

**APLICACIÓN DE LAS REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA
PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE LA PERVAPORACIÓN DEL ETANOL EN
LA MEZCLA ETANOL-AGUA**

OSCAR JAVIER BELLO LEMUS

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2018

**APLICACIÓN DE LAS REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA
PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE LA PERVAPORACIÓN DEL ETANOL EN
LA MEZCLA ETANOL-AGUA**

OSCAR JAVIER BELLO LEMUS

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar por el título de
Ingeniero Químico.**

Director:

GIOVANNI MORALES MEDINA

Ingeniero Químico., Dr.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2018

CONTENIDO

	Pag.
INTRODUCCIÓN	15
1. MARCO TEÓRICO.....	8
1.1 PERVAPORACIÓN.....	8
1.2 REDES NEURONALES ARTIFICIALES.....	9
2. METODOLOGÍA.....	20
3. RESULTADOS.....	29
3.1 ANÁLISIS DE ESTADÍSTICA DESCRIPTIVA.....	29
3.2 ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES.....	31
3.3 ANÁLISIS DE K-MEANS.....	33
3.4 ENTRENAMIENTO DE LA RNA.....	36
3.4.1 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 1.....	37
3.4.2 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 2.....	39
3.4.3 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 3.....	41
3.4.4 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 4.....	43
3.5 DESEMPEÑO DE LA RNA.....	46
3.6 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES.....	47
3.6.1 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 1.....	47
3.6.2 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 2.....	49
3.6.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 3.....	50
3.6.4 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 4.....	51
3.7 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE NÚMERO DE CAPAS.....	51
4. CONCLUSIONES.....	54

5. RECOMENDACIONES	55
BIBLIOGRAFÍA	56
ANEXOS	58

LISTA DE TABLAS

	Pag.
Tabla 1: Resumen del análisis de estadística descriptiva.....	29
Tabla 2: Propiedades de los datos pertenecientes al grupo 1.....	33
Tabla 3: Propiedades de los datos pertenecientes al Grupo 2.	34
Tabla 4: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.....	35
Tabla 5: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.....	37
Tabla 6: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.....	39
Tabla 7: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.....	41
Tabla 8: Resultados obtenidos del entrenamiento de una RNA 3:10:1 TANSIG para las 4 bases de datos.....	44
Tabla 9: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 1.....	45
Tabla 10: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 2.....	47
Tabla 11: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 3.....	48
Tabla 12: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 4.....	49
Tabla 13: Resultados del análisis de número de capas.....	50

Tabla 14: Base de datos completa clasificada por tipo de membrana y artículo del cual se obtuvo la información.....	56
Tabla 15: Resultados de pruebas de entrenamiento para hallar la configuración de RNA para Cluster 1.....	61
Tabla 16: Resultados de pruebas de entrenamiento para hallar la configuración de RNA para el Cluster 2.....	62
Tabla 17: Resultados de pruebas de entrenamiento para hallar la configuración de RNA para el Cluster 3.....	63
Tabla 18: Resultados de pruebas de entrenamiento para hallar la configuración de RNA para el Cluster 4.....	64
Tabla 19: Resultados para una RNA de topología 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia.....	65

LISTA DE FIGURAS

	Pag.
Figura 1: Gradientes de concentración de una membrana de pervaporación.....	17
Figura 1: Muestra de una RNA Feed-Forward.....	19
Figura 3: Diagrama de flujo metodología.....	20
Figura 4 Interfaz principal de la herramienta nntool en MATLAB.....	24
Figura 2: Interfaz de creación de RNA en nntool.....	24
Figura 3: Esquema de la estructura de la RNA creada en nntool.....	25
Figura 4: Interfaz de entrenamiento de una RNA en nntool; Selección de datos de entrada y de salida.....	25
Figura 5: Interfaz de entrenamiento de una RNA en nntool; Definición de parámetros de entrenamiento.....	26
Figura 6: Consola de supervisión de entrenamiento de la RNA.....	26
Figura 7: Gráfica del desempeño de MSE en cada iteración.....	27
Figura 8: Gráfica de regresión lineal de los datos obtenidos del entrenamiento de la RNA.....	27
Figura 9: Gráficos de dispersión de Flux vs variables de entrada.....	29
Figura 10: Gráficos boxplot para las variables de entrada y salida.....	30
Figura 11: : Varianza de cada componente principal.....	32
Figura 12: Gráfica de Loadings para el análisis de componentes principales.....	32

Figura 13: Gráfica de Scores para el análisis de componentes principales.....	33
Figura 14: Gráfica de análisis de K-means para 2, 3 y 4 grupos.....	34
Figura 15: Flux vs variables de entrada autoescaladas diferenciando por color las agrupaciones obtenidas del análisis K-means.....	34
Figura 16: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.....	38
Figura 17: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.....	38
Figura 21: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.....	39
Figura 18: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.....	40
Figura 19: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.....	40
Figura 20: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.....	41
Figura 21: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.....	42
Figura 22: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.....	42
Figura 23: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.....	43
Figura 24: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.....	44

Figura 25: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.....	44
Figura 26: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.....	45
Figura 27: Comparativa del desempeño de una RNA 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia para las 4 bases de datos.....	46
Figura 28: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 1.....	48
Figura 29: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 2.....	49
Figura 30: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 3.....	50
Figura 31: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 4.....	51
Figura 32: Gráfica comparativa del análisis de número de capas para los los Clusters 1, 2, 3 y 4 para una RNA 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia.....	52
Figura 33: Gráfico de dispersión Flux vs Temperatura.....	60
Figura 34: Gráfico de dispersión Flux vs Concentración.....	60
Figura 35: Gráfico de dispersión Flux vs Factor de separación.....	61
Figura 36: Gráfico de dispersión Flux vs Presión.....	61

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
ANEXO A: Base de datos completa.....	58
ANEXO B: Gráficos de dispersión Flux vs T, C, Factor de Separación y P según el artículo del cual se extrajeron los datos.....	61
ANEXO C: Resultados entrenamiento y validación de las RNA.....	63

RESUMEN

TÍTULO: APLICACIÓN DE LAS REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE LA PERVAPORACIÓN DEL ETANOL EN LA MEZCLA ETANOL-AGUA. *

AUTOR: OSCAR JAVIER BELLO LEMUS. **

PALABRAS CLAVE: REDES NEURONALES ARTIFICIALES, PERVAPORACIÓN, SEPARACIÓN POR MEMBRANAS, MEZCLA ETANOL-AGUA, ANÁLISIS POR COMPONENTES PRINCIPALES.

DESCRIPCIÓN: Como alternativa a los combustibles fósiles, uno de los más investigados y producidos es el bioetanol. Este se obtiene de la fermentación de los azúcares presentes en biomasa e industrialmente, se purifica por medios energéticamente demandantes, lo que hacen al proceso inviable económicamente. Se buscan entonces alternativas de separación eficientes y amigables con el medio ambiente. Una de ellas es la pervaporación.

Como es sabido, es necesario obtener resultados preliminares antes de llevar a cabo pruebas experimentales, esto con el fin prever cuál será el comportamiento del fenómeno a estudiar. Las redes neuronales artificiales se han convertido en una herramienta eficiente a la hora de predecir modelos que presentan no linealidad, esto en parte al incremento del poder computacional en los últimos años. Estos sistemas son capaces de tomar un problema ya resuelto, aprender y entrenar de él para crear soluciones a un nuevo problema planteado.

En este trabajo se estudió el desempeño de las RNA como modelo de predicción para el flux de salida con ciertas condiciones de operación como variables de entrada usando la herramienta nntool disponible en el software MATLAB.

* Trabajo de grado.

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina, Dr. Ing. Química.

ABSTRACT

TITLE: APPLICATION OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS IN THE PREDICTION OF THE PERVAPORATION PERFORMANCE OF ETHANOL IN THE ETHANOL-WATER MIXTURE.

AUTHOR: OSCAR JAVIER BELLO LEMUS

KEY WORDS: ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS, PERVAPORATION, SEPARATION BY MEMBRANES, WATER-ETHANOL MIXTURE, PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS.

DESCRIPTION: As alternative to fossil fuels, one of the most researched and produced is bioethanol. This fuel is obtained from fermentation of sugar present on biomass, and, industrially, it's purified by high-energy consuming methods, which makes this process not profitable. Then, the research for other separation methods that are efficient and environmental friendly becomes necessary. One of them is pervaporation.

As it's known, it's necessary to obtain primary results before experimental tests take into place, the purpose of this is foresee how is the behavior of the phenomenon to be studied like. On the other hand, the artificial neuronal networks have become in an efficient tool at the prediction of non-linear models. This is in part due to the increase of computational power experienced in the last years. These systems are capable of taking an already solved problem, learn and train from it to create solutions to a new given problem.

In this research, the performance of the ANN as prediction model to the exit flux with some operation conditions as input variables was studied using the nntool available in compilation R2017a of MATLAB.

* Bachelor Thesis.

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina, Dr. Ing. Química.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas la producción de combustibles alternativos a los derivados de los fósiles se ha convertido en un objeto importante de investigación y desarrollo. Una razón para esto, radica en que el uso de los combustibles fósiles impacta el medio ambiente promoviendo el calentamiento global. Por su parte, los biocombustibles merman considerablemente el impacto dejado por los subproductos generados en la combustión, además de tener como materias primas elementos biodegradables y renovables (Fu *et al.*, 2015)

En la familia de los biocombustibles el más estudiado es el bioetanol. Este combustible es obtenido de la fermentación de los azúcares presentes en la biomasa (Saha *et al.*, 2017). Uno de los más grandes obstáculos en el proceso de fermentación es la inhibición microbiana causada por los alcoholes producidos. Este efecto causa bajo rendimiento en la fermentación, por lo cual se hacen necesarios procesos de separación energéticamente demandantes (Fu *et al.*, 2015; Nigiz *et al.*, 2012). Como alternativa la pervaporación del alcohol usando membranas corresponde a un método eficiente y amigable con el medio ambiente (Sun *et al.*, 2013).

Así como en cualquier proceso, es de alta importancia la aplicación de herramientas informáticas que hagan uso de modelos matemáticos para predecir comportamientos y que permitan hacer un seguimiento de las variables de proceso. De esta manera, puede obtenerse una idea de los resultados antes de efectuar el proceso experimentalmente. Para este fin, se cuenta con el desarrollo de regresiones a partir de datos experimentales. Sin embargo, este tipo de modelos matemáticos ven restringido su uso a las condiciones de operación enmarcados en los datos experimentales. Alternativamente las redes neuronales artificiales brindan una opción para el desarrollo de modelos de predicción que pueden ser aplicados en diferentes intervalos de operación. En este trabajo analiza el desempeño de las RNA como herramienta para predecir el comportamiento del flux de salida en la

separación por membranas para muestras de etanol-agua, teniendo como datos de entrada a la red las variables de temperatura a la entrada, concentración de agua en el flujo de entrada y la presión en el lado permeado de la membrana. También son considerados el efecto de estas variables de entrada en el factor de separación, definido como la relación entre las fracciones de agua y de etanol a la entrada y a la salida de la membrana.

Algunos estudios reportados han intentado predecir el comportamiento de la pervaporación (Tan *et al.*, 2012; Kubaczka *et al.*, 2018); El trabajo de Tan *et al.* consistió en modelar el proceso de preparación de una membrana PDMS en los que se usó Back Propagation Neuronal Networks (BPNN) para predecir los efectos de la preparación en el desempeño de la pervaporación. Kubaczka *et al.*, se enfocó en investigar si el cálculo de los fluxes de masa de fluidos de multicomponentes basados en el sistema de las ecuaciones generalizadas Maxwell-Stefan usando los coeficientes de difusión (M-S) se comportaban de manea acorde a los resultados experimentales. Sin embargo, no se encontró algún precedente que haya usado las RNA como modelo de predicción.

1. MARCO TEÓRICO

1.1 PERVAPORACIÓN

La pervaporación es un proceso en el que se difunde una mezcla de dos sustancias a través de una membrana selectiva y uno de los componentes se evapora a baja presión en el lado de la corriente de salida, para luego ser retirado mediante un condensador o una bomba de vacío. Las membranas compuestas se utilizan con la capa densa en contacto con el líquido y la capa porosa de soporte expuesta al vapor. El cambio de fase ocurre en la membrana, y el calor de vaporización es suministrado por el calor sensible del líquido conducido a través de la capa densa delgada. El flujo de cada componente es proporcional al gradiente de concentración y la difusividad en la capa densa. Sin embargo, el gradiente de concentración es con frecuencia no lineal debido a que la membrana se hincha a medida que absorbe el líquido, esto ocasiona que el coeficiente de difusión varíe hasta 100 veces más. Esta interacción dificulta el desarrollo de correlaciones para la permeabilidad y selectividad de la membrana (McCabe *et al.*, 2007; Geankopolis, 1998).

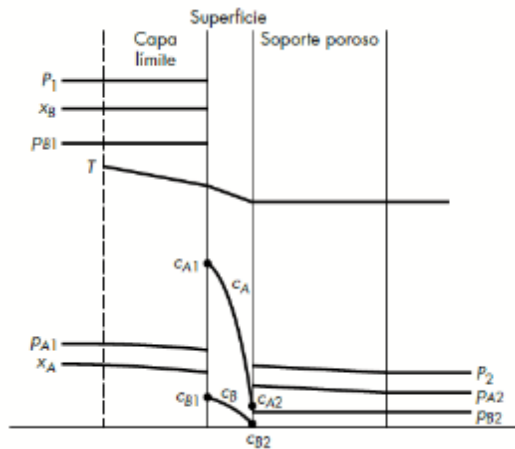


Figura 37: Gradientes de concentración de una membrana de pervaporación

1.2 REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Las redes neuronales artificiales (RNA) son sistemas que emulan el comportamiento del cerebro humano, imitando la manera de resolución de problemas. Así como el cerebro humano aplica el conocimiento adquirido a través de la experiencia y práctica, las RNA se sustentan básicamente en que pueden realizar el aprendizaje y la clasificación de patrones a través de la simulación de neuronas biológicas, es decir, toman problemas resueltos y a partir de ellos forman un sistema que toma decisiones y realizan sus propias clasificaciones para dar solución a un problema planteado (Hagan, Demuth, Beale, & Jesús, 2014).

Las RNA son herramientas ideales para casos en los que un modelo matemático no ofrece una solución completa o no es posible hallar un modelo matemático en situaciones que requieren un modelo matemático no lineal. Una RNA consta de un conjunto de elementos de procesamiento conectados entre sí y entre los que se envían información a través de conexiones. Los elementos básicos de una RNA son:

- Conjunto de unidades de procesamiento o neuronas de la red. Dichas neuronas pueden ser de entrada (encargadas de recibir y almacenar los datos empíricos), neuronas de capas ocultas (encargadas de procesar los datos de entrada) o de salida (encargadas de entregar la información obtenida por el sistema).
- Conexiones entre unidades asociadas a un peso o carga que multiplica la salida de determinada neurona y la envía hacia la Función de Activación o Transferencia para ser procesada.
- Funciones de Activación para cada unidad de procesamiento relaciones que establecen el efecto de los datos de entrada en la activación de la unidad de procesamiento (Ponce, 2010).
- El uso de funciones de activación permite crear relaciones no lineales entre las variables de entrada y las variables de salida.

El entrenamiento de la red se lleva a cabo mediante un proceso iterativo en el que se suministran datos de entrada y de salida y la red reasigna valores a los

parámetros de carga con el fin de hacer que los valores de salida coincidan con los datos suministrados. Hay que tener especial cuidado con sobreentrenar la RNA pues se puede presentar el efecto de overfitting, en el que el algoritmo de aprendizaje puede quedar ajustado a unas características muy específicas de los datos de entrenamiento que no tienen relación causal con la función objetivo, lo que puede causar que ante nuevos datos la RNA arroje resultados erróneos. Para reasignar dichos valores, se usa el algoritmo back-propagation. Este algoritmo es una generalización del procedimiento de mínimos cuadrados. Consiste en asignar valores de carga y aleatoriamente, propagar dichos valores hacia la capa de salida, calcular el error en ésta última capa y retropropagarlo hacia la capa oculta para reasignar un nuevo valor. Este proceso se repite hasta llegar a un error mínimo, conducido por un algoritmo de optimización como el Levenberg-Marquardt.

A continuación, se muestra una ilustración del esquema de la estructura de una red neuronal artificial Feed-Forward que fue la estructura usada en este trabajo.

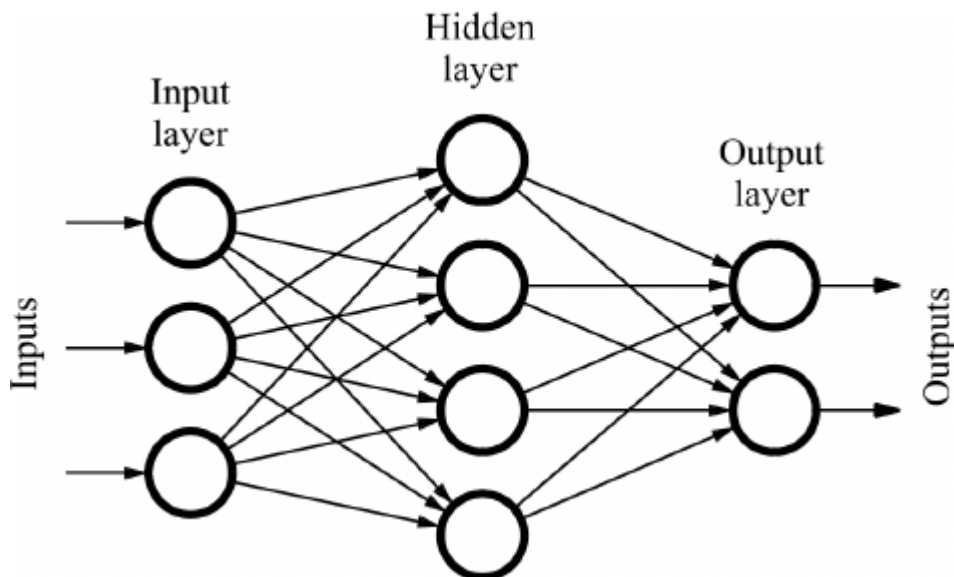


Figura 38: Muestra de una RNA Feed-Forward. (Quiza & Davim, 2018).

2. METODOLOGÍA

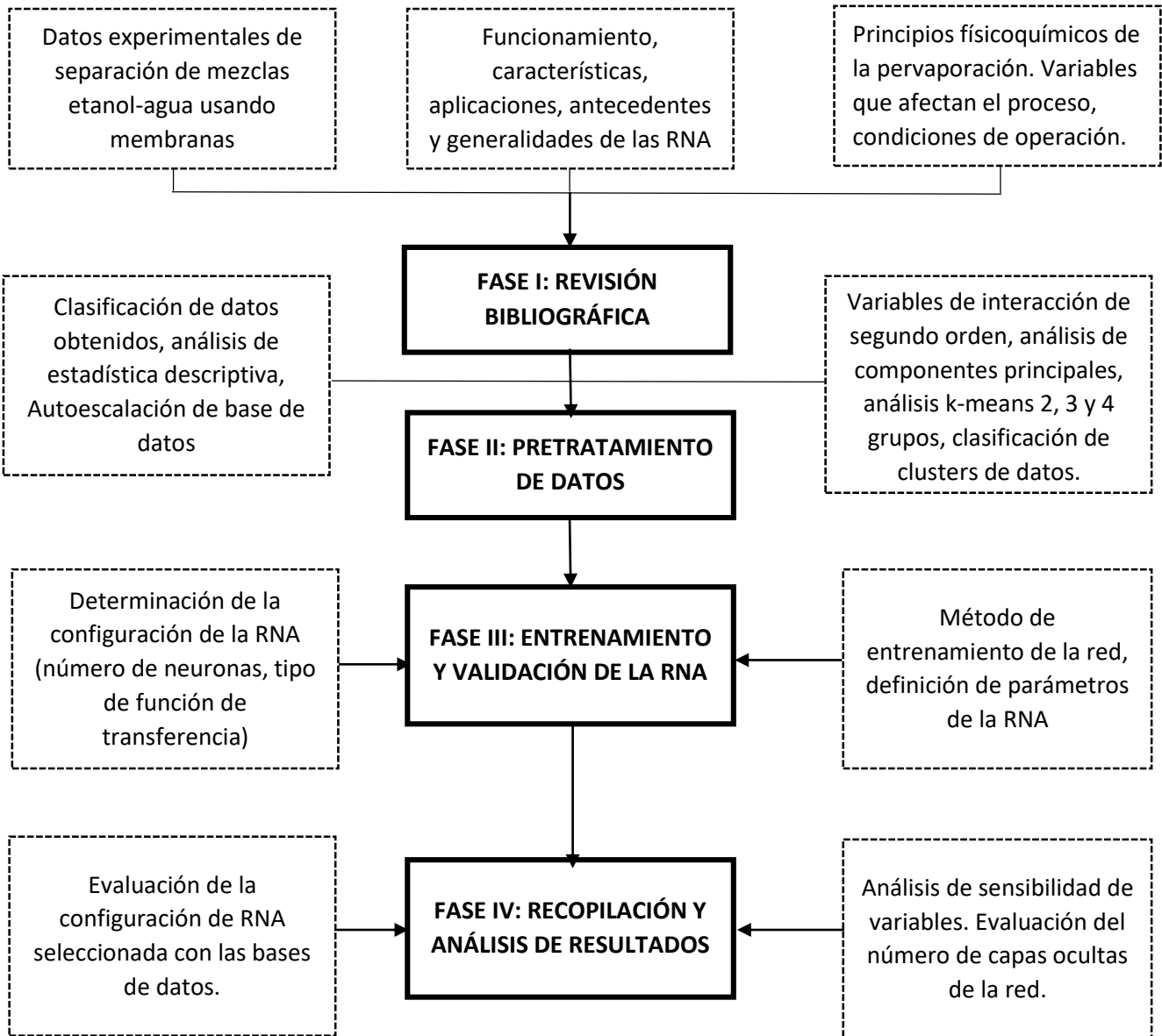


Figura 39: Diagrama de flujo metodología.

La primera fase consistió en recolectar datos experimentales de artículos científicos que tuvieran como objeto de estudio la separación de mezclas alcohol-agua usando la separación por membranas. Se recurrió a bases de datos en las que se reportaran investigaciones acerca del tema. Se hizo especial énfasis en aquellos artículos que presentaran los datos obtenidos experimentalmente, reportando las condiciones de operación.

Acto seguido, se clasificaron los datos teniendo en cuenta los siguientes factores: Artículo procedente, tipo de membrana usada en la investigación (Zeolita, PDMS) , Flux de salida obtenido medido en $\left[\frac{Kg}{m^2h}\right]$, Temperatura del flujo a la entrada medida en $[^{\circ}C]$, Concentración de agua en el flujo de entrada medida en $\left[\% \frac{V}{V}\right]$, Factor de separación (definido como $\frac{y_i/(1-y_i)}{x_i/(1-x_i)}$ en la que x_i y y_i se refieren a las fracciones másicas de etanol en la entrada y en el permeado, respectivamente) y presión en el lado de permeado medida en $[Pa]$. Una vez hecha la base de datos, se fijó como objetivo el flux de salida para la simulación y las demás variables se fijaron como variables de entrada al sistema. Se graficó el flux versus cada variable para observar de manera preliminar si existía alguna tendencia del flux con cada variable. Luego, se realizó un análisis de estadística descriptiva para cada grupo de datos. En este análisis información acerca del grupo de datos como la media, el rango, los valores mínimos y máximos, el factor de correlación de Pearson, fueron hallados. Dichos valores serían usados posteriormente para realizar la autoescalación de la base de datos. La autoescalación para cada grupo de datos se halló de la siguiente manera, como ejemplo para la temperatura:

$$T^* = \frac{T - \check{T}}{\sigma_T}$$

Donde:

T^* = Valor de temperatura autoescalado

T = Valor de temperatura reportado en $^{\circ}C$

\check{T} = Media del grupo de datos de Temperatura

σ_T = Desviación estándar del grupo de datos de Temperatura

Con este nuevo conjunto de datos autoescalados, se obtuvieron variables de interacción de segundo orden. A continuación, se listan dichas variables: T^{*2} , C^{*2} , SF^{*2} , P^{*2} , $T * C$, $T * SF$, $T * P$, $C * SF$, $C * P$ y $SF * P$. Con esta operación se obtuvieron 14 diferentes variables.

Dicha manipulación de datos se hizo necesaria dado que el siguiente paso era realizar un análisis de componentes principales. Este análisis tiene como fin transformar un conjunto de variables a un nuevo conjunto de variables no correlacionadas entre sí. Estas nuevas variables se denominan componentes principales y se ordenan dependiendo del grado de información o varianza que contengan. El nuevo conjunto de variables que se obtiene por el método de componentes principales es igual en número al de las variables originales. Este análisis se realiza cuando se tiene un gran conjunto de variables correlacionadas, para observar qué tipo de relación tienen entre sí y cuáles son las variables que más influyen en el fenómeno a estudiar. El análisis de componentes principales se llevó a cabo usando el software R en su versión 3.4.3.

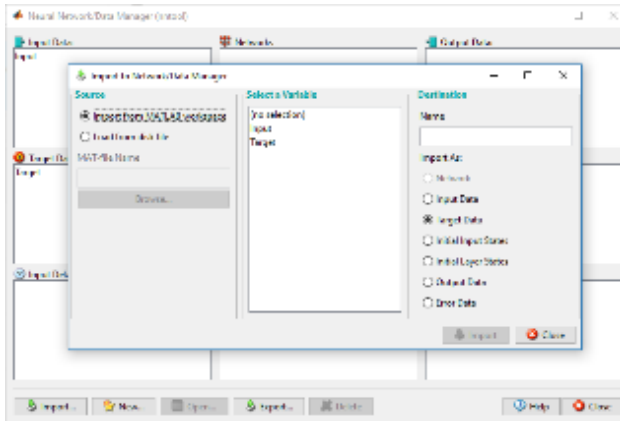
Realizando éste análisis fue posible recopilar información importante a partir de la base de datos con relación a los componentes principales, por ejemplo, se pudo encontrar la varianza que hay en cada componente principal, la influencia o el peso que tiene cada variable, y la distribución de toda la base de datos respecto a cada componente principal. Para decidir qué componentes principales usar, existen heurísticas que recomiendan usar los primeros dos o tres dado que en éstos son los que se encuentran la mayor parte de la varianza. Para este trabajo se decidió usar los primeros dos componentes principales que son los que representan el mayor porcentaje de varianza del análisis.

Teniendo la distribución de la base de datos respecto a los dos componentes principales se hace necesario realizar un análisis de cluster. Se optó por realizar un análisis de K-means para 2, 3 y 4 grupos usando el mismo software, R en su versión 3.4.3. Este análisis permite agrupar los datos en clusters que comparten características en común entre sí y de esta forma facilita encontrar qué factor o

variable hace que estos datos queden dentro del mismo grupo. El análisis de K-means, permitió que se pudieran identificar los datos correspondientes a cada cluster. De esta forma, se pudieron obtener diferentes bases de datos omitiendo completamente o parcialmente datos anómalos, o incluyendo todos los datos. Esta clasificación de los datos permitió que fuera posible crear diferentes bases de datos para el siguiente paso que sería la programación, entrenamiento y evaluación de las redes neuronales artificiales.

Para esta etapa, primero se realizó la normalización de datos usando el método de min-max en la que los datos resultantes tienen un rango de 0 a 1, esto con el fin de garantizar órdenes de magnitud similares para todas las variables. Con esta base de datos, se utilizó la herramienta "nntool" incluida en el software MATLAB en la compilación R2017a. El primer paso en esta evaluación fue encontrar la configuración de red que fuera capaz de emular con la mayor precisión la separación por membranas de la mezcla etanol agua. Dicho de otra forma, esta etapa consiste en hallar la configuración de red que al suministrarle los datos de entrada (Temperatura, Presión, Factor de Separación y Concentración) fuera capaz de arrojar resultados de salida (Flux) con la mayor precisión. El criterio para decidir qué configuración de red fue más precisa se basa en el valor de R Validation que se obtiene en la regresión hecha una vez se está entrenando la red. Los factores a tener en cuenta para la configuración de la red son el tipo de función de transferencia, el número de capas, y el número de neuronas de la red. Para este análisis se usaron tres tipos de función de transferencia, a saber: PURELIN, LOGSIG y TANSIG. Se usaron 2 capas y el número de neuronas de la red se varió de 2 a 10. Con cada configuración de red se realizaron 10 iteraciones de las cuales se obtuvo un valor promedio, esto con el fin de permitir a la red que pudiera converger lentamente a un resultado más preciso con cada iteración. A continuación, se muestra esquemáticamente cómo se realizó esta operación en la interfaz de MATLAB.

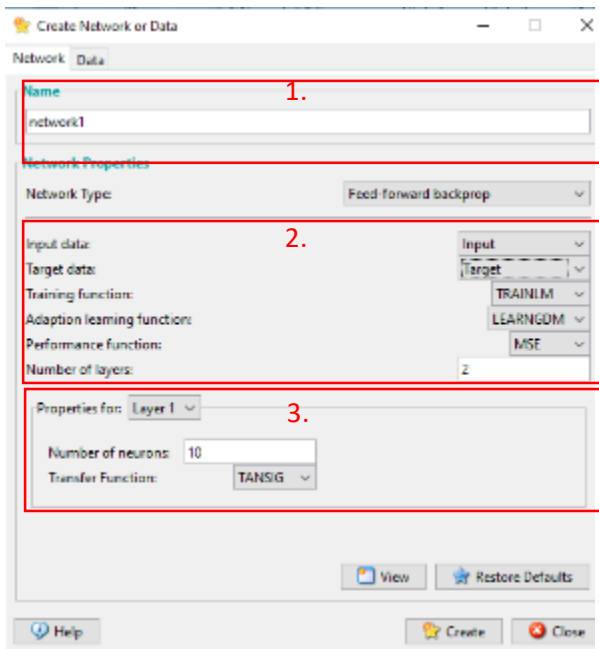
Una vez se definan las variables de entrada y de salida (Input y Output, respectivamente), se ejecuta el comando “nntool” en la caja de comandos de MATLAB. Aparece una ventana como la que se muestra.



Una vez aparezca la herramienta, se pueden importar los datos haciendo click en “Import” y definiendo los datos de entrada como Input y los de salida como Target.

Se cierra la ventana y luego se hace click en “New” para crear la RNA y definir los parámetros.

Figura 40 Interfaz principal de la herramienta nntool en MATLAB.



En la sección 1. de la ventana puede nombrarse la red.

En la sección 2, se muestran las propiedades de la RNA, en este caso, se definen los datos de entrada y de salida de la red, la función de entrenamiento, la función de aprendizaje, el parámetro a tener en cuenta para el desempeño de la red y el número de capas.

En la sección 3 se define el número de neuronas y la función de transferencia para cada capa.

Una vez definidos estos parámetros, se da click en “Create”

Figura 41: Interfaz de creación de RNA en nntool.

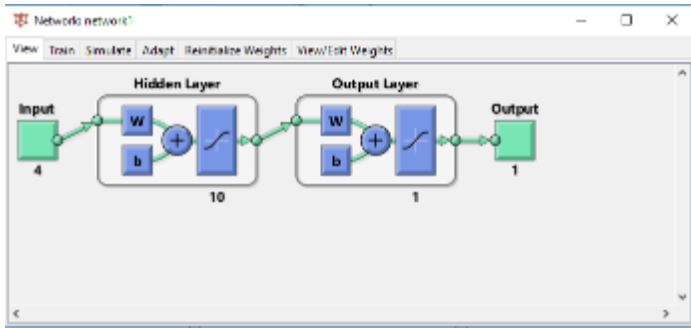


Figura 42: Esquema de la estructura de la RNA creada en nntool..

Se hace doble click en la red creada y aparece una ventana donde se pueden fijar los parámetros para el entrenamiento de la red. Lo primero que aparece es un esquema de la RNA creada, en este caso se observa que hay 4 variables de entrada o Inputs, dos capas, y una variable de salida u output. Para entrenar la red, se hace click en la pestaña Train.

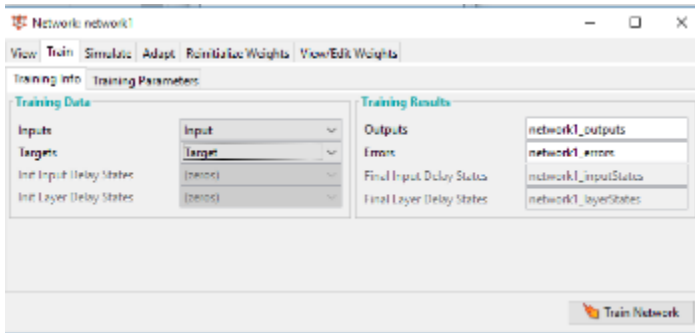


Figura 43: Interfaz de entrenamiento de una RNA en nntool; Selección de datos de entrada y de salida.

Una vez aquí, se definen los datos de entrada (Input) y de salida (Target) para el entrenamiento de la red.

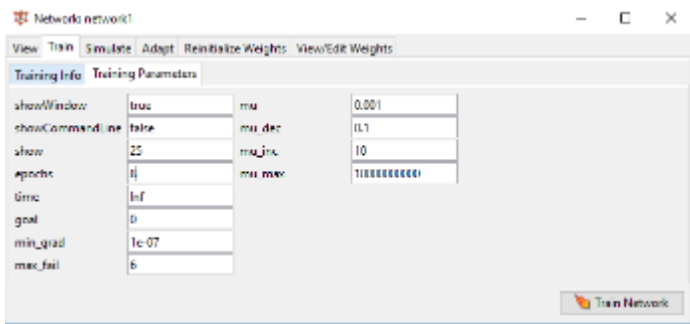


Figura 44: Interfaz de entrenamiento de una RNA en nntool; Definición de parámetros de entrenamiento.

En la pestaña de Training Parameters se pueden definir los parámetros de entrenamiento de la red como número de iteraciones o gradiente mínimo. Por defecto, el número de iteraciones es 1000, sin embargo, en este trabajo se realizaron 8 iteraciones por cada entrenamiento de la RNA. Una vez fijados los parámetros, se da click en Train Network.

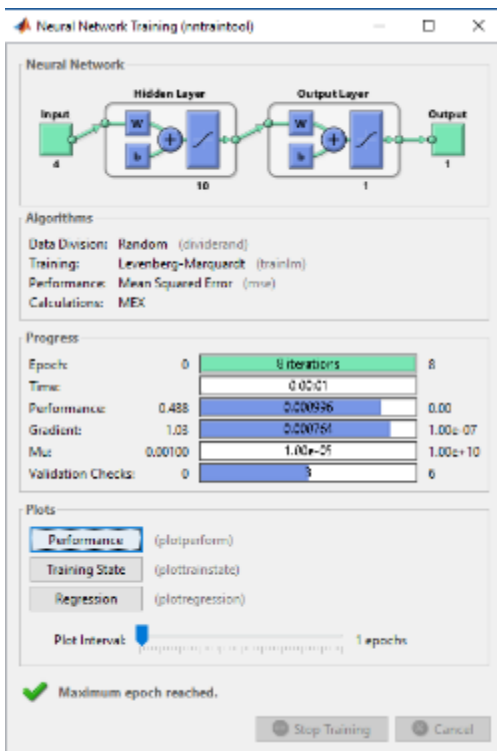
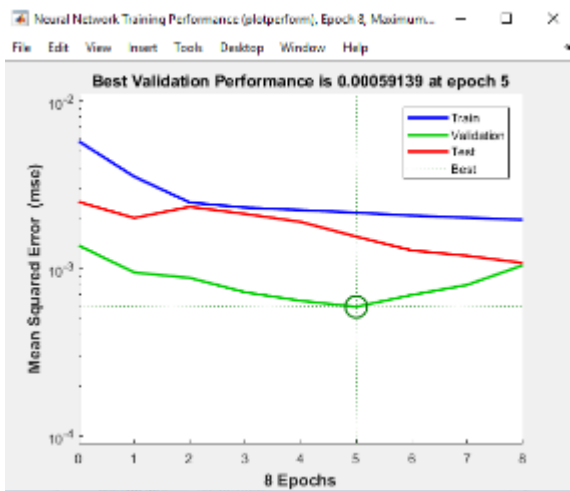


Figura 45: Consola de supervisión de entrenamiento de la RNA.

Cuando el entrenamiento de la RNA comienza esta ventana aparece en la interfaz. Se muestra el esquema de la RNA, los algoritmos calculados y el estado del entrenamiento. En la parte inferior se observa la sección "Plots" Es allí donde se pueden obtener los gráficos de los resultados. Para obtener el MSE se hace click en Performance. Para obtener las gráficas de la regresión se hace click en Regression.

Para detener el entrenamiento, se hace click en Stop Training. Es recomendable hacerlo una vez que el mínimo MSE sea hallado, de otra forma, el entrenamiento se detendrá en la última iteración, o si el mínimo gradiente entre iteraciones es alcanzado.



Cuando se hace click en Performance se obtiene una gráfica así. Esta gráfica muestra el MSE en el eje vertical y el número de iteraciones en el eje horizontal. El dato de Interés para este caso es el mínimo MSE encontrado en la iteración 5, con un valor de 0.00059139.

Figura 46: Gráfica del desempeño de MSE en cada iteración.

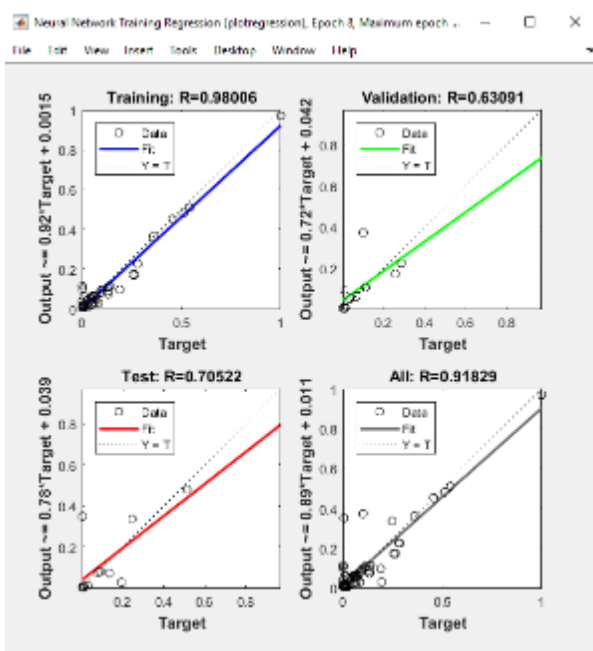


Figura 47: Gráfica de regresión lineal de los datos obtenidos del entrenamiento de la RNA.

Cuando se hace click en Regression se abre una ventana que muestra los resultados obtenidos de la regresión durante el entrenamiento de la red. Cada recuadro tiene por eje vertical los datos obtenidos del entrenamiento de la red y en el eje horizontal los datos suministrados como Target a la red. Cada recuadro tiene una línea de tendencia que da una idea del ajuste que tuvieron los datos obtenidos de la red con los datos reales. Entre más cercana a la unidad sea la pendiente de la línea de tendencia, más precisos son los resultados obtenidos.

De esta forma, una vez hallada la configuración de RNA que arrojara los resultados más precisos, se procedió entonces a realizar las pruebas con el Flux como variable objetivo y la Temperatura, la Concentración y la Presión como variables de entrada usando la configuración de RNA óptima. Dicho análisis se realizó para todos los conjuntos de datos, incluyendo u omitiendo los datos anómalos.

Se realizaron pruebas para RNAs de 1, 2, 3 y 4 capas para averiguar si el número de capas tenía un efecto significativo en la precisión de los resultados. Dado que el Factor de separación es un índice que describe qué tan exitosa fue la separación de los componentes, también se realizaron pruebas con la configuración óptima usando las mismas tres variables de entrada para hallar el Factor de Separación usando las RNAs.

Una vez se obtuvieron los resultados de las pruebas, el paso final fue realizar un análisis de sensibilidad de variables. Para dicho fin, se hicieron pruebas de entrenamiento para el tipo de red óptimo, reduciendo sistemáticamente a la mitad las variables de entrada y manteniendo las demás variables de entrada y de salida en sus valores normales. Esto se hizo con el fin de observar qué impacto tenía la variación de cada variable en la variable de salida. El análisis de sensibilidad se realizó para cada base de datos con el flux como variable de salida.

3. RESULTADOS

3.1 ANÁLISIS DE ESTADÍSTICA DESCRIPTIVA.

Durante la recopilación de datos se encontró que en algunas investigaciones la presión al lado del permeado no era reportada en algunos experimentos. Del mismo modo, se notó que el factor de separación era omitido o el valor reportado era del tipo > 50.000 . Dado que la red neuronal necesita que la totalidad de los valores tengan una magnitud definida en todas las variables, estos datos experimentales fueron omitidos. Haciendo esto, se pasó de tener una base de 145 datos a una de 74 datos. En esta base de datos se reportaban valores discretos de Flux, Temperatura, Concentración, Factor de Separación, y Presión.

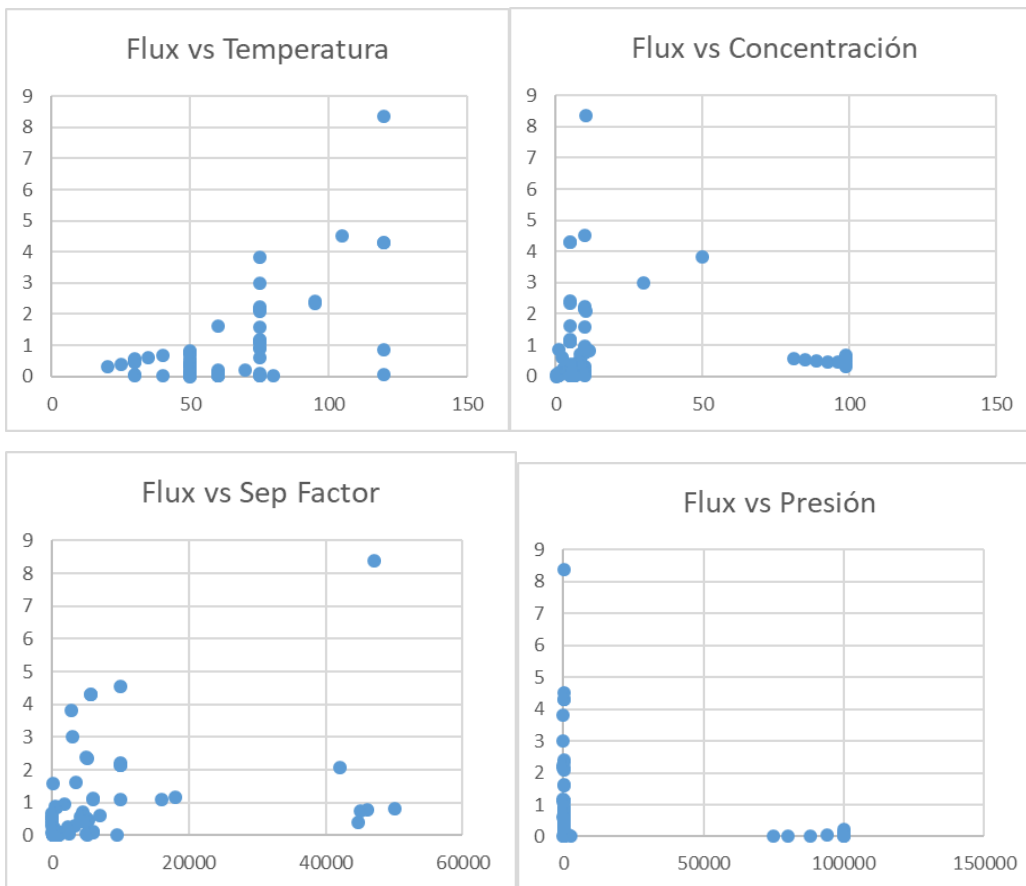


Figura 48: Gráficos de dispersión de Flux vs variables de entrada. El Flux medido en kg/m^2 , Temperatura en $^{\circ}\text{C}$, Concentración en %V/V, Presión en Pa.

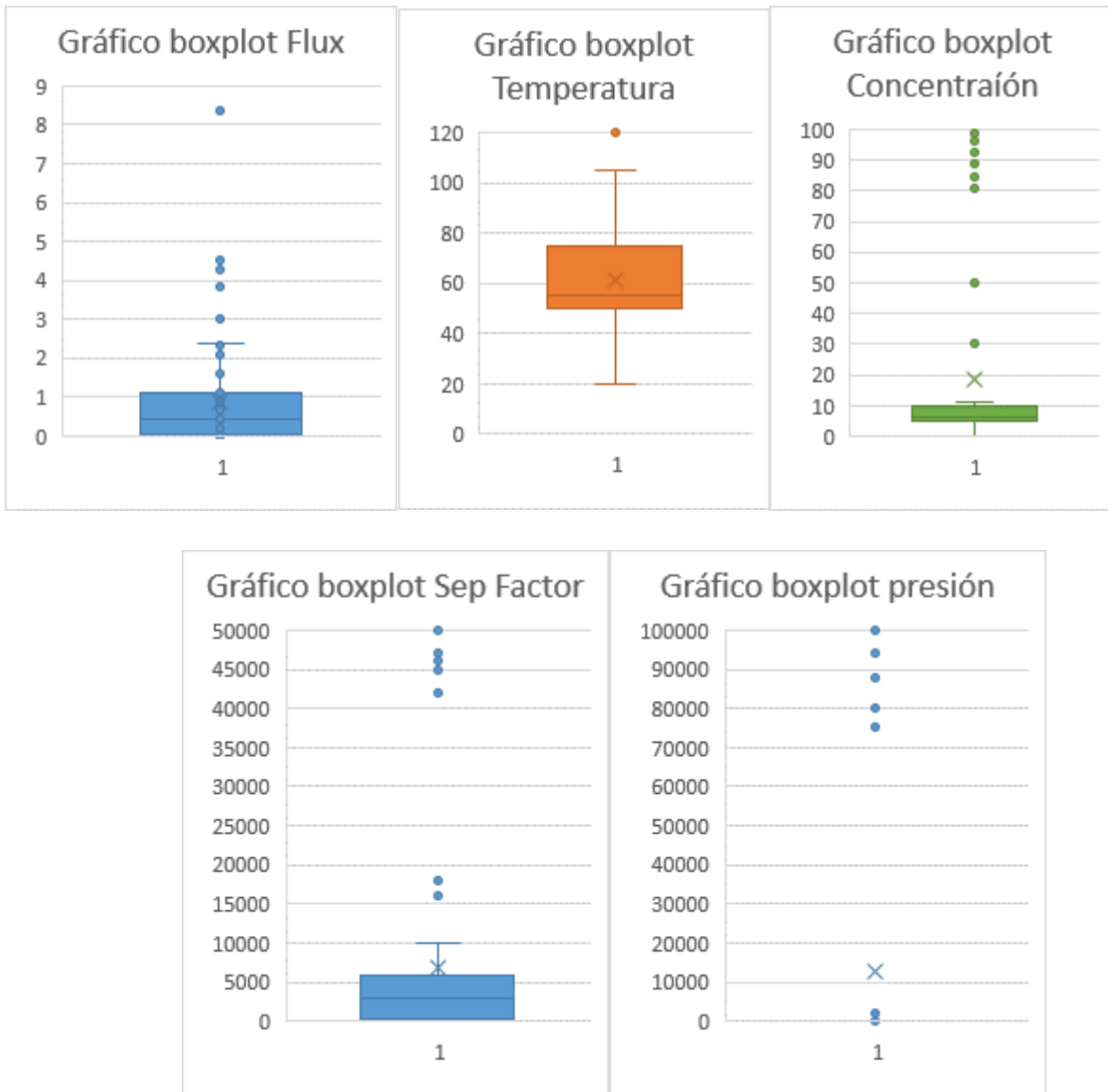


Figura 49: Gráficos boxplot para las variables de entrada y salida.

Del análisis de estadística descriptiva se obtuvieron los siguientes resultados para esta base de datos:

Variable	Unidades	Valor mínimo	Valor máximo	Media	Desviación estándar	Coefficiente de correlación respecto al Flux
Flux	$\left[\frac{Kg}{m^2h}\right]$	0.004	8.37	0.89283568	1.39617044	1
Temperatura	$[^{\circ}C]$	20	120	61.2837838	23.6275439	0.63492216
Concentración	$\left[\% \frac{V}{V}\right]$	0.05	98.8593156	18.5816535	30.7246413	-0.02379406
Factor de Separación	-	2	50000	6784.71297	12270.1866	0.37036671
Presión	$[Pa]$	13.3	100000	12845.0054	32352.923	-0.23657205

Tabla 20: Resumen del análisis de estadística descriptiva.

3.2 ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES.

Con la base de datos autoescalada y luego de hallar las variables de interacción de segundo orden, se realizó un análisis de componentes principales para el total de 14 de variables autoescaladas.

Por lo tanto, se obtuvieron 14 componentes principales, sin embargo, los primeros 3 componentes concentran la mayor parte de la variación. A continuación, se ilustra la varianza de cada componente principal.

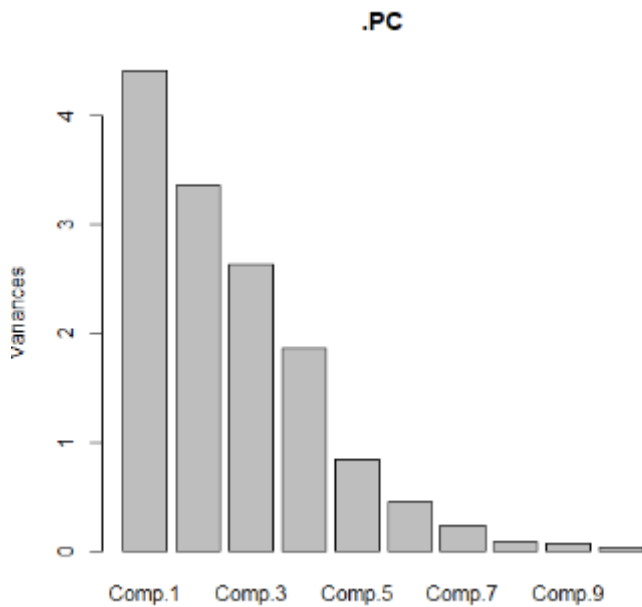


Figura 50: : Varianza de cada componente principal.

Dado que los primeros dos componentes principales concentran el mayor porcentaje de varianza, por heurística se analizan sólo las relaciones entre estos dos componentes. Luego de hacer el análisis de componentes principales, se obtuvieron las gráficas de Loadings y Scores de los primeros dos componentes principales.

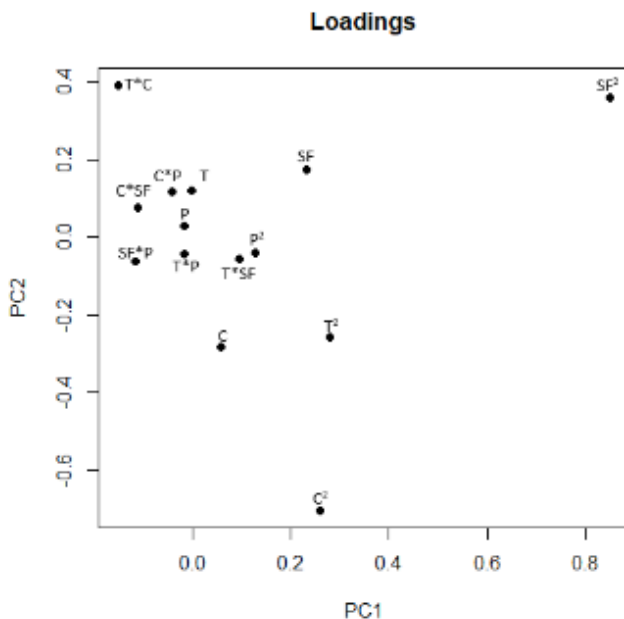
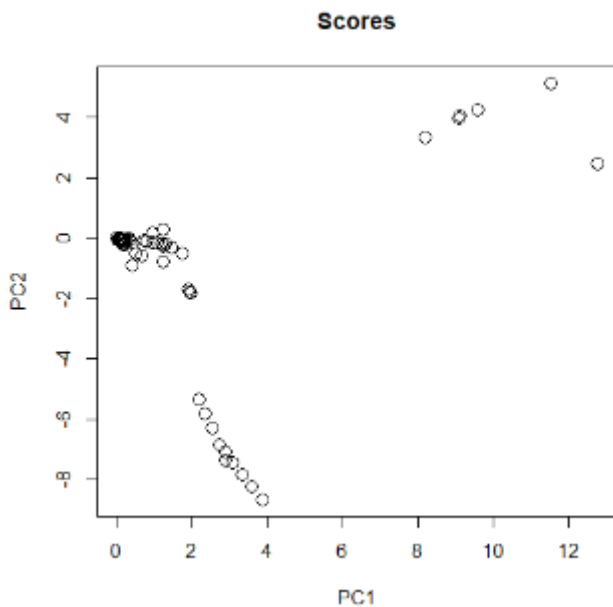


Figura 51: Gráfica de Loadings para el análisis de componentes principales.

La gráfica de Loadings permite observar la influencia o el peso que tiene cada variable en los componentes principales. Entre más a la derecha se ubique, más influencia tiene sobre el PC1. Entre más se ubique hacia la parte superior más influencia tiene en PC2. En este caso se observa que las variables que más influencia tienen en el PC1 son SF², T², Y C². Para el PC2, las variables más influyentes son C², T*C, y C. Aunque debe tenerse en cuenta que hay variables agrupadas en los valores de 0 a 0.2 en los que predomina la variable P.

De lo anterior se infiere que las variables que más peso tienen en el proceso son la temperatura y la concentración, ya que influyen fuertemente en ambos componentes principales. Esto tiene sentido desde el sentido físico del fenómeno dado que estas dos variables son las que más varían en los experimentos. En la pervaporación las condiciones de presión por lo general son cercanas al vacío, por lo tanto, la mayoría de datos tienen condiciones de presiones bajas para distintos valores de flux. En otras palabras, un incremento o decremento de la presión dentro del rango de condiciones de operación no tiene gran impacto, a comparación de la variación de la temperatura o la concentración.



De la gráfica de los Scores se puede observar la distribución de todos los datos usados en el análisis en el plano de los primeros dos componentes principales. Se destaca el hecho de que hay 3 agrupaciones de datos en el plano. En la esquina superior derecha hay 6 datos atípicos (Grupo 1), en la esquina inferior izquierda hay un total de 10 datos atípicos (Grupo 2). De lo que se concluye, que la agrupación del centro tiene un total de 58 datos (Grupo 3).

Figura 52: Gráfica de Scores para el análisis de componentes principales.

3.3 ANÁLISIS DE K-MEANS.

Para determinar la razón de la distribución de los datos en el plano de los primeros dos componentes de esta forma, se realizó un análisis de k-means para 2, 3 y 4 grupos. De esta manera se pudieron identificar las propiedades en común que tenían cada grupo de datos.

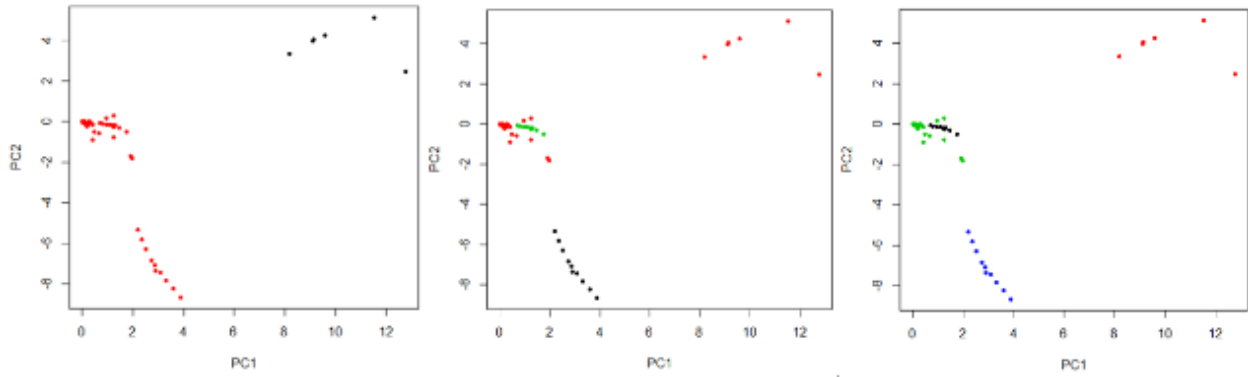


Figura 53: Gráfica de análisis de K-means para 2, 3 y 4 grupos, respectivamente.

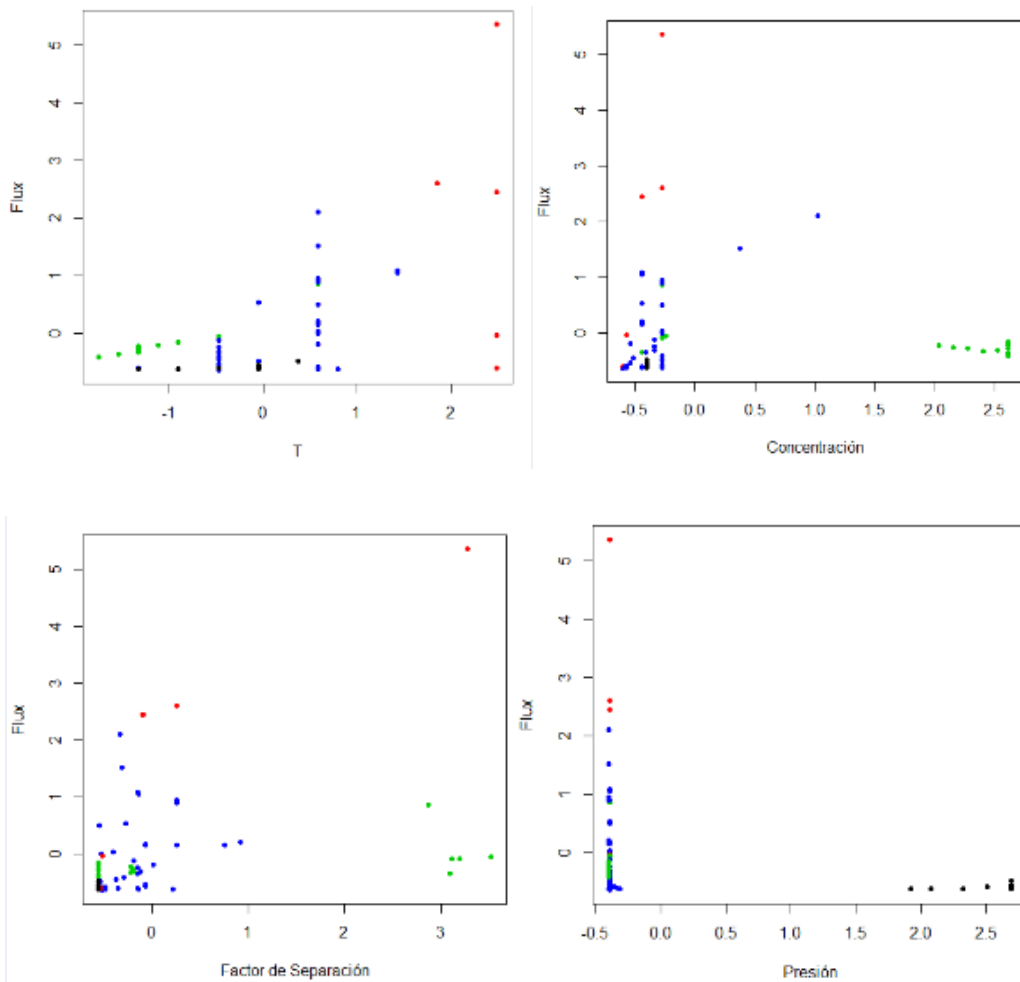


Figura 54: Flux vs variables de entrada autoescaladas diferenciando por color las agrupaciones obtenidas del análisis K-means.

Con el análisis de K-means para 4 grupos se pudo identificar los datos que corresponden al Grupo 1 (rojo) y al Grupo 2 (azul). Una vez identificados los datos que comprenden estos dos grupos, se organizaron de tal forma que pudieran observarse relaciones y tendencias entre las condiciones de operación y los Scores obtenidos del análisis de componentes principales. Estos datos se listan a continuación.

Tipo de membrana	Flux $\left[\frac{Kg}{m^2h}\right]$	T $[^{\circ}C]$	C $\left[\frac{\%V}{V}\right]$	Factor de separación	Presión $[Pa]$	PC1 Score	PC2 Score
NaA Zeolite	0.772	50	10.09	46000	133	9.59	4.27
	2.08	75	10.09	42000	133	8.19	3.32
	8.37	120	10.09	47000	133	12.78	2.49
	0.396	50	5.02	44800	133	9.10	3.99
	0.81	50	11.2	50000	133	11.52	5.12
	0.76	50	10	45000	133	9.13	4.06

Tabla 21: Propiedades de los datos pertenecientes al grupo 1.

Este conjunto de datos comparte la particularidad de tener valores de factor de separación altos, y dado que la variable SF² es la que tiene más peso en el PC1, esto ocasiona que estos valores se ubiquen tan a la derecha del plano. La temperatura tiene un rango amplio y se comprueba una vez más la relación positiva entre esta y el PC1, sin embargo, se observa que la relación es inversa para PC2. Esta relación inversa entre temperatura y PC2 se comprueba una vez más en las tendencias del grupo 2.

Tipo de membrana	Flux $\left[\frac{Kg}{m^2h}\right]$	T [$^{\circ}C$]	C $\left[\% \frac{V}{V}\right]$	Factor de separación	Presión [Pa]	PC1 Score	PC2 Score
PDMS	0.445	30	96.19771863	4500	50	2.90	-7.37
	0.44	30	92.39543726	4050	50	2.73	-6.39
	0.5	30	88.59315589	4300	50	2.53	-6.32
	0.515	30	84.79087452	4350	50	2.35	-5.82
	0.57	30	80.98859316	4050	50	2.19	-5.36
	0.3	20	98.85931559	10	50	3.88	-8.67
	0.388	25	98.85931559	9.8	50	3.59	-8.23
	0.5	30	98.85931559	9.7	50	3.53	-7.82
	0.588	35	98.85931559	9.7	50	3.09	-7.44
	0.68	40	98.85931559	9.6	50	2.88	-7.08

Tabla 22: Propiedades de los datos pertenecientes al Grupo 2.

Para este grupo de datos se observa que tienen los valores más bajos de Factor de Separación, por lo que es natural que estén ubicados en la parte inferior izquierda del plano. Sin embargo, lo más notable de este conjunto particular de datos son los valores tan altos de concentración. Estos valores son la principal razón por la que este conjunto de datos sea atípico. Estos datos corresponden a un estudio hecho a etanol derivado de la fermentación de semillas usando *Saccharomyces Cerevisiae* (Fu, y otros, 2015). Dichas soluciones fueron preparadas con el fin de obtener soluciones del 3-15% %P/V de alcohol. Esto explica por qué la concentración de agua en la alimentación es tan elevada.

3.4 ENTRENAMIENTO DE LA RNA

Una vez identificadas las propiedades de los datos atípicos, pudieron definirse 4 diferentes bases de datos en los que se omitían parcial o completamente los datos atípicos. Se clasificaron de la siguiente manera:

Cluster 1: Omite todos los datos atípicos y sólo incluye los 58 datos centralizados.

Cluster 2: Incluye los datos centralizados y los 6 datos del Grupo 1.

Cluster 3: Incluye los datos centralizados y los 10 datos del Grupo 2.

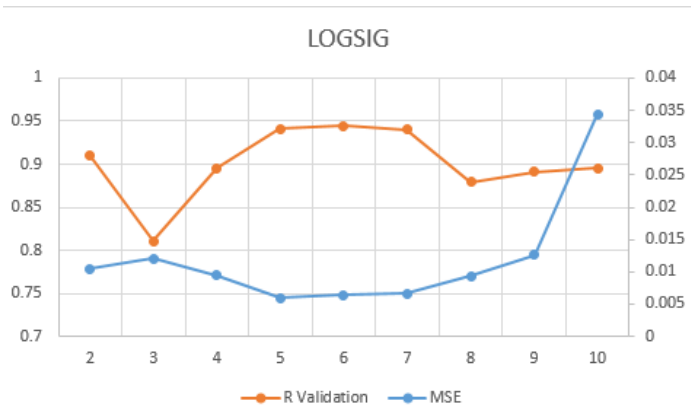
Cluster 4: Incluye todos los 74 datos.

Cada grupo de datos fue normalizado usando el método de min-max, de tal manera que tuvieran un rango de 0 a 1. Luego, se realizó el entrenamiento de las redes neuronales para hallar la configuración que fuera más precisa para cada caso. Se resumen los resultados obtenidos de este entrenamiento en las siguientes tablas y gráficas:

3.4.1 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 1

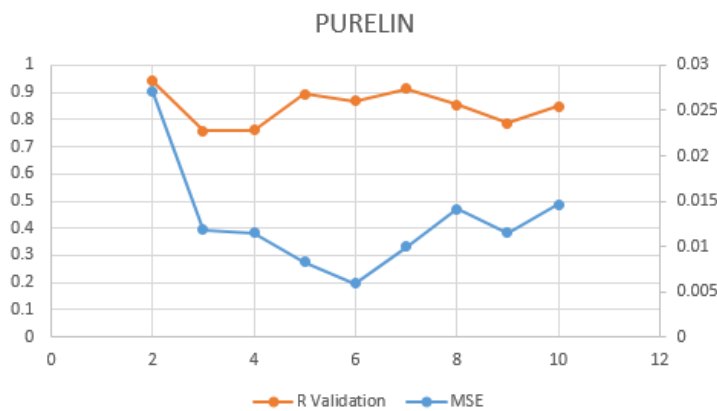
Neurons	LOGSIG		PURELIN		TANSIG	
	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation
2	0.0104823	0.910	0.02703118	0.941	0.0068857	0.818
3	0.01200758	0.810	0.01181496	0.759	0.00420487	0.899
4	0.00940925	0.896	0.01151608	0.762	0.03736882	0.92
5	0.00590848	0.941	0.00826804	0.893	0.01052288	0.811
6	0.00638391	0.944	0.00588395	0.868	0.00718488	0.938
7	0.00656936	0.940	0.00994709	0.913	0.0059108	0.897
8	0.00930291	0.879	0.01407477	0.853	0.00721052	0.825
9	0.01257134	0.891	0.01145356	0.787	0.00582617	0.891
10	0.03443308	0.895	0.0146144	0.849	0.01197424	0.771

Tabla 23: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.



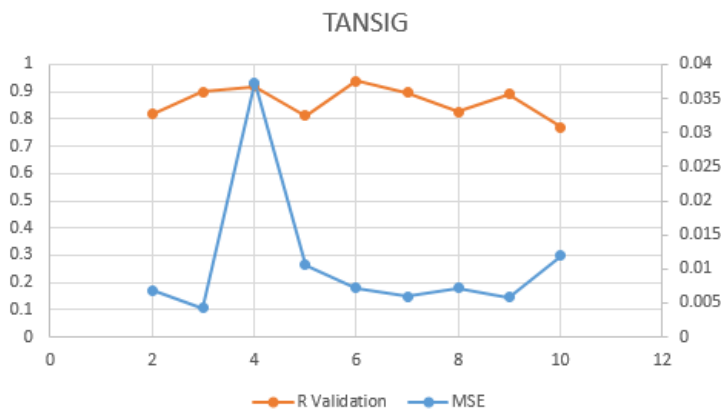
La función de LOGSIG arroja resultados bastante satisfactorios para un análisis semi-cuantitativo. Casi todas las configuraciones están cercanas a R Validation= 0.9 (eje izquierdo). Para los valores de MSE se observa que tienden a agruparse en el orden de 0.01 (eje derecho).

Figura 55: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.



La función PURELIN no ofrece gran variación en la precisión de los resultados que arroja usando diferentes números de neuronas. Sin embargo, los resultados de R Validation están entre 0.8 – 0.9. Lo que indica que sólo podrían arrojar resultados dentro del orden de lo semi-cuantitativo.

Figura 56: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.



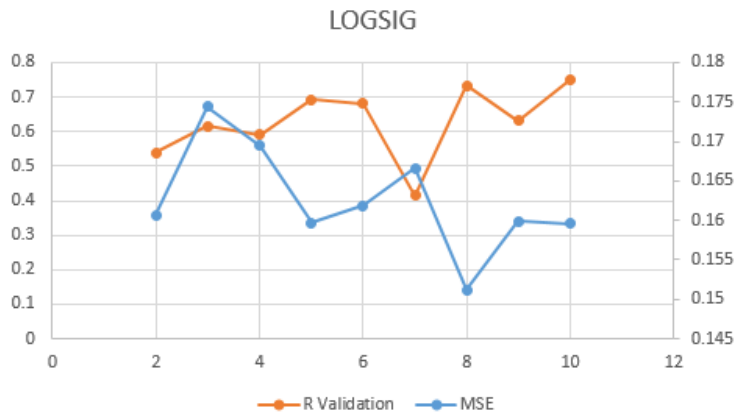
La función TANSIG se comporta de manera similar a la función PURELIN con este conjunto de datos. Los resultados de R Validation oscilan entre 0.8 y 0.9, mientras que los valores de MSE oscilan entre 0.005 y 0.01. De las tres funciones de transferencia, ésta es la que tiene mayor tendencia a valores bajos de MSE.

Figura 57: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 1.

3.4.2 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 2.

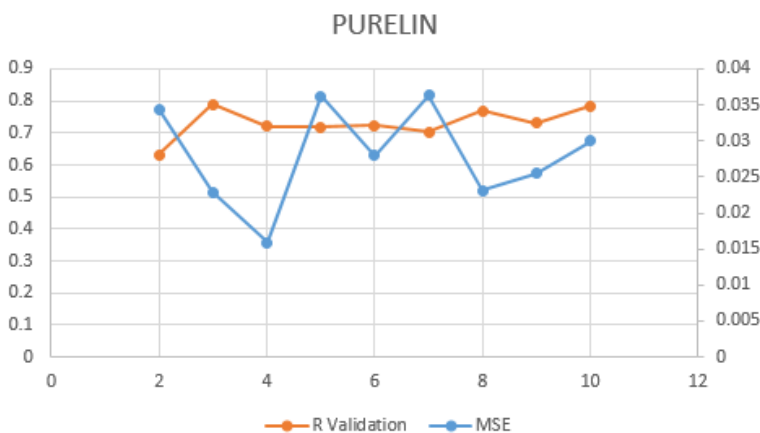
Neurons	LOGSIG		PURELIN		TANSIG	
	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation
2	0.1607222	0.539	0.0343721	0.633	0.00989271	0.9
3	0.174432	0.617	0.02283258	0.79	0.0131963	0.956
4	0.169464	0.591	0.01587315	0.721	0.00570588	0.932
5	0.159711	0.693	0.0361614	0.719	0.006436	0.885
6	0.161904	0.682	0.02796936	0.724	0.00533635	0.856
7	0.166575	0.414	0.0363694	0.704	0.01111256	0.912
8	0.1511584	0.734	0.02308408	0.77	0.00591148	0.863
9	0.159886	0.632	0.02544672	0.730	0.01031004	0.863
10	0.15963	0.752	0.02996727	0.784	0.00676732	0.872

Tabla 24: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.



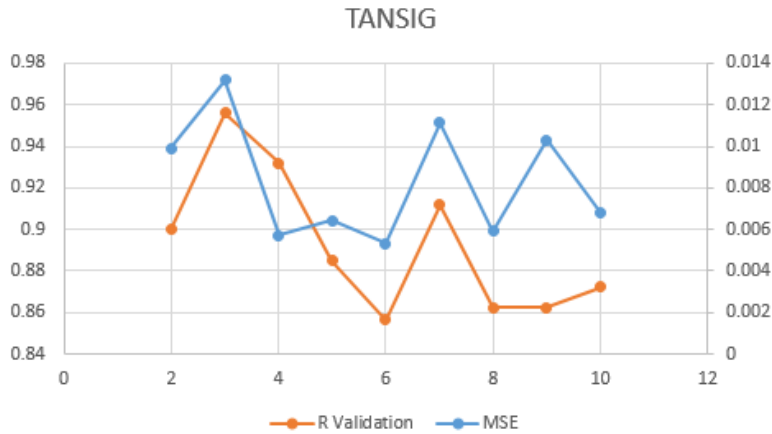
Para el Cluster 2 la función LOGSIG baja drásticamente el desempeño, llegando a unos valores de R Validation que oscilan entre 0.5-0.7. Esta configuración de RNA podría describir el fenómeno tan solo desde un punto de vista cualitativo. Los valores de MSE también son muy elevados, del orden de 0.15-0.175.

Figura 58: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.



En este caso la función PURELIN tiene un comportamiento bastante estable aumentando el número de neuronas en la RNA. Los valores de R Validation oscilan entre 0.7 y 0.8. Por lo que serían valores que permitan dar una descripción cualitativa del proceso. Por otro lado, los valores de MSE son bastante menores en comparación a la función LOGSIG.

Figura 59: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.



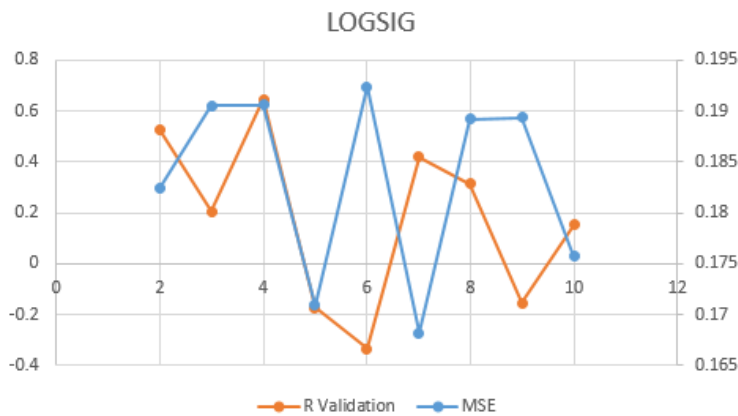
La función TANSIG es la que mejor desempeño tiene para este conjunto de datos dado que los valores de R Validation están por encima de 0.85 y se halla un valor máximo de 0.9559 para una RNA del tipo 4:3:1. Los valores de MSE también son bastante satisfactorios ya que se encuentran en un intervalo de 0.006 a 0.014.

Figura 60: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 2.

3.4.3 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 3.

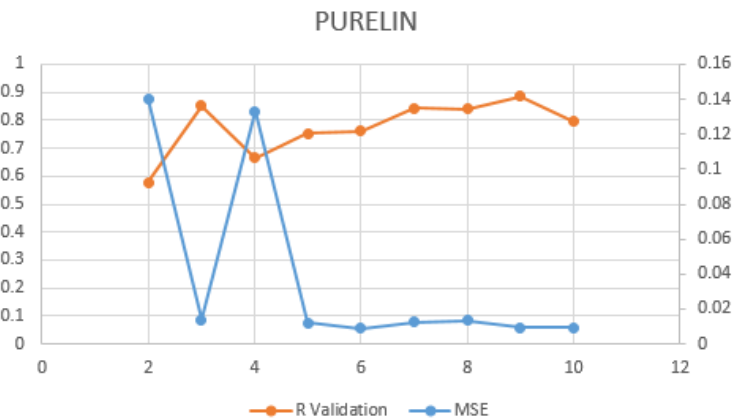
Neurons	LOGSIG		PURELIN		TANSIG	
	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation
2	0.182354	0.527	0.14044381	0.579	0.00369158	0.915
3	0.19053	0.205	0.01380276	0.853	0.00169016	0.943
4	0.1906	0.645	0.13314315	0.667	0.02249624	0.907
5	0.170929	-0.173	0.01220668	0.751	0.00270236	0.891
6	0.192403	-0.334	0.00900275	0.761	0.00373832	0.883
7	0.168203	0.419	0.01259119	0.843	0.00350847	0.887
8	0.189213	0.314	0.01338436	0.841	0.00308628	0.903
9	0.189343	-0.154	0.00953397	0.885	0.00339996	0.901
10	0.175731	0.152	0.00915308	0.796	0.00183816	0.826

Tabla 25: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.



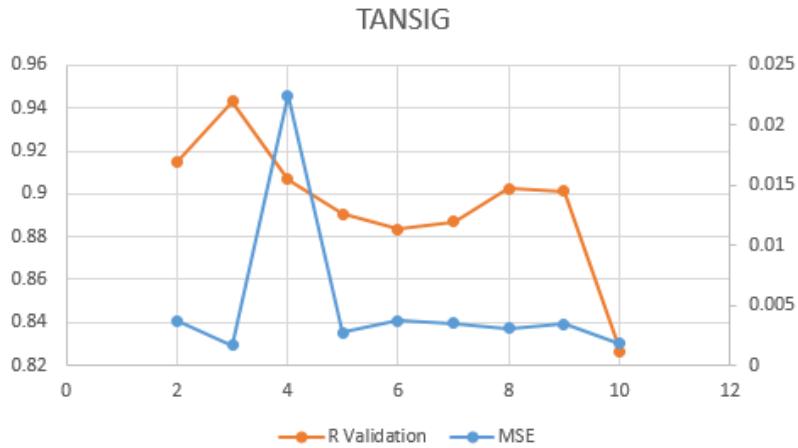
Para el conjunto de datos Cluster 3 el desempeño de la función LOGSIG es deplorable e inconstante. Tanto así que el valor máximo de R validation es tan solo de 0.645 y el valor menor es de -0.3344. Esta configuración de red no arroja resultados precisos y los valores de MSE son muy altos, del orden de 0.17-0.19.

Figura 61: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.



A diferencia de la función LOGSIG, la función PURELIN muestra un comportamiento estable en todas tendiendo a resultados muy poco diferentes conforme se aumenta el número de neuronas de la RNA tendiendo a un valor de 0.9 para R Validation. Los resultados obtenidos son aceptables y pueden dar una descripción semi-cualitativa del proceso.

Figura 62: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.



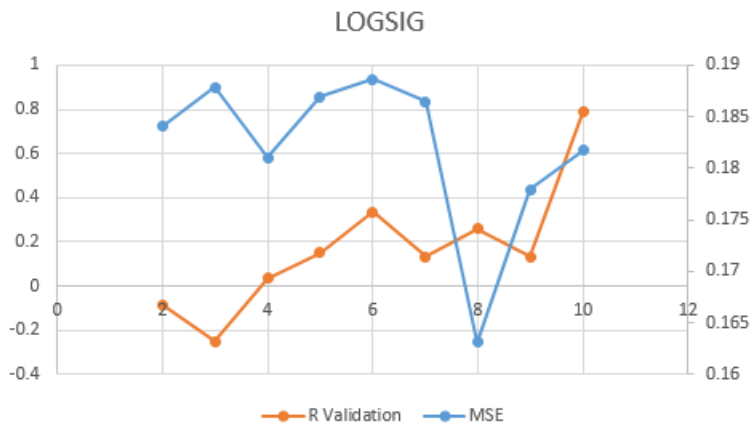
Nuevamente la función TANSIG es la que muestra tener un mejor desempeño para este conjunto de datos. El comportamiento de R Validation parece ser oscilante tendiendo a un valor de 0.9, teniendo un valor máximo de 0.943 para una configuración de RNA 4:3:1. Es notable también que los valores de MSE son bajos, centrados en 0.004 a excepción de la RNA

Figura 63: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 3.

3.4.4 ENTRENAMIENTO DE LA RNA CON DATOS DEL CLUSTER 4.

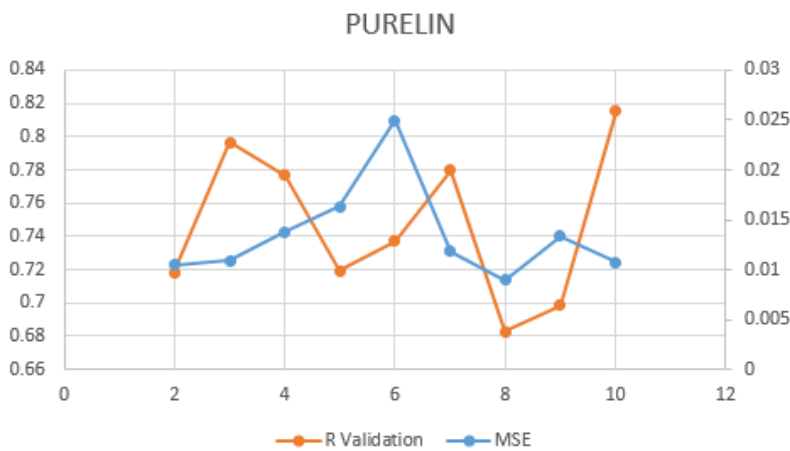
Neurons	LOGSIG		PURELIN		TANSIG	
	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation
2	0.184078	-0.084	0.01043576	0.718	0.01223027	0.836
3	0.187881	-0.250	0.01091923	0.796	0.0024214	0.94
4	0.181018	0.034	0.013794	0.777	0.0026307	0.847
5	0.186917	0.150	0.01633294	0.719	0.00247127	0.906
6	0.18864	0.336	0.02498427	0.737	0.00165658	0.882
7	0.186479	0.134	0.01182765	0.78	0.01162921	0.733
8	0.1631413	0.26	0.00891575	0.683	0.00121523	0.905
9	0.17795	0.134	0.01338532	0.698	0.00250875	0.937
10	0.181704	0.789	0.01071609	0.815	0.00203102	0.963

Tabla 26: Resumen de entrenamiento para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.



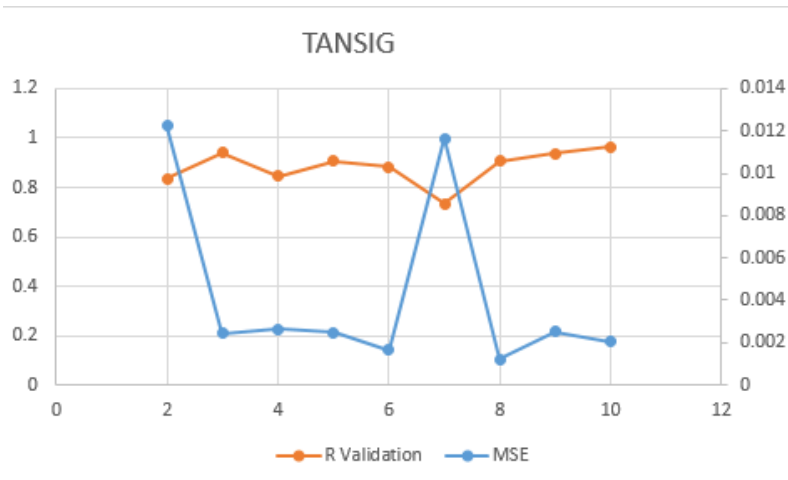
Para el conjunto de datos que incluye los datos centralizados y los atípicos el desempeño de la función LOGSIG es paupérrimo, con valores de R Validation que oscilan en 0.2, e incluso algunos de ellos negativos. Los valores de MSE son muy altos para tomar en consideración, por lo tanto, esta configuración de red no puede describir el proceso con precisión alguna.

Figura 64: Gráfica del desempeño de la función de transferencia LOGSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.



La función PURELIN para el conjunto completo de datos parece no tener ningún patrón apreciable con el aumento de número de neuronas en la red. Sin embargo, pueden dar descripciones cualitativas del proceso ya que los valores de R validation se encuentran entre 0.7-0.8. Se observa también que los valores de MSE son cercanos a 0.01.

Figura 65: Gráfica del desempeño de la función de transferencia PURELIN para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.



La función TANSIG nuevamente presenta resultados sobresalientes. Con valores de R Validation que tienden a ser mayores de 0.9 y valores de MSE que se mantienen cerca de 0.002 para la mayoría de las configuraciones. Teniendo en cuenta que se trabajó con todos los datos, incluyendo los datos atípicos, la función de transferencia TANSIG parece ser la más robusta en comparación con las funciones LOGSIG y PURELIN, en las que fue evidente que su desempeño no fue el mejor.

Figura 66: Gráfica del desempeño de la función de transferencia TANSIG para hallar la configuración óptima de la RNA con datos del Cluster 4.

De los anteriores ensayos se puede observar que la función de transferencia TANSIG es la que otorga más robustez a la RNA con todas las bases de datos, esto quiere decir que los valores de R Validation oscilan entre 0.9-0.95 para esta configuración y los valores de MSE son del orden de milésimas. Además, se puede observar que la configuración con el mayor R Validation es una RNA de tipo 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia, por lo tanto, fue ésta la configuración elegida para continuar con el entrenamiento de la red.

3.5 DESEMPEÑO DE LA RNA.

Una vez seleccionada la arquitectura óptima de la red, se procedió a hacer las pruebas de entrenamiento para obtener el flux como variable de salida teniendo la temperatura, la concentración y la presión como variables de entrada.

Base de datos	MSE	R Validation
Cluster 1	0.00668592	0.959
Cluster 2	0.01016679	0.878
Cluster 3	0.00648964	0.907
Cluster 4	0.00342147	0.871

Tabla 27: Resultados obtenidos del entrenamiento de una RNA 3:10:1 TANSIG para las 4 bases de datos.

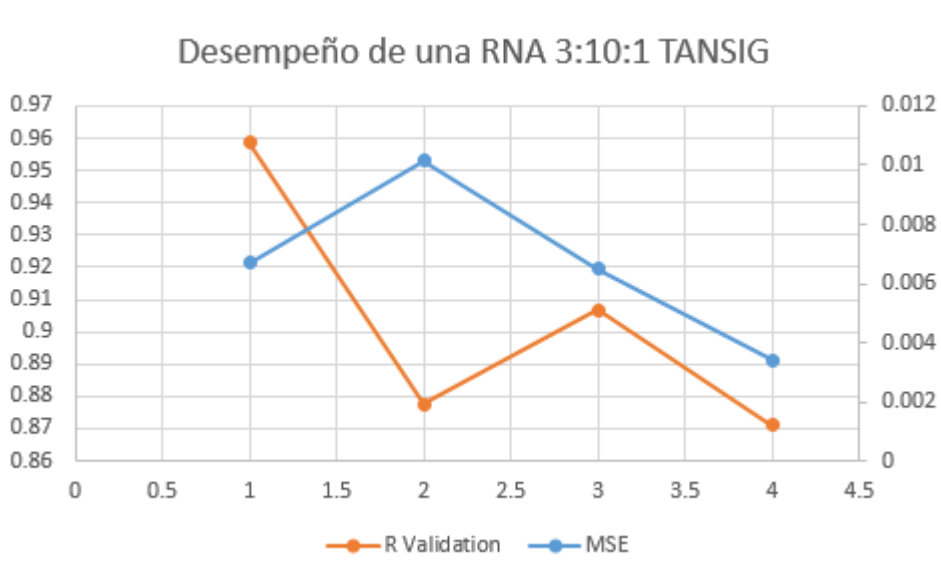


Figura 67: Comparativa del desempeño de una RNA 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia para las 4 bases de datos.

Llegados a este punto, se concluye que, de las pruebas realizadas, la arquitectura que arroja resultados más precisos es una RNA 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia para la base de datos que omite por completo los datos atípicos.

Esto tiene sentido si se parte del hecho de que, en el análisis de K-means se llegó a la conclusión de que los datos del Cluster 1 son los que más comparten características en común, por lo que es de esperar que sea con estos datos que se encuentre un mejor desempeño, en comparación con las bases de datos que incluyen los datos atípicos. No obstante, el desempeño de la RNA con las demás bases de datos sigue siendo sobresaliente, con la que podrían llegar a darse descripciones semi-cualitativas del proceso.

3.6 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES.

Después de haber encontrado la configuración de RNA, se realizó un análisis de sensibilidad de variables para cada base de datos disminuyendo cada variable al 50% y comparando con los resultados obtenidos anteriormente para cada cluster.

3.6.1 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 1.

	MSE	R Validation
Cluster 1	0.00668592	0.959
T al 50%	0.00821455	0.923
C al 50%	0.00549078	0.883
P al 50%	0.01026715	0.894

Tabla 28: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 1.

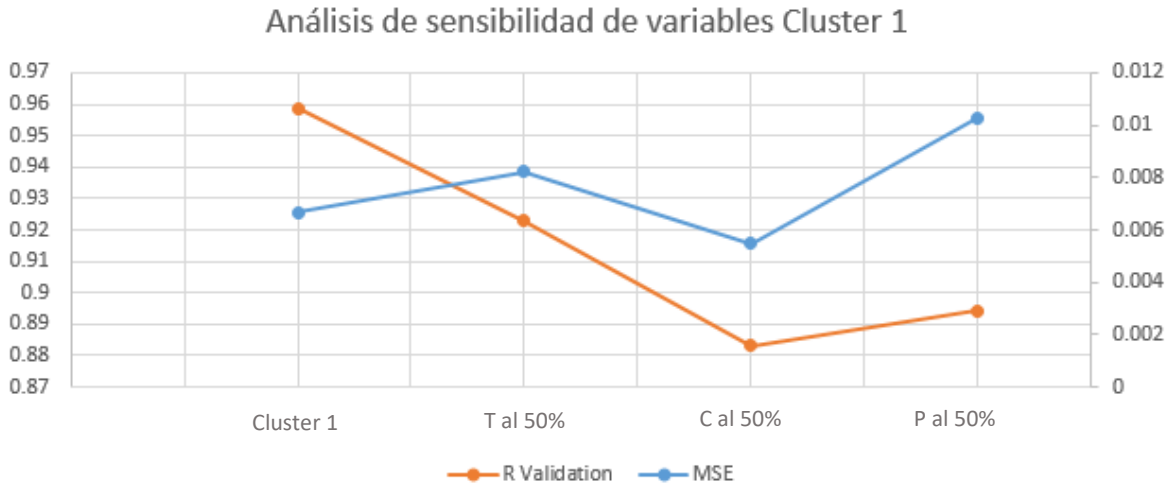


Figura 68: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 1.

Del anterior análisis para el Cluster 1 se observa que el cambio en la temperatura en la entrada tiene prácticamente el mismo efecto en la red, sin embargo, el cambio en la concentración de agua en la entrada y la presión en el lado del permeado tienen un efecto significativo. De las dos variables, la concentración es la que más impacto tiene en los resultados en la red, esto concuerda con la conclusión sacada del análisis por componentes principales en el que se observó que la concentración era la variable que más influía en ambos componentes principales. El cambio en la presión tiene influencia si se tiene en cuenta que los rangos de presión manejados en los experimentos tenían en su mayoría el mismo rango de magnitud, eso ocasiona que, una vez se hace un cambio en esta variable, el impacto que genera es mayor en los datos de salida.

3.6.2 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 2.

	MSE	R Validation
Cluster 2	0.01016679	0.878
T al 50%	0.0079992	0.801
C al 50%	0.00608908	0.948
P al 50%	0.00915053	0.774

Tabla 29: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 2.

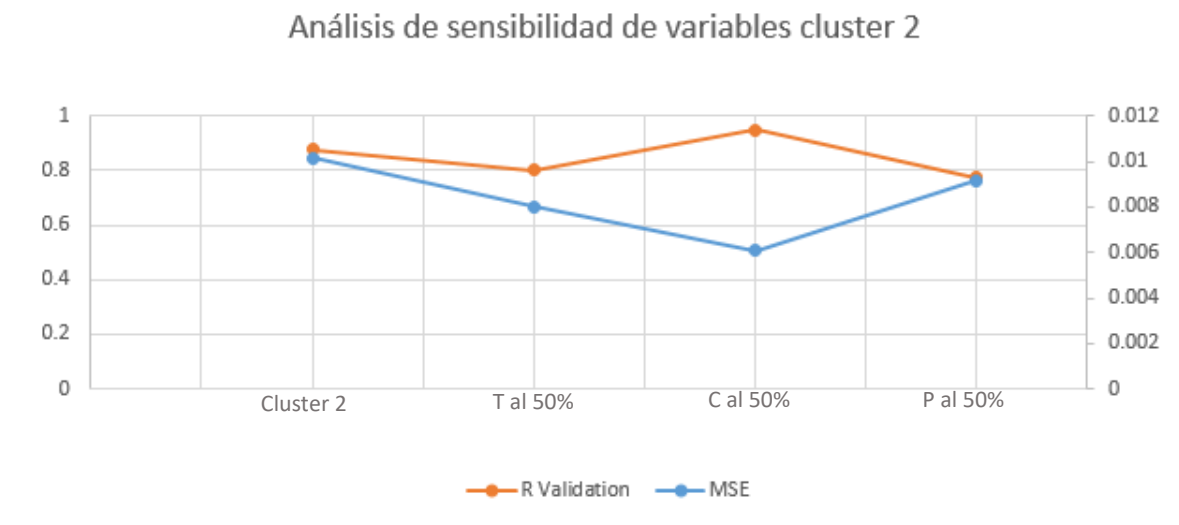


Figura 69: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 2.

Para el Cluster 2 se observa nuevamente la tendencia de que las variables que más impacto tienen en la configuración de la red son la concentración y la presión. El impacto de la temperatura no es determinante, pues aún disminuyendo la variable se obtiene un cambio menor al 10%.

3.6.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 3.

	MSE	R Validation
Cluster 3	0.00648964	0.907
T al 50%	0.00493934	0.831
C al 50%	0.00235036	0.950
P al 50%	0.00569124	0.935

Tabla 30: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 3.

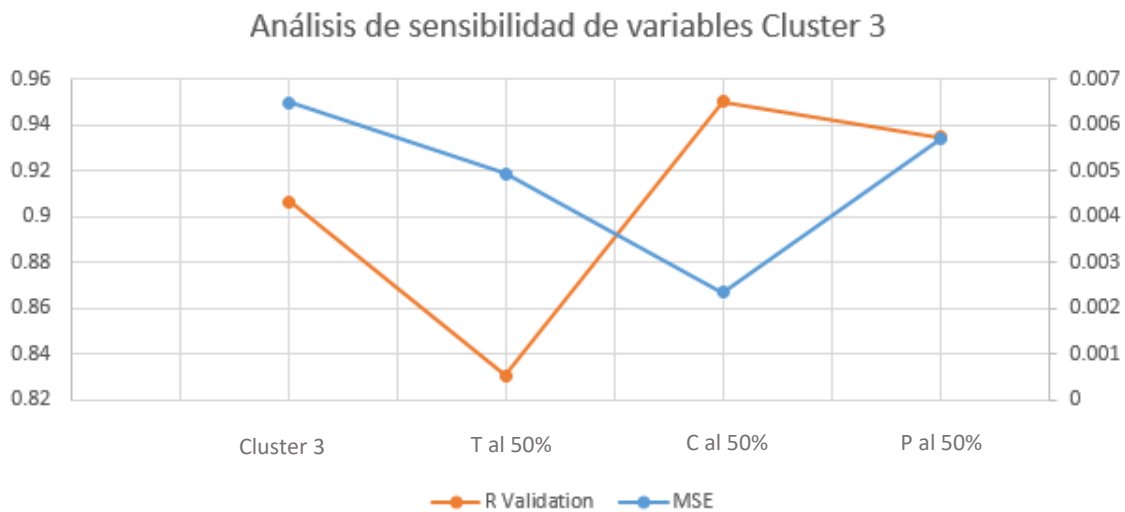


Figura 70: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 3.

A diferencia de los clusters anteriores, con éste grupo de datos es notable que el cambio en la temperatura tiene un gran efecto en la variable de salida. Esto se debe a que en esta base de datos, los datos atípicos presentan los valores de temperatura más bajos, con un rango de 30 a 40 °C. Si se disminuyen a la mitad estos valores, los nuevos valores de temperatura resultantes van a estar fuera del rango de la base de datos, por lo que esto sin duda tiene un gran impacto en las nuevas iteraciones de la RNA. Se observa también que, nuevamente la concentración sigue siendo una variable de gran impacto para este cluster.

3.6.4 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE VARIABLES PARA CLUSTER 4.

	MSE	R Validation
Cluster 4	0.00330915	0.869
T al 50%	0.00329831	0.886
C al 50%	0.00285391	0.854
P al 50%	0.00219917	0.933

Tabla 31: Resultados análisis de sensibilidad de variables para Cluster 4.

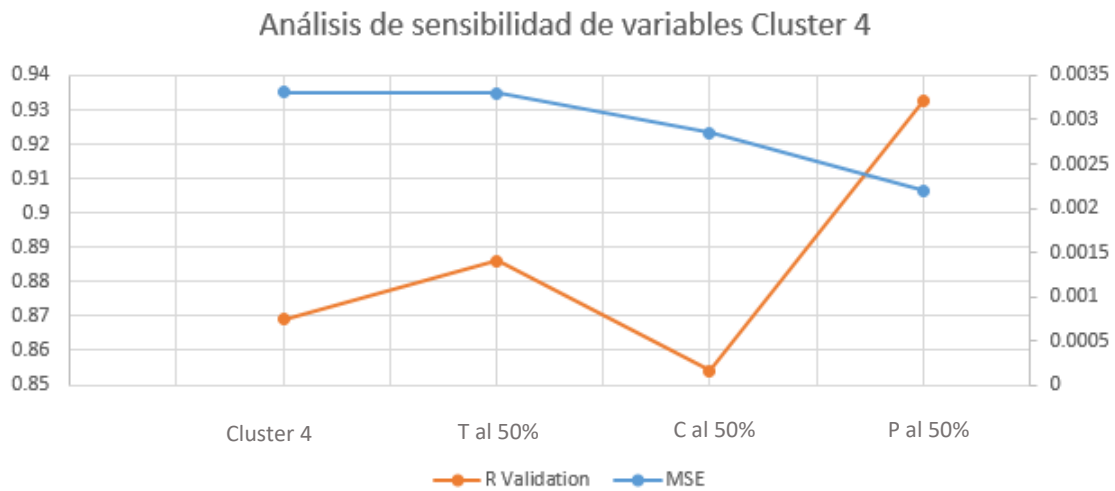


Figura 71: Gráfica análisis de sensibilidad de variables para Cluster 4.

3.7 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE NÚMERO DE CAPAS.

Se averiguó también el efecto que tiene el número de capas en el desempeño de la arquitectura de la RNA escogida. Por lo que se hicieron pruebas de entrenamiento para todas las bases de datos para redes de 1, 2, 3 y 4 capas.

Número de capas	Cluster 1		Cluster 2		Cluster 3		Cluster 4	
	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation	MSE	R Validation
1	0.0086845	0.844	0.0070165	0.838	0.0038704	0.914	0.0068793	0.824
2	0.0066859	0.959	0.0101667	0.878	0.0101667	0.878	0.0034214	0.871
3	0.0065083	0.971	0.0165192	0.880	0.0076411	0.905	0.0020738	0.849
4	0.0105400	0.932	0.0164454	0.911	0.0048659	0.903	0.0031722	0.883

Tabla 32: Resultados del análisis de número de capas.

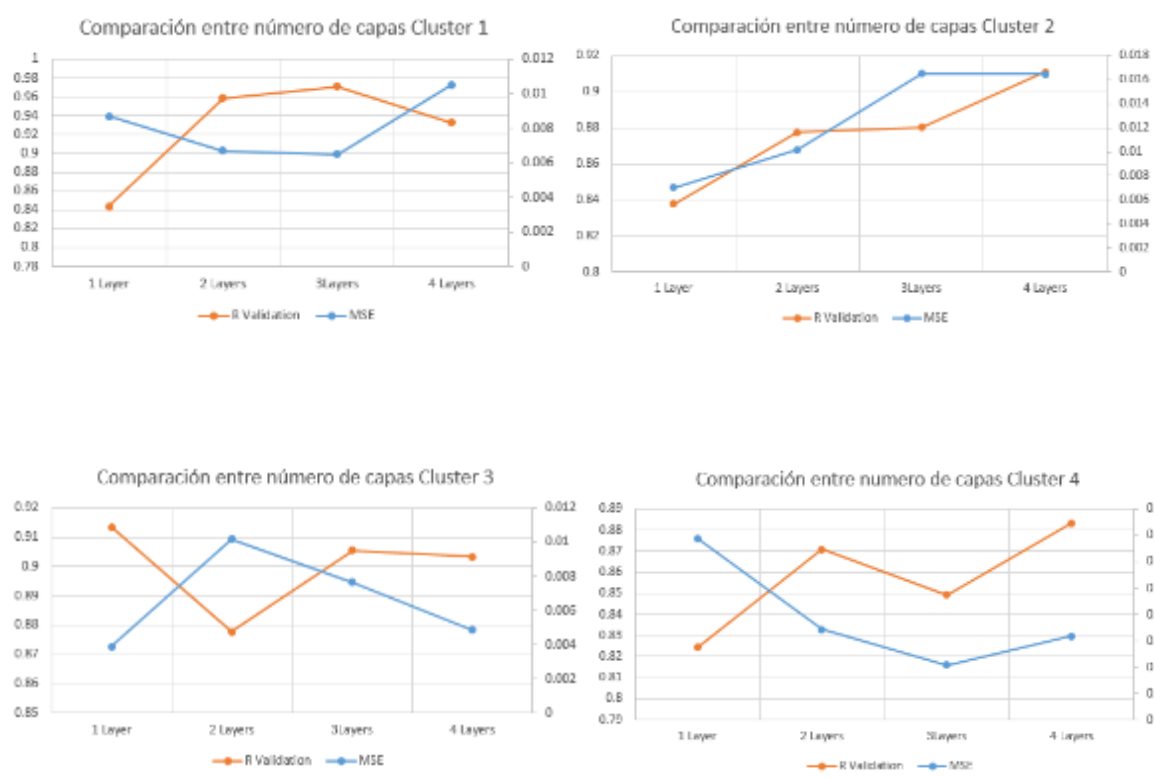


Figura 72: Gráfica comparativa del análisis de número de capas para los los Clusters 1, 2, 3 y 4 para una RNA 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia.

Se observa que existe una tendencia general en la que el valor de R Validation aumenta conforme se aumenta las capas en la RNA, sin embargo, en los casos de estudio el cambio no es determinante. Por ejemplo, para el Cluster 1, se obtiene el valor máximo con 3 capas, sin embargo no difiere mucho del valor de R Validation

para 2 capas. Para el Cluster 2, el valor de 4 capas es ligeramente mayor al de 2 y 3 capas, así también lo es, el valor de MSE. Para el Cluster 3, se tiene que el valor mínimo se obtiene con 2 capas, el mayor se obtiene con sólo una capa y los valores de 3 y 4 capas son muy similares. Finalmente, para el Cluster 4, se observa nuevamente la tendencia del aumento de R Validation con el aumento del número de capas, para el cual el valor de R Validation máximo se obtiene con una RNA de 4 capas.

4. CONCLUSIONES

Según los resultados obtenidos en el presente trabajo se observó que de los 3 tipos de funciones de transferencia la que demostró más robustez para la base de datos usada fue la TANSIG, ya que en la gran mayoría de pruebas hechas con diferentes números de neuronas en la RNA y las cuatro bases de datos manejadas en este trabajo, este tipo de función de transferencia obtuvo siempre un valor de R de 0.8 a 0.9, a diferencia de las otras configuraciones de RNA (LOGSIG y PURELIN) con las que sólo se obtuvieron resultados aceptables en el marco de lo semi-cuantitativo para la base de datos que descartaba los datos atípicos; para las otras bases de datos usadas, el desempeño de estas funciones de transferencia fue insuficiente.

Para la predicción del Flux de salida con la temperatura, concentración y presión como variables de entrada la configuración de RNA que tiene una mayor precisión es una RNA de topología 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia. Esta configuración de RNA tuvo un valor de R Validation igual a 0.97078 y un valor de MSE de 0.00650831. Dichos resultados indican que esta configuración de red puede predecir los valores del flux de salida con una precisión en el orden de lo cuantitativo.

El análisis de variables realizado permitió observar que las variables que más influyen en el proceso son la concentración de agua en el flujo de entrada y la presión en el lado del permeado, lo que respalda el fenómeno físico que se estudia ya que la pervaporación es más eficiente en concentraciones altas de alcohol, bastante cercanas al punto azeotrópico de la mezcla y la presión casi al vacío del lado del permeado es la fuerza motriz que ocasiona la transferencia de masa.

5. RECOMENDACIONES

Para mejorar el desempeño de las RNA se recomienda implementar una base de datos en la que se tengan en cuenta más variables de entrada, como por ejemplo, el diámetro de poro para poder predecir con más exactitud el flux de salida y que la configuración de RNA sea más robusta. Al mismo tiempo, se recomienda que dicha base de datos tenga una distribución uniforme de valores de temperatura, concentración, y presión, es decir, una distribución de datos típicos para procesos de pervaporación. Para obtener resultados más rigurosos se recomienda tener en cuenta como variable de entrada el grosor de la membrana.

Durante la fase de entrenamiento de las redes, se recomienda usar un número mayor de neuronas en la red para determinar si más allá de 10 neuronas se obtienen mejores desempeños.

BIBLIOGRAFÍA

- Fu, C., Cai, D., Hu, S., Miao, Q., Wang, Y., Qin, P., . . . Tan, T. (2015). Ethanol fermentation integrated with PDMS composite membrane: *Bioresource Technology*, 648-657.
- Geankopolis, C. J. (1998). *Procesos de transporte y operaciones unitarias*. Ciudad de México: Continental .
- Hagan, M. T., Demuth, H. B., Beale, M. H., & Jesús, O. D. (2014). *Neuronal Network Design (2nd edition)*. Stillwater: Oklahoma State University.
- Hu, N., Li, Y., Zhong, S., Wang, B., Zhang, F., Wu, T., . . . Chen, X. (2016). Fluoride-mediated synthesis of high-flux chabazite membranes. *Journal of Membrane Science*, 91-100.
- Kondo, M., & Mitsuru Komori, H. K.-i. (1997). Tubular-type pervaporation module with zeolite NaA membrane. *Journal of Membrane Science*, 133-141.
- Kubaczka, A., Kamiński, W., & Marszałek, J. (2018). Predicting mass fluxes in the pervaporation process using Maxwell-Stefan diffusion coefficients. *Journal of Membrane Science*, 111-119.
- McCabe, W. L., Smith, J., & Harriot, P. (2007). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. México: McGraw-Hill.
- Morigami, Y., Kondo, M., Abe, J., Kita, H., & Okamoto, K. (2001). The first large-scale pervaporation plant using tubular-type module with zeolite NaA membrane. *Separation and Purification Technology*, 251-260.
- Nigiz, F. U., Dogan, H., & Hilmioglu, N. D. (2012). Pervaporation of ethanol/water mixtures using clinoptilolite and 4A filled sodium alginate membranes. *Desalination*, 24-31.
- Okamoto, K.-i., Kita, H., Horii, K., & Tanaka, K. (2001). Zeolite NaA membrane preparation, single gas permeation and pervaporation and vapor permeation of water organic liquid mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 163-175.

- Ponce, P. (2010). *Inteligencia Artificial con Aplicaciones a la Ingeniería*. Ciudad de México: Alfaomega.
- Quiza, R., & Davim, J. P. (22 de 04 de 2018). *Researchgate*. Obtenido de https://www.researchgate.net/figure/Sample-of-a-feed-forward-neural-network_fig1_234055177
- Saha, K., Maheswari, U., Sikder, J., Chakraborty, S., Silverio, S., & Santos, J. C. (2017). Membranes as a tool to support biorefineries: Applications in enzymatic hydrolysis, fermentation and dehydration for bioethanol production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 873-890.
- Shao, J., Zhan, Z., Li, J., Wang, Z., Li, K., & Yan, Y. (2014). 8. Zeolite NaA membranes supported on alumina hollow fibers: Effect of support resistances on pervaporation performance . *Journal of Membrane Science*, 10-17.
- Sun, D., Li, B.-B., & Xu, Z.-L. (2013). Pervaporation of ethanol/water mixture by organophilic nano-silica filled PDMS composite membranes. *Desalination*, 159-166.
- Tan, M., He, G., Li, X., & Dong, Y. (2012). Prediction of the effects of preparation conditions on pervaporation performances of polydimethylsiloxane(PDMS)/ceramic composite membranes by backpropagation neural network and genetic algorithm. *Separation and Purification Technology*, 142-146.

ANEXOS

ANEXO A: Base de datos completa.

Article	Type	Flux (kg/m ² h)	T °C	Feed % water	Sep factor	Pressure (Pa)
The First Large-Scale Pervaporation Plant Using Tubular-Type Module with Zeolite NaA Membrane	NaA zeolite	1.1	75	5	10000	133
		2.15	75	10	10000	133
		4.53	105	10	10000	133
	Silica/acrylamide	0.3	50	10	3200	133
	GFT	0.01	80	5	9500	133
	CMC	0.052	30	10	2430	133
	PAA Polyion complex	1.63	60	5	3500	133
	Chitosan	0.1	60	10	6000	133
	Polymide	0.01	75	10	850	133
	Polymide (asymmetric)	0.22	60	10	280	133
	ZK-4	0.94	75	10	1800	133
	NaX	0.89	75	10	360	133
	NaY	1.59	75	10	130	133
	Sodalite	0.08	75	10	2	133
Tubular-type pervaporation module with Zeolite NaA membrane	NaA zeolite	0.772	50	10.09	46000	133
		2.08	75	10.09	42000	133
		8.37	120	10.09	47000	133
		0.396	50	5.02	44800	133
		1.1	75	5.02	5900	133
		2.35	95	5.02	5100	133
		4.3	120	5.02	5600	133
		0.079	50	1	500	133
		0.848	120	1	520	133
		0.004	50	0.05	470	133
		0.041	120	0.05	500	133
		1.63	50	79	>50000	133
		1.61	50	68	>50000	133
		1.48	50	48.9	>50000	133
		1.4	50	47.7	>50000	133
		1.38	50	46.5	>50000	133
		1.36	50	45.6	>50000	133
		1.46	50	40	>50000	133
		0.81	50	11.2	50000	133
		0.76	50	10	45000	133
		0.71	50	8.2	4500	133
		0.55	50	8.2	4900	133
		0.46	50	8	5300	133
		0.4	50	6	4900	133
		0.25	50	2.7	2200	133
		0.13	50	2	6000	133
		0.03	50	1	850	133
		0.08	50	1	900	140
0.08	50	1	890	216		
0.079	50	1	900	266		
0.078	50	1	870	533		

		0.066	50	1	863	716
		0.06	50	1	853	1333
		0.041	50	1	860	2000
		0.02	50	1	840	2666
		4.3	120	5	5680	133
		2.4	95	5	5000	133
		1.13	75	5	6000	133
		0.0367	50	5	5000	133
Zeolite NaA membrane preparation, single gas permeation and pervaporation and vapor permeation of water organic liquid mixtures	NaA zeolite	3.82	75	50	2700	13.3
		3.01	75	30	3000	13.3
		2.22	75	10	10000	13.3
		1.17	75	5	18000	13.3
		0.62	75	2	7000	13.3
		2.15	75	10	10000	13.3
		1.1	75	5	16000	13.3
		0.012	75	0.5	5100	13.3
Ethanol fermentation integrated with PDMS composite membrane	PDMS	0.445	30	96.1977186	4500	50
		0.44	30	92.3954373	4050	50
		0.5	30	88.5931559	4300	50
		0.515	30	84.7908745	4350	50
		0.57	30	80.9885932	4050	50
		0.3	20	98.8593156	10	50
		0.388	25	98.8593156	9.8	50
		0.5	30	98.8593156	9.7	50
		0.588	35	98.8593156	9.7	50
0.68	40	98.8593156	9.6	50		
Fluoride-mediated synthesis of high-flux chabazite membranes	Chabazite	3.1	75	8.06	220	
		4.3	75	8.06	350	
		6	75	8.06	2000	
		3.4	75	8.06	270	
		5	75	8.06	140	
		4.3	75	8.06	1400	
		2.8	75	8.06	1550	
		2.5	75	8.06	70	
		3.5	75	8.06	800	
		4.4	75	8.06	1220	
		6.4	75	8.06	120	
		10.8	75	8.06	20	
		3.4	75	8.06	75	
		3.8	75	8.06	1900	
		3	75	8.06	2200	
		6	75	8.06	2300	
		4.6	75	8.06	200	
		5	75	8.06	2700	
		4.8	75	8.06	2200	
		4.9	75	8.06	1900	
5.2	75	8.06	1800			
4.7	75	8.06	2900			
5.5	75	8.06	2100			
5.6	75	8.06	2200			
5.1	75	8.06	1900			
	ONS-PDMS	0.01125	30	6.253	13.06	100000

Pervaporation of ethanol-water mixture by organophilic nano-silica		0.0225	40	6.253	17.1	100000
		0.04812	50	6.253	21	100000
		0.11437	60	6.253	30.2	100000
		0.21	70	6.253	28.5	100000
		0.0113	60	6.253	10.85	75000
		0.0143	60	6.253	17.38	80000
		0.025	60	6.253	24.85	88000
		0.0583	60	6.253	28.81	94000
		0.114	60	6.253	30.21	100000
Pervaporation of ethanol-water mixtures using clinoptilolite and 4A filled sodium	Zeolite 10% wt 4A	0.09	25	2		4000
		0.093	25	5		4000
		0.13	25	10		4000
		0.15	25	15		4000
	Zeolite 7% wt 4A	0.078	25	2		4000
		0.0875	25	5		4000
		0.12	25	10		4000
		0.139	25	15		4000
	Zeolite 5% wt 4A	0.0685	25	2		4000
		0.08	25	5		4000
		0.108	25	10		4000
		0.133	25	15		4000
	Pristine	0.06	25	2		4000
		0.078	25	5		4000
		0.098	25	10		4000
		0.1125	25	15		4000
Zeolite NaA membranes supported on alumina hollow fibers Effect of support resistances on pervaporation performance	Zeolite	11.1	75	8.06	>10000	100000
		10.2	75	8.06	>10000	100000
		9.6	75	8.06	>10000	100000
		9	75	8.06	>10000	100000
		8.9	75	8.06	>10000	100000

Tabla 33: Base de datos completa clasificada por tipo de membrana y artículo del cual se obtuvo la información. Fuente: Autor.

ANEXO B: Gráficos de dispersión Flux vs T, C, Factor de Separación y P según el artículo del cual se extrajeron los datos.

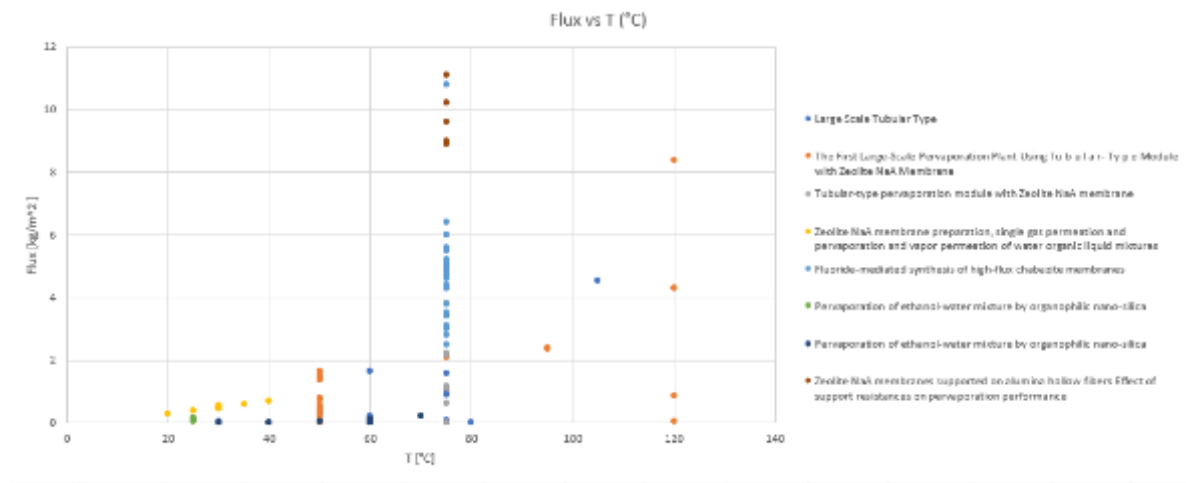


Figura 73: Gráfico de dispersión Flux vs Temperatura Fuente: Autor.

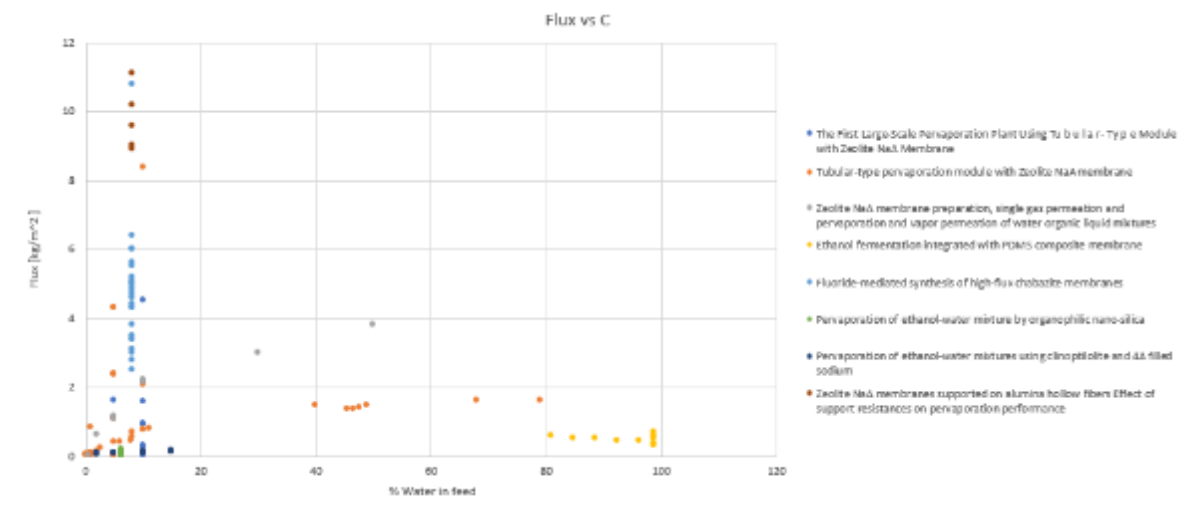


Figura 74: Gráfico de dispersión Flux vs Concentración. Fuente: Autor.



Figura 75: Gráfico de dispersión Flux vs Factor de separación. Fuente: Autor.

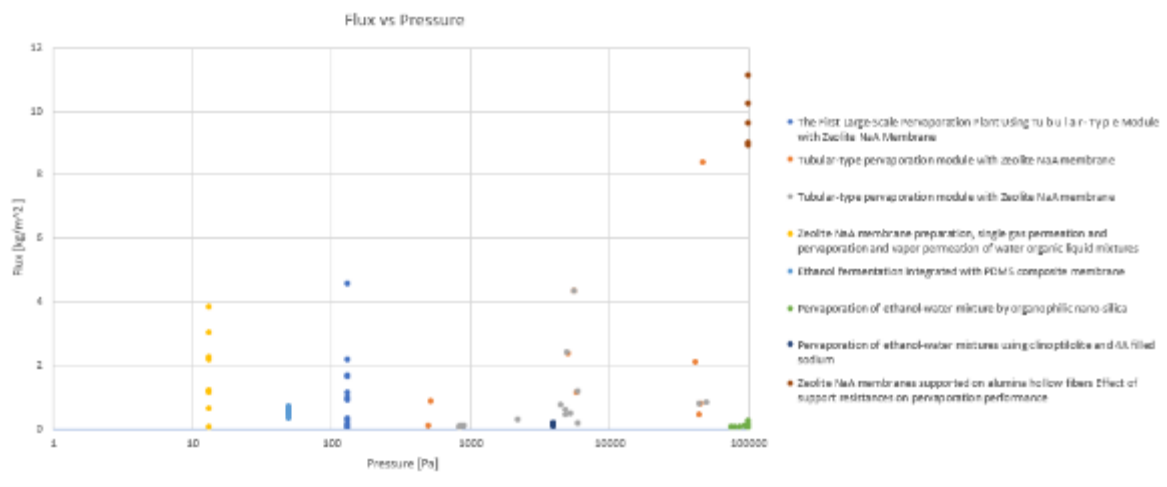


Figura 76: Gráfico de dispersión Flux vs Presión. Fuente: Autor.

ANEXO C: Resultados entrenamiento y validación de las RNA.

Clase	ID	L009G										PURELN										TAN6G									
		MSE	R Training	R Training	R Training	R Validation	Epoch	MSE	R Training	R Validation	R test	R All	Epoch	MSE	R Training	R Validation	R test	R All	Epoch												
2-Neuron	1	0.01726	0.8831	0.9256	0.9813	0.92169	8	1	0.04699	0.8926	0.9113	0.9077	0.8979	8	1	0.01806	0.9578	0.9587	0.9583	0.9584	8										
	2	0.004153	0.9157	0.9758	0.9224	0.9141	6	2	0.02617	0.9147	0.9147	0.9138	0.9129	0	2	0.04511	0.9474	0.9254	0.9268	0.9284	0										
	3	0.01307	0.9256	0.9342	0.9893	0.9309	8	3	0.01394	0.8926	0.9123	0.8813	0.8979	0	3	0.001257	0.9523	0.9885	0.9663	0.9499	5										
	4	0.002042	0.9452	0.9905	0.74541	0.91401	0	4	0.0020941	0.8842	0.9947	0.6922	0.91563	8	4	0.007293	0.9693	0.96201	0.91134	0.94949	1										
	5	0.017658	0.90148	0.9336	0.9981	0.91401	0	5	0.01226	0.9189	0.9611	0.9162	0.91563	0	5	0.002253	0.9382	0.95103	0.93689	0.94849	0										
	6	0.02318	0.77344	0.9975	0.9916	0.91401	0	6	0.0281489	0.9928	0.9426	0.9591	0.91563	0	6	0.005485	0.9744	0.98554	0.9506	0.94949	0										
	7	0.000959	0.91386	0.911	0.71413	0.91401	0	7	0.01757	0.9949	0.9482	0.9171	0.91563	0	7	0.0007434	0.9692	0.7915	0.44739	0.94949	0										
	8	0.005953	0.9152	0.9718	0.9163	0.91401	0	8	0.002021	0.9571	0.76639	0.8978	0.91563	0	8	0.007104	0.9607	0.9583	0.9471	0.94949	0										
	9	0.004212	0.9316	0.6241	0.9921	0.91401	0	9	0.01886	0.9121	0.9796	0.7608	0.915	1	9	0.003648	0.9478	0.9584	0.93979	0.94949	0										
	10	0.003771	0.88705	0.9807	0.92905	0.91401	0	10	0.0042338	0.9142	0.9728	0.9202	0.915	10	10	0.011868	0.95363	0.62475	0.9944	0.94949	0										
3-Neuron	PROM	0.004643	0.9257	0.91059	0.848915	0.94183	4	PROM	0.021018	0.9072	0.94125	0.8145	0.91012	8	PROM	0.008897	0.9677	0.97024	0.91251	0.9479	8										
	1	0.007522	0.9015	0.9901	0.7997	0.91397	4	1	0.002923	0.9644	0.8539	0.8792	0.9146	8	1	0.001942	0.9855	0.97076	0.96174	0.94291	8										
	2	0.01578	0.9184	0.9184	0.9569	0.91197	0	2	0.008242	0.8611	0.9581	0.9409	0.88616	0	2	0.0008249	0.9574	0.99991	0.97841	0.95651	4										
	3	0.009674	0.9456	0.8174	0.9997	0.91197	0	3	0.013676	0.9368	0.9194	0.7204	0.91095	6	3	0.001462	0.9824	0.4332	0.8741	0.95651	0										
	4	0.003665	0.9456	0.7096	0.9907	0.91197	0	4	0.001942	0.9641	0.9581	0.9592	0.91095	4	4	0.004324	0.9586	0.9702	0.9852	0.95651	0										
	5	0.009857	0.9286	0.848	0.9810	0.92941	8	5	0.004254	0.8978	0.8107	0.9792	0.91095	0	5	0.006482	0.9617	0.9786	0.6333	0.95651	0										
	6	0.01789	0.9524	0.8077	0.8524	0.93066	8	6	0.01327	0.9174	0.8373	0.12266	0.91095	0	6	0.00052	0.9654	0.88972	0.96782	0.95651	0										
	7	0.00365	0.9628	0.97066	0.9246	0.93066	0	7	0.01488	0.9169	0.2728	0.9521	0.91095	0	7	0.01198	0.9624	0.7728	0.96762	0.95651	0										
	8	0.01072	0.9382	0.9175	0.9621	0.93066	0	8	0.0071846	0.9241	0.9700	0.8473	0.91126	2	8	0.005246	0.9654	0.9743	0.87241	0.95651	0										
	9	0.01478	0.9709	0.9577	0.9646	0.8486	5	9	0.04507	0.9022	0.7376	0.8891	0.91126	0	9	0.007966	0.9478	0.99372	0.83739	0.95651	0										
4-Neuron	10	0.001805	0.9265	0.9928	0.9928	0.9486	0	10	0.01201	0.9092	0.9487	0.8162	0.91126	10	10	0.00156	0.8856	0.9998	0.96023	0.95651	0										
	PROM	0.0120738	0.93113	0.910304	0.88171	0.92047	4	PROM	0.0118146	0.907932	0.79527	0.77449	0.90665	8	PROM	0.00420487	0.96178	0.99041	0.84993	0.91511	12										
	1	0.011208	0.87071	0.9813	0.9488	0.9094	5	1	0.02046	0.84736	0.9097	0.9097	0.8545	0.97863	8	1	0.003942	0.91187	0.9046	0.93226	0.9479	2									
	2	0.007138	0.9374	0.9825	0.9197	0.92132	2	2	0.01401	0.9148	0.9534	0.4176	0.91501	2	2	0.017408	0.87105	0.74919	0.9462	0.9479	3										
	3	0.0039791	0.8841	0.99795	0.95718	0.92352	0	3	0.01601	0.9287	0.9483	0.9399	0.91501	0	3	0.0018485	0.90213	0.99117	0.92119	0.92679	3										
	4	0.01464	0.9379	0.9279	0.91293	0.93977	4	4	0.0004792	0.9262	0.7164	0.54613	0.91501	0	4	0.0025883	0.9502	0.96475	0.96117	0.92679	0										
	5	0.01318	0.9649	0.78817	0.99603	0.94787	0	5	0.0042153	0.8834	0.8895	0.8761	0.91501	0	5	0.013027	0.91549	0.91588	0.96929	0.92679	0										
	6	0.014178	0.8761	0.99603	0.9964	0.94787	0	6	0.0064809	0.9279	0.8006	0.8673	0.91501	0	6	0.003808	0.9148	0.96156	0.9634	0.9479	0										
	7	0.0066729	0.9654	0.9438	0.91828	0.94787	0	7	0.0071567	0.88675	0.61149	0.91501	0	7	0.0040133	0.91022	0.9082	0.9841	0.92679	0											
	8	0.01565	0.87891	0.7521	0.92173	0.84787	0	8	0.003084	0.9296	0.83789	0.95761	0.91501	0	8	0.02476	0.93309	0.89209	0.9936	0.92679	0										
5-Neuron	9	0.003665	0.9628	0.97066	0.9246	0.93066	0	9	0.00666	0.96687	0.9618	0.8668	0.91501	0	9	0.003888	0.94238	0.94868	0.94868	0.9479	0										
	10	0.0043173	0.9528	0.9723	0.90239	0.93023	1	10	0.003262	0.9098	0.9957	0.9624	0.91501	0	10	0.0069518	0.91284	0.99184	0.95568	0.92679	0										
	PROM	0.0094795	0.93479	0.95511	0.903726	0.939307	4	PROM	0.0115028	0.90543	0.76146	0.80626	0.91177	8	PROM	0.0173882	0.94476	0.92027	0.81206	0.89031	12										
	1	0.007406	0.9011	0.9418	0.9567	0.94267	4	1	0.007527	0.9391	0.9058	0.8464	0.91468	2	1	0.00312	0.94027	0.94027	0.94027	0.9479	2										
	2	0.009843	0.95991	0.9475	0.9882	0.94267	0	2	0.009774	0.9291	0.9208	0.2484	0.91748	0	2	0.0045064	0.97439	0.99137	0.95796	0.9479	2										
	3	0.0059704	0.91815	0.97267	0.96604	0.94267	0	3	0.0026585	0.9928	0.97643	0.5018	0.91748	0	3	0.0007709	0.8452	0.9988	0.98035	0.9479	0										
	4	0.002618	0.95978	0.9647	0.87973	0.94505	1	4	0.0027815	0.9686	0.5338	0.9838	0.94114	8	4	0.012423	0.9484	0.41487	0.9843	0.9479	0										
	5	0.008142	0.9747	0.9598	0.87207	0.95513	8	5	0.003313	0.9786	0.9465	0.9384	0.94511	2	5	0.01009	0.94511	0.90813	0.96617	0.9479	0										
	6	0.0044092	0.90097	0.9912	0.9453	0.97813	0	6	0.0064744	0.8787	0.9408	0.9947	0.94511	0	6	0.01243	0.96161	0.9089	0.95128	0.9479	0										
	7	0.0017991	0.9423	0.9823	0.9526	0.94533	0	7	0.0013094	0.91701	0.93767	0.99913	0.94511	0	7	0.026202	0.9817	0.14489	0.96239	0.9479	0										
8	0.01144	0.9784	0.9543	0.8413	0.93088	7	8	0.0017069	0.9156	0.9313	0.9954	0.94511	0	8	0.011208	0.9566	0.91817	0.9078	0.9479	0											
6-Neuron	9	0.0047182	0.9642	0.9943	0.97848	0.93634	0	9	0.0004799	0.9352	0.9644	0.8377	0.94511	0	9	0.0040113	0.9582	0.99149	0.9742	0.9479	0										
	10	0.0041038	0.9163	0.9747	0.89913	0.93634	0	10	0.0005599	0.9636	0.9659	0.9513	0.94511	0	10	0.014247	0.94635	0.9319	0.98712	0.9479	0										
	PROM	0.0096868	0.90139	0.90864	0.80139	0.93139	4	PROM	0.0017688	0.9138	0.9138	0.9138	0.9138	8	PROM	0.0032368	0.94635	0.94635	0.94635	0.94635	8										
	1	0.0071045	0.9279	0.9779	0.9479	0.92769	5	1	0.00874	0.94855	0.7758	0.9244	0.916	8	1	0.006814	0.94295	0.96075	0.91862	0.91612	8										
	2	0.003578	0.96902	0.96494	0.7443	0.94501	5	2	0.0060207	0.9433	0.53665	0.96249	0.94669	8	2	0.01411	0.98278	0.77284	0.9711	0.95664	3										
	3	0.000476	0.97407	0.9999	0.98979	0.94917	4	3	0.0024242	0.9869	0.9869	0.9798	0.94917	0	3	0.002286	0.96296	0.97479	0.98789	0.96884	0										
	4	0.0020731	0.9211	0.9797	0.9972	0.94917	0	4	0.0033461	0.9183	0.9669	0.9383	0.94917	0	4	0.007246	0.9788	0.9788	0.9788	0.9788	0										
	5	0.017097	0.96805	0.76126	0.83148	0.94917	0	5	0.0048955	0.99174	0.94316	0.8773	0.94917	0	5	0.00189229	0.96939	0.91113	0.92401	0.95664	0										
	6	0.002365	0.93991	0.98838	0.94625	0.94917	0	6	0.0058844	0.957	0.98471	0.4202	0.94917	0	6	0.0039752	0.97624	0.97699	0.97699	0.95664	0										
	7	0.001418	0.9869	0.99749	0.99749	0.94917	0	7	0.0016712	0.96246	0.96246	0.96246	0.94917	0	7	0.0046617	0.94917	0.94917	0.94917	0.95664	0										
8	0.01152	0.96991	0.96048	0.40886	0.94917	0	8	0.0044167	0.9097	0.9091	0.8444	0.94917	0	8	0.0065128	0.97101	0.97039	0.92891	0.95664	0											
7-Neuron	9	0.0034251	0.92113	0.98375	0.96402	0.94917	0	9	0.011537	0.9561	0.81043	0.9383	0.94868	5	9	0.0071276	0.96329	0.88151	0.99629	0.95664	0										
	10</																														

Iteration	LOGSIS										PUREIN										FANGIS															
	MSE	R Training	Validation	R test	R All	Epoch	MSE	R Training	Validation	R test	R All	Epoch	MSE	R Training	Validation	R test	R All	Epoch	MSE	R Training	Validation	R test	R All	Epoch												
1	1	0.1927	0.7374	0.6440	0.5513	0.6899	7	0.023487	0.7274	0.8316	0.6973	0.2454	2	0.036119	0.8424	0.8979	0.9601	0.2115	1	0.041734	0.8434	0.9014	0.9601	0.2115	1											
	2	0.04472	0.6267	0.6783	0.6113	0.682	5	0.041374	0.7811	0.7026	0.7482	0	2	0.001512	0.8468	0.9014	0.9601	0.2115	1	0.041734	0.8434	0.9014	0.9601	0.2115	1											
	3	0.1183	0.7342	0.6877	0.6669	0.6917	8	0.011416	0.7470	0.52102	0.9568	0.7454	0	3	0.022445	0.84878	0.9478	0.9715	0.2115	1	0.022445	0.84878	0.9478	0.9715	0.2115	1										
	4	0.1892	0.7119	0.6123	0.4801	0.682	0	4	0.061329	0.8055	0.4515	0.8239	0.7454	0	4	0.001723	0.9399	0.9462	0.9781	0.2115	1	0.001723	0.9399	0.9462	0.9781	0.2115	1									
	5	0.1559	0.7848	0.5637	0.6054	0.6639	1	5	0.0358	0.5831	0.9376	0.8221	0.7454	0	5	0.007891	0.8434	0.9014	0.9601	0.2115	1	0.007891	0.8434	0.9014	0.9601	0.2115	1									
	6	0.1675	0.5544	0.6831	0.7657	0.685	1	6	0.0485	0.7592	0.6541	0.8081	0.7454	0	6	0.004305	0.96134	0.9478	0.9715	0.2115	1	0.004305	0.96134	0.9478	0.9715	0.2115	1									
	7	0.14747	0.5429	0.7697	-0.01389	0.6917	4	7	0.01603	0.3773	0.69134	0.7412	0.7454	0	7	0.01322	0.93234	0.9793	0.9971	0.2115	1	0.01322	0.93234	0.9793	0.9971	0.2115	1									
	8	0.1345	0.6929	0.7078	0.8205	0.6917	0	8	0.01589	0.5385	0.03268	0.9746	0.7454	0	8	0.002031	0.93234	0.9831	0.9478	0.2115	1	0.002031	0.93234	0.9831	0.9478	0.2115	1									
	9	0.1789	0.7334	0.6207	0.6207	0.6917	0	9	0.04707	0.531	0.7036	0.8139	0.7454	0	9	0.000317	0.9544	0.9478	0.9715	0.2115	1	0.000317	0.9544	0.9478	0.9715	0.2115	1									
	10	0.1765	0.7215	0.6153	0.6123	0.6917	0	10	0.015158	0.7534	0.7473	0.7508	0.7454	0	10	0.003208	0.9473	0.9794	0.9794	0.2115	1	0.003208	0.9473	0.9794	0.9794	0.2115	1									
PROM											0.160722	0.7154	0.58815	0.64957	0.69546	0.6956	0.045211	0.7527	0.62428	0.82769	0.7427	0.7427	0.000777	0.94792	0.9468	0.9538	0.9538	0.2115	1	0.000777	0.94792	0.9468	0.9538	0.9538	0.2115	1
2	1	0.2047	0.40747	0.4378	0.7345	0.392	2	0.037403	0.7853	0.76109	0.6402	0.7449	2	0.010125	0.8885	0.9801	0.9524	0.2924	2	0.010125	0.8885	0.9801	0.9524	0.2924	2											
	2	0.1708	0.70845	0.3782	-0.018077	0.3582	0	3	0.014024	0.7296	0.76679	0.8006	0.7449	0	3	0.006346	0.84662	0.9581	0.976	0.4824	2	0.006346	0.84662	0.9581	0.976	0.4824	2									
	3	0.1486	0.3487	0.39982	0.51466	0.382	0	4	0.01209	0.7502	0.83209	0.6825	0.7449	0	4	0.008643	0.8178	0.9407	0.9339	0.4824	2	0.008643	0.8178	0.9407	0.9339	0.4824	2									
	4	0.1627	0.5625	0.4684	-0.1291	0.382	0	5	0.048676	0.7059	0.7603	0.014963	0.74523	0	5	0.072285	0.979328	0.9471	0.8319	0.95577	2	0.072285	0.979328	0.9471	0.8319	0.95577	2									
	5	0.1832	0.42839	0.3036	0.71496	0.39641	0	6	0.010881	0.73817	0.78856	0.7754	0.74523	0	6	0.0013816	0.93667	0.96247	0.94847	0.95577	2	0.0013816	0.93667	0.96247	0.94847	0.95577	2									
	6	0.1567	0.383	0.6078	0.6813	0.39641	3	7	0.023245	0.3614	0.84866	0.81995	0.74523	0	7	0.006663	0.91409	0.9732	0.94847	0.95577	2	0.006663	0.91409	0.9732	0.94847	0.95577	2									
	7	0.1519	0.45182	0.8502	-0.11396	0.39641	0	8	0.02439	0.7232	0.85055	0.69822	0.74523	0	8	0.0015515	0.95563	0.99132	0.95003	0.95577	2	0.0015515	0.95563	0.99132	0.95003	0.95577	2									
	8	0.18514	0.30636	0.75309	0.94713	0.39641	0	9	0.018206	0.71753	0.7648	0.80842	0.74523	0	9	0.00061137	0.96486	0.9826	0.95003	0.95577	2	0.00061137	0.96486	0.9826	0.95003	0.95577	2									
	9	0.1721	0.4190	0.477	0.77124	0.39641	0	10	0.016567	0.7842	0.77445	0.81041	0.74523	0	10	0.01208	0.96704	0.9904	0.9716	0.95577	2	0.01208	0.96704	0.9904	0.9716	0.95577	2									
	10	0.1744	0.43136	0.619413	0.404755	0.40445	0	PROM	0.024128	0.74261	0.79957	0.87491	0.74111	0.74111	0.001381	0.931108	0.94621	0.94621	0.94621	0.94621	0.2115	1	0.001381	0.931108	0.94621	0.94621	0.94621	0.2115	1							
3	1	0.14851	0.6674	0.84786	0.32667	0.69703	8	0.011993	0.7906	0.69272	0.57716	0.4059	3	1	0.001481	0.9242	0.96692	0.96671	0.93017	8	0.001481	0.9242	0.96692	0.96671	0.93017	8										
	2	0.2118	0.6239	0.7913	0.8978	0.69708	7	2	0.014062	0.7024	0.95045	0.6445	0.4059	0	2	0.008071	0.9427	0.84427	0.7953	0.4834	8	0.008071	0.9427	0.84427	0.7953	0.4834	8									
	3	0.1529	0.6076	0.8841	0.9418	0.69691	8	3	0.021101	0.7582	-0.006254	0.8461	0.4059	2	3	0.002421	0.93479	0.95829	0.9024	0.4834	8	0.002421	0.93479	0.95829	0.9024	0.4834	8									
	4	0.1824	0.7841	0.68889	0.041279	0.68919	7	4	0.0090617	0.7461	0.92847	0.50207	0.77449	0	4	0.0083177	0.95950	0.8347	0.84306	0.4834	8	0.0083177	0.95950	0.8347	0.84306	0.4834	8									
	5	0.14904	0.72179	0.61376	0.95038	0.69354	5	5	0.036232	0.7833	0.87945	0.62784	0.4059	0	5	0.0038518	0.94837	0.97719	0.83208	0.4834	8	0.0038518	0.94837	0.97719	0.83208	0.4834	8									
	6	0.1552	0.83484	0.8781	0.9002	0.69354	1	6	0.007934	0.8453	0.8253	0.84806	0.4059	0	6	0.001087	0.94468	0.94468	0.94468	0.4834	8	0.001087	0.94468	0.94468	0.94468	0.4834	8									
	7	0.1986	0.7097	0.86892	0.33206	0.69354	0	7	0.007034	0.9023	0.64951	0.64239	0.4059	0	7	0.010324	0.95201	0.9589	0.9589	0.4834	8	0.010324	0.95201	0.9589	0.9589	0.4834	8									
	8	0.1531	0.73067	0.8455	0.73186	0.69354	0	8	0.019722	0.75072	0.77088	0.78336	0.4059	0	8	0.0048463	0.96009	0.9724	0.76234	0.4834	8	0.0048463	0.96009	0.9724	0.76234	0.4834	8									
	9	0.1468	0.74007	0.8681	0.88314	0.69354	0	9	0.004808	0.7528	0.62389	0.60378	0.4059	0	9	0.0004001	0.96359	0.96359	0.96359	0.4834	8	0.0004001	0.96359	0.96359	0.96359	0.4834	8									
	10	0.18827	0.7861	0.1732	-0.34687	0.69354	0	10	0.0092943	0.82382	0.96555	0.19638	0.71769	0	10	0.0099058	0.94943	0.8054	0.97133	0.4834	8	0.0099058	0.94943	0.8054	0.97133	0.4834	8									
PROM											0.16644	0.7436	0.591307	0.644716	0.69352	0.69352	0.0118715	0.79291	0.702806	0.60389	0.7443	0.7443	0.007008	0.946117	0.911902	0.91185	0.94343	0.4834	8	0.007008	0.946117	0.911902	0.91185	0.94343	0.4834	8
4	1	0.1947	0.6217	0.6777	0.6215	0.6972	7	0.014442	0.7482	0.74009	0.7512	0.7443	1	1	0.001481	0.8424	0.94621	0.94621	0.4834	8	0.001481	0.8424	0.94621	0.94621	0.4834	8										
	2	0.1947	0.6217	0.6777	0.6215	0.6972	7	2	0.008074	0.7473	0.74009	0.7512	0.7443	0	2	0.0014508	0.8391	0.94621	0.94621	0.4834	8	0.0014508	0.8391	0.94621	0.94621	0.4834	8									
	3	0.14763	0.78738	0.8918	0.6414	0.69795	3	3	0.024642	0.8027	0.88168	0.88219	0.7443	0	3	0.018981	0.97071	0.91829	0.806	0.4834	8	0.018981	0.97071	0.91829	0.806	0.4834	8									
	4	0.14763	0.78738	0.8918	0.6414	0.69795	3	4	0.010332	0.69025	0.7974	0.88239	0.7443	0	4	0.00074389	0.96372	0.9915	0.806	0.4834	8	0.00074389	0.96372	0.9915	0.806	0.4834	8									
	5	0.14763	0.78738	0.8918	0.6414	0.69795	3	5	0.006411	0.69634	0.84329	0.8171	0.7443	0	5	0.00074389	0.96372	0.9915	0.806	0.4834	8	0.00074389	0.96372	0.9915	0.806	0.4834	8									
	6	0.14763	0.78738	0.8918	0.6414	0.69795	3	6	0.013898	0.6888	0.62006	0.72776	0.7443	0	6	0.00048164	0.93706	0.9434	0.9817	0.4834	8	0.00048164	0.93706	0.9434	0.981											

Iteration	COSMOS						PUEBLA						TAMISO							
	Validation	R Training	Validation	R test	R All	Epoch	Validation	R Training	Validation	R test	R All	Epoch	Validation	R Training	Validation	R test	R All	Epoch		
1	0.16137	0.7603	-0.0843	0.2826	0.6306	8	1	0.07786	0.875	0.8006	0.7281	0.7913	5	1	0.01263	0.9105	0.8317	0.7716	0.8318	0
2	0.16143	0.71181	0.67842	0.12036	0.6303	6	2	0.15206	0.8503	0.4001	-0.18093	0.6308	0	2	0.01823	0.9105	0.8715	0.5609	0.9318	0
3	0.19922	0.68415	0.88546	0.519	0.6303	0	3	0.007275	0.7820	0.8943	0.746	0.7913	0	3	0.000838	0.90252	0.8675	0.96234	0.8318	0
4	0.16466	0.79139	0.9218	0.6155	0.6303	0	4	0.2078	0.8269	0.12461	0.6706	0.6303	0	4	0.01863	0.9369	0.9574	0.6728	0.9318	0
5	0.16333	0.65433	0.6045	0.04871	0.6303	0	5	0.15414	0.89018	-0.2979	0.7892	0.6303	0	5	0.03043	0.92783	0.90734	0.95204	0.9318	0
6	0.17733	0.70092	-0.05167	0.78317	0.6303	0	6	0.13597	0.72167	0.8719	0.7216	0.6303	0	6	0.035022	0.88874	0.93277	0.89608	0.9318	0
7	0.20975	0.68016	0.20248	0.41248	0.6303	0	7	0.20134	0.8918	0.8243	0.9569	0.6303	0	7	0.02524	0.9478	0.9200	0.8584	0.9318	0
8	0.19568	0.69238	0.20238	0.79229	0.6303	0	8	0.197	0.8739	0.7953	0.9566	0.6303	0	8	0.005311	0.9473	0.8858	0.9748	0.9318	0
9	0.18176	0.48746	0.9664	0.64133	0.6303	0	9	0.14927	0.8641	0.90147	0.34625	0.6303	0	9	0.006204	0.98594	0.87376	0.41944	0.9318	0
10	0.18494	0.69239	0.16541	0.49007	0.6303	0	10	0.19134	0.8382	0.23602	0.1485	0.6303	0	10	0.0065014	0.91804	0.8529	0.97869	0.9318	0
FROM	0.18234	0.76412	0.35683	0.50128	0.6303	1	FROM	0.1468433	0.81941	0.19206	0.69318	0.66278	1	FROM	0.0061858	0.92062	0.94417	0.8188	0.9318	1
1	0.2002	0.47188	0.7852	0.34286	0.45259	2	1	0.017	0.7652	0.64417	0.819	0.83032	1	1	0.0012227	0.92785	0.99586	0.43743	0.86438	7
2	0.21683	0.24484	0.9351	0.64616	0.4321	3	2	0.0061154	0.82354	0.86384	0.76046	0.81137	1	2	0.0021263	0.92207	0.82605	0.93356	0.90767	8
3	0.20544	0.57166	-0.14603	0.40033	0.4521	0	3	0.0086601	0.8183	0.89513	0.45766	0.81137	0	3	0.0017847	0.8808	0.90225	0.85001	0.9320	6
4	0.18237	0.35164	-0.03814	0.80095	0.4461	0	4	0.018512	0.79046	0.95101	0.5007	0.81137	0	4	0.0011987	0.97532	0.91271	0.985	0.97517	8
5	0.15026	0.18538	0.58955	0.36664	0.4463	0	5	0.0055062	0.83487	0.83277	0.62031	0.81137	0	5	0.0000309	0.95779	0.88719	0.90956	0.84062	4
6	0.19635	0.42489	-0.12128	0.3838	0.4463	0	6	0.019183	0.71701	0.9388	0.78089	0.81137	0	6	0.0019007	0.97877	0.77111	0.86638	0.94062	0
7	0.2181	0.49363	0.27731	-0.18602	0.4463	0	7	0.0033645	0.80199	0.92176	0.80167	0.81137	0	7	0.0029259	0.97955	0.946	0.97685	0.9745	1
8	0.14491	0.44265	0.1746	0.7793	0.4463	0	8	0.0075813	0.83834	0.5286	0.89042	0.81137	0	8	0.0007224	0.97	0.87783	0.98834	0.9745	0
9	0.19138	0.50506	-0.29041	0.68892	0.4463	0	9	0.029136	0.82988	0.84377	0.90879	0.81137	0	9	0.0002224	0.97783	0.96677	0.98827	0.9745	0
10	0.21855	0.51582	0.36869	0.67066	0.4463	0	10	0.0069911	0.79251	0.81132	0.8628	0.81137	0	10	0.0004569	0.9862	0.99573	0.98737	0.9745	0
FROM	0.1901	0.42125	0.34717	0.43364	0.44608	1	FROM	0.0188075	0.81207	0.82264	0.73804	0.81025	1	FROM	0.0018016	0.9734	0.941216	0.87647	0.94518	1
1	0.19895	0.67026	0.96248	0.84411	0.7972	5	1	0.0168236	0.79927	0.81612	0.76026	0.79232	4	1	0.032488	0.92025	0.96113	0.8533	0.81898	3
2	0.19804	0.84244	0.88176	0.81852	0.7672	0	2	0.016461	0.82191	0.7926	0.89881	0.79232	0	2	0.17523	0.86021	0.94113	0.10653	0.7672	0
3	0.19566	0.81911	0.84408	-0.07507	0.7672	0	3	0.13765	0.87071	0.8272	0.84562	0.7672	0	3	0.030831	0.84795	0.97503	0.8669	0.83711	6
4	0.18283	0.69605	0.89048	0.92863	0.7672	0	4	0.1917	0.83494	0.82717	0.47722	0.7672	0	4	0.0056187	0.97409	0.81898	0.88041	0.94449	2
5	0.18533	0.79388	-0.056208	0.43393	0.7672	0	5	0.13625	0.8388	0.77628	0.81898	0.7672	0	5	0.0009773	0.9599	0.91234	0.92514	0.94449	0
6	0.1987	0.82988	0.24187	0.51816	0.7672	0	6	0.22542	0.797	0.099345	0.31509	0.7672	0	6	0.0011316	0.97509	0.9834	0.68653	0.94449	0
7	0.19122	0.7147	0.94002	0.88334	0.7672	0	7	0.17172	0.7864	0.4591	0.013094	0.7672	0	7	0.0004182	0.95051	0.86318	0.93721	0.94449	0
8	0.20917	0.74033	0.200	0.81888	0.7672	0	8	0.0188661	0.80879	0.82717	0.88637	0.7672	0	8	0.0012039	0.9311	0.91869	0.92076	0.94449	0
9	0.19759	0.81307	0.82544	0.9349	0.7672	0	9	0.19079	0.80346	0.82831	0.86487	0.7672	0	9	0.0008973	0.94754	0.96324	0.83744	0.94449	0
10	0.21419	0.78287	0.4744	0.95848	0.7672	0	10	0.20908	0.78853	0.63038	0.97947	0.7672	0	10	0.0009784	0.90324	0.99736	0.87904	0.94449	0
FROM	0.1959	0.79019	0.649024	0.72073	0.7672	1	FROM	0.1134415	0.85081	0.646445	0.680784	0.79208	1	FROM	0.0244824	0.93460	0.96947	0.96231	0.9126	1
1	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	1	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	1	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
2	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	2	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	2	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
3	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	3	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	3	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
4	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	4	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	4	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
5	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	5	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	5	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
6	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	6	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	6	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
7	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	7	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	7	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
8	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	8	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	8	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
9	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	9	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	9	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
10	0.1946	0.6935	-0.49006	0.30326	0.62839	0	10	0.0019805	0.7904	0.93891	0.93811	0.79411	0	10	0.0017096	0.95112	0.97114	0.9749	0.94692	6
FROM	0.19767	0.67311	-0.13495	0.48037	0.62839	1	FROM	0.0122646	0.79794	0.4441	0.94872	0.81025	1	FROM	0.0021728	0.97112	0.98213	0.94808	0.97064	1
1	0.21724	-0.25863	-0.47138	-0.48133	-0.13495	0	1	0.024887	0.82862	0.79301	0.73862	0.80671	1	1	0.0072425	0.82286	0.90411	0.88383	0.798	1
2	0.14679	0.24177	-0.2408	-0.42161	-0.13495	0	2	0.0015715	0.8459	0.8017	0.86298	0.80671	0	2	0.0068877	0.97051	0.94418	0.82508	0.94892	0
3	0.19816	0.30881	0.08849	0.4881	-0.13495	0	3	0.0040674	0.84919	0.82917	0.9148	0.80671	0	3	0.0078992	0.94311	0.98475	0.60962	0.94892	0
4	0.18717	0.32674	-0.62627	0.88132	-0.13495	0	4	0.0010024	0.77627	0.85688	0.91425	0.80671	0	4	0.0011438	0.94311	0.97017	0.87996	0.94892	0
5	0.20054	0.39176	-0.18128	0.33313	-0.13495	0	5	0.0040454	0.84919	0.82917	0.9148	0.80671	0	5	0.0011438	0.94311	0.97017	0.87996	0.94892	0
6	0.19819	0.2833	-0.04564	0.001769	-0.13495	0	6	0.0056165	0.81373	0.67012	0.8253	0.81049	1	6	0.0047574	0.9649	0.95173	0.6743	0.94892	0
7																				

Validación	LDG9G					PURELN					TANGS						
	R Training	R Validation	R Test	R All	Epoch	Validación	R Training	R Validation	R Test	R All	Epoch	Validación	R Training	R Validation	R Test	R All	Epoch
1	0.20318	0.2586	0.232	0.42377	0	0.008744	0.7841	0.5338	0.6242	0.75386	0	0.005797	0.7256	0.9386	0.7004	0.7549	0
2	0.18758	0.2346	0.16604	0.27295	0	0.023915	0.73117	0.6496	0.64762	0.75386	0	0.001832	0.77316	0.86126	0.63355	0.7549	0
3	0.18862	0.25247	0.48481	0.01792	0	0.004799	0.8395	0.8948	0.8191	0.7713	0	0.003182	0.7426	0.884	0.7736	0.7549	0
4	0.2029	0.2775	0.26297	0.3507	0	0.017795	0.78975	0.9326	0.24833	0.7713	0	0.01121	0.89376	0.9285	0.7549	0.7549	0
5	0.18452	0.2428	0.096116	0.05874	0	0.006609	0.83156	0.69136	0.5758	0.7713	0	0.007113	0.78622	0.8784	0.024517	0.7549	0
6	0.17199	0.246	0.24912	0.34265	0	0.005091	0.74977	0.87107	0.7442	0.77625	0	0.013463	0.84439	0.9592	0.74711	0.7549	0
7	0.2017	0.2322	0.17378	0.0481	0	0.002642	0.80101	0.9685	0.81113	0.77625	0	0.006464	0.9218	0.9379	0.7021	0.7838	0
8	0.20182	0.2972	0.48898	0.009698	0	0.004709	0.80407	0.8142	0.74395	0.77625	0	0.0080797	0.78896	0.93763	0.7611	0.7838	0
9	0.17021	0.15533	0.20685	0.28927	0	0.018419	0.77358	0.6043	0.932	0.77113	2	0.0039445	0.74505	0.96969	0.7732	0.7838	0
10	0.17334	0.19694	0.20381	0.002033	0	0.001432	0.83203	0.82011	0.99096	0.77113	0	0.006441	0.92636	0.93571	0.6699	0.7838	0
FROM	0.18479	0.21067	0.084234	0.273449	0	0.0045176	0.78711	0.71824	0.72054	0.76203	0	0.0023027	0.77708	0.81444	0.707611	0.76418	0
1	0.19274	0.19441	0.36485	0.11128	0	0.01379	0.64695	0.9091	0.94459	0.76992	2	0.003301	0.84805	0.98287	0.80711	0.94579	0
2	0.19402	0.2524	0.28442	0.1893	0	0.002183	0.7608	0.5614	0.90567	0.76992	0	0.004708	0.96716	0.92037	0.95007	0.9379	0
3	0.1822	0.2131	0.15063	0.11693	0	0.0089744	0.76119	0.88055	0.4126	0.77661	2	0.0017642	0.97524	0.97479	0.93034	0.95759	0
4	0.22989	0.18383	0.37229	0.19265	0	0.005873	0.81555	0.92536	0.89368	0.77664	1	0.0029619	0.93669	0.99233	0.99103	0.95759	0
5	0.18211	0.2102	0.2162	0.04148	0	0.0048697	0.7996	0.8848	0.6774	0.77664	0	0.0047928	0.91024	0.899	0.9896	0.95759	0
6	0.22964	0.2185	0.24839	0.1836	0	0.005363	0.7697	0.89808	0.62923	0.77664	0	0.0007792	0.93702	0.92747	0.9737	0.95759	0
7	0.18387	0.2665	0.19733	0.08755	0	0.0045655	0.77173	0.9381	0.83475	0.77664	0	0.0007061	0.97336	0.99112	0.9528	0.95104	0
8	0.18387	0.18942	0.088019	0.11885	0	0.007762	0.77177	0.83989	0.7388	0.77664	0	0.0046928	0.94673	0.95447	0.8318	0.95104	0
9	0.18135	0.17621	0.37654	0.18242	0	0.002041	0.8376	0.92069	0.82441	0.7768	1	0.0029568	0.97962	0.96041	0.98016	0.95915	0
10	0.14032	0.2084	0.22977	0.14032	0	0.0044297	0.7679	0.84741	0.78029	0.7768	0	0.0032916	0.97743	0.98093	0.86913	0.95915	0
FROM	0.18781	0.20395	0.20049	0.202205	0	0.0091823	0.767406	0.79643	0.649111	0.77525	0	0.0004214	0.96139	0.93988	0.897183	0.95442	0
1	0.18758	0.0447	0.1816	0.1994	0	0.00375	0.7816	0.9307	0.81199	0.7705	1	0.0018387	0.93203	0.93995	0.7688	0.90168	0
2	0.1803	0.11459	0.14999	0.18319	0	0.0071592	0.7776	0.70407	0.9581	0.77449	1	0.0005028	0.94556	0.95028	0.84741	0.93798	0
3	0.2029	0.07389	0.30143	0.054945	0	0.0020793	0.78466	0.72842	0.77133	0.77449	0	0.001767	0.93723	0.97238	0.77869	0.93798	0
4	0.18452	0.07848	0.28048	0.178	0	0.001678	0.8238	0.8048	0.64887	0.77449	0	0.0002078	0.93473	0.9335	0.9503	0.93798	0
5	0.1909	0.090708	0.038209	0.011731	0	0.011663	0.77211	0.8368	0.67852	0.77638	2	0.00382	0.95709	0.83141	0.94221	0.9358	0
6	0.20172	0.02949	0.2804	0.056114	0	0.024249	0.64746	0.91924	0.95912	0.77638	0	0.0020306	0.93048	0.97425	0.86752	0.9358	0
7	0.2032	0.06134	0.13998	0.11168	0	0.008209	0.81972	0.96338	0.6708	0.77638	0	0.003026	0.94888	0.93819	0.9588	0.9358	0
8	0.17021	0.09286	0.005116	0.1626	0	0.002931	0.81929	0.93529	0.62831	0.77638	0	0.0013714	0.93938	0.95407	0.9376	0.9358	0
9	0.17384	0.021312	0.19385	0.1526	0	0.0052009	0.8474	0.88079	0.57121	0.77638	0	0.0018103	0.94835	0.9852	0.97611	0.9358	0
10	0.17328	0.17222	0.27983	0.1544	0	0.0052091	0.8138	0.85738	0.61506	0.77638	0	0.0013752	0.93008	0.952406	0.9644	0.9358	0
FROM	0.18408	0.00794	0.08458	0.00794	0	0.0000000	0.78268	0.78268	0.78268	0.78268	0	0.0000000	0.92008	0.92008	0.92008	0.92008	0
1	0.19873	0.19415	0.6376	0.004041	0	0.015397	0.81716	0.66736	0.82296	0.77545	1	0.0004021	0.86766	0.91448	0.8440	0.9350	0
2	0.19512	0.02772	0.22972	0.80953	0	0.005205	0.78913	0.8425	0.67313	0.77484	2	0.0005449	0.92987	0.88275	0.97086	0.9350	0
3	0.17388	0.23281	0.1838	0.31286	0	0.003638	0.76029	0.89637	0.82301	0.77484	0	0.0001951	0.9683	0.98301	0.7768	0.9350	0
4	0.19006	0.49026	0.02053	0.09113	0	0.023772	0.77117	0.84754	0.78414	0.77484	0	0.0013993	0.97084	0.93009	0.7948	0.96148	0
5	0.20133	0.41236	0.042674	0.0044609	0	0.018807	0.77162	0.93248	0.63848	0.77484	0	0.0027471	0.97408	0.87037	0.95766	0.94681	0
6	0.17146	0.09286	0.11508	0.019439	0	0.012603	0.8196	0.77162	0.77162	0.77484	0	0.0016939	0.96217	0.96217	0.96217	0.94681	0
7	0.20075	0.8264	0.10908	0.30638	0	0.003345	0.77134	0.78505	0.88387	0.77484	0	0.00072097	0.97512	0.94828	0.9008	0.94681	0
8	0.1861	0.41694	0.078225	0.11772	0	0.0094647	0.81809	0.51076	0.65846	0.77484	0	0.00083247	0.98519	0.98186	0.92	0.94681	0
9	0.16617	0.17177	0.0024991	0.88447	0	0.0037697	0.7776	0.78884	0.81241	0.77484	0	0.0001905	0.94672	0.92267	0.98985	0.94681	0
10	0.16861	0.14101	0.044816	0.000000	0	0.0019319	0.81027	0.81027	0.81027	0.77484	0	0.0000000	0.94672	0.94672	0.94672	0.94681	0
FROM	0.16617	0.31654	0.1010811	0.1794071	0	0.0016134	0.77130	0.77130	0.77130	0.77843	0	0.00047127	0.96402	0.90669	0.80044	0.93674	0
1	0.17146	0.6462	0.97267	0.25051	0	0.013898	0.72441	0.94539	0.24739	0.77347	2	0.0011002	0.96206	0.77175	0.93229	0.95763	0
2	0.1852	0.14101	0.08216	0.000000	0	0.003638	0.81929	0.93529	0.62831	0.77638	0	0.0013714	0.93938	0.95407	0.9376	0.9358	0
3	0.18752	0.6786	0.08616	0.08311	0	0.027257	0.80917	0.88493	0.24888	0.75877	0	0.0013157	0.96212	0.96507	0.86377	0.96227	0
4	0.18345	0.69929	0.15122	0.15306	0	0.029224	0.74821	0.91399	0.69113	0.75877	0	0.0003065	0.98735	0.9274	0.93024	0.96227	0
5	0.1834	0.8775	0.48927	0.0044	0	0.003638	0.81929	0.93529	0.62831	0.77638	0	0.0013714	0.93938	0.95407	0.9376	0.9358	0
6	0.1852	0.65643	0.85457	0.42402	0	0.028407	0.88878	0.94161	0.85726	0.75877	0	0.00044629	0.92082	0.8888	0.98693	0.96314	0
7	0.20138	0.61424	0.35707	0.01397	0	0.024834	0.84118	0.93877	0.93969	0.75877	0	0.0003454	0.96977	0.99638	0.8126	0.96314	0
8	0.17146	0.09663	0.18128	0.000000	0	0.009699	0.81746	0.7574	0.90968	0.75877	0	0.0000000	0.94672	0.94672	0.94672	0.96314	0
9	0.21102	0.079794	0.09713	0.41788	0	0.0031827	0.81027	0.81027	0.81027	0.75877	0	0.0000000	0.94672	0.94672	0.94672	0.96314	0
10	0.18445	0.66087	0.046173	0.00369	0	0.018444	0.76267	0.6112	0.61875	0.75877	0	0.0001949	0.97124	0.94195	0.97609	0.97005	0
FROM	0.17174	0.466001	0.193961	0.1496027	0	0.0049497	0.81109	0.77012	0.81109	0.76224	0	0.0014608	0.94449	0.88209	0.90761	0.96144	0
1	0.17174	0.10061	0.07167	0.07614	0	0.006197	0.83004	0.87161	0.77146	0.76224	0	0.000797	0.9316</				

	ITER	MSE	R Training	R Validation	R test	R All	R2
Cluster 1	1	0.0022008	0.4484	0.99814	0.10665	0.50956	0.20106256
	2	0.0062833	0.77668	0.86251	0.86664	0.81692	0.60323182
	3	0.0098951	0.8399	0.92635	0.75873	0.83726	0.70543201
	4	0.015973	0.90035	0.98548	0.9328	0.89795	0.81063012
	5	0.0097478	0.94299	0.98265	0.082446	0.80112	0.88923014
	6	0.013925	0.7725	0.91553	0.95885	0.80112	0.59675625
	7	0.0009013	0.97013	0.95914	0.62988	0.94346	0.94115222
	8	0.00026751	0.92424	0.99895	0.94744	0.94489	0.85421958
	9	0.002228	0.95284	0.98477	0.92125	0.95797	0.90790407
	10	0.0054374	0.94365	0.97235	0.98808	0.95797	0.89047532
	PROM	0.00668592	0.847168	0.958587	0.7192766	0.846822	0.74000941
Cluster 2	1	0.015605	0.78338	0.79419	0.97278	0.82471	0.61368422
	2	0.015705	0.71216	0.95291	0.94153	0.83059	0.50717187
	3	0.025774	0.76415	0.9055	0.95017	0.83059	0.58392522
	4	0.013268	0.89341	0.79039	0.90032	0.88535	0.79818143
	5	0.0088058	0.91817	0.87093	0.81774	0.909	0.84303615
	6	0.0027023	0.87484	0.97674	0.95517	0.909	0.76534503
	7	0.01144	0.92265	0.62875	0.96099	0.91051	0.85128302
	8	0.0015866	0.94135	0.99132	0.84917	0.92308	0.88613982
	9	0.0018314	0.94578	0.89103	0.96596	0.95344	0.89449981
	10	0.0049498	0.95822	0.97464	0.946	0.95344	0.91818557
	PROM	0.01016679	0.871411	0.87764	0.925983	0.892971	0.76614521
Cluster 3	1	0.016164	0.91344	0.93649	0.37926	0.89904	0.83437263
	2	0.0044329	0.92205	0.91484	0.81795	0.87632	0.8501762
	3	0.002448	0.94666	0.83826	0.91279	0.87632	0.89616516
	4	0.022473	0.95478	0.88515	0.98248	0.90906	0.91160485
	5	0.003237	0.90085	0.94942	0.89155	0.90906	0.81153072
	6	0.0017696	0.95429	0.96116	0.96597	0.91285	0.9106694
	7	0.0042687	0.86508	0.98187	0.94289	0.91285	0.74836341
	8	0.00067396	0.91039	0.82483	0.92954	0.91285	0.82880995
	9	0.0047731	0.90908	0.82552	0.96713	0.91285	0.82642645
	10	0.0046561	0.95763	0.94988	0.91139	0.91285	0.91705522
	PROM	0.00648964	0.923425	0.906742	0.870095	0.903405	0.8535174
Cluster 4	1	0.0070641	0.84671	0.9313	0.95453	0.89995	0.71691782
	2	0.0023399	0.9042	0.94841	0.84703	0.89995	0.81757764
	3	0.0010491	0.94839	0.83341	0.98599	0.9367	0.89944359
	4	0.0030335	0.94608	0.92331	0.2757	0.9367	0.89506737
	5	0.0059133	0.94606	0.98892	0.40076	0.94373	0.89502952
	6	0.002573	0.94511	0.73329	0.98617	0.94373	0.89323291
	7	0.0013899	0.95856	0.96156	0.86102	0.94373	0.91883727
	8	0.0041262	0.95636	0.9485	0.60432	0.94373	0.91462445
	9	0.0042282	0.95445	0.83817	0.93437	0.94373	0.9109748
	10	0.0024975	0.96809	0.60245	0.97153	0.92372	0.93719825
	PROM	0.00342147	0.937401	0.870932	0.782142	0.931567	0.87989036

Tabla 38: Resultados para una RNA de topología 3:10:1 con TANSIG como función de transferencia. Fuente: Autor.