



**Universidad de Valladolid**



**ESCUELA DE INGENIERÍAS  
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

**ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES**

**GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**APROXIMACIÓN AL MODELADO DE PROCESOS  
DE INGENIERÍA QUÍMICA MEDIANTE MODELOS  
DE MACHINE LEARNING**

**Autora:**

**Rodríguez Gallego, María**

**Tutor:**

**García Serna, Juan**

*Departamento de Ingeniería Química y  
Tecnologías del Medio Ambiente*

**Valladolid**

**Noviembre , 2020**

# Tabla de contenido

RESUMEN	9
ABSTRACT	9
1. INTRODUCCIÓN	10
2. ANTECEDENTES GENERALES	12
<b>2.1. Machine Learning</b>	<b>12</b>
2.1.1. ¿Qué es?	12
2.1.2. ¿Cómo funciona?	12
2.1.3. Tipos de Machine Learning	12
2.1.4. Aplicaciones	14
2.1.5. Industria 4.0	14
2.1.6. Redes neuronales	15
<b>2.2. EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR</b>	<b>16</b>
2.2.1. Operaciones de separación líquido-vapor. Equipo Flash.	20
2.2.2. Knock-out Drums o Depósitos FLASH	22
<b>2.3. Equilibrio del Amoniacó</b>	<b>24</b>
2.3.1. Propiedades y características	24
2.3.2. Principios de Le Chatelier para equilibrios químicos.	25
2.3.3. Ecuación de Arrhenius para constantes cinéticas	25
2.3.4. Síntesis industrial del amoniacó	26
2.3.5. Aplicaciones del amoniacó	29
<b>2.4. Tratamiento hidrotermal de biomasa</b>	<b>29</b>
3. MATERIAL EXPERIMENTAL	32
<b>3.1. Material ASPEN Plus V11</b>	<b>32</b>
3.1.1. Proceso de cálculo de la fracción de vapor.	32
3.1.2. Proceso de cálculo de la constante de equilibrio del amoniacó y su fracción de vapor.	36
<b>3.2. Algoritmos y paquetes</b>	<b>40</b>
3.2.1. Numpy	40
3.2.2. Pandas	40
3.2.3. Keras	41
3.2.4. Random	41
<b>3.3. Simulación</b>	<b>42</b>
3.3.1. Simulación L_V	42

3.3.2.	Simulación equilibrio Amoniaco	44
3.3.3.	Simulación de biomasa	46
<b>4.</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>49</b>
<b>4.1.</b>	<b>Resultados simulación líquido-vapor</b>	<b>49</b>
4.1.1.	RESULTADOS PARA 3 CAPAS:	49
4.1.2.	Resultados para 6 capas:	52
<b>4.2.</b>	<b>Resultados simulación equilibrio del amoniaco</b>	<b>55</b>
<b>4.3.</b>	<b>Resultados biomasa</b>	<b>66</b>
<b>5.</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>70</b>
<b>5.1.</b>	<b>Conclusiones experimentación líquido-vapor</b>	<b>70</b>
<b>5.2.</b>	<b>Conclusiones experimentación equilibrio del amoniaco</b>	<b>75</b>
<b>5.3.</b>	<b>Conclusiones experimentación biomasa</b>	<b>82</b>
<b>6.</b>	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>82</b>

## Tabla de Figuras

Figura 1- Esquema de los cambios en las revoluciones industriales.....	15
Figura 2- Esquema del funcionamiento de las redes neuronales .....	16
Figura 3- Esquema del equilibrio líquido-vapor .....	17
Figura 4- Ecuaciones de cálculo de NRTL (I).....	18
Figura 5- Ecuaciones de cálculo de NRTL (II).....	18
Figura 6- Ecuaciones de cálculo NRTL (III).....	18
Figura 7- Esquema del algoritmo de cálculo de la fracción de vapor .....	22
Figura 8- Esquema de KO drum.....	23
Figura 9- Esquema de la reactividad del amoniaco .....	25
Figura 10- Equilibrio de síntesis del amoniaco.....	26
Figura 11- Cálculo de la constante de equilibrio de la reacción de síntesis del amoniaco .....	26
Figura 12- Diagrama de una planta de producción de amoniaco .....	28
Figura 13- Ecuación de calculo de Py .....	30
Figura 14- Ecuación de cálculo de la Energía de biocrudo o hidrocarburos por kg de biomasa ..	31
Figura 15- Ecuación de cálculo de kg de carbono por kg de biomasa seca .....	31
Figura 16- Método de selección de ecuaciones termodinámicas.....	34
Figura 17- Selección de las variables de la simulación en ASPEN-HYSIS-HYSIS .....	35
Figura 18- Resultados de la simulación en ASPEN-HYSIS-HYSIS.....	36
Figura 19- Introducción de la reacción de equilibrio en ASPEN-HYSIS .....	38
Figura 20- Diagrama de flujo de la simulación.....	39
Figura 21- Resultados de la simulación.....	39
Figura 22- Captura de pantalla del programa del Experimento L-V (I) .....	42
Figura 23- Captura de pantalla del Experimento L-V (II).....	43
Figura 24- Captura de pantalla del Experimento L-V (IV) .....	43
Figura 25- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoniaco (I).....	44
Figura 26- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoniaco (II).....	45
Figura 27- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoniaco (III).....	46
Figura 28- Captura de pantalla del programa del experimento de la biomasa (I).....	46
Figura 29- Captura de pantalla del programa de la biomasa (II) .....	47
Figura 27- Gráfico de resultados totales para 3 capas.....	52
Figura 31- Gráfico con errores de los experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 3 capas y 2 variables. ....	56
Figura 32- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 3 capas y 2 variables. ....	57
Figura 33- Gráfico con errores experimentos 1, 2 u 3 para 20 repeticiones, 6 capas y 2 variables .....	59
Figura 34- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 6 capas y 2 variables. ....	60

Figura 35- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 3 capas y 4 variables. .....	62
Figura 36- Gráficas con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 3 capas y 4 variables. ....	63
Figura 37- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 6 capas y 4 variables. .....	65
Figura 38- Gráfico con errores de los experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 6 capas y 4 variables. ....	66
Figura 39- Gráfico de resultados de las variables 1, 2 y 3. ....	67
Figura 40- Gráfico de los resultados de las variables 4, 5 y 6 .....	68
Figura 41- Gráfico de las variables 7 y 8.....	69
Figura 42- Comparación de las precisiones.....	70
Figura 43- Comparación del porcentaje de experimentos fallidos.....	71
Figura 44- Comparación de la precisión.....	72
Figura 45- Comparación de los experimentos fallidos.....	73
Figura 46- Comparación de la precisión.....	74
Figura 47- Comparación de la precisión.....	75

## Tabla de Tablas

Tabla 1 – Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 1.....	32
Tabla 2- Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 2 .....	32
Tabla 3- Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 3 .....	33
Tabla 4- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 1.1+1.2.....	33
Tabla 5- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 2.1+2.2.....	33
Tabla 6- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 3.1+3.2.....	34
Tabla 7- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 1 .....	36
Tabla 8- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 2 .....	37
Tabla 9- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 3 .....	37
Tabla 10- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 1.1 .....	37
Tabla 11- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 2.1 .....	37
Tabla 12- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 3.1 .....	37
Tabla 13- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 1 .....	49
Tabla 14- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 1.1+1.2.....	50
Tabla 15- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 2 .....	50
Tabla 16- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 2.1+2.2.....	51
Tabla 17- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 3 .....	51
Tabla 18- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 3.1+3.2.....	52
Tabla 19- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 1 .....	53
Tabla 20- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 1.1+1.2.....	53
Tabla 21- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 2 .....	53
Tabla 22- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 2.1+2.2.....	54
Tabla 23- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 3 .....	54
Tabla 24- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 3.1+3.2.....	55
Tabla 25- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	55
Tabla 26- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	56
Tabla 27- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	57
Tabla 28- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	57
Tabla 29- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	58
Tabla 30- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	58
Tabla 31- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	59
Tabla 32- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	60

Tabla 33- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	60
Tabla 34- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	61
Tabla 35- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	61
Tabla 36- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	62
Tabla 37- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	62
Tabla 38- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	63
Tabla 39- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	63
Tabla 40- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	64
<i>Tabla 11- Errores máximo y mínimo de las variables</i> .....	64
Tabla 42- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	64
Tabla 43- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	64
Tabla 44- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	65
Tabla 45- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	66
Tabla 46- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables. ....	66
Tabla 47- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (I) .....	76
Tabla 48- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (II) .....	76
Tabla 49- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (III) .....	76
Tabla 50- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (IV) .....	76
Tabla 51- Comparación de las precisiones para los diferentes experimentos del amoniaco (I) ..	77
Tabla 52-- Comparación de las precisiones para los diferentes experimentos del amoniaco (I) .	77
Tabla 53- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (V) .....	77
Tabla 54- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VI) .....	78
Tabla 55- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VII) .....	78

Tabla 56- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VIII) .....	78
Tabla 57-Comparación de las precisiones de los diferentes experimentos del amoniaco.....	79
Tabla 58- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (IX) .....	79
Tabla 59- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (X) .....	79
Tabla 60- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (XI) .....	80
Tabla 61- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (XII) .....	80
Tabla 62- Comparación de los errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos de la biomasa. ....	82



## Resumen

Este trabajo de fin de grado es el resultado de la búsqueda de la adaptación de los nuevos avances de las tecnologías, como son el Machine Learning, la Inteligencia Artificial y las redes neuronales.

Los simuladores de procesos industriales empleados en la actualidad, como Aspen Plus, son herramientas potentes, pero a la vez costosas y que necesitan de ordenadores especialmente potentes para el desarrollo de algunos cálculos. Empleando modelos de Machine Learning, se podría reducir el tiempo de cálculo, ya que son herramientas específicas que no requieren equipos de especial potencia.

El presente trabajo es tan solo un paso inicial de la búsqueda de la simbiosis de la Industria Química y las herramientas de Inteligencia Artificial.

Palabras clave: Inteligencia Artificial, Machine Learning, Procesos, Redes Neuronales, Fracción de vapor, Equilibrio químico, Biomasa, Hidrólisis térmica, Biorefinería.

## Abstract

The aim of this TFG is the pursuit of the adaptation of the newest technology advances, such as Machine Learning and Artificial Intelligence and Neural Networks.

The process simulators nowadays used, such as Aspen Plus, are powerful tools but at the same time they are expensive and need especially powerful equipment to develop their maximum functions. On the other hand, using artificial intelligence models calculation time can be reduced as they are specific tools which do not need special equipment.

This present job is just an initial step in the pursuit of the symbiosis of the chemical Industry and the Artificial Intelligence tools.

Key words: Artificial Intelligence, Machine Learning, Processes, Neural Networks, Vapor fraction, Chemical equilibrium, Biomass, Thermic hydrolysis, Biorefinery

# 1. Introducción

La Inteligencia Artificial es la rama de la ingeniería informática encargada de estudiar los posibles algoritmos o modelos que realizan actividades propias de los seres humanos imitándolos en razonamiento y conducta. A raíz de la Inteligencia Artificial surgen dos ramas más específicas: el Machine Learning y el Deep Learning.

El Machine Learning es el aprendizaje automático realizado por programas capaces de generalizar cálculos o comportamientos en función de la información que les ha sido suministrada, considerada como “ejemplos”. Está presente en diversos programas como los de reconocimiento facial, idiomas, diagnósticos médicos o, en nuestro caso, de predecir los resultados de cierto proceso químico.

El Deep Learning es la función de la inteligencia artificial que intenta imitar el funcionamiento del cerebro humano y su razonamiento para el proceso de datos y la creación de patrones para la toma de decisiones. Se compone de redes que aprenden sin supervisión empleando datos colocados al azar.

Las redes neuronales y la inteligencia artificial permiten realizar complicados cálculos matemáticos, los necesarios para conocer el valor de esos parámetros de forma no experimental, en un breve intervalo de tiempo y con precisiones, en función del experimento, elevadas.

El objetivo de este trabajo es estudiar el funcionamiento de las redes neuronales en cuanto a su precisión, errores cometidos y pruebas fallidas en diferentes pruebas de fracción de vapor después de un equipo de transferencia de calor en ciertas condiciones para una mezcla de metanol y etanol y la constante de equilibrio químico y fracción de amoníaco en su proceso de síntesis empleando la base de datos suministrada por el programa de simulación Aspen Plus y el Machine Learning.

Por otra parte, los experimentos simulados con las redes neuronales serán el estudio de la fracción de vapor después de un equipo de intercambio de calor a presión y el estudio de la constante de equilibrio y la fracción de amoníaco en su proceso químico de síntesis.

En el estudio de la fracción de vapor, se introducirá una mezcla de metanol y etanol, inicialmente al 50% y, variando la presión y temperatura, se obtiene a la salida del intercambiador de calor una fracción de vapor que varía con las condiciones. Este proceso se ha repetido empleando variaciones de más amplitud hasta variaciones muy cercanas. Posteriormente, se realizaron las mismas pruebas para las mismas variaciones, pero con cambios en la composición de la mezcla.

En el estudio del equilibrio químico de la síntesis de amoníaco, conocido como el proceso Haber-Bosch de síntesis del amoníaco, se realiza un proceso similar al realizado en el estudio de la fracción de vapor. Inicialmente, se realizan las pruebas variando las condiciones del

proceso en torno a las empleadas en la realidad (200 bar y 400°C), empleando inicialmente amplitudes mayores y reduciéndolas de forma gradual. Posteriormente, se introdujeron también variaciones en las composiciones de los reactivos, siempre cercanas a las estequiométricas.

Finalmente, se estudiará también el resultado de un proceso de hidrólisis de diferentes biomásas partiendo de un artículo científico que recopiló datos de varios procesos con resultados de composición del producto final, ratios de oxígeno, ratios de carbono entre otros.

## 2. ANTECEDENTES GENERALES

### 2.1. Machine Learning

#### 2.1.1. ¿Qué es?

El Machine Learning es la disciplina informática relacionada con la Inteligencia Artificial y que sirve para que sistemas de computación tengan la capacidad de aprender. Esta tecnología, tiene la capacidad de hacer que una serie de operaciones complicadas y que aparentemente no tienen relación entre sí, se vuelvan automáticas y con resultados satisfactorios sin la necesidad de la intervención humana.

Estos nuevos cambios están suponiendo una gran ventaja en el manejo de grandes cantidades de información, conocido como *Big Data*, ya que, al automatizar los procesos, estos se realizan de una forma más ágil y efectiva.

Para llegar a “enseñar” al sistema es necesario “entrenarlo”, y, por tanto, que el sistema encuentre una serie de patrones complejos (determinados por una gran cantidad de parámetros). Este aprendizaje puede ser puntual o continua, si recibe datos de forma discreta o continua.

#### 2.1.2. ¿Cómo funciona?

La unidad mínima de las redes neuronales son las neuronas. Las neuronas son en realidad algoritmos, ecuaciones matemáticas en las que se intenta buscar la relación más precisa entre los datos de entrada y la salida.

A diferencia de la informática clásica, en la que era necesario que se introdujeran una serie de patrones para que el sistema realizara alguna acción, los algoritmos de Machine Learning realizan buena parte de estas acciones de forma independiente. Realizan sus propios cálculos, recopilan información del sistema y obtienen los resultados óptimos para las condiciones dadas.

La clave de la capacidad del sistema a adaptarse y aprender se encuentra en la construcción de árboles de decisiones, es decir, en la relación entre las neuronas de manera que, entre las capas de las neuronas se produzcan relaciones y finalmente en la capa de salida se obtengan los mejores resultados posibles.

#### 2.1.3. Tipos de Machine Learning

##### ***Aprendizaje supervisado***

Se basa en lo que se conoce como información de entrenamiento. Se entrena al sistema proporcionando una cantidad de datos definiéndolos detalladamente con etiquetas que los definen. Por ejemplo, se entrena a un sistema para reconocer entre imágenes de perros y gatos, proporcionando previamente imágenes etiquetadas como “perro” o “gato”.

Una vez que se le proporciona la información suficiente, podrían introducirse nuevos datos sin necesidad de etiquetas en base a los patrones registrados en el entrenamiento.

Algunos de los algoritmos más importantes para el aprendizaje supervisado son:

- Regresión Lineal
- Regresión Logarítmica
- Clasificación de Naïve Bayes.
- Redes Neuronales
- SVMs (Support Vector Machines)

### ***Aprendizaje no supervisado***

En este tipo de aprendizaje no se usan valores “verdaderos” ni etiquetas. Su objetivo es que el sistema comprenda y abstraiga los patrones de información de manera directa. Se conoce como *clustering*. Por ejemplo, si se introducen las mismas imágenes de perros y gatos sin etiquetar el sistema puede llegar a detectar patrones que digan que hay dos conjuntos de imágenes distintos o al menos que tienen ciertas diferencias.

Algunos de los algoritmos más importantes empleados en el aprendizaje supervisado son:

- K-means.
- PCA (Principal component análisis)
- Análisis de similitud para la agrupación o diferenciación de elementos.
- Análisis de Componentes Principales
- Análisis de Componentes Independientes.

### ***Aprendizaje por refuerzo***

Finalmente, en el aprendizaje por refuerzo los sistemas aprenden a partir de la experiencia. Cuando tomen decisiones correctas se les premia, mientras que si toman decisiones erróneas se les castiga.

Es una técnica basada en el ensayo y error y en el uso de funciones premio que optimizan el funcionamiento del sistema.

Es una de las formas más interesantes para la inteligencia artificial ya que no requiere que se introduzca una gran cantidad de información. Como ejemplo está que el algoritmo aprenda a jugar a un juego de ocio, e.g. *Breakout*, en un principio prueba acciones sin sentido en una u otra dirección y cuando hace la correcta rebotando la bola consigue un

punto (refuerzo). A partir de ahí el algoritmo “aprende” cómo jugar para maximizar los puntos ganados.

#### **2.1.4. Aplicaciones**

Hoy en día el Machine Learning es un tema de actualidad, ya que se está aplicando en tecnologías tan diferentes como:

- Detección de rostro para, por ejemplo, teléfonos móviles.
- Antispam.
- Antivirus.
- Genética. Para la clasificación de secuencias de ADN.
- Forecast de clima o tráfico.
- Comprensión de textos
- Vehículos autónomos y robots.
- Análisis de imágenes de alta calidad.
- Análisis de comportamiento de consumo y productividad. Para la identificación de clientes potenciales y en general en sectores como telecomunicaciones, banca, seguros...

Además de estas aplicaciones, se siguen investigando otras aplicaciones como detección prematura de cánceres, sistemas de control de vuelo... etc.

#### **2.1.5. Industria 4.0**

La industria 4.0 o industria inteligente es el proceso por el cual las empresas actuales se están transformando en organizaciones más eficientes y con menos desperdicios con el objetivo de obtener unos mejores resultados. Es considerada la cuarta revolución industrial.

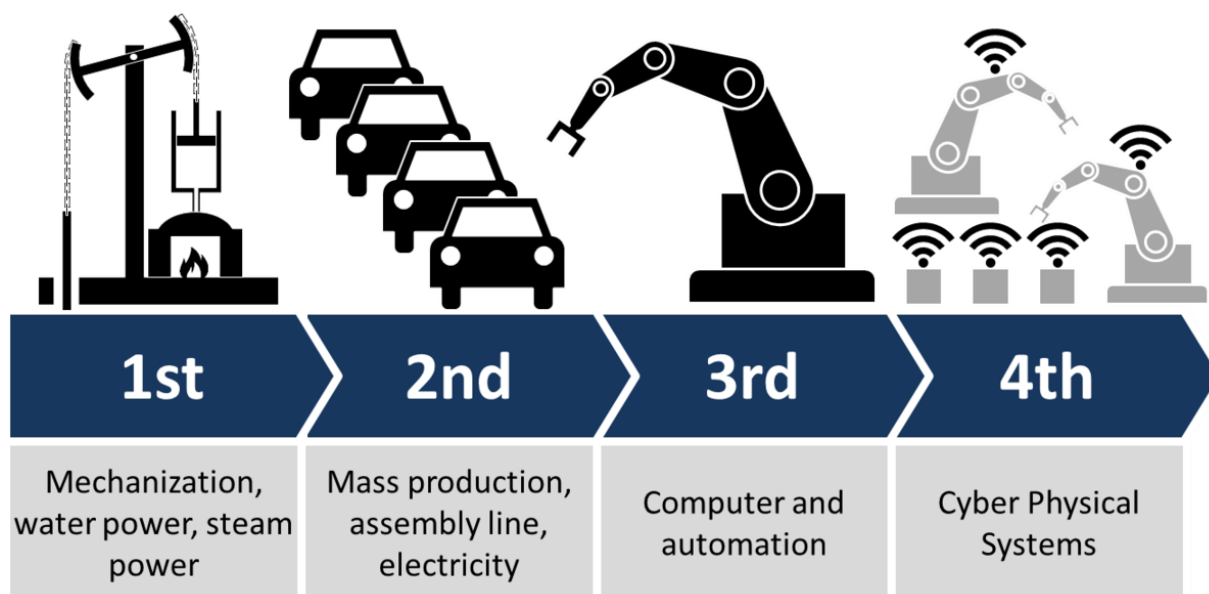


Figura 1- Esquema de los cambios en las revoluciones industriales

Este cambio se realiza empleando las nuevas tecnologías para, progresivamente, automatizar los procesos productivos. Se trata de fabricación aditiva, robótica colaborativa, herramientas de planificación de la producción, visión artificial, realidad virtual, gamificación, simulación de procesos, inteligencia operacional y las denominadas KET por su acrónimo en inglés: Key Enabling Technologies.

En esta nueva revolución industrial, la industria apuesta por una mayor automatización de los procesos, una mayor globalización y una conectividad más eficiente. Estos tres cambios y la relación entre las áreas de Productos, Procesos y los modelos de negocio, perpetrar un gran cambio en la industria, trayendo avances tecnológicos que permiten la optimización de procesos y sistemas de la planta, de la mano del Big Data y Analytics, los grandes cambios tecnológicos.

### 2.1.6. Redes neuronales

El funcionamiento de las redes es similar al que se desarrolla en el cerebro humano. El cerebro humano recibe una serie de estímulos de entrada, establece relaciones entre ellos y llega a una conclusión, proceso que ocurre igual en las redes neuronales. Las redes reciben una serie de valores de entrada, en una red en la que cada una de ellas tiene un peso, un valor numérico o una ecuación que modifica el valor de la entrada recibida.

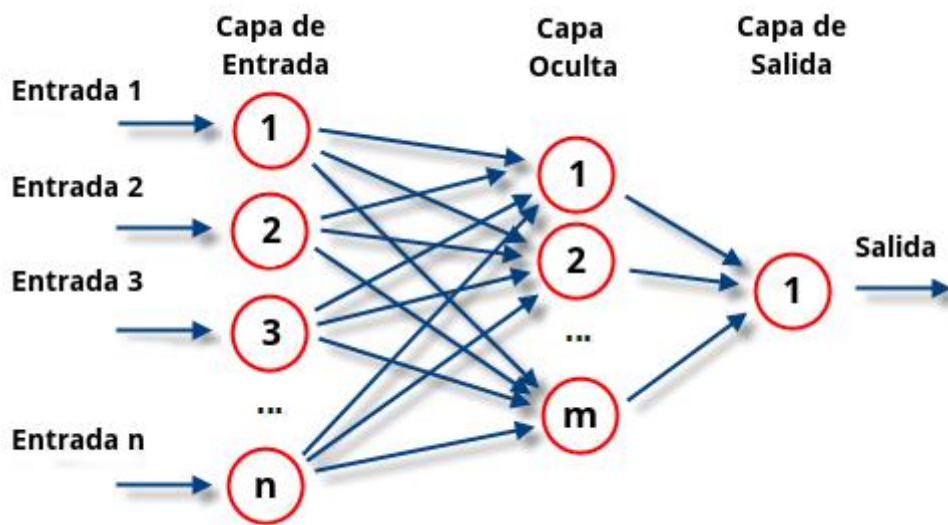


Figura 2- Esquema del funcionamiento de las redes neuronales

Finalmente, al terminar su paso por la red, los nuevos valores obtenidos, que han ido pasando de neurona a neurona y experimentando cambios, obtienen un número de valores de salida determinados, que serán la predicción o predicciones alcanzadas por la red.

Según el número de capas, el número de repeticiones del proceso (repeticiones) y el número de neuronas que tenga la red, más o menos compleja será, pudiendo llegar a completar funciones más complejas.

## 2.2. EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

El equilibrio líquido-vapor es uno de los cálculos clave en Ingeniería Química, ya que rige en muchos de los procesos de transferencia de materia.

Según las leyes de la termodinámica, es necesario que siempre exista equilibrio entre fases para todas las condiciones de presión y temperatura. Este equilibrio de fases, a saber, sólido, líquido y vapor, puede resultar especialmente interesante de estudiar cuando la aparición de una de las fases en situaciones indeseadas, como por ejemplo la aparición de burbujas de vapor en bombas o la aparición de gotas de líquido en compresores.

Para todas las condiciones de presión y temperatura, coexistirán las dos fases que la termodinámica marque. Por ejemplo, a 17°C y 1 atmósfera, coexistirán las fases líquido y vapor del aire y el agua:



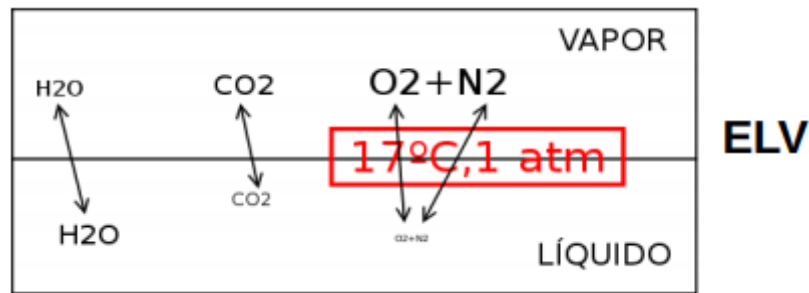


Figura 3- Esquema del equilibrio líquido-vapor

Para el caso ideal el equilibrio, regulado por las leyes de Raoult:

$$P_i = x_i * P_i^{sat}$$

Y empleando a la vez la relación de equilibrio de fases (en el caso ideal):

$$y_i = \frac{x_i P_i^{sat}}{P}$$

Para emplear esta relación de equilibrio se debe tener en cuenta que la suma de las presiones parciales debe ser en total la presión absoluta (ley de Dalton ideal).

Para calcular la presión de saturación de un componente se puede emplear la ecuación de Antoine:

$$\log(P_i^{sat}) = A \pm \frac{B}{T \pm C}$$

En el caso real, pueden ser empleadas diversas ecuaciones que se ajustan más a la realidad. En esta ocasión, han sido empleadas las de termodinámica de Peng-Robinson y las del método NRTL.

Las ecuaciones de Peng Robinson requieren el uso de tres propiedades por cada compuesto puro:  $T_c$ ,  $P_c$  y el factor acéntrico  $\omega$ .

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v^2 + 2bv + b^2}$$

Donde  $a$ ,  $b$  y  $v$  son calculadas empleando las propiedades.

Por otra parte, el método NRTL, por sus siglas en inglés, en castellano conocido como el modelo no aleatorio de dos líquidos, es el método que emplea los coeficientes de actividad de un compuesto y sus correspondientes fracciones molares en la fase líquida correspondiente.

Para una mezcla binaria, emplea las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} \ln \gamma_1 = x_2^2 \left[ \tau_{21} \left( \frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \\ \ln \gamma_2 = x_1^2 \left[ \tau_{12} \left( \frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \end{cases}$$

Figura 4- Ecuaciones de cálculo de NRTL (I)

Junto con:

$$\begin{cases} \ln G_{12} = -\alpha_{12} \tau_{12} \\ \ln G_{21} = -\alpha_{21} \tau_{21} \end{cases}$$

Figura 5- Ecuaciones de cálculo de NRTL (II)

Donde:

$$\begin{cases} \tau_{12} = \frac{\Delta g_{12}}{RT} = \frac{U_{12} - U_{22}}{RT} \\ \tau_{21} = \frac{\Delta g_{21}}{RT} = \frac{U_{21} - U_{11}}{RT} \end{cases}$$

Figura 6- Ecuaciones de cálculo NRTL (III)

Estas ecuaciones serán empleadas en los diferentes tipos de equilibrio, que son:

Según las fases implicadas:

- Equilibrio líquido vapor:
  - i) Líquido vapor
  - ii) Gas - Líquido: Gas soluble y líquido poco volátil
  - iii) Psicrométrico: Gas insoluble y líquido volátil.
- Equilibrio líquido-líquido:
  - i) Binario (Miscibilidad parcial)
  - ii) Multicomponente
- Equilibrio líquido-líquido-vapor

- i) Total o parcialmente inmiscibles
- Equilibrio sólido líquido
  - i) Binario: fusión o solubilidad
  - ii) Multicomponente: fusión o solubilidad

Todos estos tipos de equilibrios pueden tener diferentes aplicaciones. Dependiendo de si se desea la aparición o la desaparición de las fases, se emplearán diferentes procesos.

- Desaparición de las fases. Si se desea la desaparición de las fases, se emplearán flujos, bombes, compresiones o inundaciones de los componentes, impidiendo que se formen las fases por separado.
- Si se desea la aparición de las fases con el objetivo, principalmente, de separarlas:
  - i) Si el equilibrio es del tipo Líquido-Vapor:
    - ◆ Destilación o Rectificación empleando torres de platos o de relleno.
    - ◆ Gas-líquido: Absorción o desorción, en función de si se desea “limpiar” el gas o el líquido.
    - ◆ Psicrométrico: se emplea para los acondicionamientos de manera que se disminuya la temperatura de un ambiente.
  - ii) Para equilibrios líquido-líquido:
    - ◆ Se emplean extracciones líquido líquido.
  - iii) En equilibrios sólido-líquido:
    - ◆ Cristalización: se evapora el líquido a cierta velocidad que varía en función del tamaño de cristal deseado.
    - ◆ Extracción sólido-líquido: como, por ejemplo, la empleada para hacer café.
    - ◆ Fusión por zonas, para por ejemplo separar metales.

Además, en el proceso de creación de fases se diferencia entre las que emplean aporte o retirada de calor de las que emplean aporte de materia:

- Aporte/retirada de calor:
  - i) Evaporación parcial, empleada en Destilaciones o Rectificaciones.

- ii) Evaporación súbita: Flash. Será el equipo empleado en nuestros experimentos para separar las fases.
- iii) Fusión por zonas.
- iv) Condensación parcial o Quenching
- v) Congelación o Cristalización

Exigen calentamientos o enfriamiento de las fases posteriormente, para obtener los productos en la forma deseada.

- Aporte de materia:
  - i) Empleo de disolventes, como por ejemplo en Extracciones líquido-líquido y sólido-líquido.
  - j) Corrientes gaseosas, como por ejemplo aire, para procesos como la Adsorción/desorción.
  - k) Sólido adsorbente o tamices moleculares como los empleados en las Adsorciones.

Exigen separación adicional para el reciclado.

### 2.2.1. Operaciones de separación líquido-vapor. Equipo Flash.

Los equipos Flash son empleados para separar una corriente de líquido y vapor ( $x < 1$ ) principalmente, para obtener las dos fases de forma individual a unas condiciones de presión y temperatura dadas.

En este proceso, las condiciones a las que se encuentre el proceso aguas arriba no son importantes, centrándose en el cálculo de la separación.

Deben de cumplirse los balances de materia:

$$L + V = 1$$

$$z_i = x_i L + y_i V$$

Además del equilibrio:

$$y_i = \frac{x_i P_i^{sat}}{P}$$

$$\sum_i x_i P_i^{sat} = P$$

Este cálculo será clave y general, permitiendo conocer las condiciones en las que se encuentra el proceso (z) en unas P y T dadas.

Cálculo del Flash: Método de Rachford-Rice

Mediante transformación algebraica:

$$L + V = 1$$

$$z_i = x_i L + y_i V$$

$$\beta = \frac{V}{L + V}$$

Y teniendo en cuenta:

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P}$$

Se construyen las siguientes ecuaciones:

$$y_i = \frac{z_i K_i}{1 + \beta(K_i - 1)}$$

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \beta(K_i - 1)}$$

Con las que finalmente, se obtiene la ecuación de Rachford-Rice:

$$\sum_i y_i - \sum_i x_i = 0$$

$$\sum_i \left[ \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + \beta(K_i - 1)} \right] = 0$$

Para conocer la fracción de vapor de la corriente, es necesario resolver la ecuación de forma iterativa para  $\beta$ . Una vez conocido  $\beta$  las variables  $y_i$ ,  $x_i$ , L y V se pueden calcular directamente.

La expresión de Rachford-Rice tendrá solución si se cumplen de forma simultánea las siguientes dos condiciones:

1ª condición:

$$\sum_i [z_i (K_i - 1)] - 1 > 0$$

Ya que, si fuera menor que 0, se trataría de líquido subenfriado en vez de una mezcla líquido vapor.

2ª condición:

$$1 - \sum_i \left[ \frac{z_i}{K_i} \right] < 0$$

Si fuera superior a 0 se trataría de vapor sobrecalentado en lugar de una mezcla de líquido y vapor.

Sumando el conocimiento de las ecuaciones y las condiciones que se deben emplear para resolver un FLASH, se ha construido el siguiente algoritmo de resolución:

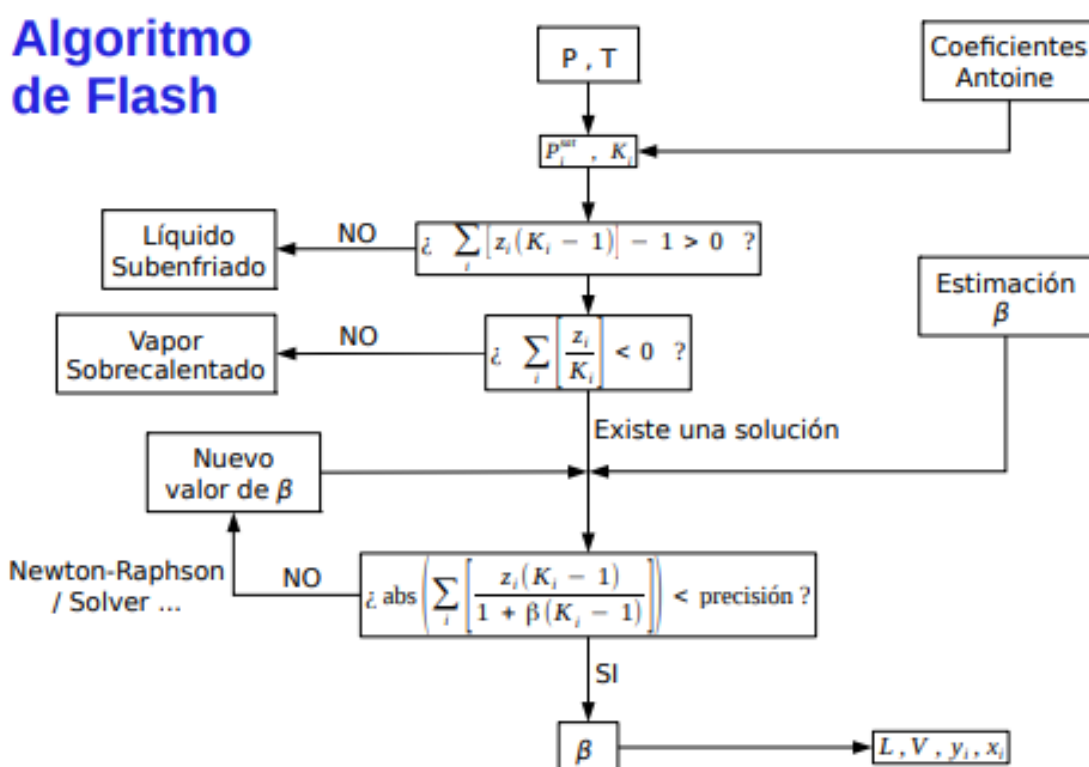


Figura 7- Esquema del algoritmo de cálculo de la fracción de vapor

El uso de las redes neuronales entrenadas para un caso concreto puede ayudar a estimar los valores semilla para este algoritmo de Flash, reduciendo el tiempo de cómputo total.

### 2.2.2. Knock-out Drums o Depósitos FLASH

Son tanques diseñados para separar líquidos condensados de base vapor. Son diseñados comúnmente tanto de forma horizontal como vertical, cuyo funcionamiento depende únicamente de los parámetros operacionales, así como de las otras condiciones de la planta que determinan las características de las condiciones de entrada.

El valor de separación teórico viene regido por el valor termodinámico que se calcularía tal como se indicó en el punto anterior 2.2.1.

Si es necesario que se almacene una gran cantidad de líquido con el objetivo de emplear el tanque de separación como, además, tanque pulmón para dar soporte a posibles problemas de irregularidades de flujo en el proceso, se suelen diseñar de forma horizontal, diseño que además es más económico. Por otra parte, si el almacenamiento deseado de líquido es bajo y el espacio disponible es limitado, se diseñan tanques verticales debido a que se adaptan bien al espacio disponible.

Aunque es cierto que tanto los tanques verticales como los horizontales se pueden diseñar para las diferentes configuraciones cuyas diferencias se encuentran principalmente en la forma en la que el vapor se encuentra dirigido.

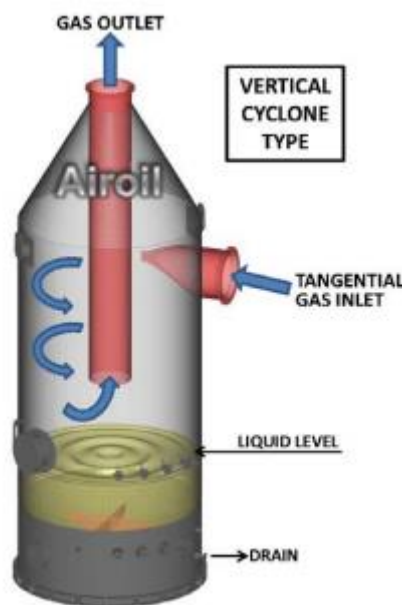


Figura 8- Esquema de KO drum

Las variadas configuraciones existentes se pueden resumir en las siguientes:

- Tanque horizontal con el vapor entrando por uno de los extremos y saliendo por la parte superior del extremo contrario.
- Tanque vertical con la entrada de vapor de forma radial y con la salida en el centro de la parte superior del tanque.
- Tanque vertical con entrada tangencial. La separación centrífuga permite que el líquido caiga a la parte inferior condensando en las paredes mientras que el gas sale por la parte central de la parte superior del tanque, tal y como se observa en la imagen.

- d) Tanque horizontal con vapor entrando por los dos extremos horizontales y saliendo por el centro del tanque.
- e) Tanque horizontal con el vapor entrando por el centro del tanque y saliendo por ambos extremos horizontales.
- f) Combinación de tanque vertical en la base y horizontal “aguas abajo” para eliminar gotas arrastradas por el vapor.

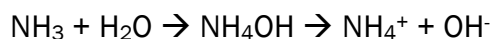
## 2.3. Equilibrio del Amoniac

### 2.3.1. Propiedades y características

Es un gas incoloro de olor irritante. Su fórmula es  $\text{NH}_3$  y su masa molecular es de 17 umas. Es muy soluble en el agua debido a su establecimiento de puentes de hidrógeno y a su estructura piramidal de  $107^\circ$ , que deja un par de electrones en uno de sus extremos y que provoca que tenga un momento dipolar distinto de 0.

Es una base de Lewis debido a que es una sustancia que puede compartir o donar un par de electrones, concretamente los que tiene apareados.

Es una base débil, que en presencia de agua reacciona de la siguiente manera:



Con un  $\text{pK}_b = 4,76$ .

Se puede preparar en escala de laboratorio tratando cloruro de amonio con hidróxido de sodio:



- Reactividad del  $\text{NH}_3$ :

El amoniac líquido se auto ioniza de modo análogo al agua:



Por lo que, dependiendo de la situación, puede actuar tanto como base como como reductor.



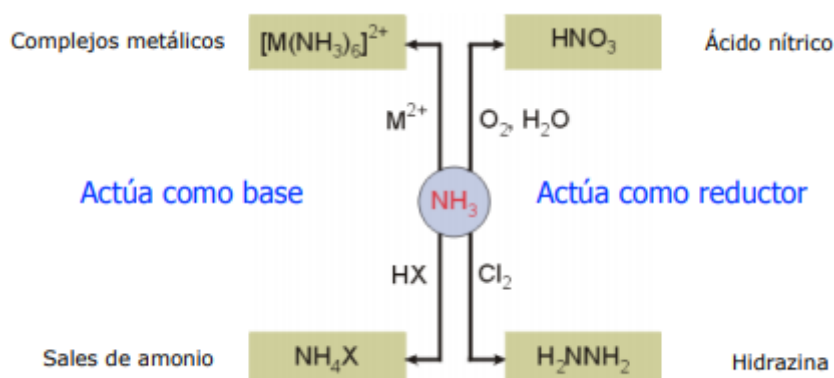


Figura 9- Esquema de la reactividad del amoníaco

### 2.3.2. Principios de Le Chatelier para equilibrios químicos.

Formulado en 1888, el principio de Le Chatelier se refiere a que un equilibrio químico tiende a mantenerse constante a ciertas condiciones del sistema. Cuando algún parámetro es modificado como por ejemplo la presión, temperatura o concentración de alguna de las especies en equilibrio, este se desplazará en la dirección que favorezca su restablecimiento.

#### Efecto de la concentración:

Ante una variación en las concentraciones de las especies el equilibrio químico se ve alterado. El principio de Le Chatelier justifica que el restablecimiento de las condiciones iniciales se debe a una fuerza que se origina en la variación. La fuerza hará que el equilibrio se redirija hacia el sentido que reestablezca el equilibrio.

#### Efecto de la presión:

Este efecto es especialmente importante para equilibrios en los que una o varias especies sean gases. Debido a que, si se produce un aumento de presión el número de moles gaseosos admitidos son menores, debido a que a más moles gaseosos más presión. De esta manera, el equilibrio se desarrolla en el sentido con menor número de moles gaseosos.

#### Efecto de la temperatura:

Los equilibrios presentan un sentido endotérmico ( $\Delta H > 0$ ) y otro sentido exotérmico ( $\Delta H < 0$ ). De esta manera, si se aumenta la temperatura, el equilibrio químico se desarrollará en el sentido que hará que disminuya, el sentido endotérmico. Igualmente, si la temperatura disminuye, el equilibrio se desarrollará en el sentido exotérmico, el cual hará que la temperatura aumente.

### 2.3.3. Ecuación de Arrhenius para constantes cinéticas

El químico Svante Arrhenius observó que la mayoría de las reacciones mostraban el mismo tipo de dependencia con la temperatura. Esta observación le condujo a su ecuación:

$$k = Ae^{-Ea/RT}$$

Siendo k la constante cinética de la velocidad:

$$v = k [A][B]$$

Donde A y Ea son conocidos como parámetros de Arrhenius.

A es conocido como el factor de frecuencia o factor pre-exponencial y se trata de la frecuencia con la que se producen los choques o colisiones con la orientación adecuada en la mezcla reactiva por unidad de concentración.

Ea, por otra parte, es la energía de activación, es decir, la energía cinética mínima de la colisión necesaria para que la reacción ocurra.

El término exponencial  $e^{-Ea/RT}$  es la fracción de colisiones con la energía suficiente como para reaccionar. Esta fracción de colisiones aumenta con la temperatura debido al signo negativo del exponente. Por lo tanto, cuando la temperatura aumenta, aumenta el número de colisiones eficaces haciendo que aumente  $e^{-Ea/RT}$ , por lo que, para A constante, el valor de k aumentará y consigo lo hará la velocidad.

### 2.3.4. Síntesis industrial del amoníaco

Industrialmente, el proceso de síntesis de amoníaco lo inventó Fritz Haber en 1904 después de estudiar el equilibrio producido. En 1913, Bosch optimizó el proceso industrial, finalmente conocido como el proceso Haber-Bosch.

Reacción de equilibrio:



Figura 10- Equilibrio de síntesis del amoníaco

Como se puede observar, es una reacción ligeramente exotérmica, cuya constante es:

$$K_{\text{eq}} = \frac{P_{\text{NH}_3}^2}{P_{\text{N}_2}^2 \cdot P_{\text{H}_2}^3}$$

Figura 11- Cálculo de la constante de equilibrio de la reacción de síntesis del amoníaco

Ya que todos se encuentran de forma gaseosa.

El rendimiento de la reacción es de entre un 10 y un 20%, pero se ve favorecido con las siguientes condiciones:

- i) Elevadas presiones, de en torno a 200 atm. El aumento en la presión desplaza, según las leyes de Le Chatelier, el equilibrio hacia la derecha ya que es donde hay un menor número de moles gaseosos, 2 frente a los 5 de los reactivos.
  - ii) Moderadas temperaturas, sobre 400°C. Un aumento de la temperatura, según las leyes de Le Chatelier, desplaza el equilibrio hacia la izquierda, pero, conociendo la fórmula de Arrhenius para la constante cinética, sabemos que este aumento de la temperatura favorece la velocidad.
  - iii) Catalizadores activos, para hacer que aumente la velocidad sin necesidad de aumentar la temperatura.
  - iv) Eliminación del amoniaco de la mezcla de equilibrio. Según las leyes de Le Chatelier, al eliminar el amoniaco de la mezcla en equilibrio, se provoca que el equilibrio se desplace hacia los productos, de manera que se restituya produciendo más.
  - v) Gases puros. Al eliminar posibles impurezas, el amoniaco producido será de mayor calidad y se obtendrá más cantidad.
- Catalizador

Tal y como se ha recogido en las condiciones que favorecen el equilibrio químico, el catalizador es de vital importancia para la producción de amoniaco a velocidades más altas. El paso que determinará la velocidad de reacción es la adsorción del nitrógeno sobre el catalizador y su posterior ruptura.

Para la síntesis del amoniaco, el catalizador empleado es el  $\alpha$ -Fe finamente dividido que contiene óxidos de aluminio, circonio o de silicio a una concentración aproximada del 3% y  $K_2O$  al 1%.

- i) El precatalizador es  $Fe_3O_4$  que se reduce a  $\alpha$ -Fe con el propio  $H_2$  del proceso
- j) Estos óxidos tienen como función aumentar la porosidad y evitar el sintetizado por formación de aluminosilicatos.

Los catalizadores de hierro pierden rápidamente su actividad si se calientan por encima de los 520°C y son extremadamente sensibles a la presencia de compuestos de oxígeno, azufre, fósforo, arsénico, cloro e hidrocarburos ya que estos disminuyen la superficie activa del catalizador envenenándolo o dificultando la difusión del nitrógeno y del hidrógeno para la reacción.

De forma general, se emplea la adición de  $CaO$  como promotor del catalizador ya que mejora su resistencia al envenenamiento.

Proceso industrial de síntesis de amoniaco:

## (1) Obtención del nitrógeno.

El nitrógeno es un gas incoloro e inodoro que constituye aproximadamente un 78% del volumen del aire.

El nitrógeno molecular se obtiene principalmente por destilación fraccionada del aire.

## (2) Obtención del hidrógeno

La principal fuente de hidrógeno gas son los hidrocarburos ya que se obtiene como subproducto de diversas reacciones.

## (3) Purificación de los gases obtenidos. Eliminación de impurezas.

## (4) Reducción del precatalizador

## (5) Compresión

## (6) Reacción en el horno de síntesis

## (7) Condensación del amoniaco

## (8) Recirculación de gases son reaccionar con el objetivo de aumentar la conversión.

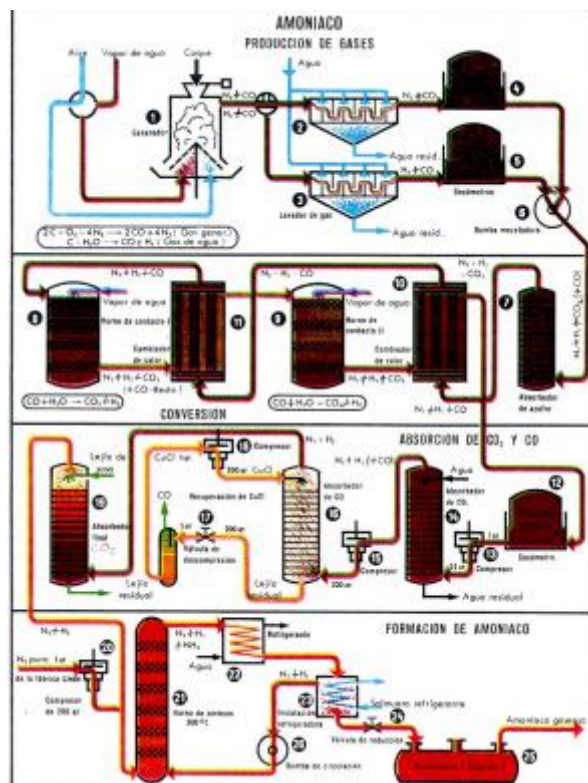


Figura 12- Diagrama de una planta de producción de amoníaco

### 2.3.5. Aplicaciones del amoníaco

El amoníaco es el producto de partida de casi todos los compuestos nitrogenados obtenidos de forma industrial y es uno de los productos inorgánicos más importantes.

La síntesis del amoníaco está directamente relacionada con la manufactura de fertilizantes sintéticos como el sulfato amónico, nitrato amónico, urea y diversos fosfatos amónicos.

La producción del ácido nítrico emplea el 20% de la producción de amoníaco, la urea el 20% y los fosfatos de amonio el 15%.

Sus principales usos son: 75% en fertilizantes, 20% en plásticos y fibras como melamina, resinas duroplásticas tipo fórmica... y 5% en explosivos comerciales y militares como nitrato de celulosa, TNT ,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  o la nitroglicerina.

## 2.4. Tratamiento hidrotermal de biomasa

Debido a los acuerdos aceptados por los países en el Tratado de París, se acordó limitar el incremento de temperatura global hasta un máximo de 2°C. Por ello, las tecnologías con emisiones negativas (NETs) han ganado un protagonismo en el plan de mitigación del cambio climático.

Diversas predicciones acuerdan que la posibilidad de limitar el incremento de temperatura solo existe si se emplean las NETs debido a que no solo no emiten carbono, sino que además capturan el que se encuentra en el aire. Por esa razón, el Tratado de París requerirá de las tecnologías NET como un medio para capturar el aire, y con ella el carbono contaminante, incrementar la superficie verde, producción de energía verde y almacenamiento de dióxido de carbono (BECCS).

El objetivo perseguido por estas tecnologías es “deshacer” el cambio climático sustrayendo el  $\text{CO}_2$  de la atmósfera y atrapándolo en formaciones geológicas bajo tierra haciendo que la concentración de gases de efecto invernadero disminuya en la atmósfera.

BECCS es una NET que combina el cultivo de biomasa y su conversión para la producción de energía verde con la captura en cavidades geológicas de carbono (CCS).

Muchos modelos de predicción coinciden en que las BECCS jugarán un rol crucial en la limitación del incremento de las temperaturas. Literatura previa se ha centrado en la combustión o en la co-combustión de biomasa para la producción energética y posteriormente “secuestrar” el dióxido de carbono resultante. A partir de estos análisis, las BECCS prueban que producen gran cantidad de energía y costes asociados con el crecimiento, con la cosecha y el procesado de biomasa y así mismo la baja eficiencia de la

biomasa en su conversión directa en energía mediante la combustión. El punto negativo que ofrecen las BECCS tanto para la energía producida como los costes económicos se podrían ver incrementados según la biomasa empleada.

De esta manera es necesario buscar maneras en las que la biomasa de su mayor potencial energético y que permita desarrollarse sin altos costes económicos. Estos métodos podrían ser los que emplean cambios termoquímicos. En ellos, se realizan pirólisis, gasificación y tratamientos hidrotermales (HHT). Estos tratamientos se realizan con condiciones de temperatura, tiempo de tratamiento, humedad de la alimentación, presencia o ausencia de oxígeno, etc, de manera que se promueven transformaciones químicas de la biomasa hacia la obtención de productos que “almacenan” energía o que sean valiosos para otros procesos. Cada tipo de tratamiento termoquímico produce diferentes productos.

Los HTT encapsulan varios tratamientos, incluyendo carbonización hidrotermal (HTC), licuefacción hidrotermal (HTL) y gasificación hidrotermal (HTG). Estos tratamientos se ajustan especialmente a los que necesitan biomazas con contenidos de humedad más altos, incluyendo algas, residuos orgánicos líquidos, fangos, estiércoles y otros porque no es necesaria una intensificación energética previa a los procesos de tratamiento de secado.

Los resultados de los tratamientos de las diferentes biomazas serán empleados para realizar el tercer experimento de este TFG, introduciendo como variables de entrada el ratio de Oxígeno-Carbono (O/C), el ratio Hidrógeno-Carbono (H/C), el contenido en cenizas (%DW), la temperatura de reacción (T, °C), el tiempo de reacción en minutos (t) y la concentración de sólidos inicial (IC, %).

Por otra parte, dependiendo de la biomasa en cuestión, se obtendrán diferentes parámetros de su composición: rendimiento de biocrudo (B\_Y), rendimiento de hidrocarburos (C\_Y), rendimiento de ACP (C\_Y), rendimiento de gas (G\_Y), energía en biocrudo (MJ/kg de biomasa en seco), energía en los hidrocarburos (MJ/kg de biomasa en seco), carbono en el biocrudo (Kg C/kg de biomasa en seco), carbono en los hidrocarburos (kg C/ kg de biomasa en seco).

Las ecuaciones empleadas para realizar los cálculos de productos, de energía y de kg de Carbono son:

$$Pr\ oduct_{yield} (\%) = \frac{Mass_{product} (kg)}{Mass_{feedstock} (kg)}$$

Figura 13- Ecuación de cálculo de Py

$$Energy_{Biocrude/Hydrochar} (MJ / kg\ biomass\ on\ DW) = \frac{Mass_{biocrude/hydrochar} (kg)}{Mass_{initial\ dry\ feedstock} (kg)} \times HHV_{biocrude/hydrochar} (MJ / kg)$$

Figura 14- Ecuación de cálculo de la Energía de biocrudo o hidrocarburos por kg de biomasa

$$\text{Carbon}_{\text{Biocrude/Hydrochar}} (\text{kg C / kg biomass on DW}) = \frac{\text{Mass}_{\text{biocrude/hydrochar}} (\text{kg})}{\text{Mass}_{\text{initial dry feedstock}} (\text{kg})} \times \text{Carbon}_{\text{biocrude/hydrochar}} (\text{kgC / kg})$$

Figura 15- Ecuación de cálculo de kg de carbono por kg de biomasa seca

Se analizarán diferentes biomásas, entre ellas diferentes tipos de las previamente mencionadas algas, residuos orgánicos líquidos, fangos y estiércoles.

## 3. Material experimental

### 3.1. Material ASPEN Plus V11

El objetivo principal de este TFG es, empleando el Machine Learning, es decir, suministrando a la red neuronal un elevado número de datos, que esta consiga aprender y calcular la incógnita o el parámetro deseado. Se distinguirá entre dos pruebas, la primera empleada para calcular la fracción de vapor después de un proceso de aporte de calor a presión y la segunda empleada para calcular la constante de equilibrio y la fracción de amoniaco en su proceso de síntesis o proceso Haber-Bosch.

#### 3.1.1. Proceso de cálculo de la fracción de vapor.

Se empleará ASPEN Plus V11 para simular las variaciones de fracción de vapor al variar la presión, temperatura y, posteriormente, variar también la composición de la mezcla. Se realizarán tres experimentos, empezando con amplitudes de variación de presiones y temperaturas más grandes y posteriormente, ir disminuyendo esas amplitudes en los siguientes experimentos. Las variaciones están recogidas en la siguiente tabla:

Experimento 1			
	Inicio	Fin	N.º intervalos
Presión	1	101	100
Temperatura	20	220	100
Comp1 (fracc molar)	0.5	0.5	0
Comp2 (fracc molar)	0.5	0.5	0

Tabla 1 – Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 1

Experimento 2			
	Inicio	Fin	Nº intervalos
Presión	1	11	100
Temperatura	20	80	100
Comp1 (fracc molar)	0.5	0.5	0
Comp2 (fracc molar)	0.5	0.5	0

Tabla 2- Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 2



Experimento 3			
	Inicio	Fin	Nº intervalos
Presión (bar)	1	2	100
Temperatura (°C)	80	90	100
Comp1 (fracc molar)	0.5	0.5	0
Comp2 (fracc molar)	0.5	0.5	0

Tabla 3- Condiciones empleadas en el Experimento L-V número 3

Además, para la variación de composiciones, se emplearán las mismas variaciones de presión y temperatura y se les añadirá las variaciones de composición.

Experimento 1.1 + 1.2			
	Inicio	Fin	Nº intervalos
Presión (bar)	1	101	10
Temperatura (°C)	20	220	10
Comp1 (kmol)	0	50	10
Comp2 (kmol)	0	50	10

Tabla 4- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 1.1+1.2

Experimento 2.1 y 2.2			
	Inicio	Fin	Nº intervalos
Presión (bar)	1	11	10
Temperatura	20	80	10
Comp1 (kmol)	1	25	10
Comp2 (kmol)	1	25	10

Tabla 5- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 2.1+2.2

Experimento 3.1 + 3.2			
	Inicio	Fin	Nº intervalos
Presión (bar)	1	2	10
Temperatura (°C)	80	90	10
Comp1 (kmol)	1	10	10
Comp2 (kmol)	1	10	10

Tabla 6- Condiciones empleadas en el Experimento L-V números 3.1+3.2

De esta manera, se obtiene el mismo número de datos de todos los experimentos, en torno a 10.000. Y, además, se comienza empleando variaciones de presión de 1 a 101 bares y de 20 a 220 °C, se reduce la amplitud a variaciones de 1 a 11 bares y de 20 a 80°C y finalmente, se varía de 1 a 2 bares y de 80 a 90 °C. Estas variaciones se mantienen constantes, aunque, al incorporar las variaciones de composición, inicialmente de 0 a 50 bares, posteriormente de 1 a 25 bares y finalmente de 1 a 10 bares, obteniéndose 10.000 datos.

Estas variaciones son introducidas en ASPEN PLUS V11, donde se emplean los siguientes parámetros:

- Componentes: Metanol, Etanol. Sus ID de componente son: Metha-01 y Ethan-01.
- Termodinámicamente, su Method Filter es el común (COMMON) y su método base es NRTL.

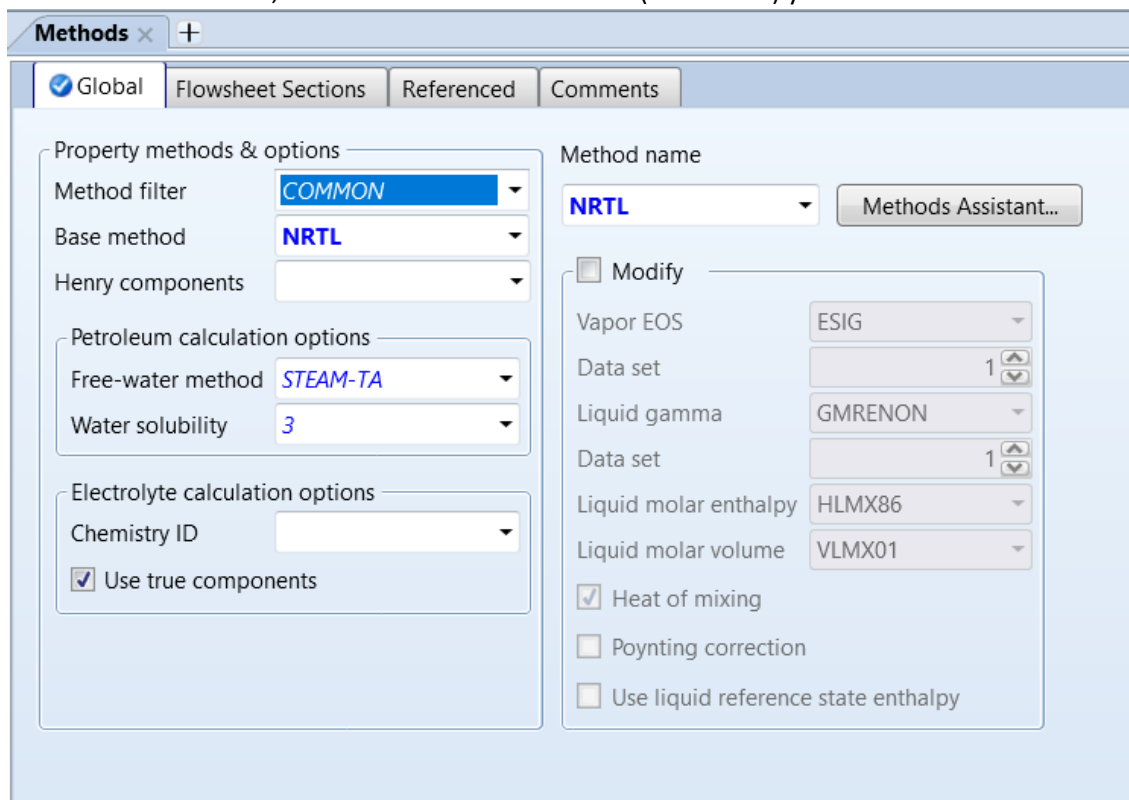


Figura 16- Método de selección de ecuaciones termodinámicas

- Además, se ha introducido que no se estime ningún parámetro.
- Para las unidades se ha introducido que se emplee el sistema métrico y el uso de la unidad de bares para la presión.

Posteriormente, se introduce el diagrama de flujo en la pestaña correspondiente.

El diagrama de flujo consiste en dos corrientes, una con una fracción molar igual a 1 de metanol, S1, y otra de fracción molar igual a 1 de etanol, S2. Estas dos corrientes de flujo se introducen en el mezclador de donde van al intercambiador de calor, empleando la corriente 1, que se encuentra a las condiciones que marque el experimento. A la salida del intercambiador, en la corriente 2, donde se encuentra la mezcla de líquido y vapor, la corriente va al tanque flash, donde se produce la separación de líquido y vapor, saliendo el líquido por la parte inferior del tanque en la corriente 4 mientras que el vapor sale por la parte superior del tanque en la corriente 3.

Finalmente, se introducen los parámetros de la simulación con, para cada experimento, las condiciones dadas previamente.

The screenshot displays the 'Manipulated variables' section in Aspen Plus V11. It features a table with four rows, each representing a manipulated variable. Below the table are buttons for 'New', 'Delete', 'Copy', and 'Paste'. The 'Edit selected variable' section is also visible, showing the configuration for variable 1.

Variable	Active	Manipulated variable	Units
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Block-Var Block=B2 Variable=PRES Sentence=PARAM	bar
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Block-Var Block=B2 Variable=TEMP Sentence=PARA...	C
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Stream-Var Stream=S1 Substream=MIXED Variable...	kmol/hr
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Stream-Var Stream=S2 Substream=MIXED Variable...	kmol/hr

**Edit selected variable**

**Manipulated variable**

Variable: 1  
 Type: Block-Var  
 Block: B2  
 Variable: PRES  
 Sentence: PARAM

**Manipulated variable limits**

Equidistant  Logarithmic  List of values

Start point: 1 bar  
 End point: 101 bar  
 Number of points: 10  
 Increment: 11.111111 bar

Figura 17- Selección de las variables de la simulación en ASPEN PLUS V11

Finalmente, se obtienen los resultados de la simulación:

Row/Case	Status	VARY 1 B2 PARAM PRES BAR	VARY 2 B2 PARAM TEMP C	VARY 3 S1 MIXED TOTAL MO LEFLOW KMOL/HR	VARY 4 S2 MIXED TOTAL MO LEFLOW KMOL/HR	BETA
▶ 1	OK	1	20	50	50	0
▶ 2	OK	1	22.0202	50	50	0
▶ 3	OK	1	24.0404	50	50	0
▶ 4	OK	1	26.0606	50	50	0
▶ 5	OK	1	28.0808	50	50	0
▶ 6	OK	1	30.101	50	50	0
▶ 7	OK	1	32.1212	50	50	0
▶ 8	OK	1	34.1414	50	50	0
▶ 9	OK	1	36.1616	50	50	0
▶ 10	OK	1	38.1818	50	50	0
▶ 11	OK	1	40.202	50	50	0
▶ 12	OK	1	42.2222	50	50	0

Figura 18- Resultados de la simulación en ASPEN PLUS V11

Con columnas que son: el número de caso, si este se ha desarrollado correctamente, la presión, la temperatura, el flujo molar del metanol, el flujo molar del etanol y la Beta, es decir, la fracción de vapor obtenida en las circunstancias dadas.

Como se puede observar en la captura el número de veces que se obtiene una fracción de vapor 0 o 1 es muy elevado, por lo que es necesario que se clasifiquen previamente en la red neuronal.

### 3.1.2. Proceso de cálculo de la constante de equilibrio del amoníaco y su fracción de vapor.

Se empleará ASPEN PLUS V11 para simular las variaciones de constante de equilibrio y de la fracción de amoníaco al variar las condiciones a las que se realice la síntesis de amoníaco. Al igual que se ha realizado en los experimentos de cálculo de la fracción de vapor, se realizarán tres experimentos diferentes, empleando inicialmente más amplitud al variar las condiciones de presión y temperatura para ir reduciéndolas paulatinamente.

Experimento 1	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	100	300	2.00	100
T (°C)	300	500	2.00	100
flujo molar N2	25	25	0	0
flujo molar H2	75	75	0	0

Tabla 7- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoníaco número 1

Experimento 2	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	150	250	1.00	100
T (°C)	350	450	1.00	100
flujo molar N2	25	25	0	0
flujo molar H2	75	75	0	0

Tabla 8- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 2

Experimento 3	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	190	210	0.20	100
T (°C)	390	410	0.20	100
flujo molar N2	25	25	0	0
flujo molar H2	75	75	0	0

Tabla 9- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 3

Como se puede ver, siempre se guarda la estequiometría de la reacción. Posteriormente, se realizarán para las mismas variaciones de presión y temperatura, pero incorporando también las variaciones en la composición:

Experimento 1.1	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	100	300	20.00	10
T (°C)	300	500	20.00	10
flujo molar N2	1	25	2.4	10
flujo molar H2	1	75	7.4	10

Tabla 10- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 1.1

Experimento 2.1	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	150	250	10.00	10
T (°C)	350	450	10.00	10
flujo molar N2	1	25	2.4	10
flujo molar H2	1	75	7.4	10

Tabla 11- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 2.1

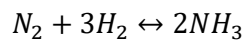
Experimento 3.1	desde	hasta	A	nºpuntos
P (bar)	190	210	2.00	10
T (°C)	390	410	2.00	10
flujo molar N2	1	25	2.4	10
flujo molar H2	1	75	7.4	10

Tabla 12- Condiciones empleadas en el equilibrio del amoniaco número 3.1

Al igual que ocurría en los experimentos de líquido-vapor, el número de datos obtenidos para cada uno de los experimentos es de en torno a los 10.000. Inicialmente, se varían la presión de los 100 hasta los 300 bares y la temperatura de los 300 a los 500°C. Posteriormente, se reduce la amplitud de la variación, variando la presión desde los 150 a los 250 bares y la temperatura de los 350 a los 450°C. Finalmente, esta variación se realiza de los 190 a los 210 bares y de los 290 a los 410 °C.

Estas variaciones son introducidas en ASPEN PLUS V11 de la siguiente manera:

- Se introduce las unidades a emplear, las del sistema métrico decimal y los bares.
- Posteriormente, se introducen los componentes que intervendrán en el proceso: Nitrógeno, Hidrógeno y el Amoniaco.
- Los métodos empleados serán: Method Filter COMMON y Base Method PSRK.
- En cuanto a la química de la reacción, se introduce el equilibrio de síntesis del amoniaco:



Será relevante introducir también que se desea que la ecuación sea calculada de forma logarítmica y con las constantes A, B, C, D y E y en función de la temperatura y la presión.

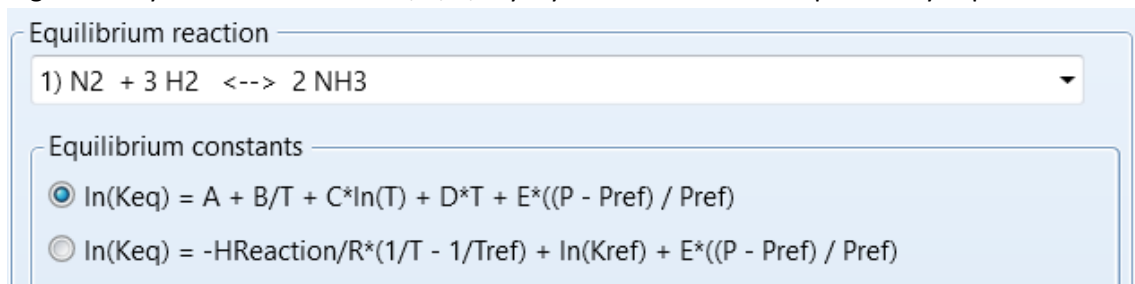


Figura 19- Introducción de la reacción de equilibrio en ASPEN PLUS V11

Una vez introducido las variantes previas, se introduce el diagrama de flujo en la pestaña correspondiente:

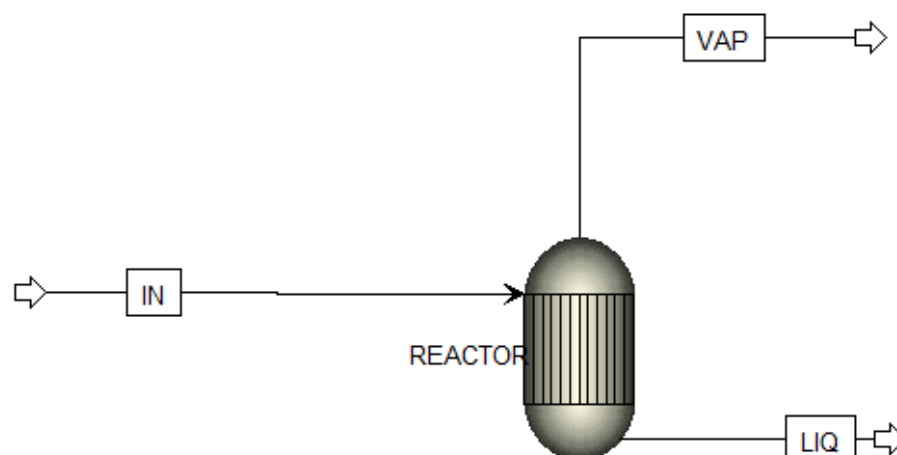


Figura 20- Diagrama de flujo de la simulación

En el caso en el que se incorporan las variaciones de composición, se introduce un mezclador a la entrada del reactor.

- Las corrientes se introducen como entrada, corriente líquida y corriente vapor.
- Se introducen las características del reactor.
- Para la convergencia de los resultados, se introduce también una tolerancia del 0.0001.
- Finalmente, se introduce el análisis que variará las condiciones del proceso, con las variaciones dichas previamente y obteniendo para cada una de las variaciones lo resultados.

	Row/Case	Status	VARY 1 REACTOR PARAM TEMP  C	VARY 2 REACTOR PARAM PRES  BAR	(YNH3)/( (YN2**0. 5)*(YH2* *1.5)*P)	YNH3
▶	1	OK	400	100	0.0142415	0.256008
▶	2	OK	400	101	0.0142569	0.257683
▶	3	OK	400	102	0.0142723	0.259349
▶	4	OK	400	103	0.0142879	0.261005
▶	5	OK	400	104	0.0143035	0.262653
▶	6	OK	400	105	0.0143193	0.264291
▶	7	OK	400	106	0.0143351	0.265921
▶	8	OK	400	107	0.014351	0.267542
▶	9	OK	400	108	0.014367	0.269155
▶	10	OK	400	109	0.0143831	0.270759
▶	11	OK	400	110	0.0143993	0.272355
▶	12	OK	400	111	0.0144156	0.273942

Figura 21- Resultados de la simulación

Estos resultados son exportados a un Excel y posteriormente tratados con el software de Inteligencia Artificial.

Los datos obtenidos, al igual que ocurría en el experimento de líquido-vapor, son del orden de 10.000 datos.

## 3.2. Algoritmos y paquetes

El programa informático empleado para aplicar la inteligencia artificial será Python, más concretamente dentro de su variante anaconda, el programa Spyder.

Spyder es un potente entorno de desarrollo interactivo para el lenguaje Python. Posee funciones avanzadas para la edición, pruebas interactivas, depuración e introspección y un entorno informático numérico.

Además, spyder es un entorno de desarrollo integrado y multiplataforma de código abierto para programación científica en el lenguaje Python y, además incluye soporte de herramientas interactivas para la inspección de datos e incorpora controles de calidad específicos de Python e instrumentos como Pyflakes, Pylint y Rope.

Para poder realizar los cálculos necesarios e implantar las redes neuronales, será necesario emplear diferentes librerías:

### 3.2.1. Numpy

NumPy es el paquete fundamental para la computación científica con Python. Contiene entre otras cosas:

- Un poderoso objeto de matriz N-dimensional
- Funciones sofisticadas (difusión)
- Herramientas para la integración de código C / C ++ y Fortran.
- Álgebra lineal útil, transformada de Fourier y capacidades de números aleatorios.

Además de sus obvios usos científicos, NumPy también puede usarse como un eficiente contenedor multidimensional de datos genéricos. Se pueden definir tipos de datos arbitrarios. Esto permite que NumPy se integre a la perfección con una amplia variedad de bases de datos (Numpy 2019).

### 3.2.2. Pandas

Pandas es una biblioteca de software escrita como extensión de NumPy para manipulación y análisis de datos para el lenguaje de programación Python. En particular, ofrece estructuras de datos y operaciones para manipular tablas numéricas y series temporales. Es un software libre distribuido bajo la licencia BSD. El nombre deriva del término "datos de panel", término de econometría que designa datos que combinan una dimensión temporal con otra dimensión transversal (Pandas 2019).



Es ampliamente utilizado en ciencia de los datos para manipular los datos en dataframes, instancias de su clase más característica.

### 3.2.3. Keras

Keras es una biblioteca empleada para redes neuronales de Código abierto escrita en Python. Es capaz de ejecutarse sobre TensorFlow, Microsoft Cognitive Toolkit o Theano. Está especialmente diseñada para posibilitar una experimentación más ágil con redes de Deep Learning. Sus fuertes se centran en ser user-friendly, modular y extensible.

Fue desarrollada por François Chollet con el objetivo de formar parte de los esfuerzos dedicados a la investigación del proyecto ONEIROS (open-ended Neuro-Electronic Intelligent Robot Operating System).

A partir de 2017, el equipo de TensorFlow de Google decidió dar soporte decidió dar soporte a Keras en la biblioteca de core de TensorFlow.

Keras contiene varias implementaciones de los bloques constructivos de las redes neuronales como por ejemplo las capas, funciones objetivo, funciones de activación y optimizadores matemáticos.

Además, permite generar modelos de Deep Learning en teléfonos inteligentes, tanto aquellos con sistema operativo iOS como Android sobre una Java Virtual Machine o sobre web.

### 3.2.4. Random

La biblioteca random contiene una serie de funciones relacionadas con los valores aleatorios. Si se descarga entera permite generar números enteros dentro de un intervalo, dentro de un rango de números al igual que también permite general números decimales.

### 3.3. Simulación

#### 3.3.1. Simulación L\_V

En el caso de líquido-vapor, se comienza realizando los experimentos en ASPEN Plus V11. Tal y como se ha detallado previamente, implementando un mezclador de las corrientes, un intercambiador de calor donde se aumentan la temperatura y la presión. Después de este incremento de presión y temperatura, la corriente de salida en la que se encuentran todos los componentes podrá encontrarse en tres situaciones diferentes:

- Puede darse que la fracción de vapor sea 0, es decir, que se trate de un líquido de forma completa sin nada de vapor.
- También puede ocurrir que la fracción de vapor se encuentre entre 0 y 1, es decir, que se encuentren mezcladas las dos fracciones tanto líquido como vapor.
- O, en último lugar, se podrá dar el caso de que la fracción de vapor sea 1, es decir, la corriente será enteramente de vapor.

Una vez que los datos se han obtenido empleando ASPEN PLUS V11, son llevados a archivos de Microsoft Excel desde donde los extraerá Python spyder.

También, para observar una mayor variación de los datos y comprobar una correcta obtención de los resultados, se introducen además de la variación de presión y temperatura variaciones en las composiciones de las corrientes variando el flujo de las corrientes de entrada.

Con el objetivo de obtener un mayor rango de datos que permitan obtener un mejor modelo, las variaciones de presión y temperatura se darán en 3 rangos diferentes, comenzando con variaciones de mayor rango, luego variaciones de un rango intermedio y finalmente, variaciones en un rango menor, siendo el número de datos obtenidos siempre de un orden de 10.000 datos.

En Python spyder, se creará un código que abrirá el Excel, leerá la información y la almacenará en su memoria en forma de vector de datos.

```
# 1. READ DATA
dirpath = os.getcwd() + "\\
trainname = "Experimento 1.1 + 1.2.xlsx"
testname = "Experimento 1.1 + 1.2.xlsx"
modelname = "model_experimeto1.1+1.2.sol"
```

Figura 22- Captura de pantalla del programa del Experimento L-V (I)

Además, la información recibida, para un correcto funcionamiento de la red, es separada en información para que la red entrene e información para que la red realice los test.

```

# 1. READ DATA
dirpath = os.getcwd() + "\\\"
trainname = "Experimento_1.xlsx"
testname = "Experimento_1.xlsx"
modelname = "model_experimento1.sol"

# 1.1. Training data
a = np.array(pd.read_excel (dirpath + trainname))
a1 = a[:,[0,2,3,4,5,6]]

# 1.1.1. Data separation for Train/Validation

f_valid=0.2 # %Experiments por VALIDATION

ndata=a1.shape[0]
seed(1)

i_train=int((1-f_valid)*ndata)
i_valid=ndata-i_train

a_train=np.zeros((i_train,a1.shape[1]))
a_valid=np.zeros((i_valid,a1.shape[1]))
a_head=list(range(0,ndata))
print(a1.shape)
print(a_valid.shape)
b=np.sort(np.random.choice(a_head, i_train, replace=False))

j=0
k=0

```

Figura 23- Captura de pantalla del Experimento L-V (II)

```

for i in range(0, ndata):
    if j<i_train:
        if i==b[j]:
            a_train[j,:]=a1[i,:]
            j+=1
        else:
            a_valid[k,:]=a1[i,:]
            k+=1
    else:
        a_valid[k,:]=a1[i,:]
        k+=1
# -----

x_train = a_train[:, [1,2,3,4]]
y_train = a_train[:, [5]]

```

Figura 24- Captura de pantalla del Experimento L-V (IV)

Esta información, debido a que se encuentran datos en las tres situaciones previamente mencionadas, necesitan ser filtradas ya que el objetivo será que, dados los datos de las condiciones iniciales y composición de la mezcla, la red neuronal calcule la fracción de vapor, que se da entre 0 y 1, por lo tanto, las situaciones en las que esta sea 0 o 1 no resultarán interesantes.

Una vez los datos estén filtrados, la red comienza a calcular la fracción de vapor. Para ver que valores de número de neuronas y el número de capas de neuronas.

La variación de neuronas se dio entre una y ocho y la variación de capas fue de 3 y 6.

### 3.3.2. Simulación equilibrio Amoniaco

La simulación del equilibrio del amoniaco comenzará igual de como lo hacía la parte de equilibrio líquido-vapor. Se introducen en ASPEN PLUS V11 las dos corrientes de nitrógeno e hidrógeno en un mezclador y posteriormente en un reactor. Del reactor, sale el amoniaco gas con una corriente que variará en función de las variaciones en las corrientes de entrada en el reactor. ASPEN PLUS V11, como resultado de la simulación, dará los valores de la constante de equilibrio químico de la reacción y la fracción de vapor del amoniaco en la salida.

Además de variaciones en las corrientes de entrada ya mencionadas, en el reactor se variarán las condiciones de presión y temperatura, lo que variará la constante de equilibrio y con ella la concentración de amoniaco de salida.

$$K_{eq} = \frac{y_{NH_3}}{0.5 * y_{N_2} * 1.5 * y_{H_2}}$$

Tal y como ocurría con los experimentos de líquido vapor, se realizarán las variaciones comenzando con una amplitud mayor, en un segundo lugar una amplitud intermedia y finalmente con un rango de datos mucho menor, obteniendo de esta manera en todas las ocasiones en torno a 10.000 en los que la diferencia entre experimento y experimento será mayor aportando riqueza al experimento.

De esta manera, la experimentación comenzará también con la apertura del Excel y la lectura de los datos:

```
# 1. READ DATA
dirpath = os.getcwd() + "\\
trainname = "Experimento1.xlsx"
testname = "Experimento1.xlsx"
modelname = "model_experimento1.sol"
```

Figura 25- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoniaco (I)

Una vez abierto el fichero, se almacenan los datos y se diferencia en los que serán empleados para la simulación:

```
# 1.1. Training data
a = np.array(pd.read_excel (dirpath + trainname))
a1 = a[:,[2,3,4,5]]

# 1.1.1. Data separation for Train/Validation

f_valid=0.2 # %Experiments por VALIDATION

ndata=a1.shape[0]
seed(1)

i_train=int((1-f_valid)*ndata)
i_valid=ndata-i_train

a_train=np.zeros((i_train,a1.shape[1]))
a_valid=np.zeros((i_valid,a1.shape[1]))
a_head=list(range(0,ndata))
print(a1.shape)
print(a_valid.shape)
b=np.sort(np.random.choice(a_head, i_train, replace=False))

j=0
k=0
```

Figura 26- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoníaco (II)

```
for i in range(0, ndata):
    if j<i_train:
        if i==b[j]:
            a_train[j,:]=a1[i,:]
            j+=1
        else:
            a_valid[k,:]=a1[i,:]
            k+=1
    else:
        a_valid[k,:]=a1[i,:]
        k+=1
# -----

x_train = a_train[:, [0,1]]
y_train = a_train[:, [2,3]]
```

Figura 27- Captura de pantalla del programa del equilibrio del amoniaco (III)

Una vez los datos están ya en la memoria de la red neuronal, se variarán el número de neuronas desde 1 hasta 500, el número de repeticiones de 20 a 200 y el número de capas, empleando 3 y 6.

### 3.3.3. Simulación de biomasa

En esta ocasión, los datos no serán sustraídos de ASPEN PLUS V11, sino que se obtendrán del paper con datos obtenidos a partir de experimentación con redes neuronales, empleando diferentes métricas.

Los datos son introducidos en archivos de Microsoft Excel, donde no todos los datos tenían resultados para todas las variables descritas en el apartado, los resultados han sido filtrados de manera que los datos introducidos tengan valor para todas las variables. De esta manera, se dividieron los datos en tres subficheros, donde todos los experimentos tenían valor para todas las variables.

En la red neuronal, el fichero comienza abriendo los datos:

```
# 1. READ DATA
dirpath = os.getcwd() + "\\
trainname = "Var 7 8.xlsx"
testname = "Var 7 8.xlsx"
modelname = "model_experimento3.sol"
```

Figura 28- Captura de pantalla del programa del experimento de la biomasa (I)

Una vez abiertos los datos, la red neuronal los almacena y los diferencia entre datos de entreno y datos de test:

```
# 1.1. Training data
a = np.array(pd.read_excel (dirpath + trainname))
a1 = a[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]

# 1.1.1. Data separation for Train/Validation

f_valid=0.2 # %Experiments por VALIDATION

ndata=a1.shape[0]
seed(1)

i_train=int((1-f_valid)*ndata)
i_valid=ndata-i_train

a_train=np.zeros((i_train,a1.shape[1]))
a_valid=np.zeros((i_valid,a1.shape[1]))
a_head=list(range(0,ndata))
print(a1.shape)
print(a_valid.shape)
b=np.sort(np.random.choice(a_head, i_train, replace=False))

j=0
k=0

for i in range(0, ndata):
    if j<i_train:
        if i==b[j]:
            a_train[j,:]=a1[i,:]
            j+=1
        else:
            a_valid[k,:]=a1[i,:]
            k+=1
    else:
        a_valid[k,:]=a1[i,:]
        k+=1
```

Figura 29- Captura de pantalla del programa de la biomasa (II)

De esta manera, la red almacena la información y la emplea para calcular las salidas.

En esta ocasión, se variará el número de repeticiones en 1000, 2000 y 5000 y el número de neuronas de 100 hasta 1000 de cien en cien.

La red neuronal intentará calcular el valor de las variables salida y dará como salida los errores cometidos en el cálculo de las variables y la precisión con la que se han calculado.



## 4. Resultados

### 4.1. Resultados simulación líquido-vapor

#### 4.1.1. RESULTADOS PARA 3 CAPAS:

##### EXPERIMENTO 1:

- Se observa que, empleando 20 repeticiones se obtiene una precisión de un máximo de 98.09% que se alcanza con 4 neuronas, y un mínimo del 88,60% alcanzando con una neurona.
- El “salto” que se produce al pasar de usar 1 a 2 neuronas hace que la precisión pase del 88,6% al 98,08%, lo cual es destacable. A partir del uso de 2 neuronas el programa está cerca de una precisión del 100%, con aproximadamente el 98% en todos los experimentos.
- El programa, además, da el dato del número de experimentos que fallan. El máximo es del 0.9% mientras que el mínimo es del 0%. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan se incrementa según aumenta el número de neuronas y la precisión.
  2. El número de pruebas que falla es prácticamente despreciable, ya que, de 10000 datos que tiene el experimento, aproximadamente fallan 100.

EXPERIMENTO 1		
	Precisión	Experiments failed
máx	98,09%	0,90%
min	88,60%	0,00%

Tabla 13- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 1

##### EXPERIMENTO 1.1+1.2:

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 96,77%, alcanzado con 5 neuronas y un mínimo de 84,57%, alcanzado con una neurona.
- El “salto” de mejora de la precisión se obtiene también con el paso de una a dos neuronas, pasando de una precisión del 84.57% al 94.75%, mejorando en un 10%.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 3.6%, alcanzado con 2 neuronas y de un mínimo del 0%, alcanzado con 1 neurona. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan aumenta de un 0 a un 3,6% al pasar de 1 a 2 neuronas, a la vez que mejora su precisión. Al continuar aumentando el número de neuronas, el número de experimentos que fallan disminuye ligeramente, hasta una llegar al 1,5% para 5 neuronas. Es decir, aunque la precisión haya aumentado al aumentar el número de neuronas, también lo ha hecho el número de experimentos que han fallado.
  2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 360, lo cual, de un total de 10.000, es algo más considerable que para el Experimento 1.

EXPERIMENTOS 1.1+1.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	96.77%	3.60%

min	84.57%	0.00%
-----	--------	-------

Tabla 14- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 1.1+1.2

### COMPARACIÓN EXPERIMENTOS 1 Y 1.1+1.2

- Precisión o Precisión: Si bien al aumentar el número de neuronas la precisión ha aumentado, en el experimento 1 su valor final para 5 neuronas (98.09%) es mayor que el obtenido en el experimento 1.1+1.2 (96,77%).
- Experimentos fallidos: Al igual que ocurre en la precisión, el número de experimentos fallidos es menor para el experimento 1, tanto en su máximo como en su mínimo que para el experimento 1.1+1.2.

Por lo tanto, dado que tanto la precisión como el número de experimentos fallidos tienen mejores valores para el experimento 1 que para el experimento 1.1 + 1.2, podemos concluir que, para este rango de datos, el programa da mejores resultados para la variación de dos variables (presión y temperatura) que para la variación de cuatro variables (presión, temperatura y composiciones).

### EXPERIMENTO 2:

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 99.58%, alcanzado con 5 neuronas y un mínimo de 99.51%, alcanzado con una neurona.
- No se produce ningún salto en la mejora de la precisión, sino que esta ya es elevada con tan solo 1 neurona.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 0.04%, alcanzado con 5 neuronas y de un mínimo del 0%, alcanzado con el resto de las neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan aumenta de un 0 a un 0.04% al pasar a 5 neuronas, a la vez que mejora su precisión ligeramente.
  2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 40, lo cual, de un total de 10.000, se podría considerar como despreciable.

EXPERIMENTO 2		
	Precisión	Experiments failed
máx	99.58%	0.04%
min	99.51%	0.00%

Tabla 15- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 2

### EXPERIMENTO 2.1 + 2.2:

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 98.02%, alcanzado con 5 neuronas y un mínimo de 97.33%, alcanzado con una neurona.
- El "salto" de mejora de la precisión se obtiene también con el paso de una a dos neuronas, pasando de una precisión del 97.33% al 98.02%, que posteriormente se mantiene constante, aunque aumente el número de neuronas.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 0.03%, alcanzado con 1 neurona y de un mínimo del 0%, alcanzado con el resto de las pruebas. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan comienza siendo del 0.03% y pasa a ser del 0% en el resto de las pruebas, por lo que al aumentar el número de neuronas el número de experimentos que falla disminuye hasta el 0% y posteriormente se mantiene constante.

2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 30, lo cual, de un total de 10.000, se puede considerar como despreciable.

EXPERIMENTOS 2.1+2.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	98.02%	0.03%
min	97.33%	0.00%

Tabla 16- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 2.1+2.2

### EXPERIMENTO 3:

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 88.48%, alcanzado con 4 neuronas y un mínimo de 64.62%, alcanzado con 1 y 2 neuronas.
- Se produce un salto al pasar de 2 a 3 neuronas, pasando de una precisión de 64.62% al 85.89% y un segundo salto al aumentar hasta 4 neuronas, con una precisión de un máximo del 88.48%.
- Debido a los bajos valores de precisión, ha sido necesario realizar la prueba con 6 neuronas hasta ver que, aunque el número de neuronas aumentara, la precisión no lo hacía, hecho que no se producía para valores tan bajos de precisión en el resto de los experimentos.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 35.38%, alcanzado con 1 y 2 neuronas y de un mínimo del 6.58%, alcanzado con cuatro neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan disminuye de un 35.38 a un 9.33% al pasar de 2 a 3 neuronas, a la vez que mejora su precisión.
  2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 3538, lo cual, de un total de 10.000, se convierte en una variable para tener en cuenta.

EXPERIMENTO 3		
	Precisión	Experiments failed
máx	88.48%	35.38%
min	64.62%	6.58%

Tabla 17- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimento 3

### EXPERIMENTO 3.1+3.2:

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 88.23%, alcanzado con 7 neuronas y un mínimo de 64.26%, alcanzado con una, dos y tres neuronas.
- El "salto" de mejora de la precisión se obtiene también con el paso de 3 a 4 neuronas, pasando de una precisión del 64.26% al 88.20%, que posteriormente se mantiene constante, aunque aumente el número de neuronas, hasta un máximo de 88.23% alcanzado con 7 neuronas.
- Debido a los bajos valores de precisión, ha sido necesario, al igual que en el experimento 3, realizar la prueba también con 7 neuronas hasta ver que, aunque el número de neuronas aumentara, la precisión no lo hacía, hecho que no se producía para valores tan bajos de precisión en el resto de los experimentos.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 35.74%, alcanzado con 1, 2 y 3 neuronas y de un mínimo del 6.11%, alcanzado con 7 neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  3. El número de experimentos que fallan comienza siendo del 35.74% y disminuye hasta un 7.79% con 4 neuronas. Posteriormente alcanza su mínimo de 6.11% con 7 neuronas.

4. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 3574, lo cual, de un total de 10.000, es una variable que es necesario tener en cuenta.

EXPERIMENTOS 3.1+3.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	88.23%	35.74%
min	64.26%	6.11%

Tabla 18- Resultados del Experimento L-V con 3 capas Experimentos 3.1+3.2

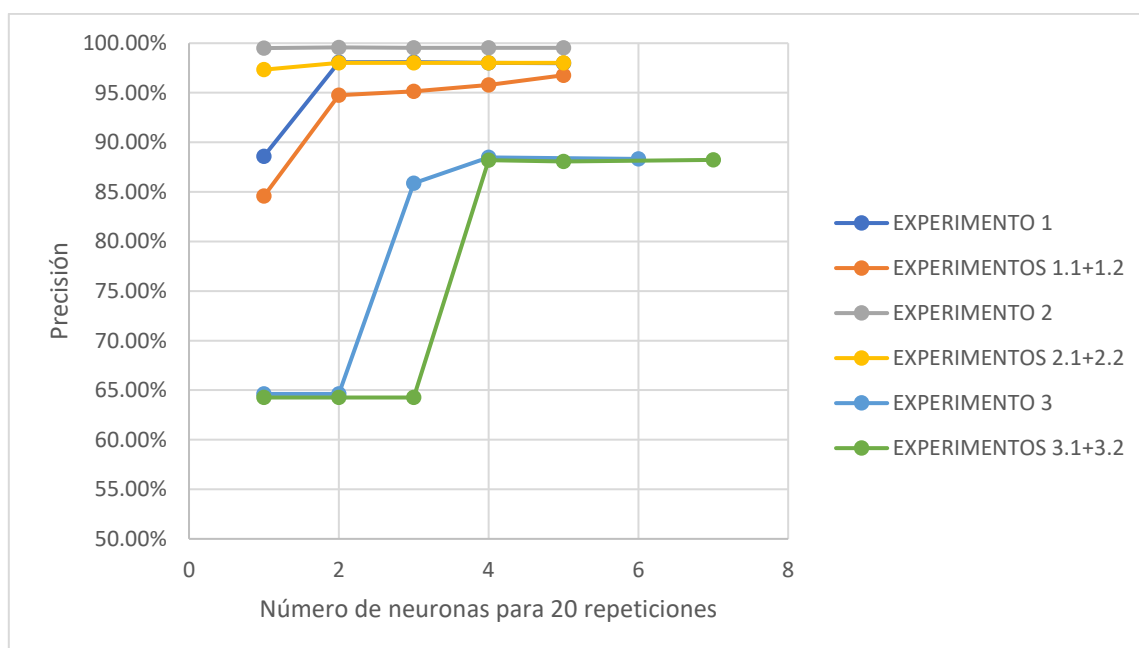


Figura 30- Gráfico de resultados totales para 3 capas

#### 4.1.2. Resultados para 6 capas:

##### EXPERIMENTO 1:

- Se observa que, empleando 20 repeticiones se obtiene una precisión de un máximo de 99.26% que se alcanza con 5 neuronas, y un mínimo del 88,60% alcanzando con 1, 2 y 3 neuronas.
- El "salto" que se produce al pasar de usar 3 a 4 neuronas hace que la precisión pase del 88,6% al 98,08%, lo cual es destacable. A partir del uso de 4 neuronas la precisión que se alcanza con los experimentos está en torno al 98-99%, con un máximo de 99,26% con 5 neuronas, aumentando hasta el uso de 7 neuronas.
- El programa, además, da el dato del número de experimentos que fallan. El máximo es del 0.6% mientras que el mínimo es del 0%. Por lo tanto, se observa que:
  3. El número de experimentos que fallan se incrementa al realizarse el salto en la precisión y posteriormente vuelve a disminuir con un mínimo, entre las precisiones más altas.
  4. El número de pruebas que falla es prácticamente despreciable, ya que, de 10000 datos que tiene el experimento, aproximadamente fallan en su máximo, sobre 60.

EXPERIMENTO 1		
	Precisión	Experiments failed
máx	99.26%	0.60%

min	88.60%	0.00%
-----	--------	-------

Tabla 19- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 1

**EXPERIMENTO 1.1 + 1.2**

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 95.62%, alcanzado con 4 neuronas y un mínimo de 84,57%, alcanzado con 1, 2 y 3 neuronas.
- El “salto” de mejora de la precisión se obtiene también con el paso de 3 a 4 neuronas, pasando de una precisión del 84.57% al 95,62%, mejorando en un 11%.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 2,34%, alcanzado con 5 neuronas y de un mínimo del 0%, alcanzado con 1, 2 y 3 neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan aumenta de un 0 a un 1,12% al pasar de 3 a 4 neuronas, a la vez que mejora su precisión. Al continuar aumentando el número de neuronas, el número de experimentos que fallan continúa aumentando, hasta una llegar al 2.34% para 5 neuronas.
  2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 234, lo cual, de un total de 10.000, es algo más considerable que para el Experimento 1, pero aun así se podría considerar como despreciable.

EXPERIMENTOS 1.1+1.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	95.62%	2.34%
min	84.57%	0.00%

Tabla 20- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 1.1+1.2

**EXPERIMENTO 2:**

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 99.58%, alcanzado con 5 neuronas y un mínimo de 99.51%, alcanzado con una neurona.
- No se produce ningún salto en la mejora de la precisión, sino que esta ya es elevada con tan solo 1 neurona, al igual que ocurría con 3 capas.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 0.26%, alcanzado con 2 neuronas y de un mínimo del 0%, alcanzado con el resto de las neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  1. El número de experimentos que fallan aumenta de un 0 a un 0.04% al pasar a 2 neuronas, a la vez que mejora su precisión ligeramente.
  2. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 26, lo cual, de un total de 10.000, se podría considerar como despreciable.

EXPERIMENTO 2		
	Precisión	Experiments failed
máx	99.63%	0.26%
min	99.51%	0.00%

Tabla 21- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 2

Al igual que ocurría con la prueba con 3 capas, la precisión alcanzada es de casi el 100% con tan solo una neurona y se mantiene así, aunque el número de neuronas aumente.

**EXPERIMENTO 2.1 + 2.2:**

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 99.15%, alcanzado con 5 neuronas y un mínimo de 98.02%, alcanzado con 1, 2, 3 y 4 neuronas.
- El “salto” de mejora de la precisión se obtiene también con el paso de cuatro a 5 neuronas, pasando de una precisión del 98.02% al 99.15%, máximo.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 0.13%, alcanzado con 5 neuronas y de un mínimo del 0%, alcanzado con el resto de las pruebas. Por lo tanto, se observa que:
  5. El número de experimentos que fallan comienza siendo del 0% y pasa a ser del 0.13% con 5 neuronas, prueba de la máxima precisión, por lo que alcanza su máximo a la vez que lo alcanza la precisión
  6. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 13 , lo cual, de un total de 10.000, se puede considerar como despreciable.

EXPERIMENTOS 2.1+2.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	99.15%	0.13%
min	98.02%	0.00%

Tabla 22- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 2.1+2.2

**EXPERIMENTO 3:**

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 88.48%, alcanzado con 6 y 7 neuronas y un mínimo de 64.62%, alcanzado con 1, 2, 3 y 4 neuronas.
- Se produce un salto al pasar de 5 a 6 neuronas, pasando de una precisión de 64.62% al 88.48, máximo.
- Debido a los bajos valores de precisión, ha sido necesario realizar la prueba con 6 y 7 neuronas hasta ver que, aunque el número de neuronas aumentara, la precisión no lo hacía, hecho que no se producía para valores tan bajos de precisión en el resto de los experimentos.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 35.38%, alcanzado con 1, 2, 3, 4 y 5 neuronas y de un mínimo del 7.48%, alcanzado con 6 neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  3. El número de experimentos que fallan disminuye de un 35.38 a un 7.48% al pasar de 5 a 6 neuronas, a la vez que aumenta la precisión.
  4. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 3538, lo cual, de un total de 10.000, se convierte en una variable que será necesario tener en cuenta.

EXPERIMENTO 3		
	Precisión	Experiments failed
máx	88.48%	35.38%
min	64.62%	7.48%

Tabla 23- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimento 3

**EXPERIMENTO 3.1+3.2:**

- Empleando 20 repeticiones, se obtiene una precisión de un máximo del 89.39%, alcanzado con 7 y 8 neuronas y un mínimo de 64.26%, alcanzado con 1, 2, 3, 4, 5 y 6 neuronas.
- Se produce un salto al pasar de 6 y 7 neuronas, pasando de una precisión de 64.26% al 89.39%, máximo.

- Debido a los bajos valores de precisión, ha sido necesario realizar la prueba con 6, 7 y 8 neuronas hasta ver que, aunque el número de neuronas aumentara, la precisión no lo hacía, hecho que no se producía para valores tan bajos de precisión en el resto de los experimentos.
- El número de experimentos que fallan es de un máximo del 35.74%, alcanzado con 1, 2, 3, 4, 5 y 6 neuronas y de un mínimo del 4.78%, alcanzado con cuatro neuronas. Por lo tanto, se observa que:
  5. El número de experimentos que fallan disminuye de un 35.38 a un 7.15% al pasar de 6 a 7 neuronas, para alcanzar su mínimo en 4,78% con 8 neuronas.
  6. Finalmente, evaluando el número de experimentos que han fallado, en su máximo han sido 3538, lo cual, de un total de 10.000, se convierte en una variable que será necesario tener en cuenta.

EXPERIMENTOS 3.1+3.2		
	Precisión	Experiments failed
máx	89.39%	35.74%
min	64.26%	4.78%

Tabla 24- Resultados del Experimento L-V con 6 capas Experimentos 3.1+3.2

## 4.2. Resultados simulación equilibrio del amoniaco

### 1ª Prueba: 20 repeticiones, 3 capas y 2 variables (presión y temperatura)

- El error de la constante de equilibrio, a partir de ahora llamada la variable 0, disminuye notablemente entre el experimento 1 y el experimento 3, siendo en torno a un 20% menor en el experimento 3 respecto a experimento1, disminuyendo también al aumentar las neuronas.

Error variable 0 exp1	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp 3
152,2%	82,33%	35,7%
29,1%	9,35%	7,5%

Tabla 25- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- La precisión se mantiene en el 100% en todos los casos.
- En cuanto a la fracción de amoniaco a la salida, a partir de ahora la variable 1, su error también es menor en el experimento 3 en comparación con el experimento1 y con el 2, siendo este último el que tiene un menor mínimo, disminuyendo al aumentar las neuronas hasta volverse prácticamente nulo.

Error variable 1 exp 1	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp3
29,1%	19,79%	8,7%
1,8%	0,59%	2,5%

Tabla 26- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

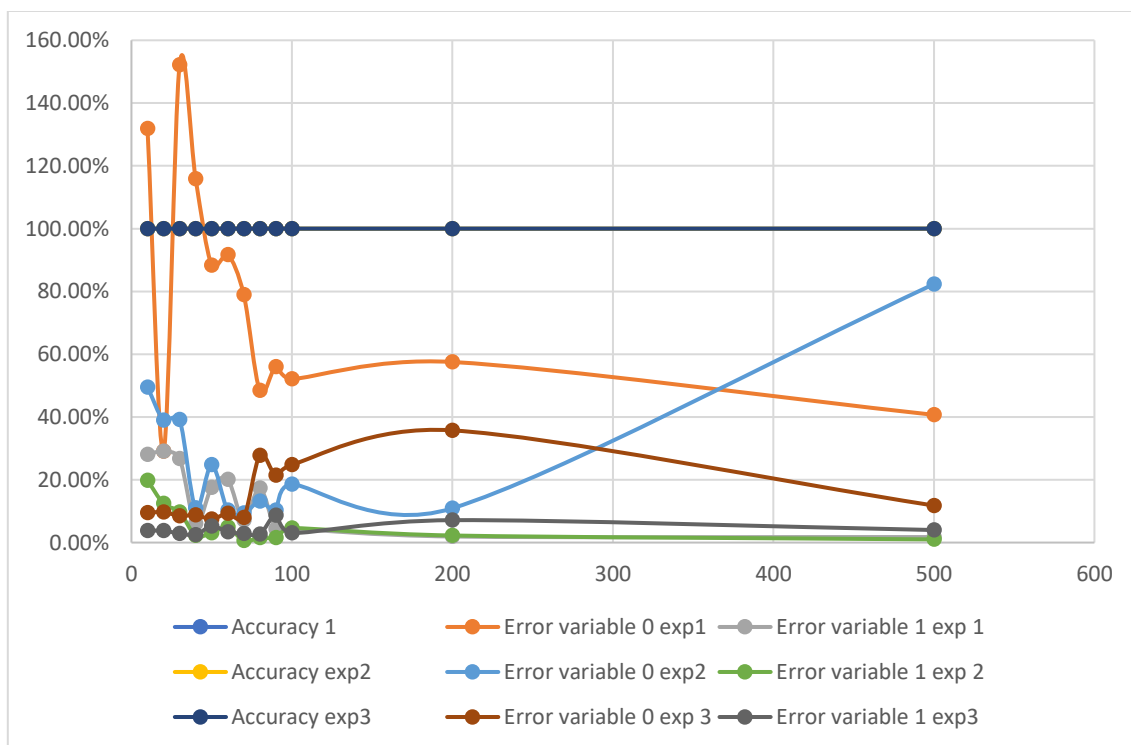


Figura 31- Gráfico con errores de los experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 3 capas y 2 variables.

### 2ª prueba: 200 repeticiones, 3 capas y 2 variables.

En comparación con los errores que se obtenían con 20 repeticiones, los errores son mucho menores, llegando con las 500 neuronas a ser menor del 20% para todas las variables.

- La Precisión se mantiene siempre en torno al 100%, sin variar con los cambios.
- Al aumentar las neuronas, el error de la variable 0 del experimento 1, que es el mayor, aunque cercano al del experimento 2, en su pico se encuentra en torno al 50%, disminuyendo al aumentar las neuronas hasta ser de tan solo sobre un 10%, el valor mínimo registrado.
- El error de la variable 0 en el experimento 3 aumenta ligeramente al aumentar las neuronas, pero siempre por debajo del 20%.



Error variable 0 exp1	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp 3
47,9%	44,82%	18,4%
5,9%	2,84%	3,5%

Tabla 27- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- Los errores de la variable 1, tanto del experimento 1 y del experimento 3 son mínimos siendo para ambos el valor máximo del 10%.

Error variable 1 exp 1	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp3
3,0%	19,38%	4,9%
0,5%	0,75%	1,1%

Tabla 28- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

Ilustración 1- Errores máximo y mínimo de las variables.

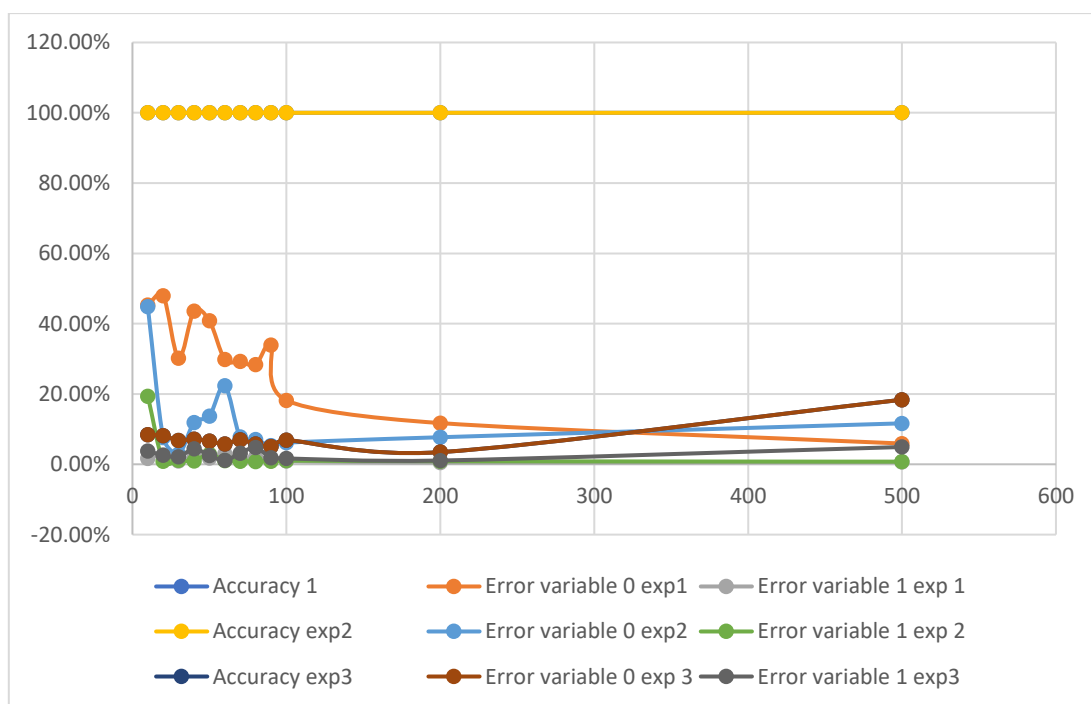


Figura 32- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 3 capas y 2 variables.

**3ª Prueba: 20 repeticiones, 6 capas y 2 variables**

En este caso, en comparación con los mismos experimentos para 3 capas, los errores son considerablemente menores.

- Aunque el error de la variable 0 del experimento 1 comienza siendo elevado, según aumentan las neuronas se mantiene más estable y de menor valor, siendo en su punto mínimo de en torno al 10%

Error variable 0 exp1	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp 3
146,1%	53,58%	17,9%
11,6%	6,03%	6,7%

Tabla 29- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 1 comienza siendo ligeramente inferior al 40% en el experimento 1, 20% para el experimento 2 y mientras que para el experimento 3 es prácticamente nula. En el caso del experimento 1, el error disminuye y se mantiene en torno al 1 % para 500 neuronas.

Error variable 1 exp 1	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp3
37,6%	19,85%	4,1%
1,1%	1,13%	2,4%

Tabla 30- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- La precisión se mantiene siempre en el 100%, sin variaciones

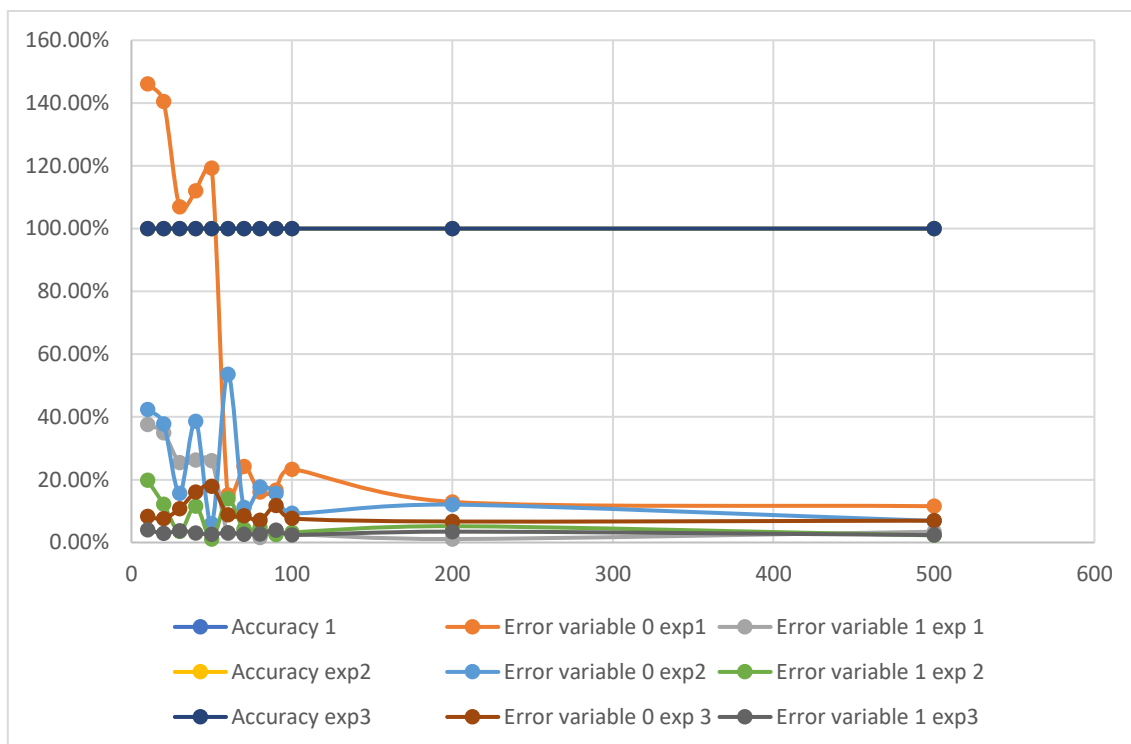


Figura 33- Gráfico con errores experimentos 1, 2 u 3 para 20 repeticiones, 6 capas y 2 variables

#### 4ª prueba: 200 repeticiones, 6 capas y 2 variables

Finalmente, empleamos 200 repeticiones y 6 capas para los experimentos.

- La precisión se mantiene en torno al 100%, sin variaciones.

Precisión 1	Precisión exp2	Precisión exp3
100,0%	11,34%	100,0%
100,0%	2,68%	100,0%

Tabla 31- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 0 es significativamente menor, aunque comienza siendo elevado para el experimento 1, se mantiene siempre cerca del 10% y aumentando el número de neuronas, cerca de la nulidad. Por otra parte, es destable que para el experimento 2 el error es menor del 5% desde el primer experimento.

Error variable 0 exp1	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp 3
137,7%	3,18%	13,8%

3,3%	3,20%	6,4%
------	-------	------

Tabla 32- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 1 se comporta de forma similar al error en la variable 0, siendo su valor mínimo y en torno al 0% durante todo el experimento, a excepción del inicio donde alcanza un valor de en torno al 40%.

Error variable 1 exp 1	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp3
36,6%	11,34%	3,8%
0,6%	2,68%	1,8%

Tabla 33- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

En este experimento se puede observar que los resultados obtenidos son de mejor calidad que los obtenidos para menor número de capas y de repeticiones.

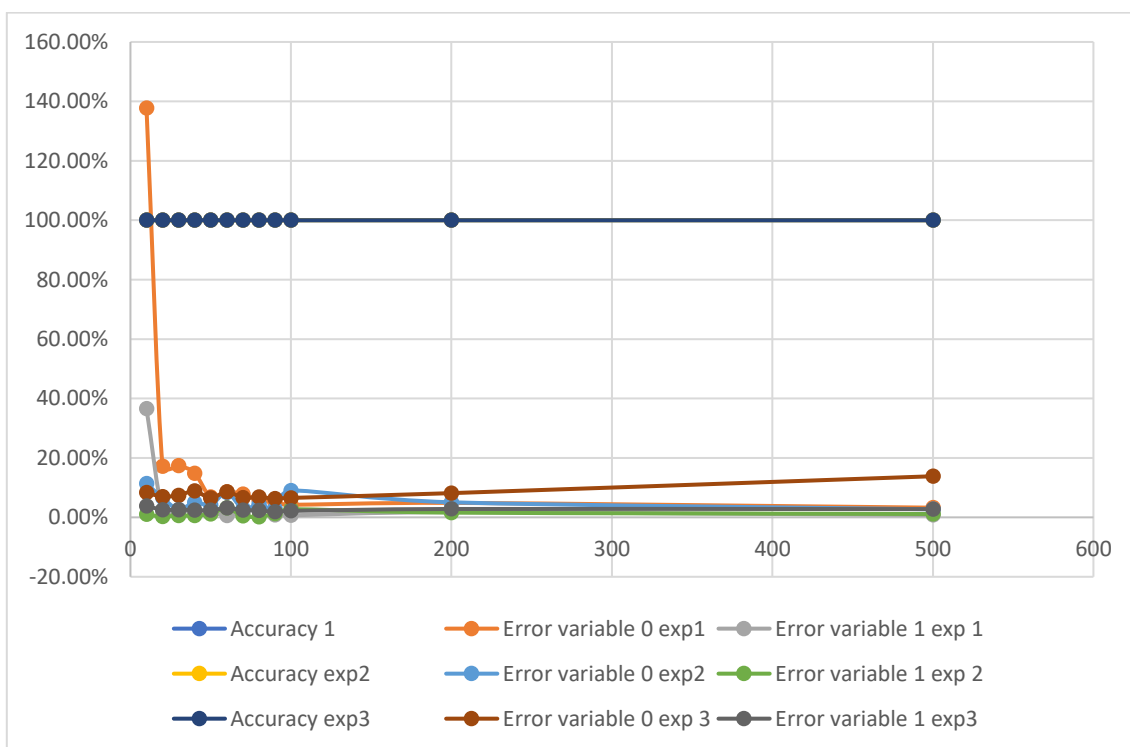


Figura 34- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 6 capas y 2 variables.

### 5ª prueba: 20 repeticiones, 3 capas y 4 variables

En general, al incorporar las variaciones de las composiciones, los errores cometidos por el programa son mayores que con 2 variables.

- La Precisión comienza siendo menor del 100% y se mantiene constante en torno al 95%.

Precisión exp1.1	Precisión exp 2,1	Precisión exp 3,1
96,1%	98,0%	98,3%
92,4%	92,9%	94,4%

Tabla 34- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 0 varía mucho para el experimento 1, alcanzando valores de hasta el 170% y, finalmente, al aumentar las neuronas, alcanzando un valor de en torno al 70%. Además, para el experimento 2, que en este caso sí presenta valores similares a los otros dos experimentos, el error de la variable 0 se mantiene siempre igual o menor al 100%, siendo también muy inestable, con un mínimo en el 30% y un máximo del 100%. Por otra parte, para el experimento 3, el error de la variable 0 varía notablemente, teniendo su pico en torno al 120% y su mínimo para el 38% aprox. Como se puede ver en la gráfica, ambos son muy inestables y tienen grandes fluctuaciones.

Error variable 0 exp 1.1	Error variable 0 exp 2,1	Error variable 0 exp 3,1
169,1%	98,7%	116,9%
49,4%	30,7%	37,4%

Tabla 35- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error en la variable 1 es menor que el que se comete en la variable 0 en general, menos en el caso de 1 neurona para estas condiciones en el experimento 1.1, alcanzando su pico en torno al 170%. Finalmente, aparte de también fluctuar como lo hace el error de la variable 1, se mantiene inferior al 100% y en torno al 50% para el experimento 1.1 y al 30% para el experimento 3.1. Por otra parte, distinguiéndose de los experimentos con solo 2 variables, el error de la variable 1 en el experimento 2.1 comienza siendo elevado, pero termina disminuyendo con forma similar a una exponencial, hasta alcanzar valores de en torno al 25%.

Error variable 1 exp 1.1	Error variable 1 exp 2,1	Error variable 1 exp 3,1
174,4%	221,1%	64,5%

32,2%	21,8%	22,0%
-------	-------	-------

Tabla 36- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

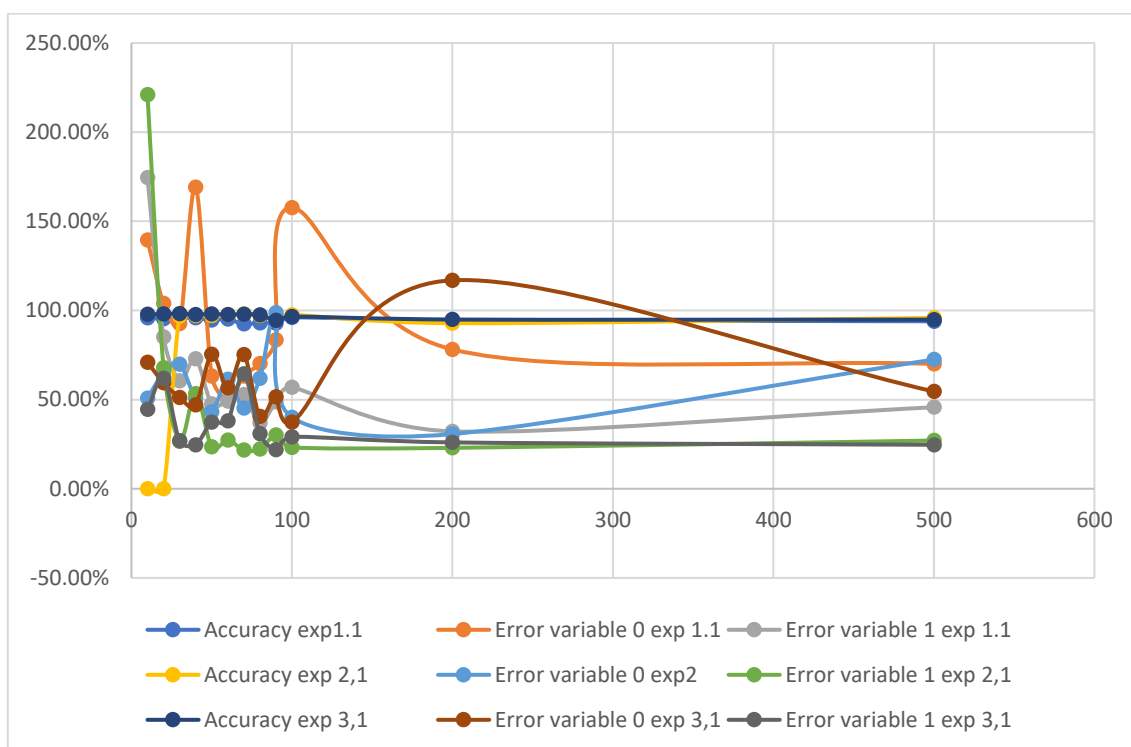


Figura 35- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 3 capas y 4 variables.

### 6ª prueba: 200 repeticiones, 3 capas y 4 variables

- La Precisión de los experimentos continúa, al igual que en la prueba con 20 repeticiones, en torno al 100% pero sin alcanzarlo.

Precisión exp1.1	Precisión exp 2,1	Precisión exp 3,1
99.4%	99.1%	99.3%
95.9%	96.0%	96.4%

Tabla 37- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 0 en el caso del experimento 1.1 es inestable al inicio con pocas neuronas, pero, según se aumentaba el número de neuronas termina siendo de un valor de en torno al 15% mientras que en el caso del experimento 2.1 será de aproximadamente el 9%. Finalizando, el error del experimento 3.1. será similar a los previos, con un valor ligeramente superior al 9% para un mayor número de neuronas y con inestabilidad cuando se emplean menos neuronas.

Error variable 0 exp 1,1	Error variable 0 exp 2,1	Error variable 0 exp 3,1
83.5%	47.6%	56.0%
11.9%	7.7%	8.1%

Tabla 38- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 1, para el experimento 3.1 comienza siendo elevado, pero rápidamente disminuye para ir a la par que el error del experimento 1.1, en torno a valores del 6%. Por otra parte, el error de la variable 0 para el experimento 2 es intermedio a los otros dos, finalizando con su mínimo para las 500 neuronas, con un valor de aproximadamente el 9%.

Error variable 1 exp 1,1	Error variable 1 exp 2,1	Error variable 1 exp 3,1
68.0%	233.2%	216.1%
4.3%	3.1%	3.8%

Tabla 39- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

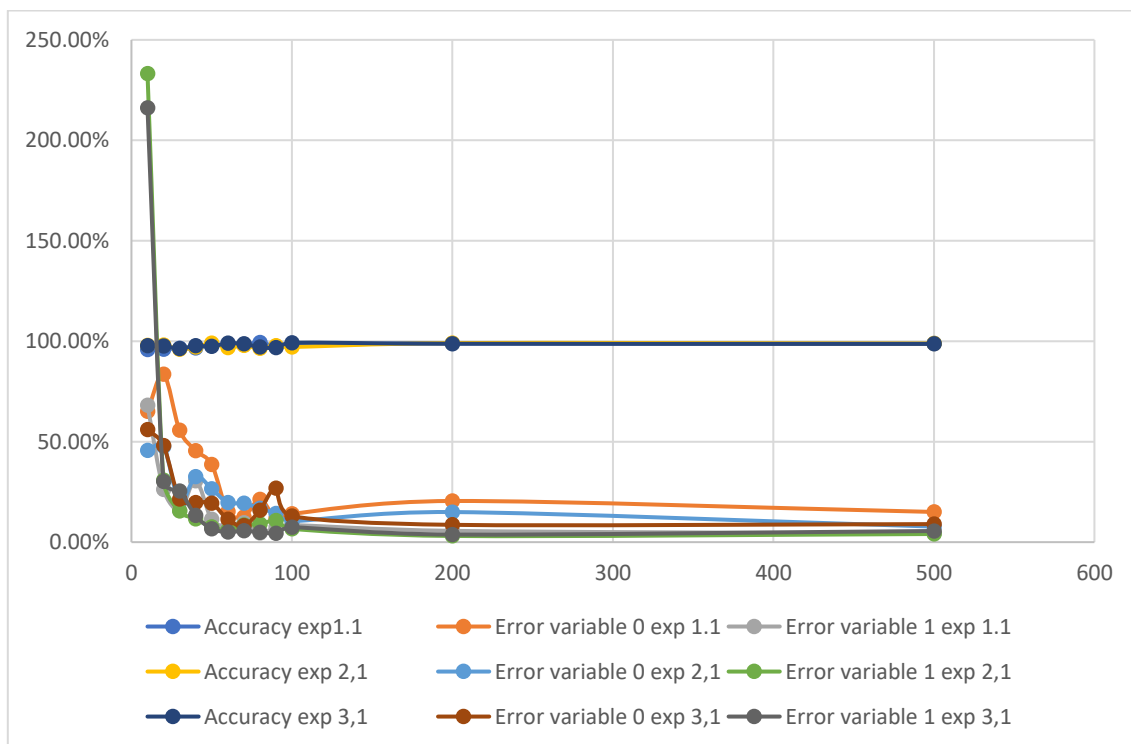


Figura 36- Gráficas con errores experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 3 capas y 4 variables.

**7ª prueba: 20 repeticiones, 6 capas y 4 variables**

- Precisión: Se mantiene en todos los experimentos en torno al 100% pero prácticamente sin alcanzarlo.

Precisión exp1.1	Precisión exp 2,1	Precisión exp 3,1
97.6%	98.8%	98.7%
95.9%	96.3%	96.0%

Tabla 40- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

**Tabla 41- Errores máximo y mínimo de las variables**

- El error en la variable 0 tiene grandes fluctuaciones para las variaciones iniciales en el número de neuronas mientras que finalmente, al alcanzar un número de neuronas elevado para todos los experimentos se estabiliza en valores menores.

Error variable 0 exp 1.1	Error variable 0 exp 2,1	Error variable 0 exp 3,1
159.3%	57.3%	70.7%
23.4%	12.6%	10.1%

Tabla 42- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error en la variable 1 también fluctúa inicialmente, pero de una manera más ligera que la variable 0. De igual manera, al aumentar el número de neuronas se estabiliza en valores mínimos.

Error variable 1 exp 1.1	Error variable 1 exp 2,1	Error variable 1 exp 3,1
203.0%	92.6%	199.5%
10.5%	3.3%	6.2%

Tabla 43- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.



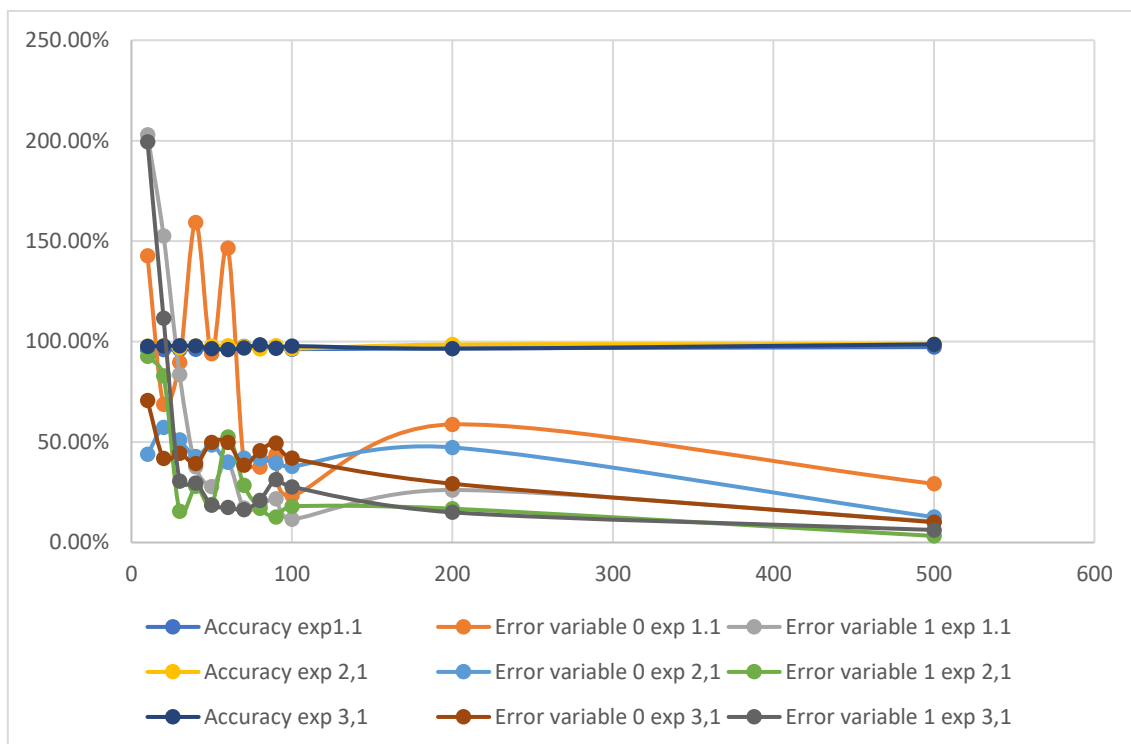


Figura 37- Gráfico con errores experimentos 1, 2 y 3 para 20 repeticiones, 6 capas y 4 variables.

### 8ª prueba: 200 repeticiones, 6 capas y 4 variables.

- Precisión: se mantiene siempre en torno al 100%, llegando a alcanzarlo para números de neuronas elevados.

Precisión exp 1,1	Precisión exp 2,1	Precisión exp 3,1
99.5%	99.6%	99.3%
94.5%	97.6%	97.7%

Tabla 44- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 0 ya no fluctúa drásticamente como lo hacía en los experimentos previos, sino que lo hace de forma ligera, disminuyendo su valor y siguiendo tendencias similares para los experimentos 1.1, 2.1 y 3.1. Finalmente, todos alcanzan sus mínimos en valores entre el 10 y el 15%.

Error variable 0 exp 1,1	Error variable 0 exp 2,1	Error variable 0 exp 3,1
74.2%	54.5%	51.0%
9.6%	5.5%	5.7%

Tabla 45- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

- El error de la variable 1 sigue una tendencia similar que el error de la variable 0, fluctuando inicialmente, pero estabilizándose en valores más pequeños que los de anteriores pruebas.

Error variable 1 exp 1,1	Error variable 1 exp 2,1	Error variable 1 exp 3,1
43.7%	169.1%	168.2%
3.4%	1.8%	2.2%

Tabla 46- Resultados de la simulación del amoniaco. Errores máximos y mínimos de las variables.

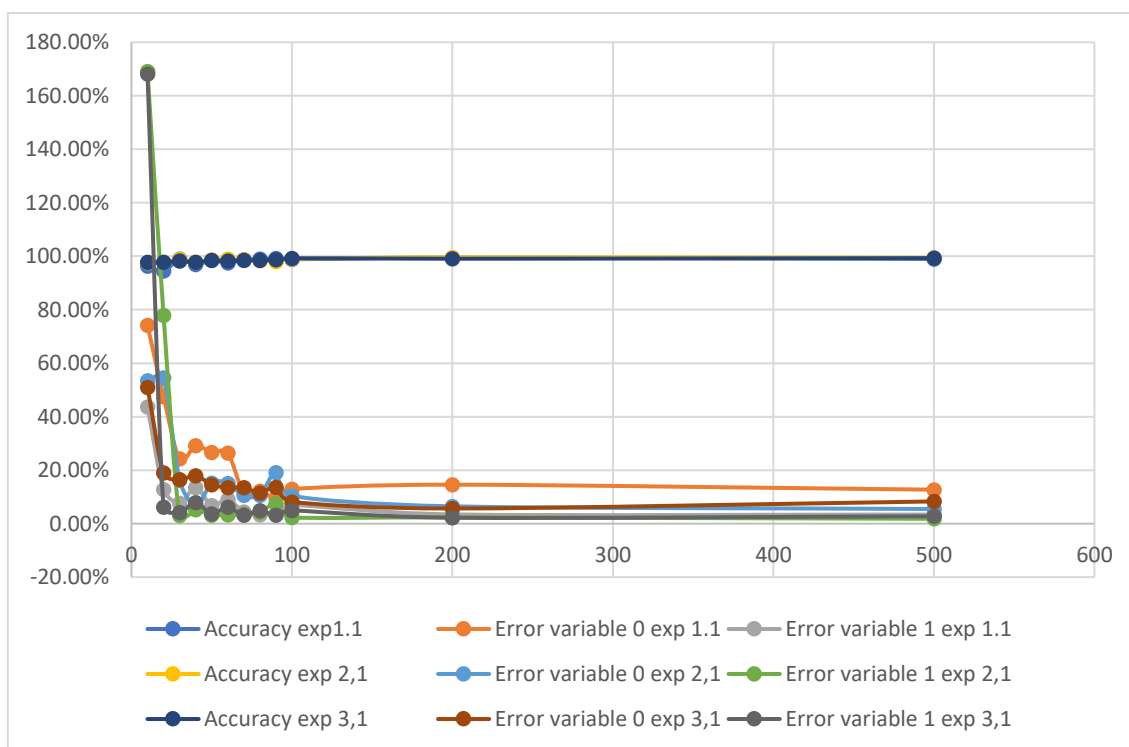


Figura 38- Gráfico con errores de los experimentos 1, 2 y 3 para 200 repeticiones, 6 capas y 4 variables.

### 4.3. Resultados biomasa

Al dividir el fichero en tres subficheros en el que en cada uno de ellos se pase por la red neuronal e intente calcular cada una de las variables.

De esta manera, se analizarán los ficheros de forma individual.

### Experimento de las variables 1, 2 y 3

En primer lugar, se tratará el fichero que tiene como entradas las generales, es decir, ratio oxígeno-carbono, ratio hidrógeno carbono, porcentaje de cenizas, temperatura en grados centígrados, tiempo de tratamiento y la concentración de sólidos inicial y como salidas, el rendimiento de biocrudo, el rendimiento en hidrocarburos y el rendimiento en ACP (coproducto acuoso).

El error en la variable 0 corresponderá a el que se produce al intentar calcular el rendimiento en biocrudo, el error en la variable 1 corresponderá al que se produce al intentar calcular el rendimiento en hidrocarburos y el error en la variable 2 será el que se produce al intentar calcular el rendimiento en la producción de coproducto acuoso.

- El error en la variable 0 comienza fluctuando inicialmente de manera ligera, para mantenerse siempre estable en torno al 30% aunque el número de neuronas empleadas aumentara-
- El error en la variable 1 inicia siendo de en torno al 60%, su máximo, y según aumenta el número de neuronas disminuye su valor, finalizando en torno al 35%.
- El error en la variable 2 es el que más valor tiene a lo largo de todo el experimento, comienza aumentando del 90% al 120%, disminuyendo y manteniéndose ligeramente constante en torno al 80% y finaliza aumentando de manera lineal hasta su máximo, aproximadamente un 165%.

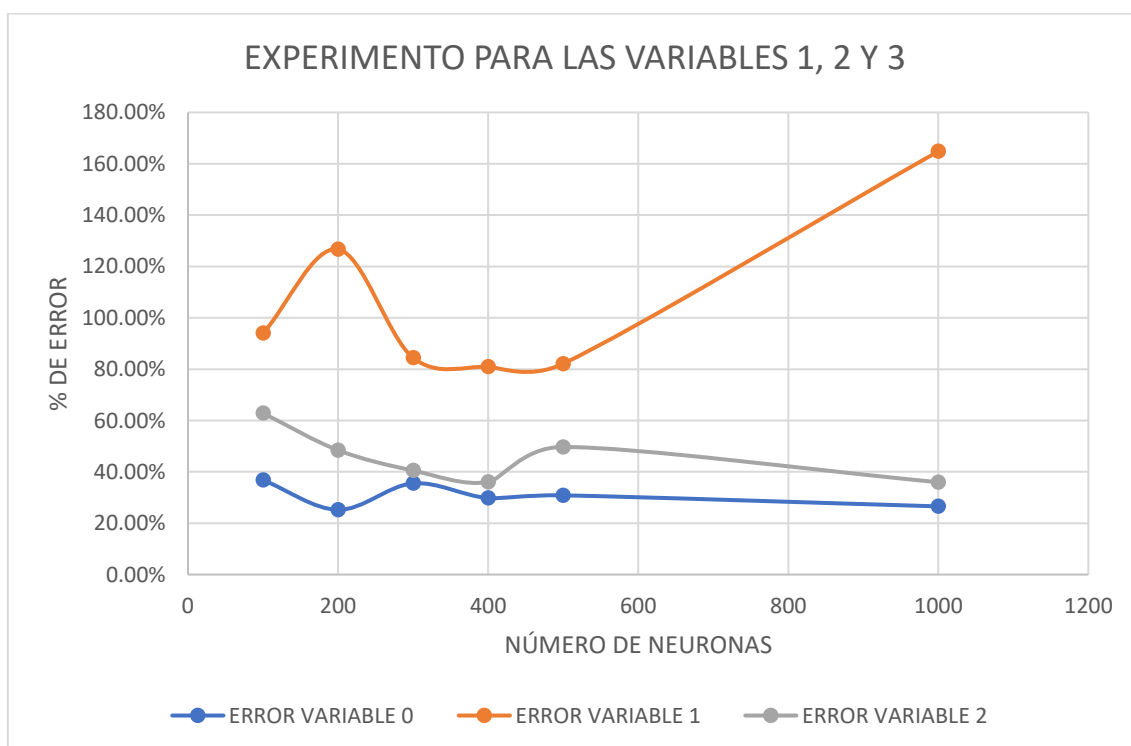


Figura 39- Gráfico de resultados de las variables 1, 2 y 3.

### Experimento de las variables 4, 5 y 6

Continuando con la misma forma de proceder que en los experimentos de las variables 1, 2 y 3, las variables tratadas ahora serán el rendimiento de producción de gas, le energía almacenada en el biocrudo producido y la energía almacenada en los hidrocarburos producidos.

- El error en la variable 0, tal y como se ve en la gráfica fluctúa en el inicio y no parece estabilizarse según aumenta el número de neuronas, además alcanza valores muy elevados (779,67%)
- El error en la variable 1, pese a tener valores inferiores a los alcanzados en la variable 0 también fluctúa y, aunque con una pendiente menor que la que tenía también la variable 0, también aumenta con el número de neuronas.
- El error en la variable 2 comienza teniendo valores inferiores en su inicio, aumenta de forma constante según aumenta el número de neuronas, aunque con fluctuaciones, no de forma lineal.

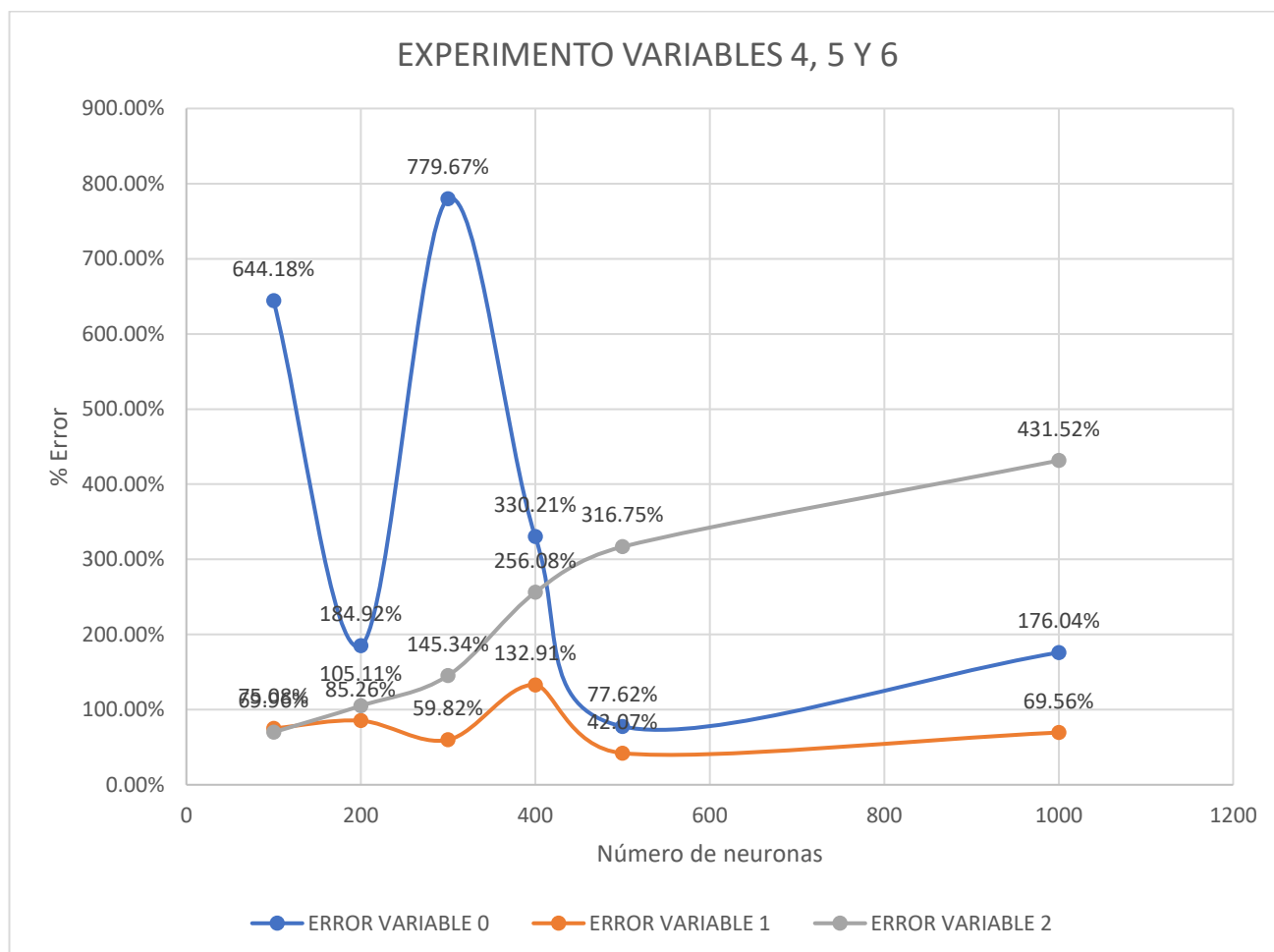


Figura 40- Gráfico de los resultados de las variables 4, 5 y 6

### Experimento de las variables 7 y 8

Continuando, las variables séptima y octava del experimento serán los kilos de carbono producido por kilo de biocrudo y los kilos de carbono producido por kilo de hidrocarburo.

En esta ocasión, al ser solo dos variables las tratadas, se analizarán los errores en la variable 0 (kilos de carbono producido por kilo de biocrudo) y en la variable 1 (kilos de carbono producido por kilo de hidrocarburo).

- El error en la variable 0 se mantiene en torno al 50% sin presentar grandes fluctuaciones, con un mínimo del 41.08% y un máximo del 70.54%.

- El error en la variable 1 por el contrario, sí que presenta valores superiores y grandes fluctuaciones, con un mínimo del 105% y un máximo del 561.26%.

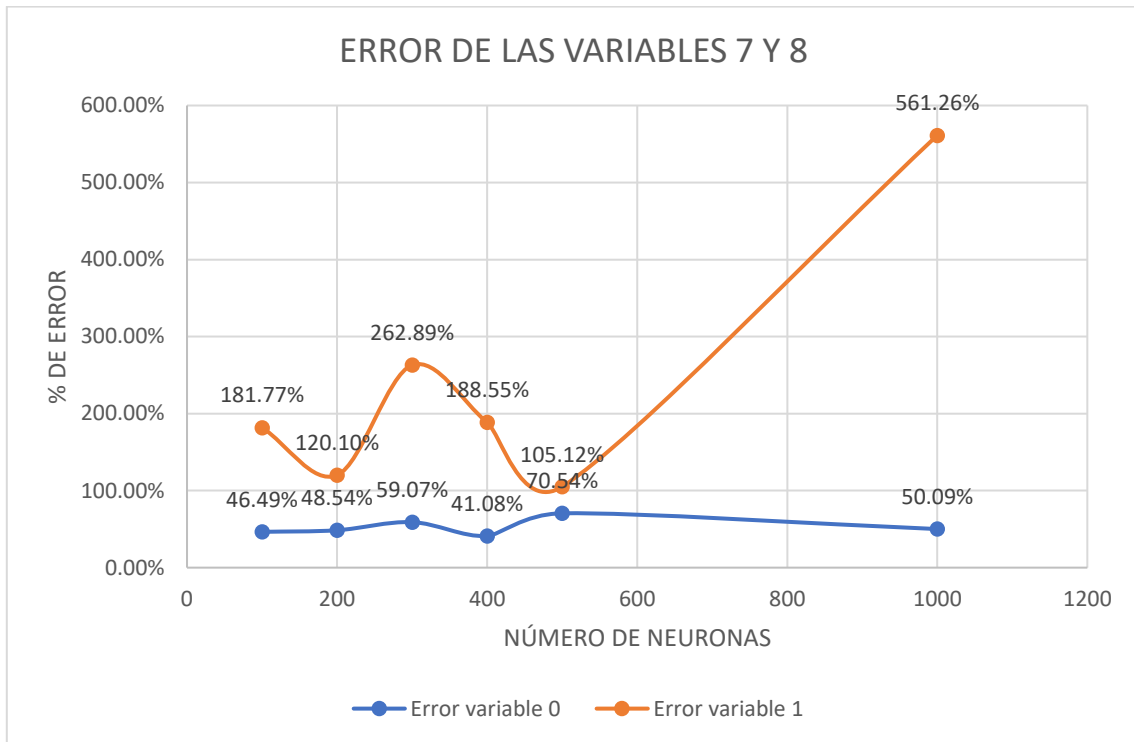


Figura 41- Gráfico de las variables 7 y 8

## 5. Conclusiones

### 5.1. Conclusiones experimentación líquido-vapor

#### EXPERIMENTOS 1 Y 1.1+1.2

- Precisión:

1. Comparando el número de capas, en ambas pruebas ( 1 y 1.1+1.2), la precisión es similar o mayor con 6 capas a con 3 capas, por lo que, como se ha observado en las pruebas, se pueden obtener dos resultados diferentes, aunque similares al realizar la misma prueba en dos instantes de tiempo diferentes, por lo que teniendo esto en cuenta, los resultados son similares o ligeramente mejores con 6 capas que con 3.
2. Comparando cuando se realiza la mejora de la precisión, para 6 capas es necesario un mayor número de neuronas para que se produzca la mejora, aunque posteriormente los resultados sean ligeramente mejores.

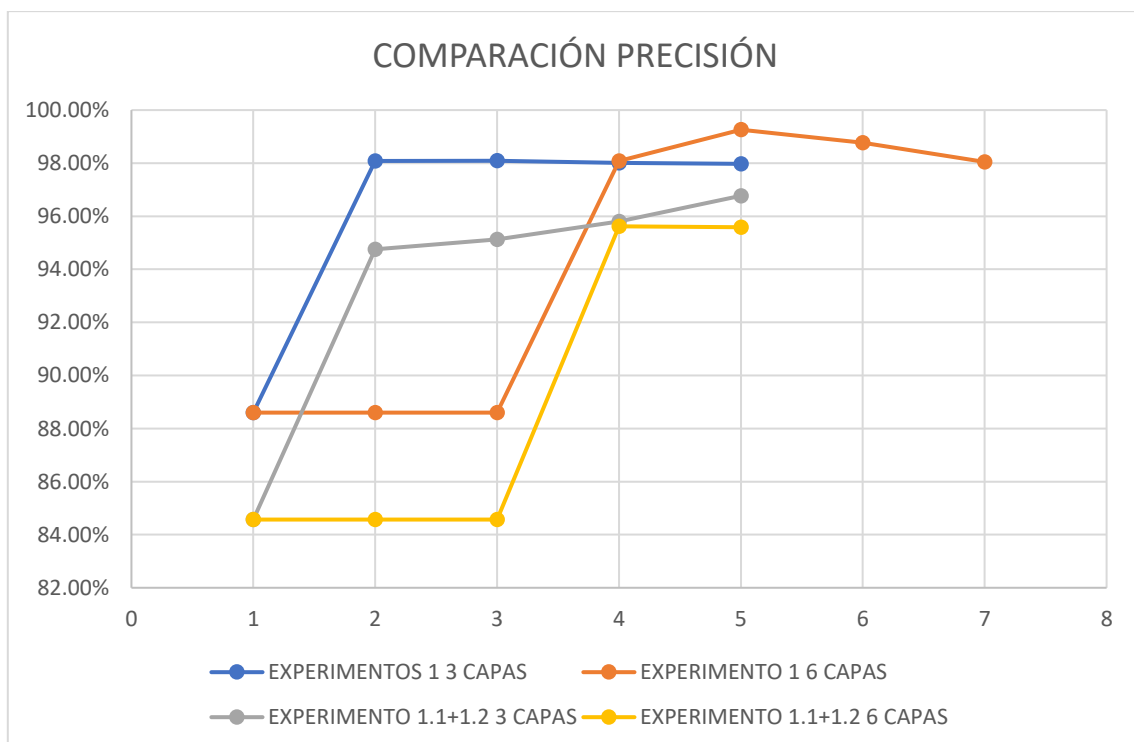


Figura 42- Comparación de las precisiones

- Experimentos fallidos:

No se observa correlación en cuanto al número de experimentos fallidos. De forma general, el número de experimentos fallidos es bajo, por lo que el número de experimentos no es una variable para tener en cuenta.

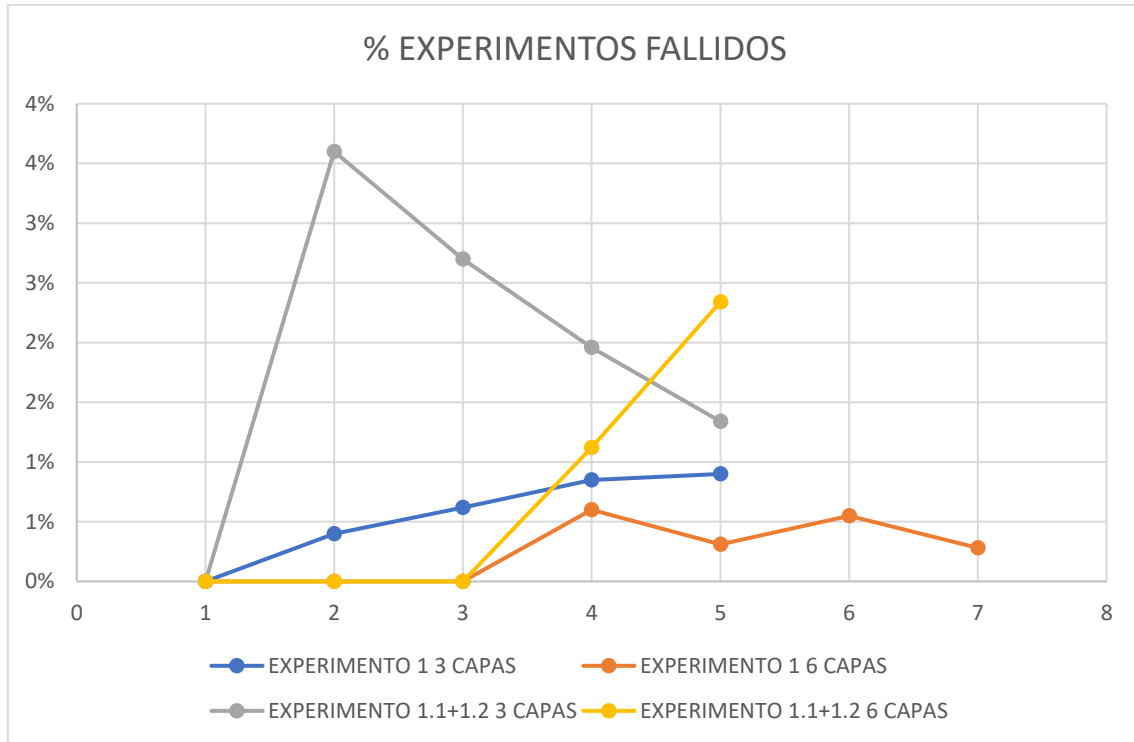


Figura 43- Comparación del porcentaje de experimentos fallidos.

## EXPERIMENTOS 2 Y 2.1+2.2

### - Precisión:

1. Comparando el número de capas, en ambas pruebas ( 2 y 2.1+2.2), la precisión es similar o mayor con 6 capas a con 3 capas, por lo que como ocurría en los experimentos 2 y 2.1+2.2, los resultados son similares o ligeramente mejores con 6 capas que con 3.
2. Comparando cuando se realiza la mejora de la precisión, para 6 capas es necesario un mayor número de neuronas para que se produzca la mejora, aunque posteriormente los resultados sean ligeramente mejores. Incluso, para el experimento 2.1+2.2, se obtiene mayor precisión con 6 capas que con 3, diferencia que no ocurría con el resto de los experimentos.

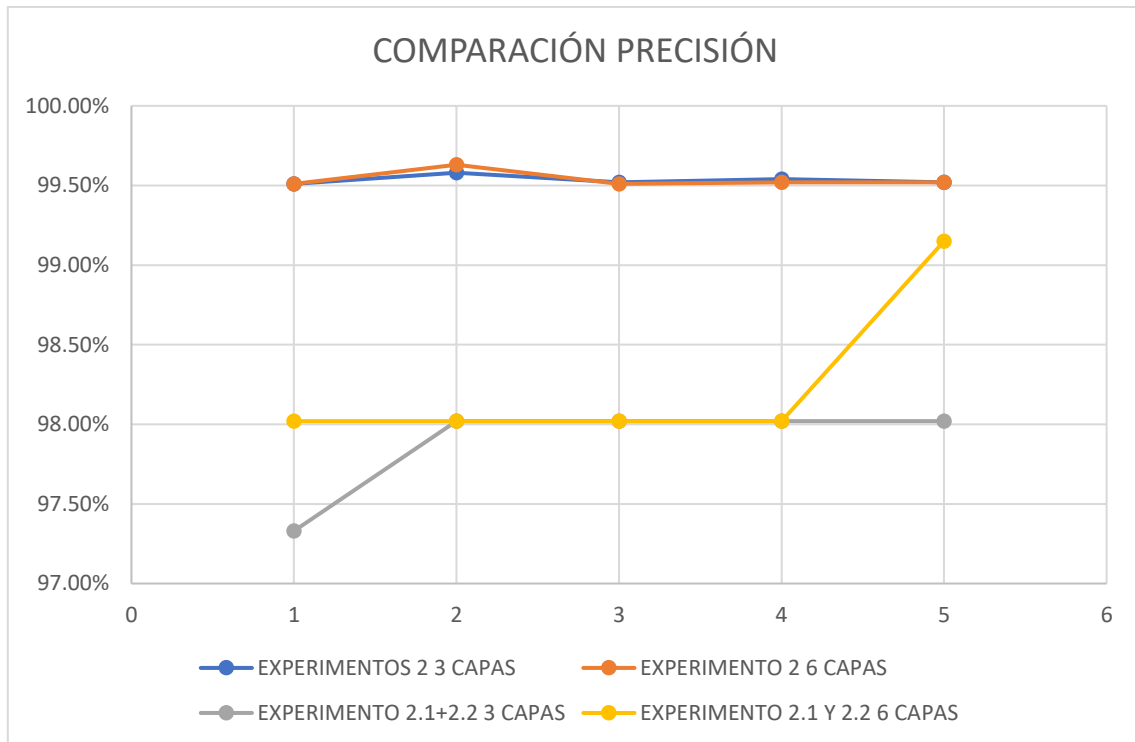
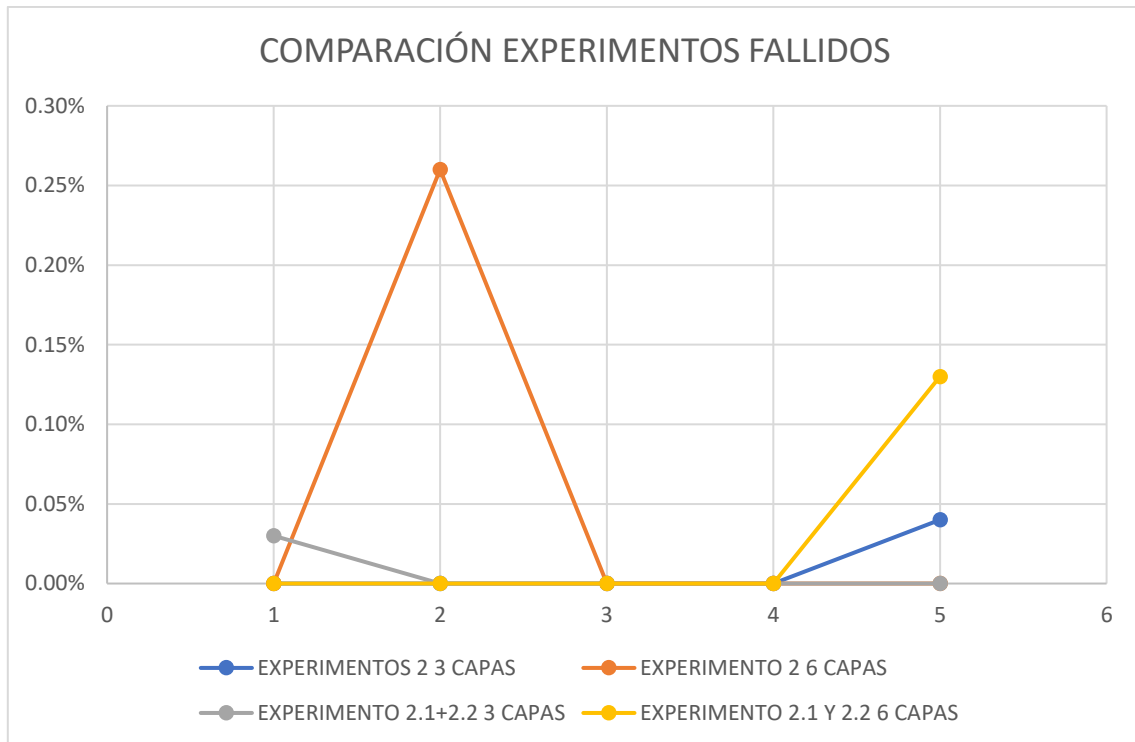


Figura 44- Comparación de la precisión

- Experimentos fallidos:

No se observa, tal y como ocurría en los experimentos previos, correlación en cuanto al número de experimentos fallidos. De forma general, el número de experimentos fallidos es bajo, por lo que el número de experimentos no es una variable para tener en cuenta.





*Figura 45- Comparación de los experimentos fallidos*

### **EXPERIMENTOS 3 Y 3.1+3.2**

- Precisión:

1. Comparando el número de capas, en ambas pruebas ( 3 y 3.1+3.2), la precisión es similar o mayor con 6 capas a con 3 capas, por lo que como ocurría en los experimentos 3 y 3.1+3.2, los resultados son similares o ligeramente mejores con 6 capas que con 3.
2. Comparando cuando se realiza la mejora de la precisión, para 6 capas es necesario un mayor número de neuronas para que se produzca la mejora, aunque posteriormente los resultados sean ligeramente mejores.

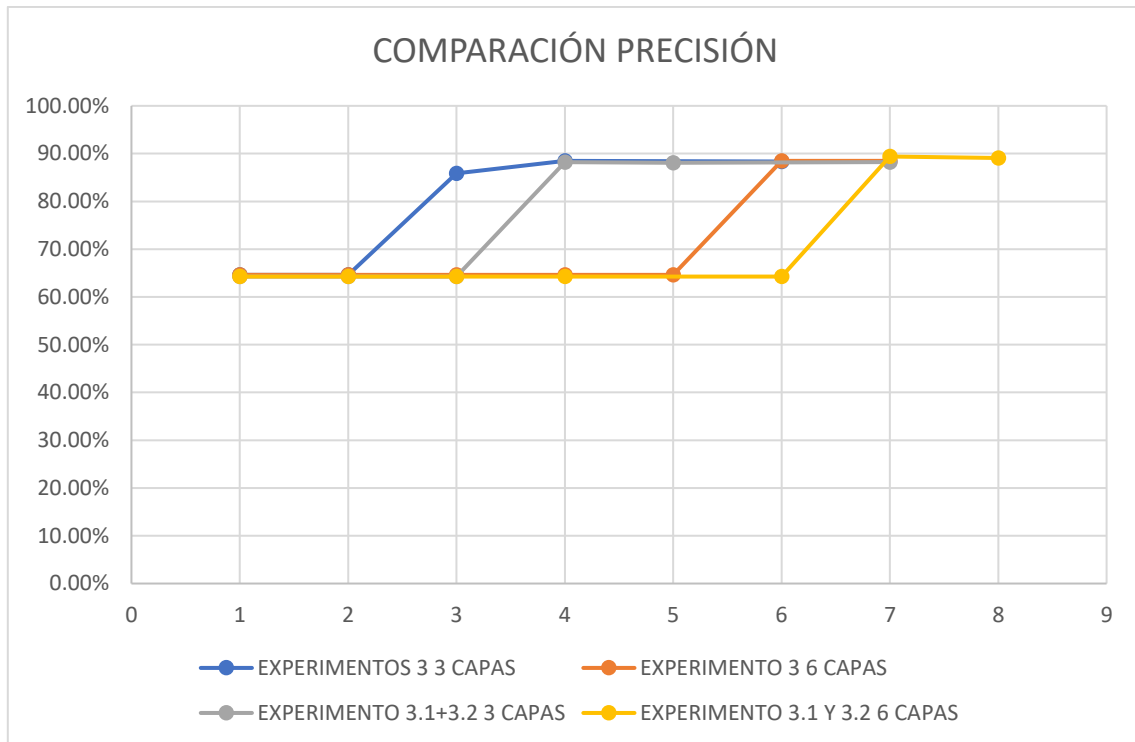


Figura 46- Comparación de la precisión

- Experimentos fallidos:

A diferencia de como ocurría en los experimentos previos, el número de experimentos fallidos comienza siendo elevados, de entorno a un 35% en todos los casos, por lo que se convierte en una variable para tener en cuenta, ya que de 10.000 datos sobre 3500 fallan al pasar por el programa.

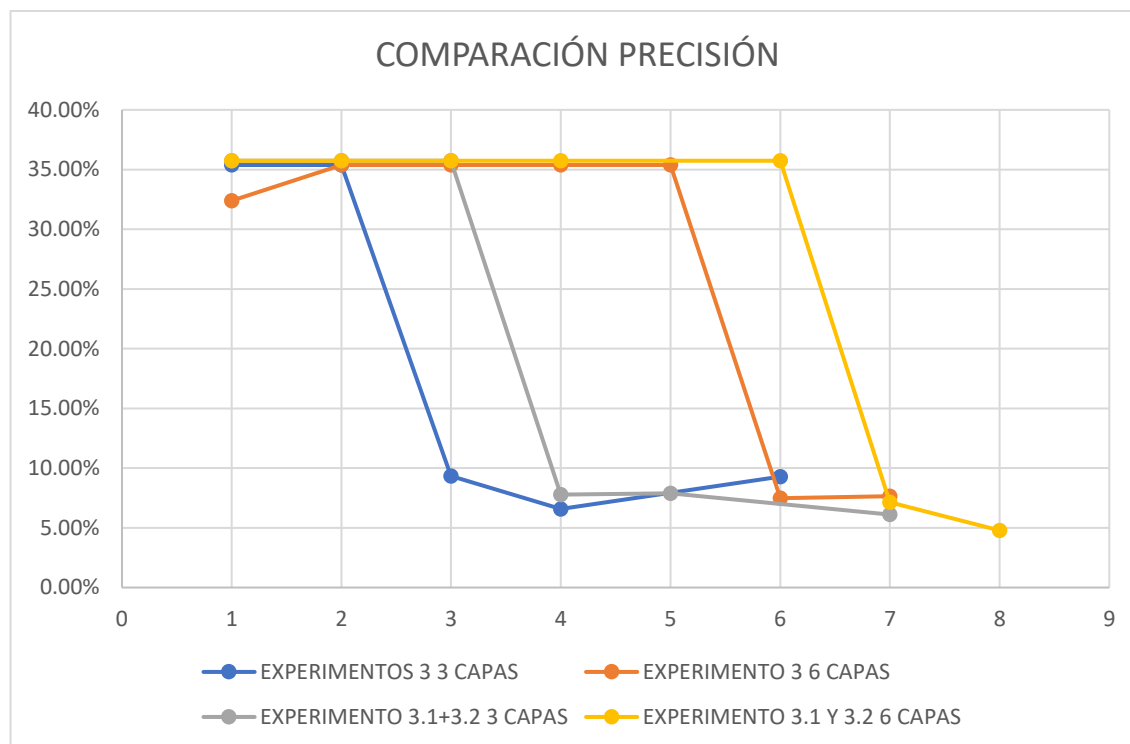


Figura 47- Comparación de la precisión

De forma general, se puede concluir que, empleando números de neuronas relativamente bajos, del orden de 10 y un número de repeticiones también bajo, de en torno a 20, los resultados obtenidos por la red neuronal se pueden considerar como satisfactorios ya que los errores producidos no son excesivamente altos, excepto algún experimento en concreto, y las precisiones de la red son elevadas.

## 5.2. Conclusiones experimentación equilibrio del amoniaco

### Comparación 1 y 1.1

Los experimentos 1 y 1.1 son iguales en cuanto las presiones y temperaturas, por lo que podemos comparar sus precisiones y errores.

**Precisión:** En este caso, la diferencia entre las precisiones de las predicciones del programa es mínima ya que, en ambos casos, se obtiene una precisión cercana al 100% de forma constante.

**Error de la variable 0:** El error cometido en la variable 0, se puede observar que, de forma general, es mayor en el experimento 1.1 ya que tiene máximos y mínimos de mayor valor que los que presentan los datos del experimento 1. Por lo tanto, se puede concluir que, para el error de la variable 0, al introducir las variaciones de composición en los datos, los errores cometidos en las predicciones son mayores, aunque la precisión sea similar.

Error variable 0 exp1 20 repeticiones y 3 capas	Error variable 0 exp1 200 repeticiones y 3 capas	Error variable 0 exp1 20 repeticiones y 6 capas	Error variable 0 exp1 200 repeticiones y 6 capas
152.2%	47.9%	146.1%	137.7%
29.1%	5.9%	11.6%	3.3%

Tabla 47- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (I)

Error variable 0 exp 1.1 20 repeticiones y 3 capas	Error variable 0 exp 1.1 200 repeticiones y 3 capas	Error variable 0 exp 1.1 20 repeticiones y 6 capas	Error variable 0 exp 1.1 200 repeticiones y 6 capas
169,1%	83.50%	159.30%	74.20%
49,4%	11.90%	23.40%	9.60%

Tabla 48- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (II)

- Error de la variable 1: Al igual que se observaban en los errores de la variable 0 también existen diferencias en los errores de la variable 1. En este caso, también son menores para sólo 2 variables, presentando para 4 variables máximos y mínimos superiores.

Error variable 1 exp 1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 1 exp 1 200 repeticiones 6 capas
29.1%	3.0%	37.6%	36.6%
1.8%	0.5%	1.1%	0.6%

Tabla 49- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (III)

Error variable 1 exp 1.1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 1.1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 1.1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 1 exp 1.1 200 repeticiones 6 capas
174,4%	68.0%	203.0%	43.7%
32,2%	4.3%	10.5%	3.4%

Tabla 50- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (IV)

### Comparación 2 y 2.1

- Precisión o precisión: en el experimento 2 la Precisión es del 100% de forma constante, mientras que para el experimento 2.1 varía, siendo siempre inferior al 100%, por lo tanto, la precisión de los resultados es superior para 2 variables que para 4.

Precisión exp2	Precisión exp2	Precisión exp2	Precisión exp2
100%	100%	100%	100%
100%	100%	100%	100%

Tabla 51- Comparación de las precisiones para los diferentes experimentos del amoniaco (I)

Precisión exp 2,1 20 repeticiones 3 capas	Precisión exp 2,1 200 repeticiones 3 capas	Precisión exp 2,1 20 repeticiones 6 capas	Precisión exp 2,1 200 repeticiones 6 capas
99.6%	99.1%	98.8%	99.6%
97.6%	96.0%	96.3%	97.6%

Tabla 52-- Comparación de las precisiones para los diferentes experimentos del amoniaco (I)

- Error de la variable 0: en el experimento 2, tiene su máximo en la prueba con 20 repeticiones y 3 capas, con un 82,33% y su mínimo del 2,58% para 200 repeticiones y 6 capas.

Por otra parte, el error de la variable 0 del experimento 2.1 es muy inferior, llegando para 20 repeticiones y 3 capas a tener un máximo de 98,7% y un mínimo para 200 repeticiones y 6 capas a un mínimo del 5,5%.

Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp2	Error variable 0 exp2
82.33%	44.82%	53.58%	11.34%
9.35%	2.84%	6.03%	2.68%

Tabla 53- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (V)

Error variable 0 exp 2,1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 2,1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 2,1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 0 exp 2,1 200 repeticiones 6 capas
98,70%	47.6%	57.3%	54.5%
30,70%	7.7%	12.6%	5.5%

Tabla 54- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VI)

- Error variable 1: Por otra parte, en el experimento 2, los errores tienen máximos mucho menores, de en torno a 20%, mientras que los mínimos son prácticamente despreciables, aproximadamente iguales o menores a 1%. Estos valores difieren enormemente a los obtenidos, para las mismas pruebas, para el experimento 2.1. En esta ocasión, se alcanzan máximos mayores que los del error de la variable 0 (233,2%) a la vez que se obtienen mínimos menores (1,8%), casi despreciables.

Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp 2	Error variable 1 exp 2
19.79%	19.38%	19.85%	3.18%
0.59%	0.75%	1.13%	0.20%

Tabla 55- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VII)

Error variable 1 exp 2,1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 2,1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 2,1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 1 exp 2,1 200 repeticiones 6 capas
221,10%	233.2%	92.6%	169.1%
21,80%	3.1%	3.3%	1.8%

Tabla 56- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (VIII)

Por lo tanto, al igual que ocurre en el resto de los experimentos los resultados son satisfactorios para un número elevado de capas y de repeticiones, obteniéndose errores menores al 1% y, por tanto, despreciables.

### Comparación 3 y 3.1

- Precisión: En el experimento 3, la Precisión se mantiene constante en el 100%, sin variar al cambiar repeticiones, capas ni Neuronas empleadas. Por otra parte, en el

experimento 3.1 se obtienen valores inferiores. Aunque los máximos son cercanos al 100% (99,3% para 200 repeticiones y 3 y 6 capas), no lo alcanzan.

Precisión exp 3,1 20 repeticiones 3 capas	Precisión exp 3,1 200 repeticiones 3 capas	Precisión exp 3,1 20 repeticiones 6 capas	Precisión exp 3,1 200 repeticiones 6 capas
98,30%	99.3%	98.7%	99.3%
94,40%	96.4%	96.0%	97.7%

Tabla 57-Comparación de las precisiones de los diferentes experimentos del amoniaco

- Error en la variable 0: En el caso del experimento 3, el error tiene un máximo de 35,7% y un mínimo de 3,5%. Por otra parte, el experimento 3.1 obtiene un máximo de 116% y un mínimo de 5,7% para 200 repeticiones y 6 capas. Como se puede observar, al igual que ocurría en la precisión, los valores obtenidos en el experimento 3 obtienen un menor error.

Error variable 0 exp 3 20 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 3 200 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 3 20 repeticiones 6 capas	Error variable 0 exp 3 200 repeticiones 6 capas
35,7%	18,4%	17,9%	13,8%
7,5%	3,5%	6,7%	6,4%

Tabla 58- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (IX)

Error variable 0 exp 3,1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 3,1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 0 exp 3,1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 0 exp 3,1 200 repeticiones 6 capas
116,90%	56.0%	70.7%	51.0%
37,40%	8.1%	10.1%	5.7%

Tabla 59- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (X)

- Error de la variable 1: Comparando el error en la variable 1, obtenemos resultados mejores que los obtenidos en la variable 0, con menos error. En el caso del experimento 3, el error obtenido tiene un máximo del 8,7% para 20 repeticiones y 3 capas y un mínimo de 1,1% . Por otra parte, para el experimento 3.1 se obtienen errores significativamente mayores, con un máximo del 216% para 200 repeticiones y 3 capas y un mínimo del 2,2% para 200 repeticiones y 6 capas. Aunque el menor mínimo es similar al obtenido en el experimento 3, de forma general, los errores obtenidos para el experimento 3 son menores que los obtenidos en el 3.1.

Error variable 1 exp3 20 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp3 200 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp3 20 repeticiones 6 capas	Error variable 1 exp3 200 repeticiones 6 capas
8,7%	4,9%	4,1%	3,8%
2,5%	1,1%	2,4%	1,8%

Tabla 60- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (XI)

Error variable 1 exp 3,1 20 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 3,1 200 repeticiones 3 capas	Error variable 1 exp 3,1 20 repeticiones 6 capas	Error variable 1 exp 3,1 200 repeticiones 6 capas
64,50%	216.1%	199.5%	168.2%
22,00%	3.8%	6.2%	2.2%

Tabla 61- Comparación de errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos del amoniaco (XII)

Por lo tanto, podemos concluir al comparar ambos experimentos que los resultados obtenidos en el experimento 3 son más satisfactorios que los obtenidos en el experimento 3,1, trabajando mejor el programa para 2 variables que para 4 en todas las combinaciones realizadas de repeticiones, neuronas y capas para los dos errores calculados.

En esta ocasión, analizando la totalidad de los experimentos se puede concluir que, si bien los resultados obtenidos sin la variación de las composiciones son más satisfactorios que los obtenidos con las variaciones, los resultados son buenos. También es necesario considerar que, al aumentar el número de neuronas y el número de capas, la precisión y el error cometido es menor.





### 5.3. Conclusiones experimentación biomasa

A pesar de que los datos fueron obtenidos empleando redes neuronales, los errores obtenidos al procesar la red neuronal los datos son elevados, con un máximo del 779.67% para la variable 4 (energía almacenada en el biocrudo) y un mínimo del 25.25% obtenida para la variable 1 (ratio oxígeno carbono).

	Var 1	Var 2	Var 3	Var 4	Var 5	Var 6	Var 7	Var 8
Max	36.82%	164.85 %	62.86%	779.67 %	132.91 %	431.52 %	70.54%	561.26 %
Min	25.25%	80.93%	35.98%	77.62%	42.07%	69.96%	41.08%	105.12 %

Tabla 62- Comparación de los errores máximos y mínimos para los diferentes experimentos de la biomasa.

Además, es necesario tener en cuenta en la comparación la gran fluctuación obtenida al procesar los datos, hecho que, aunque no se producía en todas las variables, es necesario tener en cuenta. También es de relevancia que al aumentar el número de neuronas o de repeticiones, los datos no mejoraban disminuyendo sus errores ni estabilizándose, hecho que sí que ocurría en el resto de los experimentos.

Para comprobar este último hecho, se realizó unos experimentos extras aumentando el número de repeticiones del proceso y manteniendo el número de neuronas constante en su máximo, 1000, obteniéndose resultados muy similares a los obtenidos para menos repeticiones y neuronas.

En esta ocasión, los resultados obtenidos no son plenamente satisfactorios, por lo que intenté reagrupar los datos de manera que se pudieran evaluar cada biomasa por separado, esperando obtener mejores precisiones y menores errores. Debido a que no todos los experimentos tienen datos para todas las variables, no ha sido posible ya que la red neuronal no admite que se introduzcan casillas vacías para el análisis,

## 6. Bibliografía

Atria Innovación. (n.d.). Qué son las redes neuronales y sus funciones. Retrieved October 26, 2020, from 22-10-2019 website: <https://www.atriainnovation.com/que-son-las-redes-neuronales-y-sus-funciones/#:~:text=Las redes neuronales artificiales son,entrada hasta generar una salida.>

Bruno López Takeyas. (n.d.). No Title. Retrieved October 26, 2020, from Introducción a la Inteligencia Artificial website: <http://www.itnuevolaredo.edu.mx/takeyas/>

Consulting, C. (n.d.). Industria 4.0, la cuarta revolución industrial y la inteligencia operacional. Retrieved October 26, 2020, from 20 Abr 2020 website: <https://www.cic.es/industria-40-revolucion-industrial/>

Damián A. (n.d.). Spyder, un potente entorno de desarrollo interactivo para Python. Retrieved from 27-02-2013 website: <https://ubunlog.com/spyder-entorno-desarrollo-python/>

EcuRed. (n.d.). Principio de Le Chatelier. Retrieved from 05-05-2017 website: [https://www.ecured.cu/Principio\\_de\\_Le\\_Chatelier](https://www.ecured.cu/Principio_de_Le_Chatelier)

García Serna, J. (n.d.). Machine Learning y Deep Learning en Ingeniería Química.

González Duque, R. (2000). Python para todos. Web Book, (6), 108. Retrieved from <http://dspace.universia.net/handle/2024/919>

Ibertech. (n.d.). ¿Qué es Machine Learning y qué aplicaciones tiene en nuestro día a día? Retrieved October 26, 2020, from 22-03-2018 website: <https://www.ibertech.org/que-es-machine-learning-y-que-aplicaciones-tiene-en-nuestro-dia-a-dia-2/>

Marco, B. S. (n.d.). Valores aleatorios: la biblioteca random. Retrieved October 26, 2020, from 04-04-2019 website: <https://www.mclibre.org/consultar/python/lecciones/python-biblioteca-random.html>

Mato Chaín, F. (2017). Equilibrio entre Fases Equilibrios y Aplicaciones ( TQ 3 . 1 ). 1–5.

Mato Chaín, F. (2017). Modelo de Soluciones Ideales (TQ 3.2). 1–9.

Mato Chaín, F. (2017). Soluciones reales. 1–20.

Mónica González. (n.d.). Principio de Le Chatelier. Retrieved October 26, 2020, from 13-05-2010 website: <https://quimica.laguia2000.com/conceptos-basicos/principio-de-le-chatelier>

Nelli, F. (2018). Python data analytics: With Pandas, NumPy, and Matplotlib: Second edition. In Python Data Analytics: With Pandas, NumPy, and Matplotlib: Second Edition. <https://doi.org/10.1007/978-1-4842-3913-1>

Reacción APD. (n.d.). ¿Qué es Machine Learning y cómo funciona? Retrieved October 26, 2020, from <https://www.apd.es/que-es-machine-learning/#::~text=Machine Learning o Aprendizaje automático,de datos en su sistema>

Sebastián Giraldo A. (n.d.). Ecuaciones de Estado. Retrieved October 26, 2020, from 03-05-2005 website: [http://ambiente.usach.cl/jromero/imagenes/Lista\\_Ecuaciones\\_de\\_Estado.pdf](http://ambiente.usach.cl/jromero/imagenes/Lista_Ecuaciones_de_Estado.pdf)

Todos, P. P. (n.d.). Hablemos con Python.

Virginia Frías García. (n.d.). ¿Qué es Machine Learning y qué aplicaciones tiene en nuestro día a día? Retrieved October 26, 2020, from 19 de mayo 2016 website:

<http://www.intelygenz.es/que-es-machine-learning-y-que-aplicaciones-tiene-dia-a-dia/>

Wikipedia. (n.d.). Destilación flash. Retrieved October 26, 2020, from 04-08-2020 website:

[https://es.wikipedia.org/wiki/Destilación\\_flash](https://es.wikipedia.org/wiki/Destilación_flash)

Wikipedia. (n.d.). Industria 4.1. Retrieved October 26, 2020, from 15-10-2020 website:

[https://es.wikipedia.org/wiki/Industria\\_4.0](https://es.wikipedia.org/wiki/Industria_4.0)

Wikipedia. (n.d.). Keras. Retrieved October 26, 2020, from 20-05-2020 website:

<https://es.wikipedia.org/wiki/Keras>

Zaforas, M. (n.d.). Machine Learning, la forma de hacer Big Data inteligente. Retrieved October 26, 2020, from 18-04-2018 website:

<https://www.paradigmadigital.com/dev/machine-learning-la-forma-big-data-inteligente/>