,000403	-7,817	2333,40	-19,3999
340	383,15	12,0013	1,127	0,1195	0,0026	1314,48	-10,3884	146803,92	431,776	6,0679	9,29E+02	-7,7224	0,1122	0,00033	0,000372	-7,897	2072,00	-17,2266
360	388,15	11,9703	1,078	0,0753	0,0026	1259,50	-9,9539	150660,42	418,501	6,0367	8,69E+02	-7,2237	0,1158	0,00032	0,000347	-7,967	932,82	-7,7554
380	393,15	11,9038	1,035	0,0340	0,0025	1210,18	-9,5641	154566,92	406,755	6,0082	8,15E+02	-6,7721	0,1235	0,00033	0,000336	-7,997	2291,89	-19,0547
400	398,15	11,8859	0,995	-0,0046	0,0025	1165,66	-9,2123	158523,42	396,309	5,9822	7,65E+02	-6,3604	0,1256	0,00031	0,000313	-8,071	2699,23	-22,4414
420	403,15	11,8848	0,960	-0,0409	0,0025	1125,29	-8,8932	162529,92	386,976	5,9584	7,20E+02	-5,9832	0,1258	0,00030	0,000287	-8,155	1570,55	-13,0576
440	408,15	11,8486	0,928	-0,0751	0,0025	1088,52	-8,6026	166586,42	378,606	5,9365	6,78E+02	-5,6359	0,1300	0,00030	0,000274	-8,202	1250,98	-10,4007
460	413,15	11,8035	0,898	-0,1074	0,0024	1054,87	-8,3367	170692,92	371,072	5,9164	6,39E+02	-5,3145	0,1352	0,00029	0,000264	-8,239	2052,30	-17,0628

480	418,15	11,7875	0,871	-0,1379	0,0024	1023,97	-8,0925	174849,42	364,270	5,8979	6,03E+02	-5,0161	0,1371	0,00029	0,000249	-8,299	1860,28	-15,4663
500	423,15	11,7671	0,846	-0,1669	0,0024	995,50	-7,8674	179055,92	358,112	5,8808	5,70E+02	-4,7378	0,1395	0,00028	0,000236	-8,351	1759,69	-14,6301
520	428,15	11,7452	0,823	-0,1944	0,0023	969,17	-7,6594	183312,42	352,524	5,8651	5,39E+02	-4,4774	0,1420	0,00027	0,000225	-8,400	237,45	-1,9742
540	433,15	11,6731	0,802	-0,2205	0,0023	944,76	-7,4665	187618,92	347,442	5,8506	5,09E+02	-4,2329	0,1504	0,00028	0,000223	-8,406	2201,88	-18,3065
560	438,15	11,6689	0,782	-0,2454	0,0023	922,07	-7,2871	191975,42	342,813	5,8372	4,81E+02	-4,0026	0,1509	0,00027	0,000211	-8,464	2168,02	-18,0249
580	443,15	11,665	0,764	-0,2691	0,0023	900,91	-7,1200	196381,92	338,590	5,8248	4,55E+02	-3,7851	0,1514	0,00026	0,000199	-8,520	465,78	-3,8725
600	448,15	11,6054	0,747	-0,2918	0,0022	881,15	-6,9637	200838,42	334,731	5,8133	4,31E+02	-3,5792	0,1583	0,00026	0,000197	-8,532	135,59	-1,1273
620	453,15	11,5341	0,731	-0,3135	0,0022	862,63	-6,8174	205344,92	331,201	5,8027	4,07E+02	-3,3837	0,1666	0,00027	0,000196	-8,535	885,96	-7,3659
640	458,15	11,4888	0,716	-0,3343	0,0022	845,26	-6,6801	209901,42	327,971	5,7929	3,85E+02	-3,1977	0,1719	0,00027	0,000192	-8,557	1271,47	-10,5710
660	463,15	11,4579	0,702	-0,3542	0,0022	828,92	-6,5510	214507,92	325,012	5,7839	3,63E+02	-3,0203	0,1755	0,00027	0,000187	-8,587	-715,31	5,9471
680	468,15	11,356	0,688	-0,3733	0,0021	813,54	-6,4294	219164,42	322,301	5,7755	3,43E+02	-2,8508	0,1874	0,00028	0,000190	-8,570	326,41	-2,7138
700	473,15	11,2904	0,676	-0,3917	0,0021	799,02	-6,3147	223870,92	319,816	5,7677	3,23E+02	-2,6885	0,1950	0,00028	0,000188	-8,577	-152,36	1,2667
720	478,15	11,206	0,664	-0,4093	0,0021	785,29	-6,2062	228627,42	317,538	5,7606	3,05E+02	-2,5329	0,2048	0,00028	0,000189	-8,574	599,92	-4,9878
740	483,15	11,1499	0,653	-0,4263	0,0021	772,30	-6,1035	233433,92	315,451	5,7540	2,87E+02	-2,3833	0,2114	0,00029	0,000187	-8,587	-653,21	5,4308
760	488,15	11,0437	0,642	-0,4427	0,0020	759,98	-6,0062	238290,42	313,540	5,7479	2,69E+02	-2,2393	0,2238	0,00029	0,000189	-8,573	-357,08	2,9688
780	493,15	10,9469	0,632	-0,4585	0,0020	748,29	-5,9137	243196,92	311,791	5,7423	2,53E+02	-2,1005	0,2350	0,00030	0,000191	-8,566	379,75	-3,1573
800	498,15	10,8796	0,623	-0,4737	0,0020	737,17	-5,8259	248153,42	310,192	5,7372	2,37E+02	-1,9665	0,2429	0,00030	0,000189	-8,574	-903,53	7,5119
820	503,15	10,7564	0,614	-0,4884	0,0020	726,59	-5,7423	253159,92	308,732	5,7325	2,21E+02	-1,8370	0,2572	0,00031	0,000192	-8,555	-633,37	5,2658
840	508,15	10,6416	0,605	-0,5026	0,0020	716,51	-5,6626	258216,42	307,401	5,7282	2,06E+02	-1,7116	0,2706	0,00032	0,000195	-8,543	-527,52	4,3858
860	513,15	10,5289	0,597	-0,5164	0,0019	706,89	-5,5866	263322,92	306,189	5,7242	1,91E+02	-1,5900	0,2837	0,00033	0,000197	-8,533	-1014,21	8,4321
880	518,15	10,3903	0,589	-0,5297	0,0019	697,70	-5,5140	268479,42	305,090	5,7206	1,77E+02	-1,4721	0,2999	0,00034	0,000201	-8,514	-1238,42	10,2962
900	523,15	10,2361	0,581	-0,5425	0,0019	688,92	-5,4446	273685,92	304,095	5,7173	1,63E+02	-1,3575	0,3179	0,00035	0,000205	-8,491	-2416,14	20,0878
920	528,15	10,0143	0,574	-0,5550	0,0019	680,51	-5,3781	278942,42	303,198	5,7144	1,50E+02	-1,2460	0,3437	0,00037	0,000214	-8,447	-1370,24	11,3922
940	533,15	9,8384	0,567	-0,5671	0,0019	672,46	-5,3145	284248,92	302,392	5,7117	1,37E+02	-1,1375	0,3642	0,00039	0,000220	-8,423	-2121,87	17,6413
960	538,15	9,6126	0,561	-0,5788	0,0019	664,75	-5,2535	289605,42	301,672	5,7093	1,24E+02	-1,0318	0,3905	0,00041	0,000228	-8,386	-2210,61	18,3790
980	543,15	9,37029	0,554	-0,5902	0,0018	657,34	-5,1950	295011,92	301,033	5,7072	1,12E+02	-0,9286	0,4187	0,00043	0,000237	-8,348	-2134,12	17,7430
1000	548,15	9,12094	0,548	-0,6012	0,0018	650,23	-5,1388	300468,42	300,468	5,7053	9,96E+01	-0,8279	0,4478	0,00045	0,000245	-8,312	-2161,37	17,9696

1020	553,15	8,85805	0,542	-0,6119	0,0018	643,39	-5,0847	305974,92	299,975	5,7037	8,77E+01	-0,7295	0,4784	0,00047	0,000254	-8,277	-2276,83	18,9296
1040	558,15	8,57479	0,537	-0,6223	0,0018	636,81	-5,0327	311531,42	299,549	5,7023	7,62E+01	-0,6333	0,5114	0,00049	0,000264	-8,240	-2296,44	19,0926
1060	563,15	8,27669	0,531	-0,6325	0,0018	630,48	-4,9827	317137,92	299,187	5,7011	6,48E+01	-0,5391	0,5462	0,00052	0,000274	-8,203	-1582,72	13,1587
1080	568,15	8,02018	0,526	-0,6423	0,0018	624,38	-4,9345	322794,42	298,884	5,7001	5,37E+01	-0,4468	0,5760	0,00053	0,000281	-8,179	-2397,81	19,9354
1100	573,15	7,68945	0,521	-0,6519	0,0017	618,50	-4,8881	328500,92	298,637	5,6992	4,29E+01	-0,3563	0,6146	0,00056	0,000291	-8,142	-2535,84	21,0830
1120	578,15	7,33175	0,516	-0,6613	0,0017	612,83	-4,8432	334257,42	298,444	5,6986	3,22E+01	-0,2676	0,6563	0,00059	0,000302	-8,104	-1630,32	13,5545
1140	583,15	7,03725	0,512	-0,6703	0,0017	607,36	-4,8000	340063,92	298,302	5,6981	2,17E+01	-0,1806	0,6906	0,00061	0,000310	-8,079	-946,48	7,8691
1160	588,15	6,7951	0,507	-0,6792	0,0017	602,07	-4,7582	345920,42	298,207	5,6978	1,14E+01	-0,0950	0,7188	0,00062	0,000314	-8,066	-376,00	3,1260
1180	593,15	6,60015	0,503	-0,6878	0,0017	596,97	-4,7178	351826,92	298,158	5,6976	1,32E+00	-0,0110	0,7415	0,00063	0,000316	-8,060	125,90	-1,0468
1200	598,15	6,44918	0,498	-0,6962	0,0017	592,03	-4,6788	357783,42	298,153	5,6976	-8,62E+00	0,0716	0,7591	0,00063	0,000315	-8,062	138,55	-1,1519
1220	603,15	6,29884	0,494	-0,7044	0,0017	587,25	-4,6410	363789,92	298,188	5,6977	-1,84E+01	0,1529	0,7766	0,00064	0,000315	-8,064	941,96	-7,8314
1240	608,15	6,22225	0,490	-0,7124	0,0016	582,62	-4,6045	369846,42	298,263	5,6980	-2,80E+01	0,2330	0,7855	0,00063	0,000311	-8,077	280,92	-2,3355
1260	613,15	6,08574	0,487	-0,7203	0,0016	578,14	-4,5691	375952,92	298,375	5,6984	-3,75E+01	0,3118	0,8014	0,00064	0,000310	-8,080	1426,23	-11,8576
1280	618,15	6,0543	0,483	-0,7279	0,0016	573,80	-4,5348	382109,42	298,523	5,6988	-4,68E+01	0,3895	0,8051	0,00063	0,000304	-8,099	682,62	-5,6753
1300	623,15	5,95624	0,479	-0,7353	0,0016	569,59	-4,5015	388315,92	298,705	5,6995	-5,61E+01	0,4660	0,8165	0,00063	0,000301	-8,108	806,75	-6,7073
1320	628,15	5,86995	0,476	-0,7426	0,0016	565,51	-4,4692	394572,42	298,919	5,7002	-6,51E+01	0,5415	0,8266	0,00063	0,000298	-8,118	1100,42	-9,1489
1340	633,15	5,81073	0,473	-0,7497	0,0016	561,55	-4,4379	400878,92	299,163	5,7010	-7,41E+01	0,6160	0,8335	0,00062	0,000294	-8,132	1238,06	-10,2933
1360	638,15	5,76449	0,469	-0,7567	0,0016	557,70	-4,4075	407235,42	299,438	5,7019	-8,29E+01	0,6896	0,8389	0,00062	0,000289	-8,148	640,74	-5,3271
1380	643,15	5,666	0,466	-0,7635	0,0016	553,97	-4,3780	413641,92	299,741	5,7029	-9,17E+01	0,7622	0,8503	0,00062	0,000287	-8,155	1086,25	-9,0311
1400	648,15	5,60735	0,463	-0,7701	0,0015	550,34	-4,3494	420098,42	300,070	5,7040	-1,00E+02	0,8339	0,8572	0,00061	0,000283	-8,168	1533,51	-12,7496
1420	653,15	5,5884	0,460	-0,7766	0,0015	546,81	-4,3215	426604,92	300,426	5,7052	-1,09E+02	0,9048	0,8594	0,00061	0,000278	-8,187	842,42	-7,0039
1440	658,15	5,51019	0,457	-0,7830	0,0015	543,38	-4,2944	433161,42	300,807	5,7065	-1,17E+02	0,9749	0,8685	0,00060	0,000276	-8,196	1018,66	-8,4691
1460	663,15	5,4477	0,454	-0,7892	0,0015	540,04	-4,2680	439767,92	301,211	5,7078	-1,26E+02	1,0442	0,8758	0,00060	0,000272	-8,208	1194,98	-9,9351
1480	668,15	5,40084	0,451	-0,7953	0,0015	536,80	-4,2423	446424,42	301,638	5,7092	-1,34E+02	1,1128	0,8812	0,00060	0,000269	-8,222	512,70	-4,2626
1500	673,15	5,29658	0,449	-0,8013	0,0015	533,64	-4,2174	453130,92	302,087	5,7107	-1,42E+02	1,1806	0,8934	0,00060	0,000267	-8,227	1043,31	-8,6741
1520	678,15	5,2376	0,446	-0,8071	0,0015	530,56	-4,1930	459887,42	302,558	5,7123	-1,50E+02	1,2478	0,9003	0,00059	0,000264	-8,239	1164,95	-9,6854
1540	683,15	5,18935	0,444	-0,8128	0,0015	527,56	-4,1693	466693,92	303,048	5,7139	-1,58E+02	1,3143	0,9059	0,00059	0,000261	-8,251	1114,37	-9,2649

1560	688,15	5,13738	0,441	-0,8184	0,0015	524,64	-4,1462	473550,42	303,558	5,7156	-1,66E+02	1,3802	0,9119	0,00058	0,000258	-8,263	998,80	-8,3040
1580	693,15	5,07634	0,439	-0,8239	0,0014	521,79	-4,1237	480456,92	304,087	5,7173	-1,74E+02	1,4454	0,9191	0,00058	0,000255	-8,274	1374,99	-11,4317
1600	698,15	5,0466	0,436	-0,8293	0,0014	519,01	-4,1018	487413,42	304,633	5,7191	-1,82E+02	1,5101	0,9225	0,00058	0,000252	-8,288	1150,78	-9,5676
1620	703,15	4,99905	0,434	-0,8346	0,0014	516,30	-4,0803	494419,92	305,197	5,7210	-1,89E+02	1,5742	0,9281	0,00057	0,000249	-8,299	360,48	-2,9971
1640	708,15	4,88809	0,432	-0,8398	0,0014	513,65	-4,0594	501476,42	305,778	5,7229	-1,97E+02	1,6378	0,9410	0,00057	0,000248	-8,303	1498,24	-12,4563
1660	713,15	4,8689	0,430	-0,8449	0,0014	511,07	-4,0390	508582,92	306,375	5,7248	-2,05E+02	1,7008	0,9432	0,00057	0,000244	-8,318	1164,69	-9,6833
1680	718,15	4,82348	0,427	-0,8499	0,0014	508,55	-4,0191	515739,42	306,988	5,7268	-2,12E+02	1,7633	0,9485	0,00056	0,000241	-8,329	1088,44	-9,0493
1700	723,15	4,77243	0,425	-0,8548	0,0014	506,09	-3,9997	522945,92	307,615	5,7288	-2,20E+02	1,8253	0,9545	0,00056	0,000239	-8,340	1340,30	-11,1433
1720	728,15	4,74145	0,423	-0,8596	0,0014	503,69	-3,9807	530202,42	308,257	5,7309	-2,27E+02	1,8869	0,9581	0,00056	0,000236	-8,352	1316,20	-10,9429
1740	733,15	4,7089	0,421	-0,8643	0,0014	501,34	-3,9621	537508,92	308,913	5,7331	-2,34E+02	1,9480	0,9619	0,00055	0,000233	-8,365	995,90	-8,2799
1760	738,15	4,65208	0,419	-0,8689	0,0014	499,04	-3,9440	544865,42	309,583	5,7352	-2,42E+02	2,0087	0,9685	0,00055	0,000231	-8,374	1301,00	-10,8165
1780	743,15	4,61885	0,418	-0,8735	0,0013	496,80	-3,9262	552271,92	310,265	5,7374	-2,49E+02	2,0689	0,9724	0,00055	0,000228	-8,386	988,94	-8,2220
1800	748,15	4,56235	0,416	-0,8779	0,0013	494,60	-3,9089	559728,42	310,960	5,7397	-2,56E+02	2,1287	0,9789	0,00054	0,000226	-8,395	1138,54	-9,4658
1820	753,15	4,5174	0,414	-0,8823	0,0013	492,46	-3,8919	567234,92	311,668	5,7419	-2,63E+02	2,1881	0,9842	0,00054	0,000224	-8,405	1436,76	-11,9452
1840	758,15	4,4949	0,412	-0,8866	0,0013	490,36	-3,8753	574791,42	312,387	5,7442	-2,70E+02	2,2472	0,9868	0,00054	0,000221	-8,417	1433,66	-11,9195
1860	763,15	4,47235	0,410	-0,8909	0,0013	488,30	-3,8591	582397,92	313,117	5,7466	-2,77E+02	2,3058	0,9894	0,00053	0,000218	-8,430	950,76	-7,9046
1880	768,15	4,41483	0,409	-0,8950	0,0013	486,29	-3,8432	590054,42	313,859	5,7489	-2,84E+02	2,3641	0,9961	0,00053	0,000216	-8,438	1282,44	-10,6622
1900	773,15	4,3816	0,407	-0,8991	0,0013	-695,17	5,4939	597760,92	314,611	5,7513	4,45E+03	-36,9694	1,0000	0,00053	0,000214	-8,449	-6532,15	54,3083

Realizado por: Jara, Michel. 2021

Desviación estándar de la energía de activación calculada		
Método de Friedman	Método de KAS	Método de FWO
49,8748	14,2170	12,6257

Realizado por: Jara, Michel. 2021

ANEXO E. Base de datos de entrenamiento para diseñar la red neuronal artificial

Variables de entrada			Variable de salida
Tiempo (s)	Temperatura (K)	Peso(mg)	Ea (FWO)
0	298,15	12,9641	0
20	303,15	12,9628	99,9302
40	308,15	12,9406	59,3883
60	313,15	12,9570	42,8079
80	318,15	12,9116	33,7274
100	323,15	12,8819	27,9855
120	328,15	12,8009	24,0238
160	338,15	12,6239	18,9102
180	343,15	12,5470	17,1638
200	348,15	12,4823	15,7509
220	353,15	12,3655	14,5844
240	358,15	12,2756	13,6048
280	368,15	12,1713	12,0517
300	373,15	12,0805	11,4256
320	378,15	12,0275	10,8755
340	383,15	12,0013	10,3884
360	388,15	11,9703	9,9539
380	393,15	11,9038	9,5641
400	398,15	11,8859	9,2123
420	403,15	11,8848	8,8932
440	408,15	11,8486	8,6026
480	418,15	11,7875	8,0925
500	423,15	11,7671	7,8674
520	428,15	11,7452	7,6594
540	433,15	11,6731	7,4665
560	438,15	11,6689	7,2871
580	443,15	11,6650	7,1200
600	448,15	11,6054	6,9637
620	453,15	11,5341	6,8174
640	458,15	11,4888	6,6801
660	463,15	11,4579	6,5510
680	468,15	11,3560	6,4294
700	473,15	11,2904	6,3147
720	478,15	11,2060	6,2062
740	483,15	11,1499	6,1035
760	488,15	11,0437	6,0062
780	493,15	10,9469	5,9137
820	503,15	10,7564	5,7423
840	508,15	10,6416	5,6626
860	513,15	10,5289	5,5866
880	518,15	10,3903	5,5140

900	523,15	10,2361	5,4446
920	528,15	10,0143	5,3781
960	538,15	9,6126	5,2535
980	543,15	9,3703	5,1950
1000	548,15	9,1209	5,1388
1020	553,15	8,8581	5,0847
1040	558,15	8,5748	5,0327
1060	563,15	8,2767	4,9827
1080	568,15	8,0202	4,9345
1100	573,15	7,6895	4,8881
1120	578,15	7,3318	4,8432
1160	588,15	6,7951	4,7582
1180	593,15	6,6002	4,7178
1200	598,15	6,4492	4,6788
1220	603,15	6,2988	4,6410
1240	608,15	6,2223	4,6045
1260	613,15	6,0857	4,5691
1280	618,15	6,0543	4,5348
1300	623,15	5,9562	4,5015
1320	628,15	5,8700	4,4692
1340	633,15	5,8107	4,4379
1360	638,15	5,7645	4,4075
1400	648,15	5,6074	4,3494
1420	653,15	5,5884	4,3215
1440	658,15	5,5102	4,2944
1460	663,15	5,4477	4,2680
1480	668,15	5,4008	4,2423
1500	673,15	5,2966	4,2174
1520	678,15	5,2376	4,1930
1560	688,15	5,1374	4,1462
1580	693,15	5,0763	4,1237
1600	698,15	5,0466	4,1018
1620	703,15	4,9991	4,0803
1640	708,15	4,8881	4,0594
1660	713,15	4,8689	4,0390
1680	718,15	4,8235	4,0191
1700	723,15	4,7724	3,9997
1720	728,15	4,7415	3,9807
1760	738,15	4,6521	3,9440
1780	743,15	4,6189	3,9262
1800	748,15	4,5624	3,9089
1820	753,15	4,5174	3,8919
1840	758,15	4,4949	3,8753
1880	768,15	4,4148	3,8432

1900	773,15	4,3816	5,4939
------	--------	--------	--------

ANEXO F. Base de datos para validar la red neuronal artificial

Variables de entrada			Variable de salida
Tiempo (s)	Temperatura (K)	Peso(mg)	Ea (FWO)
140	333,15	12,7284	21,1244
260	363,15	12,2265	12,7706
460	413,15	11,8035	8,3367
800	498,15	10,8796	5,8259
940	533,15	9,8384	5,3145
1140	583,15	7,0373	4,8000
1380	643,15	5,6660	4,3780
1540	683,15	5,1894	4,1693
1740	733,15	4,7089	3,9621
1860	763,15	4,4724	3,8591

Realizado por: Jara, Michel. 2021

ANEXO G. Script de la normalización de los datos de entrenamiento

```
% EXTRACCIÓN DE BASE DE DATOS DE EXCEL
```

```
%Leer base de datos de Excel
```

```
Extraer=readtable('Datos TGA.xlsx','Sheet','Datos de entrenamiento');
```

```
%Convertir la tabla a Matriz Numérica
```

```
Datose = table2array(Extraer);
```

```
% NORMALIZACIÓN DE ENTRADAS(TGA)
```

```
entradas=Datose(1:3,:);
```

```
%Tiempo
```

```
t_max=max(entradas(1,:));
```

```
t_min=min(entradas(1,:));
```

```
t_norm =[(entradas(1,1:end)-t_min)/(t_max-t_min)];
```

```
%Temperatura
```

```
T_max=max(entradas(2,:));
```

```
T_min=min(entradas(2,:));
```

```
T_norm =[(entradas(2,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
```

```
%Peso
```

```
p_max=max(entradas(3,:));
```

```
p_min=min(entradas(3,:));
```

```
p_norm =[(entradas(3,1:end)-p_min)/(p_max-p_min)];
```

```
%Entradas normalizadas
```

```
Entradas_norm=[t_norm;T_norm;p_norm];
```

```
%Normalización de la salida
```

```
salida=Datose(4,:);
```

```
%Energía de activación
```

```
Ea_max=max(salida(1,:));
```

```
Ea_min=min(salida(1,:));
```

```
Salidas_norm =[(salida(1,1:end)-Ea_min)/(Ea_max-Ea_min)];
```


ANEXO H. Script de la normalización de los datos de validación

`%Leer datos de validación desde la Hoja de Excel`

```
Extraerv=readtable('Datos TGA.xlsx','Sheet','Datos de validación');
```

`%Convertir la tabla a Matriz Numérica`

```
Datosv = table2array(Extraerv);
```

`%Cargar archivo net y parámetros maximos y minimos de la Salida de la red neuronal`

```
load('RNA375BR.mat');
```

`%Normalización de datos de Entrada`

```
entradasv=Datosv(1:3,:);
```

`%tiempo`

```
t_normv =[(entradasv(1,1:end)-t_min)/(t_max-t_min)];
```

`%temperatura`

```
T_normv =[(entradasv(2,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
```

`%peso`

```
p_normv =[(entradasv(3,1:end)-p_min)/(p_max-p_min)];
```

`%Entradas normalizadas`

```
Ent_normval=[t_normv;T_normv;p_normv];
```

ANEXO I. Diseño y entrenamiento de la red neuronal artificial

```
% DISEÑO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 16-ene-2021 14:27:56
% This script assumes these variables are defined:
% Entradas_norm - input data.
% Salidas_norm - target data.

x = Entradas_norm;
t = Salidas_norm;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help ntrain
% 'trainlm' is usually fastest.
% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
% 'trainsecg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
trainFcn = 'trainbr'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 375;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
% For a list of all processing functions type: help nprocess
net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% For a list of all data division functions type: help nndivision
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

% Choose a Performance Function
% For a list of all performance functions type: help nnperformance
```

```

net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error

% Choose Plot Functions
% For a list of all plot functions type: help nnplot
net.plotFns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
    'plotregression', 'plotfit'};

% Train the Network
[net,tr] = train(net,x,t);

% Test the Network
y = net(x);
e = gsubtract(t,y);
performance = perform(net,t,y)

% Recalculate Training, Validation and Test Performance
trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
valTargets = t .* tr.valMask{1};
testTargets = t .* tr.testMask{1};
trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
valPerformance = perform(net,valTargets,y)
testPerformance = perform(net,testTargets,y)

% View the Network
view(net)

% Plots
% Uncomment these lines to enable various plots.
% figure, plotperform(tr)
% figure, plottrainstate(tr)
% figure, ploterrhist(e)
% figure, plotregression(t,y)
% figure, plotfit(net,x,t)

% Deployment
% Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
% See the help for each generation function for more information.
if (false)
    % Generate MATLAB function for neural network for application

```

```

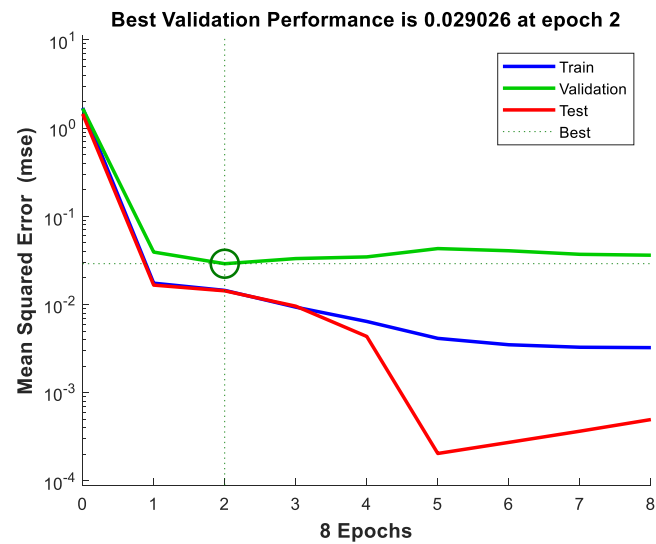
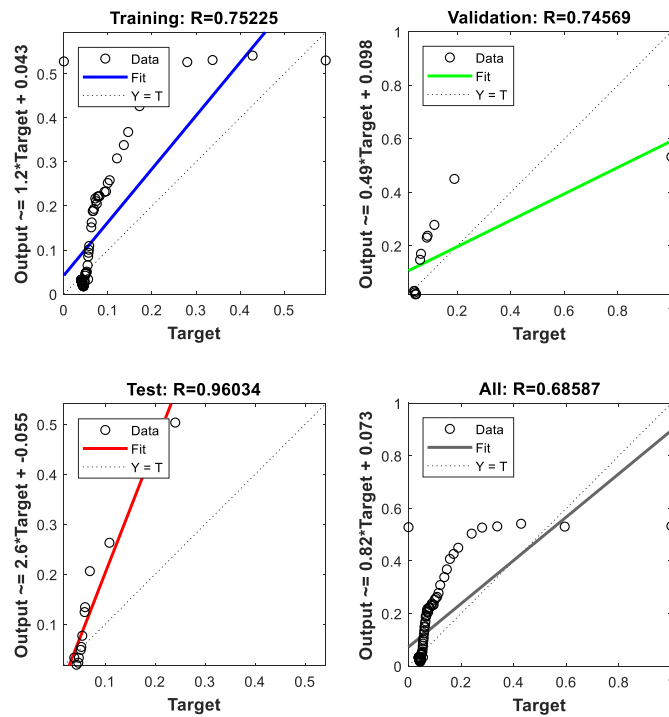
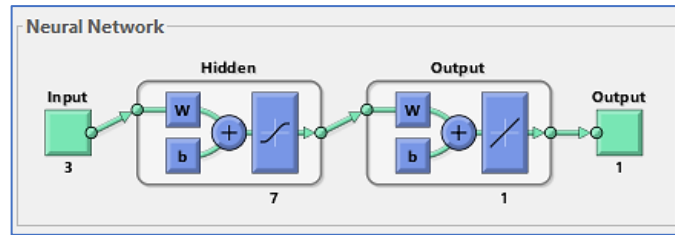
% deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
% tools, or simply to examine the calculations your trained neural
% network performs.
genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
    % generation with MATLAB Coder tools.
    genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
    % Simulink Coder tools.
    gensim(net);
end

% RESULTADOS
% Predicción de energía de activación normalizada
Ea_pred_Norm = net(Entradas_norm(1:end,:))
% Energía de activación predicha
Ea_predicha = [Ea_pred_Norm(1,:).*(Ea_max-Ea_min)+Ea_min]';

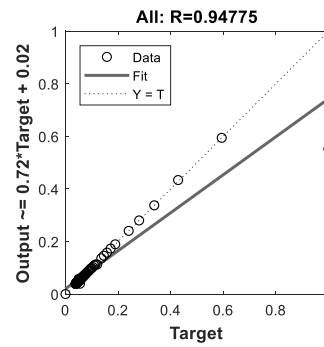
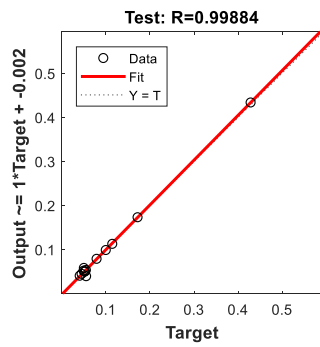
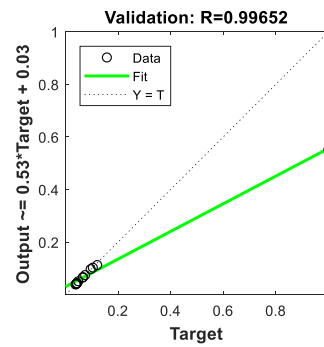
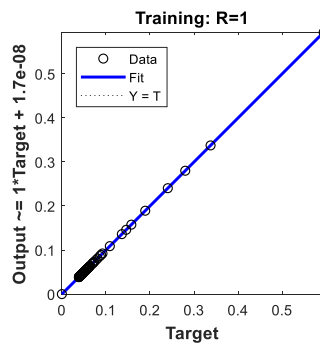
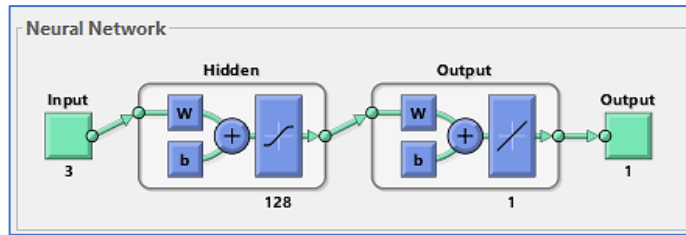
```

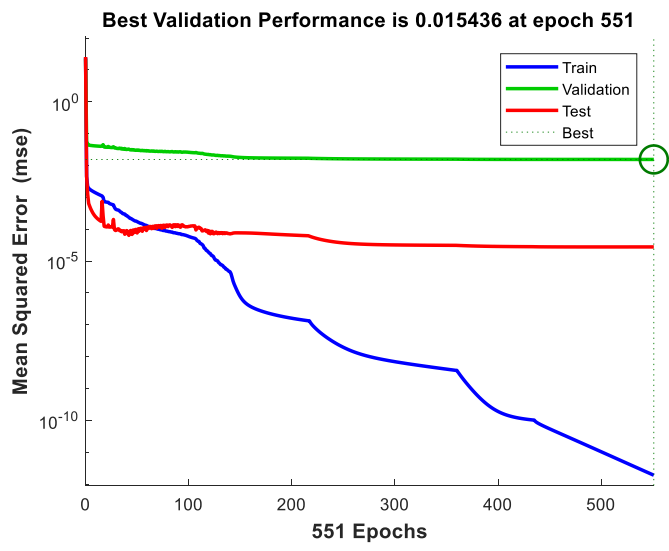
ANEXO J. Entrenamiento de la red modificando la cantidad de neuronas en la capa oculta

- Resultados con 7 neuronas en la capa oculta

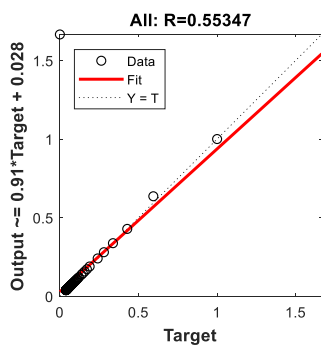
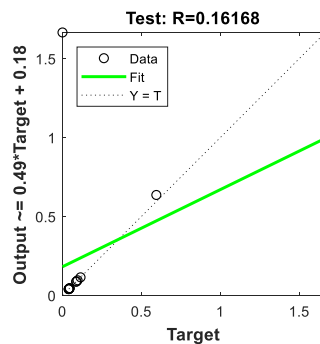
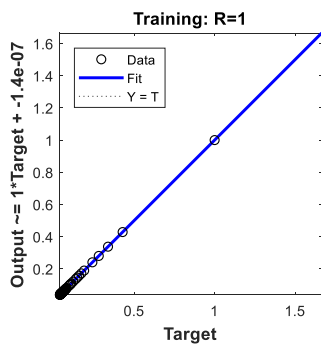
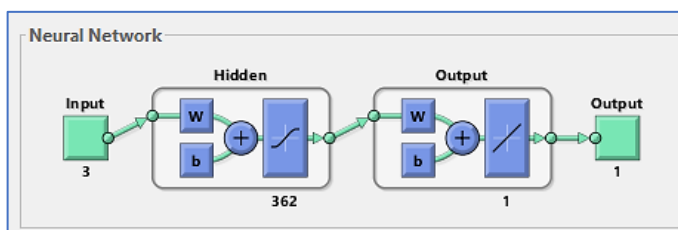


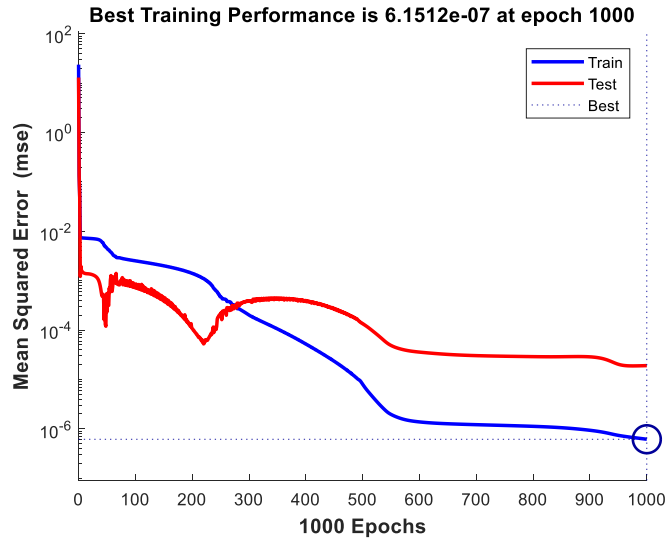
- Resultados con 128 neuronas en la capa oculta



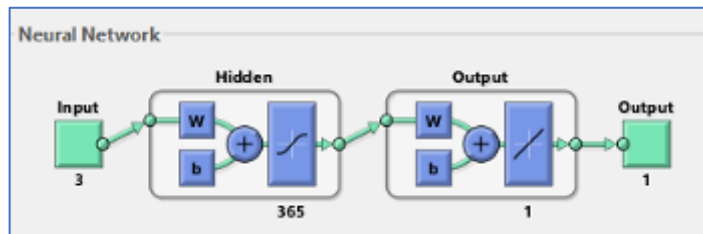


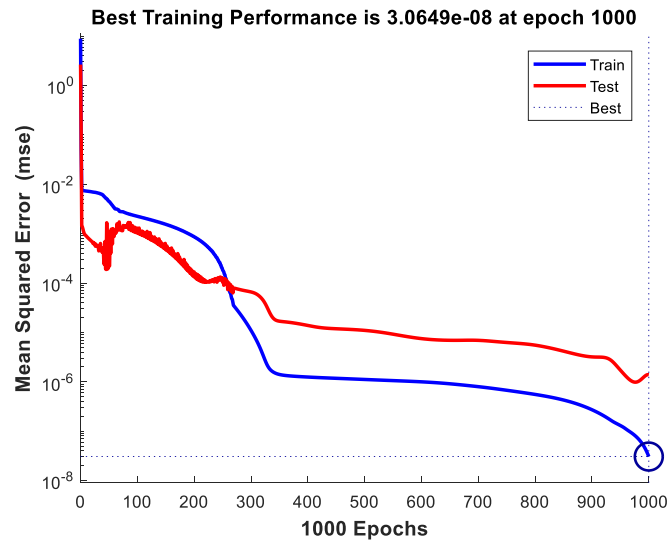
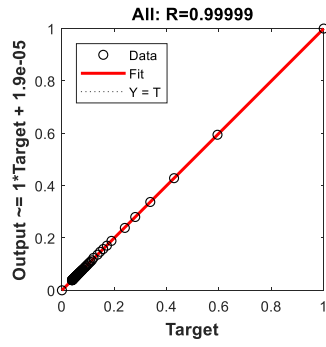
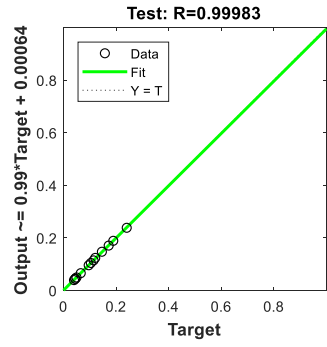
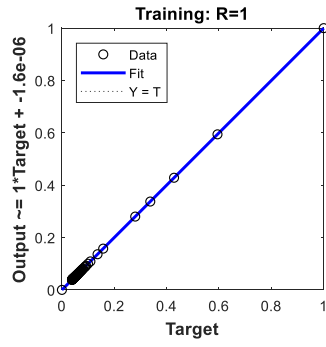
- Resultados con 362 neuronas en la capa oculta





- Resultados con 375 neuronas en la capa oculta





ANEXO K. Resultados predichos por la red neuronal artificial en el entrenamiento

Energía de activación por el método de FWO	
Ea Real (TGA)	Ea Predicha (RNA)
0	0,0001
99,9302	99,9300
59,3883	59,3883
42,8079	42,8077
33,7274	33,7265
27,9855	27,9913
24,0238	24,0128
18,9102	18,9280
17,1638	17,1466
15,7509	15,7569
14,5844	14,5789
13,6048	13,6019
12,0517	12,0529
11,4256	11,4305
10,8755	10,8752
10,3884	10,3812
9,9539	9,9581
9,5641	9,5637
9,2123	9,2179
8,8932	8,9223
8,6026	8,6160
8,0925	8,0881
7,8674	7,8672
7,6594	7,6628
7,4665	7,4638
7,2871	7,2902
7,1200	7,1197
6,9637	6,9623
6,8174	6,8199
6,6801	6,6794
6,5510	6,5476
6,4294	6,4300
6,3147	6,3148
6,2062	6,2065
6,1035	6,1074
6,0062	6,0056
5,9137	5,9110
5,7423	5,7421
5,6626	5,6612
5,5866	5,5895
5,5140	5,5145

5,4446	5,4427
5,3781	5,3708
5,2535	5,2526
5,1950	5,1972
5,1388	5,1392
5,0847	5,0827
5,0327	5,0322
4,9827	4,9843
4,9345	4,9341
4,8881	4,8788
4,8432	4,8178
4,7582	4,7515
4,7178	4,7166
4,6788	4,6794
4,6410	4,6402
4,6045	4,6073
4,5691	4,5696
4,5348	4,5357
4,5015	4,5002
4,4692	4,4668
4,4379	4,4357
4,4075	4,4071
4,3494	4,3529
4,3215	4,3233
4,2944	4,2963
4,2680	4,2680
4,2423	4,2365
4,2174	4,2198
4,1930	4,1933
4,1462	4,1416
4,1237	4,1226
4,1018	4,1029
4,0803	4,0867
4,0594	4,0760
4,0390	4,0462
4,0191	4,0213
3,9997	4,0022
3,9807	3,9664
3,9440	3,9602
3,9262	3,9232
3,9089	3,9041
3,8919	3,7477
3,8753	3,5349
3,8432	3,8450

5,4939	5,4931
--------	--------

ANEXO L. Script de validación de la red neuronal artificial

%Validación de la red neuronal

```
PropPred_val = net(Ent_normval(1:end,:));
```

% Resultados

%Energía de activación predicha-----

```
Ea_predval = [PropPred_val(1,:).*(Ea_max-Ea_min)+Ea_min]';
```

% Gráficos

```
salidav=Datosv(4,:);
```

```
Valor_RealVal=salidav'
```

% Valores reales por TGA y valores predichos por la RNA

```
Realval= Valor_RealVal';
```

```
Prediccionval= Ea_predval';
```

```
Valor_PredichoVal=Ea_predval
```

%Energía de activación

```
figure;
```

```
plot(Realval(1,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccionval(1,:));grid;legend('Ea Real','Ea Predicha')
```

```
xlabel('Experimentaciones')
```

```
ylabel('Energía de activación (KJ/mol)')
```

```
title('Predicción de la Energía de activación por el método de Flynn-Wall-Ozawa (FWO)')
```

ANEXO M. Resultados predichos por la red en la validación

Energía de activación por el método de FWO		
Ea Real (TGA)	Ea Predicha (RNA)	Error de predicción (%)
21,1244	20,9977	0,5999
12,7706	12,7793	0,0679
8,3367	8,3266	0,1213
5,8259	5,8349	0,1543
5,3145	5,3095	0,0949
4,8000	4,7812	0,3914
4,3780	4,3794	0,0311
4,1693	4,1653	0,0957
3,9621	3,9322	0,7538
3,8591	3,6404	5,6662

Realizado por: Jara, Michel. 2021

ANEXO N. Script de la interfaz gráfica de usuario

```
function varargout = GUI(varargin)
%GUI MATLAB code file for GUI.fig
% See also: GUIDE, GUIDATA, GUIHANDLES
% Edit the above text to modify the response to help GUI
% Last Modified by GUIDE v2.5 30-Jan-2021 23:16:24
% Begin initialization code - DO NOT EDIT
gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
                  'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
                  'gui_OpeningFcn', @GUI_OpeningFcn, ...
                  'gui_OutputFcn', @GUI_OutputFcn, ...
                  'gui_LayoutFcn', [], ...
                  'gui_Callback', []);
if nargin && ischar(varargin{1})
    gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end

if nargout
    [varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
    gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% End initialization code - DO NOT EDIT
% --- Executes just before GUI is made visible.
function GUI_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
% Choose default command line output for GUI
handles.output = hObject;

% Update handles structure
guidata(hObject, handles);

% UIWAIT makes GUI wait for user response (see UIRESUME)
% uiwait(handles.figure1);
% --- Outputs from this function are returned to the command line.
function varargout = GUI_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)
% varargout cell array for returning output args (see VARARGOUT);
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
```

```

% handles  structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Get default command line output from handles structure
varargout{1} = handles.output;

% --- Executes on button press in Calcular.
function Calcular_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject  handle to Calcular (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles  structure with handles and user data (see GUIDATA)
Tiempo=str2double(get(handles.Tiempo,'String'));
Temperatura=str2double(get(handles.Temperatura,'String'));
Peso=str2double(get(handles.Peso,'String'));

%Normalizar Entradas
t_n =[(Tiempo-0)/(1900-0)];
T_n =[(Temperatura-298.15)/(773.15-298.15)];
P_n =[(Peso-4.3816)/(12.9641-4.3816)];

% Variable con las entradas normalizadas
EntradasRNA=[t_n;T_n;P_n];
assignin('base','Entradas_RNA',EntradasRNA)

% Cargar la red neuronal artificial entrenada
Variables_RNA=load('RNA375BR.mat');
assignin('base','Variables_RNA',Variables_RNA);
RNA = getfield (Variables_RNA, 'net');
assignin('base','RNA',RNA);

%cargar salidas aprendida%
Eamax = getfield (Variables_RNA, 'Ea_max');
Eamin = getfield (Variables_RNA, 'Ea_min');

%Propiedades de la red neuronal artificial
Propiedades_RNA = RNA(EntradasRNA);
assignin('base','Propiedades_RNA',Propiedades_RNA)

%Resultados de la red neuronal artificial
Ea_predicho = Propiedades_RNA(1,:).*(Eamax-Eamin)+Eamin

```

```

assignin('base','Ea_Predicho',Ea_predicho)

%Mostrar resultado en Interfaz
set(handles.Ea,'String',Ea_predicho);

% --- Executes on button press in Limpiar.
function Limpiar_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Limpiar (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
%Limpiar Entradas
set(handles.Tiempo,'String','');
set(handles.Temperatura,'String','');
set(handles.Peso,'String','');
%Limpiar Salida
set(handles.Ea,'String','');
clc;

function Ea_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Ea (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Hints: get(hObject,'String') returns contents of Ea as text
%       str2double(get(hObject,'String')) returns contents of Ea as a double

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function Ea_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Ea (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
%       See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function Tiempo_Callback(hObject, eventdata, handles)

```



```

% hObject handle to Tiempo (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Hints: get(hObject,'String') returns contents of Tiempo as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of Tiempo as a double
Tiempo=str2double(get(hObject,'String'))
assignin('base','Tiempo',Tiempo)

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function Tiempo_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to Tiempo (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function Temperatura_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to Temperatura (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Hints: get(hObject,'String') returns contents of Temperatura as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of Temperatura as a double
Temperatura=str2double(get(hObject,'String'))
assignin('base','Temperatura',Temperatura)

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function Temperatura_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to Temperatura (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.

```

```
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function Peso_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Peso (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Hints: get(hObject,'String') returns contents of Peso as text
%        str2double(get(hObject,'String')) returns contents of Peso as a double
Peso=str2double(get(hObject,'String'))
assignin('base','Peso',Peso)
```

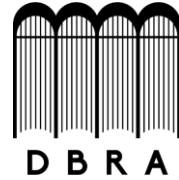
```
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
```

```
function Peso_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Peso (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    empty - handles not created until after all CreateFcns called
```

```
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
```

```
% See ISPC and COMPUTER.
```

```
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE
UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL**

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 18 / 10 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Michel Abigail Jara Romero</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniera Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.</i>

**LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**

Firmado digitalmente por
LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Nombre de
reconocimiento (DN):
c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=060276697
4, cn=LUIS ALBERTO
CAMINOS VARGAS
Fecha: 2021.10.18
09:37:02 -05'00'



0730-DBRAI-UPT-2021