



*Predicción del comportamiento termogravimétrico de la energía de activación de los residuos cáscara de papa (solanum tuberosum)*

*Prediction of the thermogravimetric behavior of the activation energy of potato peel waste (solanum tuberosum)*

*Previsão do comportamento termogravimétrico da energia de ativação da batata (solanum tuberosum) descasca os resíduos*

Michel Abigail Jara Romero <sup>I</sup>  
[michel.jara@esPOCH.edu.ec](mailto:michel.jara@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0003-2704-441X>

Luis Santiago Carrera Almendáriz <sup>II</sup>  
[luissantiago.carrera@esPOCH.edu.ec](mailto:luissantiago.carrera@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0002-3262-5895>

Marlene Jacqueline García Veloz <sup>III</sup>  
[marlene.garcía@esPOCH.edu.ec](mailto:marlene.garcía@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0002-9996-1594>

Ana Gabriela Flores Huilcapi <sup>IV</sup>  
[gabrielafloresingquimica@gmail.com](mailto:gabrielafloresingquimica@gmail.com)  
<https://orcid.org/0000-0001-8748-7859>

**Correspondencia:** [michel.jara@esPOCH.edu.ec](mailto:michel.jara@esPOCH.edu.ec)

Ciencias Técnicas y Aplicadas  
Artículo de Investigación

\* **Recibido:** 23 de junio de 2022 \* **Aceptado:** 12 de julio de 2022 \* **Publicado:** 09 de agosto de 2022

- I. Ingeniera Química, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Riobamba, Ecuador.
- II. Ingeniero Químico, Máster en Química, Magíster en Calidad y Productividad, Facultad de Ciencias, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Riobamba, Ecuador.
- III. Ingeniera en Empresas, Magíster en Auditoría Integral, Facultad de Ciencias, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Riobamba, Ecuador.
- IV. Ingeniera Química, Máster en Química, Magíster en Gestión Ambiental, investigadora independiente, Riobamba, Ecuador.



## Resumen

El uso de combustibles fósiles genera un impacto negativo en el medio ambiente. Por lo que se ha impulsado la investigación del aporte energético de los residuos agroindustriales, pues en el Ecuador el consumo anual de papa por persona está en 30 kg. El comportamiento térmico de materiales como la cáscara de papa se determina por termogravimetría. Esta investigación desarrolló una red neuronal artificial capaz de predecir el comportamiento termogravimétrico de la energía de activación en los residuos de cáscara de papa (*Solanum tuberosum*). Se utilizaron datos experimentales del análisis termogravimétrico de la cáscara de papa y cálculos mediante modelos cinéticos propuestos, estableciendo una base de 100 datos en el modelo de predicción. El desarrollo de la red se llevó a cabo en el software Matlab con tres variables de entrada correspondientes al tiempo, temperatura y peso. Se desarrollaron 375 neuronas en la capa oculta de acuerdo con el coeficiente de correlación de Pearson de 1 y error cuadrático medio de  $2,327E-09$  que evidenciaron como mejor algoritmo de entrenamiento el de regularización bayesiana; por último, se empleó una variable de salida correspondiente a la energía de activación calculada por el método cinético de Flynn Wall Ozawa, validando de esta manera al modelo de predicción con un valor del 95% de confianza. La información de la energía de activación real obtenidos por termogravimetría y predicha por la red neuronal artificial muestran estadísticamente que no existe una diferencia significativa, de tal manera que el método de predicción de redes neuronales artificiales desarrollado resulta muy efectivo para la predicción de la energía de activación de los residuos de cáscara de papa.

**Palabras Clave:** Cáscara de papa; Análisis termogravimétrico; Redes neuronales artificiales; Modelos Cinéticos; Energía de activación; Matlab.

## Abstract

The use of fossil fuels generates a negative impact on the environment. For this reason, research on the energy contribution of agro-industrial residues has been promoted, since in Ecuador the annual consumption of potatoes per person is 30 kg. The thermal behavior of materials such as potato skins is determined by thermogravimetry. This research developed an artificial neural network capable of predicting the thermogravimetric behavior of activation energy in potato peel residues (*Solanum tuberosum*). Experimental data from thermogravimetric analysis of potato peel

and calculations using proposed kinetic models were used, establishing a base of 100 data in the prediction model. The development of the network was carried out in Matlab software with three input variables corresponding to time, temperature and weight. 375 neurons were developed in the hidden layer according to a Pearson correlation coefficient of 1 and a mean square error of  $2.327E-09$ , which showed the Bayesian regularization as the best training algorithm; Finally, an output variable corresponding to the activation energy calculated by the Flynn Wall Ozawa kinetic method was used, thus validating the prediction model with a 95% confidence value. The information of the real activation energy obtained by thermogravimetry and predicted by the artificial neural network show statistically that there is no significant difference, in such a way that the artificial neural network prediction method developed is very effective for the prediction of the activation energy. activation of potato peel residues.

**Keywords:** potato skin; thermogravimetric analysis; Artificial neural networks; Kinetic Models; Activation energy; matlab.

## Resumo

O uso de combustíveis fósseis gera um impacto negativo no meio ambiente. Por isso, tem sido promovida a pesquisa sobre a contribuição energética dos resíduos agroindustriais, já que no Equador o consumo anual de batatas por pessoa é de 30 kg. O comportamento térmico de materiais como cascas de batata é determinado por termogravimetria. Esta pesquisa desenvolveu uma rede neural artificial capaz de prever o comportamento termogravimétrico da energia de ativação em resíduos de casca de batata (*Solanum tuberosum*). Foram utilizados dados experimentais da análise termogravimétrica da casca de batata e cálculos utilizando os modelos cinéticos propostos, estabelecendo uma base de 100 dados no modelo de predição. O desenvolvimento da rede foi realizado no software Matlab com três variáveis de entrada correspondentes a tempo, temperatura e peso. 375 neurônios foram desenvolvidos na camada oculta de acordo com um coeficiente de correlação de Pearson de 1 e um erro quadrático médio de  $2,327E-09$ , que mostrou a regularização Bayesiana como o melhor algoritmo de treinamento; Por fim, foi utilizada uma variável de saída correspondente à energia de ativação calculada pelo método cinético Flynn Wall Ozawa, validando assim o modelo de predição com um valor de confiança de 95%. As informações da energia de ativação real obtida pela termogravimetria e predita pela rede neural artificial mostram estatisticamente que não há diferença significativa, de modo que o método de predição da rede

neural artificial desenvolvido é muito eficaz para a predição da energia de ativação. de resíduos de casca de batata.

**Palavras-chave:** casca de batata; análise termogravimétrica; Redes neurais artificiais; Modelos Cinéticos; Energia de ativação; matlab.

## Introducción

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

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

El análisis termogravimétrico (TGA) se ha convertido en un procedimiento de mucho interés al momento de analizar el comportamiento térmico de diferentes materiales en este caso de los residuos de cáscara de la papa, proporcionando información importante para el análisis cinético como es la pérdida de masa de la biomasa en cuestión con respecto a diferentes intervalos de tiempo y temperatura resultando de gran importancia ya que estos permiten calcular variables dentro del proceso de degradación térmica como es la energía de activación, constante de reacción y orden de la misma, fundamentada en el uso de métodos o ecuaciones iso convencionales. (Finkelstein, 2015). (Córtes & Bridgwater, 2015) (PHOTOMETRICS, 2010) (Córtes & Bridgwater, 2015). (Chen N. , 2017)

Hoy en día, se están llevando a cabo varios métodos computacionales para la predicción de datos térmicos, reduciendo el número de procedimientos y análisis de laboratorio (Ozgue, 2018), por lo

que el uso de inteligencia artificial en este trabajo permite la predicción de la energía de activación a diferentes tasas de calentamiento.

Existen estudios sobre la aplicación de RNA en la predicción de datos térmicos, estos se han centrado principalmente en materiales que tienen rutas de descomposición más predecibles, como los polímeros y compuestos. Se ha determinado la cinética de reacción de diferentes materiales poliméricos mediante datos basados en el análisis TGA a varias velocidades de calentamiento (Conesa, 2004), como compuestos de carbono reforzado con fibra de carbono y en biomasa celulósica (CRFC) (Bezerra, Bento, Rocco, Lourenco, & Pardini, 2008). (Yildiz, 2016) (Chen H. , 2011). (Burgaz, 2014). (Ozgue, 2016) (Basu, 2018).

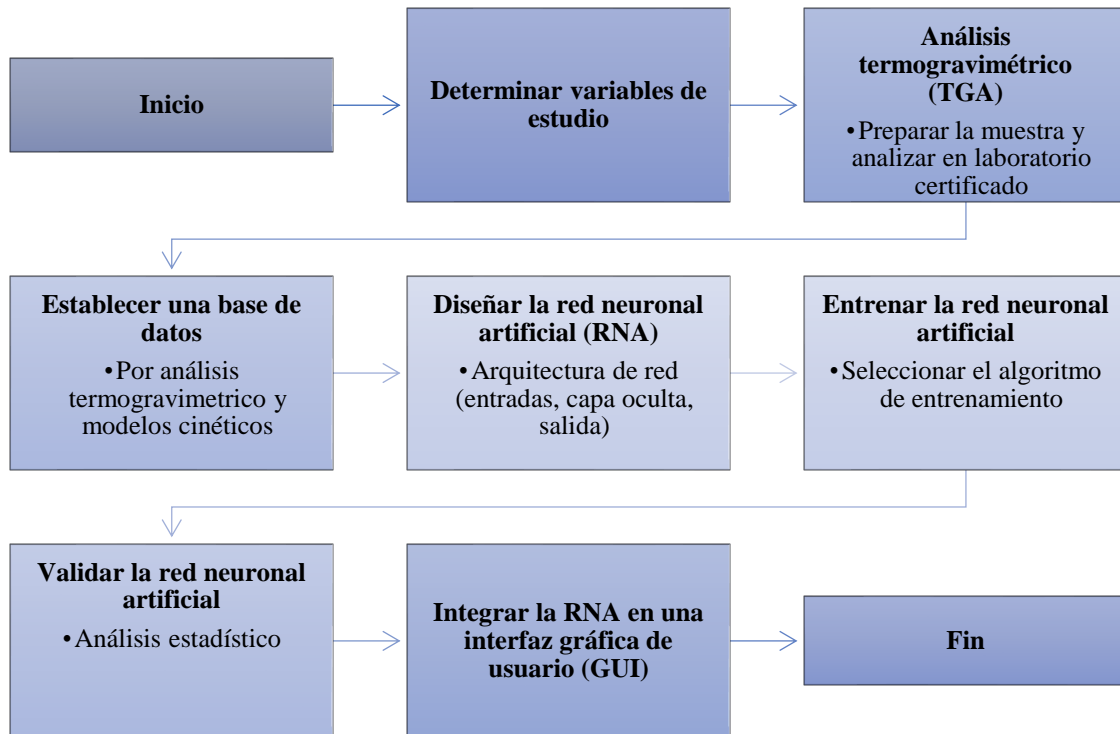
Las redes neuronales (RNA) se diseñan a partir de una serie de capas (entrada, oculta y salida) y cada capa comprende muchas "neuronas". Cada neurona acepta un valor de entrada de la capa anterior y lo asigna a una función no lineal. La salida de esta función se utiliza como entrada para la siguiente capa en la RNA, hasta llegar a la última capa, donde la salida corresponde al objetivo que se va a predecir. Además, un parámetro ajustable, el "peso" (o coeficiente) de cada función de la neurona se ajusta en el diseño de este modelo para minimizar el error del valor predicho, un proceso conocido como "entrenamiento" de la red neuronal. (Rosario, 2020) (Lecun, 2015) (Jaiswal, 2018).

El interés de los académicos en la idea de que el aprendizaje artificial y automático puede reemplazar a actividades del ser humano, para asumir roles en el lugar de trabajo y remodelar el proceso organizacional existente ha ido creciendo constantemente (Haefner, 2021). (Sunphorka, 2017). (Kumar & Selvarajo, 2015) (Gómez, 2019). (Rosario, 2020) (MATHWORKS, 2020).

## Metodología

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**<sup>1</sup> se describe mediante fases, la metodología empleada para su desarrollo.

Figura 1. Metodología del trabajo



Fuente: Jara, Michel, 2021

Es importante mencionar que las variables obtenidas por análisis termogravimétrico están sujetas a cálculos antes de reemplazar en los modelos cinéticos.

Tabla 1. Modelos cinéticos

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



Fuente: (Lecun, 2015)

Se estableció una base de datos en Microsoft Excel a partir de la información proporcionada por dos análisis termogravimétricos, donde el modelo de Flynn-Wall-Ozawa (FWO) presentó menor desviación en sus datos 12,98 y 12,62 en sus diferentes tasas de calentamiento 5°C/min y 15°C/min respectivamente.

Se diseñan las variables de entrada y salida de la red neuronal artificial:

**Tabla 2.** Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial

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

Fuente: Jara, Michel, 2021

Se importa la base de datos desde Microsoft Excel hacia el espacio de trabajo de Matlab. Se normalizan los datos para las entradas y salida con la finalidad de evitar la redundancia en los datos; lo que conlleva una mejora en el proceso de entrenamiento y predicción de la red, mediante siguiente ecuación:

$$V_N = \frac{V - V_{\min}}{V_{\max} - V_{\min}} \quad (1)$$

Con los datos normalizados, se utiliza la aplicación Neural Net Fitting (*nftool*) de la caja de herramientas de Matlab.

Las neuronas en la capa oculta se determinan en función del error cuadrático medio (MSE) y la correlación lineal (R) que presenta la red neuronal durante su entrenamiento. Para entrenar la red se establecen inicialmente 7 neuronas en la capa oculta y en base al MSE y la correlación (R) obtenido con esta cantidad de neuronas, se irá aumentando progresivamente el número de neuronas en la capa oculta. Se selecciona el número óptimo de neuronas en función del menor MSE y el R más cercano a 1.

En la Tabla 3, se presentan los diferentes ensayos realizados durante el entrenamiento de la red:



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

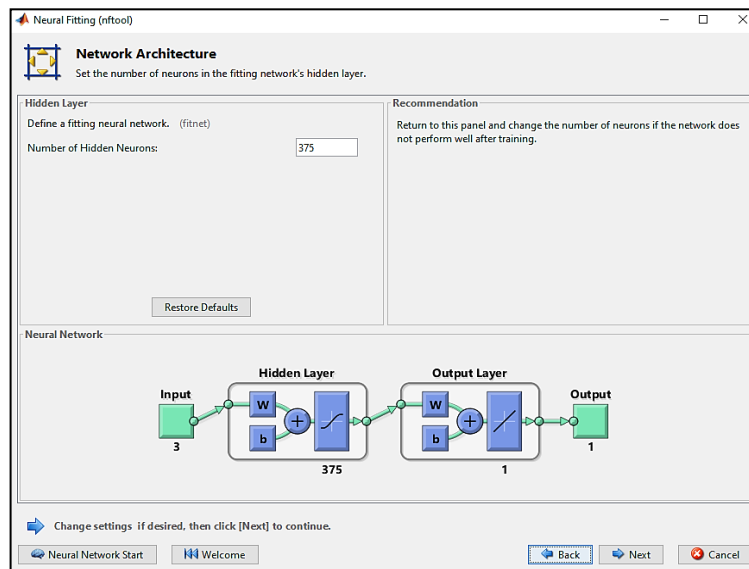
Topologías de red Entrada-N° neuronas- Salida-	Levenberg- Marquardt		Bayesian Regularization		Scaled Gradient	Conjugate
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
3-7-1	2,903E-02	0,68587	3,496E-06	0,57305	1,48E-04	0,76769
3-15-1	1,190E-05	0,77809	7,669E-03	0,76637	5,24E-03	0,66846
3-23-1	2,158E-04	0,76310	2,157E-04	0,77054	1,17E-04	0,77913
3-44-1	6,541E-10	0,92426	8,030E-03	0,77084	3,49E-04	0,77112
3-55-1	5,635E-02	0,74815	2,780E-03	0,75744	2,29E-02	0,58437
3-67-1	9,966E-05	0,84495	7,957E-03	0,76367	1,57E-03	0,40323
3-77-1	1,084E-03	0,76233	8,131E-03	0,76378	1,89E-03	0,70658
3-91-1	5,971E-04	0,72604	8,190E-03	0,76426	8,19E-04	0,74302
3-103-1	2,008E-04	0,75107	8,199E-03	0,76445	5,16E-03	0,66011
3-115-1	1,742E-02	0,93345	8,223E-03	0,76653	1,06E-02	0,24612
3-128-1	1,544E-02	0,94775	2,647E-03	0,76509	3,74E-03	0,54047
3-140-1	9,034E-04	0,79312	1,241E-09	0,52041	3,08E-02	0,56760
3-152-1	6,502E-04	0,59353	8,222E-03	0,76603	5,66E-03	0,70161
3-165-1	4,984E-02	0,74584	7,871E-03	0,77613	3,21E-02	0,60275
3-177-1	1,190E-04	0,89208	8,139E-03	0,76708	1,59E-03	0,73837
3-189-1	4,212E-04	0,83754	7,852E-03	0,77898	7,44E-03	0,70896
3-202-1	1,349E-04	0,92651	7,404E-03	0,77962	4,54E-03	0,70878
3-214-1	1,013E-01	0,67599	8,202E-03	0,76670	2,32E-02	0,52741
3-227-1	3,810E-04	0,60888	7,631E-03	0,78466	8,24E-04	0,76455
3-300-1	7,407E-02	0,69348	2,550E-03	0,79050	2,76E-03	0,67214
3-365-1	1,646E-03	0,82313	3,065E-08	0,99999	2,24E-03	0,53497
3-370-1	2,650E-04	0,82678	1,156E-09	0,99999	5,00E-03	0,72070
3-375-1	2,220E-03	0,83480	2,327E-09	1,00000	4,76E-03	0,32321

Fuente: Jara, Michel, 2021

De los ensayos presentados en la Tabla 3 se puede identificar que la mejor arquitectura de red (ver Figura 2) consta de los siguientes parámetros:

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

**Figura 2.** Arquitectura de la red neuronal artificial



**Fuente:** Jara, Michel, 2021

La Tabla 3, permite determinar la arquitectura de red y evidencia que el algoritmo de regularización bayesiana tiene la correlación lineal más cercana a 1 y menor error cuadrático medio que los algoritmos de Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient. En la validación de la red neuronal artificial, se comparan los resultados obtenidos por la red con los resultados obtenidos por análisis TGA y modelos cinéticos; empleando un nuevo conjunto de 10 datos. Esta validación permitirá evaluar el rendimiento de la red neuronal artificial mediante un análisis de la varianza (ANOVA).

**Tabla 4.** Ejemplo de tabla ANOVA

<b>Fuente</b>	<b>Suma de Cuadrados</b>	<b>Gl</b>	<b>Cuadrado Medio</b>	<b>Razón-F</b>	<b>Valor-P</b>
Entre grupos	0,00776574	1	0,00776574	0,000254299	0,686

Intra grupos	549,681	18	30,5378		
Total (Corr.)	549,689	19			

Fuente: Jara, Michel, 2021

## Resultados

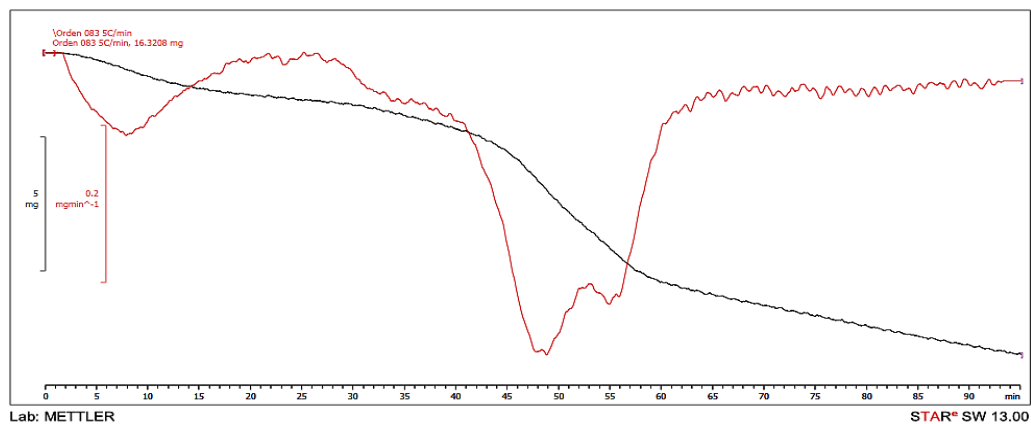
### Análisis termogravimétrico de la cáscara de papa experimental

Tabla 5. Especificaciones del ensayo

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

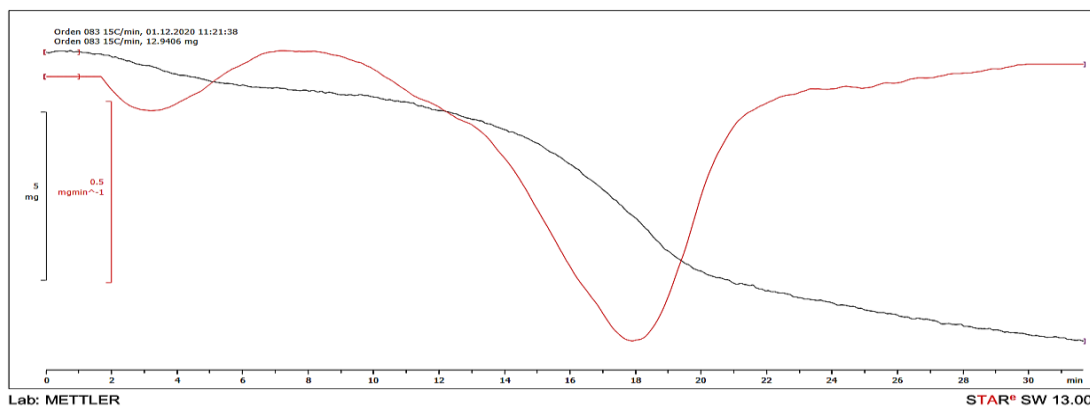
Fuente: Jara, Michel, 2021

Figura 3. Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 5°C/min



Fuente: Resultados laboratorio UCE, 2021

**Figura 4.** Termograma de la cáscara de papa con una tasa de calentamiento de 15°C/min



**Fuente:** Resultados laboratorio UCE, 2021

Empleando las ecuaciones presentadas en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.1** se calculó la energía de activación a partir de los datos TGA. Los resultados de la energía de activación por los métodos de Flynn-Wall-Ozawa (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose (KAS) y Friedman se describen en la Tabla 6. Es importante destacar que la energía de activación calculada por el método de Friedman obtuvo una desviación estándar de 49,87; el método de KAS de 14,22 y el método de FWO de 12,63. Por lo tanto, para diseñar la red neuronal artificial se emplearon los datos de la energía de activación calculada por el método de Flynn-Wall-Ozawa (FWO).

**Tabla 6.** Energía de activación calculada por diferentes métodos cinéticos

t [s]	T [K]	P [mg]	Ea(FWO)	Ea(KAS)	Ea(Friedman)
0	298,15	12,9641	0	0	0
20	303,15	12,9628	-99,9302	-102,5855	236,8342
40	308,15	12,9406	-59,3883	-59,8938	-319,5857
60	313,15	12,957	-42,8079	-42,4097	238,7520
80	318,15	12,9116	-33,7274	-32,8155	3,0171
100	323,15	12,8819	-27,9855	-26,7334	59,3394
120	328,15	12,8009	-24,0238	-22,5241	13,5254
140	333,15	12,7284	-21,1244	-19,4324	21,5061
160	338,15	12,6239	-18,9102	-17,0615	-3,2985
180	343,15	12,547	-17,1638	-15,1827	-10,3402

200	348,15	12,4823	-15,7509	-13,6548	8,3214
220	353,15	12,3655	-14,5844	-12,3860	-4,2151
240	358,15	12,2756	-13,6048	-11,3139	-16,7250
260	363,15	12,2265	-12,7706	-10,3948	-13,8657
280	368,15	12,1713	-12,0517	-9,5969	-3,6691
300	373,15	12,0805	-11,4256	-8,8967	-13,4948
320	378,15	12,0275	-10,8755	-8,2764	-19,3999
340	383,15	12,0013	-10,3884	-7,7224	-17,2266
360	388,15	11,9703	-9,9539	-7,2237	-7,7554
380	393,15	11,9038	-9,5641	-6,7721	-19,0547
400	398,15	11,8859	-9,2123	-6,3604	-22,4414
420	403,15	11,8848	-8,8932	-5,9832	-13,0576
440	408,15	11,8486	-8,6026	-5,6359	-10,4007
460	413,15	11,8035	-8,3367	-5,3145	-17,0628
480	418,15	11,7875	-8,0925	-5,0161	-15,4663
500	423,15	11,7671	-7,8674	-4,7378	-14,6301
520	428,15	11,7452	-7,6594	-4,4774	-1,9742
540	433,15	11,6731	-7,4665	-4,2329	-18,3065
560	438,15	11,6689	-7,2871	-4,0026	-18,0249
580	443,15	11,665	-7,1200	-3,7851	-3,8725
600	448,15	11,6054	-6,9637	-3,5792	-1,1273
620	453,15	11,5341	-6,8174	-3,3837	-7,3659
640	458,15	11,4888	-6,6801	-3,1977	-10,5710
660	463,15	11,4579	-6,5510	-3,0203	5,9471
680	468,15	11,356	-6,4294	-2,8508	-2,7138
700	473,15	11,2904	-6,3147	-2,6885	1,2667
720	478,15	11,206	-6,2062	-2,5329	-4,9878
740	483,15	11,1499	-6,1035	-2,3833	5,4308
760	488,15	11,0437	-6,0062	-2,2393	2,9688
780	493,15	10,9469	-5,9137	-2,1005	-3,1573

800	498,15	10,8796	-5,8259	-1,9665	7,5119
820	503,15	10,7564	-5,7423	-1,8370	5,2658
840	508,15	10,6416	-5,6626	-1,7116	4,3858
860	513,15	10,5289	-5,5866	-1,5900	8,4321
880	518,15	10,3903	-5,5140	-1,4721	10,2962
900	523,15	10,2361	-5,4446	-1,3575	20,0878
920	528,15	10,0143	-5,3781	-1,2460	11,3922
940	533,15	9,8384	-5,3145	-1,1375	17,6413
960	538,15	9,6126	-5,2535	-1,0318	18,3790
980	543,15	9,37029	-5,1950	-0,9286	17,7430

Fuente: Jara, Michel, 2021

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

Fuente: Jara, Michel, 2021

La Tabla 7 corresponde al conjunto de datos empleados para entrenar la red neuronal artificial y el conjunto de datos descritos en la Tabla 8 son los datos empleados en la validación de la red neuronal artificial.

**Tabla 7.** Base de datos de entrenamiento para diseñar la red neuronal artificial

<b>VARIABLES DE ENTRADA</b>			<b>VARIABLE DE SALIDA</b>
Tiempo (s)	Temperatura (K)	Peso(mg)	Ea (FWO)
0	298,15	12,9641	0
20	303,15	12,9628	99,9302
40	308,15	12,9406	59,3883
60	313,15	12,9570	42,8079
80	318,15	12,9116	33,7274
100	323,15	12,8819	27,9855
120	328,15	12,8009	24,0238

160	338,15	12,6239	18,9102
180	343,15	12,5470	17,1638
200	348,15	12,4823	15,7509
220	353,15	12,3655	14,5844
240	358,15	12,2756	13,6048
280	368,15	12,1713	12,0517
300	373,15	12,0805	11,4256
320	378,15	12,0275	10,8755
340	383,15	12,0013	10,3884
360	388,15	11,9703	9,9539
380	393,15	11,9038	9,5641
400	398,15	11,8859	9,2123
420	403,15	11,8848	8,8932
440	408,15	11,8486	8,6026
480	418,15	11,7875	8,0925
500	423,15	11,7671	7,8674
520	428,15	11,7452	7,6594
540	433,15	11,6731	7,4665
560	438,15	11,6689	7,2871
580	443,15	11,6650	7,1200
600	448,15	11,6054	6,9637
620	453,15	11,5341	6,8174
640	458,15	11,4888	6,6801
660	463,15	11,4579	6,5510
680	468,15	11,3560	6,4294
700	473,15	11,2904	6,3147
720	478,15	11,2060	6,2062
740	483,15	11,1499	6,1035
760	488,15	11,0437	6,0062
780	493,15	10,9469	5,9137



820	503,15	10,7564	5,7423
840	508,15	10,6416	5,6626
860	513,15	10,5289	5,5866
880	518,15	10,3903	5,5140
900	523,15	10,2361	5,4446
920	528,15	10,0143	5,3781
960	538,15	9,6126	5,2535
980	543,15	9,3703	5,1950

Fuente: Jara, Michel, 2021

**Tabla 8.** Base de datos para validar la red neuronal artificial

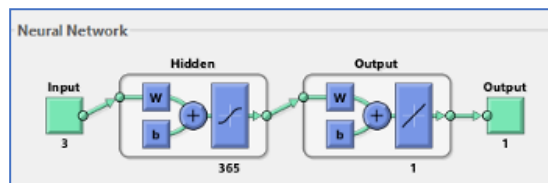
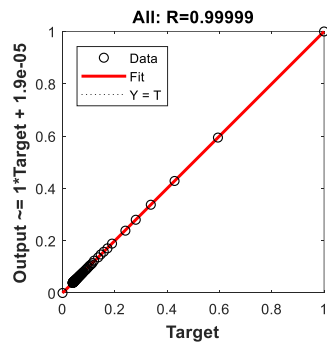
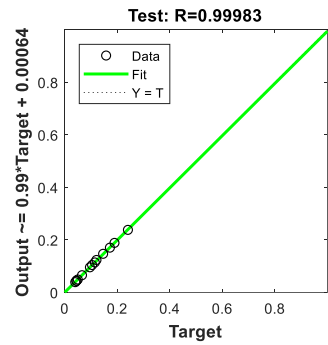
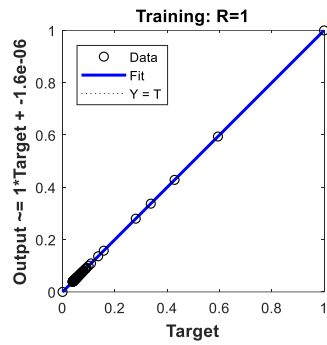
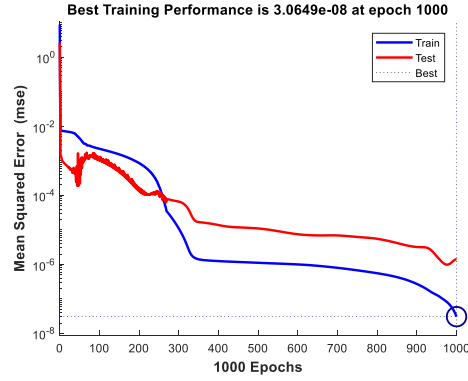
Variables de entrada			Variable de salida
Tiempo (s)	Temperatura (K)	Peso(mg)	Ea (FWO)
140	333,15	12,7284	21,1244
260	363,15	12,2265	12,7706
460	413,15	11,8035	8,3367
800	498,15	10,8796	5,8259
940	533,15	9,8384	5,3145

Fuente: Jara, Michel, 2021

Utilizando la ecuación para la Fuente: Jara, Michel, 2021

en Matlab, se normalizan tanto los datos de las variables de entrada y como los datos de salida de la red neuronal artificial.. Estimadores de rendimiento como la correlación lineal y el error cuadrático medio permiten determinar que una arquitectura de red que consta de 375 neuronas en la capa oculta es idónea para un correcto aprendizaje de la red y que permita predecir la energía de activación. Algunos de los resultados obtenidos luego de modificar el número de neuronas en la capa oculta se resumen en la Figura 5. Los datos predichos durante el entrenamiento de la red neuronal se presentan en la Tabla 9.

**Figura 5.** Entrenamiento de la red modificando la cantidad de neuronas en la capa oculta para 375 neuronas



Fuente: Jara, Michel, 2021

Tabla 9. Resultados predichos por la red neuronal artificial en el entrenamiento

<b>Energía de activación por el método de FWO</b>			
<b>Ea Real (TGA)</b>	<b>Ea Predicha (RNA)</b>	<b>Ea Real (TGA)</b>	<b>Ea Predicha (RNA)</b>
0	0,0001	5,4446	5,4427
99,9302	99,93	5,3781	5,3708
59,3883	59,3883	5,2535	5,2526
42,8079	42,8077	5,195	5,1972
33,7274	33,7265	5,1388	5,1392
27,9855	27,9913	5,0847	5,0827
24,0238	24,0128	5,0327	5,0322
18,9102	18,928	4,9827	4,9843
17,1638	17,1466	4,9345	4,9341
15,7509	15,7569	4,8881	4,8788
14,5844	14,5789	4,8432	4,8178
13,6048	13,6019	4,7582	4,7515
12,0517	12,0529	4,7178	4,7166
11,4256	11,4305	4,6788	4,6794
10,8755	10,8752	4,641	4,6402
10,3884	10,3812	4,6045	4,6073
9,9539	9,9581	4,5691	4,5696
9,5641	9,5637	4,5348	4,5357
9,2123	9,2179	4,5015	4,5002
8,8932	8,9223	4,4692	4,4668
8,6026	8,616	4,4379	4,4357
8,0925	8,0881	4,4075	4,4071
7,8674	7,8672	4,3494	4,3529
7,6594	7,6628	4,3215	4,3233
7,4665	7,4638	4,2944	4,2963
7,2871	7,2902	4,268	4,268

7,12	7,1197	4,2423	4,2365
6,9637	6,9623	4,2174	4,2198
6,8174	6,8199	4,193	4,1933
6,6801	6,6794	4,1462	4,1416
6,551	6,5476	4,1237	4,1226
6,4294	6,43	4,1018	4,1029
6,3147	6,3148	4,0803	4,0867
6,2062	6,2065	4,0594	4,076
6,1035	6,1074	4,039	4,0462
6,0062	6,0056	4,0191	4,0213
5,9137	5,911	3,9997	4,0022
5,7423	5,7421	3,9807	3,9664
5,6626	5,6612	3,944	3,9602
5,5866	5,5895	3,9262	3,9232
5,514	5,5145	3,9089	3,9041

Fuente: Jara, Michel, 2021

Empleado los datos de validación descritos en la Tabla 8, se realiza un nuevo código con la finalidad de validar la red neuronal y evaluar la predicción de la energía de activación de los residuos de cáscara de papa en función del aprendizaje de la red neuronal artificial durante su entrenamiento. Los datos predichos en la validación de la red neuronal artificial se observan en Tabla 10.

**Tabla 10.** Resultados predichos por la red en la validación

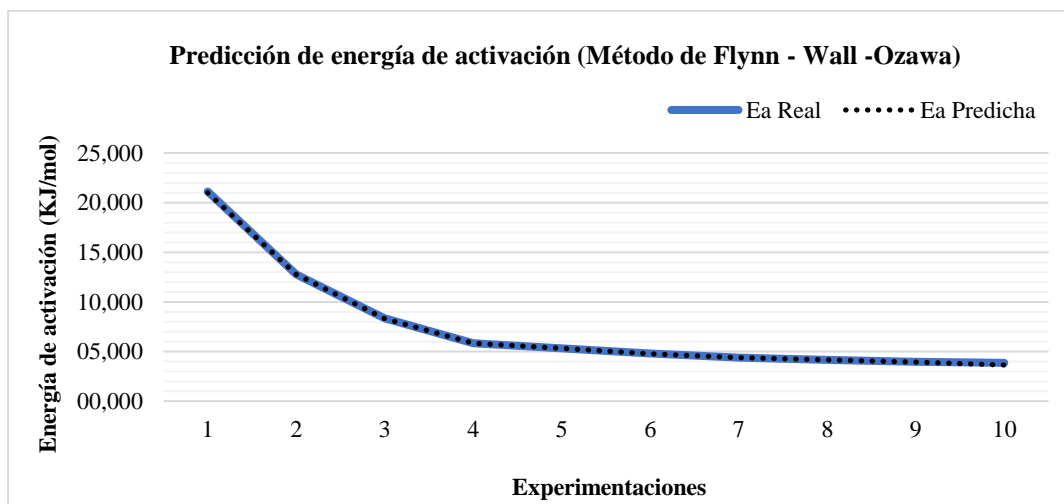
<b>Energía de activación por el método de FWO</b>		
<b>Ea Real (TGA)</b>	<b>Ea Predicha (RNA)</b>	<b>Error de predicción (%)</b>
21,1244	20,9977	0,5999
12,7706	12,7793	0,0679
8,3367	8,3266	0,1213
5,8259	5,8349	0,1543

5,3145	5,3095	0,0949
4,8000	4,7812	0,3914
4,3780	4,3794	0,0311
4,1693	4,1653	0,0957
3,9621	3,9322	0,7538
3,8591	3,6404	5,6662

Fuente: Jara, Michel, 2021

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

Figura 6. Energía de activación real y predicha por la red neuronal artificial



Fuente: Jara, Michel, 2021

a) Análisis de la varianza ANOVA

Tabla 11. Análisis de Medias para la energía de activación real y predicha

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

Fuente: Jara, Michel, 2021

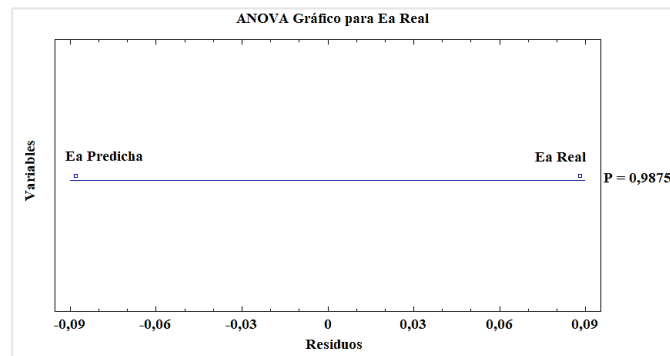
Tabla 12. Análisis ANOVA para la energía de activación real y predicha

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

Fuente: Jara, Michel, 2021

En la Figura 15 puede igualmente observarse el valor P de la tabla ANOVA y los intervalos de las medias, pueden apreciarse en el **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.6**. En la prueba de rangos múltiples, estos intervalos se usan para determinar cuáles medias son significativamente diferentes de otras.

Figura 15. Gráfico ANOVA para la energía de activación



Fuente: Jara, Michel, 2021

b) Prueba de rangos múltiples

Tabla 13. Prueba de rangos múltiples para la energía de activación real y predicha

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

Fuente: Jara, Michel, 2021

El método empleado para discriminar entre las medias es el procedimiento de diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. La **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.11** describe las medias de los datos reales y predichos de la energía de activación, mientras que la **¡Error! No**

**se encuentra el origen de la referencia.** 12 describen un valor-P mayor a 0,05; por tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y los predichos por la red neuronal para la energía de activación con un 95,0% de confianza. Adicionalmente, mediante la prueba de rangos múltiples presentada en la Tabla 13, se observa que los datos de la energía de activación real y predicha presentan una media homogénea.

De acuerdo a los resultados de la energía de activación calculada por el método de Friedman obtuvo una desviación estándar de 49,87; el método de KAS de 14,22 y el método de FWO de 12,63. Por lo tanto, para diseñar la red neuronal artificial se emplearon los datos de la energía de activación calculada por el método de Flynn-Wall-Ozawa (FWO), además que los resultados predichos por la red neuronal para la energía de activación se compararon estadísticamente con los resultados calculados por el modelo cinético de Flynn-Wall-Ozawa (FWO); un valor P mayor a 0,05 demuestra que no existe diferencias significativas entre la media de los datos experimentales y los predichos por la red; adicionalmente, la prueba de rangos múltiples identifica como grupos homogéneos a la energía de activación real y predicha.

Entonces, de acuerdo con el modelo de Flynn-Wall-Ozawa (FWO), este presentó menor desviación en sus datos 12,98 y 12,62 en sus diferentes tasas de calentamiento 5°C/min y 15°C/min respectivamente, donde este análisis permitió conseguir la base de datos de energía de activación como salidas de la red propuesta.

## Conclusiones

- El modelo de predicción se basa en una red neuronal prealimentada (Feedforward Neural Networks) de aprendizaje supervisado que emplea datos experimentales del análisis termogravimétrico y cinético realizado en los residuos de cáscara de papa (*Solanum tuberosum*) para calcular la energía de activación.
- La base de datos se elaboró primordialmente con los resultados TGA de la variación del peso de la muestra en función del tiempo y temperatura seleccionando la tasa de calentamiento de 15 °C/min en atmósfera inerte con inyección de N<sub>2</sub> a 20 mL/min; debido a que el termograma no presenta una diferencia significativa con la tasa de calentamiento de 5°C/min, además proporciona mayor cantidad de datos para luego calcular la energía de activación mediante modelos cinéticos establecidos por Flynn-Wall-Ozawa (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose



(KAS) y Friedman, sin embargo, el método FWO con  $\sigma = 12,623$ ; es el método con menor desviación estándar y por ende el mejor modelo cinético para calcular la energía de activación en los residuos de cáscara de papa.

- La red neuronal artificial se diseñó en el software Matlab y está conformada por 3 neuronas de entrada correspondiente a tiempo, temperatura y peso de la muestra de cáscara de papa en el TGA, 375 neuronas en la capa oculta y 1 neurona de salida que corresponde a la energía de activación predicha; además, la red se entrenó con el algoritmo de regularización bayesiana obteniendo un coeficiente de correlación de 1 y error cuadrático medio de  $2,327E-09$ .

Los resultados predichos por la red neuronal para la energía de activación se compararon estadísticamente con los resultados calculados por el modelo cinético de Flynn-Wall-Ozawa (FWO); un valor P mayor a 0,05 demuestra que no existe diferencias significativas entre la media de los datos experimentales y los predichos por la red; adicionalmente, la prueba de rangos múltiples identifica como grupos homogéneos a la energía de activación real y predicha.

## Referencias

1. Basu, P. (2018). Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction. Elsevier Inc, 497-499.
2. Bezerra, E. M., Bento, M. S., Rocco, J. A., Lourenco, K. I., & Pardini, L. C. (2008). Artificial neural network (ANN) prediction of kinetic parameters of (CRFC) composites. Computational Materials Science, 656-663. Recuperado el 11 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.commat.2008.05.002>
3. Burgaz, E. (2014). Prediction of thermal stability, crystallinity and thermomechanical properties of poly(ethylene oxide)/clay nanocomposites with artificial neural networks. Thermochemica Acta, 159-166. Recuperado el 11 de Enero de 2021, de <http://dx.doi.org/10.1016/j.tca.2013.10.032>
4. Chen, H. (2011). Experimental research on cellulosic biomass pyrolysis and BP neural network prediction. 2011 IEEE Power Engineering and Automation Conference, (págs. 26-29). doi:DOI 10.1109/PEAM.2011.6134787
5. Chen, N. (2017). Kinetics of coffee industrial residue pyrolysis using distributed activation energy model and components separation of bio-oil by sequencing temperature-raising

- pyrolysis". *Bioresource Technology*, 437-760. Recuperado el 12 de Noviembre de 2020, de <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.062>
6. Conesa, J. (2004). Artificial neural network for modelling thermal decompositions. *Analytical and Applied Pyrolysis*, 343-352. doi:S0165-2370(03)00093-7
  7. Córtes, A., & Bridgwater, A. (2015). Kinetic study of the pyrolysis of miscanthus and its acid hydrolysis residue by thermogravimetric analysis. *Fuel Processing Technology*, 184-193. doi:10.1016/j.fuproc.2015.05.013
  8. Finkelstein, D. (2015). A Beginner's Guide to Thermogravimetric Analysis. *Technometrics*, 522-522. Obtenido de <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1198/tech.2005.s328>
  9. Goh, G. (2017). Deep learning for computational chemistry. *Computational Chemistry*, 1291-1307. doi:10.1002/jcc.24764
  10. Gómez, A. (2019). Recuperado el 11 de Diciembre de 2020, de Arrhenius y el cálculo de la energía de activación: [https://www.feriadelasciencias.unam.mx/anteriores/feria23/feria105\\_04\\_arrhenius\\_y\\_el\\_calculo\\_de\\_la\\_energia\\_de\\_activacion.pdf](https://www.feriadelasciencias.unam.mx/anteriores/feria23/feria105_04_arrhenius_y_el_calculo_de_la_energia_de_activacion.pdf).
  11. Haefner, N. (2021). Artificial intelligence and innovation management: A review, framework. *Technological Forecasting and Social Change*, 162. Recuperado el 12 de Enero de 2021, de <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2020.120392>
  12. Jaiswal, P. (2018). Estudio comparativo de varios algoritmos de entrenamiento de redes neuronales artificiales. 1087-1191. doi:10.1109/ICACCCN.2018.8748660.
  13. Kumar, A., & Selvarajo, A. (2015). Feedforward neural network modeling of biomass pyrolysis process for biochar production. *Chemical Engineering Transactions*, 1681-1686. doi:0.3303/CET1545281
  14. Lecun, Y. (2015). Deep learning. *Nature*, 436-444. doi:10.1038/nature14539
  15. MAGAP. (2020). Recuperado el 10 de Noviembre de 2020, de Ministerio de Agricultura, Ganadería, Acuacultura y Pesca: <https://www.agricultura.gob.ec/ecuador-se-proyecta-a-ser-exportador-de-papa/>.
  16. MATHWORKS. (2020). Recuperado el 15 de Diciembre de 2020, de Redes Neuronales Artificiales: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html>.

17. Osman, A. (2020). Physicochemical Characterization and Kinetic Modeling concerning Combustion of Waste Berry Pomace. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 17573-17586. doi:10.1021/acssuschemeng.0c07390
18. Ozguc, C. (2016). A study to predict pyrolytic behaviors of refuse-derived fuel (RDF): Artificial neural network application". *Analytical and Applied Pyrolysis*, 84-94. doi:10.1016/j.jaap.2016.10.013
19. Ozguc, C. (2018). Activation energy prediction of biomass wastes based on different neural network topologies. doi:10.1016/j.fuel.2018.02.045
20. PHOTOMETRICS. (2010). Recuperado el 2021 de Enero de 2021, de Thermogravimetric Analysis (TGA): <https://photometrics.net/thermogravimetric-analysis-tga/>
21. Rosario, B. (2020). Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo. Ecuador.
22. Sunphorka, S. (2017). Application of artificial neural network for kinetic parameters prediction of biomass oxidation from biomass properties. *Energy Institute*, 51-61. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.joei.2015.10.007
23. Yildiz, Z. (2016). Application of artificial neural networks to co-combustion of hazelnut husk-lignite coal blends. *Bioresource Technology*, 42-47. doi:DOI 10.1016/j.biortech.2015.09.114