



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

**PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO
TERMOGRAVIMÉTRICO DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN
DE LOS RESIDUOS DE CAFÉ MEDIANTE EL USO REDES
NEURONALES ARTIFICIALES**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: LENIN STALIN VACACELA ASADOBAY

DIRECTOR: Ing. MABEL MARIELA PARADA RIVERA

Riobamba – Ecuador

2022

© 2022, **Lenin Stalin Vacacela Asadobay**

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, LENIN STALIN VACACELA ASADOBAY, 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, 11 de agosto de 2022



Lenin Stalin Vacacela Asadobay

060442735-1

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Propuesta Tecnológica, **PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO TERMOGRAVIMÉTRICO DE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN DE LOS RESIDUOS DE CAFÉ MEDIANTE EL USO REDES NEURONALES ARTIFICIALES**, realizado por el señor **LENIN STALIN VACACELA ASADOBAY**, 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. Adrián Alejandro Rodríguez Pinos PRESIDENTE DEL TRIBUNAL		2022-08-11
Ing. Mabel Mariela Parada Rivera DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN		2022-08-11
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada MIEMBRO DEL TRIBUNAL		2022-08-11

DEDICATORIA

El presente trabajo de titulación se lo dedico a Dios por darme la oportunidad de cumplir una meta más y formarme como profesional, a mis padres que día a día estuvieron conmigo en este camino tan largo que pese a las dificultades presentadas supieron guiarme. A mis hermanas que con tan grandiosos consejos nunca dejaron que desmaye en los momentos difíciles. A mi hija Brittany que fue la parte esencial en este logro y a mi esposa que con esa voz de aliento supo brindarme su apoyo incondicional.

Especialmente a mis abuelitos que desde el cielo siempre me dieron su bendición para no dejarme solo. Esto es dedicado a ustedes, un sueño que se hizo realidad. Gracias infinitamente a todos.

Lenin

AGRADECIMIENTO

A Dios por brindarme salud y las bendiciones para alcanzar este logro, así también a mis padres que gracias a su esfuerzo y sacrificio se pudo culminar con éxito mi carrera estudiantil.

A cada uno de mis docentes por sus conocimientos brindados, que con experiencias buenas y malas supe cumplir con mi objetivo.

A la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo por permitirme formar como profesional, de la misma manera a mi Tutora Ing. Mabel Parada y a mi miembro colaborador Ing. Darío Guamán por brindarme su apoyo y ayuda incondicional junto a sus consejos durante este trabajo de titulación.

Lenin

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
RESUMEN.....	xiii
SUMMARY.....	xiv

CAPÍTULO I

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

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	4
2.1. Estado del arte.....	4
2.2. Bases Teóricas.....	6
2.2.1. <i>Termogravimetría</i>	6
2.2.2. <i>Modelos cinéticos</i>	6
2.2.3. <i>Neurona Artificial</i>	7
2.2.4. <i>Redes neuronales artificiales</i>	8
2.2.5. <i>Arquitectura de red neuronal</i>	8
2.2.5.1. <i>Capa de entrada</i>	8
2.2.5.2. <i>Capas intermedias u ocultas</i>	9
2.2.5.3. <i>Capa de salida</i>	9
2.2.6. <i>Entrenamiento de la red neuronal</i>	9
2.3. Marco Legal.....	10
2.3.1. <i>Matlab</i>	11

CAPÍTULO III

3.	METODOLOGÍA	12
3.1.	Localización del proyecto	13
3.2.	Determinación de variables de estudio	13
3.2.1.	<i>Operacionalización de variables</i>	14
3.2.1.1.	<i>Selección de variables</i>	14
3.2.1.2.	<i>Operación de variables</i>	15
3.3.	Análisis termogravimétrico(TGA)	15
3.3.1.	<i>Residuos de café</i>	15
3.3.2.	<i>Secado natural</i>	16
3.3.3.	<i>Secado forzado</i>	16
3.3.4.	<i>Molienda</i>	16
3.3.5.	<i>Tamizado</i>	16
3.3.6.	<i>Análisis termogravimétrico</i>	16
3.4.	Establecimiento de la base de datos	17
3.4.1.1.	<i>Determinación de orden de reacción</i>	17
3.4.1.2.	<i>Análisis de modelos cinéticos para el cálculo de energía de activación</i>	19
3.5.	Diseño de la red neuronal artificial	22
3.5.1.	<i>Entradas y salidas en la red neuronal artificial</i>	22
3.5.2.	<i>Normalización de datos</i>	23
3.5.2.1.	<i>Red neuronal artificial</i>	24
3.6.	Entrenamiento de la red neuronal artificial	25
3.7.	Análisis Estadístico	29

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	31
4.1.	Cronograma	31
4.2.	Presupuesto	32
4.3.	Recursos materiales	32
4.3.1.	<i>Recursos humanos</i>	32
4.3.2.	<i>Recursos materiales</i>	32
4.4.	Resultados	33
4.4.1.	<i>Análisis termogravimétrico</i>	33
4.4.2.	<i>Resultados de la energía de activación</i>	33
4.4.2.1.	<i>Método de cinética libre</i>	33

4.4.2.2. <i>Método de Friedman</i>	35
4.4.2.3. <i>Método de Coast</i>	35
4.4.3. <i>Desarrollo de la red neuronal artificial</i>	36
4.4.3.1. <i>Normalización de los datos</i>	36
4.4.3.2. <i>Diseño de la Red Neuronal</i>	37
4.4.4. <i>Análisis estadístico de los datos predichos</i>	39
4.4.4.1. <i>Análisis ANOVA</i>	39
4.4.4.2. <i>Análisis de Medias</i>	40
CONCLUSIONES	41
RECOMENDACIONES	42
BIBLIOGRAFÍA	
ANEXOS	

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2:	Estudios relacionados a la energía de activación.....	5
Tabla 2-2:	Modelos cinéticos.....	7
Tabla 1-3:	Características geográficas del cantón Caluma	13
Tabla 2-3:	Modelos cinéticos.....	14
Tabla 3-3:	Funciones para la determinación de energía de activación método de Coast.....	14
Tabla 4-3:	Operación de variables	15
Tabla 5-3:	Coefficientes para determinación de orden	18
Tabla 6-3:	Coefficientes del método de Friedman	20
Tabla 7-3:	Coefficientes del método de Coast	21
Tabla 8-3:	Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial.....	23
Tabla 9-3:	Clasificación de datos para entrenamiento de la red	25
Tabla 1-4:	Cronograma de actividades	31
Tabla 2-4:	Presupuesto del proyecto.....	32
Tabla 3-4:	Recursos humanos del proyecto	32
Tabla 4-4:	Recursos materiales utilizados en el proyecto.....	32
Tabla 5-4:	Especificaciones del ensayo	33
Tabla 6-4:	Análisis ANOVA	39
Tabla 7-4:	Tabla de medias.....	40

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2:	Red neuronal.....	8
Figura 2-2:	Arquitectura de la red neuronal	9
Figura 1-3:	Metodología del trabajo.....	12
Figura 2-3:	Localización geográfica del cantón Caluma.....	13
Figura 3-3:	Procedimiento para el análisis TGA de los residuos de café.....	15
Figura 4-3:	Resultados del análisis TGA de los residuos de café en función de la conversión 17	
Figura 5-3:	Regresión lineal simple para la determinación del orden de reacción.	18
Figura 6-3:	Energía de activación por método de cinética libre.....	19
Figura 7-3:	Regresión simple del método de Friedman	20
Figura 8-3:	Regresión simple del método de Coast	21
Figura 9-3:	Energía de activación en función de variables del análisis TGA	22
Figura 10-3:	Normalización de datos de entrada.....	23
Figura 11-3:	Normalización de datos de salida	24
Figura 12-3:	Aplicación para redes neuronales en Matlab.....	24
Figura 13-3:	Entradas y salidas normalizadas.....	25
Figura 14-3:	Entrenamiento Levenberg-Marquardt con 550 neuronas en la capa oculta	26
Figura 15-3:	Entrenamiento Scaled Conjugate Gradient con 550 neuronas en la capa oculta	27
Figura 16-3:	Entrenamiento Bayesi-Regularizationy con 550 neuronas en la capa oculta.	28
Figura 17-3:	Arquitectura de la red neuronal artificial.....	29
Figura 18-3:	Metodología de análisis estadístico	30
Figura 2-4:	Energía de activación por cinética libre	34
Figura 3-4:	Energía de activación por el método de Friedman	35
Figura 4-4:	Energía de activación por el método de Coast	36
Figura 5-4:	Arquitectura de red con 550 neuronas.....	37
Figura 6-4:	Curva de aprendizaje de red de 550 neuronas	37
Figura 7-4:	Correlación de red de 550 neuronas	38
Figura 8-4:	Comparación de la energía de activación real y la predicha	39

ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A:** ENTRENAMIENTO DE RED
- ANEXO B:** RESULTADOS DEL MODELO DE CINÉTICA LIBRE
- ANEXO C:** RESULTADO CINÉTICA DE FRIEDMAN
- ANEXO D:** RESULTADOS CINÉTICA DE COAST
- ANEXO E:** NEURONAL NET FITTING

RESUMEN

El desarrollo de redes neuronales artificiales como herramienta para la evaluación energética de los residuos orgánicos ha tomado relevancia dentro del campo científico. Por ello, el trabajo tiene como objetivo desarrollar una red neuronal con capacidad de predicción de la energía de activación de los residuos de café. Los datos de la degradación térmica de los residuos de café se obtuvieron mediante análisis termogravimétrico, dando resultados de pérdida de peso (mg) en función de intervalos de temperatura (°C) y tiempo (s) a una tasa de calentamiento de 15 °C/min, atmósfera inerte a 15ml/min en rangos de temperatura de 25-500 °C, resultados que fueron evaluados mediante modelos cinéticos como cinética libre, Friedman y Coast, donde el método de Coast por regresión simple es el que tiene un r^2 82.3706% y un factor de correlación de 0.907582 por ende este modelo se utilizó para el cálculo de la energía de activación. La red neuronal fue diseñada en Matlab misma que cuenta con 3 neuronas de entrada como son tiempo, temperatura y peso de los residuos de café generados por el análisis termogravimétrico, dentro de su arquitectura tiene 550 neuronas en la capa oculta y 1 neurona de salida correspondiente a la energía de activación predicha, su algoritmo de regularización es bayesiana con un coeficiente de correlación de 0.999 y error cuadrático medio de 9.92E-07. Los resultados predichos por la red neuronal artificial fueron validados estadísticamente por el método de comparación de muestras, en este caso la energía de activación calculada convencionalmente y energía de activación predicha, donde el valor de P es de 0.9993 indica que no existe una diferencia estadísticamente significativa ya que este es mayor que 0.05 con un nivel de confianza del 95%.

Palabras clave: < TECNOLOGÍA>, < ENERGÍA>, < CINÉTICA>, < MODELO>, <PREDICCIÓN>

LUIS ALBERTO
CAMINOS
VARGAS

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento
(DN): c=EC, l=RIOBAMBA,
serialNumber=D602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.04.05 17:26:32
-05'00'



0935-DBRAI-UTP-2021

SUMMARY

The aim of this work is to develop a neural network with the ability to predict the activation energy of coffee waste. Data on the thermal degradation of coffee residues were obtained by thermogravimetric analysis, obtaining weight loss results (mg) based on intervals of temperature (°C) and time (s) at a heating rate of 15 °C / min, inert atmosphere at 15ml / min in temperature ranges of 25-500 °C, Results that were evaluated using kinetic models such as free kinetics, Friedman and Coast, where the Coast method by simple regression is the one that has an r^2 82.3706% and a correlation factor of 0.907582. Therefore, this model was used to calculate the energy activation. The neural network was designed in Matlab the same one that has 3 input neurons such as time, temperature and weight of the coffee residues generated by the thermogravimetric analysis. Within its architecture, it has 550 neurons in the hidden layer and 1 output neuron corresponding to the predicted activation energy. Its regularization algorithm is Bayesian with a correlation coefficient of 0.999 and mean square error of 9.92E-07. The predicted results by the artificial neural network were statistically validated by the sample comparison method. In this case, the conventionally calculated activation energy and predicted activation energy, where the value of P is 0.9993 indicates that there is no statistically significant difference since it is greater than 0.05 with a confidence level of 95%.

Keywords: <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY>, <ENERGY>, <KINETICS>, <PREDICTION>, <ALGORITHM>, <ACTIVATION>, <THERMOGRAVIMETRY>, <NEURONAL NETWORK>.



CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

Los residuos generados en el sector agrícola se han convertido en el principal recurso para la generación de energía debido a su gran potencial energético. La biomasa es cada vez más relevante como portador de energía debido a su alta diversidad y disponibilidad. Incluye plantas, restos de materiales agrícolas y procesos forestales, así como desechos orgánicos, industriales, animales y humanos. Los desechos agrícolas, en particular, contienen altas cantidades de componentes orgánicos (celulosa, hemicelulosa, lignina y cantidades menores de otros orgánicos) y poseen un alto contenido energético (Fernandes & Costa 2010). La biomasa se puede mejorar mediante pirólisis, que es una forma de tratamiento térmico que descompone los materiales orgánicos en formas líquidas, sólidas y gaseosas en ausencia de oxígeno. Todas las fracciones de salida tienen potencial como combustibles para el transporte (Hossain & Davies 2013). La mayoría de los procesos de mejora de la biomasa están optimizados para la biomasa leñosa; sin embargo, por razones económicas y ambientales solo se puede utilizar una parte de la biomasa forestal disponible. En este contexto, además de la biomasa forestal, es fundamental utilizar también residuos agrícolas con fines energéticos. La extrema variedad de biomasa exige una extensa investigación sobre el impacto de su composición en un comportamiento pirolítico (Burhenne et al. 2013).

La conversión de biomasa en combustibles líquidos, gaseosos y otros productos estimularon el crecimiento de investigación y desarrollo en todo el mundo. Biomasa lignocelulósica (LB), que incluye principalmente bosques desechos, residuos agrícolas, etc., aporta una gran mayoría de materia prima de biomasa sin explotar (Hu et al. 2016).

1.2. Planteamiento del problema

La creciente preocupación por el uso de fuentes fósiles y los cambios repentinos de su precio en el mercado, han obligado a los países a aumentar la participación de las fuentes alternativas en la producción de energía. La biomasa es reconocida como el recurso energético renovable y de alta producción con cero emisiones netas de CO₂ en el mundo (Santos et al., 2020, p.1276). Además, a partir de la biomasa es posible generar no solo energía sino también otros productos químicos de alto valor mediante la aplicación de diferentes tecnologías. La pirólisis es la descomposición térmica de la biomasa para producir productos sólidos, líquidos y gaseosos, proceso que se da en ausencia de oxígeno. Las investigaciones sobre los comportamientos pirolíticos de la biomasa en la región de alta temperatura desempeñan un papel importante en términos de obtener información

sobre el proceso, proporcionar una mejor comprensión de los parámetros del proceso y diseño del equipo.

El análisis termogravimétrico (TGA) se ha convertido en un procedimiento de laboratorio simple pero necesario al momento de analizar el comportamiento térmico de diferentes materiales en este caso de los residuos de café, proporcionando información importante para el análisis cinético como pérdida de masa en función del 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. 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 lo tanto, las redes neuronales artificiales se pueden aplicar para modelar la descomposición de la biomasa y predecir la energía de activación de los residuos de café 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(Hu et al. 2016).

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Realizar un modelo de predicción del comportamiento termogravimétrico de la energía de activación de los residuos de café mediante el uso de redes neuronales artificiales.

1.3.2. Objetivos Específicos

- Obtener datos de la degradación térmica de los residuos de café mediante pruebas termogravimétricas.
- Cuantificar la energía de activación de los residuos de café en base a modelos cinéticos propuestos.
- Diseñar la estructura de la red neuronal artificial que permita obtener resultados con la mayor precisión respecto a la energía de activación.
- Validar los resultados predichos por la red neuronal utilizando un análisis estadístico frente a los calculados de forma convencional.

1.4. Justificación del proyecto

Ante la creciente demanda por la generación de nuevos métodos de optimización para la obtención de modelos cinéticos y variables como la energía de activación, utilizar redes neuronales artificiales se ha convertido en una de las herramientas que mejor se ajusta para el manejo de datos como son los resultados del análisis termogravimétrico de los residuos de café generados en el cantón Caluma, disminuyendo de esta manera cálculos ambiguos que conllevan a largos procedimientos de análisis y de trabajo en laboratorio.

Predecir una de las variables más importantes como es la energía de activación a partir de la ecuación cinética que mejor describa la degradación de la biomasa en este caso conformada por los residuos de cáscara de café, resulta de vital importancia en la búsqueda y generación de nuevas fuentes de energía sea en forma de combustibles por métodos pirolíticos o como fuente de calor por métodos de gasificación para procesos industriales que requieran de estos procesos de conversión; es notorio que hoy en día la urgencia por la búsqueda de alternativas eficientes que replacen de alguna manera a los combustibles fósiles está en continuo crecimiento, es así que dentro de este campo, la revalorización de la biomasa mediante la predicción de la energía de activación de los residuos es una de las alternativas más viables y atractivas para los investigadores.

1.5. Alcance

Este proyecto tecnológico tendrá la capacidad de predecir la energía de activación, como parámetro principal de la cinética de biomasa para su valoración energética. El desarrollo de modelos predictivos se convierte en una herramienta de alto valor para la municipalidad del cantón Caluma por su versatilidad y gran capacidad de análisis de residuos agrícolas, este tipo de investigaciones le convierten a este cantón como uno de los pioneros en el Ecuador en el aprovechamiento de residuos del agro para generación de energía limpia.

Uno de los enfoques del trabajo de integración curricular es brindar a los estudiantes de la carrera de ingeniería química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo una base investigativa para el desarrollo de trabajos relacionados a la generación de energía limpia como principal alternativa a los combustibles derivados del petróleo.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del arte

En el siguiente trabajo “Cinética termogravimétrica de la pirólisis lenta de biomasa lignocelulósica mediante el modelo de energía de activación distribuida, la deconvolución de Fraser-Suzuki y el método isoconversional” El resultado del procedimiento sin modelo mostró que la pirólisis lignocelulósica según el modelo de reacción de un paso está dominado por los efectos de difusión. Sin embargo, las características complejas de las variaciones son causadas por cambios en el mecanismo, que son difíciles de determinar.

El modelo de energía de activación distribuida se ajusta muy bien a los datos experimentales. Según el modelo de energía de activación distribuida (DAEM), la energía de activación de pseudocomponentes sigue el orden de: lignina> celulosa> hemicelulosa. Tales resultados cumplen el orden de termo estabildades de los componentes: lignina)> hemicelulosas> celulosa. La distribución de energía de activación de la lignina es la más amplia e indicó que la descomposición de la lignina cubre todo el rango de temperatura pirolítica(Hu et al. 2016).

En otro intento de calcular la energía de activación se menciona al siguiente artículo “Predicción de energía de activación de residuos de biomasa basada en diferentes topologías de redes neuronales” El trabajo analiza el rendimiento de predicción de datos térmicos de ANN para más de una biomasa, así como la fiabilidad de estos datos de ANN predichos en los pasos posteriores. Se seleccionaron residuos forestales lignocelulósica (LFR) y residuos de aceite de oliva (OOR) como materias primas de biomasa. El rendimiento de predicción de datos térmicos de ANN se realizó sobre la base de dos enfoques mediante el desarrollo; dos redes individuales para cada materia prima, y una red para ambas materias primas. Después al fijar la estructura principal de las redes, se realizaron estudios de optimización para determinar la mejor configuración de red. De esta forma, también se pretendía discutir el efecto de los parámetros internos de la RNA en la capacidad de predicción general para problemas más complejos. En el paso final, los datos predichos se aplicaron para calcular las energías de activación en base a tres modelos cinéticos convencionales y los resultados se compararon con los calculados utilizando datos térmicos experimentales. Al final, se concluyó que el dato térmico experimental encaja bastante bien con los datos predichos de ANN ($R^2 > 0,99$), pero se requería una topología de red más compleja para la red combinada debido a la complejidad del conjunto de datos. Más importante aún, se muestra que los datos predichos pueden ser aplicables para los pasos posteriores, como en el cálculo de las energías de activación usando diferentes modelos(Çepelioğullar et al. 2018).

Según Lin et al. (2021) en su trabajo “Análisis cinético isoconvensional de reacciones de pirólisis superpuestas: el caso de la biomasa lignocelulósica y las mezclas con antracita” La función de desconvolución por Fraser-Suzuki resolvió las curvas de velocidad superpuestas en tres pseudocomponentes independientes con alta precisión, mejorando los coeficientes de correlación y los rangos de conversión razonables para la cinética isoconvensional. Las influencias del aditivo sobre la energía de activación de los pseudocomponentes coincidieron con las observadas en los parámetros cinéticos generales, lo que probablemente se atribuyó a la difusividad térmica, trayendo sinergia positiva o negativa según las propiedades térmicas de la biomasa. La mayoría de los cambios se distribuyeron en pseudo hemicelulosa y lignina, y aumentaron aún más junto con el proceso de pirólisis. La reproducción de las curvas de velocidad se realizó sobre la base de los parámetros cinéticos obtenidos, que validaron que los análisis cinéticos eran de alta calidad.

Tabla 1-2: Estudios relacionados a la energía de activación

Autor(s)	Tema	Año
Mian et al.	Estudio cinético de la pirólisis de pellets de biomasa utilizando el modelo de energía de activación distribuida y los métodos Coats Redfern y su comparación.	2019
Navarro et al.	Estudio cinético para la co-pirólisis de biomasa lignocelulósica y plásticos utilizando el modelo de energía de activación distribuida	2018
Arenas, Navarro & Martínez	Cinética de pirólisis de residuos de biomasa mediante métodos isoconvensionales y el modelo de energía de activación distribuida.	2019
Xu et al.	Efecto de compensación cinética en modelo logístico de energía de activación distribuida para pirólisis de biomasa lignocelulósica.	2018
Kirtania & Bhattacharya	Acoplamiento de un modelo de energía de activación distribuida con simulación de partículas para la pirólisis de flujo arrastrado de biomasa.	2015

Soria-Verdugo et al.	Modelado de la pirólisis de biomasa bajo aumentos de temperatura parabólicos y exponenciales utilizando el Modelo de Energía de Activación Distribuida.	2016
Soria-Verdugo et al.	Evaluación de la precisión del modelo de energía de activación distribuida para las curvas de devolatilización de biomasa obtenidas a altas tasas de calentamiento.	2014

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Termogravimetría

Las curvas termogravimétricas (TG) y termogravimétricas diferenciales (DTG) permiten estudiar el comportamiento de la pirólisis, relacionarlo con las propiedades de la materia prima y aislarlo de los procesos de transporte cuando las tasas de calentamiento son bajas, es decir, en estas condiciones se puede asumir que los gradientes de temperatura y concentración de especies dentro de la muestra son marginales (Ferreiro, Rabaçal & Costa 2016).

Con base en el TGA, los parámetros y mecanismos cinéticos de pirólisis se pueden estimar utilizando dos procedimientos principales: sin modelo y basado en modelo. El procedimiento sin modelo puede estimar los parámetros cinéticos (es decir, energía de activación aparente y factor pre exponencial) con precisión sin conocer el mecanismo pirolítico combinando los métodos isoconversionales, los métodos de gráficos maestros y los efectos de compensación de energía. Y los mecanismos precisos se pueden determinar mediante cálculo inverso utilizando los parámetros cinéticos. Sin embargo, el mecanismo de reacción real de la pirólisis de biomasa es extremadamente complejo debido principalmente a la gran heterogeneidad del proceso de pirólisis y las morfologías amorfas de sus componentes (Hu et al. 2016).

2.2.2. Modelos cinéticos

La cinética es un 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.

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. 2016).

Tabla 2-2: 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)	$\ln\beta = \ln\left(\frac{k_0 E_a}{Rg(a)}\right) - 5.331 - 1.052 \frac{E_a}{RT}$
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).

La evaluación cinética es esencial para una mejor comprensión de la conversión de la biomasa, debido a que los modelos simples proporcionan información de gran utilidad para la optimización de los parámetros del proceso y el diseño de nuevos reactores que se pueden emplear para la pirólisis y gasificación.

Utilizando métodos isotérmicos y no isotérmicos siendo este último más fiable, en los métodos isotérmicos se observa una pequeña pérdida de peso antes de alcanzar la temperatura deseada, lo que puede conducir a errores en la estimación de los parámetros cinéticos en este caso el de mayor importancia del estudio como es la energía de activación.

De lo expuesto los métodos de Ozawa-Flynn-Wall (OFW), Kissinger-Akahira-Sunose (KAS) y Friedman son los modelos isoconversionales más utilizados, debido a los bajos errores (por debajo del 1%)(Chen et al. 2016).

2.2.3. *Neurona Artificial*

Una red neuronal artificial es similar a una red neuronal biológica en un cerebro. Una red neuronal biológica funciona de la siguiente manera: la información fluye hacia adentro, es procesado por las neuronas, y los resultados fluyen. La base de la neurona es reaccionar a patrones previamente aprendidos. Cuando estamos creando el mismo tipo de replicación en términos de tecnología e informática, lo llamamos red neuronal artificial. Al igual que la neurona biológica, la información fluye, es procesada por una red neuronal artificial, y los resultados fluyen(Nandy & Biswas 2018,p.2).

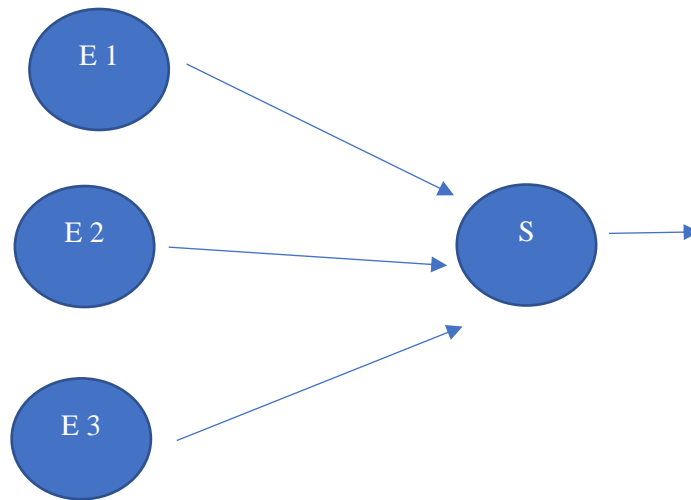


Figura 1-2: Red neuronal

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

2.2.4. Redes neuronales artificiales

Las Redes Neuronales Artificiales son modelos matemáticos y computacionales basados en el complejo comportamiento del cerebro humano, específicamente de las neuronas biológicas. La capacidad que tienen para aprender por medio de algoritmos de entrenamiento, ha permitido su uso y aplicación en todas las ciencias. (Viñuela & Galván 2004)

Las redes neuronales son sistemas dinámicos autoadaptativos. debido a la capacidad de autoajustarse de los elementos procesales (neuronal) que componen el sistema. Son dinámicos, pues son capaces de estar constantemente cambiando para adaptarse a las nuevas condiciones. (Hilera & Martínez 1995)

2.2.5. Arquitectura de red neuronal

Según López & Velo. (2007), “La arquitectura de la red neuronal es la interconexión entre las distintas neuronas. Estas se agrupan en capas, cada una de ellas con un conjunto de neuronas de número variable y comportamiento similar”. Dentro del esquema de red, se distinguen tres tipos de capas:

2.2.5.1. Capa de entrada

El número y tipo de neuronas de esta capa depende de los datos del problema que se esté abordando. Esta capa recibe los datos o señales procedentes del entorno, recibe los vectores de entrada y los redistribuye a las neuronas de la capa intermedia sin realizar ningún tipo de procesamiento sobre los datos, es sólo una receptora de información. (López & Velo 2007)

2.2.5.2. Capas intermedias u ocultas

Pueden ser más de una dependiendo del problema, estas capas no tienen conexión directa con el entorno y mediante el tratamiento adecuado de estas capas se consigue la extracción de características, adaptabilidad, generalización, es decir, transforma los vectores de entrada en vectores intermedios, que caracterizan los patrones de entrenamiento. (López & Velo 2007).

2.2.5.3. Capa de salida

El número de neuronas de esta capa depende de las salidas de la red, es decir, sus neuronas proporcionan la respuesta de la red neuronal a partir de un estímulo de la capa intermedia. (López & Velo 2007)

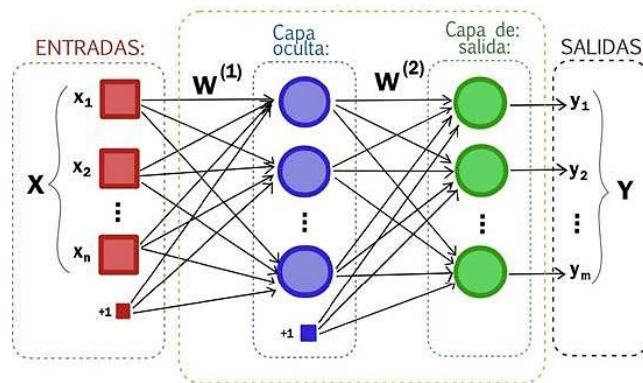


Figura 2-2: Arquitectura de la red neuronal

Fuente: (Barrazueta & Tierra 2018).

2.2.6. Entrenamiento de la red neuronal

Una red neuronal debe configurarse de manera que la aplicación de un conjunto de entradas produzca el conjunto deseado de salidas. Varios métodos existen para configurar las fortalezas de las conexiones. Una forma es establecer los pesos explícitamente, utilizando a priori conocimiento. Otra forma es "entrenar" la red neuronal alimentándola con patrones de enseñanza y dejar que cambie sus pesos de acuerdo con alguna regla de aprendizaje (Montavon 2020, p.17).

$$= \frac{n \sum_{i=1}^n (y' y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2]}}$$

Donde:

R = coeficiente de correlación lineal.

y = resultados reales por experimentación (TGA)

y' = resultados de la RNA

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

Donde:

n = número de experimentaciones.

y_t = resultados reales por experimentación (TGA)

y'_t = resultados de la RNA

2.3. Marco Legal

En los orígenes de la informática al software se le consideraba parte de la máquina, incluso los fabricantes tenían a disposición el código de fuente sin ninguna restricción

“La protección jurídica que los Derechos de Autor le pueden dar al software se debe primero tener en cuenta que este régimen jurídico ha sido adoptado de modo ampliamente mayoritario por el derecho comparado y prácticamente no encuentra resistencias en el panorama mundial. Ha sido también la vía de tutela jurídica adoptada por los países signatarios del Acuerdo Sobre los Aspectos de los Derechos de Propiedad Intelectual relacionados con el Comercio (ADIPC), conocidos como ATRIPS por sus siglas en inglés, celebrados en el marco de la Ronda Uruguay sobre el Acuerdo General sobre Aranceles Aduaneros y Comercio o GATT por sus siglas en inglés (Ibarra 2016, p.40)”.

La protección de software en Ecuador o programas no tiene un enfoque desde la protección de los derechos de autor y patentes, debido a que al software se lo define como “*una obra intelectual sui generis que requiere una protección específica, ya que constituye el resultado de un esfuerzo creativo, de inversión de tiempo y dinero*”. (Sánchez, 2005).

La Ley de Propiedad Intelectual 55 define al programa de ordenador (software) como:

“*Toda secuencia de instrucciones o indicaciones destinadas a ser utilizadas, directa o indirectamente, en un dispositivo de lectura automatizada, ordenador aparato electrónico o similar con capacidad de procesar información, para la realización de una función o tarea, u obtención de un resultado determinado, cualquiera que fuere su forma de expresión o fijación. El programa de ordenador comprende también la documentación preparatoria, planes y diseños, la documentación técnica y los manuales de uso*”. (Ley de Propiedad Intelectual, 2016)

Así mismo la propia Ley, en su artículo 28 señala que:

“Los programas de ordenador se consideran obras literarias y se protegen como tales. Dicha protección se otorga independientemente de que hayan sido incorporados en un ordenador y cualquiera sea la forma en que estén expresado, ya sea en forma legible por el hombre (código fuente) o en forma legible por la máquina (código objeto), ya sean programas operativos y programas aplicativos, incluyendo diagramas de flujo, planos, manuales de uso, y en general, aquellos elementos que conformen la estructura, secuencia y organización del programa.” (Ley de Propiedad Intelectual, 2016)

2.3.1. Matlab

Para el desarrollo del trabajo se contrató la licencia estudiantil por un costo de 55,00 \$, donde permite hacer uso de las herramientas como neuronal fitting, en relación al marco jurídico expresado anteriormente se establece que no se ha violentando contra ella.

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

El propósito principal es la predicción de la energía de activación como principal parámetro cinético para la valoración energética de los residuos de café, es así que para el desarrollo del mismo se realiza un análisis termogravimétrico.



Figura 1-3: Metodología del trabajo

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

El trabajo es de tipo experimental debido a que tiene como base fundamental el análisis termogravimétrico de los residuos de café, con una rampa de calentamiento de 15 °C/min en un rango de temperatura de 25 a 500 °C ;rango que se considera en base a revisión bibliográfica, del análisis se obtienen datos de temperatura, peso y tiempo, variables importantes para ser consideradas como entradas para la red que se diseña en el trabajo , seguido de esto se evalúa los modelos cinéticos propuestos en este caso en particular se determina el orden de reacción ,mismo que permitirá obtener un valor de energía de activación teniendo así una salida de 100 datos en concordancia con las variables de entrada, datos que sirven para entrenar y validar la red neuronal artificial para una correcta predicción de la energía de activación de los residuos de café.

Como último paso se realiza una comparación estadística de los resultados reales frente a los predichos por la red neuronal artificial diseñada, para la validación de la misma.

3.1. Localización del proyecto

El trabajo de integración curricular se implementará en el cantón Caluma de la provincia de Bolívar como lo muestra la Tabla 1-3 sus características geográficas es una latitud de -1.58333m, longitud de -79.1333 y una altitud de 380 m.s.n.m, la característica climática del cantón Caluma en cuanto a su temperatura

Tabla 1-3: Características geográficas del cantón Caluma

UBICACIÓN	Cantón Caluma , perteneciente a la Provincia de Bolívar, Ecuador.
LATITUD	-1.58333 m
LONGITUD	-79.1333 m
ALTITUD	380 m.s.n.m
CLIMA	Temperatura máxima: 21 °C
	Temperatura mínima: 18°C

Fuente: GAD-CANTONAL CALUMA

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021



Figura 2-3: Localización geográfica del cantón Caluma

Fuente: Adaptado de Google Earth (2021)

3.2. Determinación de variables de estudio

La energía de activación es el parámetro cinético que permite conocer la cantidad de energía necesaria para que se pueda llevar a cabo la descomposición de la biomasa (residuos de café) en diferentes intervalos de tiempo y temperatura.

En este contexto se muestra en la Tabla 2-3 los modelos cinéticos isoconversionales como el de cinética libre que permitirán el cálculo de la energía de activación y el orden de la reacción.

Tabla 2-3: Modelos cinéticos

Nombre del método	Ecuación
Determinación de orden de reacción	$\text{Ln}(-\text{Ln}(1-a)) = \text{Ln}A - \frac{E_a}{RT} - n\text{Ln}\left(\frac{da}{dT}\right)$
Cinética libre	$E_a = R \cdot \text{Ln} \left[\frac{\left(\frac{da}{dt}\right)_1}{\left(\frac{da}{dt}\right)_2} \right] \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)^{-1}$
Friedman	$\text{Ln} \left(\beta \frac{d\alpha}{dt} \right) = \text{Ln}[AF(\alpha)] - \frac{E_a}{RT}$
Coast	$\text{Ln} \left(\frac{F(a)}{T^2} \right) = \text{Ln} \left(\frac{A \cdot R}{\beta \cdot E_a} \right) - \frac{E_a}{RT}$

Fuente:(Cai et al. 2018)

Tabla 3-3: Funciones para la determinación de energía de activación método de Coast

Funciones para Coast		
Orden	f(a)	F(a)
0	1	a
1	1 - a	-Ln(1 - a)
n	(1 - a) ⁿ	$\frac{[1 - (1 - a)^{1-n}]}{1 - n}$

Fuente:(Hu et al. 2016)

La Tabla 3-3 indica las funciones matemáticas que permiten determinar el orden de la reacción de descomposición de los residuos de café, para el cálculo de la energía de activación con una menor dispersión de datos.

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: Vacacela, Lenin,2021.

3.3. Análisis termogravimétrico(TGA)

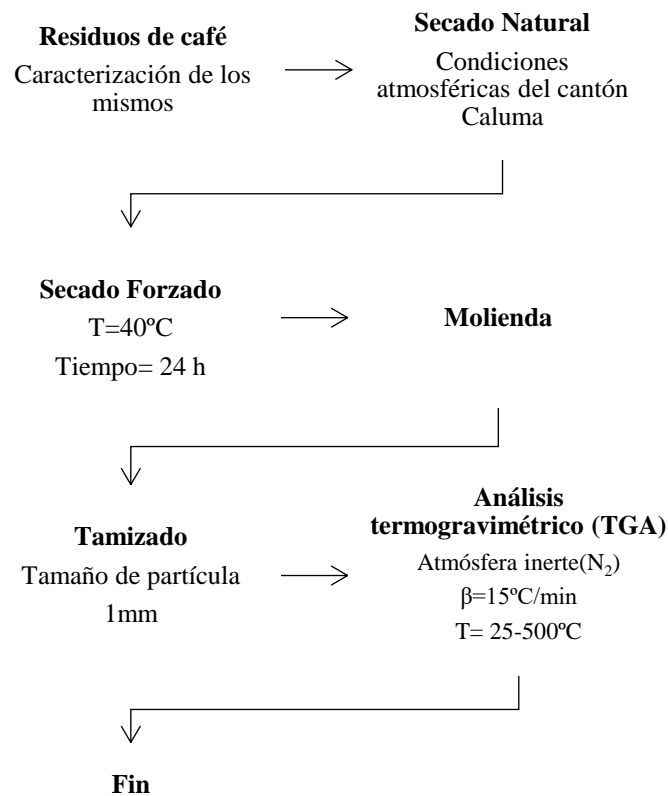


Figura 3-3: Procedimiento para el análisis TGA de los residuos de café.

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021.

3.3.1. Residuos de café

Residuos lignocelulósicos que se generan como subproducto del agro tanto nacional como internacional, sus características han hecho de este una potencial biomasa para la generación de energía, para el caso de estudio la muestra se recolecto en el cantón Caluma provincia de Bolívar.

3.3.2. Secado natural

Consiste en el aprovechamiento de las condiciones ambientales del sector para el secado de los residuos de café en este caso la temperatura del cantón Caluma oscila entre los 21°C y 26°C, este proceso se considera primordial para la eliminación de agua en primera instancia de la muestra.

3.3.3. Secado forzado

Es aquel proceso que se lleva a cabo de forma asistida por un equipo de calentamiento, en este caso un secador de bandejas del laboratorio de operaciones unitarias de la facultad de ciencias de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

3.3.4. Molienda

Proceso mecánico que permite disminuir el tamaño de partícula de los residuos de café dentro del contexto del trabajo de integración curricular, este proceso se lo llevo a cabo en un molino de bolas durante un periodo de tiempo de treinta minutos.

3.3.5. Tamizado

Proceso para la separación de partículas según su tamaño, en este proceso se utilizó la torre de tamices del laboratorio de procesos industriales de la facultad de ciencias de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, esta operación se la llevo a cabo hasta tener un tamaño de partícula de 1 mm de los residuos de café.

3.3.6. Análisis termogravimétrico

Proceso que consta de una termo balanza donde mide el cambio de peso(mg) en función de la temperatura(°C) y el tiempo(s) con el que se desee trabajar, para el caso de los residuos de café ya se establece en el diagrama de flujo mostrado en la Figura 3-3.

La técnica de la termogravimetría se puede llevar a cabo en tres etapas

Análisis isoterma, en el que los cambios de masa se registran a una temperatura constante.

Análisis cuasi-isoterma, en la que la muestra a analizar se calienta mientras que la masa es constante y se estabiliza la temperatura mientras se van produciendo los cambios de masa.

Análisis dinámico, en el que la muestra se calienta, en una atmosfera determinada, con una rampa de temperatura controlada(Faraldos & Goberna 2011).

En el caso de los residuos de café se analizaron de forma dinámica con una atmosfera determinada y un intervalo de temperatura definido.

3.4. Establecimiento de la base de datos

El establecimiento de datos para desarrollar el trabajo se lo realizó en función de modelos cinéticos propuestos, mismos que por análisis de regresión simple se determina el más idóneo para el cálculo de la energía de activación

3.4.1.1. Determinación de orden de reacción

En base la ecuación

$$\ln(-\ln(1 - a)) = \ln A - \frac{E_a}{RT} - n \ln\left(\frac{da}{dT}\right)$$

Tiene la forma $y=a +bx$ donde b es la pendiente correspondiente al orden de reacción de la descomposición de los residuos de café con respecto al tiempo y al rango de temperatura que fue definido.

$$\ln(-\ln(1 - a)) = y$$

$$\ln\left(\frac{da}{dT}\right) = x$$

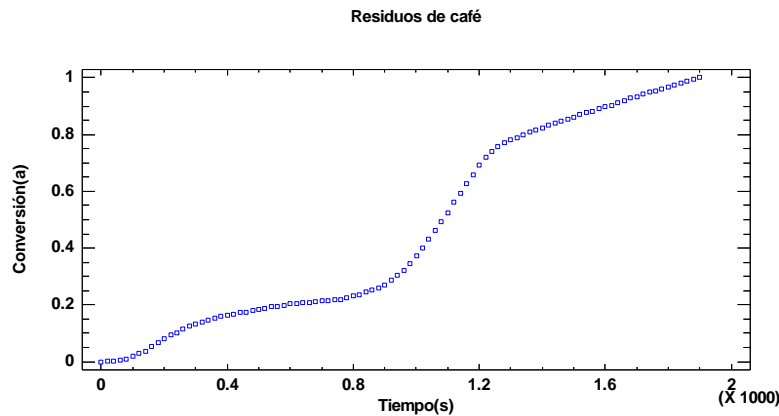


Figura 4-3: Resultados del análisis TGA de los residuos de café en función de la conversión

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

La Figura 4-3 representa la conversión (α) en función del tiempo partiendo del análisis de los resultados del estudio termogravimétrico con un total de 100 datos, realizado este proceso de interpretación grafica se procede al cálculo del orden de reacción de la biomasa en estudio.

El resultado del orden de reacción se obtiene mediante método gráfico fundamentado en un análisis estadístico, para el conocimiento de sus valores de la pendiente se utilizó modelos de regresión lineal simple.

Regresión Simple $\ln(-\ln(1-a))$ vs. $\ln(da/dT)$

Variable dependiente: $\ln(-\ln(1-a))$

Variable independiente: $\ln(da/dT)$

Lineal: $y = a + b \cdot x$

Tabla 5-3: Coeficientes para determinación de orden

	Mínimos Cuadrados	Estándar	Estadístico
Parámetro	Estimado	Error	T
Intercepto	10.0395	0.328622	30.5504
Pendiente	1.4476	0.0433183	33.4178

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Coefficiente de Correlación = 0.961191

R-cuadrada = 92.3888%

R-cuadrado (ajustado para g.l.) = 92.3061 %

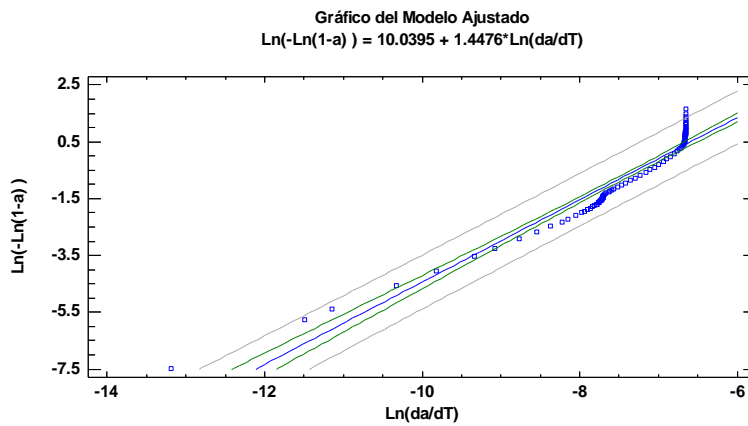


Figura 5-3: Regresión lineal simple para la determinación del orden de reacción.

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Los resultados de la regresión simple indican que el valor de la pendiente corresponde a 1.4476 siendo este su orden de reacción para la descomposición global de la biomasa (residuos de café) denotándose en la siguiente ecuación cinética.

$$\ln(-\ln(1-a)) = 10.0395 \left(\ln A - \frac{E_a}{RT} \right) - 1.4476 \ln \left(\frac{da}{dT} \right)$$

El conocimiento del orden de reacción, permite calcular la energía de activación exacta por el modelo cinético de Coast en función de las expresiones matemáticas propuestas en la Tabla 2-3Tabla 3-3.

3.4.1.2. Análisis de modelos cinéticos para el cálculo de energía de activación

Cinética Libre

Se denota por la siguiente ecuación:

$$E_a = R \cdot \text{Ln} \left[\frac{\left(\frac{da}{dt}\right)_1}{\left(\frac{da}{dt}\right)_2} \right] \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)^{-1}$$

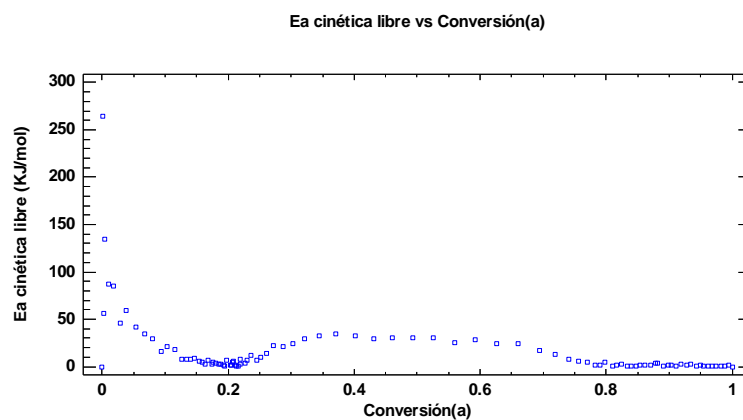


Figura 6-3: Energía de activación por método de cinética libre

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Este modelo cinético no requiere de un análisis por regresión simple, tampoco la determinación del orden de reacción para el cálculo de la energía de activación.

Método de Friedman

Se denota por la siguiente ecuación:

$$\text{Ln} \left(\beta \frac{d\alpha}{dt} \right) = \text{Ln}[AF(\alpha)] - \frac{E_a}{RT}$$

Ecuación que se relaciona con $y = a + bx$ donde se grafica $\ln(\beta \cdot da/dt)$ frente a $1/T$ lo que permite realizar un análisis por regresión simple y obtener la energía de activación en cada uno de los puntos que componen a la recta.

Regresión Simple - $\text{Ln}(B \cdot da/dt)$ vs. $1/T$

Variable dependiente: $\text{Ln}(B \cdot da/dt)$

Variable independiente: $1/T$

Lineal: $y = a + b \cdot x$

Tabla 6-3: Coeficientes del método de Friedman

	Mínimos Cuadrados	Estándar	Estadístico
Parámetro	Estimado	Error	T
Intercepto	-8.78124	0.395173	-22.2212
Pendiente	-166.899	189.242	-0.881936

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Coefficiente de Correlación = -0.0905907

R-cuadrada = 0.820667 %

R-cuadrado (ajustado para g.l.) = -0.234432 %

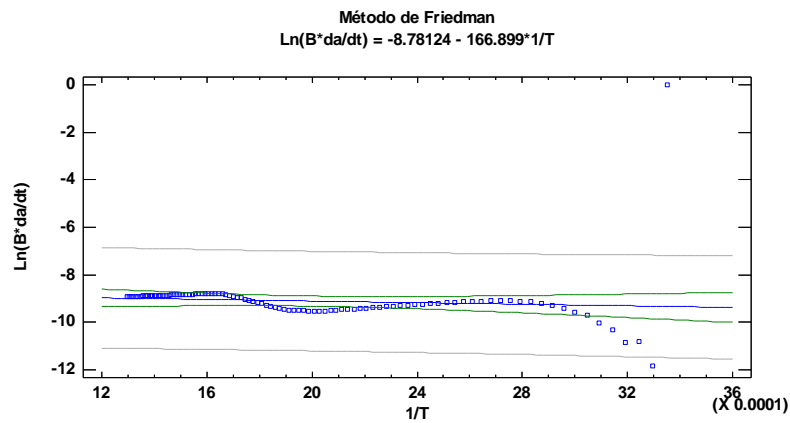


Figura 7-3: Regresión simple del método de Friedman

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Método de Coast

Se denota por la siguiente ecuación:

$$\text{Ln}\left(\frac{F(a)}{T^2}\right) = \text{Ln}\left(\frac{A \cdot R}{\beta \cdot E_a}\right) - \frac{E_a}{RT}$$

Para este método se propone funciones matemáticas y para ello se realizó anteriormente el cálculo del orden de reacción para utilizar la siguiente.

$$F(a) = \frac{[1 - (1 - a)^{1-n}]}{1 - n}$$

La misma que se expresa en función del orden conocido

$$F(a) = \frac{[1 - (1 - a)^{1-1.44}]}{1 - 1.44}$$

De la misma que los anteriores métodos se deja en función de la ecuación de la recta para el análisis por regresión simple $y = a + bx$ donde se grafica $\text{Ln}(F(a)/T^2)$ frente a $1/T$

Regresión Simple - $\ln(F(\alpha)/T^2)$ vs. $1/T$

Variable dependiente: $\ln(F(\alpha)/T^2)$

Variable independiente: $1/T$

Lineal: $y = a + b \cdot x$

Tabla 7-3: Coeficientes del método de Coast

	Mínimos Cuadrados	Estándar	Estadístico
Parámetro	Estimado	Error	T
Intercepto	-8.52694	0.227643	-37.4576
Pendiente	-2245.57	108.309	-20.7329

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Coefficiente de Correlación = 0.907582

R-cuadrada = 82.3706 %

R-cuadrado (ajustado para g.l.) = 82.1789 %

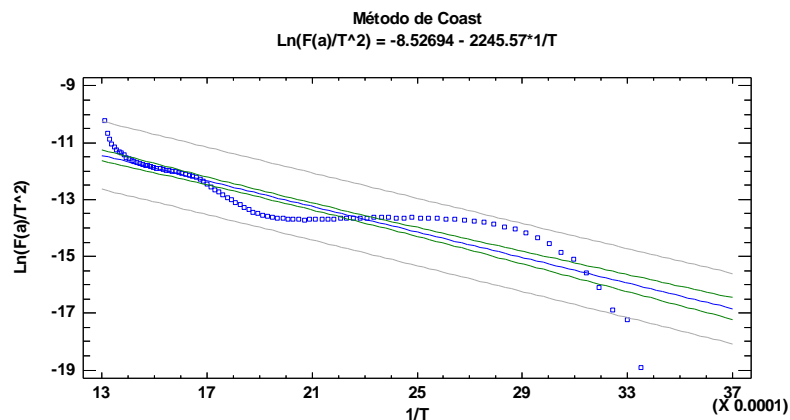


Figura 8-3: Regresión simple del método de Coast

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

Analizado cada uno de los modelos cinéticos y expresiones matemáticas de cinética libre por regresión simple, se determina que el método de Coast es el más indicado para el cálculo de la energía de activación con un valor de r^2 de 82.3706 % en comparación al obtenido en el método de Friedman.

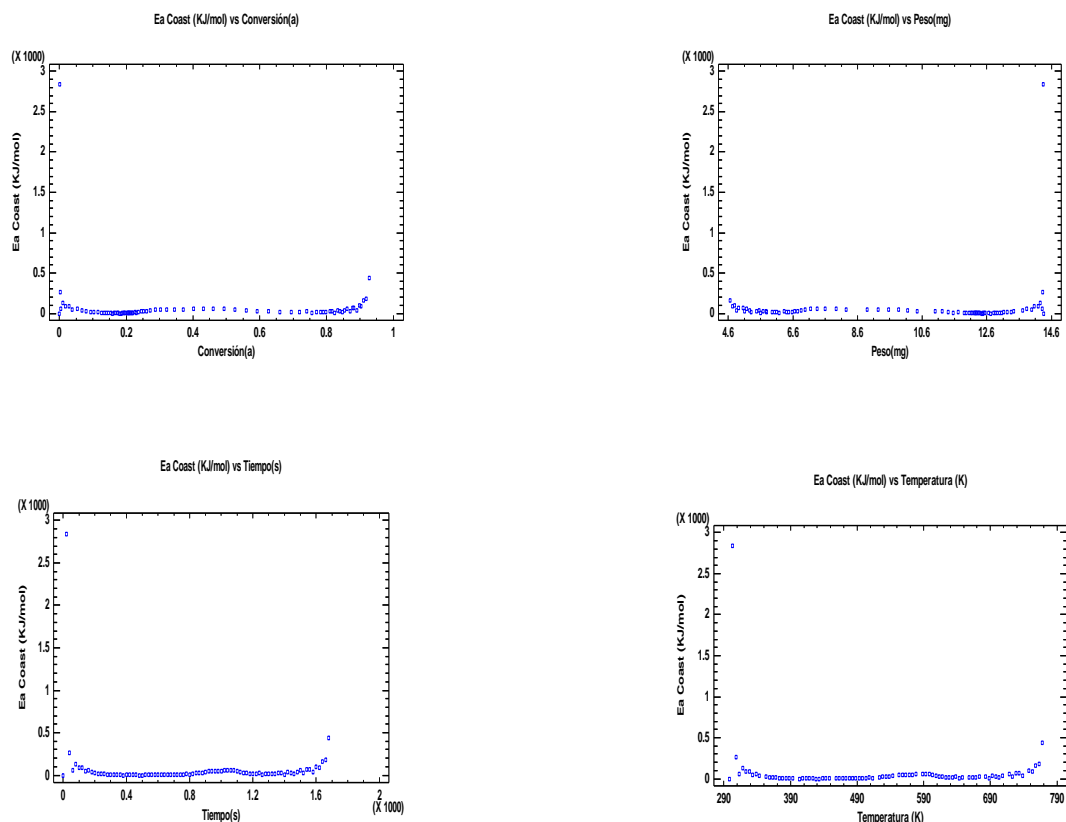


Figura 9-3: Energía de activación en función de variables del análisis TGA

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

De esta manera se calcula la energía de activación en cada uno de los puntos que componen la recta.

La Figura 9-3 indica la dependencia de la energía de activación en función de las variables involucradas en el estudio cinético de los resultados dados por el análisis termogravimétrico, para el cálculo de la energía de activación por el método de Coast.

3.5. Diseño de la red neuronal artificial

3.5.1. Entradas y salidas en la red neuronal artificial

Se establece las variables de la capa de entrada como de salida antes de que fuera diseñada la red neuronal artificial, para este trabajo se considera tres variables de entrada mismas que corresponden a peso, temperatura y tiempo datos que se obtienen del análisis termogravimétrico y una variable de salida que es la energía de activación misma que fue calculada por modelos cinéticos propuestos.

Tabla 8-3: 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: Vacacela, Lenin, 2021

3.5.2. Normalización de datos

Antes de desarrollar la red neuronal generalmente se normalizan los datos para evitar redundancia de los mismos, por ello se importa desde la base de datos tanto para variables de entrada como de salida creada en Microsoft Excel al espacio de trabajo de Matlab para mejorar el proceso de entrenamiento y predicción de la red, mediante la siguiente ecuación.

$$X_{\text{Norm}} = \frac{X - X_{\text{min}}}{X_{\text{max}} - X_{\text{min}}}$$

Donde:

X_{Norm} = valor normalizado

X = valor que se desea normalizar

X_{min} = valor mínimo

X_{max} = valor máximo

```

1 % 01. EXTRACCIÓN DE BASE DE DATOS DE EXCEL
2 % Leer base de datos de Excel
3 Extrac=readtable('Base de Datos.xlsx','Sheet','DatosE');
4
5 % Convertir la tabla a matriz numérica
6 Datos = table2array(Extrac);
7
8 % ENTRADAS
9 % 02. NORMALIZACIÓN DE ENTRADAS (TGA)
10 entradas=Datos(1:3,:);
11 %-----TEMPERATURA-----
12 T_max=max(entradas(1,:));
13 T_min=min(entradas(1,:));
14 T_norm = [(entradas(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
15 %-----PESO-----
16 P_max=max(entradas(2,:));
17 P_min=min(entradas(2,:));
18 P_norm = [(entradas(2,1:end)-P_min)/(P_max-P_min)];
19 %-----TIEMPO-----
20 t_max=max(entradas(3,:));
21 t_min=min(entradas(3,:));
22 t_norm = [(entradas(3,1:end)-t_min)/(t_max-t_min)];
23 %-----ENTRADAS NORMALIZADAS-----
24 Entr_norm=[T_norm;P_norm;t_norm];
25

```

Figura 10-3: Normalización de datos de entrada

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

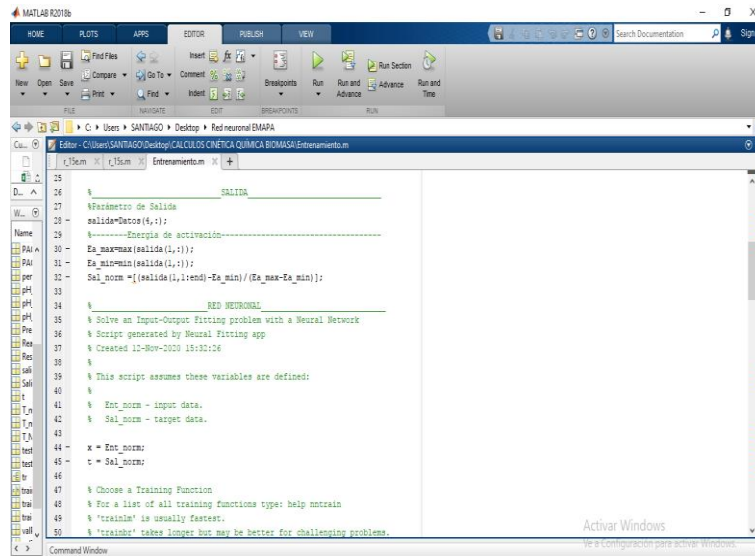


Figura 11-3: Normalización de datos de salida

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

3.5.2.1. Red neuronal artificial

Luego de que los datos fueron normalizados, se emplea la aplicación neuronal net fitting (*nftool*) de la caja de herramientas de Matlab, seleccionando la opción se mostrara el asistente de diseño de la red neuronal artificial como se muestra a continuación.

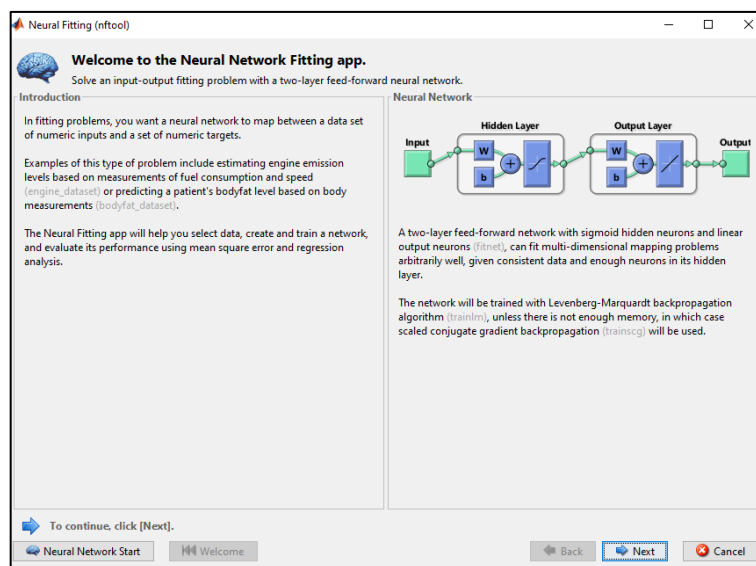


Figura 12-3: Aplicación para redes neuronales en Matlab

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

Luego de esto el usuario seleccionara next y se mostrara el asistente de diseño de red, dentro de este se va a seleccionar las entradas y salidas normalizadas como se muestra a continuación.

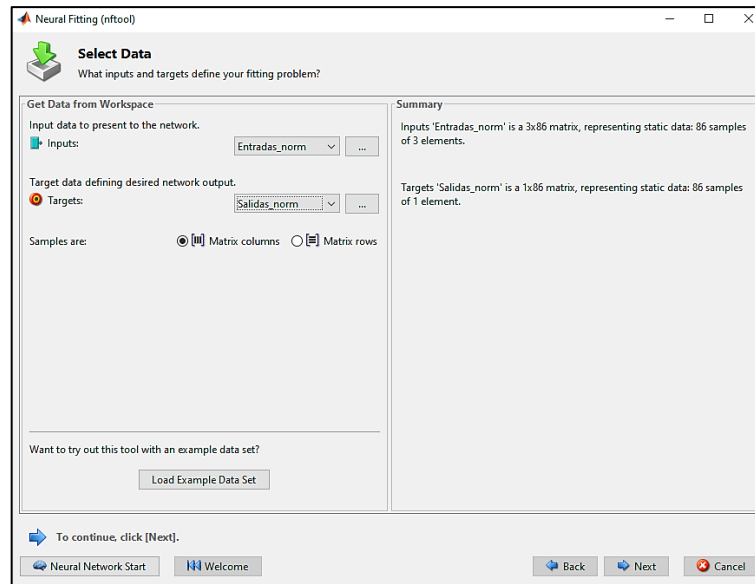


Figura 13-3: Entradas y salidas normalizadas

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

3.6. Entrenamiento de la red neuronal artificial

En el proceso de entrenamiento de la red neuronal artificial es necesario determinar el número óptimo de neuronas en la capa oculta y seleccionar el algoritmo de entrenamiento, la selección del número de neuronas se lo realiza en función del error cuadrático medio (MSE) y la correlación lineal (R) durante el entrenamiento con las diferentes funciones. Para este proceso se empezó con 25 neuronas en la capa oculta utilizando las diferentes funciones como son Levenberg-Marquardt, Bayesi-Regularizationy Scaled Conjugate Gradient, revisando los valores de MSE y R, es importante señalar que mientras el valor de R es más cercano a 1 se considera a este como el mejor número de neuronas en la capa oculta.

La Tabla 9-3 indica cómo se clasificaron los datos para el entrenamiento con los diferentes modelos de predicción

Tabla 9-3: Clasificación de datos para entrenamiento de la red

DATOS		
ENTRENAMIENTO	VALIDACIÓN	PRUEBA
67	14	14

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

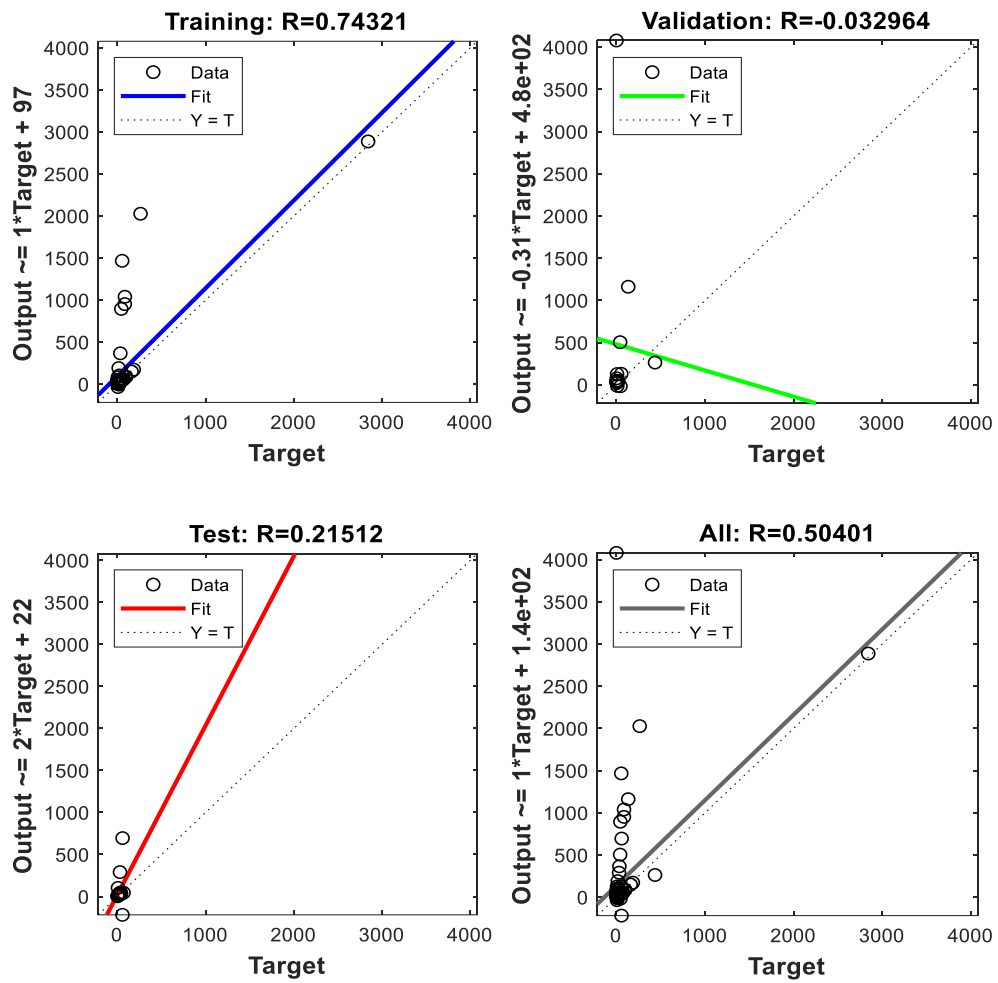


Figura 14-3: Entrenamiento Levenberg-Marquardt con 550 neuronas en la capa oculta

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

La Figura 14-3 según su valor de R 0.50401 indicó que el método de entrenamiento Levenberg-Marquardt no es el más adecuado para predecir la energía de activación.

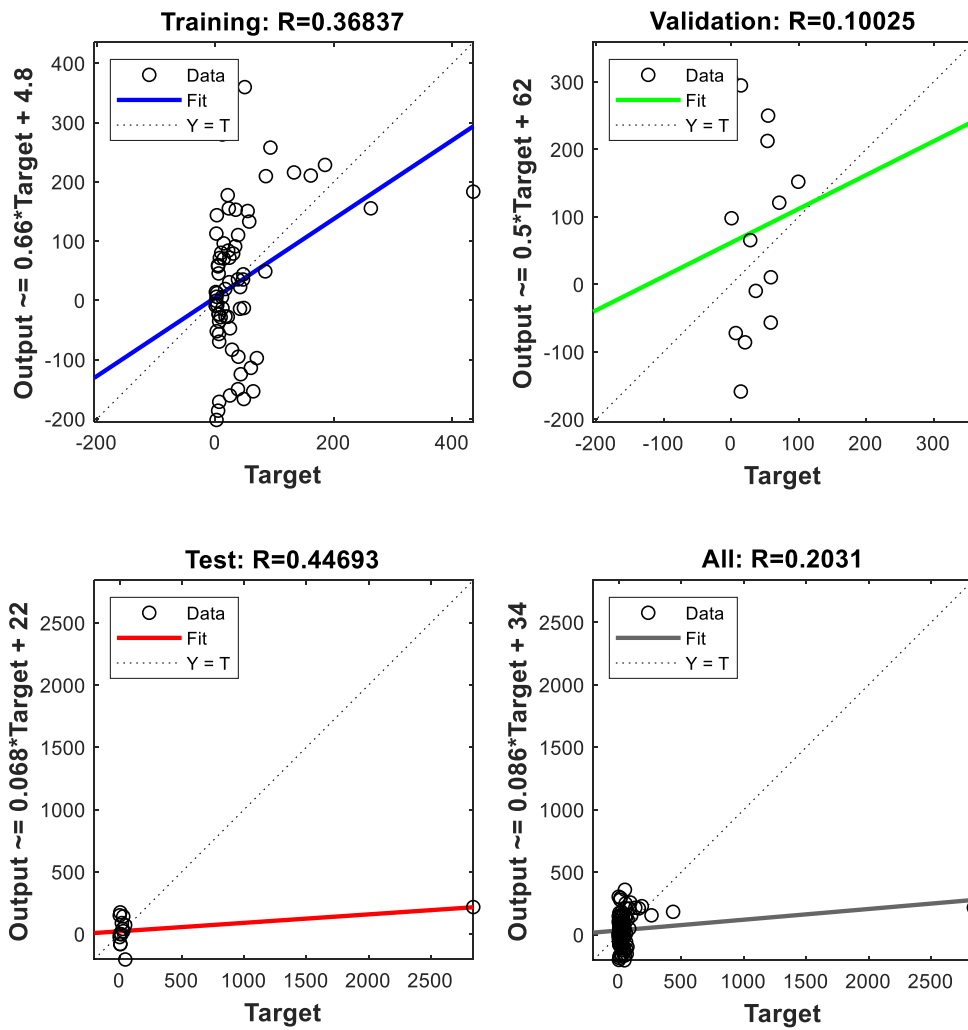


Figura 15-3: Entrenamiento Scaled Conjugate Gradient con 550 neuronas en la capa oculta

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

La Figura 15-3 indica un bajo rendimiento en el entrenamiento de la red neuronal artificial con el método de Scaled Conjugate Gradient con 550 neuronas en la capa oculta proporcionando un valor de R de 0.2031, de este modo se lo aparta como modelo de predicción para la energía de activación de los residuos de café.

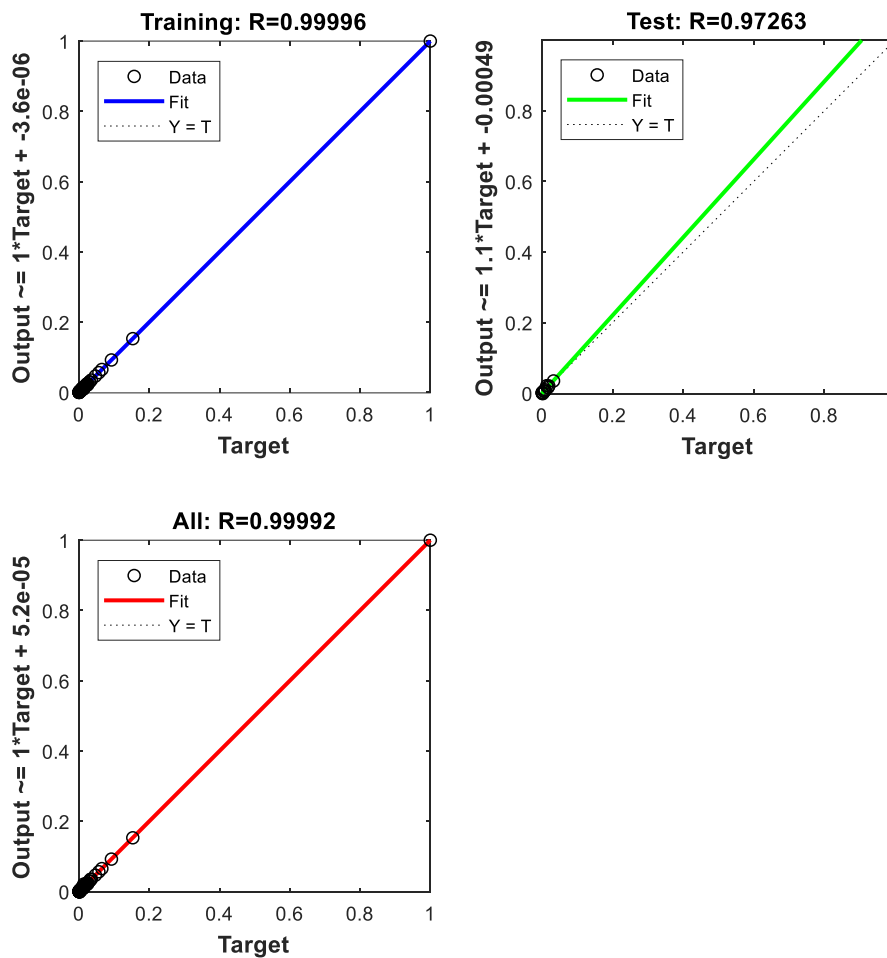


Figura 16-3: Entrenamiento Bayesi-Regularizationy con 550 neuronas en la capa oculta.

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

En comparación a la Figura 14-3 y la Figura 15-3 el entrenamiento por el método Bayesi-Regularizationy tiene un valor de R de 0.99992 muy cercano a 1 lo que hace de este el modelo indicado para la predicción de la energía de activación.

De esta manera se procedió con la arquitectura de la red

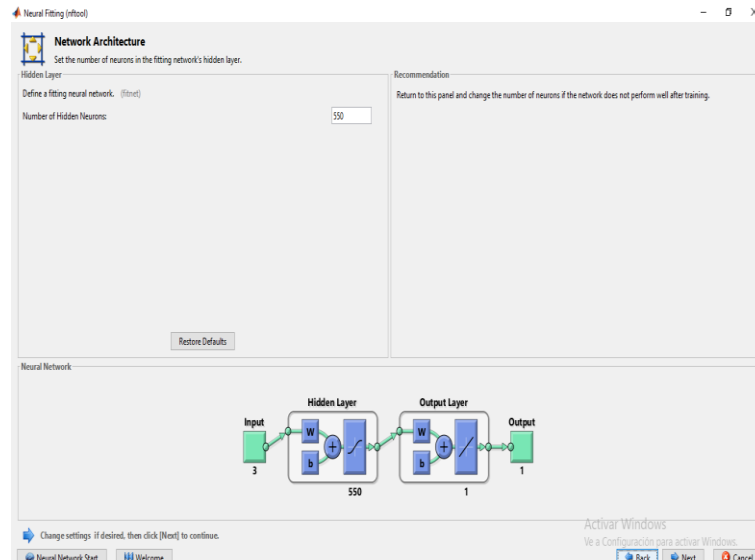


Figura 17-3: Arquitectura de la red neuronal artificial

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

La red neuronal artificial trabaja de forma predeterminada con las siguientes funciones de activación:

- Función de transferencia en la capa oculta: Hyperbolic tangent sigmoid (tansig).
- Función de transferencia para la capa de salida: Función lineal (purelin)

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 y logra resultados de estimación más precisos (Balram et al., 2019, p.20).

El algoritmo de Regularización Bayesiana (BR) actualiza los pesos y los valores de sesgo, minimizando el error de predicción y determinando la combinación correcta para obtener una red que generalice bien (Baghirli, 2015, p.15).

3.7. Análisis Estadístico

Para evaluar la idoneidad de la red neuronal artificial desarrollada se comparan las salidas predichas frente a las salidas realizadas por cálculos de cinética. Ambas bases de datos serán analizadas mediante una comparación de muestras.

Las pruebas estadísticas que se aplicaran son:

Tabla ANOVA: análisis de la varianza como un componente entre distintos grupos y otro dentro de los grupos.

Para fortalecer el análisis estadístico se elaborarán graficas ANOVA.

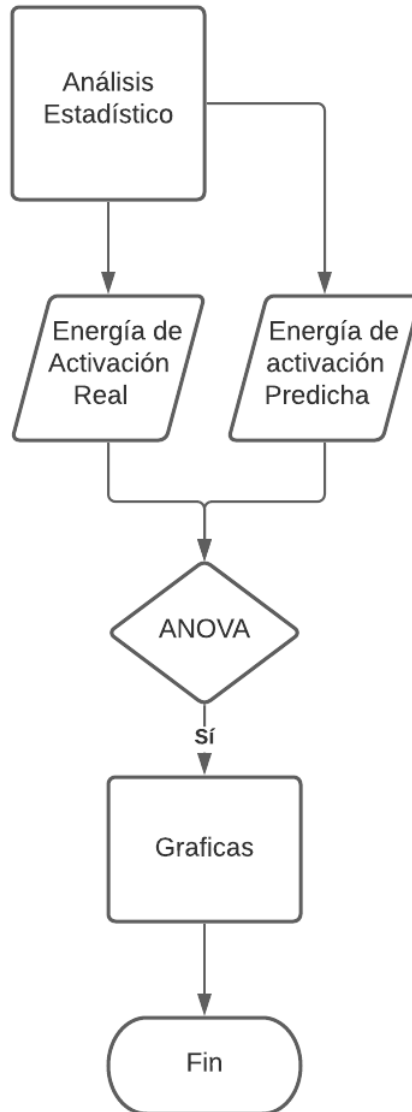


Figura 18-3: Metodología de análisis estadístico

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Cronograma

Tabla 1-4: Cronograma de actividades

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
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Elaboración del anteproyecto				■	■	■	■	■												
Determinación de variables					■	■	■	■												
Obtención de datos experimentales									■	■	■	■								
Determinación 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: Vacacela, Lenin, 2021.

4.2. Presupuesto

Tabla 2-4: Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Análisis termogravimétrico	\$85	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	\$335		

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

4.3. Recursos materiales

4.3.1. Recursos humanos

Tabla 3-4: Recursos humanos del proyecto

Nombre	Función que desempeña
Lenin Vacacela	Autor del Proyecto
Mabel Parada	Tutor (a) académico del proyecto

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

4.3.2. Recursos materiales

Tabla 4-4: Recursos materiales utilizados en el proyecto

Equipo y software	Uso
Termo balanza	Análisis termogravimétrico de los residuos de café.
Computadora	Calculos cinéticos, diseño de la red neuronal.
Matlab	Diseño de la red neuronal
STATGRAPHICS CENTURION	Validación de los resultados de la red neuronal

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

4.4. Resultados

4.4.1. Análisis termogravimétrico

Tabla 5-4: Especificaciones del ensayo

Muestra	Biomasa
Descripción	Residuos de semilla y cáscara de café
Tipo de ensayo	Termogravimetría
Equipo / máquina	Mettler Toledo TGA-1
Descripción del método	Rampa de calentamiento 15 °C/min Programa de 25 a 500 °C Atmósfera inerte (N ₂) 15 ml/min Resultados de TGA y dTGA (200 puntos)

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

Fuente: Laboratorio de investigación UCE

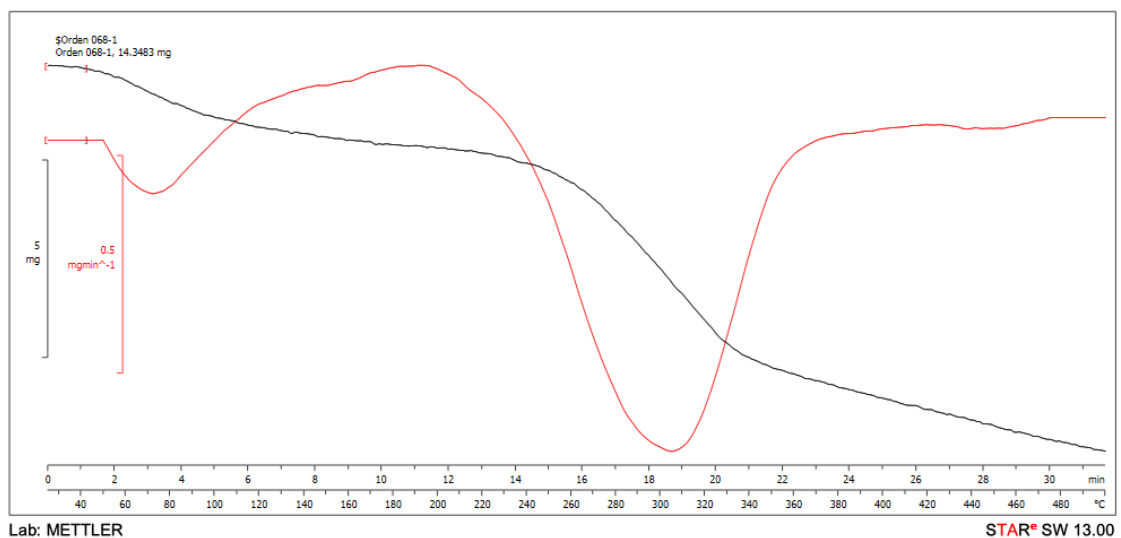


Figura 1-4: Termo grama de los residuos de café

Fuente: Laboratorio de investigación UCE

4.4.2. Resultados de la energía de activación

4.4.2.1. Método de cinética libre

Este modelo no depende del cálculo del orden de reacción para determinar la energía de activación.

El mismo muestra los siguientes resultados

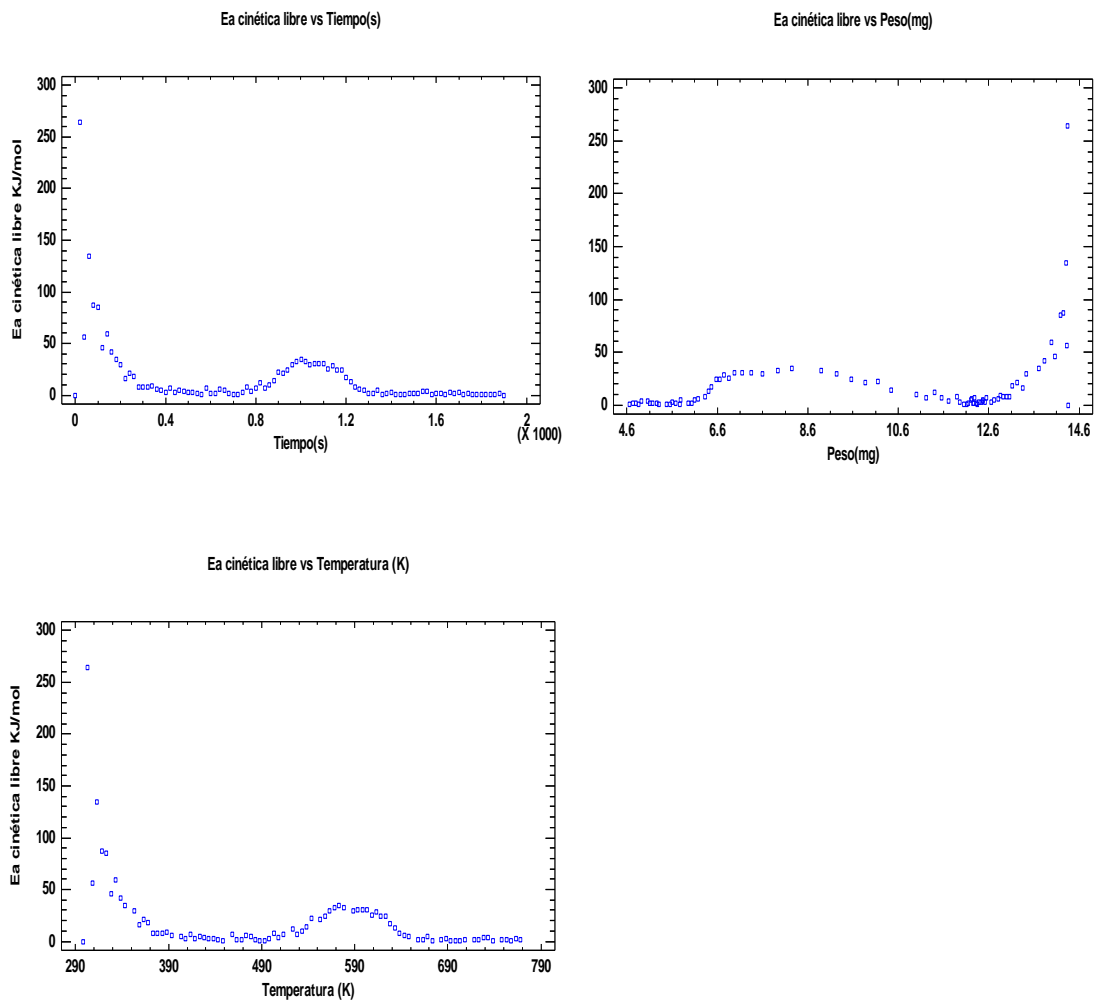


Figura 2-4: Energía de activación por cinética libre

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

La Figura 2-4 indica la dependencia de la energía de activación calculada por el modelo de cinética libre en función de las variables como son peso, tiempo y temperatura.

Uno de los principales inconvenientes de utilizar el modelo de cinética libre para el cálculo de la energía de activación, es que no considera el orden por ende causa gran dispersión en sus datos, por ello es importante señalar que para una valoración rápida de los residuos u otro material este modelo es el más indicado.

4.4.2.2. Método de Friedman

Este método muestra los siguientes resultados de energía de activación.

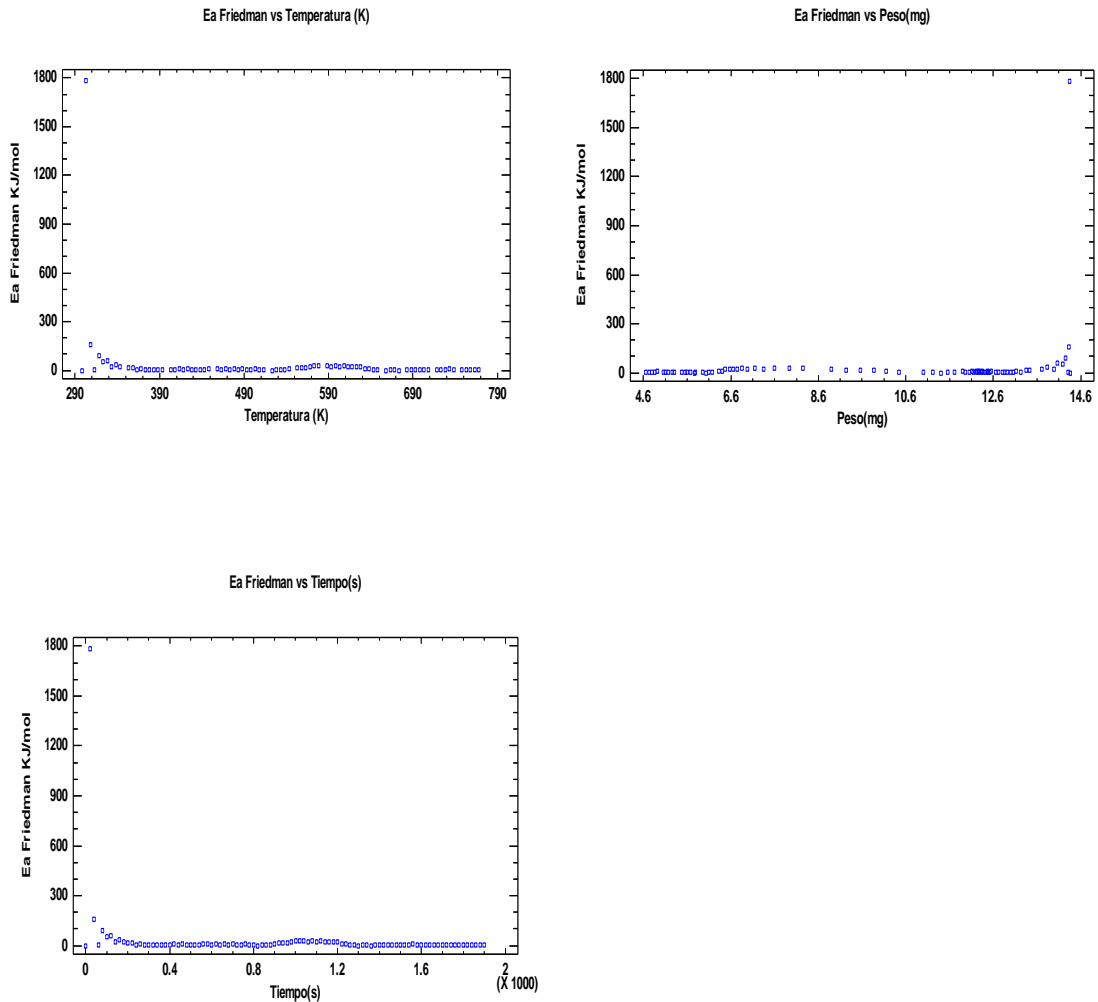


Figura 3-4: Energía de activación por el método de Friedman

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

La Figura 3-4 indica una mínima dispersión de la energía de activación en relación a la Figura 2-4, esto se debe a que el método de Friedman es un modelo isoconversional donde su dependencia radica en un análisis por regresión simple.

4.4.2.3. Método de Coast

El método de Coast se eligió para el cálculo de la energía de activación debido a la influencia que tiene el orden de reacción dentro de este modelo cinético minimizando la dispersión de datos teniendo así una recta más ajustada y un factor de correlación más cercano a 1.

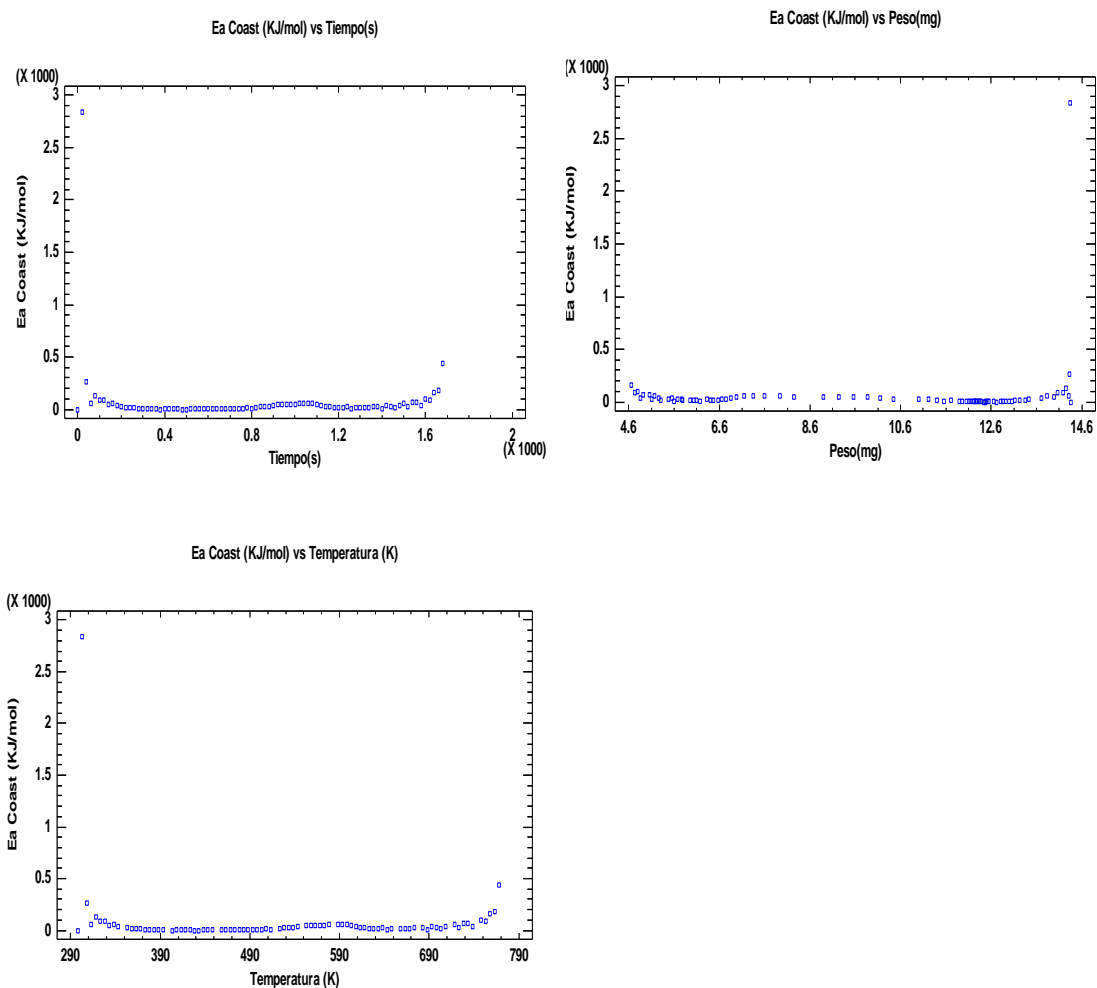


Figura 4-4: Energía de activación por el método de Coast

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021.

En la Figura 4-4 se demuestra que el método de Coast es el más idóneo para el cálculo de la energía de activación, debido a su dependencia del orden de reacción para el desarrollo de su modelo cinético es así que se genera a partir de este la neurona de salida del modelo de predicción.

4.4.3. Desarrollo de la red neuronal artificial

4.4.3.1. Normalización de los datos

Con la ecuación descrita en el capítulo 3 se normalizan tanto las variables de entrada como las de salida para evitar redundancia o incoherencia en el conjunto de datos.

4.4.3.2. Diseño de la Red Neuronal

Luego de haber importado los datos se procede a utilizar la herramienta Neuronal Net Fitting como se muestra en el capítulo 3.

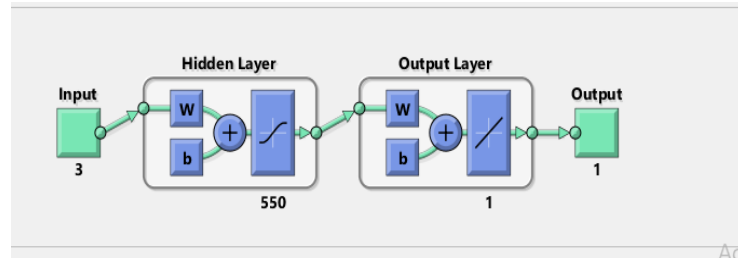


Figura 5-4: Arquitectura de red con 550 neuronas

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

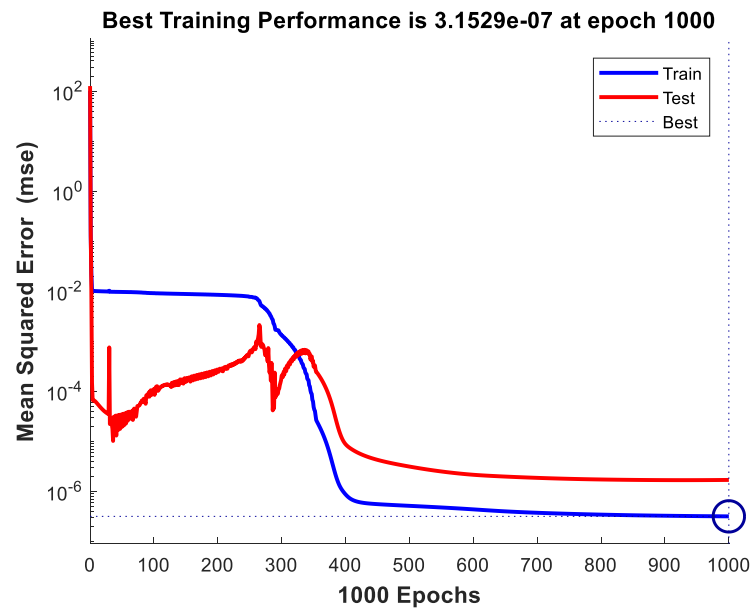


Figura 6-4: Curva de aprendizaje de red de 550 neuronas

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

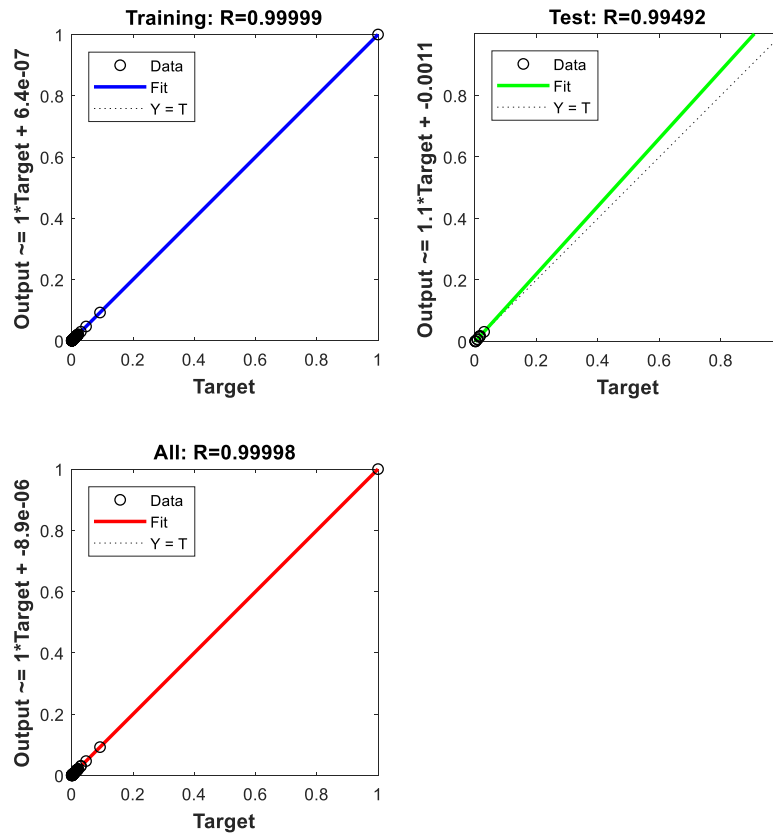


Figura 7-4: Correlación de red de 550 neuronas

Realizado por: Vacacela, Lenin, 2021

La Figura 5-4 muestra la arquitectura de la red con 3 neuronas en la capa de entrada como son temperatura, peso, tiempo; mientras que en la capa oculta consta de 550 neuronas y 1 neurona de salida que es la energía de activación. Mientras que la Figura 6-4 indica la curva de aprendizaje con los 67 datos seleccionados para entrenamiento, la Figura 7-4 enseña los resultados de la regresión de los datos, principal indicador para verificar que la red neuronal tenga la capacidad de predecir la energía de activación de los residuos de café a partir de datos obtenido experimentalmente es decir en el análisis termogravimétrico.

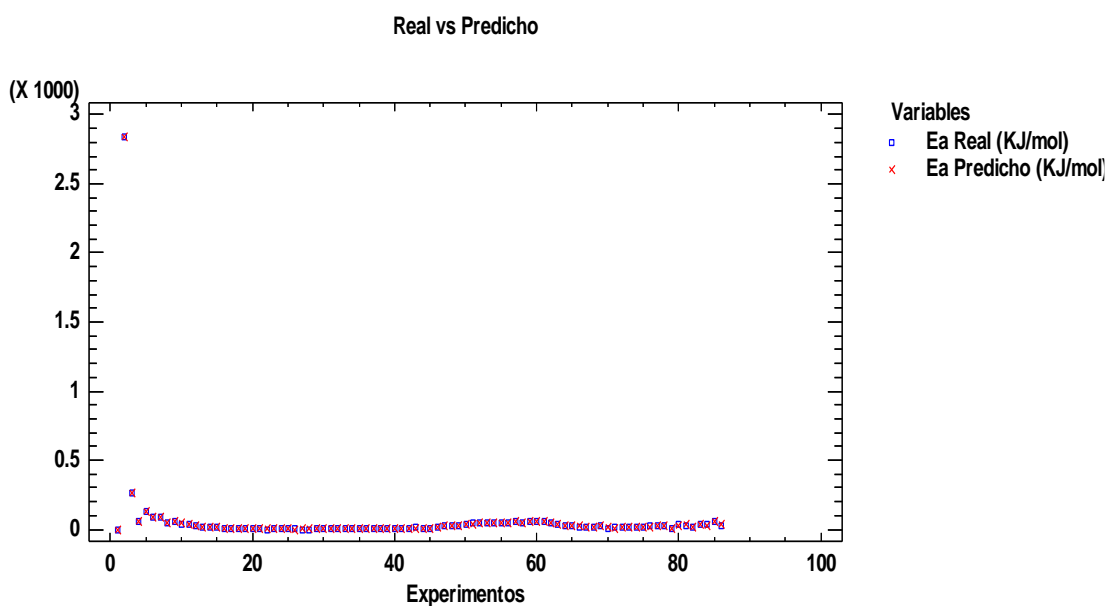


Figura 8-4: Comparación de la energía de activación real y la predicha

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

La Figura 8-4 compara la energía de activación real frente a la energía de activación predicha por la red neuronal artificial donde visualmente no existe una diferencia entre las dos muestras.

4.4.4. Análisis estadístico de los datos predichos

Los datos predichos por la red neuronal artificial se comparan estadísticamente con los resultados reales de la energía de activación para fortalecer los resultados del mismo.

4.4.4.1. Análisis ANOVA

Tabla 6-4: Análisis ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0.0629752	1	0.0629752	6.74801E-7	0.9993
Intra grupos	1.58651E7	170	93324.1		
Total (Corr.)	1.58651E7	171			

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente entre-grupos y un componente dentro-de-grupos. La razón-F, que en este caso es igual a 6.74801E-7, es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos. Puesto

que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los valores predichos por la red neuronal artificial con aquellos calculados con un nivel del 95.0% de confianza.

4.4.4.2. Análisis de Medias

Tabla 7-4: Tabla de medias

			Error Est.		
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Ea Real (KJ/mol)	86	59.6878	32.9418	13.7062	105.669
Ea Predicho (KJ/mol)	86	59.7261	32.9418	13.7445	105.708
Total	172	59.707			

Realizado por: Vacacela, Lenin,2021

Esta tabla muestra la media para cada columna de datos. También muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. El error estándar es el resultado de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel. La tabla también muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces.

CONCLUSIONES

- El modelo de predicción desarrollado para evaluar el comportamiento termogravimétrico de la energía de activación de los residuos de café, se fundamenta en una red neuronal prealimentada de aprendizaje supervisado empleando datos experimentales del análisis termogravimétrico y evaluación por modelos cinéticos de los mismos para el cálculo de la energía de activación.
- Se obtuvo los datos de la degradación térmica de los residuos de café mediante análisis experimental termogravimétrico, mismo que arroja resultados de pérdida de peso (mg) en función de intervalos de temperatura (°C) y tiempo (s) con su debida programación de trabajo a una tasa de calentamiento de 15 °C/min, atmósfera inerte a 15ml/min en rangos de temperatura de 25-500 °C.
- El cálculo de la energía de activación se lo llevó a cabo mediante modelos cinéticos propuestos como es el de cinética libre, método de Friedman y el de Coast, métodos que fueron evaluados por regresión simple en el caso de Friedman y Coast, donde el de Coast tiene un r^2 82.3706% y un factor de correlación de 0.907582 por ende este modelo se utilizó para el cálculo de la energía de activación.
- La red neuronal fue diseñada en Matlab misma que cuenta con 3 neuronas de entrada perteneciente a tiempo, temperatura y peso de los residuos de café proporcionadas por el análisis termogravimétrico, también dentro de su arquitectura posee 550 neuronas en la capa oculta y 1 neurona de salida correspondiente a la energía de activación predicha, su algoritmo de regularización es bayesiana con un coeficiente de correlación de 0.999 y error cuadrático medio de 9.92E-07.
- Los resultados predichos por la red neuronal artificial fueron validados estadísticamente por el método de comparación de varias muestras, en este caso energía de activación calculada convencionalmente y energía de activación predicha, donde el valor de P es de 0.9993 el que muestra que no existe una diferencia estadísticamente significativa debido a que mayor que 0.05 con un nivel de confianza del 95%.

RECOMENDACIONES

Utilizar como herramienta el modelo de predicción de la energía de activación para proyectos enfocados en la producción de energía limpia a partir de residuos orgánicos.

Plantear modelos de predicción para cada uno de los modelos cinéticos para ampliar la investigación y tener un enfoque más amplio de evaluación de residuos orgánicos.

Fortalecer temas de investigación con enfoques tecnológicos para el fortalecimiento de la investigación de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

BIBLIOGRAFÍA

ARENAS, C.N., NAVARRO, M.V. & MARTÍNEZ, J.D., *Bioresource Technology*. Pyrolysis kinetics of biomass wastes using isoconversional methods and the distributed activation energy model. [en línea], vol. 288, no. May, pp. 121485. ISSN 18732976. DOI 10.1016/j.biortech.2019.121485. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.121485>.

BAGHIRLI, O., *Dissertation*, Comparison of Lavenberg-Marquardt, Scaled Conjugate Gradient And Bayesian Regularization Backpropagation Algorithms for Multistep Ahead Wind Speed Forecasting Using Multilayer Perceptron Feedforward Neural Network. no. June, pp. Uppsala University.

BALRAM, D., LIAN, K.Y. & SEBASTIAN, N., *Ecotoxicology and Environmental Safety*, Air quality warning system based on a localized PM2.5 soft sensor using a novel approach of Bayesian regularized neural network via forward feature selection. vol. 182, no. April, pp. 109386. ISSN 10902414. DOI 10.1016/j.ecoenv.2019.109386.

BARRAZUETA, P. & TIERRA, L., *Desarrollo De Un Algoritmo De Redes Neuronales Artificiales Aplicado a La Predicción De Tráfico De La Infraestructura De Comunicaciones De Redes Corporativas*. S.l.: Escuela Superior Politécnica De Chimborazo.

BURHENNE, L., MESSMER, J., AICHER, T. & LABORIE, M.P., *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* The effect of the biomass components lignin, cellulose and hemicellulose on TGA and fixed bed pyrolysis. [en línea], vol. 101, pp. 177-184. ISSN 01652370. DOI 10.1016/j.jaap.2013.01.012. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jaap.2013.01.012>.

CAI, J., XU, D., DONG, Z., YU, X., YANG, Y., BANKS, S.W. & BRIDGWATER, A. V., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Processing thermogravimetric analysis data for isoconversional kinetic analysis of lignocellulosic biomass pyrolysis: Case study of corn stalk. vol. 82, no. April, pp. 2705-2715. ISSN 18790690. DOI 10.1016/j.rser.2017.09.113.

ÇEPELIOĞULLAR, Ö., MUTLU, İ., YAMAN, S. & HAYKIRI-ACMA, H., *Fuel*. Activation energy prediction of biomass wastes based on different neural network topologies. [en línea], vol. 220, no. February, pp. 535-545. ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2018.02.045. Disponible en: www.elsevier.com/locate/fuel%0AFull.

CHEN, N., REN, J., YE, Z., XU, Q., LIU, J. & SUN, S., *Bioresource Technology*. Kinetics of coffee industrial residue pyrolysis using distributed activation energy model and components separation of bio-oil by sequencing temperature-raising pyrolysis. [en línea], vol. 221, pp. 534-540. ISSN 18732976. DOI 10.1016/j.biortech.2016.09.062. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.062>.

FARALDOS, M. & GOBERNA, C., *Técnicas de análisis y caracterización de materiales* [en línea]. Segunda ed. Madrid: s.n. ISBN 9788400093877. Disponible en: <http://publicacionesoficiales.boe.es/>.

FERNANDES, U. & COSTA, M., *Biomass and Bioenergy* Potential of biomass residues for energy production and utilization in a region of Portugal. [en línea], vol. 34, no. 5, pp. 661-666. ISSN 09619534. DOI 10.1016/j.biombioe.2010.01.009. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.biombioe.2010.01.009>.

FERREIRO, A.I., RABAÇAL, M. & COSTA, M., *Energy Conversion and Management*. A combined genetic algorithm and least squares fitting procedure for the estimation of the kinetic parameters of the pyrolysis of agricultural residues. [en línea], vol. 125, pp. 290-300. ISSN 01968904. DOI 10.1016/j.enconman.2016.04.104. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2016.04.104>.

HILERA, J. & MARTÍNEZ, V., *Redes neuronales artificiales. Fundamentos, modelos y aplicaciones*. Estados Unidos: RA-MA. ISBN 020187895X.1995.

HOSSAIN, A.K. & DAVIES, P.A., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Pyrolysis liquids and gases as alternative fuels in internal combustion engines - A review. [en línea], vol. 21, pp. 165-189. ISSN 13640321. DOI 10.1016/j.rser.2012.12.031. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2012.12.031>.

HU, M., CHEN, Z., WANG, S., GUO, D., MA, C., ZHOU, Y., CHEN, J., LAGHARI, M., FAZAL, S., XIAO, B., ZHANG, B. & MA, S., *Energy Conversion and Managemen*. Thermogravimetric kinetics of lignocellulosic biomass slow pyrolysis using distributed activation energy model, Fraser-Suzuki deconvolution, and iso-conversional method. *t* [en línea], vol. 118, pp. 1-11. ISSN 01968904. DOI 10.1016/j.enconman.2016.03.058. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2016.03.058>.

IBARRA, M., *Software libre o software propietario para una efectiva transferencia de tecnología en ecuador* [en línea]. S.l.: Universidad Internacional del Ecuador. Disponible en: <https://repositorio.uide.edu.ec/bitstream/37000/1425/1/T-UIDE-0598.pdf>.

KIRTANIA, K. & BHATTACHARYA, S., *Coupling of a distributed activation energy model with particle simulation for entrained flow pyrolysis of biomass*. *Fuel Processing Technology* [en línea], vol. 137, pp. 131-138. ISSN 03783820. DOI 10.1016/j.fuproc.2015.04.014. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2015.04.014>.

LIN, B., ZHOU, J., QIN, Q., XIE, C. & LUO, Z., *Journal of the Energy Institute*, Isoconversional kinetic analysis of overlapped pyrolysis reactions: The case of lignocellulosic biomass and blends with anthracite. vol. 95, pp. 143-153. ISSN 17460220. DOI 10.1016/j.joei.2021.01.011.

LÓPEZ, P. & VELO, R., *Estimación de la velocidad del viento mediante redes neuronales.* , Estimación de la velocidad del viento mediante redes neuronales. pp. 26-28.

MIAN, I., LI, X., JIAN, Y., DACRES, O.D., ZHONG, M., LIU, J., MA, F. & RAHMAN, N., *Bioresource Technology*. Kinetic study of biomass pellet pyrolysis by using distributed activation energy model and Coats Redfern methods and their comparison. [en línea], vol. 294, no. August, pp. 122099. ISSN 18732976. DOI 10.1016/j.biortech.2019.122099. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122099>.

MONTAVON, G., *Introduction to Neural Networks* [en línea]. Octava edi. Amsterdam: s.n. Disponible en: <http://www.op.dlr.de/FF-DR-RS/>.

NANDY, A. & BISWAS, M., *Neural Networks in Unity*. Primera ed. Kolkata: s.n. ISBN 9781484236727.

NAVARRO, M. V., LÓPEZ, J.M., VESES, A., CALLÉN, M.S. & GARCÍA, T., *Energy*, Kinetic study for the co-pyrolysis of lignocellulosic biomass and plastics using the distributed activation energy model. vol. 165, pp. 731-742. ISSN 03605442. DOI 10.1016/j.energy.2018.09.133.

OSMAN, A.I., YOUNG, T.J., FARRELL, C., HARRISON, J., AL-MUHTASEB, A.H. & ROONEY, D.W., *Physicochemical Characterization and Kinetic Modeling Concerning Combustion of Waste Berry Pomace.* , DOI 10.1021/acssuschemeng.0c07390.

SANTOS, C., DE OLIVEIRA, L., ALVES ROCHA, E. & FRANCA, A., *Renewable Energy* Thermal conversion of defective coffee beans for energy purposes: Characterization and kinetic modeling. [en línea], vol. 147, pp. 1275-1291. ISSN 18790682. DOI 10.1016/j.renene.2019.09.052. Disponible en: www.elsevier.com/locate/rene%0AThermal.

SORIA-VERDUGO, A., GARCIA-GUTIERREZ, L.M., BLANCO-CANO, L., GARCIA-HERNANDO, N. & RUIZ-RIVAS, U., *Energy Conversion and Management* Evaluating the accuracy of the Distributed Activation Energy Model for biomass devolatilization curves obtained at high heating rates. [en línea], vol. 86, pp. 1045-1049. ISSN 01968904. DOI 10.1016/j.enconman.2014.06.074. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2014.06.074>.

SORIA-VERDUGO, A., GOOS, E., ARRIETA-SANAGUSTÍN, J. & GARCÍA-HERNANDO, N., *Energy Conversion and Management* Modeling of the pyrolysis of biomass under parabolic and exponential temperature increases using the Distributed Activation Energy Model. [en línea], vol. 118, pp. 223-230. ISSN 01968904. DOI 10.1016/j.enconman.2016.04.003. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2016.04.003>.

VIÑUELA, P.I. & GALVÁN, I.M., *Book Review : Redes Neuronales Artificiales . Un Enfoque Práctico* Pearson Educación , 2004 ISBN 84-205-4025-0. , vol. 4, no. 2, pp. 122-123.

XU, D., CHAI, M., DONG, Z., RAHMAN, M.M., YU, X. & CAI, J., *Bioresource Technology*, Kinetic compensation effect in logistic distributed activation energy model for lignocellulosic biomass pyrolysis. vol. 265, pp. 139-145. ISSN 18732976. DOI 10.1016/j.biortech.2018.05.092.

ANEXOS

ANEXO A: ENTRENAMIENTO DE RED

Arquitectura de red	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
3-25-1	1.27E-04	0.55277	1.10E-02	0.41475	2.00E-04	0.47796
3-50-1	9.52E-03	0.30681	7.69E-05	0.35922	7.17E-02	0.08252
3-75-1	4.34E-04	0.16829	0.008598	0.54432	2.01E-02	0.46611
3-100-1	3.87E-04	0.56633	7.48E-05	0.35435	2.73E-03	0.36525
3-125-1	1.76E-04	0.50711	0.009469	0.54671	7.27E-02	0.17072
3-150-1	1.50E-05	0.51941	0.009005	0.55401	7.65E-02	0.06176
3-175-1	0.001294	0.37073	0.010946	0.41797	2.00E-03	0.19868
3-200-1	9.03E-05	0.38292	0.009496	0.54521	9.00E-02	0.00783
3-225-1	1.66E-04	0.71605	0.009076	0.53885	4.94E-02	0.35137
3-250-1	0.002948	0.56928	0.009391	0.55078	3.15E-03	0.47936
3-275-1	1.25E-04	0.70725	0.009280	0.55681	8.07E-04	0.53241
3-300-1	2.98E-04	0.70242	9.08E-07	0.59447	1.16E-02	0.43465
3-325-1	0.065462	0.45379	0.009335	0.55391	9.99E-03	0.01046
3-350-1	0.003591	0.52134	0.008895	0.55895	2.80E-03	0.39387
3-375-1	0.001195	0.74468	0.011091	0.41973	6.14E-02	0.17241
3-400-1	0.008032	0.20276	0.009193	0.56258	8.06E-02	0.25442
3-425-1	0.001355	0.67664	3.71E-07	0.27155	3.75E-03	0.43175
3-450-1	0.072723	0.15316	0.009025	0.57354	1.00E-02	0.44071
3-475-1	0.006304	0.58753	6.06E-07	0.28051	4.41E-03	0.43304
3-500-1	0.003108	0.29747	6.90E-07	0.99857	5.45E-02	0.43424
3-525-1	0.008235	0.66622	5.50E-07	0.89416	8.24E-03	0.32567
3-550-1	0.007687	0.33697	9.92E-07	0.99992	1.38E-02	0.41404
3-575-1	0.003498	0.27123	2.34E-07	0.25997	3.90E-02	0.18061
3-600-1	0.091904	0.06934	1.86E-07	0.26255	8.76E-03	0.31374

ANEXO B: RESULTADOS DEL MODELO DE CINÉTICA LIBRE

TEMPERATURA (K)	PESO (mg)	TIEMPO (s)	Energía de Activación (KJ/mol)
298.15	14.3538	0	0
303.15	14.3483	20	264.5538534
308.15	14.3231	40	56.25993231
313.15	14.3095	60	134.5590394
318.15	14.2524	80	86.97215797
323.15	14.1825	100	85.43949448
328.15	14.0714	120	45.72500291
333.15	13.9851	140	59.37252368
338.15	13.84	160	42.29906341
343.15	13.7046	180	34.12345205
348.15	13.5717	200	29.77226461
353.15	13.4361	220	15.94539014
358.15	13.3498	240	21.63015947
363.15	13.2287	260	18.00254612
368.15	13.117	280	8.162002835
373.15	13.0546	300	7.952871317
378.15	12.9918	320	8.202117248
383.15	12.926	340	8.563731174
388.15	12.8564	360	5.348932956
393.15	12.8048	380	4.816706639
398.15	12.7558	400	2.941673284
403.15	12.7178	420	7.239530681
408.15	12.6531	440	2.278762875
413.15	12.6462	460	4.213141623
418.15	12.6	480	3.956738189
423.15	12.555	500	3.037638118
428.15	12.5153	520	2.777715285
433.15	12.477	540	1.376781154
438.15	12.4636	560	0.932517414
443.15	12.4365	580	7.071393262
448.15	12.3729	600	2.029274911
453.15	12.3628	620	1.801406346
458.15	12.3303	640	5.612817715
463.15	12.3405	660	4.728386798
468.15	12.2919	680	1.101302943
473.15	12.2761	700	1.02771562
478.15	12.2484	720	0.790764023
483.15	12.222	740	2.67865902
488.15	12.2146	760	7.648178511
493.15	12.151	780	3.685383912
498.15	12.1085	800	6.37640298

503.15	12.051	820	12.29060554
508.15	11.9599	840	6.805797594
513.15	11.8981	860	9.7817457
518.15	11.8187	880	13.99804515
523.15	11.7135	900	21.7076094
528.15	11.5593	920	20.70495056
533.15	11.4053	940	24.39627554
538.15	11.2215	960	29.27867709
543.15	10.9961	980	32.20840543
548.15	10.7374	1000	34.68683615
553.15	10.4445	1020	32.91120738
558.15	10.148	1040	29.02630785
563.15	9.86799	1060	30.87637002
568.15	9.55774	1080	30.07541782
573.15	9.23919	1100	30.91961785
578.15	8.89678	1120	25.51354565
583.15	8.5933	1140	28.14538098
588.15	8.24999	1160	24.77051432
593.15	7.92955	1180	24.70875911
598.15	7.5983	1200	16.84412204
603.15	7.34785	1220	12.68655331
608.15	7.1413	1240	8.279333911
613.15	6.98425	1260	5.767546228
618.15	6.85585	1280	4.736466248
623.15	6.7391	1300	1.613482615
628.15	6.65895	1320	1.996419898
633.15	6.57425	1340	4.647207283
638.15	6.45839	1360	0.391347918
643.15	6.40109	1380	1.203174961
648.15	6.32534	1400	2.540942218
653.15	6.23415	1420	0.088034402
658.15	6.173	1440	0.998601823
663.15	6.0995	1460	0.126181482
668.15	6.03584	1480	1.524828047
673.15	5.95649	1500	1.508315995
678.15	5.87729	1520	2.031888892
683.15	5.79224	1540	3.694348147
688.15	5.77024	1560	3.270332863
693.15	5.67215	1580	0.296752265
698.15	5.6063	1600	1.144839357
703.15	5.556	1620	1.665413594
708.15	5.4756	1640	0.531815718
713.15	5.40725	1660	3.074481983

718.15	5.31194	1680	1.096382841
723.15	5.26054	1700	2.623629067
728.15	5.17019	1720	0.976615842
733.15	5.09695	1740	1.914800755
738.15	5.05363	1760	0.086066752
743.15	4.98975	1780	0.880977833
748.15	4.91776	1800	0.720552136
753.15	4.862	1820	0.832948856
758.15	4.7906	1840	0.541768318
763.15	4.73295	1860	0.899080572
768.15	4.66098	1880	1.56128964
773.15	4.6133	1900	indeterminación

ANEXO C. RESULTADO CINÉTICA DE FRIEDMAN

TEMPERATURA (K)	PESO (mg)	TIEMPO (s)	Energía de Activación (KJ/mol)
298.15	14.3538	0	0
303.15	14.3483	20	1782.648239
308.15	14.3231	40	159.4272673
313.15	14.3095	60	6.216541119
318.15	14.2524	80	89.52509618
323.15	14.1825	100	51.49092922
328.15	14.0714	120	55.99879441
333.15	13.9851	140	20.4520153
338.15	13.84	160	37.14962174
343.15	13.7046	180	22.40548417
348.15	13.5717	200	16.06713038
353.15	13.4361	220	13.20226781
358.15	13.3498	240	0.6026247
363.15	13.2287	260	7.3178808
368.15	13.117	280	4.567830576
373.15	13.0546	300	4.516371322
378.15	12.9918	320	4.06688039
383.15	12.926	340	3.238936774
388.15	12.8564	360	2.364829954
393.15	12.8048	380	5.122591099
398.15	12.7558	400	5.244695143
403.15	12.7178	420	6.74964861
408.15	12.6531	440	2.116161333
413.15	12.6462	460	11.32867786
418.15	12.6	480	4.557035272
423.15	12.555	500	4.556548855
428.15	12.5153	520	5.238917528
433.15	12.477	540	5.279983936

438.15	12.4636	560	9.23154782
443.15	12.4365	580	6.733563479
448.15	12.3729	600	0.418799092
453.15	12.3628	620	9.355116628
458.15	12.3303	640	5.370523303
463.15	12.3405	660	12.6403099
468.15	12.2919	680	2.163293732
473.15	12.2761	700	7.865047268
478.15	12.2484	720	5.615302184
483.15	12.222	740	5.73814417
488.15	12.2146	760	9.099544989
493.15	12.151	780	1.329701866
498.15	12.1085	800	2.53586989
503.15	12.051	820	0.247569834
508.15	11.9599	840	6.249738094
513.15	11.8981	860	0.848755453
518.15	11.8187	880	3.904674071
523.15	11.7135	900	8.197349185
528.15	11.5593	920	15.97993131
533.15	11.4053	940	15.04714926
538.15	11.2215	960	18.80540835
543.15	10.9961	980	23.7519834
548.15	10.7374	1000	26.74329196
553.15	10.4445	1020	29.28086372
558.15	10.148	1040	27.56207892
563.15	9.86799	1060	23.73185756
568.15	9.55774	1080	25.63455359
573.15	9.23919	1100	24.88430347
578.15	8.89678	1120	25.77737825
583.15	8.5933	1140	20.4184505
588.15	8.24999	1160	23.09579028
593.15	7.92955	1180	19.76487218
598.15	7.5983	1200	19.74558811
603.15	7.34785	1220	11.92201801
608.15	7.1413	1240	7.804180599
613.15	6.98425	1260	3.435420987
618.15	6.85585	1280	0.960881635
623.15	6.7391	1300	0.034105115
628.15	6.65895	1320	3.122097707
633.15	6.57425	1340	2.705221844
638.15	6.45839	1360	0.021501557
643.15	6.40109	1380	5.028085487
648.15	6.32534	1400	3.402511452

653.15	6.23415	1420	2.034573998
658.15	6.173	1440	4.634224413
663.15	6.0995	1460	3.519071046
668.15	6.03584	1480	4.363750282
673.15	5.95649	1500	2.938107398
678.15	5.87729	1520	2.928338319
683.15	5.79224	1540	2.37917143
688.15	5.77024	1560	8.080475014
693.15	5.67215	1580	1.091495841
698.15	5.6063	1600	4.041389593
703.15	5.556	1620	5.459882901
708.15	5.4756	1640	2.627098504
713.15	5.40725	1660	3.738711185
718.15	5.31194	1680	1.174586351
723.15	5.26054	1700	5.324500532
728.15	5.17019	1720	1.584028084
733.15	5.09695	1740	3.211053873
738.15	5.05363	1760	6.082939917
743.15	4.98975	1780	4.062983251
748.15	4.91776	1800	3.249409608
753.15	4.862	1820	4.83268947
758.15	4.7906	1840	3.261337302
763.15	4.73295	1860	4.618589291
768.15	4.66098	1880	3.160648824
773.15	4.6133	1900	5.604289202

ANEXO D: RESULTADOS CINÉTICA DE COAST

TEMPERATURA (K)	PESO (mg)	TIEMPO (s)	Energía de Activación (KJ/mol)
298.15	14.3538	0	0
303.15	14.3483	20	2841.600563
308.15	14.3231	40	262.3026232
313.15	14.3095	60	53.83916872
318.15	14.2524	80	132.6388287
323.15	14.1825	100	85.20103919
328.15	14.0714	120	84.2114731
333.15	13.9851	140	44.17199791
338.15	13.84	160	58.6774267
343.15	13.7046	180	41.50893269
348.15	13.5717	200	33.34109131
353.15	13.4361	220	29.08302288
358.15	13.3498	240	14.46263536
363.15	13.2287	260	20.78182445
368.15	13.117	280	17.02620993
373.15	13.0546	300	6.276061228
378.15	12.9918	320	6.074032474
383.15	12.926	340	6.3854169
388.15	12.8564	360	6.831841267
393.15	12.8048	380	3.230194197
398.15	12.7558	400	2.633259231
403.15	12.7178	420	0.494467387
408.15	12.6531	440	5.41835221
413.15	12.6462	460	5.522595031
418.15	12.6	480	1.928726893
423.15	12.555	500	1.633996829
428.15	12.5153	520	0.564911004
433.15	12.477	540	0.254841088
438.15	12.4636	560	4.618951563
443.15	12.4365	580	1.943409923
448.15	12.3729	600	5.266775057
453.15	12.3628	620	5.465967288
458.15	12.3303	640	0.964680477
463.15	12.3405	660	9.770879303
468.15	12.2919	680	2.459016332
473.15	12.2761	700	4.48014456
478.15	12.2484	720	1.967993945
483.15	12.222	740	2.269204419
488.15	12.2146	760	6.447868828
493.15	12.151	780	5.933633908

498.15	12.1085	800	1.187429563
503.15	12.051	820	4.467727404
508.15	11.9599	840	11.76208458
513.15	11.8981	860	5.127176956
518.15	11.8187	880	8.887106659
523.15	11.7135	900	14.30522686
528.15	11.5593	920	24.37933556
533.15	11.4053	940	23.60566035
538.15	11.2215	960	29.03828035
543.15	10.9961	980	36.47035994
548.15	10.7374	1000	41.81193238
553.15	10.4445	1020	47.09199542
558.15	10.148	1040	46.61577968
563.15	9.86799	1060	42.83125974
568.15	9.55774	1080	48.0878723
573.15	9.23919	1100	49.58702026
578.15	8.89678	1120	54.43956148
583.15	8.5933	1140	48.00534343
588.15	8.24999	1160	57.12348488
593.15	7.92955	1180	54.75305566
598.15	7.5983	1200	59.85822008
603.15	7.34785	1220	45.49342441
608.15	7.1413	1240	38.06352206
613.15	6.98425	1260	28.27865152
618.15	6.85585	1280	22.64957166
623.15	6.7391	1300	20.93678448
628.15	6.65895	1320	11.94721271
633.15	6.57425	1340	14.05490731
638.15	6.45839	1360	24.55490105
643.15	6.40109	1380	7.481528086
648.15	6.32534	1400	14.16915227
653.15	6.23415	1420	20.56387119
658.15	6.173	1440	11.10715229
663.15	6.0995	1460	16.63590924
668.15	6.03584	1480	13.9651434
673.15	5.95649	1500	21.61370321
678.15	5.87729	1520	23.32624458
683.15	5.79224	1540	28.100526
688.15	5.77024	1560	0.722472962
693.15	5.67215	1580	38.71830734
698.15	5.6063	1600	24.59773618
703.15	5.556	1620	17.61423115
708.15	5.4756	1640	38.30546273

713.15	5.40725	1660	34.27347306
718.15	5.31194	1680	58.85247701
723.15	5.26054	1700	30.00581239
728.15	5.17019	1720	69.92353415
733.15	5.09695	1740	63.84654044
738.15	5.05363	1760	38.0708393
743.15	4.98975	1780	71.27277044
748.15	4.91776	1800	99.46514066
753.15	4.862	1820	92.85413197
758.15	4.7906	1840	160.9165222
763.15	4.73295	1860	184.9787747
768.15	4.66098	1880	435.1222117
773.15	4.6133	1900	Indeterminado

ANEXO E NEURONAL NET FITTING

Welcome to the Neural Network Fitting app.
Solve an input-output fitting problem with a two-layer feed-forward neural network.

Introduction:
In fitting problems, you want a neural network to map between a data set of numeric inputs and a set of numeric targets.

Examples of this type of problem include estimating engine emission levels based on measurements of fuel consumption and speed (`engine_data.csv`) or predicting a patient's bodyfat level based on body measurements (`bodyfat_data.csv`).

The Neural Fitting app will help you select data, create and train a network, and evaluate its performance using mean square error and regression analysis.

Neural Network:

A two-layer feed-forward network with sigmoid hidden neurons and linear output neurons (`trainffn`), can fit multi-dimensional mapping problems arbitrarily well, given consistent data and enough neurons in its hidden layers.

The network will be trained with Levenberg-Marquardt backpropagation algorithm (`trainlm`), unless there is not enough memory, in which case scaled conjugate gradient backpropagation (`trainsgx`) will be used.

Get Data from Workspace
Input data to present to the network.
Inputs: `Entradas_norm`

Target data defining desired network output.
Targets: `Salidas_norm`

Samples are: Matrix columns Matrix rows

Want to try out this tool with an example data set?
[Load Example Data Set](#)

Summary
Inputs 'Entradas_norm' is a 3x85 matrix, representing static data: 85 samples of 3 elements.
Targets 'Salidas_norm' is a 1x85 matrix, representing static data: 85 samples of 1 element.

Network Architecture
Set the number of neurons in the fitting network's hidden layer.

Hidden Layer
Define a fitting neural network (`ffnn`)
Number of Hidden Neurons:

Recommendation
Return to this pane and change the number of neurons if the network does not perform well after training.

Reset to Defaults

Neural Network

Input: 3
Hidden Layer: 50
Output Layer: 1
Output: 1

Change settings if desired, then click [Next] to continue.
Active Windows
Neural Network Start | Welcome



espoch

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: 05 / 10 / 2022

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Lenin Stalin Vacacela Asadobay</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniero Químico</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.



Luis Caminos

0935-DBRAI-UTP-2021