

Dpto. Ing. Química y Nuclear



Máster Universitario en Seguridad Industrial y Medio Ambiente

Departamento de Ingeniería Química y Nuclear

Universidad Politécnica de Valencia

MODELIZACIÓN MEDIANTE REDES NEURONALES DEL ENSUCIAMIENTO DE MEMBRANAS CERÁMICAS DE ULTRAFILTRACIÓN

TESIS FINAL DE MÁSTER

AUTOR:

David Catalán Martínez

DIRECTORES:

Dr. D. José Marcial Gozávez Zafrilla

Dra. D^a. María Cinta Vincent Vela

Valencia, Septiembre de 2012

AGRADECIMIENTOS

Dando por finalizada con este documento este máster me gustaría dedicar unas líneas a aquellas personas que han participado de una manera u otra de este trabajo.

A mis directores José Marcial Gozávez Zafrilla y María Cinta Vincent Vela por su labor en la dirección del trabajo, sus consejos, ayuda y dedicación a la consecución de esta tesis.

A mis compañeros de Máster por su apoyo y guía en este año.

A mis amigos, en especial a mis amigos de la carrera, por haber sido una ayuda constante estos años de estudios. Por ser una motivación para ser una persona mejor.

A mi familia, por todo.

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS.....	I
NOMENCLATURA	VII
RESÚMENES	IX
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Objetivos	1
1.2. Motivación	2
1.3. Estructura del trabajo fin de máster	6
2. ANTECEDENTES	8
2.1. Tecnología de membranas	8
2.1.1. Clasificación de los procesos de membrana	8
2.1.2. Procesos de ultrafiltración	10
2.1.3. Modelos físicos para ultrafiltración.....	14
2.1.4. Aplicaciones de la ultrafiltración.....	17
2.2. Redes neuronales artificiales	18
2.2.1. Tipos de redes neuronales artificiales.....	20
2.2.2. Funciones de transferencia, métodos de entrenamiento y de aprendizaje	21
2.2.3. Aplicaciones de las redes neuronales artificiales.....	26
2.2.4. Aplicación de redes neuronales artificiales en tecnología de membranas.....	31
2.2.5. Comparación entre modelos teóricos y redes neuronales artificiales.....	33
2.3. Procedimiento experimental	36
2.3.1. Planta piloto	36
2.3.2. Membranas empleadas.....	39
2.3.3. Condiciones de ensayo.....	40
2.3.4. Procedimiento experimental.....	41
3. METODOLOGÍA.....	45
3.1. Software utilizado	45
3.2. Metodología de trabajo con redes neuronales.....	46
3.2.1. Estrategia de modelización	46
3.2.2. Algoritmos de entrenamiento.....	62
3.3. Metodología de evaluación del ajuste	63
3.3.1. Estimación del error del ajuste	63
3.3.2. Uso e interpretación del método ANOVA.....	65
3.3.3. Comparación gráfica con los datos experimentales	67

3.3.4.	Comparación entre los modelos físicos y redes neuronales artificiales	68
3.4.	Programación de los modelos físicos	68
3.4.1.	Simulación de nuevos ensayos a condiciones no ensayadas	68
3.4.2.	Selección de las condiciones no ensayadas	69
3.4.3.	Aplicación de las redes neuronales a los nuevos ensayos	69
4.	RESULTADOS	70
4.1.	Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos de la membrana CARBOSEP	70
4.1.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales	71
4.1.2.	Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales	74
4.1.3.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales	76
4.1.4.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios.	83
4.1.5.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios	86
4.2.	Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos de la membrana CARBOSEP	93
4.2.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales	95
4.2.2.	Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales	96
4.2.3.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales	98
4.3.	Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos de la membrana TAMI	109
4.3.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales	109
4.3.2.	Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales	112
4.3.3.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales	114
4.4.	Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos de la membrana TAMI..	133
4.4.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales	135
4.4.2.	Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales	136

4.4.3.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales	137
4.5.	Simulación de nuevos ensayos a condiciones no ensayadas	153
4.6.	Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP con los ensayos simulados	156
4.6.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios	156
4.6.2.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios	161
4.7.	Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP con los ensayos simulados	164
4.7.1.	Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios	165
4.7.2.	Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios	167
5.	DISCUSIÓN	170
5.1.	Estrategia de modelización para maximizar el grado de ajuste de las redes neuronales	170
5.2.	Comparación del ajuste mediante redes neuronales artificiales con respecto del ajuste mediante modelos físicos	171
6.	CONCLUSIONES	179
	ANEXO I: Estimación del ensuciamiento dinámico mediante las condiciones ensayadas	181
	ANEXO II: Modelo de regresión de la densidad de flujo volumétrica estacionaria	184
7.	BIBLIOGRAFÍA	186

NOMENCLATURA

A	Área de la membrana (m^2)
a_p	Radio equivalente de soluto
C_0	Concentración de alimentación
C_{0v}	Concentración de alimentación en porcentaje volumétrico (v/v)
CFV	Cross-Flow Velocity
C_g	Concentración de la capa gel
C_{gv}	Concentración de la capa gel en porcentaje volumétrico (v/v)
D	Coefficiente de difusión del PEG en la capa gel
Dint	Diámetro interno de las membranas
J_0	Densidad de flujo volumétrico inicial
J_p	Densidad de flujo volumétrico
J_{pss}	Densidad de flujo volumétrico estacionario
K_{cCF}	Constante del modelo de bloqueo de poros completo adaptado a flujo tangencial
K_{CF}	Constante de la ecuación general de los modelos de Hermia adaptados a flujo tangencial
K_{cgCF}	Constante del modelo de formación de torta adaptado a flujo tangencial
K_{eCF}	Constante del modelo de bloqueo de poros estándar adaptado a flujo tangencial
K_{iCF}	Constante del modelo de bloqueo de poros intermedio adaptado a flujo tangencial
msne	Error cuadrático medio normalizado
MW	Peso molecular
n_{CF}	Constante de la ecuación general de los modelos de Hermia adaptados a flujo tangencial (adimensional)
Neur	Número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal
Pesos	Tipo de inicialización de los pesos en las redes neuronales perceptrón multicapa
Pret	Tipo de pretratamiento de los datos

R^2	Coefficiente de regresión al cuadrado
R_c^1	Resistencia específica de la capa gel
R_m	Resistencia intrínseca de la membrana
t	tiempo del ensayo
TMP	Presión transmembranal (Transmembrane Pressure)
ΔP	Gradiente de presiones

Letras griegas

ϵ	Porosidad de la capa gel
μ	Viscosidad
ν	Viscosidad cinemática
ρ	Densidad

Abreviaturas

ANN	Red neuronal artificial (Artificial Neural Network)
ANOVA	Análisis de la varianza
BP	ANN Backpropagation o retropropagación
BR	ANN de base radial
ECG	Electrocardiograma
MAE	Error absoluto medio
MF	Microfiltración
MSE	Error cuadrático medio
NF	Nanofiltración
NMSE	Error cuadrático medio normalizado
OI	Ósmosis Inversa
PEG	Polietilenglicol
PM	ANN Perceptrón Multicapa
SD	Sistema de desvío de la planta piloto de ultrafiltración.
SOM	Mapa autoorganizativo (Self-Organizing Map)
UF	Ultrafiltración
UPV	Universidad Politécnica de Valencia

RESÚMENES

Título: “Modelización mediante redes neuronales del ensuciamiento de membranas cerámicas de ultrafiltración”.

Resumen

En este trabajo, se han empleado redes neuronales artificiales para modelar la disminución de la densidad de flujo volumétrico de la ultrafiltración de polietilenglicol con membranas cerámicas. Las redes neuronales artificiales probadas fueron perceptrón multicapa (PM) y de base radial (BR). Las condiciones experimentales presión transmembranal y velocidad tangencial, tiempo, y ensuciamiento dinámico se utilizaron como variables de entrada para predecir la densidad de flujo volumétrico de permeado. En este trabajo se ha estudiado como el uso de pretratamientos de los datos experimentales y la selección adecuada de los parámetros de las redes neuronales mejoran el ajuste obtenido.

Trabajos previos han estudiado el modelado teórico siendo los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial el mejor modelo para predecir los datos experimentales. Las redes neuronales perceptrón multicapa generan simulaciones comparables a los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial. Los resultados de las redes neuronales de base radial muestran que el ruido de los datos experimentales provoca que este tipo de redes neuronales no puedan generar buenas predicciones de los datos experimentales.

Títol: "Modelització per mitjà de xarxes neuronals de l'embrutiment de membranes ceràmiques d'ultrafiltració".

Resum

En aquest treball, s'han empleat xarxes neuronals artificials per a modelar la disminució de la densitat del flux volumètric de la ultrafiltració de polietilenglicol amb membranes ceràmiques. Les xarxes neuronals provades van ser perceptrón multicapa (PM) i de base radial (BR). Les condicions experimentals pressió transmembranal i velocitat tangencial, temps i embrutiment dinàmic es van utilitzar com a variables d'entrada per a predir la densitat de flux volumètric de permeat. En aquest treball s'ha estudiat com l'ús de pretractaments de les dades experimentals i la selecció adequada dels paràmetres de les xarxes neuronals milloren l'ajust obtingut.

Treballs previs han estudiat el modelatge teòric on els models d'Hermia adaptats al flux tangencial han sigut els millors models per a predir les dades experimentals. Les xarxes neuronals perceptrón multicapa generen simulacions comparables als models d'Hermia adaptats al flux tangencial. Els resultats de les xarxes neuronals de base radial mostren que el soroll de les dades experimentals provoquen que aquest tipus de xarxes neuronals no puguin generar bones prediccions de les dades experimentals.

Title: “Modeling membrane fouling in ceramic ultrafiltration membranes using artificial neural networks”.

Abstract

In this work, flux decline during crossflow UF of PEG with ceramic membranes has been modeled using artificial neural networks. The artificial neural networks tested were the multilayer perceptron (MP) and the radial basis (RB). Operating conditions of transmembrane pressure, crossflow filtration velocity, time, dynamic fouling and feed concentration were used as inputs to predict the permeate flux. In this work it has been studied how the use of pretreatments of the experimental data and the optimal selection of the parameters of the neural networks can improve the fitting accuracy.

Previous works studied theoretical modeling and Hermia’s models adapted to crossflow ultrafiltration were the best models to predict the experimental data. Multilayer perceptron neural networks generate simulations that are comparable with Hermia’s models adapted to crossflow ultrafiltration. The results of the radial basis neural networks showed that the noise of the experimental data cause that this neural networks can’t generate accuracy predictions of the experimental data.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Objetivos

El objetivo principal del trabajo es desarrollar un método de redes neuronales artificiales para ajustar los resultados experimentales obtenidos en la Tesis Doctoral de María Cinta Vincent Vela titulada: “Modelado dinámico de procesos de ultrafiltración tangencial aplicados a la separación de macromoléculas” (Vincent Vela, 2006).

La consecución del objetivo principal de esta Tesis se consigue a partir de los siguientes objetivos específicos:

- Estudiar diferentes estrategias de manipulación de los datos experimentales con el fin de favorecer el ajuste de los datos mediante la red neuronal seleccionada. Está centrado en la búsqueda de tratamientos de datos antes de introducirlos en las redes neuronales, así como establecer métodos y criterios de evaluación de los resultados que se obtengan.
- Selección de los algoritmos y estrategias de entrenamiento más adecuados. A partir del entrenamiento de las redes neuronales seleccionadas y para cada una de las estrategias propuestas, se seleccionará la combinación de red neuronal – estrategia que proporcione los mejores resultados en base a los criterios de evaluación establecidos.
- Simulación de las redes neuronales seleccionadas para cada membrana. Se recoge la solución obtenida y se representan los resultados simulados por la red neuronal para cada membrana y para cada una de las condiciones de cada ensayo.
- Comparación y análisis de los resultados obtenidos entre las diferentes redes neuronales empleadas. Se trata de observar los resultados obtenidos y realizar un análisis de la capacidad del método desarrollado de ajustarse a los datos experimentales. Se realizan pruebas de las redes neuronales desarrolladas para condiciones experimentales no ensayadas con el fin de observar si los resultados que la red neuronal propone son coherentes.
- Ajuste de los datos experimentales mediante modelos físicos. A partir de los modelos propuestos en la Tesis de Vincent Vela (Vincent Vela, 2006), y otros modelos ajustados en diferentes publicaciones.
- Comparación y análisis de las prestaciones que ofrecen los modelos físicos estudiados y las redes neuronales artificiales desarrolladas. Se trata de analizar las ventajas e inconvenientes que puedan tener las diferentes técnicas de modelización estudiadas.

1.2. Motivación

Los datos experimentales obtenidos en la Tesis Doctoral de Vincent Vela (2006) han sido ajustados mediante modelos físicos tanto en la propia Tesis como en publicaciones posteriores. En la Tesis Doctoral, se proponen los siguientes mecanismos:

- 1) Aplicación de modelos dinámicos de ultrafiltración no empíricos
 - A. Modelo de aplicación de la teoría de la ultrafiltración transversal en el caso dinámico. Los resultados fueron publicados en (Vincent Vela, 2005) y muestran que este modelo no es capaz de describir satisfactoriamente el comportamiento del sistema. Los autores concluían que este desajuste podría ser debido a que el modelo no tiene en cuenta la influencia de la velocidad de flujo cruzado en la formación de la capa gel.
 - B. Modelo de difusión inducido por cizalla aplicado en el caso de la ultrafiltración dinámica. Los resultados están publicados en (Vincent Vela, et al., 2007) y muestran discrepancias entre los datos experimentales y los resultados del modelo con resultados aceptables para tiempos de ensayo elevados (condiciones estacionarias). Esto es debido a que el modelo predice un ensuciamiento menor que el que muestran los resultados experimentales para el comienzo de los ensayos.
 - C. Modelo dinámico de Song para la ultrafiltración tangencial. Los resultados fueron publicados en (Vincent Vela, et al., 2006) y muestran que el modelo no describe satisfactoriamente el proceso dinámico que muestran los resultados experimentales, no obstante el ajuste es aceptable para condiciones estacionarias de cada ensayo a velocidades bajas.
 - D. Modelo dinámico de Bhattacharjee y Bhattacharya para la ultrafiltración controlada por la presión osmótica o por la capa gel indistintamente. Los resultados de la implementación de este modelo están publicados en (Vincent Vela, et al., 2007) y muestran que este modelo no se ajusta con precisión a los datos experimentales. Los autores justificaban el desajuste en que este modelo considera la formación de la capa gel como principal causa de ensuciamiento formándose con más facilidad a velocidades tangenciales bajas.
 - E. Modelo dinámico que combina el bloqueo de poros y la formación de capa gel, cuyos resultados fueron publicados en (Vincent Vela, et al., 2006) y que muestra una diferencia significativa entre los datos del modelo y los experimentales. Los autores concluían que bajo ciertas condiciones el bloqueo de poros o/y la formación de la capa gel puede no ocurrir. Además el modelo predice que la capa gel se forma sobre poros obstruidos y esto podría no ser así.

- F. Modelo de difusión inducido por cizalla aplicado en el caso de la ultrafiltración dinámica con estimación empírica de la concentración en la capa gel. Los resultados muestran que este modelo no describe el comportamiento que presentan los datos experimentales.
- G. Modelo dinámico de Song para la ultrafiltración tangencial con estimación empírica de la concentración en la capa gel. Los resultados se publicaron en (Vincent Vela, et al., 2009). Los resultados muestran grandes discrepancias entre las predicciones del modelo y los datos experimentales. Los autores concluían que podría no haberse detectado experimentalmente la rápida disminución de la densidad de flujo volumétrico causado por el bloqueo de poros ni la adsorción que el modelo no considera.
- 2) Aplicación de modelos dinámicos de ultrafiltración semi-empíricos
- A. Modelos de Hermia: el modelo de bloqueo intermedio de poros es el que mejor se ajusta a los resultados experimentales. En la mayoría de los casos los valores del error cuadrático medio se encuentran por debajo de 0.9 debido a que los modelos de Hermia consideran filtración frontal.
- Modelo de bloqueo completo de poros ($n = 2$)
 - Modelo de bloqueo intermedio de poros ($n = 1$)
 - Modelo de bloqueo estándar de poros ($n = 3/2$)
 - Modelo de formación de torta ($n = 0$)
- B. Modelos de Hermia adaptados para flujo tangencial. Los resultados fueron publicados en (Vincent Vela, et al., 2009) y muestran que estos modelos presentan una elevada precisión en el ajuste y describen el comportamiento de los datos experimentales. El modelo que mejor se ajusta es el modelo de bloqueo intermedio ($n_{CF} = 1$). No obstante, en esta publicación también se estudiaba la adecuación del parámetro n_{CF} según las condiciones de operación.
- Modelo de bloqueo completo de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 2$)
 - Modelo de bloqueo intermedio de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 1$)
 - Modelo de bloqueo estándar de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 3/2$)
 - Modelo de formación de capa gel para flujo tangencial ($n_{CF} = 0$)

En otras publicaciones se han considerado otros modelos como:

- Modelo basado en la ley de Darcy para flujo a través de medios porosos. Publicado en (Vincent Vela, et al., 2006) y cuyos resultados muestran que el modelo no describe el comportamiento observado en los datos experimentales. Los autores concluían que como para el modelo la formación de la capa gel se produce en la superficie de la membrana cuyos poros están obstruidos, sin embargo la capa gel podría no formarse a

velocidades tangenciales bajas y, de formarse, se podría formar sobre toda la superficie de la membrana y no solo en las zonas con poros obstruidos.

Entre las conclusiones que cita la Tesis hay que destacar que:

- No existe un modelo dinámico no empírico que describa adecuadamente la dinámica de los procesos de ultrafiltración para diferentes condiciones de operación y para el cual se obtengan buenas predicciones.
- Los resultados predichos por los modelos semi-empíricos, incluso cuando los parámetros de los mismos se estiman de forma teórica, se asemejan más a los datos experimentales que las mejores predicciones obtenidas con los modelos teóricos.

La modelización mediante modelos semi-empíricos desarrollados para los datos experimentales obtenidos de los ensayos de la membrana CARBOSEP muestran que no existe un modelo único que ajuste los datos experimentales para todas las condiciones experimentales (para la membrana CARBOSEP: presión transmembranal y velocidad tangencial ya que la concentración se mantuvo constante) debido a que el comportamiento dinámico de los resultados discrepancias al variar dichas condiciones (Vincent Vela, et al., 2009).

Se observa que la implementación de modelos físicos a los resultados experimentales, salvo en el caso de los modelos semi-empíricos adaptados al flujo tangencial para los resultados de los ensayos de la membrana CARBOSEP, no son aceptables. Esto provoca que se busquen otras metodologías de modelización con la finalidad de encontrar ajustes más precisos.

Las redes neuronales artificiales han sido probadas con éxito en multitud de procesos de membranas. En el caso de esta tesis, se van a desarrollar redes neuronales artificiales de perceptrón multicapa y de base radial. Entre los artículos donde se implementan este tipo de redes a procesos de membrana se va a destacar:

- Redes neuronales multicapa (perceptrón multicapa y retropropagación):

Para microfiltración se ha desarrollado un trabajo de redes neuronales artificiales de retropropagación donde además de medir la capacidad de la red para modelar los datos experimentales, se caracterizaba la importancia relativa de cada input sobre la variable respuesta (en ese caso la densidad de flujo normalizada) a partir de los pesos obtenidos de la red entrenada (Chellam, 2005). Los resultados mostraban un ajuste de elevada precisión a los datos experimentales.

Para ultrafiltración se han encontrado varios trabajos:

Se ha desarrollado un trabajo de redes neuronales artificiales de perceptrón multicapa para ultrafiltración de proteínas de leche. En dichas redes neuronales, se emplea como inputs la presión transmembranal y el tiempo de operación y obtiene datos de densidad de flujo volumétrico normalizado, resistencia por ensuciamiento e índice de

rechazo. Los resultados dinámicos no acaban de ajustarse a los datos experimentales para el caso de la resistencia por ensuciamiento. Cabe destacar que este trabajo introduce un porcentaje muy bajo para el entrenamiento de la red (12.5%) de los datos, no obstante, estos datos son seleccionados manualmente, de manera que es el propio autor quien decide la distribución de los datos entre el entrenamiento, la validación y el test. Esto provoca que el autor no requiera tantos datos para caracterizar el comportamiento dinámico de la red neuronal como si se hubieran distribuido de manera aleatoria como se hace normalmente (Razavi, et al., 2004).

Otro trabajo tenía como objetivo desarrollar una mejora de la productividad de agua potable mediante ultrafiltración mediante un algoritmo de control anticipativo. Para ello se estimaba la resistencia mediante la ley de Darcy y se añade a las condiciones del proceso para introducirlas como variables de entrada a la red neuronal, posteriormente se desarrollaron dos redes neuronales: una para medir la resistencia de fin de un ciclo de filtración y otra para determinar la resistencia de comienzo del ciclo siguiente después del contralavado (Cabassud, et al., 2002; Delgrange-Vincent, et al., 2000).

La implementación de redes neuronales de perceptrón multicapa para la ultrafiltración de zumo de frutas se estudió en (Rai, et al., 2005) con resultados satisfactorios. El estudio buscaba la modelización de la densidad de flujo volumétrico y la concentración de pectina en el permeado para cada tiempo de ensayo en unas condiciones determinadas. En este estudio, el factor tiempo se ha recogido en pequeños lotes, es decir, en vez de recoger datos temporales de manera continua (como en el resto de estudios dinámicos), los datos de densidad de flujo y concentración se han recogido cada 5 minutos con 40 minutos para cada ensayo, lo que reduce el número de observaciones disponibles para cada ensayo.

Para nanofiltración se ha desarrollado un trabajo para modelar el índice de rechazo de las sales NaCl y MgCl₂ mediante diferentes tipos de entrenamiento en (Darwish, et al., 2007).

- Base radial:

Hay que destacar un trabajo donde se compara redes neuronales artificiales retropropagación, de base radial y un modelo de regresión en la filtración de coloides en proceso de ultrafiltración y microfiltración. Para ello han empleado un porcentaje bajo de los datos para la fase de entrenamiento (17% del total de los datos) escogiendo los datos manualmente en vez de con una selección aleatoria. Para el caso del modelo de regresión, se han empleado los datos del entrenamiento para conseguir la ecuación del modelo de regresión. Los resultados muestran que las redes neuronales presentan una parámetros de ajuste significativamente mayores que el modelo de regresión y, de entre las redes neuronales, las de base radial muestran resultados significativamente mejores que los de retropropagación. Hay que

puntualizar que este estudio no realiza una modelización de la dinámica del proceso sino de los datos estacionarios de las condiciones experimentales ensayadas (Chen, et al., 2006).

Hay más trabajos de aplicación de ANN sobre procesos de membrana que se van a ir citando a lo largo de esta tesis, pero atendiendo a que salvo los modelos físicos más complicados no consiguen un buen ajuste de los datos y a las experiencias de otros autores empleando redes neuronales artificiales para modelar los datos en procesos de membrana, se van a desarrollar redes neuronales artificiales para el ajuste de los datos experimentales.

1.3. Estructura del trabajo fin de máster

La estructura del Trabajo Fin de Máster es la siguiente: tras comentar en el primer apartado los objetivos y la motivación, en el apartado 2 tiene una doble función: en primer lugar se desarrollan los aspectos más importantes en cuanto a la tecnología de membranas, centrándose en la ultrafiltración, y en los aspectos más importantes de las redes neuronales artificiales; en segundo lugar en este apartado se explica la metodología experimental seguida por Vincent Vela (2006) para realizar los ensayos experimentales.

En el apartado 3 se explica la metodología seguida para aplicar las redes neuronales artificiales a los datos experimentales. Para ello en primer lugar se explica que tipo de redes neuronales se van a utilizar así como los parámetros de control de estas redes neuronales y los tratamientos aplicados a los datos experimentales. En segundo lugar se explica las estrategias empleadas para la aplicación de las redes neuronales a los datos experimentales. Por último, se explica cómo se va a evaluar el grado de ajuste de las redes neuronales a los datos experimentales. También se desarrolla la metodología para programación de modelos físicos para la simulación de ensayos para condiciones experimentales no probadas en (Vincent Vela, 2006).

En el apartado 4 se muestran los resultados de las simulaciones de las estrategias de redes neuronales explicadas en el apartado 3. Para determinar el mejor resultado se hace uso de análisis de la varianza de los parámetros de caracterización del ajuste de las redes neuronales a los datos experimentales definidos en el apartado 3.

En el apartado 5 se realiza un análisis de los resultados obtenidos. En primer lugar se analiza que niveles de las estrategias estudiadas proporciona los mejores resultados para cada red neuronal explicando el motivo de que sea la mejor estrategia. También se comparan los resultados obtenidos con otros trabajos de aplicación de redes neuronales artificiales a datos experimentales de tecnología de membranas, centrándose en microfiltración y ultrafiltración. Por último se realiza una comparación con los modelos físicos aplicados a los datos experimentales y se explican las

observaciones, tanto cualitativas como cuantitativas, observadas para el ajuste de los datos experimentales mediante estas dos técnicas.

En un último apartado se explican las conclusiones obtenidas de la aplicación de redes neuronales artificiales a datos experimentales a un proceso de ultrafiltración, tanto las conclusiones de haber conseguido (o no) los objetivos descritos, como las conclusiones obtenidas durante la implementación de la metodología explicada sobre los datos experimentales.

2. ANTECEDENTES

2.1. Tecnología de membranas

Mulder (2000) define los procesos de membrana como procesos donde la corriente de alimentación pasa por una membrana semipermeable que actúa como una barrera que permite el paso, de manera selectiva, de ciertas sustancias a través de ella, mientras que impide o restringe el transporte de otros compuestos. Estos procesos generan dos corrientes: la corriente que contiene las sustancias que han atravesado la membrana o permeado, y la corriente que contiene las sustancias que han quedado retenidas o rechazo, a partir de una corriente alimento, tal y como se observa en la Figura 1:

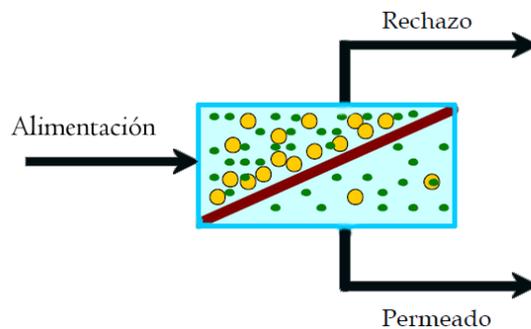


Figura 1: Esquema de un proceso de separación con membranas

Las membranas deben responder a las exigencias siguientes:

- Selectividad: indica la capacidad de la membrana para discriminar entre las moléculas de las sustancias presentes en la disolución, dejando pasar preferentemente unas frente a otras. Está relacionado con el tamaño de los poros y la estructura química de la membrana.
- Permeabilidad: está relacionada con la estructura porosa o densa de la membrana y con el espesor de la capa activa. Permite que aquellas moléculas que pueden atravesar la membrana, lo hagan con la mayor densidad de flujo posible. Dicha permeabilidad depende de diversos factores, como por ejemplo: el espesor de la membrana, el tamaño de los poros o la velocidad de flujo de la corriente de entrada.
- Resistencia mecánica, química y térmica: depende de la naturaleza química del material utilizado y que se debe adaptar al proceso.

2.1.1. Clasificación de los procesos de membrana

La clasificación de los procesos de membrana se puede realizar atendiendo a diversos criterios, por ejemplo en función de la dirección del flujo de alimentación con respecto

a la membrana se tienen filtración convencional o frontal y filtración tangencial, tal y como ilustra la Figura 2:

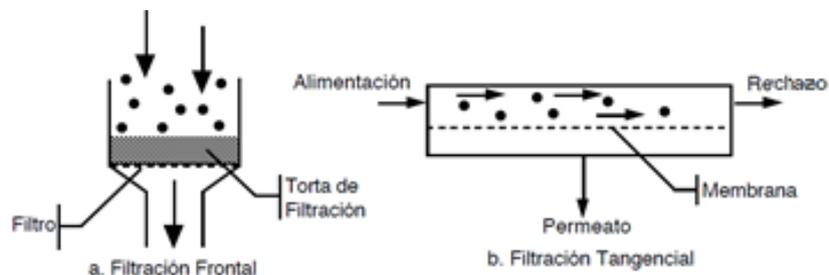


Figura 2: Filtración convencional o frontal vs filtración tangencial

Sin embargo, una clasificación más reconocida es la que se realiza atendiendo a la fuerza impulsora, tal y como se observa en la Tabla 1:

Tabla 1: Clasificación de los procesos de membrana según la fuerza impulsora.

Fuerza impulsora	Proceso
Diferencia o gradiente de presiones (ΔP)	Microfiltración (MF)
	Ultrafiltración (UF)
	Nanofiltración (NF)
	Ósmosis Inversa (OI)
Diferencia de presiones parciales (ΔP_i)	Pervaporación
	Separación de gases
Diferencia de potencial eléctrico	Electrodialisis
Diferencia de concentraciones	Diálisis

Este estudio se va a centrar en los procesos que emplean el gradiente de presiones como fuerza impulsora. Las diferencias entre estos procesos se observan en la Tabla 2:

Tabla 2: Comparación entre los procesos basados en diferencias de presión. (Alcaina Miranda)

	MF	UF	NF	OI
Separación	Bacterias y hongos	Macromoléculas	Iones polivalentes y moléculas (PM<300)	Solutos e iones de bajo PM
Presión osmótica	Despreciable	Despreciable	Moderada	Elevada
Presión aplicada (bar)	< 2	1-10	5-15	10-70
Estructura de la membrana	Simétrica (no siempre)	Asimétrica	Asimétrica	Asimétrica
Espesor de la capa activa (μm)	10-150	0.1-1	0.1-1	0.1-1
J_p ($\text{L}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{hr}^{-1}$)	>200	5-200	5-80	5-80

Se puede observar de manera visual la diferencia entre estos procesos atendiendo al tamaño de las partículas retenidas en la membrana en la Figura 3:

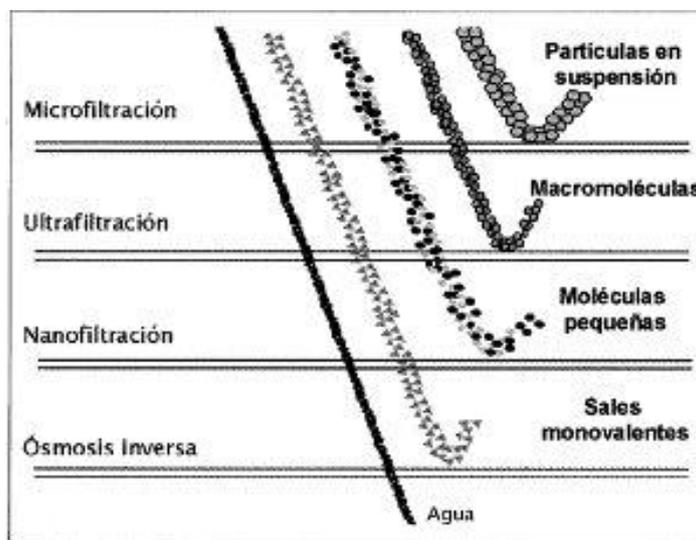


Figura 3: Separación mediante procesos de membranas basados en un gradiente de presión

El interés de la utilización de la tecnología de membranas se ha centrado en el tratamiento de aguas residuales, la recuperación de compuestos de alto valor añadido, así como la producción agua potable y agua de proceso (Wenshan, et al., 2012). Sin embargo, el ensuciamiento de la membrana puede ser el principal obstáculo para una aplicación más amplia de los procesos ultrafiltración ya que causa mayores costos de proceso (Gao, et al., 2011). Así que, una mejor comprensión de ensuciamiento de la membrana es clave para resolver los problemas surgidos durante la aplicación de esta tecnología (Wenshan, et al., 2012).

Microfiltración (MF) y ultrafiltración (UF) se han convertido en opciones viables para hacer frente a la actual y los futuros reglamentos de agua potable relacionados con el tratamiento de las aguas superficiales, aguas subterráneas, y las aplicaciones de reutilización de agua para eliminación microbiana y la de turbidez.

Las empresas potabilizadoras o depuradoras en todo el mundo están recurriendo a un tratamiento avanzado para cumplir con las normas más estrictas de agua potable o agua depurada. Los sistemas de membranas se han convertido en la tecnología de elección viable para estas aplicaciones.

2.1.2. Procesos de ultrafiltración

La UF es una técnica de separación de macromoléculas, coloides y partículas en suspensión de una disolución (tal y como se observa en Figura 3). Las membranas de UF retienen solutos de un peso molecular del orden de miles de Daltons, y presentan un tamaño de poro entre 0.05 μm y 1 nm (Mulder, 2000). Al igual que las membranas de MF, son membranas porosas en las que las partículas quedan retenidas en la corriente rechazo debido a su tamaño y a su forma con respecto al tamaño de poro de

la membrana, aunque también influyen las interacciones entre la membrana y las partículas y la naturaleza de la membrana.

A nivel industrial, la UF fue desarrollada para el tratamiento de aguas residuales y eliminación de partículas y macromoléculas que contenían, debido a su alta eficiencia y funcionamiento estable en la eliminación de este tipo de sustancias (H.K Shon et al., 2004). Actualmente, la UF tiene aplicación en numerosos ámbitos industriales, para la concentración y el fraccionamiento, donde un ejemplo es la concentración y fraccionamiento de lactosuero en la industria láctea (Chan, et al., 2004), la eliminación de pintura de los depósitos de pintado, la concentración de tinta de las aguas residuales de los procesos de impresión (Lipnizki, 2008), la eliminación de componentes no biodegradables de la industria textil (Gozálvez-Zafrilla, et al., 2008), etc.

Uno de los mayores obstáculos que dificulta la aplicación de los procesos de ultrafiltración es el fenómeno de descenso de la densidad de flujo de permeado con el tiempo debido al ensuciamiento que se produce al depositarse la materia sobre la superficie de la membrana o entre la estructura porosa de la misma, aumentando significativamente la resistencia hidráulica al paso de fluido a su través. Esto puede conllevar reducciones importantes de la densidad de flujo del permeado, requiriendo en última instancia la limpieza de la membrana o un remplazo completo de ella (Zydney, et al., 2003).

El ensuciamiento de las membranas de ultrafiltración se debe a varios mecanismos que pueden actuar juntos o por separado en las distintas etapas del proceso de ultrafiltración. Estos mecanismos son (Vincent Vela, 2006):

- Taponamiento de los poros de la membrana: es debido a que el tamaño de las moléculas de soluto es similar al de los poros de la membrana. Ocurre tanto a nivel superficial como en el interior de los mismos
- Formación de capa gel, debida al establecimiento de una red tridimensional entre las macromoléculas de soluto y el disolvente. La concentración en la capa gel es constante para unas determinadas condiciones experimentales (ver la Figura 4); pero varía con la velocidad tangencial y la concentración de la alimentación para un mismo soluto (Mulder, 2000).
- Adsorción de moléculas sobre la superficie de membrana, debido a afinidades químicas entre la membrana y el soluto. La adsorción puede producirse también en el interior de los poros, reduciendo así el diámetro efectivo de los mismos.
- Formación de depósitos sobre la superficie de la membrana o en el interior de la misma por precipitación de las moléculas de soluto o sedimentación de materia en suspensión.

Otro fenómeno que también contribuye al descenso de la densidad de flujo de permeado con el tiempo es la polarización por concentración (Figura 4). Consiste en el incremento de la concentración del soluto que no es capaz de atravesar la membrana en las cercanías de la superficie de la misma. Este incremento de la concentración de soluto se debe al transporte convectivo del mismo causado por la presión transmembranal.

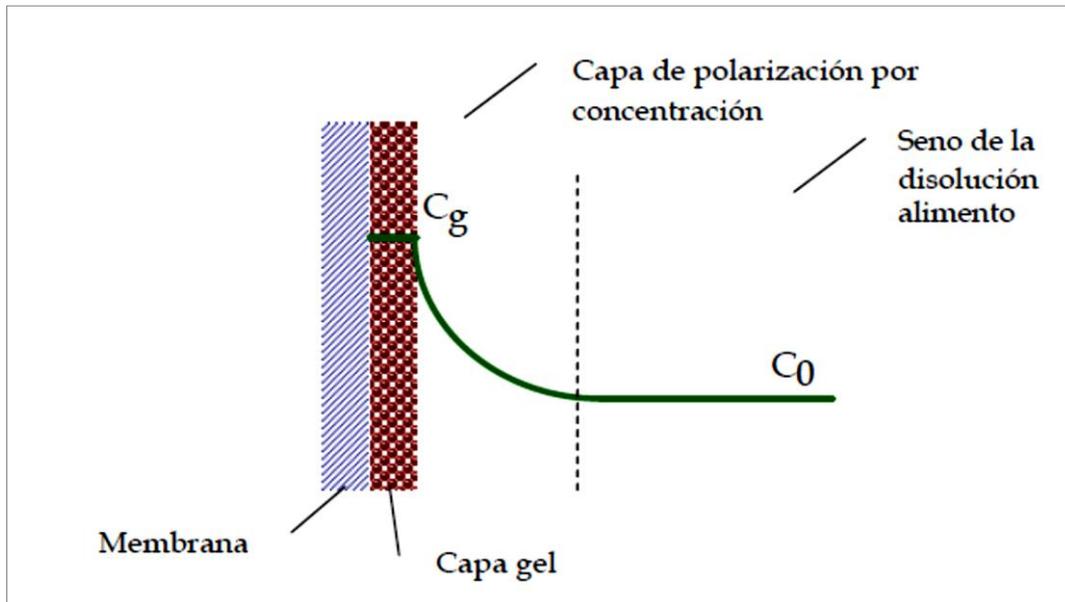


Figura 4: Esquema de los procesos de polarización por concentración y formación de la capa gel.

La polarización por concentración no se considera como un mecanismo de ensuciamiento, ya que es un fenómeno intrínseco al proceso de concentración y no afecta a las propiedades de la membrana. El ensuciamiento requiere limpieza para su eliminación, mientras que la polarización por concentración desaparece al parar el proceso.

Una representación esquemática de los procesos de polarización por concentración y formación de capa gel se muestra en la Figura 5 en la se muestra una curva típica de la evolución de la densidad de flujo de permeado con el tiempo para un proceso de ultrafiltración.

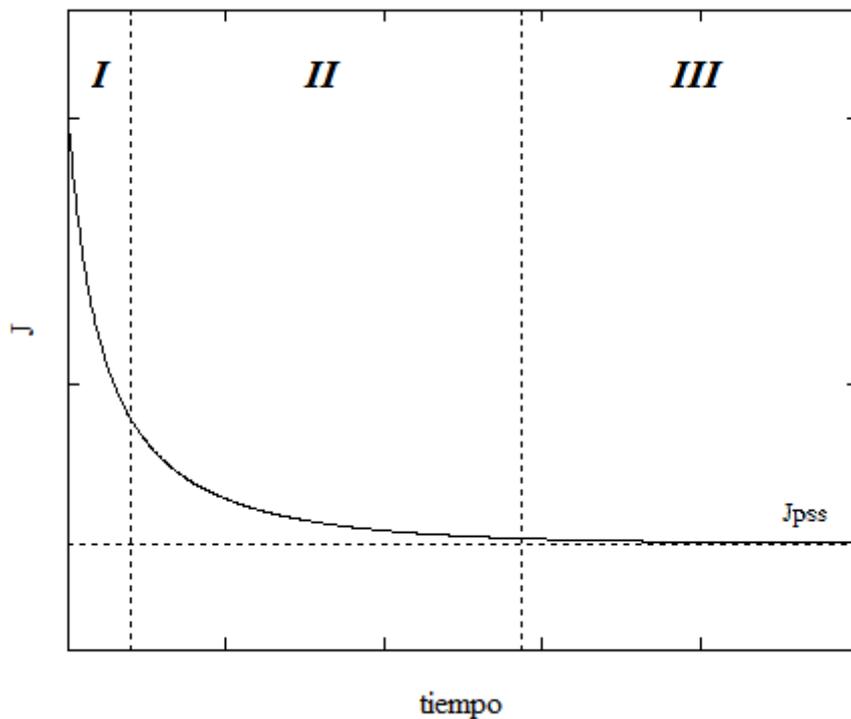


Figura 5: Representación esquemática de las tres etapas de descenso de la densidad de flujo de permeado con el tiempo

Por tanto, existen tres etapas diferentes en el proceso de UF: una rápida disminución inicial (I) debida al fenómeno de polarización por concentración, seguida de una disminución menos acusada que en el primer tramo (II) debida a la formación de depósitos en la superficie y finalmente, una etapa de estado estacionario (III), en la que la densidad de flujo alcanza un valor prácticamente constante. Sin embargo, mientras que la etapa II se encuentra en todos los procesos de UF, las etapas I y III no siempre se presentan: por ejemplo, si el tiempo de operación no es suficientemente largo puede no alcanzarse el estado estacionario.

Existen distintas maneras de clasificar los tipos de ensuciamiento que pueden tener lugar en las membranas de UF. Según Baker (2004), en función de si las moléculas de suciedad se depositan principalmente en el interior de la membrana o en su superficie se pueden distinguir dos tipos de ensuciamiento:

- Reversible: ensuciamiento superficial
- Irreversible: consiste en el ensuciamiento interno de la membrana como puede ser el bloqueo de poros.

Por otra parte, según Liu (2006), en función de la naturaleza de las sustancias que forman los depósitos de suciedad se pueden distinguir cuatro tipos de ensuciamiento:

- Inorgánico: debido a la acumulación de precipitados de naturaleza inorgánica (como hidróxidos metálicos), en forma de incrustaciones, en la superficie de la membrana o en el interior de la estructura porosa.

- Coloidal: en ocasiones en que los coloides tienen un tamaño mucho menor que el tamaño de poro de la membrana, pueden quedar atrapados entre la estructura.
- Microbiológico: el ensuciamiento microbiológico es el resultado de la formación de películas y geles en la superficie de la membrana, provocados por el crecimiento de los microorganismos y la liberación al medio de sus productos extracelulares. Este gel protege a los microorganismos de los ataques físicos y químicos de la limpieza.
- Orgánico: el ensuciamiento orgánico es especialmente importante en los procesos de filtración por membranas de disoluciones con una alta carga de materia orgánica. En esos casos, este tipo de ensuciamiento es la causa principal de la disminución de la densidad de flujo de permeado.

El estudio del ensuciamiento, en los procesos de membrana en general y en los procesos de ultrafiltración en particular, es uno de los campos más estudiados en el campo de la tecnología de membranas debido a que el ensuciamiento es el principal factor limitante para la aplicación de los procesos de membranas debido a que el ensuciamiento, además de reducir la capacidad de producción de permeado, reduce la vida útil de las membranas y requiere su eliminación periódica mediante procesos de limpieza. Cada uno de los procesos de membrana con gradiente de presiones como fuerza impulsora (MF, UF, NF y OI) presenta mecanismos de ensuciamiento diferentes. Dichos mecanismos han sido ampliamente estudiados por diferentes autores (Ahmed, et al. 2010; Chuyang, et al. 2011; El Rayess, et al., 2011; Wenshan, et al., 2012).

2.1.3. Modelos físicos para ultrafiltración

En las últimas décadas ha aumentado considerablemente el número de trabajos dedicados al desarrollo y aplicación de modelos matemáticos con el fin de conocer la influencia de las condiciones de operación en la evolución de la densidad de flujo de permeado con el tiempo de filtrado (Yee, et al., 2009; Taragaza, et al., 2006; Rinaldoni, et al., 2009). Sin embargo, a pesar de estos estudios, aún no se conoce exactamente de forma cuantitativa el efecto de los parámetros básicos de un proceso de ultrafiltración, como por ejemplo, la velocidad tangencial o la presión transmembranal, sobre el ensuciamiento de las membranas, por lo que continúan realizándose numerosos trabajos sobre dicha temática (Vincent Vela, 2006).

Esta Tesis Final de Máster está centrada en los resultados experimentales que obtuvo Vincent Vela (2006). Son muchas las publicaciones de modelos físicos aplicados a estos resultados: (Vincent Vela, et al., 2006; Vincent Vela, 2005; Vincent Vela, et al., 2006; Vincent Vela, et al., 2007; Vincent Vela, et al., 2009; Vincent Vela, et al., 2009; Vincent Vela, et al., 2007).

En esta Tesis final de Máster se van a emplear dos tipos de modelos físicos:

- Modelo no empírico: modelo de aplicación de la teoría de la ultrafiltración transversal en el caso dinámico
- Modelos semi-empíricos: modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial

En el caso de los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial, se van a comparar los resultados presentados en (Vincent Vela, 2006) y publicados en (Vincent Vela, et al., 2009) con los resultados que se han obtenido de aplicar las redes neuronales artificiales.

A. *Modelo de aplicación de la teoría de la ultrafiltración transversal en el caso dinámico*

Según este modelo, el descenso de la densidad de flujo de permeado con el tiempo viene descrito por la ecuación 1.

$$J_P(t) = \frac{\Delta P}{\mu \cdot R_m} \cdot \left(1 + 2 \cdot R'_c \cdot \frac{\Delta P}{(\mu \cdot R_m)^2} \cdot \frac{C_0}{C_g - C_0} \cdot t \right)^{-1/2} \quad (\text{Ec. 1})$$

Según el modelo, la densidad de flujo de permeado inicial corresponde al valor para la membrana limpia. A continuación desciende linealmente con el tiempo para periodos cortos de operación, debido al crecimiento de la capa gel. A la vez que la densidad de flujo de permeado disminuye, la velocidad de formación de la capa gel también lo hace. Para periodos largos de operación, la densidad de flujo de permeado es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del tiempo.

En la elaboración del modelo se han considerado las siguientes hipótesis:

- Rechazo completo al paso de moléculas de soluto.
- Presión transmembranal siempre constante.
- Flujo transversal a la membrana.
- R_m constante, por lo tanto no se produce la compactación de la membrana con el tiempo.
- El único mecanismo de ensuciamiento de la membrana es la formación de capa gel.

El modelo (Davis, 1992) ha sido desarrollado para el caso de la ultrafiltración con flujo transversal a la superficie de la membrana. Este modelo ha sido objeto de investigación para su aplicación en la ultrafiltración tangencial en muchas ocasiones. Se ha utilizado en la purificación de disoluciones en la industria azucarera (Jacob, et al., 2000), en la recuperación de proteínas (Parnham, et al., 1996), en la separación de un biocatalizador (Meindersma, et al., 1997), etc. Pero mayoritariamente se ha aplicado de manera empírica, obteniendo los parámetros del modelo mediante ajuste de datos experimentales.

B. Modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial

La forma habitual de llevar a cabo el proceso de UF es utilizando un flujo de alimentación que circula en dirección tangencial a la superficie de la membrana, contrariamente a las hipótesis consideradas por Hermia. Considerando que en el proceso de UF el flujo es tangencial a la membrana, de Barros *et al.* (2003) modificaron la ecuación general de los modelos de Hermia obteniendo la ecuación 2:

$$-\frac{dJ_p}{dt} = K_{CF} \cdot (J_p - J_{PSS}) \cdot J_p^{2-n_{CF}} \quad (\text{Ec. 2})$$

A partir del ajuste empírico del modelo a los resultados experimentales se puede estimar el valor de n_{CF} . De este modo se puede deducir el mecanismo de ensuciamiento involucrado en un determinado proceso de ultrafiltración.

Para diferentes valores de n_{CF} , se obtienen los distintos Modelos de Hermia adaptados para flujo tangencial.

Modelo de bloqueo completo de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 2$)

Para realizar la adaptación del modelo al caso del flujo tangencial se considera que, dependiendo de la velocidad tangencial, la densidad de flujo de permeado se puede incrementar aumentando la presión transmembranal. La ecuación resultante en este caso es la Ec. 3:

$$J_p = J_{PSS} + (J_0 - J_{PSS}) \cdot e^{-K_{CCF} \cdot J_0 \cdot t} \quad (\text{Ec. 3})$$

Siendo K_{CCF} el área de membrana bloqueada por unidad de volumen de permeado y de porosidad inicial de superficie de membrana. La expresión para determinar el parámetro K_{CCF} es la siguiente (Ec. 4):

$$K_{CCF} = \frac{3 \cdot \rho_m \cdot X_m}{4 \cdot \rho_s \cdot a_p \cdot \psi} \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde: ρ_m es la densidad de la disolución alimento sobre la superficie de la membrana, X_m la fracción másica del soluto sobre la superficie de la membrana, ρ_s la densidad del soluto, ψ el factor de forma del soluto y a_p el radio de una molécula de soluto.

Modelo de bloqueo intermedio de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 1$)

Este modelo adaptado para flujo tangencial (Ec. 5) tiene en cuenta la situación dinámica de bloqueo-desbloqueo de poros que se produce por efecto del flujo tangencial a la superficie de la membrana.

$$J_p = \frac{J_0 \cdot J_{PSS} \cdot e^{K_{ICF} \cdot J_{PSS} \cdot t}}{J_{PSS} + J_0 \cdot (e^{K_{ICF} \cdot J_{PSS} \cdot t} - 1)} \quad (\text{Ec. 5})$$

Siendo K_{ICF} el área de membrana bloqueada por unidad de volumen de permeado y por unidad de porosidad inicial de la superficie de la membrana. Este parámetro se calcula de forma equivalente a la constante K_{CCF} del modelo de bloqueo completo de poros adaptado a flujo tangencial (Ec. 4).

Modelo de bloqueo estándar de poros para flujo tangencial ($n_{CF} = 3/2$)

En este caso, puesto que el ensuciamiento tiene lugar en el interior de la membrana, no se ve afectado por el valor de la velocidad tangencial aplicada, y la densidad de flujo de permeado no presenta un valor límite. Además, como el transporte de las moléculas de soluto desde la membrana a la disolución alimento no se produce, la ecuación general para este modelo coincide con la ecuación desarrollada en el caso de la ultrafiltración convencional, es decir, coincide con la ecuación del modelo de bloqueo estándar de poros convencional (Ec. 6).

$$\frac{1}{J_P^{1/2}} = \frac{1}{J_0^{1/2}} + K_{eCF} \cdot t \quad (\text{Ec. 6})$$

De igual forma, el parámetro K_{eCF} , que constituye la constante característica del modelo de bloqueo de poros estándar adaptado a flujo tangencial se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$K_{eCF} = 2 \cdot \frac{K_g}{A_0} \cdot A \cdot J_0^{1/2} \quad (\text{Ec. 7})$$

Modelo de formación de capa gel para flujo tangencial ($n_{CF} = 0$)

Se introduce la influencia de la velocidad tangencial incluyendo un término que considere la erosión de la capa gel, obteniendo la ecuación 8.

$$t = \frac{1}{K_{cgCF} \cdot J_{PSS}^2} \cdot \ln \left(\frac{J_P}{J_0} \cdot \frac{J_0 - J_{PSS}}{J_P - J_{PSS}} - J_{PSS} \cdot \left(\frac{1}{J_P} - \frac{1}{J_0} \right) \right) \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde K_{cgCF} es el parámetro principal del modelo, que viene definido de acuerdo con la ecuación 9:

$$K_{cgCF} = \frac{a \cdot K_G}{J_0 \cdot R_m} \quad (\text{Ec. 9})$$

Siendo: a la resistencia específica de la capa gel (calculada como el cociente entre la masa acumulada de soluto en la membrana por unidad de área de la misma) y K_G la masa de la capa gel por unidad de volumen de permeado.

2.1.4. Aplicaciones de la ultrafiltración

Las aplicaciones de un proceso de ultrafiltración dependen de la corriente de salida que interese teniendo. Hay sectores donde ambas corrientes se aprovechan aguas abajo del proceso de UF. De manera que atendiendo a la descripción de las corrientes de salida:

- Permeado: corriente con concentraciones bajas de la sustancia selectiva de la membrana.
- Rechazo: corriente con concentraciones relativamente elevadas de la sustancia selectiva de la membrana (en todo caso más alta que la concentración de alimentación).

La valorización de la corriente de permeado implica que el objetivo del proceso sea la eliminación o dilución de las sustancias selectivas de la membrana con respecto a la corriente de alimento. Entre otras aplicaciones:

- Tratamiento de aguas residuales:
 - o Proceso terciario
 - o Pretratamiento de un proceso de ósmosis inversa
- Potabilización de aguas
- Desalación de aguas
 - o Pretratamiento de un proceso de ósmosis inversa
- Clarificación de Jugos de zumos de frutas
- Filtración (clarificación) de Vinos y Cerveza

La valorización de la corriente de rechazo implica que el objetivo del proceso sea una concentración de las sustancias selectivas de la membrana con respecto a la corriente de alimento. Entre otras aplicaciones:

- Concentración de proteínas
- La concentración de la leche antes de hacer queso
- Aguas abajo de procesamiento (por ejemplo, la concentración) de las proteínas derivadas de la biotecnología (por ejemplo, anticuerpos terapéuticos)
- Recuperación de vacunas y antibióticos de fermentación caldo

2.2. Redes neuronales artificiales

Las redes neuronales artificiales (ANN) proporcionan un medio para hacer frente a problemas de patrones orientados complejos y de series de tiempo (análisis de tendencias). La naturaleza no paramétrica de los modelos de redes neuronales permite que se desarrolle sin tener ningún conocimiento previo de la distribución de la población de datos o los posibles efectos de interacción entre las variables como se requiere en los métodos paramétricos estadísticos.

Las redes neuronales artificiales son una tecnología basada en estudios sobre el sistema nervioso y al cerebro como se muestra en la Figura 6.

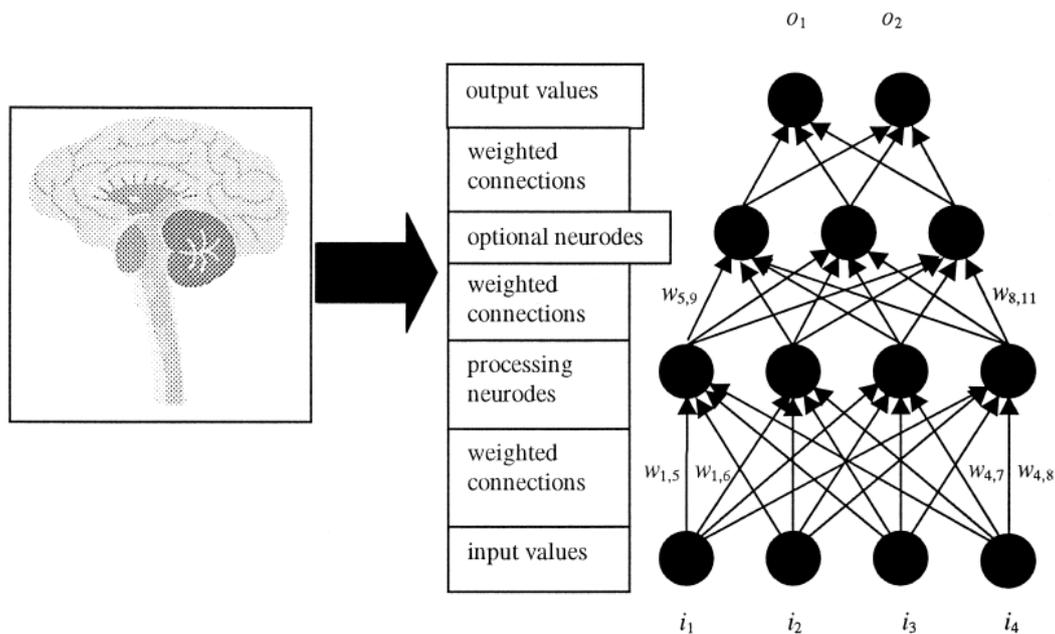


Figura 6: Muestra de la arquitectura de una red neuronal (no muestra todos los pesos). (Walczak, et al.)

Las redes neuronales artificiales emulan a una red neuronal biológica, que utilizan un conjunto reducido de conceptos biológicos de los sistemas neuronales. Específicamente, los modelos ANN simulan la actividad eléctrica del sistema nervioso y del cerebro. Los elementos de proceso (también conocidos como neuronas o perceptrones) están conectados a otros elementos de procesamiento. Normalmente las neuronas están dispuestas en una capa o vector, con la salida de una capa sirviendo como la entrada a la capa siguiente y posiblemente de otras capas. Una neurona puede estar conectada a todos o un subconjunto de las neuronas en la capa posterior, con estas conexiones simulando las conexiones sinápticas del cerebro. Los pesos de las señales de datos que entran en una neurona simulan la excitación eléctrica de una célula nerviosa y en consecuencia la transferencia de información dentro de la red o el cerebro. Los valores de entrada a un elemento de tratamiento se multiplican por un peso de conexión, $w_{n,m}$, que simula el fortalecimiento de las vías neuronales en el cerebro. Es a través de la adaptación de las fuerzas de las conexiones o de los pesos que el aprendizaje se puede emular en el ANN.

Teóricamente, para simular la actividad asincrónica del sistema nervioso humano, los elementos de procesamiento de la red neuronal artificial también deben ser activados con la señal de entrada ponderada de manera asincrónica. Sin embargo, la mayoría de las implementaciones de software y hardware de redes neuronales artificiales ponen en práctica un enfoque más discreto que garantiza que cada elemento de proceso se activa una vez por cada presentación de un vector de valores de entrada.

El desarrollo de diseños de ANN requiere tomar muchas decisiones, tales como valores de entrada, la formación y los datos de prueba, los tamaños de los conjuntos de algoritmos de aprendizaje, la arquitectura de red o topología, y la función de

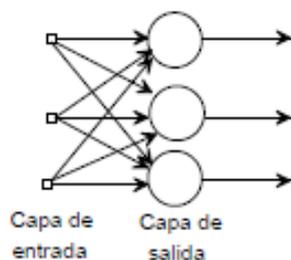
transferencia. Varias de estas decisiones dependen el uno del otro. Por ejemplo, la arquitectura ANN y el algoritmo de aprendizaje determinará el tipo de valor de entrada (es decir, binario o continuo). Por lo tanto, es esencial para seguir una metodología o una secuencia bien definida de pasos cuando el diseño de las redes neuronales artificiales. Estos pasos se enumeran a continuación:

- Determinación de los datos para la aplicación de la ANN.
- Determinar las variables de entrada
- Separar los datos en los subconjuntos de entrenamiento y test.
- Definir la arquitectura de la red neuronal.
- Seleccionar el algoritmo de aprendizaje de los pesos de la red.
- Introducir las variables de entrada en la red.
- Entrenamiento de la red neuronal (repetir hasta que el error sea menor que el error aceptable).
- Test (muestra de validación de los resultados de la red neuronal entrenada).

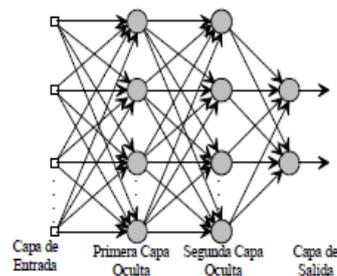
2.2.1. Tipos de redes neuronales artificiales

Las estructuras neuronales fruto de las conexiones de las neuronas pueden clasificarse de diferentes formas:

- Según el número de capas
 - Redes neuronales monocapas: se corresponde con la ANN más sencilla, ya que se tiene una capa de neuronas que proyectan las entradas a una capa de neuronas de salida donde se realizan diferentes cálculos. La capa de entrada, por no realizar ningún cálculo, no se cuenta. De ahí el nombre de redes neuronales monocapa.
 - Redes neuronales multicapa: es una generalización de la anterior existiendo un conjunto de capas intermedias entre la entrada y la salida (capas ocultas). Este tipo de red puede estar total o parcialmente conectada.



(a)



(b)

Figura 7: Redes neuronales artificiales según el número de capas. (a): ANN monocapa; (b) ANN multicapa.

b. Según el tipo de conexiones

- Redes neuronales no recurrentes: en esta red la propagación de las señales se produce en un sentido solamente, no existiendo la posibilidad de realimentaciones, por lo que no tienen memoria. La red de la Figura 8 (a) es no recurrente, como las utilizadas en el presente trabajo.
- Redes neuronales recurrentes: esta red viene caracterizada por la existencia de lazos de realimentación. La retroalimentación contiene un retraso que permite retener los valores del primer paso para usarlo en el posterior paso de procesamiento. De este modo la red puede grabar información como referencia futura e identificar patrones tanto temporales como espaciales.

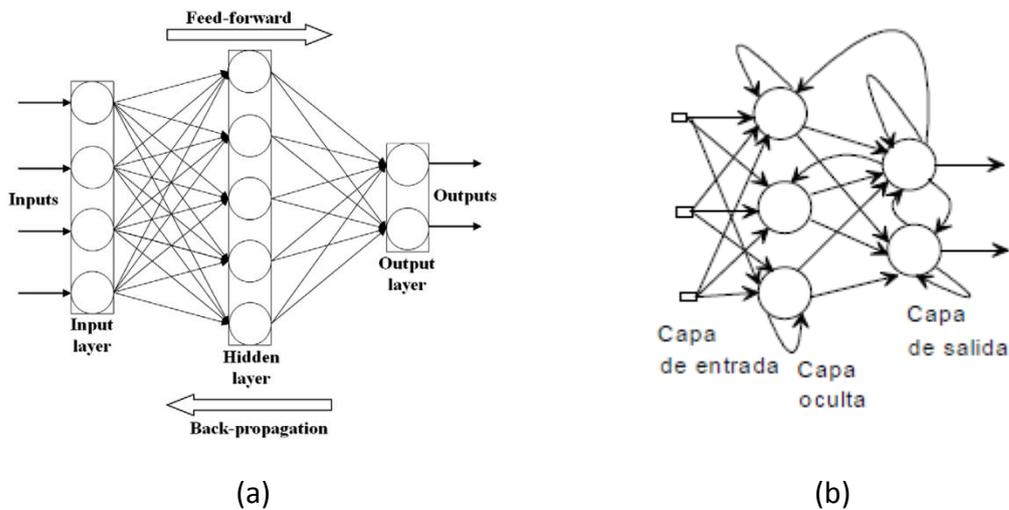


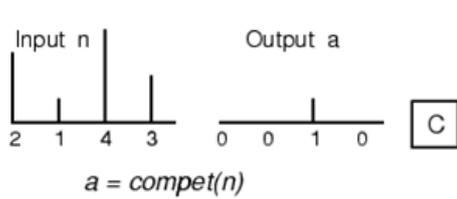
Figura 8: (a): ANN no recurrente; (b): ANN recurrente.

c. Según el grado de conexión

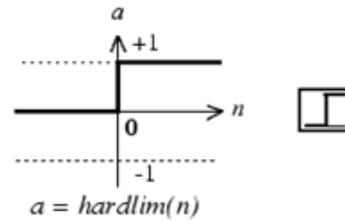
- Redes neuronales totalmente conectadas: En este caso todas las neuronas de una capa se encuentran conectadas con las de la capa siguiente (redes no recurrentes) o con las de la capa anterior (redes recurrentes).
- Redes parcialmente conectadas: En este caso no se da la conexión total entre neuronas de diferentes capas.

2.2.2. Funciones de transferencia, métodos de entrenamiento y de aprendizaje

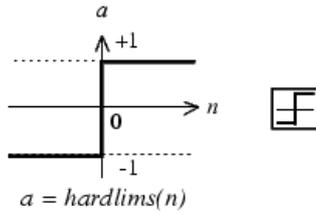
Los nodos o neuronas de una red neuronal aplican las funciones de transferencia a las entradas a dicho nodo. Existen diversas maneras de configurar una neurona. Entre las cuales se van a destacar:



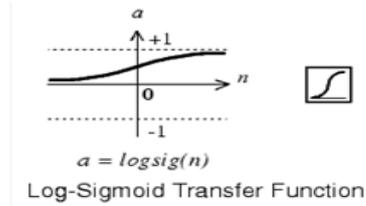
(a)



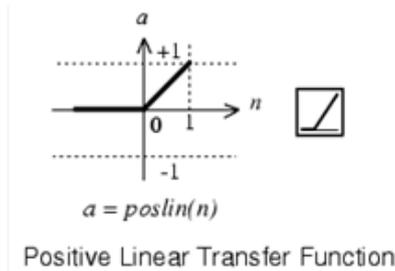
(b)



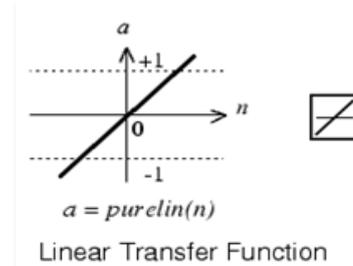
(c)



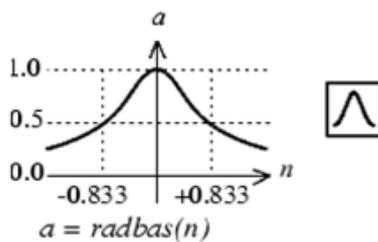
(d)



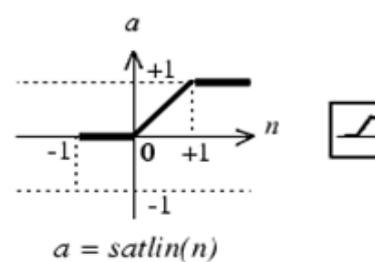
(e)



(f)



(g)



(h)

Figura 9: Funciones de transferencia de las ANN I. (a): Función de transferencia competitiva; (b): Función de transferencia escalón unidad; (c): Función de transferencia escalón simétrico; (d): Función de transferencia log-sigmoid; (e): Función de transferencia lineal positiva; (f): Función de transferencia lineal; (g): Función de transferencia de base radial; (h): Función de transferencia lineal saturada.

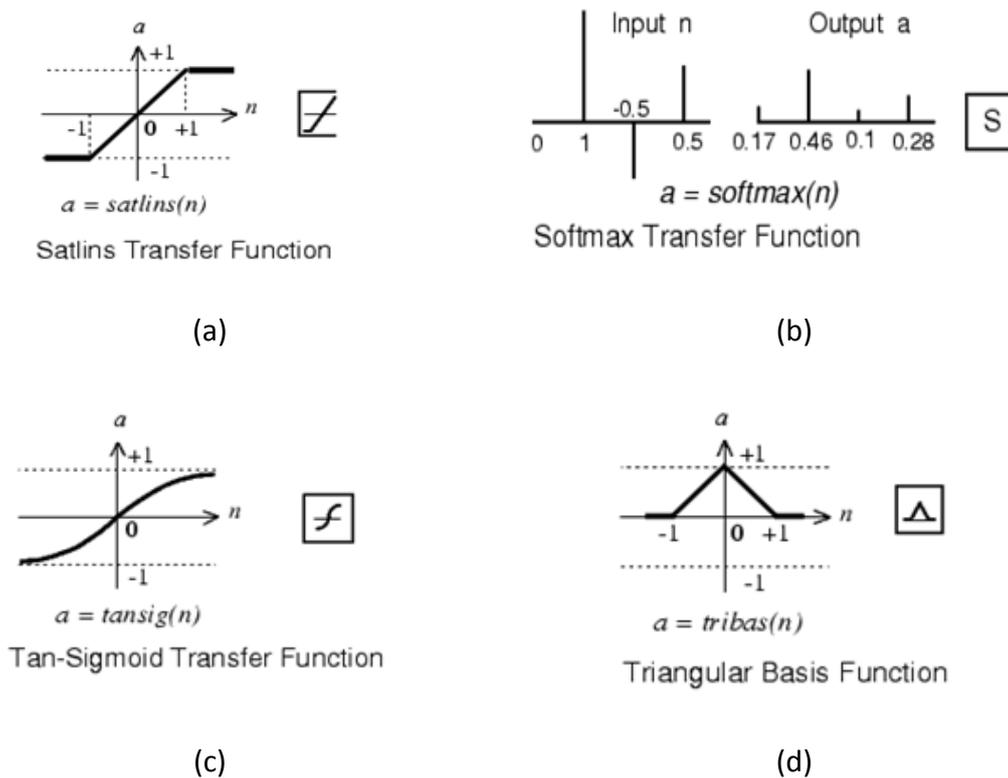


Figura 10: Funciones de transferencia de ANN II. (a): Función de transferencia lineal saturada simétrica; (b): Función de transferencia softmax; (c): Función de transferencia tan-sigmoid; (d): Función de transferencia de base triangular

El funcionamiento de un nodo o neurona se explica mediante la siguiente figura:

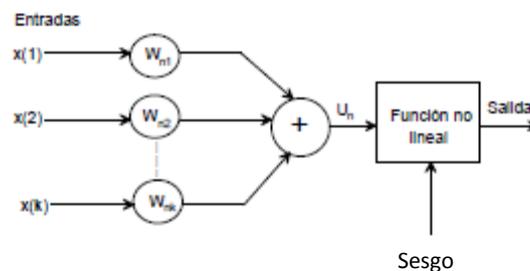


Figura 11: Funcionamiento de un nodo o neurona de una red neuronal artificial.

Las señales transferidas desde nodos de capa anterior (n-1) se suman, de manera que las entradas finales al nodo o neurona j de la capa n son este sumatorio y el sesgo de la capa anterior (n-1).

$$Salida_{n,j} = f\left(\left(\sum_i \sum w_i \cdot Salida_{n-1,i}\right) + sesgo_{n-1}\right) \quad (\text{Ec. 10})$$

En cuanto a los métodos de aprendizaje, se trata de algoritmos que aplican cambios a los pesos de la red neuronal. Antes de definir las diferentes funciones de aprendizaje, se van a explicar las estrategias de aprendizaje para las redes neuronales artificiales.

La siguiente figura muestra una clasificación de las ANN según el tipo de aprendizaje:

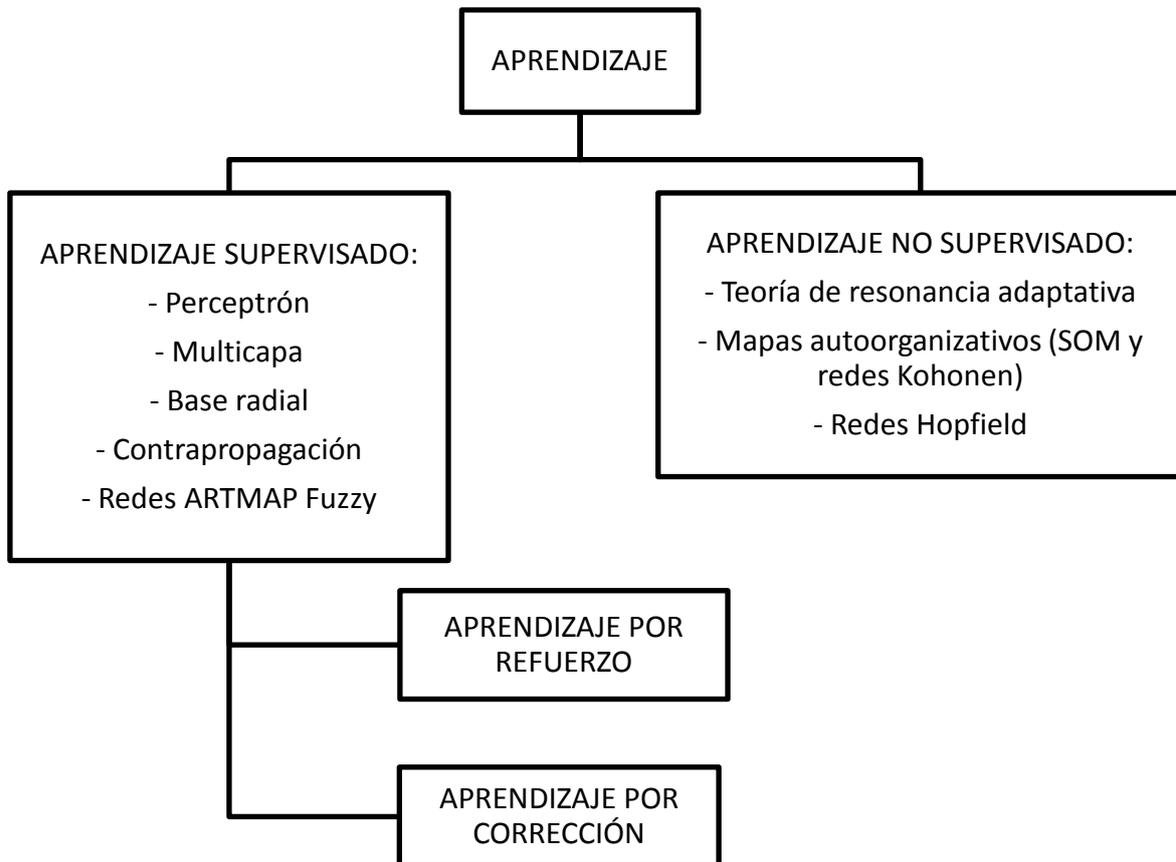


Figura 12: estrategias de aprendizaje de las redes neuronales artificiales.

La primera división de los métodos de aprendizaje es entre los algoritmos supervisados y los no supervisados. En los no supervisados se desconoce la señal que debe dar la red neuronal. La red, en este caso, se organiza a si misma agrupando, según sus características, las diferentes señales de entrada. Estos sistemas proporcionan un método de clasificación de las diferentes entradas mediante técnicas de agrupamiento.

El aprendizaje supervisado introduce en la red neuronal las salidas que debe proporcionar ante las señales de entrada que se le presentan. Se observa la salida de la red neuronal y se determina la diferencia entre esta y la señal deseada. Posteriormente, los pesos de la red neuronal son modificados de acuerdo al error cometido. Este aprendizaje puede darse por aprendizaje por refuerzo o por aprendizaje por corrección. En el primer caso solo se conoce si la señal de salida se adecua a la señal deseada (o no) de forma booleana (verdadero o falso). En el caso de aprendizaje por corrección se conoce la magnitud de la desviación entre la señal de salida y la deseada.

En la siguiente tabla se muestran las opciones de entrenamiento de las redes neuronales disponibles según el tipo de red neuronal artificial empleada.

Tabla 3: Tipos de entrenamiento de los pesos de las ANN

Función de entrenamiento	Ecuación en Matlab	Tipos de ANN
Función de aprendizaje diagonal de la conciencia	learncon	Aprendizaje supervisado
Función de aprendizaje gradiente de descendente	learnngd	tipo multicapa
Función de aprendizaje gradiente de descendentes con momento	learnngdm	tipo multicapa
Función de aprendizaje de Hebb	learnh	Aprendizaje no supervisado
Función de aprendizaje de Hebb descendente	learnhd	Aprendizaje no supervisado
Función de aprendizaje de pesos instar	learnis	Aprendizaje supervisado
Función de aprendizaje de pesos Kohonen	learnk	Kohonen
Función de aprendizaje de pesos LVQ1	learnlv1	Aprendizaje supervisado
Función de aprendizaje de pesos LVQ2	Learnlv2	Aprendizaje supervisado
Función de aprendizaje de pesos outstar	learnos	Aprendizaje supervisado
Función de aprendizaje de pesos y sesgos perceptrón	learnp	Perceptrón simple
Función de aprendizaje de pesos y sesgos perceptrón normalizado	learnpn	Perceptrón simple
Función de aprendizaje mapa de pesos autoorganizativos	learnsom	SOM
Función de aprendizaje mapa de pesos autoorganizativos por lotes	learnsomb	SOM
Función de aprendizaje de pesos y sesgos Widrow-Hoff	learnwh	Aprendizaje supervisado

Los métodos para entrenar las redes neuronales con el fin de encontrar el valor de los pesos que cumplan con el objetivo de error admisible se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 4: Diferentes algoritmos de entrenamiento de redes neuronales, ordenados según su lentitud de cálculo.

Algoritmos	Secuencia de Matlab
Variable	Traingdx
Rprop	Trainrp
Gradiente conjugado escalar	Trainscg
Flecher Powel CG	Traincgf
Polak Ribière CG	Traincgp
Powell Beale CG	Traincgb
Secante de un paso	Trainoss
Quasi Newton BFGS	Trainbfg
Levenberg Marquardt	Trainlm

Ghandehari (2011) realizó un estudio sobre que algoritmo de entrenamiento genera los mejores resultados sobre un proceso de microfiltración. En este estudio se comparaban las técnicas Rprop, gradiente conjugado escalar, quasi newton y Levenberg Marquardt. Los resultados indican que los mejores ajustes los ofrece el método Levenberg Marquardt.

Sarkar (2009) comparó varios métodos de entrenamiento para un proceso de ultrafiltración. En él se observaba que no diferencias significativas con respecto al ajuste de los datos salvo para los métodos gradiente descendente de retropropagación (traingd), gradiente descendente adaptativo de retropropagación (traingda) y gradiente descendente con momento de retropropagación (traingdm).

2.2.3. Aplicaciones de las redes neuronales artificiales

Las características especiales de los sistemas de redes neuronales artificiales es que permiten que sea utilizada esta nueva técnica de cálculo en una extensa variedad de aplicaciones.

Las redes neuronales artificiales presentan resultados razonables en aplicaciones donde las entradas presentan ruido o las entradas están incompletas. Algunas de las áreas de aplicación de las ANN son las siguientes:

- Análisis y Procesado de señales
- Reconocimiento de Imágenes
- Control de Procesos
- Filtrado de ruido
- Robótica
- Procesado del Lenguaje
- Diagnósticos médicos
- Otros

Conversión Texto a Voz: la conversión texto-voz consiste en cambiar los símbolos gráficos de un texto en lenguaje hablado. El sistema de red neuronal llamado NetTalk convierte texto en fonemas y con la ayuda de un sintetizador de voz generando voz a partir de un texto escrito.

La ventaja que ofrece la computación neuronal frente a las tecnologías tradicionales en la conversión texto-voz es la propiedad de eliminar la necesidad de programar un complejo conjunto de reglas de pronunciación en el ordenador. A pesar de que el sistema NetTalk ofrece un buen comportamiento, la computación neuronal para este tipo de aplicación abre posibilidades de investigación y expectativas de desarrollo comercial.

Procesado Natural del Lenguaje: incluye el estudio de cómo se construyen las reglas del lenguaje. Las características propias de la computación neuronal como la capacidad de generalizar a partir de datos incompletos y la capacidad de abstraer, permiten al sistema generar buenos pronósticos para verbos nuevos o verbos desconocidos.

Compresión de Imágenes: la compresión de imágenes es la transformación de los datos de una imagen a una representación diferente que requiera menos memoria o que se pueda reconstruir una imagen imperceptible. Se han diseñado sistemas de compresión de imágenes utilizando redes neuronales con un factor de compresión de 8:1.

Reconocimiento de Caracteres: es el proceso de interpretación visual y de clasificación de símbolos. Se han desarrollado un sistema de redes neuronales que tras el entrenamiento con un conjunto de tipos de caracteres de letras, es capaz de interpretar un tipo de carácter o letra que no haya visto con anterioridad.

Reconocimiento de Patrones en Imágenes: una aplicación típica es la clasificación de objetivos detectados por un sonar. Existen varias ANN basadas en la Backpropagation cuyo comportamiento es comparable con el de los operadores humanos. Otra aplicación normal es la inspección industrial.

Problemas de Combinatoria: en este tipo de problemas la solución mediante cálculo tradicional requiere un tiempo de proceso (CPU) que es exponencial con el número de entradas. Un ejemplo es el problema del vendedor; el objetivo es elegir el camino más corto posible que debe realizar el vendedor para cubrir un número limitado de ciudades en un área geográfica específica. Este tipo de problema ha sido abordado con éxito por Hopfield y el resultado de su trabajo ha sido el desarrollo de una ANN que ofrece buenos resultados para este problema de combinatoria.

Procesado de la Señal: en este tipo de aplicación existen tres clases diferentes de procesado de la señal que han sido objeto de las ANN como son la predicción, el modelado de un sistema y el filtrado de ruido.

- **Predicción:** en el mundo real existen muchos fenómenos de los que conocemos su comportamiento a través de una serie temporal de datos o valores. Se ha demostrado que la red backpropagation supera en un orden de magnitud a los métodos de predicción polinómicos y lineales convencionales para las series temporales caóticas.
- **Modelado de Sistemas:** los sistemas lineales son caracterizados por la función de transferencia que no es más que una expresión analítica entre la variable de salida y una variable independiente y sus derivadas. Las ANN también son capaces de aprender una función de transferencia y comportarse correctamente como el sistema lineal que está modelando.
- **Filtro de Ruido:** las ANN también pueden ser utilizadas para eliminar el ruido de una señal. Estas redes son capaces de mantener en un alto grado las estructuras y valores de los filtros tradicionales.

Modelos Económicos y Financieros: una de las aplicaciones más importantes del modelado y pronóstico es la creación de pronósticos económicos como por ejemplo los precios de existencias, la producción de las cosechas, el interés de las cuentas, el volumen de las ventas etc. Las redes neuronales están ofreciendo mejores resultados en los pronósticos financieros que los métodos convencionales.

Servo Control: un problema difícil en el control de un complejo sistema de servomecanismo es encontrar un método de cálculo computacional aceptable para compensar las variaciones físicas que se producen en el sistema. Entre los inconvenientes destaca la imposibilidad en algunos casos de medir con exactitud las variaciones producidas y el excesivo tiempo de cálculo requerido para la obtención de la solución matemática. Existen diferentes redes neuronales que han sido entrenadas para reproducir o predecir el error que se produce en la posición final de un robot. Este error se combina con la posición deseada para proveer una posición adaptativa de corrección y mejorar la exactitud de la posición final.

Una vez se han definido las capacidades de las redes neuronales artificiales se puede definir sus aplicaciones a través de los campos de conocimiento donde se aplican. Los campos donde se aplican las redes neuronales artificiales son los siguientes:

- 1- Medicina: problemas de diagnóstico médico. Es uno de los campos con más futuro y de los menos desarrollados. Las aplicaciones de modelización están relacionadas con el procesado de señales biomédicas como el electrocardiograma fetal (FECG), el electromiograma (EMG), electroencefalograma (EEG), etc.
 - a. Diagnóstico de cardiopatías: mediante perceptrón multicapa y de base radial, aunque también se han aplicado los mapas autoorganizativos,

- Fuzzy ARTMAP, redes neuronales probabilísticas y combinaciones de perceptrones.
 - b. Detección de tumores cancerígenos: mediante el análisis de imágenes.
 - c. Determinación de los puntos característicos del electrocardiograma (ECG): identificación de los puntos del ECG que serán usados posteriormente por el cardiólogo.
- 2- Farmacia: estrechamente unidas a las anteriores. Diagnóstico de posibles efectos adversos de la administración de un fármaco.
- a. Predicción del riesgo de intoxicación por digoxina: predicción del posible riesgo de intoxicación.
 - b. Predicción de la respuesta emética: relacionada con el número de náuseas y vómitos que siente un paciente oncológico tras un tratamiento con quimioterapia.
 - c. Predicción del nivel de Tacrolimus en sangre: para terapias post-trasplante. Se emplean perceptrones multicapa para la predicción del nivel de este fármaco en sangre según las dosis.
 - d. Predicción del nivel de ciclosporina: para evitar el rechazo en trasplantes de riñón, corazón, pulmón e hígado. Predecir la concentración de este fármaco a corto plazo ayudaría a la optimización de la siguiente dosis.
- 3- Procesamiento de una señal: es uno de los principales campos de aplicación.
- a. Ecuilibración de canales de comunicación: recuperación de señales que, al pasar a través de un canal de comunicación, sufre distorsiones. Si la señal es de tipo binario este problema se puede considerar como un problema de clasificación. Dentro de esta aplicación se identifica la eliminación del ruido.
 - b. Reconocimiento de patrones en imágenes: evidencia la capacidad de las ANN, ya que trata una tarea relativamente sencilla para un ser humano pero tremendamente costosa de implementar en un sistema artificial.
 - c. Reconocimiento de voz: de gran importancia para la implantación de sistemas controlados por la voz.
 - d. Sonar y Radar: clasificación de determinados objetos (imágenes, sonidos, señales unidimensionales, etc.) permite su aplicación en este campo con dispositivos para identificar objetos.
 - e. Control: se entrena la red neuronal para poder realizar predicciones de comportamiento que facilite el control.

- 4- Economía: se trata de un campo donde se toman decisiones entre una serie de opciones. Las ANN son directamente aplicables frente a otros métodos por sus características intrínsecamente no lineales.
 - a. Concesión de créditos: a partir de determinados marcadores económicos de la persona que pide el préstamo decide su posible viabilidad.
 - b. Detección de posibles fraudes en tarjetas de crédito: empleadas como elementos discriminatorios para conceder determinada cantidad en un cajero automático.
 - c. Determinación de la posibilidad de quiebra de un banco: determina el riesgo de quiebra a partir de determinados parámetros económicos.
 - d. Predicción del gasto eléctrico de empresas y centrales: a partir de la estimación del consumo energético se puede administrar mejor los recursos de que dispone la empresa.
 - e. Tendencias a corto y medio plazo en bolsa de valores: se están comercializando un gran número de productos derivados de las ANN.
 - f. Predicción de stocks: uno de los principales problemas que se encuentra una fábrica es la falta o exceso de suministros.
- 5- Medio ambiente: el medio es un ambiente dinámico y no lineal.
 - a. Predicción de la irradiación solar: junto con otros muchos trabajos encaminados a la predicción de manchas solares han sido la base para la aplicación a otros problemas medioambientales.
 - b. Predicción de niveles tóxicos de ozono en zonas urbanas y rurales: predicciones de su concentración a corto plazo en las zonas bajas de la atmósfera puede conducir a la aplicación de medidas de prevención para evitar los efectos perniciosos sobre la salud de esta sustancia.
 - c. Predicción de variaciones globales de temperatura: por ejemplo, las variaciones de las temperaturas marinas, ya que alertan sobre la formación de huracanes y tormentas.

Las diferentes áreas del conocimiento donde se pueden aplicar las ANN quedan reflejadas en la siguiente tabla:

Tabla 5: Aplicaciones de las redes neuronales artificiales según el área de aplicación.

Campo de investigación	Aplicaciones
Ciencias informáticas	Aprendizaje de sistemas, procesamiento de información no simbólica, etc.
Estadística	Modelos clasificadores, regresiones no lineales, etc.
Ingenierías	Control automático, procesamiento de señales, etc.
Ciencias del conocimiento	Modelos de pensamiento y conciencia (Función cerebral de Alto Nivel)
Neurofisiología	Modelos de memoria, sistemas de sensores y motores (Función cerebral de Nivel Medio)
Física	Modelos de fenómenos en mecánica estadística, etc.
Biología	Interpretación de secuencias de nucleótidos, etc.

2.2.4. Aplicación de redes neuronales artificiales en tecnología de membranas

Atendiendo a lo explicado en el apartado anterior, la aplicación de las redes neuronales sobre los procesos de membranas se centran en la modelización de los resultados obtenidos y el control automático del proceso.

En el caso de la modelización se estudia tanto la modelización dinámica de los ensayos desarrollados a diferentes condiciones experimentales como la modelización de los estados estacionarios a los que se llega a partir de una serie de condiciones experimentales.

El control automático del proceso mediante redes neuronales artificiales se centra, no exclusivamente, en encontrar la secuencia controlada de proceso-limpieza que optimice el proceso.

Son muchos los trabajos publicados de redes neuronales artificiales sobre procesos de membrana empleando, en su mayoría, redes neuronales del tipo multicapa (perceptrón multicapa o retropropagación) y del tipo de base radial. En la siguiente tabla se observa un resumen de alguno de estos trabajos:

Tabla 6: Resultados de aplicar redes neuronales artificiales a procesos de membrana.
BP(2)=retropropagación con dos capa intermedias. RE=error relativo; Emin=desviación mínima;
Emax=desviación máxima; Emedia=desviación media. Norm: normalización de la densidad de flujo
volumétrica.

Proceso	ANN	Pret	Datos Train	Neur	Precisión	Ref.
MF	BP	Norm	50%	3-10	MSE=0.04-0.01	(Chellam, 2005)
MF de suspensiones de bentonita	PM	No	73.6%	5-10	RE<10	(Hamachi, et al., 1999)
UF de leche	PM	No	10% manual	3-11	E _{min} =1.06 E _{max} =3.61	(Razavi, et al., 2004)
UF de leche desnatada	PM	No	10% manual	3-15	E _{max} =3.0 E _{media} =1.0	(Razavi, et al., 2003)
UF tratamiento de aguas	PM	No	-	-	E _{max} =2.89 E _{media} =1.37	(TEODOSIU, et al., 2000)
UF agua potable	PM	No	31.39%	5-10	RE<5	(Delgrange, et al., 1998)
UF y MF	BP(2)	Norm	28.6% manual	(4-9) (2-4)	R ² >0.99	(Sahoo, et al., 2006)
UF y MF	BR	No	16.93% manual		R ² =0.988 RMSE=0.082	(Chen, et al., 2006)
UF Y MF	BP(2)	No	16.93% manual	4 2	R ² =0.958 RMSE=0.156	(Chen, et al., 2006)
UF	PM	No	1/3	5	R ² > 92%	(Rahmanian, et al., 2011)
UF	PM	Norm	67.8%	3-12	R ² =0.998-1	(Sarkar, et al., 2009)
NF y OI	BP	Norm	80%	2-7	MSE=(0.53-2.03)·10 ⁻⁴	(Purkait, et al., 2009)
NF y OI	BP BP(2)	Norm	90%	3-4 (2-6) (1-5)	MSE=(4.33-4.67)·10 ⁻⁴ MSE=(2.10-7.33)·10 ⁻⁴	(Purkait, et al., 2009)

2.2.5. Comparación entre modelos teóricos y redes neuronales artificiales

Para caracterizar la capacidad de modelización de las redes neuronales artificiales, se deben comparar los resultados de los parámetros de ajuste obtenidos con los respectivos parámetros para los modelos teóricos con el fin de determinar que método es más adecuado para la modelización de los datos.

Para el caso de la tecnología de membranas no hay muchos estudios que hayan realizado esta comparación. Concretamente se han encontrado dos publicaciones con este tipo de estudio (Ghandehari, et al., 2011; Aydinera, et al., 2005). Por esta razón se van a introducir comparaciones entre ANN y modelos teóricos de otros campos de estudio con el fin de caracterizar este tipo estudio en trabajos anteriores.

Los resultados de la comparación entre modelos teóricos y redes neuronales artificiales, tanto para el campo de tecnología de membranas como para otros campos, de publicaciones encontradas se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 7: Comparación entre modelos teóricos y redes neuronales artificiales. MSE: error cuadrático medio; RMSD= raíz de la desviación media al cuadrado; AARE= media del error relativo absoluto. ANN: red neuronal artificial: PM=perceptrón multicapa; MC: Multicapa; MDR: diagonal recurrente modifica. (*) Se integra el modelo de Preisach en la red neuronal artificial diagonal recurrente. MSE_{BC}: Bloque completo; MSE_{BI}: Bloqueo intermedio; MSE_{BS}: Bloqueo estándar; MSE_{CG}: Capa gel

Campo	Modelo físico			Tipo	ANN		Referencia
	Modelo	Parámetro de error	R ²		Parámetro de error	R ²	
Tecnología de membranas. MF	Modelos de Hermia	MSE _{BC} =0.042849	0.1867	BP	MSE=0.0027	0.9940	(Ghandehari, et al., 2011)
		MSE _{BI} =0.004489	0.9888				
		MSE _{BS} =0.003249	0.8661				
		MSE _{CG} =0.015376	0.8580				
Tecnología de membranas. MF	Modelo de Koltuniewicz	-	0.914-0.989	BP	-	0.9440-0.9930	(Aydinera, et al., 2005)
		-	-	BP	-	0.9670-0.9990	
Deformación de materiales a altas temperaturas	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	AARE=3.48%	0.9952	MC	AARE=0.58%	0.9998	(Xiao, et al., 2012)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	AARE=7.624%	0.9861	PM	AARE=2.58%	0.9995	(Xiao, et al., 2012), (Ji, et al., 2011)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	AARE=4.09%	0.9941	PM	AARE=0.41%	0.9997	(Xiao, et al., 2012), (Li, et al., 2012)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	AARE=5.45%	-	PM	AARE=1.58%	-	(Xiao, et al., 2012), (Li, et al., 2012)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	RMSD = 5.18%	-	PM	RMSD = 4.28%	-	(Xiao, et al., 2012), (Kapoor, et al., 2005)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	AARE=9.07%	0.9543	PM	AARE=0.13%	0.9995	(Xiao, et al., 2012), (Kalaichelvia, et al., 2009)
	Zener-Hollomon adaptado a un modelo de Arrhenius	-	0.9558	PM	-	0.9931	(Xiao, et al., 2012), (Chen, et al., 2007)

Campo	Modelo físico			ANN			Referencia
	Modelo	Parámetro de error	R ²	Tipo	Parámetro de error	R ²	
Radiación solar y térmica	Ecuación de Angstrom–Prescott	MSE=1.87	0.8980	PM	MSE=1.99	0.9010	(Wan, et al., 2008)
	radiación térmica	(MJ/m ²)			(MJ/m ²)		
	Ecuación de Angstrom–Prescott	MSE=1.88	0.8960	PM	MSE=2.00		
	radiación solar	(MJ/m ²)			(MJ/m ²)		
Histéresis en piezocerámicos	Basado en el modelo de Preisach	MSE=6.6586·10 ⁻⁴	-	MDR*	MSE=5.7197·10 ⁻⁵	-	(Dang, et al., 2005)
Electrodiálisis	Modelo matemático	(μm)	0.9500	PM	(μm)	0.9990	(Sadrzadeh, et al., 2008)
		MSE=38.605			MSE=0.102		
Evapotranspiración	FAO 56 Penman–Monteith E _{PM56}	(%)	-	PM	(%)	-	(Landeras, et al., 2008)
		MSE=0.365-0.528			MSE=0.285-0.433		
	Hargreaves and Samani E _{HS}	(mm/d)	-	PM	(mm/d)	-	
		MSE=0.570			MSE=0.531		
	Priestley and Taylor E _{PT}	(mm/d)	-	PM	(mm/d)	-	
		MSE=0.646			MSE=0.377-0.531		
	Makkink E _{MK}	(mm/d)	-	PM	(mm/d)	-	
		MSE=0.528-0.623			MSE=0.377-0.531		
Turc E _T	(mm/d)	-	PM	(mm/d)	-		
	MSE=0.450-0.558			MSE=0.238-0.385			
		(mm/d)			(mm/d)		

2.3. Procedimiento experimental

En este apartado se expone la metodología experimental con la que se obtuvieron los datos experimentales desarrollada por Vincent Vela (2006).

2.3.1. Planta piloto

Los ensayos de ultrafiltración tangencial se realizaron en la planta piloto que se muestra en la Figura 13, la cual se diseñó en el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la UPV para la realización de (Vincent Vela, 2006).

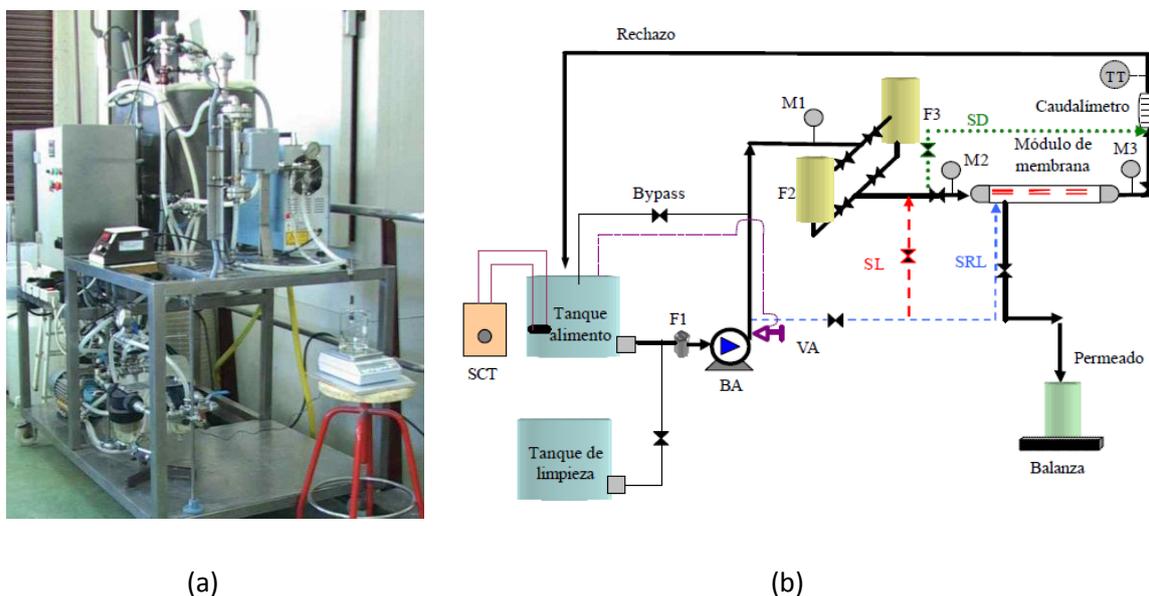


Figura 13: Planta piloto. (a) fotografía de la planta piloto de ultrafiltración utilizada en los ensayos; (b) esquema de la planta piloto de ultrafiltración utilizada en los ensayos

Según se puede observar en el esquema representado en la Figura 13 (b); la planta piloto de ultrafiltración dispone de dos tanques: un tanque de alimentación y otro de limpieza. El tanque de alimentación incorpora un agitador para homogeneizar la disolución alimento y un interruptor de nivel que permite trabajar de forma continua sin parar la instalación. Un filtro de 100 micras situado a la entrada de la bomba de alimentación de velocidad variable retiene cualquier partícula en suspensión, protegiendo la bomba de alimentación.

A la salida de la bomba hay una válvula de seguridad o válvula de alivio de presión que limita la presión máxima de la planta, desviando parte del caudal al tanque de alimentación si se alcanza la presión de tarado, que en este caso es de 7 bar. Dos filtros de 25 micras situados a continuación de la bomba evitan el acceso a la membrana de agregados moleculares del alimento. Sólo uno de estos dos filtros está operativo

durante los ensayos de ultrafiltración. En cada extremo de los filtros se sitúan sendos manómetros para comprobar la caída de presión en los mismos.

Tras los filtros se sitúa el módulo de membrana tubular. La caída de presión se mide mediante otro par de manómetros en cada extremo del módulo. El caudalímetro situado en la corriente de rechazo permite medir el caudal volumétrico. La válvula de regulación situada justo antes del caudalímetro se utiliza para regular la PTM. Un sistema de recogida de permeado con una balanza permite determinar la densidad de flujo de permeado gravimétricamente.

La planta piloto también está equipada con un sistema de lavado y otro sistema para realizar retro-lavados, además de un sistema de control de la temperatura y un sistema de desvío.

El sistema de lavado (SL) consiste simplemente en un tramo de tubería con las correspondientes válvulas para evitar el paso de la disolución de limpieza por los filtros previos a la entrada del módulo de membranas, ya que podría dañarlos.

El sistema de retro-lavado (SRL) está diseñado de forma similar al de lavado, pero en esta ocasión la disolución de limpieza se introduce en el módulo de membrana por el lado del permeado.

El sistema de control de temperatura (SCT) consta principalmente de tres dispositivos: un intercambiador de calor para refrigerar, una resistencia eléctrica para calentar y un sensor de temperatura (TT) situado en la corriente de rechazo.

El sistema de desvío (SD) consiste en un by-pass que permite el paso de la disolución contenida en el tanque por toda la planta de ultrafiltración a excepción del módulo de membrana. De este modo se consigue ajustar la temperatura de ensayo y el caudal de alimentación evitando el contacto de la disolución alimento con la membrana durante el proceso de ajuste de las condiciones de operación.

La disolución alimento es impulsada hacia el módulo de membranas por la bomba de alimentación de velocidad variable, la cual permite operar con diferentes velocidades tangenciales. Dos manómetros situados en cada uno de los extremos del módulo de membranas miden la presión transmembranal, la cual se controla mediante la válvula situada a la salida del módulo (válvula de regulación). El caudalímetro situado en la corriente de rechazo permite controlar de modo continuo el caudal volumétrico de rechazo. La temperatura se mantiene constante gracias al sistema de control de temperatura.

Una vez que la disolución alimento se ha puesto en circulación cerrada a través del SD con el caudal volumétrico y la temperatura deseados, la válvula de acceso al módulo de membrana se abre y se cierra el SD. El caudal volumétrico de rechazo se comprueba con el caudalímetro, mientras que la válvula de regulación se cierra parcialmente hasta

conseguir la presión transmembranal deseada. A partir de este momento se toman medidas continuas de la densidad de flujo de permeado hasta que se alcanza el estado quasi-estacionario.

En la preparación de la disolución acuosa que constituye el alimento se utilizó PEG para síntesis suministrado por Merck-Schuchardt (Alemania). El peso molecular del PEG suministrado es de 35 kDa. Las características del producto se recogen en la Tabla 8.

Tabla 8: Características del PEG empleado en los ensayos.

Parámetro	Valor
Densidad a 20°C (kg/m³)	1200
pH de 100 kg/m³ de PEG en agua a 20°C	5-7
Punto de fusión	60-65
Presión de vapor a 20°C (MPa)	$<1 \cdot 10^{-6}$
Solubilidad en agua a 20°C (kg/m³)	500
Temperatura de descomposición (°C)	220

En la preparación de las disoluciones de limpieza de las membranas CARBOSEP M2 se utilizó NaOH químicamente puro en lentejas suministrado por Panreac (España). Las características del producto se recogen en la Tabla 9.

Tabla 9: Características del NaOH empleado en la preparación de las disoluciones de limpieza para la membrana CARBOSEP.

Parámetro	Valor
Densidad a 20°C (kg/m³)	2130
Punto de fusión	318
Solubilidad en agua a 20°C (kg/m³)	1090

En la preparación de las disoluciones de limpieza de las membranas TAMI MSKT se utilizó, además de NaOH químicamente puro en lentejas suministrado por Panreac (España), NaClO también suministrado por Panreac (España) en una disolución al 10 % (p/v). Las características del producto se recogen en la Tabla 10.

Tabla 10: Características del NaClO empleado en la preparación de las disoluciones de limpieza para la membrana TAMI.

Parámetro	Valor
Densidad a 10°C (kg/m³)	1180
Punto de fusión	318
Solubilidad en agua a 20°C (kg/m³)	Miscibilidad total

El agua desionizada utilizada en la preparación de las disoluciones alimento y las disoluciones de limpieza fue producida en el laboratorio del departamento de Ingeniería Química y Nuclear, mediante el equipo desmineralizador de afino Station 8000 E/35 y la resina de intercambio iónico Station 8000 L 5.2, ambos suministrados por Veolia Water Systems (Francia). El agua desionizada obtenida es de calidad grado reactivo tipo III según la norma ASTM D 1193-91, equivalente al agua bidestilada. Esta agua presenta una conductividad máxima de 0.25 mS/cm. El pH de la misma es aproximadamente estable al carecer ésta de una cantidad suficiente de constituyentes que puedan alterar el pH.

2.3.2. Membranas empleadas

En los ensayos se utilizaron dos tipos de membranas cerámicas monotubulares: membranas CARBOSEP M2 de Orelis, S.A. Francia) y membranas Ceram Inside - MSKTT02510010 de TAMI Industries (Francia). Se trata de membranas comerciales constituidas por un tubo cilíndrico de 20 cm de longitud, 10 mm de diámetro externo y 6 mm de diámetro interno. El área efectiva de las membranas es de 35.5 cm².

Las características de las membranas que se han estudiado se muestran en la Tabla 11:

Tabla 11: Características de las membranas empleadas.

Parámetro	CARBOSEP	TAMI
Denominación	CARBOSEP M2	TAMI MSKTT02510010
Material	ZrO ₂ -TiO ₂ soporte de carbono	Al ₂ O ₃ -TiO ₂ soporte de alúmina
Umbral de corte molecular (kDa)	15	5
Tamaño medio de poro (nm)	4	-

Las especificaciones técnicas de ambas membranas se recogen en la Tabla 12.

Tabla 12: Especificaciones técnicas de las membranas estudiadas.

Parámetro	CARBOSEP M2	TAMI MSKT
Densidad de flujo volumétrico de permeado al agua pura a 25°C y 0.4 MPa (L·hr ⁻¹ ·m ⁻²)	150-350	50-80
Máxima temperatura de operación (°C)	100	150
Máxima presión de operación (MPa)	1.5	4.5
Intervalo de pH	0-14	0-14

2.3.3. Condiciones de ensayo

Ensayos realizados con la membrana CARBOSEP

Se realizaron ensayos de ensuciamiento con la membrana CARBOSEP M2 a diferentes TMPs y velocidades tangenciales. Todos los ensayos con la membrana CARBOSEP M2 se realizaron a una temperatura de 25 °C y una concentración del alimento de 5 g/L.

Las condiciones experimentales consideradas para realizar los ensayos se resumen en la Tabla 13.

Tabla 13: Condiciones experimentales utilizadas en los ensayos de ultrafiltración con las membranas CARBOSEP M2.

Parámetro	Valores
TMP (MPa)	0.1-0.2-0.3-0.4
CFV (m/s)	1-2-3
Temperatura (°C)	25
Concentración de alimento (g/L)	5
Total de ensayos	12

Ensayos realizados con la membrana TAMI

Las condiciones experimentales consideradas para realizar los ensayos se resumen en la Tabla 14.

Tabla 14: Condiciones experimentales utilizadas en los ensayos de ultrafiltración con las membranas TAMI.

Parámetro	Valores
TMP (MPa)	0.2-0.3-0.4-0.5
CFV (m/s)	1-2-3
Temperatura (°C)	25
Concentración de alimento (g/L)	5-10-15
Total de ensayos	36

Se realizaron otros 4 ensayos adicionales para estudiar el efecto de la temperatura, pero como no se van a estudiar en esta Tesis no se van a describir.

2.3.4. Procedimiento experimental

La densidad de flujo de permeado a través de la membrana se determina gravimétricamente mediante pesada de un volumen determinado de permeado equivalente a 2, 3, 4 ó 5 g y recogido en un tiempo determinado que se mide con un cronómetro.

Las lecturas en la balanza se realizan en intervalos de tiempo de 3, 5, 10, 15, 20 y 30 minutos, dependiendo del tiempo transcurrido desde el inicio del experimento. Las lecturas se espacian más al final del experimento, cuando éste se aproxima al estado quasi-estacionario.

Debido a que la concentración de las disoluciones utilizadas es reducida (5, 10 y 15 g/L) y a que dicha concentración aún será menor en el permeado, se ha considerado la densidad de las mismas igual a la densidad del agua a 25 °C ($\rho = 997.07 \text{ kg/m}^3$). Prádanos et al. (1995) han demostrado la validez de esta simplificación en sus ensayos de ultrafiltración con PEG para estas concentraciones.

El volumen recogido se calcula considerando su masa y una densidad de la disolución igual a la del agua a 25°C. Una vez calculado el volumen, la densidad de flujo de permeado se calcula dividiendo el volumen entre el tiempo y el área de la membrana según la ecuación 11.

$$J_P = \frac{V}{t \cdot A} \quad (\text{Ec. 11})$$

Ensayos de caracterización de las membranas de ultrafiltración

Para determinar la permeabilidad al agua pura y la resistencia intrínseca de las membranas se realizaron ensayos con agua desionizada a diferentes TMP (0.1, 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5 MPa). En todos ellos, la velocidad tangencial de circulación del agua desionizada fue de 3 m/s y la temperatura de 25°C.

Todos los ensayos se realizaron a 25°C, ya que ésta es una temperatura de referencia en la bibliografía consultada. La velocidad tangencial no tiene repercusión sobre el comportamiento de la membrana con agua pura.

Durante cada ensayo se midió la densidad de flujo de permeado cada 3 minutos. La duración de cada ensayo fue de 30 minutos. En todos los ensayos se comprobó que el agua desionizada obtenida mediante la resina de intercambio iónico fuese de calidad grado reactivo tipo III. Para ello se midieron la conductividad y el pH, aceptando sólo valores de conductividad inferiores a 0.25 mS/cm y valores de pH entre 5 y 8.

El error relativo que se comete en la medida de la densidad de flujo de permeado al agua pura se calculó tomando como base los trabajos de Daufin et al. (1991) y Daufin et al. (1992). Dicho error se calcula como la suma de los errores relativos cometidos en

cada una de las mediciones necesarias para determinar la densidad de flujo de permeado. Estos errores son los derivados del uso de los siguientes equipos de medida: los manómetros para determinar la presión transmembranal, la balanza para pesar el volumen de permeado recogido, el cronómetro para contabilizar el tiempo en el que se recoge una masa determinada de permeado y el sistema de control de temperatura para mantener constante la temperatura en 25°C. Por lo tanto, el error relativo en la medida de la densidad de flujo de permeado se determina mediante la ecuación 12.

$$\frac{\Delta J_P}{J_P} \leq \frac{\Delta P}{P} + \frac{\Delta m}{m} + \frac{\Delta t}{t} + \frac{\Delta T}{T} \quad (\text{Ec. 12})$$

donde,

$$\frac{\Delta P}{P} = \frac{\Delta P_e}{P_e} + \frac{\Delta P_s}{P_s} \leq 6.67\% \quad (\text{Ec. 13})$$

$$\frac{\Delta m}{m} \leq 0.20\% \quad (\text{Ec. 14})$$

$$\frac{\Delta t}{t} \leq 0.04\% \quad (\text{Ec. 15})$$

$$\frac{\Delta T}{T} \leq 4.00\% \quad (\text{Ec. 16})$$

Resultando un error relativo asociado a la medida de la densidad de flujo de permeado al agua pura igual o inferior al 11%.

$$\frac{\Delta J_P}{J_P} \leq 10.90\% \quad (\text{Ec. 17})$$

Si se considera que la membrana es completamente permeable al agua, la resistencia intrínseca de la misma (R_m) se puede determinar mediante la ecuación de Hagen-Poiseuille (Ec. 18), válida para el flujo de fluidos a través de medios porosos (Cheryan, 1998). Para ello se han ajustado a dicha ecuación los datos experimentales de la densidad de flujo de permeado al agua pura obtenidos para diferentes TMPs.

$$J_P = \frac{\Delta P}{\mu \cdot R_m} \quad (\text{Ec. 18})$$

Las resistencias de las membranas obtenidas resultaron ser de $6.869 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-1}$ para la membrana CARBOSEP M2 y de $2.527 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-1}$ para la membrana TAMI MSKT.

Ensayos de ensuciamiento de las membranas de ultrafiltración

El procedimiento experimental en los ensayos de ensuciamiento fue el siguiente:

1. Se prepara la disolución alimento disolviendo PEG en agua desionizada hasta alcanzar la concentración deseada y se introduce en el tanque de alimentación.
2. Se pone en marcha la instalación evitando el paso de la alimentación a través de la membrana hasta que la temperatura se estabilice en 25 °C.

3. Se pone en marcha el experimento previo desplazamiento del volumen almacenado en la instalación con un volumen superior. Como tiempo cero de inicio del experimento (puesta en marcha del cronómetro), se toma el instante en el que se abre la válvula de permeado una vez fijados la TMP y el caudal. El rechazo y el permeado se recirculan al tanque de alimentación.
4. Se realizan mediciones de la densidad de flujo de permeado.
5. Finalmente, la planta se para cuando hayan transcurrido 7 horas desde su puesta en marcha, tiempo suficiente para alcanzar el estado quasi-estacionario.

Protocolo de limpieza de las membranas de ultrafiltración

Tras cada ensayo de ensuciamiento se efectuó la limpieza de las membranas, para lo que se utilizó el tanque de limpieza que se muestra en la Figura 13 (b).

El protocolo de limpieza de las membranas CARBOSEP M2 consta de las siguientes etapas:

1. Aclarado con agua desionizada (35 minutos).
2. Limpieza con una disolución acuosa de NaOH 0.2% (p/p) en agua desionizada (1.5 horas).
3. Aclarado con agua desionizada (35 minutos).

En el caso de las membranas TAMI MSKT, la segunda etapa de limpieza se realizó con una disolución acuosa de NaClO de 250ppm. Para evitar la corrosión del acero se adicionó NaOH hasta alcanzar un pH de 11. La primera y la tercera etapa de limpieza de las membranas TAMI MSKT fueron iguales a las de las membranas CARBOSEP M2.

Todas las etapas del protocolo de limpieza se realizaron a una temperatura de 50 °C, una PTM cercana a 0 bar y una velocidad tangencial de 3 m/s.

La elección de NaOH como agente de limpieza se debe a que los agentes de ensuciamiento de la membrana son orgánicos, por lo que es aconsejable una limpieza alcalina. El NaOH es una base relativamente económica, habiéndose realizado además numerosos estudios que demuestran su eficacia en la limpieza de membranas (Bartlett, et al., 2002)

A la vista de que los resultados que se obtenían con el NaOH no eran satisfactorios en el caso de las membranas TAMI MSKT; el NaOH se sustituyó por NaClO. El NaClO ha resultado ser efectivo en la limpieza de membranas cerámicas cuyo ensuciamiento se debe a la presencia de materia orgánica (Porter, et al., 1995; Sulaiman, et al., 2001);

Antes de realizar cualquier etapa de limpieza se comprobó previamente que el agua desionizada que se obtiene con la resina de intercambio iónico es de la calidad adecuada, mediante la medida de la conductividad y del pH.

Una vez finalizado el protocolo de limpieza se vació el tanque y se cargó con agua desionizada para medir la densidad de flujo de permeado, comprobando previamente la calidad del agua. Dicha medida se realizó a una temperatura de 25°C, una TMP de 3 bar y una velocidad tangencial de 3 m/s. El objetivo de la misma es comprobar que la duración del proceso de limpieza ha sido suficiente para conseguir recuperar totalmente la permeabilidad inicial de la membrana.

Si la diferencia entre la densidad de flujo de permeado al agua desionizada medida tras la limpieza y la obtenida en los ensayos de caracterización inicial de la membrana, bajo las mismas condiciones experimentales, es superior al error cometido en la determinación experimental de la densidad de flujo de permeado, se vuelve a repetir el protocolo de limpieza las veces que sea necesario. El error relativo cometido en la medida de la densidad de flujo de permeado se calculó del modo que se muestra en este apartado y resultó ser igual o inferior a un 11%.

3. METODOLOGÍA

3.1. Software utilizado

Matlab 7.9.0 2009b ®:

MATLAB® es un entorno de programación para el desarrollo de algoritmos, el análisis de datos, la visualización y el cálculo numérico. Con MATLAB se pueden solucionar problemas de cálculo técnico más rápidamente que con lenguajes de programación tradicionales tales como C, C++ o Fortran.

Se puede utilizar MATLAB en una gran variedad de aplicaciones, tales como procesamiento de señales e imágenes, comunicaciones, diseño de control, pruebas y medidas, modelado y análisis financiero o biología computacional.

El lenguaje MATLAB realiza las operaciones vectoriales y matriciales que son fundamentales para los problemas de ingeniería y científicas. Permite un rápido desarrollo y ejecución. Con el lenguaje MATLAB, se puede programar y desarrollar algoritmos más rápidamente que con los lenguajes tradicionales, porque no es necesario llevar a cabo tareas de bajo nivel de administración, tales como la declaración de variables, especificando los tipos de datos, y la asignación de memoria. En muchos casos, MATLAB elimina la necesidad de bucles 'for'. Como resultado, una línea de código de MATLAB puede sustituir a menudo varias líneas de código C o C++.

Al mismo tiempo, MATLAB ofrece todas las características de un lenguaje de programación tradicional, incluidos los operadores aritméticos, control de flujo, estructuras de datos, tipos de datos, programación orientada a objetos y las características de depuración.

MATLAB proporciona una serie de funciones para documentar y compartir su trabajo. Puede integrar su código de MATLAB con otros lenguajes y aplicaciones y distribuir sus algoritmos de MATLAB y aplicaciones. Además proporciona una serie de interfaces desarrollados para campos y sectores muy específicos: aeroespacial, financieros, etc. Entre los que se encuentra también el interfaz específico para redes neuronales artificiales.

En este trabajo el Matlab se ha empleado para el pretratamiento y tratamiento de los datos para la aplicación de las redes neuronales artificiales.

Statgraphics Centurion XV®:

STATGRAPHICS Centurion XV es una herramienta de análisis de datos de gran alcance que combina una amplia gama de procedimientos con gráficos interactivos para proporcionar un entorno integrado de análisis que se puede aplicar en todos los aspectos de las operaciones comerciales y de protocolos de gestión 6 Sigma a las

iniciativas de control de calidad. Está diseñado con funciones avanzadas de estadística, lo suficientemente importantes como para ser utilizado por los estadísticos más experimentados, sin embargo, su interfaz proporciona la sencillez suficiente para que incluso un analista menos experimentado pueda realizar procedimientos complejos.

En este trabajo el Statgraphics Centurion XV se emplea para los análisis de la varianza de los parámetros de caracterización del ajuste de las diferentes ANN empleadas.

3.2. Metodología de trabajo con redes neuronales

3.2.1. Estrategia de modelización

Desde un punto de vista general la estrategia a seguir va a ser la siguiente:

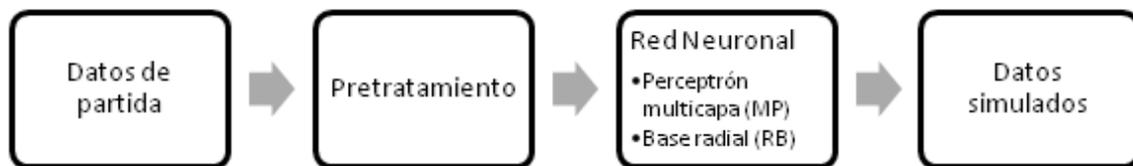


Figura 14: Estrategia general de modelado de los datos mediante redes neuronales.

Se observa que la metodología empleada consta de varias fases con el fin de simular los resultados de la implementación de las diferentes estrategias de aplicación de las redes neuronales que se van a estudiar sobre los datos experimentales. A continuación se va a describir cada fase de este esquema.

Pretratamiento de los datos

Antes de introducir los datos en la red neuronal correspondiente, son tratados con el fin de mejorar el ajuste final que la red neuronal pueda realizar sobre los datos. Los mecanismos que se proponen como pretratamientos son:

A. Normalización de la densidad de flujo volumétrico

La bibliografía consultada muestra que la densidad de flujo volumétrico debe ser normalizada a partir de la siguiente ecuación (Chellam, 2005; Sahoo, et al., 2006; Sarkar, et al., 2009; Purkait, et al., 2009):

$$J_{norm} = (1 - \Delta_L - \Delta_U) \cdot \frac{J - J_{min}}{J_{max} - J_{min}} + \Delta_L \quad (\text{Ec. 19})$$

La bibliografía implementa esta ecuación con J_{max} como la densidad de flujo volumétrico inicial y J_{min} como la densidad de flujo volumétrico estacionaria para cada ensayo. Δ_L y Δ_U son parámetros para evitar el sobre ajuste posterior de la red neuronal y según la bibliografía consultada se van a tomar valores de 0.01 para ambos parámetros. De manera que esta ecuación normaliza la distribución de flujo

volumétrico entre sus valores inicial y estacionario a valores entre 0.98 y 0.01 de manera adimensional.

Observando los resultados disponibles, tanto para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP como para los ensayos realizados con la membrana TAMI, son muchos los ensayos donde no se observa disminución inicial de la densidad de flujo debido al bloqueo de poros, es decir, los ensayos presentan distribuciones estabilizadas desde la primera toma de muestras de la densidad de flujo volumétrico. Todo ello va a provocar que intentar aplicar la ecuación 19 tal y como dice la bibliografía suponga desvirtuar los datos como se observa en la siguiente figura:

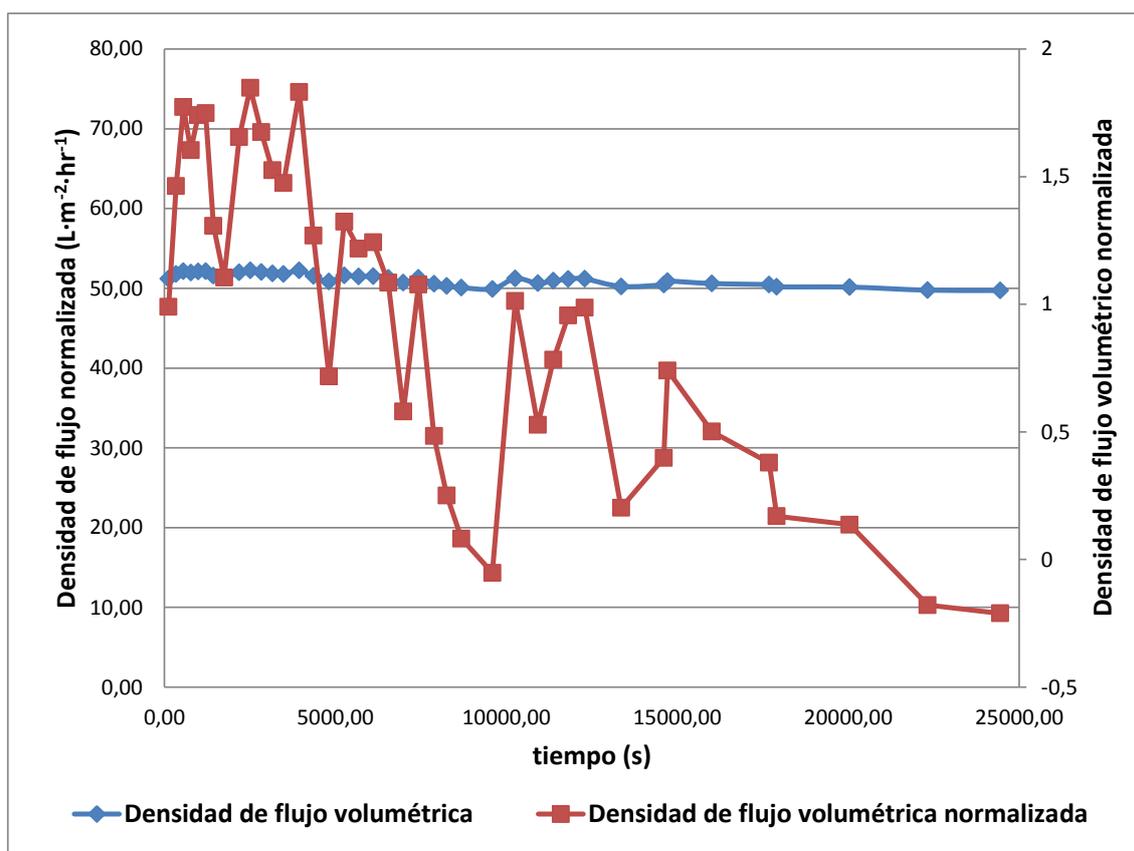


Figura 15: Densidad de flujo volumétrico y normalización mediante la J_0 y J_{pss} para las condiciones: presión transmembranal 0.1 MPa, velocidad tangencial 2 m/s y concentración de 5 g/L desarrollado con la membrana CARBOSEP.

Y se toma como valores J_{max} como la densidad de flujo volumétrico máxima observada y J_{min} como la densidad de flujo volumétrica mínima observada para cada ensayo, se obtiene la siguiente representación:

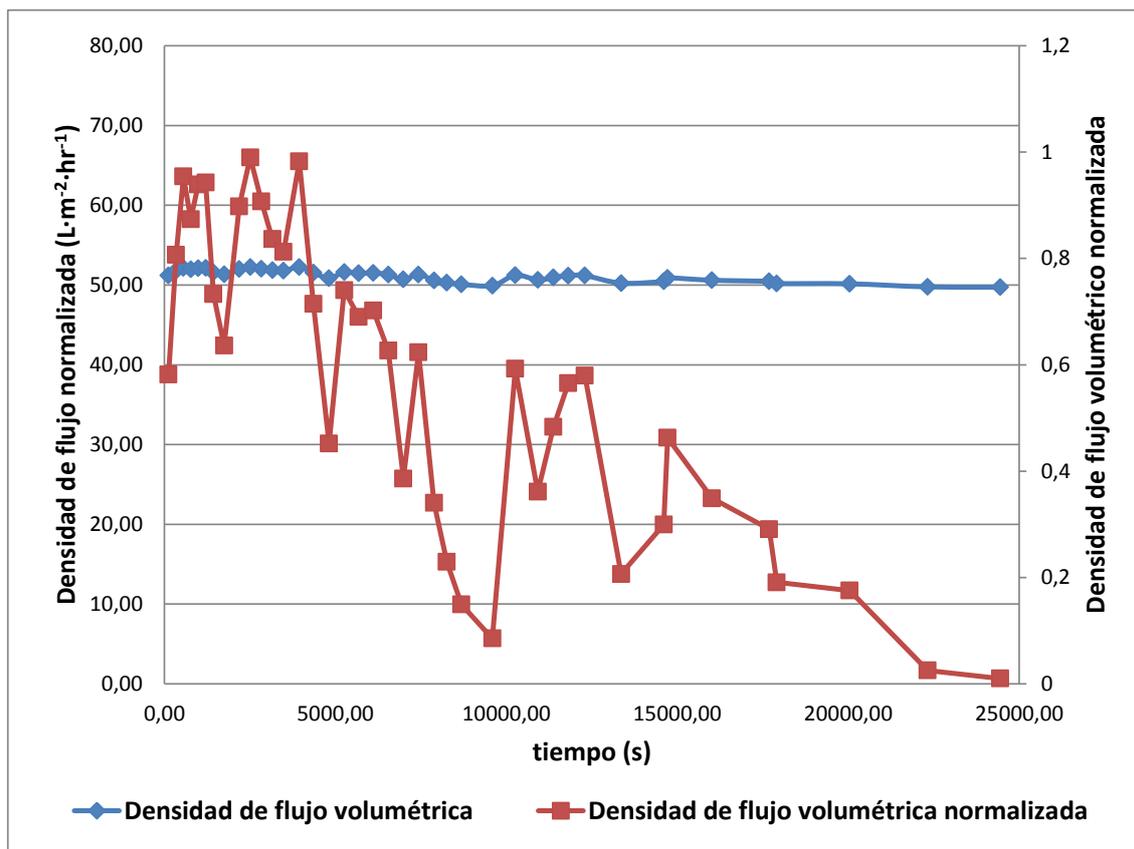


Figura 16: Densidad de flujo volumétrico y normalización mediante la J_{max} y J_{min} para las condiciones: presión transmembranal 0.1 MPa, velocidad tangencial 2 m/s y concentración de 5 g/L desarrollado con la membrana CARBOSEP.

En ambos casos los resultados no representan los ensayos ya que los datos experimentales revelan una estabilización inmediata de la densidad de flujo volumétrico y, la primera normalización (Figura 15) revela valores negativos de la densidad de flujo normalizada, mientras que la segunda (Figura 16) muestra una disminución irregular de la densidad de flujo normalizado.

Para evitar estos problemas se va a aplicar la ecuación manteniendo constantes los valores mínimo y máximo de la ecuación para todos los datos de cada membrana, tal que, para los resultados experimentales desarrollados con la membrana CARBOSEP, el valor máximo que se va introducir es de 175 L/(m²·hr) y el valor mínimo de 25 L/(m²·hr); y para los resultados experimentales de los ensayos desarrollados con la membrana TAMI, el valor máximo que se va introducir es de 75 L/(m²·hr) y el valor mínimo de 5 L/(m²·hr). Estos valores se han escogido observando la distribución de los resultados de los ensayos desarrollados para ambas membranas.

Al tratar la densidad de flujo con esta ecuación se debe tener en cuenta que los datos generados por la simulación de la red neuronal van a estar normalizados, de manera que se debe invertir la ecuación para poder observar el ajuste dinámico de los resultados de la red neuronal.

$$J = J_{min} + (J_{max} - J_{min}) \cdot (J_{norm} - \Delta_L) / (1 - \Delta_L - \Delta_U) \quad (\text{Ec. 20})$$

B. Estimación de la resistencia por ensuciamiento

Este pretratamiento se propuso observando los resultados de realizar pruebas de las redes neuronales a desarrollar para los datos. Los resultados mostraban que la red neuronal devolvía simulaciones con ajustes muy elevados ($R^2 > 0.95$) y sin embargo al representarlos mostraban distribuciones que no tendían a estabilizarse para tiempos de ensayo elevados, es decir, para condiciones estacionarias.

Para resolver este desajuste se propuso introducir un input adicional generado a partir de los inputs ya disponibles (concentración, velocidad tangencial y presión transmembranal) cuyo objetivo sea introducir en la red neuronal información de que la densidad de flujo volumétrico se estabilice para tiempos elevados de ensayo.

La resistencia debida al ensuciamiento tiende a aumentar hasta estabilizarse en un valor a lo largo del tiempo del ensayo de manera que se requiere un modelo pueda estimar el ensuciamiento dinámico del sistema a partir de las condiciones del ensayo.

El modelo de ensuciamiento dinámico viene definido por la siguiente ecuación:

$$R(t) = \frac{TMP}{\mu \cdot J(t)} - R_m \quad (\text{Ec. 21})$$

La densidad de flujo volumétrico introducida en la ecuación no es la densidad de flujo volumétrico experimental, sino la resultante de implementar un modelo físico sencillo que obtenga la distribución dinámica de la densidad de flujo volumétrico a partir de las condiciones de cada ensayo.

Este tipo de pretratamiento sólo se va a realizar para los datos experimentales obtenidos de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP. Esto es debido a que la mayoría de los ensayos realizados con la membrana TAMI muestran una estabilización casi inmediata de la densidad de flujo volumétrico, de manera que no tiene sentido introducir un input adicional a la red neuronal que aporte información sobre el comportamiento dinámico de cada ensayo cuando realmente no se ha producido este comportamiento.

El desarrollo y los resultados de este modelo están descritos en el ANEXO I.

Redes neuronales artificiales empleadas

Se van a emplear dos tipos de redes neuronales artificiales: la red neuronal perceptrón multicapa y la red neuronal de base radial. Aunque la mayoría de las publicaciones de aplicación de ANN para UF emplean el interfaz de Matlab, Matlab toolbox (Sahoo, et al., 2006; Guadix, et al., 2010; Curcio, et al., 2005), debido a la forma con la que se va a trabajar se van a emplear las funciones del código del programa creando los algoritmos de las redes neuronales artificiales y tratamiento de datos, tanto antes como después

de introducir los datos en la red neuronal. Las razones por las que no se va a usar el Matlab Toolbox se van a ir comentando a medida que se explica el procedimiento seguido.

1) De tipo multicapa: perceptrón multicapa.

Las redes neuronales perceptrón multicapa son redes neuronales constituidas por las siguientes capas:

- Capa de entrada con tantos nodos como inputs, más el nodo del sesgo.
- Capas intermedias: el número de nodos de las capas intermedias las decide el autor del estudio.
- Capa de salida: tantas como variables respuesta u outputs se vayan a ajustar con la red neuronal.

Cada nodo supone aplicar la función de transferencia a las entradas que llegan al nodo.

Cada vector de conexión entre dos nodos supone aplicar el peso que supone este determinado vector a la salida del nodo de origen.

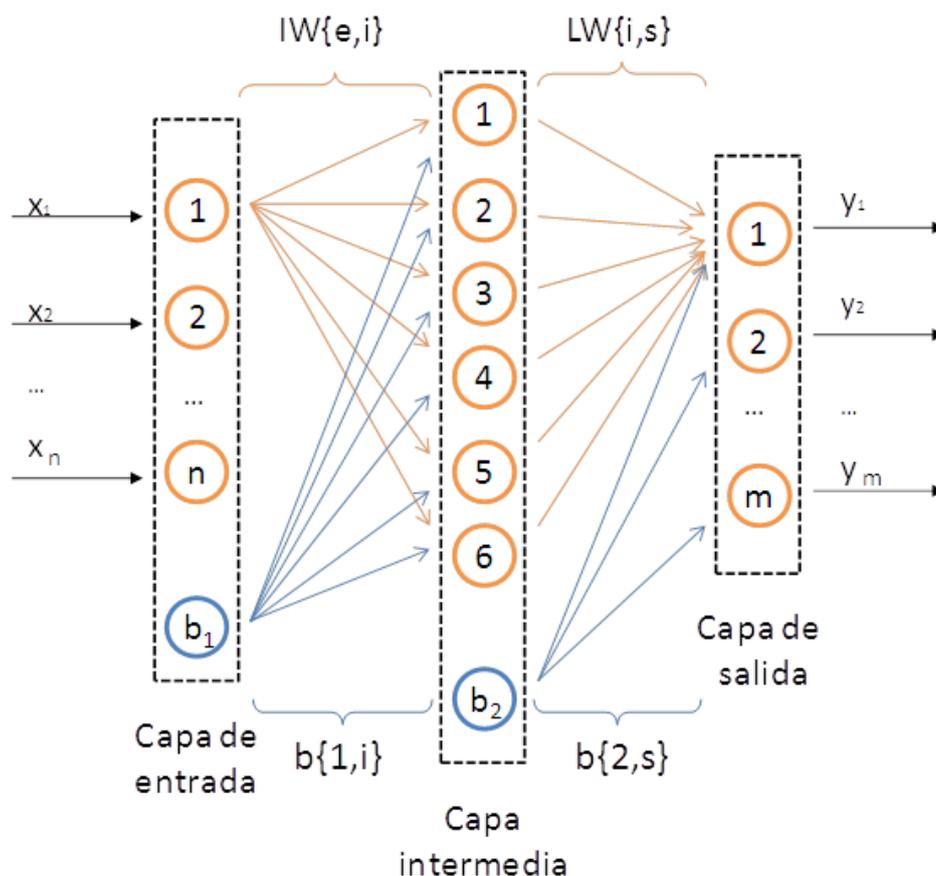


Figura 17: Esquema de una red neuronal multicapa con 6 neuronas en la capa intermedia y una capa intermedia.

donde:

$\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$: es el conjunto de variables de entrada o inputs que se introducen en la red neuronal.

$\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$: es el conjunto de variables de salida u outputs.

$IW\{e,i\}$: son los pesos de conexión entre los nodos o neuronas de la capa de entrada y los nodos de la capa intermedia.

$LW\{i,s\}$: son los pesos de conexión entre los nodos la capa intermedia y los nodos la capa de salida.

$b\{1,i\}$: pesos de conexión entre el sesgo de la capa de entrada y los nodos de la capa intermedia.

$b\{2,s\}$: pesos de conexión entre el sesgo de la capa de intermedia y los nodos de la capa de salida.

$e: \{1, 2, \dots, n\}$: vector de posición de los nodos de la capa de entrada.

$i: \{1, 2, \dots, 6\}$: vector de posición de los nodos de la capa intermedia.

$s: \{1, 2, \dots, m\}$: vector de posición de los nodos de la capa de salida.

La función con la que se crean redes neuronales multicapa (feed-forward) es newff. El funcionamiento de esta función es la siguiente:

- 1- Crear la red neuronal: para ello hay que invocar la función newff:

$$net = newff(I, T, [S_1 S_2 \dots S_N], \{TF_1 TF_2 \dots TF_N\}, BTF, BLF, PF, IPF, OPF, DDF) \quad (\text{Ec. 22})$$

Donde

I: matriz con los elementos representativos de cada variable de entrada.

T: matriz con los elementos representativos de cada variable de salida.

S_i Tamaño de la capa i. N define el número de capas intermedias.

TF_i Función de transferencia de la capa i, por defecto es 'tansig'.

BTF Función de entrenamiento, por defecto 'trainlm'.

BLF Función de aprendizaje de los pesos/sesgos, por defecto 'learngdm'.

PF Función de evaluación, por defecto 'mse'. Se cambia por 'msne'.

IPF - Funciones de procesamiento de las variables de entrada. El valor predeterminado es {'fixunknowns', 'remconstantrows', 'mapminmax'}.

OPF - Funciones de procesamiento de las variables salida. El valor predeterminado es {'remconstantrows', 'mapminmax'}.

DDF - la división de datos de función, por defecto = 'dividerand'. Divide los datos aleatoriamente entre datos para el entrenamiento, datos para la validación y datos para el test.

Para este estudio no es necesario emplear todos los elementos de la función quedando reducida a:

$$net = newff(I,T,Neur) \quad (\text{Ec. 23})$$

Se observa que salvo la función de evaluación que se va a cambiar posteriormente, las funciones de entrenamiento y aprendizaje son las que la función `newff` tiene por defecto. La función de aprendizaje `learnngdm` está explicada en el apartado 3.2.2. La función de entrenamiento `trainlm` emplea el método Levenberg–Marquardt que ofrece la capacidad de convergencia más rápida de entre los métodos de entrenamiento disponibles.

Las funciones de transferencia de las neuronas también son las que tiene por defecto. En este caso emplea la función ‘`tansig`’ para la capa intermedia y ‘`purelin`’ para la capa de salida (explicadas en el apartado 2.2.2).

Una vez creada la red neuronal, el programa ofrece una visualización de la red neuronal creada:

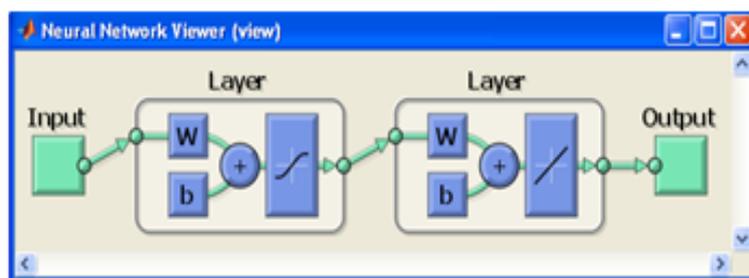


Figura 18: Visualización de la red neuronal perceptrón multicapa creada.

2- Definir los objetivos y especificaciones del entrenamiento:

Se van a cambiar una serie de parámetros de la red neuronal antes de proceder al entrenamiento.

En primer lugar se va a cambiar la forma de evaluar el objetivo de error admisible por el de error cuadrático medio normalizado. En el apartado 3.3.1 se explican las razones de emplear este parámetro para cuantificar el error. Para ello se implementa la siguiente línea de código:

$$net.performFcn='msne' \quad (\text{Ec. 24})$$

También hay que introducir adecuadamente la distribución de los datos para el entrenamiento, validación y el test. Para este estudio la distribución entre los tres grupos se va a realizar de manera aleatoria con el siguiente reparto: 50 % de los datos para la fase de entrenamiento, 25 % de los datos para la validación y el 25 % de los datos para la fase de test. Para ello hay que implementar las siguientes líneas de código:

$$\text{net.divideParam.trainRatio}=0.5 \quad (\text{Ec. 25})$$

$$\text{net.divideParam.valRatio}=0.25 \quad (\text{Ec. 26})$$

$$\text{net.divideParam.testRatio}=0.25 \quad (\text{Ec. 27})$$

Por último hay que cambiar los parámetros de número de iteraciones máxima el objetivo de error admisible (en este caso en valores de error cuadrático medio normalizado):

$$\text{net.trainParam.goal} = 0.0001 \quad (\text{Ec. 28})$$

$$\text{net.trainParam.epochs} = 500 \quad (\text{Ec. 29})$$

Pruebas previas realizadas con los datos para esta red neuronal indicaron que el objetivo de error alcanza valores mínimos de 10^{-4} . El número de repeticiones que requiere la red neuronal perceptrón multicapa para conseguir ajustarse a los datos experimentales generalmente no supera las 200 repeticiones, así que se escoge un valor de 500 para dar un margen de seguridad.

➤ *Pesos iniciales para las redes neuronales perceptrón multicapa*

Los pesos son los valores que conectan cada nodo de la red neuronal, de manera que en el entrenamiento de la red neuronal se van a buscar los valores óptimos de estos pesos. En esta Tesis se va a estudiar el efecto de la inicialización de estos pesos en la bondad del ajuste final obtenido. Para ello se proponen dos tipos de inicialización:

- 1) Pesos iniciales nulos: todos los pesos de la red (independientemente del número de neuronas de la capa intermedia) van a inicializarse con el valor de 0.
- 2) Pesos iniciales aleatorios: todos los pesos de la red (independientemente del número de neuronas de la capa intermedia) van a inicializarse con un valor aleatorio.

Esta es una de las razones por las cuales se ha preferido trabajar con el código de Matlab en vez de con la interfaz que ofrece el propio Matlab para implementar redes neuronales (Matlab toolbox), ya que el control de los pesos iniciales de la interfaz es poco práctico debido a que obliga a cambiar los pesos iniciales uno a uno, mientras que el código permite implementar funciones dentro de la red neuronal (antes de entrenarla) que le indique como debe inicializar estos pesos. Estas funciones son las siguientes:

$$\text{net.inputWeights}\{a,b\}.\text{initFcn}='initzero' \quad (\text{Ec. 30})$$

$$\text{net.layerWeights}\{a,b\}.\text{initFcn}='initzero' \quad (\text{Ec. 31})$$

$$\text{net.biases}\{a,b\}.\text{initFcn}='initzero' \quad (\text{Ec. 32})$$

Donde $\text{net.inputWeights}\{a,b\}.\text{initFcn}$ indica la inicialización de los pesos entre la capa de entrada y la capa intermedia, $\text{net.layerWeights}\{a,b\}.\text{initFcn}$ indica la inicialización de

los pesos entre la capa intermedia y la capa de salida y `net.biases{a,b}.initFcn` indica la inicialización de los pesos entre los sesgos y los nodos.

3- Entrenar la red neuronal: para ello hay que introducir la función `train`:

$$[net,tr] = train(net,Inputs,Targets) \quad (\text{Ec. 33})$$

Donde `tr` es un parámetro que caracteriza el entrenamiento, validación y test realizado por la función `train`. Contiene la siguiente información:

`trainFcn`: 'trainlm': indica la función de entrenamiento que emplea.

`trainParam`: [1x1 struct]: indica los parámetros de caracterización del entrenamiento

`performFcn`: 'mse'. Parámetro de caracterización del error o desajuste cometido por la ANN.

`performParam`: [1x1 struct]

`divideFcn`: 'dividerand'

`divideParam`: [1x1 struct]: vector con las proporciones de distribución de datos en los conjuntos de entrenamiento, validación y test.

`trainInd`: vector de puntos de las variables de salida empleado en el entrenamiento

`valInd`: vector de puntos de las variables de salida empleado en el validación

`testInd`: vector de puntos de las variables de salida empleado en el test

`stop`: 'Minimum gradient reached.': criterio de parada del entrenamiento

`num_epochs`: número de iteraciones

`best_epoch`: mejor iteración

`goal`: objetivo de error admisible

`states`: {'epoch' 'time' 'perf' 'vperf' 'tperf' 'mu' 'gradient' 'val_fail'}

`epoch`: vector de las iteraciones realizadas

`time`: tiempo necesario para cada iteración

`perf`: vector de valores de mse para cada iteración para los datos del entrenamiento.

`vperf`: vector de valores de mse para cada iteración para los datos de la validación.

`tperf`: vector de valores de mse para cada iteración para los datos del test.

`mu`: vector de valores de mu para cada iteración.

`gradient`: vector de valores del gradiente para cada iteración

`val_fail`: vector de valores del número de validaciones realizadas en cada iteración

Al ejecutar la función train aparece la siguiente ventana:

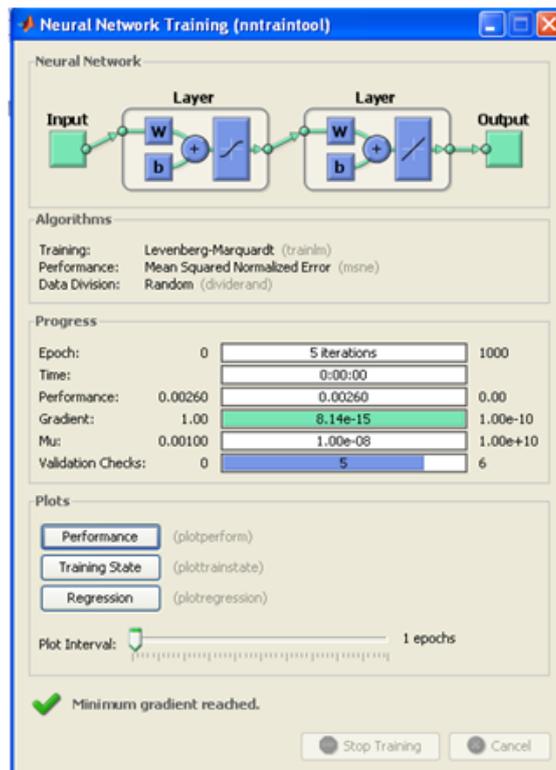


Figura 19: ventana de entrenamiento de las redes neuronales multicapa.

Se observa que la ventana ofrece tres tipos de gráficos en los que se puede observar como se ha desarrollado el entrenamiento mediante tres parámetros: en términos de error (pestaña Performance), en términos de evolución del gradiente y mu (pestaña Training State), y en términos de los resultados de coeficiente de regresión para el entrenamiento, validación y test (Pestaña Regression).

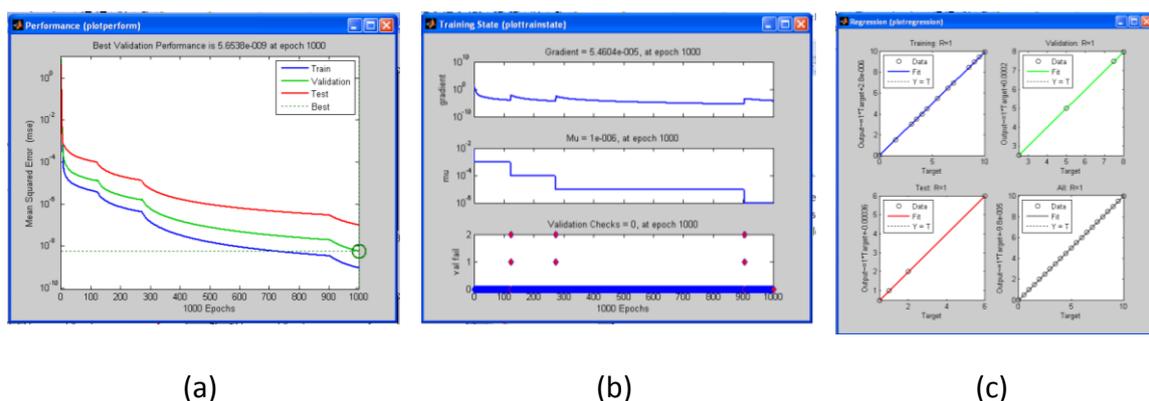


Figura 20: Ventanas de los gráficos que ofrece el Neural Networks Training (nntool) de Matlab: (a) Gráfico de evolución del error en función del número de repeticiones; (b) Gráfico de la evolución del gradiente, mu y de las validaciones realizadas en función del número de repeticiones; (c) Gráfico de los resultados de la regresión conseguida para los datos de la fase de entrenamiento, los datos para la fase de validación, los datos para la fase de test y el total de los datos.

En este estudio, no se va a analizar la fase de entrenamiento de los datos sino la capacidad que tiene la red neuronal para el ajuste del total de los datos, de manera que salvo la regresión total de los datos (Figura 20 (c) gráfico de la regresión total: parte inferior a la derecha), el resto de los gráficos no se van a analizar, por lo que no se guardan estos gráficos para los entrenamientos que se van a realizar.

4- Simular la red neuronal: mediante la función sim:

$$\text{sim}(\text{net}, \text{Inputs}) \quad (\text{Ec. 34})$$

2) De base radial.

Este tipo de red neuronal se crea mediante la siguiente función:

$$[\text{net}, \text{tr}] = \text{newrb}(\text{P}, \text{T}, \text{GOAL}, \text{SPREAD}, \text{MN}, \text{DF}) \quad (\text{Ec. 35})$$

Donde:

P: matriz de los valores de entrada a la red neuronal o inputs.

T: matriz de la/s variable/s de salida de la red neuronal u outputs.

GOAL: objetivo de error admisible. Para este tipo de red se mide en MSE sin opción de poder cambiarlo a otro tipo de caracterización de error.

SPREAD: parámetro de difusión de las neuronas en la red neuronal.

MN: máximo número de neuronas admisibles.

DF: número de neuronas que se añaden tras cada iteración

La visualización de esta red es la siguiente:

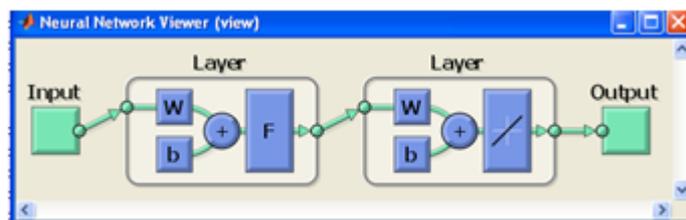


Figura 21: Visualización de la red neuronal de base radial creada a partir de la función newrb.

La función newrb crea una red neuronal de base radial añadiendo número determinado de neuronas en cada iteración hasta que el valor del error total de la red alcanza un valor objetivo o bien se alcanza el número máximo de neuronas (por defecto el número de conjunto de datos de la entrada).

Este tipo de red no requiere de un entrenamiento explícito. Al crear la red neuronal, que en el caso de implementar el código supone llegar a la línea del código con la definición de la red neuronal (ecuación 35) se realiza un proceso iterativo hasta conseguir el objetivo de error admisible o hasta llegar al número de neuronas máximo. Dicho proceso es el siguiente;

- i. Simulación de la red.
- ii. Se localiza el patrón de entrada con mayor error y se añade una neurona en la capa de base radial con los pesos de dicho patrón.
- iii. Se recalculan los pesos de la capa lineal para minimizar el error cometido.

Tras ejecutar la función de la red neuronal de base radial (ecuación 35), aparece en pantalla una ventana donde se muestra la evolución del error a medida que se van realizando repeticiones hasta conseguir el objetivo del error.

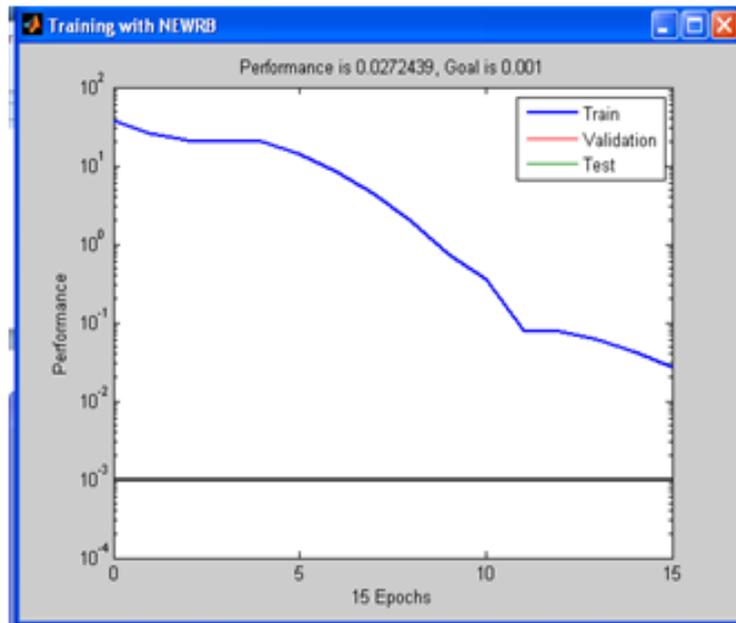


Figura 22: Ventana de evolución del error en términos de error cuadrático medio (MSE) para una red neuronal de base radial.

Una vez que se ha completado la fase de entrenamiento de la red neuronal de base radial, la simulación de la red neuronal se realiza mediante la misma función que la red neuronal perceptrón multicapa descrita por la ecuación 34.

➤ *Difusión para las redes neuronales de base radial*

La difusión (spread) determina el ancho del área del espacio de entrada al que cada neurona responde. Por ejemplo, el valor de difusión (o spread) toma el valor 4, cada neurona de la capa de neuronas de base radial responde con valores de 0.5 o superiores a cada patrón de entrada situado a una distancia de 4 del vector de pesos. Este parámetro debe ser lo suficientemente grande como para que las neuronas puedan responder eficientemente a regiones solapadas del espacio de entrada, mejorando de esta manera la capacidad de generalización. No obstante, si este valor es demasiado grande, todas las neuronas de la capa de base radial tomarán como salida valores cercanos a 1 con todos los patrones de entrada, perdiendo toda la información almacenada en la capa de base radial.

Distribución de los datos

Una vez se ha explicado más detenidamente las redes neuronales que se van a aplicar a los datos experimentales, se tiene que explicar cómo se van a introducir estos datos en cada red neuronal.

Independientemente de la red neuronal empleada, los datos se van a distribuir en dos grupos: entrenamiento y comprobación. En el caso de las ANN perceptrón multicapa el grupo de comprobación se divide en validación y test.

Para las ANN perceptrón multicapa cada iteración en la fase de entrenamiento supone alterar los pesos de la red neuronal hasta conseguir que los datos simulados para el grupo de datos de entrenamiento cumpla con las condiciones de error admisible. Una vez se tenga una distribución de pesos que cumpla los objetivos de error para el grupo de datos de entrenamiento, se pasa a la fase de validación, donde se comprueban los resultados de la red neuronal para condiciones no entrenadas de manera que, la fase de entrenamiento no se da por finalizada hasta no conseguir los objetivos de error admisible para este grupo. Así que si no se cumple con el objetivo de error para este grupo se vuelven a cambiar los pesos de la red neuronal mediante los datos de entrenamiento, y, si se cumple con los objetivos de error, se pasa a la fase de test. El último grupo (datos del test) supone una última comprobación para observar que los resultados de la red neuronal, entrenados y validados, tienen buenos resultados para variables de entrada para los que no se ha ajustado los pesos de la red neuronal.

Como se ha introducido en el apartado de la motivación algunos autores han seleccionado los datos para el entrenamiento de la red neuronal de manera que unos pocos puntos para cada ensayo caracterizan su comportamiento dinámico generando buenos ajustes (traducidos en elevados coeficientes de regresión) con pocos datos introducidos en la fase de entrenamiento (Razavi, et al., 2004; Sahoo, et al., 2006; Chen, et al., 2006).

No obstante, este proceder provoca que no se emplee toda la potencia que ofrecen las redes neuronales ya que se le está indicando a la red neuronal como tiene que modelar los datos cuando las redes neuronales tienen la capacidad de ser capaces de determinar este comportamiento. Es por ello que se ha escogido un enfoque más clásico de manera que la distribución de los datos en los grupos se va a realizar de manera aleatoria introduciendo el 50% de los datos en la fase de entrenamiento, 25% para la fase del test y 25% para la validación.

En el caso de las redes neuronales multicapa el código permite introducir una función para ajustar la distribución de los datos a estos porcentajes de manera aleatoria, sin embargo, las redes de base radial no ofrecen esta opción siendo necesario realizarlo implementar un algoritmo auxiliar que distribuya los datos. Dicho algoritmo en primer

lugar desordenará de manera aleatoria todos los datos, y posteriormente los separa en tres conjuntos atendiendo a los porcentajes ya indicados.

Es importante añadir que en este desorden un vector de posición los determinan: concentración, presión transmembranal, velocidad tangencial, tiempo del ensayo y densidad de flujo volumétrica. De manera que los que se desordena son la posición que ocupan estos vectores dentro de la matriz que contiene todos los datos. Para facilitar se reordenación después de haber entrenado la red neuronal, también se introduce el número de posición que ocupan estos vectores de posición antes de desordenar la matriz.

Métodos de modelización

Una vez se ha definido las diferentes estrategias de pretratamiento de los datos y las ANN que se van a emplear se van a definir las estrategias de modelado que se van a seguir para ajustar las redes neuronales artificiales propuestas.

En la Figura 14 se ha introducido el esquema general. A continuación se van a introducir los métodos implementados en esta tesis para el ajuste de los datos experimentales mediante red neuronales.

En primer lugar se han descrito dos formas de pretratamiento lo que permite generar cuatro tipos de datos pretratados:

- 1) No aplicar ningún tipo de pretratamiento: NOPRET
- 2) Aplicar el pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico: PRET1
- 3) Aplicar el pretratamiento de introducción de la resistencia por ensuciamiento dinámico de la membrana: PRET2
- 4) Aplicar los dos tipos de pretratamiento, tanto la normalización de la densidad de flujo normalizado como introducir la resistencia por ensuciamiento dinámico de la membrana: PRET3

De acuerdo con las opciones de pretratamientos definidas, tal y como se ilustra en la Figura 23, se obtienen cuatro matrices de datos.

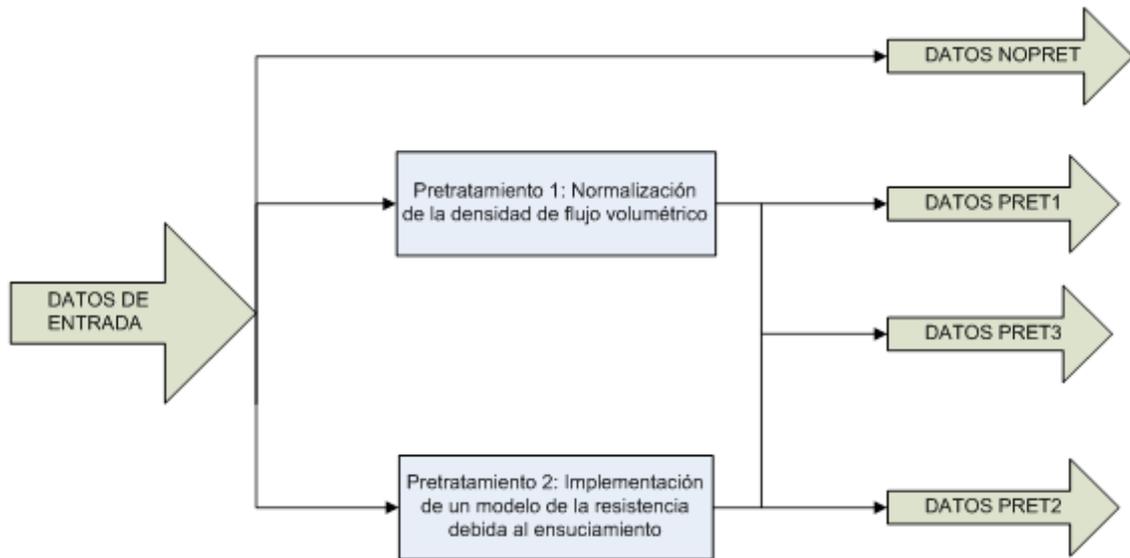


Figura 23: Diagrama de los pretratamientos previos a las redes neuronales desarrollados en este trabajo. NOPRET: datos sin pretratar; PRET1: normalización de la densidad de flujo volumétrico; PRET2: Introducción de la resistencia por ensuciamiento dinámica; PRET3: aplicar ambos tipos de pretratamientos.

Una vez se tienen las matrices de datos pretratados, se introducen dentro de la red neuronal, para ello hay que separar los datos entre datos de entrada o inputs y datos da salida o targets. Se deben introducir en la red neuronal tanto los inputs como los targets, tal y como se ha explicado al introducir como se emplean las funciones de invocación de las ANN del Matlab introducidas en este apartado (ecuaciones 22, 23 y 35).

Para la red neuronal de perceptrón multicapa, el método seguido en la implementación de la red es el siguiente:

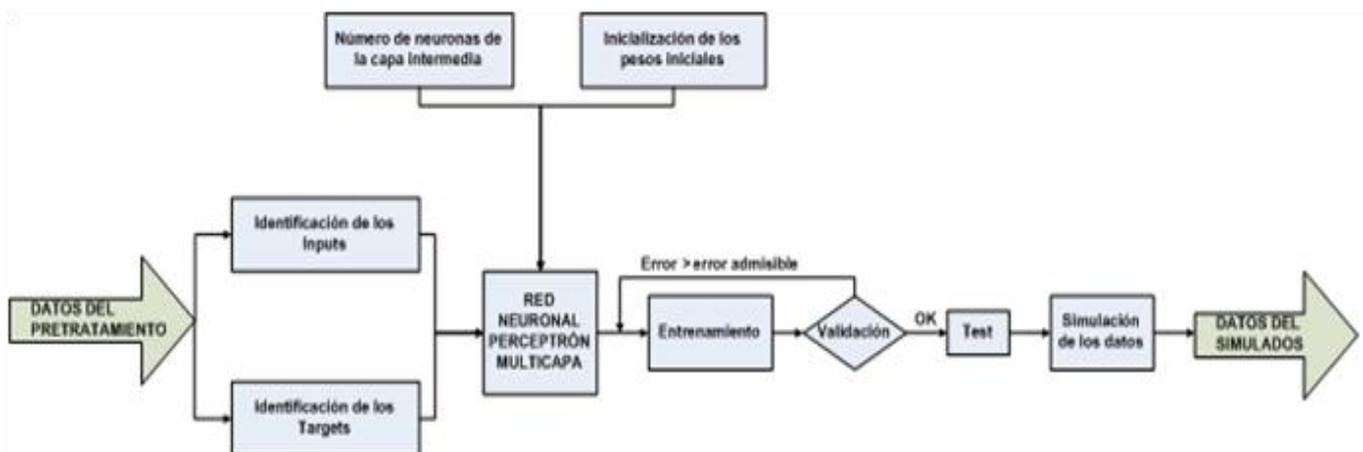


Figura 24: Estrategia para la implementación de una red neuronal perceptrón multicapa.

Tal y como ilustra la figura, se deben decidir el número de neuronas de la capa intermedia y la inicialización de los pesos.

El número de neuronas de la capa intermedia debe ser el menor posible, para reducir el tiempo de entrenamiento y evitar riesgos de exceso de ajuste (Bowen et al., 1998a). El número de neuronas que se van a estudiar atendiendo a este criterio va desde 5 hasta 10. Otra de las razones de aplicar el código en vez del interfaz para aplicar todo el rango de número de neuronas de la capa intermedia se deben crear las redes neuronales una a una, mientras que el código permite implementar un proceso iterativo que cree una nueva red neuronal cambiando el número de neuronas de la capa intermedia.

Atendiendo que este procedimiento se realiza para cada uno de los datos obtenidos en los posibles pretratamientos, se van a obtener resultados para cada tipo de pretratamiento, tipo de inicialización de los pesos de la red y número de neuronas de la capa intermedia implementadas. El resumen de las pruebas realizadas para este tipo de red se observa en la siguiente tabla:

Tabla 15: Número de simulaciones para perceptrón multicapa.

	Opciones	Número
Pretratamiento de los datos	NOPRET, PRET1, PRET2 y PRET 3	4
Inicialización de los pesos iniciales	0 y aleatorios	2
Número de neuronas de la capa intermedia	5 - 10	6
Número de simulaciones		48
Número de repeticiones		3
Numero de simulaciones final para perceptrón multicapa		144

La red neuronal de base radial requiere una metodología diferente ya que, tal y como se ha introducido en este apartado, no requiere de un entrenamiento específico y, al invocar la función dentro del código, se producirá el proceso iterativo hasta que cumpla con los objetivos de error admisible o llegue al número de neuronas máximas.

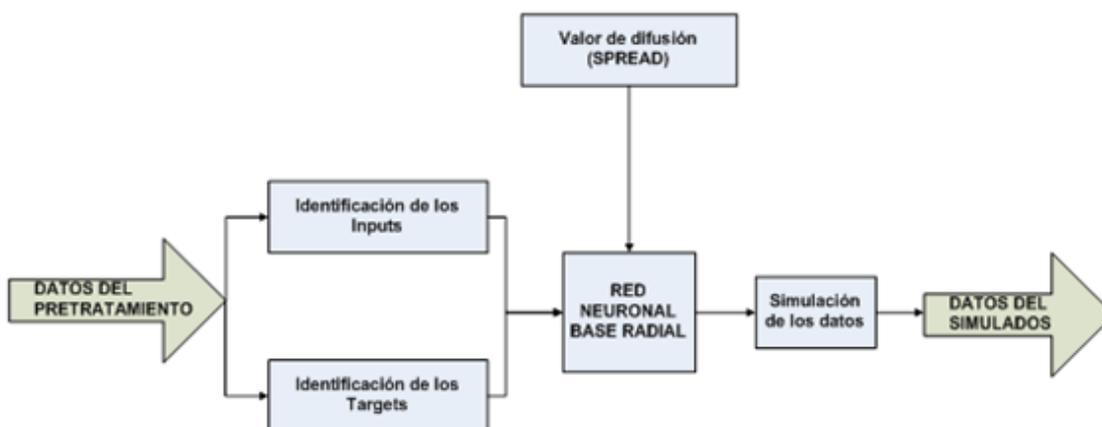


Figura 25: Estrategia para la implementación de una red neuronal de base radial.

En este caso, en primer lugar se debe encontrar el rango de difusión con el que se va a trabajar, para ello en primer lugar se realizarán unas pruebas previas donde se busca un rango para la difusión donde se obtengan buenos valores tanto para la regresión de los datos experimentales como para la regresión de las condiciones estacionarias.

Los parámetros de control en este tipo de red neuronal es únicamente la difusión. Se repetirá cada valor de la difusión para cada una de las formas de pretratamiento definidas.

Finalmente se introduce un resumen de los parámetros que van a definir cada red neuronal en las dos siguientes tablas.

Tabla 16: Resumen de la distribución de los datos en inputs y targets según el pretratamiento empleado.

Pretratamiento \ Membrana	CARBOSEP		TAMI	
	Inputs	Targets	Inputs	Targets
NOPRET	TMP, CFV, tiempo	J	C ₀ , TMP, CFV, tiempo	J
PRET1	TMP, CFV, tiempo	Jnorm	C ₀ , TMP, CFV, tiempo	Jnorm
PRET2	TMP, CFV, R, tiempo	J	NO	-
PRET3	TMP, CFV, R, tiempo	Jnorm	NO	-

Tabla 17: Resumen de los parámetros de control para cada tipo de red neuronal.

Red neuronal	Parámetros de control	Valores para los parámetros de control
Perceptrón multicapa	Nº de neuronas de la capa intermedia	5-10
	Inicialización de los pesos de la red	0 y aleatorios
Base radial	Spread	A determinar

3.2.2. Algoritmos de entrenamiento

Tal y como se ha descrito en el apartado anterior, la función de entrenamiento que se va a emplear es el aprendizaje gradiente de descendentes con momento (mediante la función learn_gdm), y el método de entrenamiento es el Levenberg-Marquardt (mediante la función train_lm).

Función de aprendizaje gradiente de descendentes con momento: learn_gdm. Calcula el cambio de peso dW para una neurona dada desde la neurona de entrada P y E de error, y la tasa de aprendizaje del peso (o sesgo) LR y el momento constante MC , de acuerdo con el descenso de gradiente con momento:

$$dW = MC \cdot dW_{previa} + (1 - MC) \cdot LR \cdot gW \quad (\text{Ec. 36})$$

Se aplica para las redes neuronales tipo multicapa.

El algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM) es un algoritmo iterativo de optimización en el que el método de iteración presenta una ligera modificación sobre el método tradicional de Newton.

Está dado por la ecuación:

$$x_i = x_{i-1} - \alpha \cdot (\lambda \cdot I + H_f)^{-1} \cdot \nabla f \quad (\text{Ec. 37})$$

Donde α y λ son positivos e I es la matriz identidad. Se trata de seleccionar λ con el fin de que la matriz $\lambda \cdot I - H_f$ sea positiva definida. Normalmente se seleccionan valores de λ elevados los cuales disminuyen a medida que se aproxima al mínimo.

EL entrenamiento para cuando se da alguna de las siguientes condiciones:

- El número máximo de iteraciones se alcanza.
- Se excede el tiempo máximo de entrenamiento.
- Se consigue el valor del error objetivo.
- El gradiente cae por debajo min_grad .
- μ excede μ_max .
- El objetivo de la validación ha aumentado más de max_fail desde la última vez que disminuyó (cuando se utiliza validación).

3.3. Metodología de evaluación del ajuste

3.3.1. Estimación del error del ajuste

Para caracterizar la bondad del ajuste conseguido por las redes neuronales desarrolladas para los diferentes métodos propuestos, se va a hacer uso de los siguientes parámetros de caracterización de la regresión:

Coeficiente de regresión (R^2)

El coeficiente de regresión viene definido como:

$$r(x, y) = \frac{\text{COV}(x, y)}{s_x \cdot s_y} \quad (\text{Ec. 38})$$

donde:

COV: covarianza entre las variables x e y.

s_x o s_y : desviación típica de las variables x e y respectivamente.

La covarianza viene definida como:

$$COV(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{N-1} \quad (\text{Ec. 39})$$

Donde \bar{x} e \bar{y} son las medias muestrales de las variables x e y respectivamente.

Posteriormente se analizan los resultados mediante análisis de la varianza. Este tipo de análisis propone intervalos cuantificados a partir de la media y la desviación típica de la variable que se está analizando y el error de primera especie asumido de manera que no es conveniente introducir en el análisis el coeficiente de regresión directamente ya que esto puede dar lugar a intervalos que sobrepasen el valor de 1. Para evitar esta incoherencia en el análisis se va a transformar el coeficiente de regresión obtenido mediante la siguiente ecuación:

$$-\log_{10}(1 - R^2) \quad (\text{Ec. 40})$$

Los resultados de esta ecuación se pueden observar en la siguiente figura:

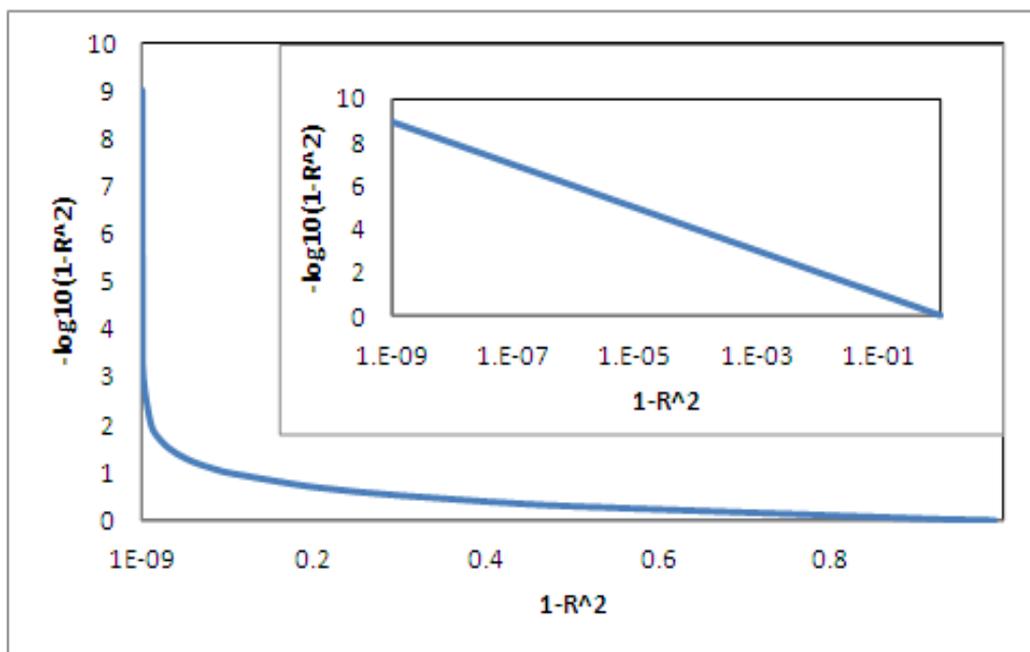


Figura 26: Coeficiente de regresión modificado mediante la ecuación 56

Se observa que cuanto más cercano es el valor del coeficiente de regresión a 1 mayor es el valor de $-\log_{10}(1-R^2)$.

Este coeficiente se va a medir para el ajuste de los datos simulados por la red con los datos experimentales y el ajuste de las condiciones estacionarias que propone la red con respecto a las condiciones estacionarias experimentales.

Error cuadrático medio normalizado (NMSE)

El error cuadrático medio normalizado o en inglés *Normalised Mean Square Error*, viene definido por la siguiente función:

$$NMSE = \frac{\sum_{i=1}^N (z_i - \hat{z}_i)^2}{\sigma^2 \cdot N} \quad (\text{Ec. 41})$$

En donde z_i es el valor real de la serie, \hat{z}_i es la predicción y σ^2 es la varianza de la serie real sobre el tamaño de la muestra N . Un valor de $NMSE = 1$ corresponde a predecir la media, e idealmente se busca que $NMSE = 0$, es decir que la predicción sea igual al valor real.

En el Matlab este parámetro aparece bajo el nombre de `msne` (mean square normalized error).

Existen otros parámetros para caracterizar el ajuste de la red neuronal a los datos. Las redes neuronales en el Matlab tienen implementado por defecto el error cuadrático medio (MSE – mean square error):

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^N (z_i - \hat{z}_i)^2}{N} \quad (\text{Ec. 42})$$

Otro parámetro es el error cuadrático absoluto (MAE – mean absolute error):

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |z_i - \hat{z}_i|}{N} \quad (\text{Ec. 43})$$

Se observa que tanto el MSE como el MAE son parámetros de caracterización del error dimensionales. El error medio absoluto (MAE) tiene las mismas unidades que la variable respuesta (en este caso unidades de densidad de flujo volumétrico) mientras que la media de los errores al cuadrado (MSE) tiene unidades de la variable respuesta al cuadrado.

Para este estudio resulta más conveniente trabajar con parámetros de caracterización del ajuste de las redes adimensionales debido a que se van a comparar redes neuronales que ajusten la densidad de flujo volumétrica con redes neuronales que ajusten la densidad de flujo volumétrica normalizada.

3.3.2. Uso e interpretación del método ANOVA

La técnica estadística análisis de la varianza (ANOVA) fue desarrollada por R. A. Fisher hacia 1930 y constituye la técnica básica para el estudio de observaciones que dependen de varios factores, siendo la herramienta fundamental en el análisis de los modelos de regresión y de diseño de experimentos.

Esta técnica estudia el efecto de uno o más factores sobre la media de una variable (también puede generalizarse para estudiar los posibles efectos de los factores sobre

la varianza de la variable). La idea básica consiste en descomponer la variabilidad total observada en unos datos en una serie de términos, asociados a los efectos de cada factor estudiado y sus posibles interacciones, más una parte residual con la que después se comparan las primeras. De esta manera la comparación de la variabilidad de la variable respuesta asociada a cada factor con la variabilidad de la variable respuesta residual permite estudiar si el efecto es o no significativo sobre la media (o la varianza) de la variable respuesta.

Para este trabajo se realizan ANOVA para los parámetros de caracterización de del ajuste de las ANN empleadas, para determinar si los factores empleados (tipo de pretratamiento, número de neuronas de la capa intermedia e inicialización de los pesos de la red neuronal para perceptrón multicapa; tipo de Pretratamiento y valor de difusión para base radial) tienen efectos estadísticamente significativos sobre la media de dichos parámetros.

El procedimiento seguido para presentar los resultados de los ANOVA realizados es el siguiente:

- 1- Presentar la tabla resumen del ANOVA: esta tabla consta del resumen del procedimiento y muestra el valor de la suma de cuadrados, grados de libertad, cuadrados medios, valor de la F de Fisher y el p valor para cada factor estudiado; valor de la suma de cuadrados, grados de libertad y cuadrados medios para el residuo; y valor de la suma de cuadrados y grados de libertad totales de la variable respuesta.

La suma de cuadrados se calcula atendiendo a la siguiente ecuación:

$$SC_{total} = \sum_{i=1}^{N_{total}} (x_i - \bar{x})^2 \quad (\text{Ec. 44})$$

$$SC_{factor} = \sum_{k=1}^{N_{factores}} N_k \cdot (\bar{x}_k - \bar{x})^2 \quad (\text{Ec. 45})$$

$$SC_{residual} = \sum_{i=1}^{N_{total}} (x_i - \bar{x}_k)^2 \quad (\text{Ec. 46})$$

El número de grados de libertad para cada factor es igual al número de niveles de cada factor menos 1. El número de grados de libertad totales son igual al número de datos menos 1. El número de grados de libertad residuales es igual al número de grados de libertad totales menos el número de grados de libertad de cada uno de los factores.

Los cuadrados medios se obtienen del cociente de la suma de cuadrados entre el número de grados de libertad. Este parámetro es una estimación de la varianza existente entre las poblaciones estudiadas de manera que el cociente entre los cuadrados medios de cada factor entre el cuadrado medio residual se distribuye como una F de Fisher con el número de grados de libertad del factor

y el número de grados de libertad residuales como grados de libertad de la F de Fisher:

$$\frac{CM_{factor}}{CM_{residual}} = F_{gl_{factor}, gl_{residual}} \quad (\text{Ec. 47})$$

La F de Fisher estudia la relación entre las varianzas muestrales y poblacionales de dos variables independientes, tal que si el p valor asociado a la F de Fisher es menor que un valor llamado riesgo de primera especie se considera que el efecto del factor tiene efectos estadísticamente significativos sobre la media (o la varianza) de la variable respuesta. El riesgo de primera especie se define como la probabilidad de equivocarse rechazando la hipótesis nula (media muestral igual a media poblacional) cuando esta sea cierta, generalmente se opera con 0.05.

- 2- Presentar los gráficos de comparación de medias con los intervalos LSD: Estos gráficos constan de las medias y los intervalos LSD (*Least Significant Difference*) para cada uno de los niveles de cada uno de los factores estudiado.

Estos intervalos se calculan mediante la siguiente ecuación:

$$\bar{x}_{i,j} \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot t_{gl_{residual}}^{\alpha/2} \cdot \sqrt{\frac{CM_{residual}}{N_{factor}}} \quad (\text{Ec. 48})$$

Donde $\bar{x}_{i,j}$ es la media del nivel i del factor j y $t_{gl_{residual}}^{\alpha/2}$ es la t de Student con el número de grados de libertad residuales para la mitad del error de primera especie. La t de Student estudia la inferencia de medias muestrales en poblaciones normales.

- 3- Intervalos de interacción de efectos de los factores en el caso de que el efecto de dichas interacciones sea estadísticamente significativo. Este gráfico solo muestra las medias de la variable respuesta para los niveles de los factores graficados.

3.3.3. Comparación gráfica con los datos experimentales

La comparación de los datos simulados con respecto de los experimentales se realiza de dos maneras:

- 1) Mediante un gráfico que muestre los datos experimentales frente a los datos simulados. El ajuste obtenido es mayor cuanto más se ajuste la distribución de este gráfico a la linealidad de pendiente unidad, que significa datos experimentales igual a datos simulados.
- 2) Mediante gráficos dinámicos de cada uno de los ensayos. En estos gráficos se aprecia si el método empleado ha sido capaz de describir cada uno de los

comportamientos que los datos experimentales muestran o si hay determinados comportamientos que el método no es capaz de modelar. Además permite comprobar bajo qué condiciones de ensayo se producen estos posibles desajustes, acotando los desajustes en determinadas condiciones de ensayo permitiendo una posible interpretación.

3.3.4. Comparación entre los modelos físicos y redes neuronales artificiales

La comparación entre los ajustes obtenidos mediante modelos físicos y las ANN sobre los datos experimentales se va a realizar atendiendo a las condiciones de ensayo empleadas y restringiendo los modelos físicos comparados a los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial ya que, tal y como se ha introducido en el apartado de Motivación, son los únicos modelos físicos que ofrecen ajustes aceptables a los datos experimentales. Atendiendo a este criterio, se puede analizar bajo qué condiciones se obtienen los ajustes más precisos según el modelo empleado y se puede analizar que método genera los ajustes más precisos sobre los datos experimentales.

3.4. Programación de los modelos físicos

3.4.1. Simulación de nuevos ensayos a condiciones no ensayadas

Con el fin de mejorar el ajuste de las condiciones estacionarias del sistema, se van a repetir las estrategias de modelización seguidas para los datos experimentales pero incluyendo los resultados de aplicar ensayos simulados mediante un modelos físico.

En este caso sólo hay modelos físicos implementados con ajustes aceptables para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP. Tal y como se ha explicado en el apartado de Motivación, el modelo físico que mejor se ajusta a los datos experimentales es el modelo de Hermia adaptado al flujo tangencial para bloque de poros intermedio, cuyos resultados se publicaron en (Vincent Vela, et al., 2009).

Se disponen de 12 resultados experimentales, así que se van a simular otros 12 ensayos a otras condiciones experimentales diferentes a las desarrolladas en los casos experimentales para mejorar el estudio.

En la siguiente figura se ilustra este proceso:

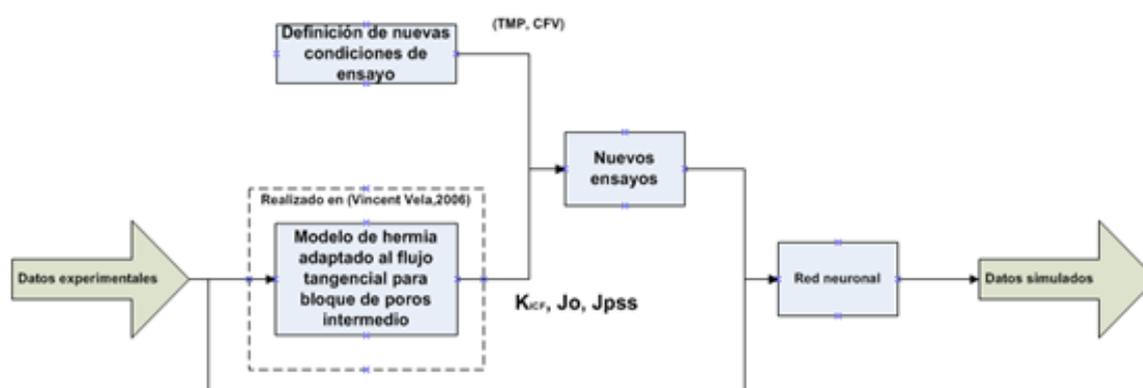


Figura 27: Estudio con redes neuronales de los resultados estacionarios incluyendo ensayos simulados mediante el modelo de Hermia adaptado al flujo tangencial para bloque de poros intermedio.

3.4.2. Selección de las condiciones no ensayadas

Las nuevas condiciones de ensayo para simular los ensayos van a estar dentro del rango de las condiciones de los ensayo experimentales desarrollados (Vincent Vela, 2006). La elección de las nuevas condiciones de ensayo se realiza mediante el siguiente procedimiento:

- 1) Se definen los niveles para cada parámetro (en este caso presión transmembranal y velocidad tangencial).
- 2) Se crean vectores de condiciones de ensayo (TMP CFV) a partir de las condiciones definidas de manera aleatoria asegurándose que no se repiten las condiciones de ensayo experimentales.
- 3) Se recogen los parámetros para aplicar la ecuación del modelo: J_0 , J_{pss} y K_{icf} .
- 4) Se realizan los ensayos simulados.

Los niveles para la presión transmembranal y la velocidad tangencial propuestos son los siguientes:

Tabla 18: Niveles propuestos para las nuevas condiciones de los ensayos simulados.

Parámetro	Ud	Valores propuestos
TMP	MPa	0.1-0.125-0.15-0.175-0.2-0.225-0.25-0.275-0.3-0.325-0.35-0.375-0.4
CFV	m/s	1-1.25-1.5-1.75-2-2.25-2.2-2.75-3

3.4.3. Aplicación de las redes neuronales a los nuevos ensayos

Se han implementado la misma metodología que para los datos experimentales, es decir, se va a proceder como se ha descrito en el apartado Métodos de modelización.

4. RESULTADOS

Se va proceder a describir los resultados de realizar los procesos y métodos para el ajuste de los datos mediante redes neuronales artificiales explicados en el apartado anterior. Para ello en primer lugar se realiza un análisis de la varianza de los parámetros de caracterización de los ajustes obtenidos para determinar cuál ha sido la mejor estrategia de ajuste dentro de cada red neuronal. Una vez se haya seleccionado la estrategia de ajuste óptimo para cada red, se muestran los resultados del ajuste.

Los artículos consultados de redes neuronales artificiales generalmente se limitan a representar gráficos de los valores observados frente a los predichos por la red neuronal (Delgrange, et al., 1998; Sarkar, et al., 2009; Razavi, et al., 2004; Delgrange-Vincent, et al., 2000). Los resultados observados en esta tesis indican que pese a obtener resultados del coeficiente de regresión elevados, representando los resultados dinámicamente se producen desajustes (sobre todo para puntos no utilizados para el entrenamiento de la red neuronal). Por lo que la representación de resultados en esta tesis va a estar enfocada a la representación dinámica y estacionaria de los resultados.

4.1. Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos de la membrana CARBOSEP

Antes de realizar los análisis de la varianza para los parámetros de caracterización, se va a introducir la notación de caracterización de las redes neuronales desarrolladas para perceptrón multicapa en los datos de la membrana CARBOSEP.

- Pret: indica el tipo de pretratamiento realizado.
- Pesos: indica la inicialización de los pesos de la red.
- Neur: indica el número de neuronas de la capa intermedia.

La Tabla 19 muestra un resumen de la notación empleada para los elementos del procedimiento empleado, así como de los niveles que pueden tomar y su descripción.

Tabla 19: Notación de los factores de la red neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
	2	Modelo del ensuciamiento dinámico del sistema
	3	Pretratamiento doble
Pesos	0	Pesos iniciales nulos
	1	Pesos iniciales aleatorios
Neur	5-6-7-8-9-10	-

4.1.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales

Tal y como se ha explicado en el apartado 3.3.1, para evitar incoherencias con los intervalos se va a analizar el $[-\log_{10}(1- R^2)]$. Los resultados del análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ del ajuste a los datos experimentales se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 20: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	3.80337	3	1.267790	5.15	0.0024
B:Pesos	1.79461	1	1.794610	7.29	0.0082
C:Neur	4.87450	5	0.974901	3.96	0.0026
INTERACTIONS					
AB	0.77721	3	0.259069	1.05	0.3732
AC	2.37241	15	0.158160	0.64	0.8327
BC	1.01510	5	0.203020	0.82	0.5352
ABC	3.18590	15	0.212393	0.86	0.6068
RESIDUAL	23.6346	96	0.246193		
TOTAL (CORRECTED)	41.4577	143			

Se observa que, individualmente, todos los factores tienen un efecto estadísticamente significativo sobre la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2)]$ asumiendo un error de primera especie del 5%. Las interacciones entre los efectos, ya sean interacciones dobles o triples, no tienen efectos significativos sobre la variable respuesta bajo el error de primera especie asumido.

La Figura 28 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento del análisis de la varianza realizado.

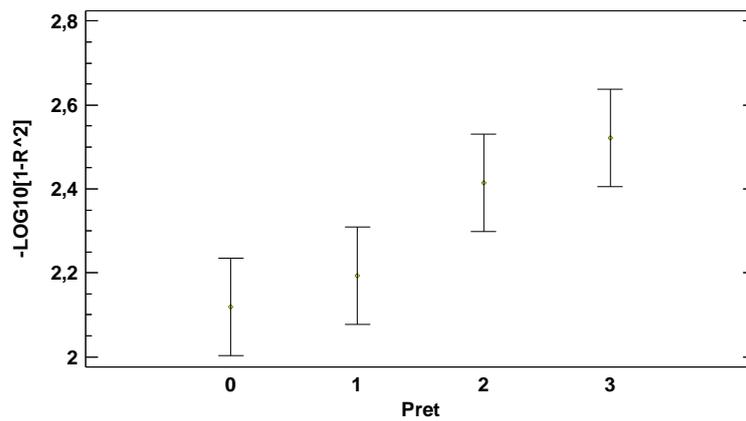


Figura 28: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 29 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

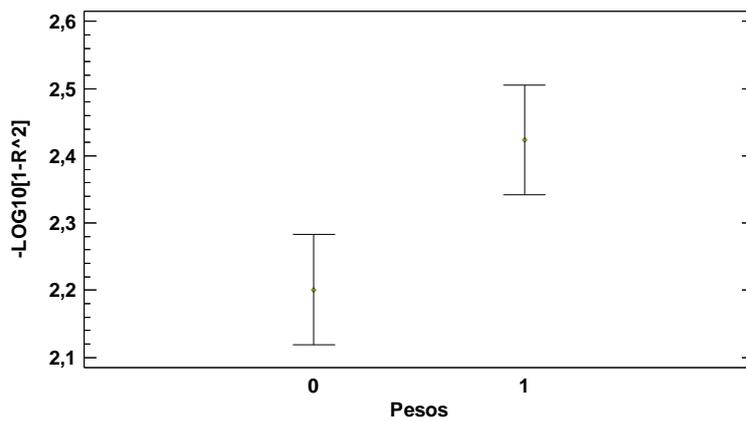


Figura 29: Efecto de la inicialización de los pesos de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 30 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

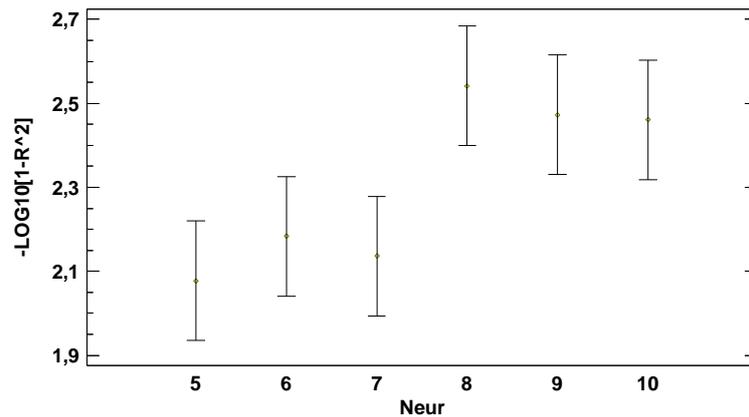


Figura 30: Efecto del número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 28 muestra que los pretratamientos escogidos mejoran progresivamente la regresión de los datos experimentales en la membrana CARBOSEP empleando la red neuronal perceptrón multicapa. Se observa que el pretratamiento 1 (normalización de la densidad de flujo volumétrico no mejora significativamente la regresión obtenida) con respecto a no aplicar ningún tipo de pretratamiento. La introducción de un modelo de ensuciamiento como variable de entrada (pretratamientos 2 y 3) mejoran significativamente los resultados siendo el pretratamiento 3 ligeramente superior a los resultados del pretratamiento 2.

La Figura 29 muestra que inicializar los pesos con valores aleatorios genera coeficientes de regresión más elevados.

La Figura 30 muestra que entre el rango del número de neuronas para la capa intermedia de la red, el coeficiente de regresión alcanza valores mayores para valores elevados dentro de dicho rango (8-10). Se observa que introducir 8 neuronas en la capa intermedia ofrece resultados ligeramente superiores al introducir 9 o 10. Puede ser debido a que la variabilidad de los datos requiera mayor número de nodos o neuronas en la capa intermedia de la red neuronal. Estos resultados son similares a los que muestran (Chellam, 2005; Razavi, et al., 2003; Razavi, et al., 2004) que son estudios para la aplicación de ANN sobre la evolución dinámica de la densidad de flujo volumétrico para MF y UF. Otros estudios muestran que los mejores ajustes se consiguen para número de neuronas de la capa intermedia 6-8 (Shetty, et al., 2003), aunque este estudio sea para NF.

Atendiendo a que las interacciones no tienen efectos significativos sobre la variable respuesta no se van a introducir las representaciones de la visualización de los efectos de las interacciones.

4.1.2. Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales

El resumen del análisis de la varianza realizado sobre el error medio cuadrático normalizado de los ajustes de las redes neuronales perceptrón multicapa sobre los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 21: Análisis de la varianza para el error cuadrático medio normalizado de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	0.000105295	3	0.0000350984	1.44	0.2355
B:Pesos	0.000133568	1	0.0001335680	5.49	0.0212
C:Neur	0.000251797	5	0.0000503593	2.07	0.0760
INTERACTIONS					
AB	0.000054006	3	0.0000180020	0.74	0.5311
AC	0.000194843	15	0.0000129896	0.53	0.9157
BC	0.000173234	5	0.0000346468	1.42	0.2229
ABC	0.000393545	15	0.0000262363	1.08	0.3872
RESIDUAL	0.002337500	96	0.0000243490		
TOTAL (CORRECTED)	0.003643790	143			

A pesar de que este parámetro caracteriza el ajuste de la ANN a los datos experimentales, no se obtienen los mismos resultados que para el $[-\log_{10}(1-R^2)]$ siendo la inicialización de los pesos de la red el único efecto significativo sobre la variable respuesta: NMSE (en nomenclatura del Matlab: msne), asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 31 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento del análisis de la varianza realizado.

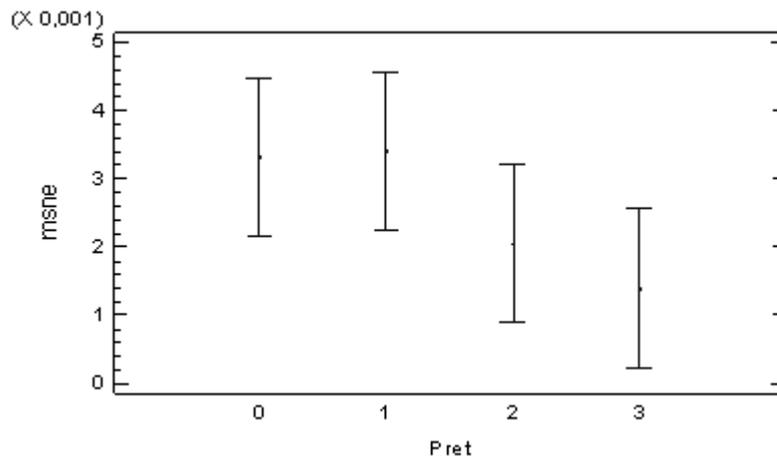


Figura 31: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 32 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

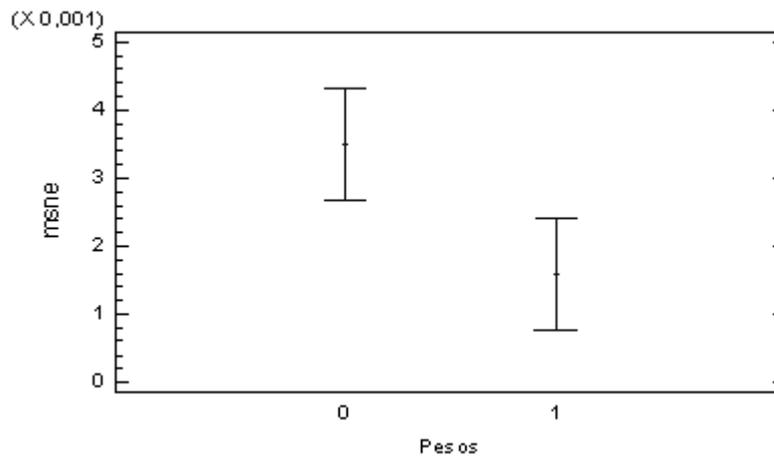


Figura 32: Efecto de la inicialización de los pesos de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 32 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia del análisis de la varianza realizado.

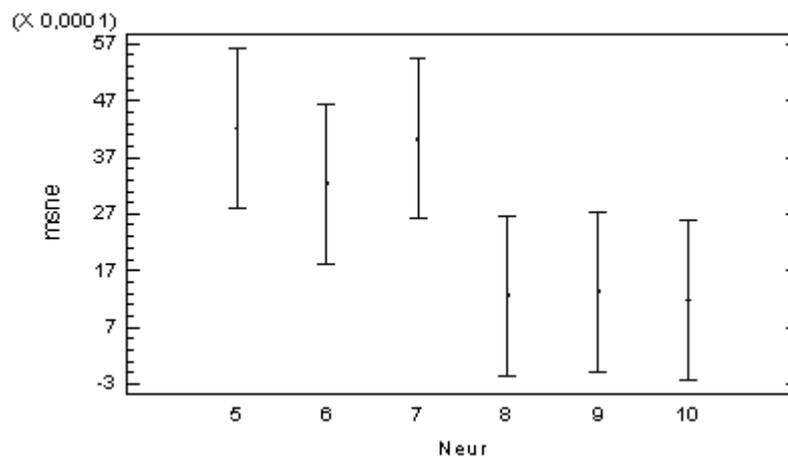


Figura 33: Efecto del número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

A pesar de no tener efectos significativos, las Figura 31 y 33 muestran que el msne tiende a valores más bajos para los pretratamientos 2 y 3 y para neuronas en la capa intermedia de la red neuronal elevados (8-10), tal y como se describía en el ANOVA para el $[-\log_{10}(1 - R^2)]$ de la red neuronal perceptrón multicapa para los datos experimentales de la membrana CARBOSEP. Se observa también que en la Figura 33, los intervalos LSD para las neuronas 8, 9 y 10 muestran que los valores inferiores de estos intervalos son menores que 0. Esto es debido a la aplicación literal de la fórmula del intervalo LSD (ecuación 48), sin embargo, solo se va a atender al hecho de que para estos valores, el factor analizado es significativamente más pequeño. La interpretación de la Figura 33 es la misma que para el caso de $[-\log_{10}(1 - R^2)]$ en la Figura 30.

La Figura 32 muestra que el msne tiende a valores más bajos para inicializaciones de los pesos de la red aleatorios.

4.1.3. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1 - R^2)]$: las figuras 28 a la 30 y de la Tabla 20, se observa que los ajustes más aproximados de los datos son para las condiciones:

$$\text{Pret}=3 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=8$$

En el estudio del análisis de la varianza de NMSE: de las figuras 31 a la 33 y de la Tabla 21, se observa los ajustes más aproximados de los datos son para las condiciones:

$$\text{Pret}=3 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=8, 9 \text{ y } 10$$

De manera que se van a mostrar los datos para $\text{Pret}=3 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=8$. Aplicando estos parámetros se obtienen los siguientes resultados:

Tabla 22: Resultados de los parámetros de caracterización para Pret=3 – Pesos=1 – Neur=8 para las redes neuronales perceptrón multicapa en los datos de la membrana CARBOSEP.

Pret	Pesos	Neur	msne	R ²	R ² est
3	1	8	0.00029772	0.9983	0.7270
3	1	8	0.00033029	0.9981	0.1817
3	1	8	0.00035582	0.9980	0.9036

R² est: es el coeficiente de regresión obtenido al estudiar la regresión de la red neuronal sobre las condiciones estacionarias.

Atendiendo a que los valores de R² y NMSE tienen resultados casi idénticos, se va a emplear el valor R² de los datos estacionarios como criterio para escoger la mejor simulación. El mejor resultado se obtiene para la tercera simulación ya que presenta los mejores resultados de regresión estacionaria. Los resultados de esta simulación se representan en las figuras de la 34 a la 43.

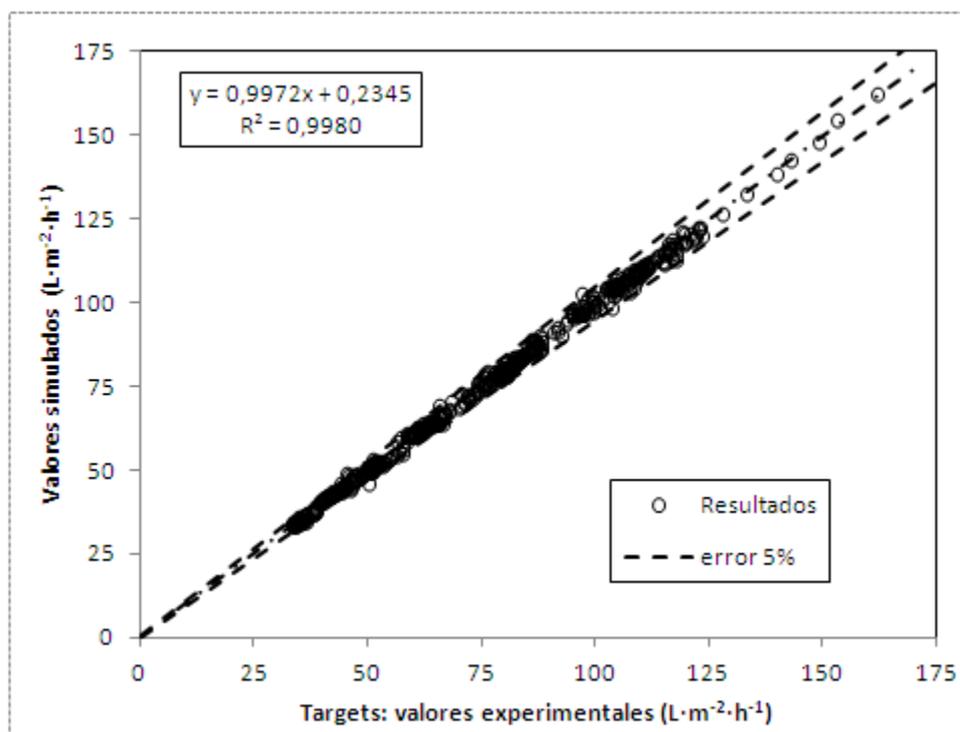


Figura 34: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal perceptrón multicapa para pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

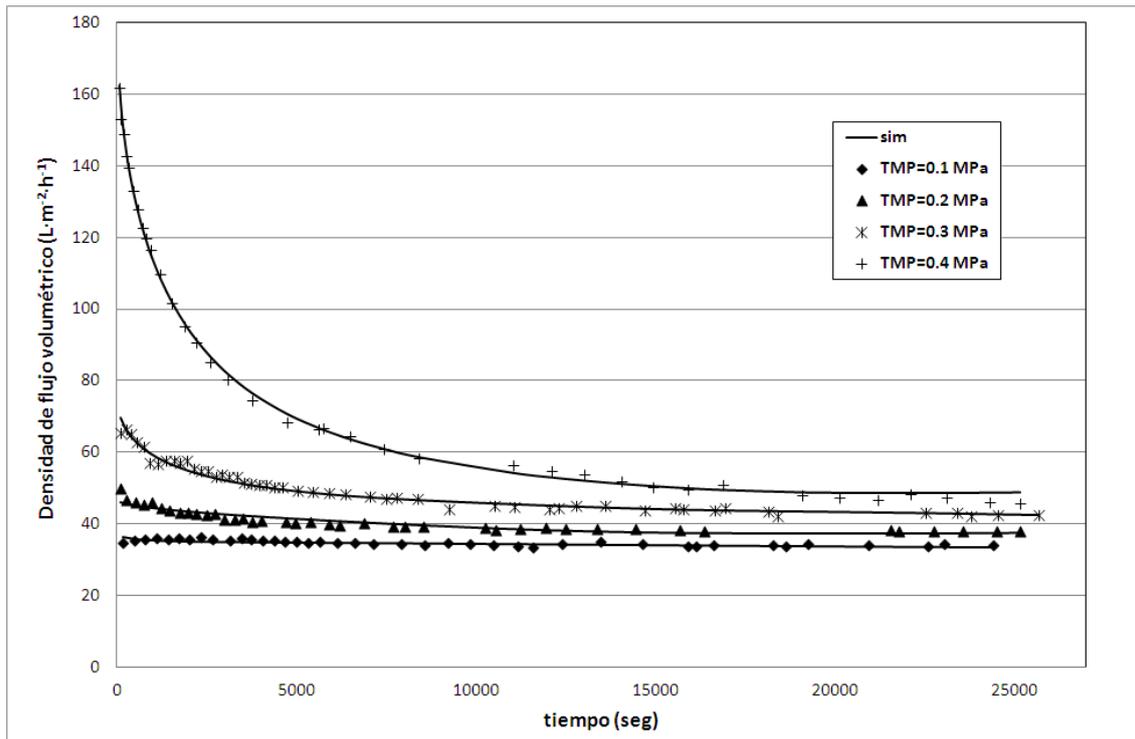


Figura 35: Resultados de la simulación de la red para $CFV=1m/s$. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

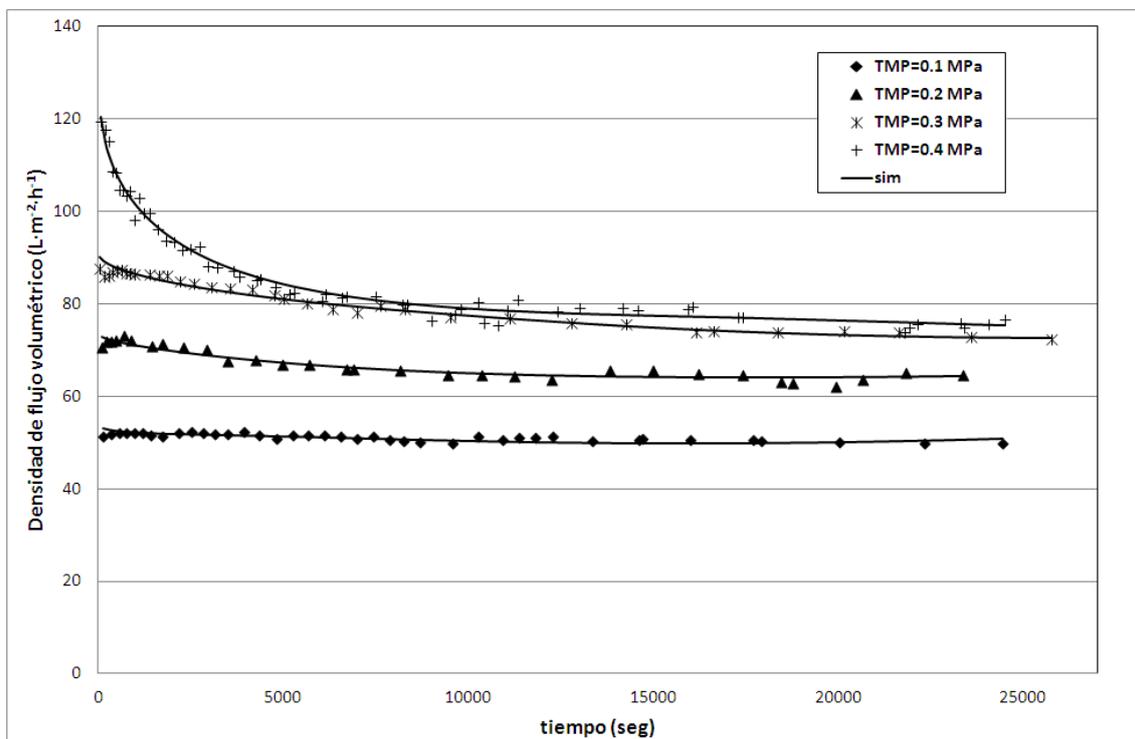


Figura 36: Resultados de la simulación de la red para $CFV=2m/s$. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

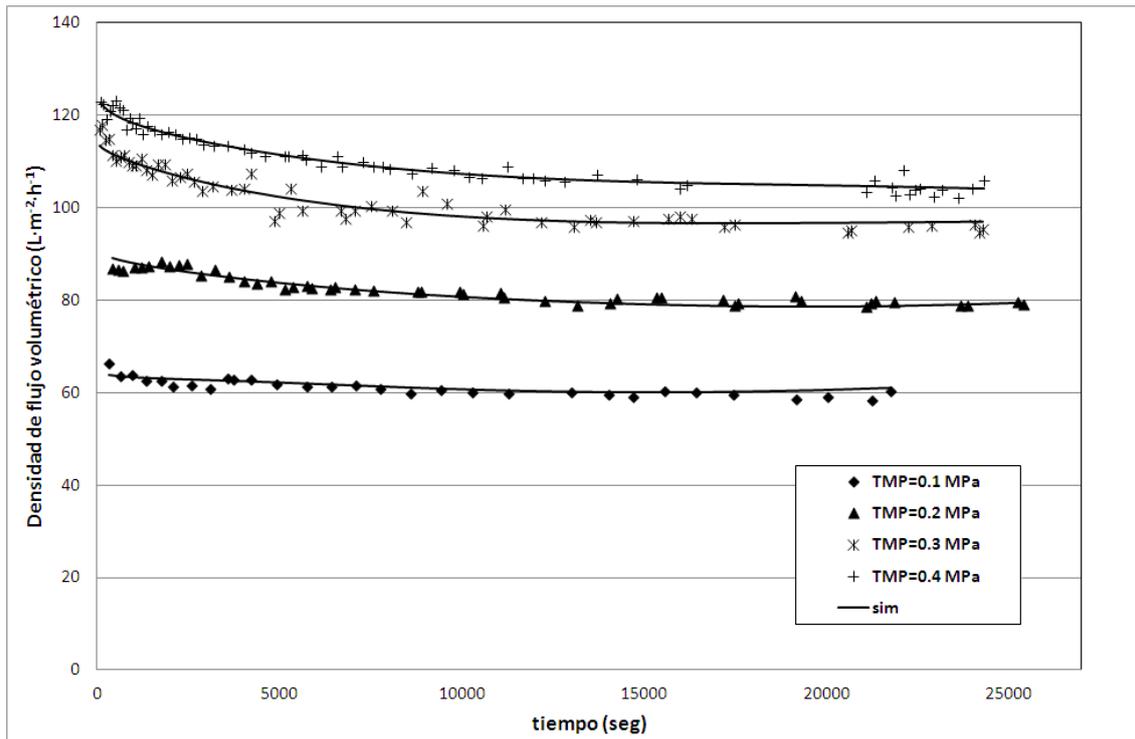


Figura 37: Resultados de la simulación de la red para CFV=3m/s. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

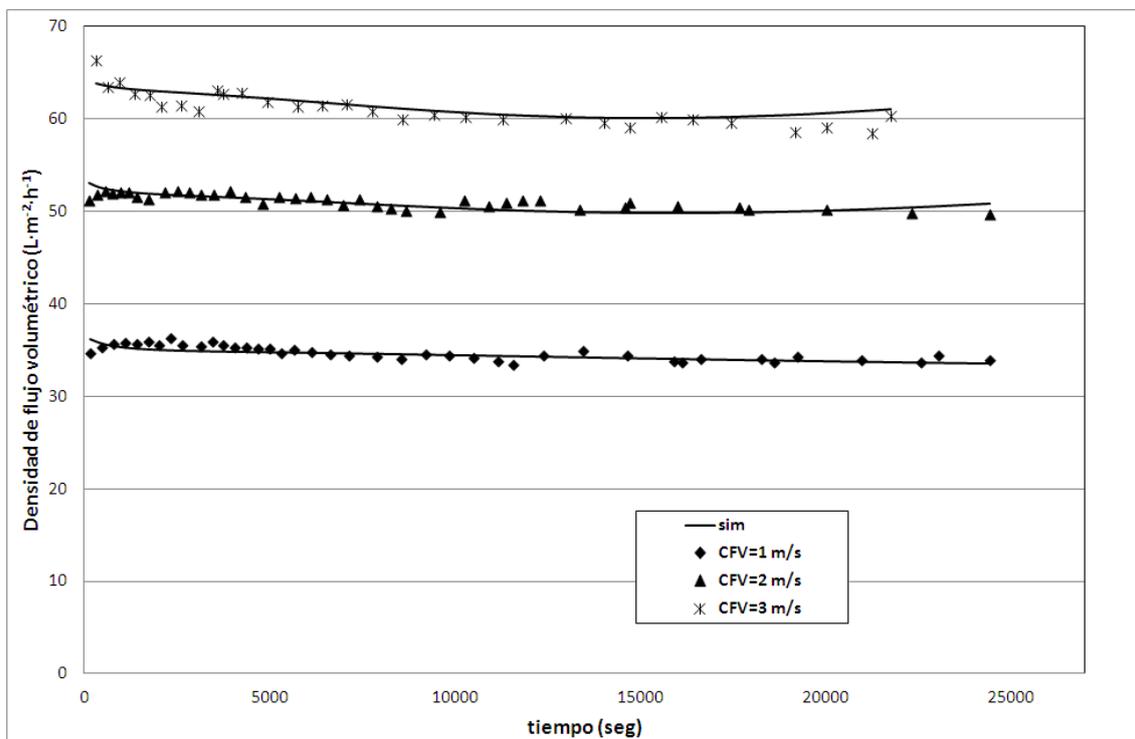


Figura 38: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.1 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

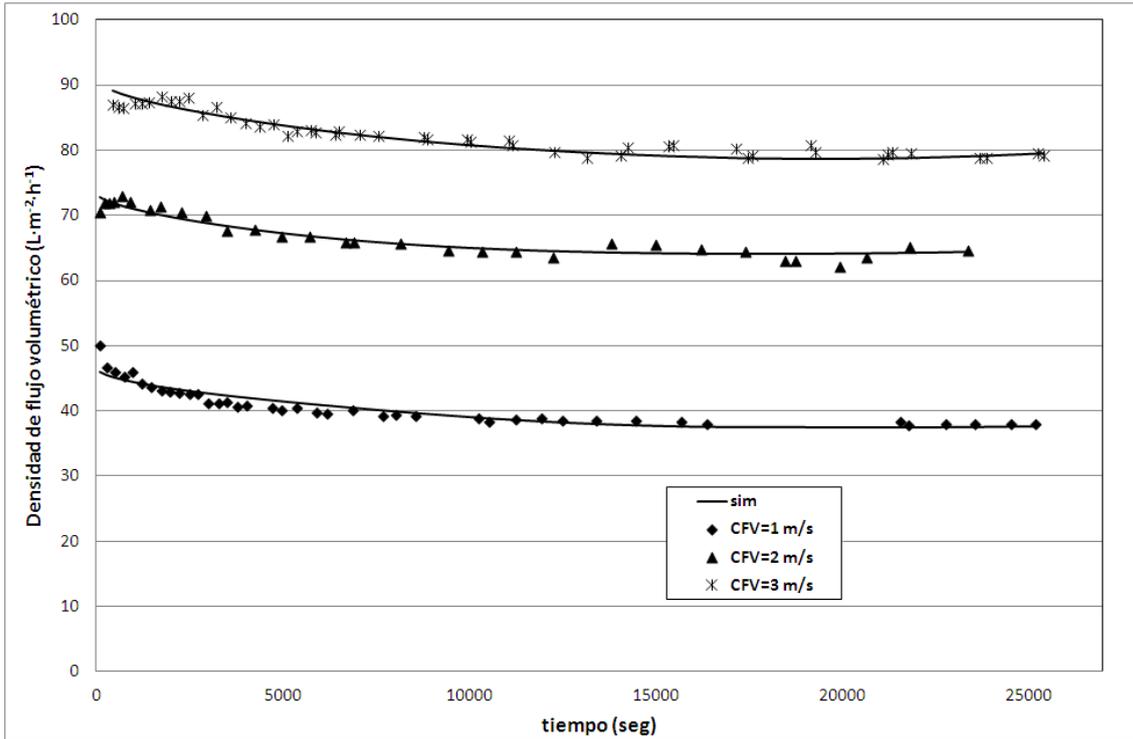


Figura 39: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.2$ MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

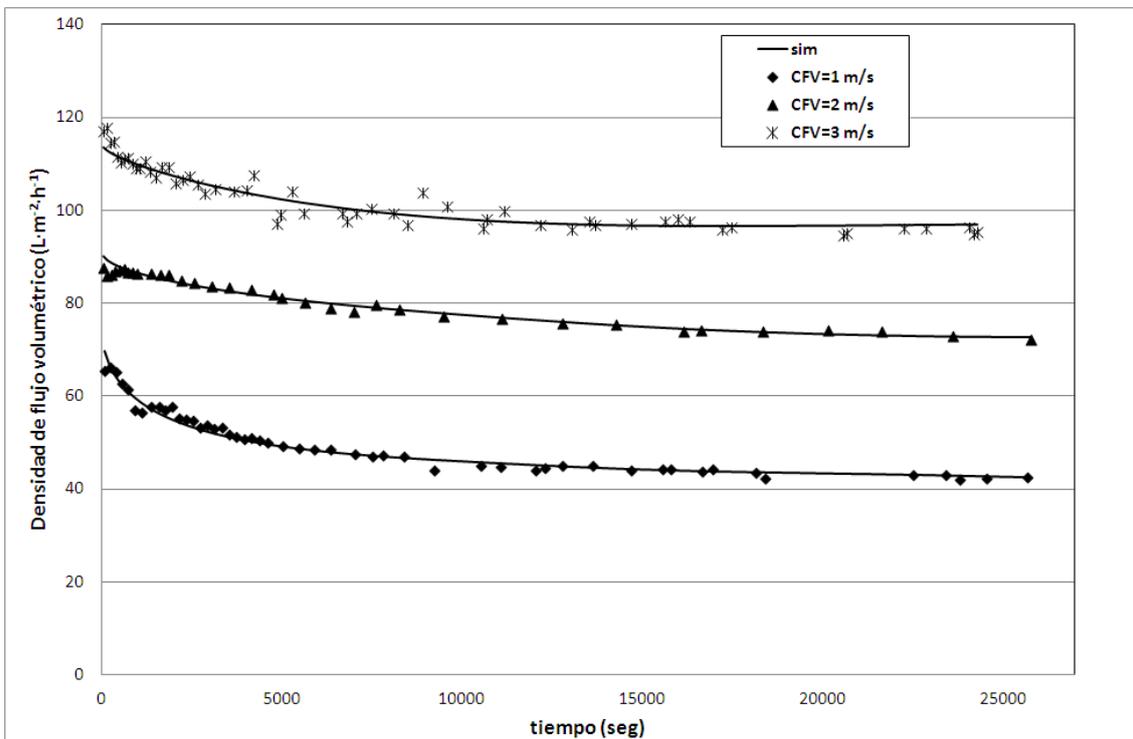


Figura 40: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.3$ MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

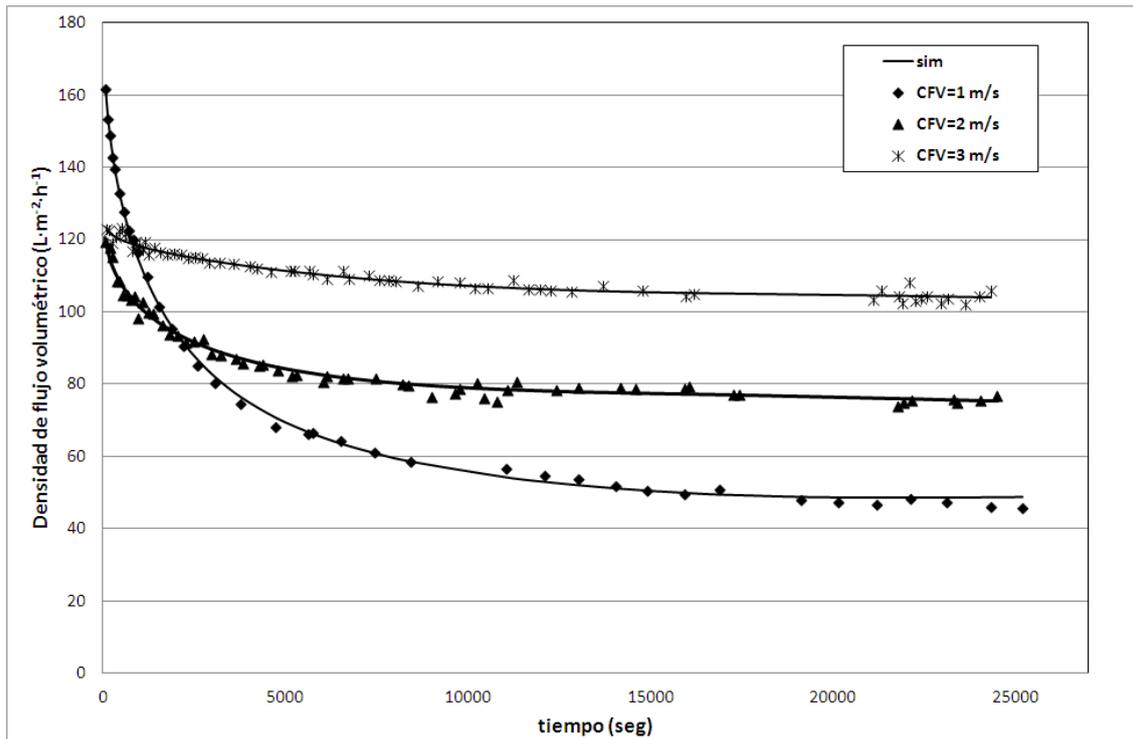


Figura 41: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP.

Los resultados de las simulaciones muestran ajustes muy precisos, tal y como muestra la Figura 34, ya que la red neuronal ha sido capaz de ajustar las densidades de flujo volumétrico teniendo en cuenta que hay ensayos donde hay disminución inicial de la densidad de flujo volumétrico y hay ensayos donde la densidad de flujo volumétrico parece estabilizada desde el comienzo del ensayo. Sin embargo se observan algunos desajustes en el comportamiento dinámico de las simulaciones. Se observa que algunas simulaciones, en vez de estabilizarse, incrementan ligeramente el valor de la densidad de flujo volumétrico para los tiempos finales del ensayo, sobre todo en la Figura 38 para las representaciones de CFV 2 y 3 m/s. También se observa para algunos ensayos, la disminución inicial debido al bloqueo de poros no termina de ajustarse bien a lo observado experimentalmente (Figura 39 en CFV 1m/s y Figura 40 en CFV 3 m/s).

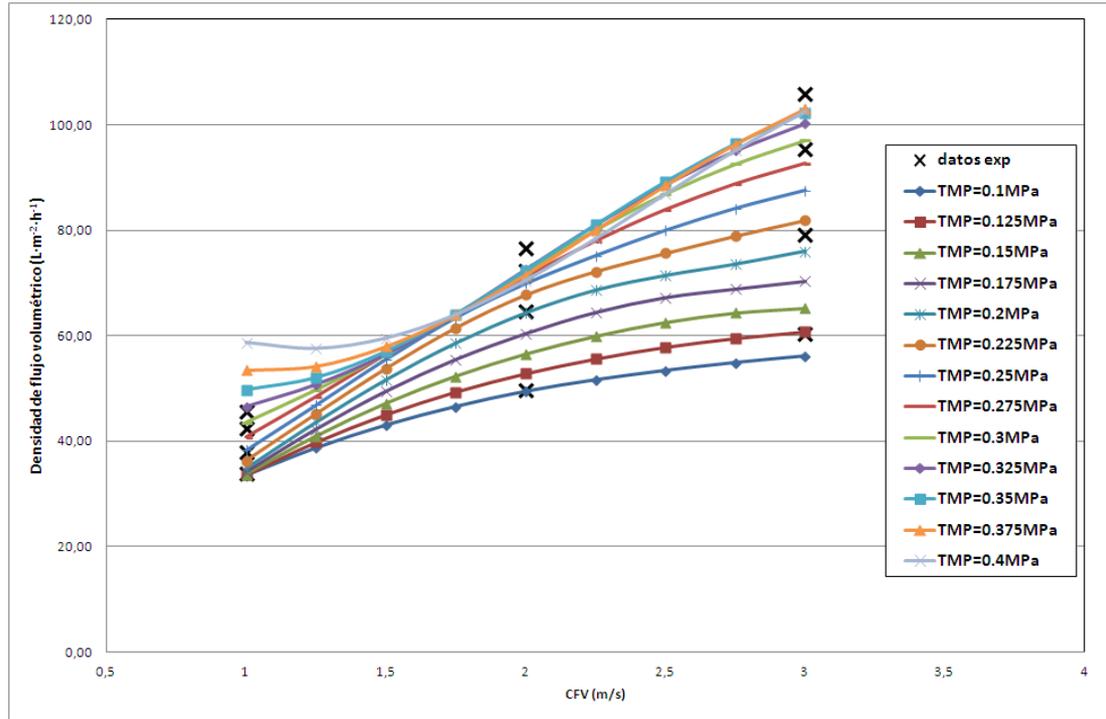


Figura 42: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP. (X datos experimentales)

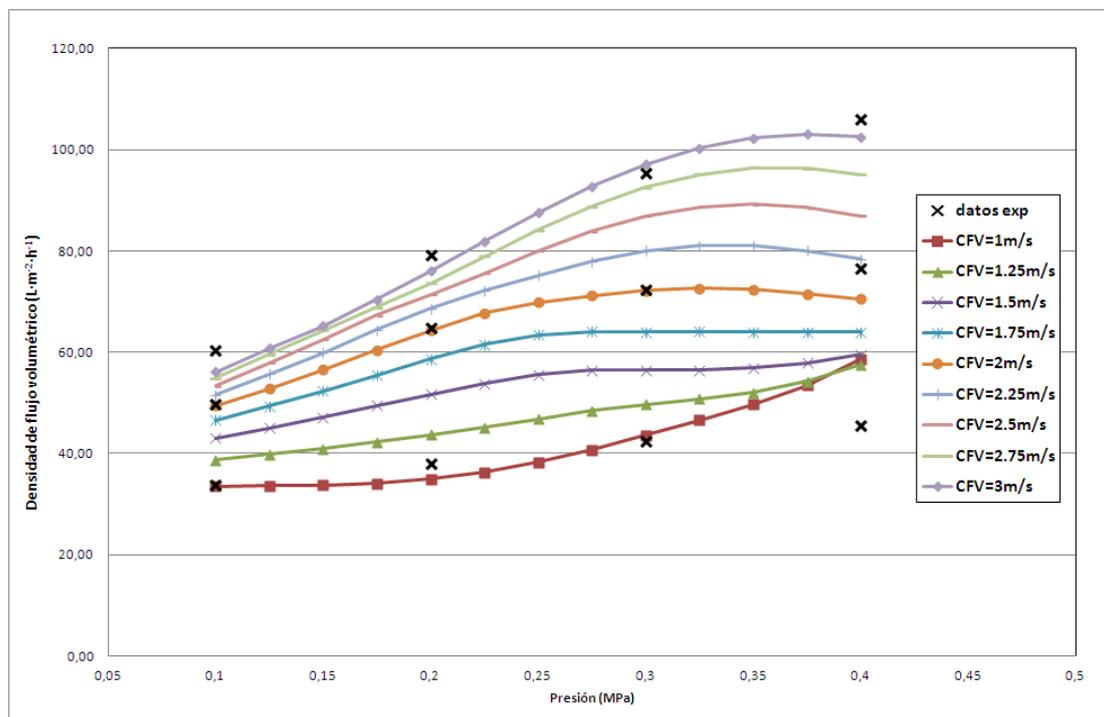


Figura 43: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento doble pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 3 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana CARBOSEP. (X datos experimentales)

En la Figura 42 parece que el comportamiento estacionario de los resultados de la red neuronal obtiene buenos resultados para presiones bajas (ya que las representaciones obtenidas para estas presiones presentan evoluciones coherentes). Al analizar la Figura 43 se observa que ninguna representación presenta una evolución aceptable ya que se observa que la evolución es parabólica para velocidades tangenciales bajas y elevadas, y para velocidades intermedias se observan estabilizaciones de la densidad de flujo volumétrica a presiones intermedias.

4.1.4. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios

Atendiendo a que buscar el mejor ajuste para los datos experimentales ha provocado representaciones de los resultados estacionarios con evoluciones incoherentes (tanto para la evolución respecto a la velocidad tangencial y la presión transmembranal), se va a buscar la ANN perceptrón multicapa que devuelva el mejor resultado de ajuste sobre los datos estacionarios con el fin de observar si la ANN es capaz de obtener simulaciones con evoluciones coherentes con respecto a los datos estacionarios experimentales.

Durante la ejecución de las simulaciones se observaron resultados anómalos para este factor. Se va a introducir un filtro para analizar tan solo los resultados de R^2 de los datos estacionarios que sean menores que 1. Análogamente al análisis del R^2 de los datos se va a estudiar el $-\log_{10}(1-R^2)$.

El resumen del análisis de la varianza realizado se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 23: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	5.78853000	3	1.92951000	21.14	0.0000
B:Pesos	0.00000353	1	0.00000353	0.00	0.9951
C:Neur	0.13323800	5	0.02664760	0.29	0.9162
INTERACTIONS					
AB	0.6989810	3	0.2329940	2.55	0.0607
AC	1.5996500	15	0.1066430	1.17	0.3115
BC	0.7590720	5	0.1518140	1.66	0.1520
RESIDUAL	7.9400700	87	0.0912652		
TOTAL (CORRECTED)	17.8126000	119			

Se observa que el único efecto estadísticamente significativo es el pretratamiento empleado, asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 44 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento del análisis de la varianza realizado.

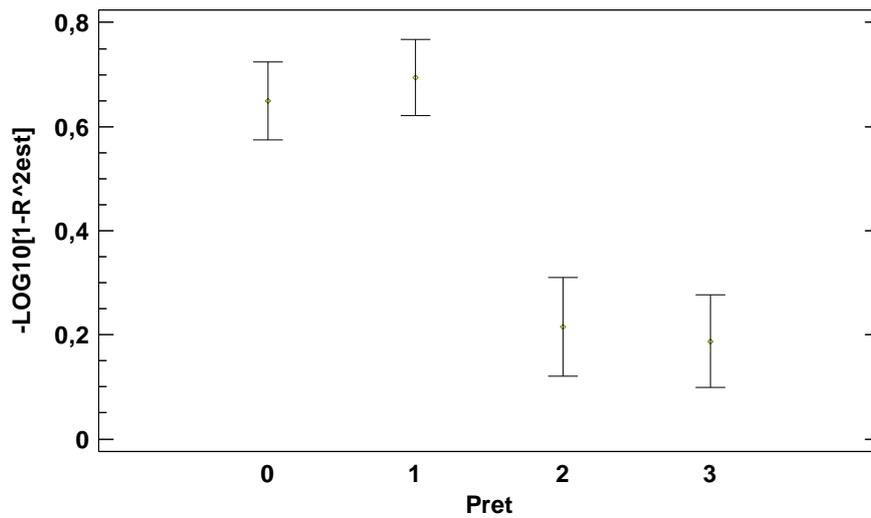


Figura 44: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 45 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

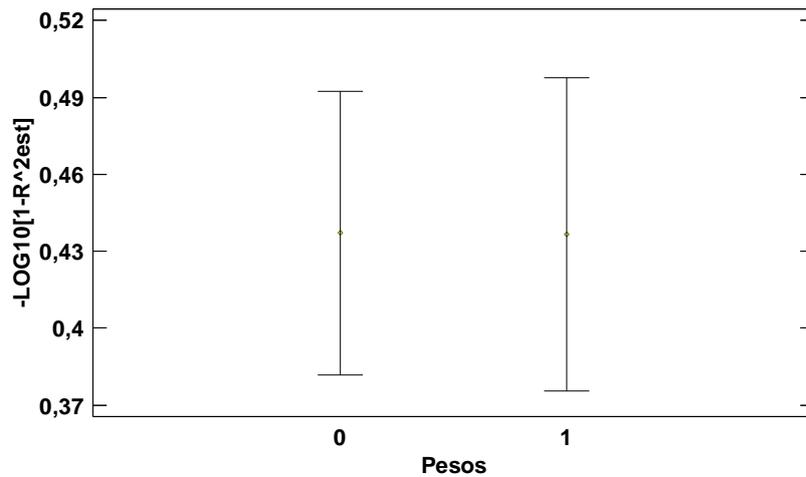


Figura 45: Efecto de la inicialización de los pesos de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 46 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia del análisis de la varianza realizado.

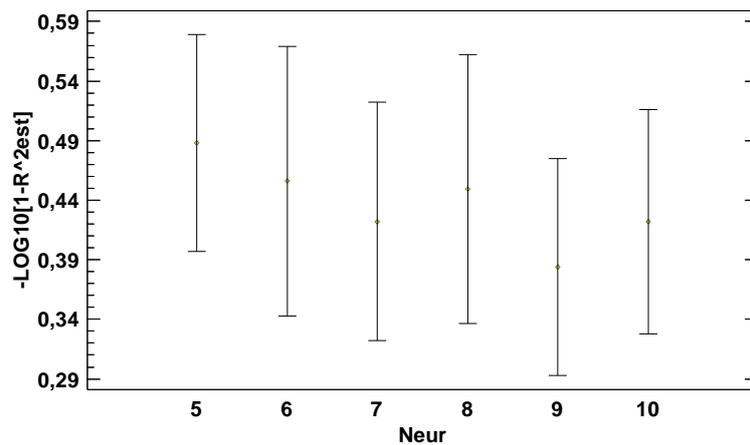


Figura 46: Efecto del número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Al observar los resultados del coeficiente de regresión de los datos estacionarios, se observa que llegan a valores mayores que los que indican estos intervalos. Por ello se va a introducir la siguiente figura que resulta de restringir la interacción de los pesos iniciales de la red y el número de neuronas de la capa intermedia de la red para el pretratamiento 1.

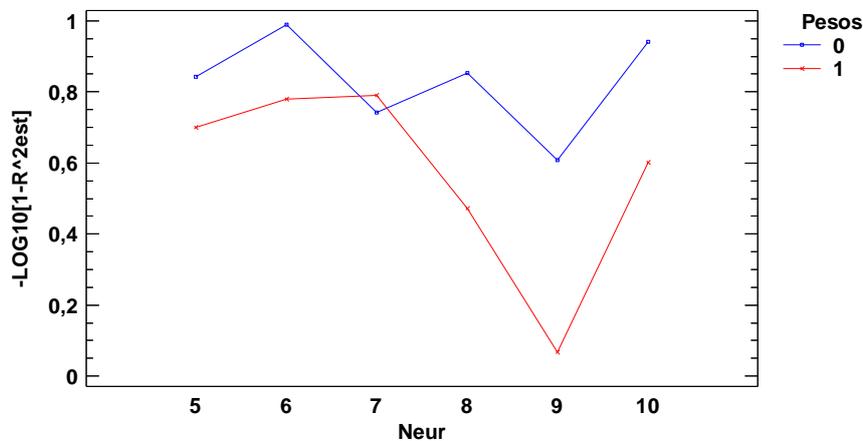


Figura 47: Efecto la interacción de la inicialización de los pesos de la red y el número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Los resultados muestran que la inicialización de los pesos y el número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal no influyen sobre el ajuste de los datos estacionarios. Las ANN que se han implementado tienen como objetivo ajustar los datos experimentales, así que no tiene sentido que los parámetros para ajustar la red neuronal (inicialización de los pesos y número de neuronas) mejoren el ajuste a las condiciones estacionarias.

Sin embargo, el pretratamiento empleado sí que ofrece una mejora significativa sobre el ajuste de los datos estacionarios. Puede ser debido a que la mejora del ajuste sobre los datos experimentales sea suficientemente significativa como para afectar a los datos estacionarios que la red neuronal simula.

4.1.5. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$: de la Figura 44 a la 47 y la Tabla 23 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

$$\text{Pret}= 1 - (\text{Pesos}= 0 - \text{Neur}= 6) \text{ ó } (\text{Pesos}= 1 - \text{Neur}= 5)$$

Por ello, en la Tabla 24 se muestran los resultados para $\text{Pret}= 1 - (\text{Pesos}= 0 - \text{Neur}= 6)$ ó $(\text{Pesos}= 1 - \text{Neur}= 5)$. Los ensayos realizados con estos parámetros presentan los siguientes resultados:

Tabla 24: Resultados de los parámetros de caracterización en $\text{Pret}=1 - (\text{Pesos}=0 - \text{Neur}=6)$ ó $(\text{Pesos}=1 - \text{Neur}= 5)$ para las redes neuronales perceptrón multicapa en los datos de la membrana CARBOSEP.

Pret	Pesos	Neur	msne	R ²	R ² _{est}
1	0	6	0.0041725	0.9765	0.9661
1	0	6	0.0200892	0.8868	0.6909
1	0	6	0.0012881	0.9927	13210.5536
1	1	5	0.0020367	0.9885	0.9450
1	1	5	0.0008825	0.9950	0.8428
1	1	5	0.0008119	0.9954	0.0803

Se observa que la tercera simulación, para pesos iniciales 0 y 6 neuronas en la capa intermedia, se obtiene un resultado anómalo del coeficiente de regresión para datos estacionarios.

Se observa que pese a que la primera simulación de $\text{Pret}=1 - \text{Pesos}=0 - \text{Neur}=6$ presenta un mejor resultado de coeficiente de regresión para los datos estacionarios, los resultados de regresión de los datos experimentales son inferiores a los que presenta la primera simulación de $\text{Pret}=1 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=5$. La finalidad de la red neuronal es el ajuste de los datos experimentales, así que se va a representar los resultados de la primera simulación de $\text{Pret}=1 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=5$.

Los resultados de la simulación de la red neuronal propuesta se muestran en las figuras de la 48 a la 57.

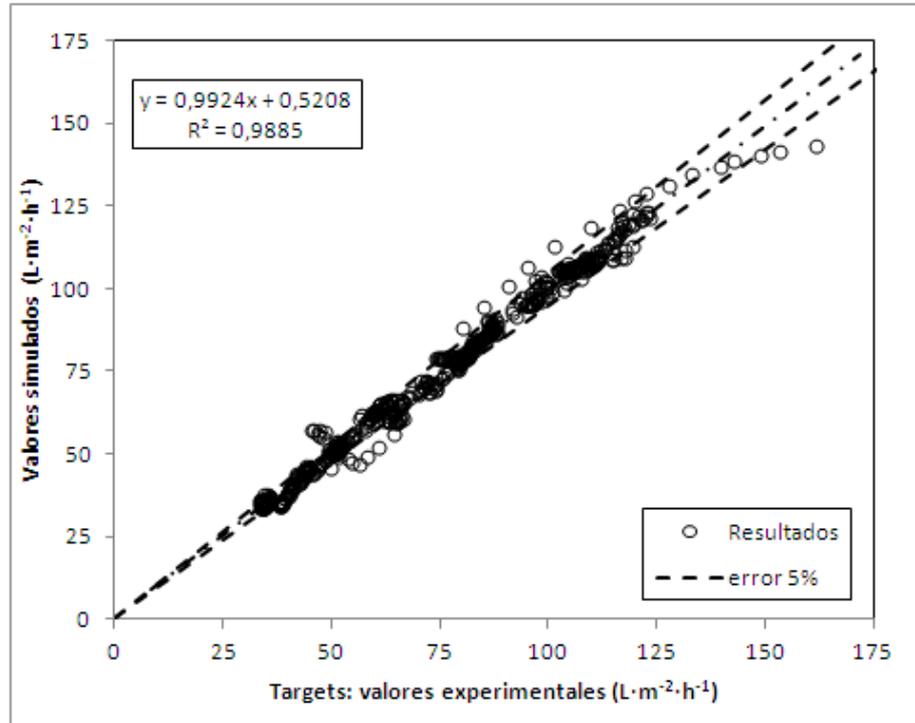


Figura 48: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal perceptrón multicapa para pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

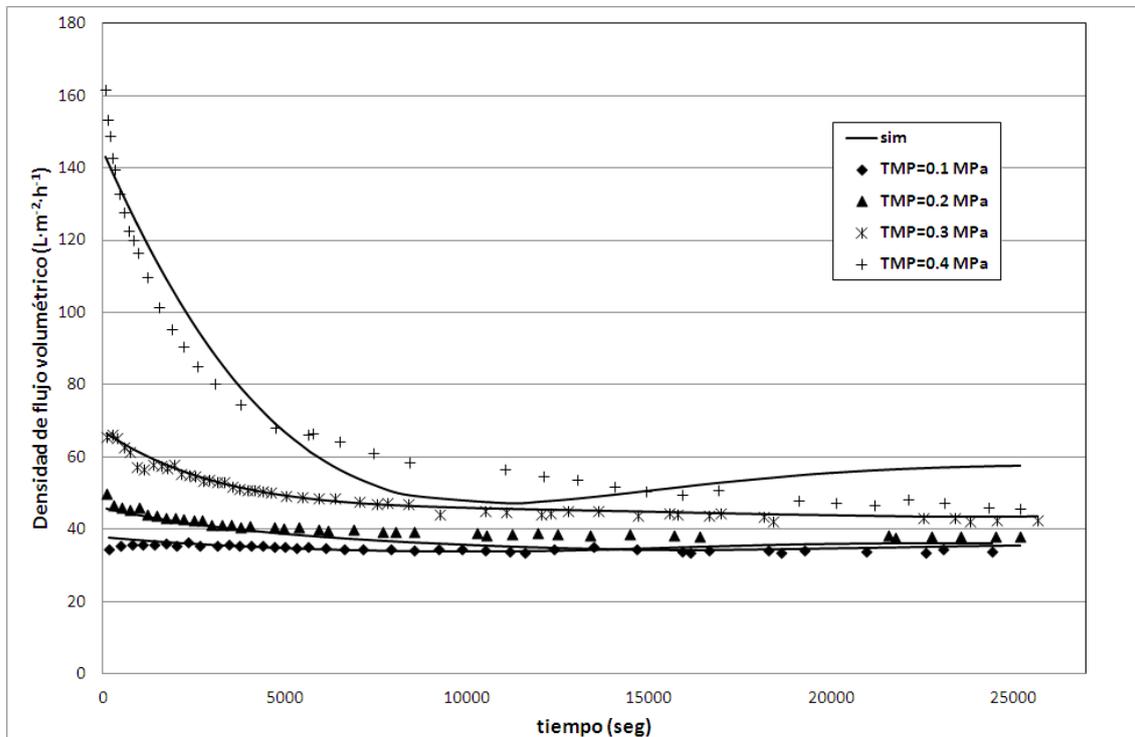


Figura 49: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

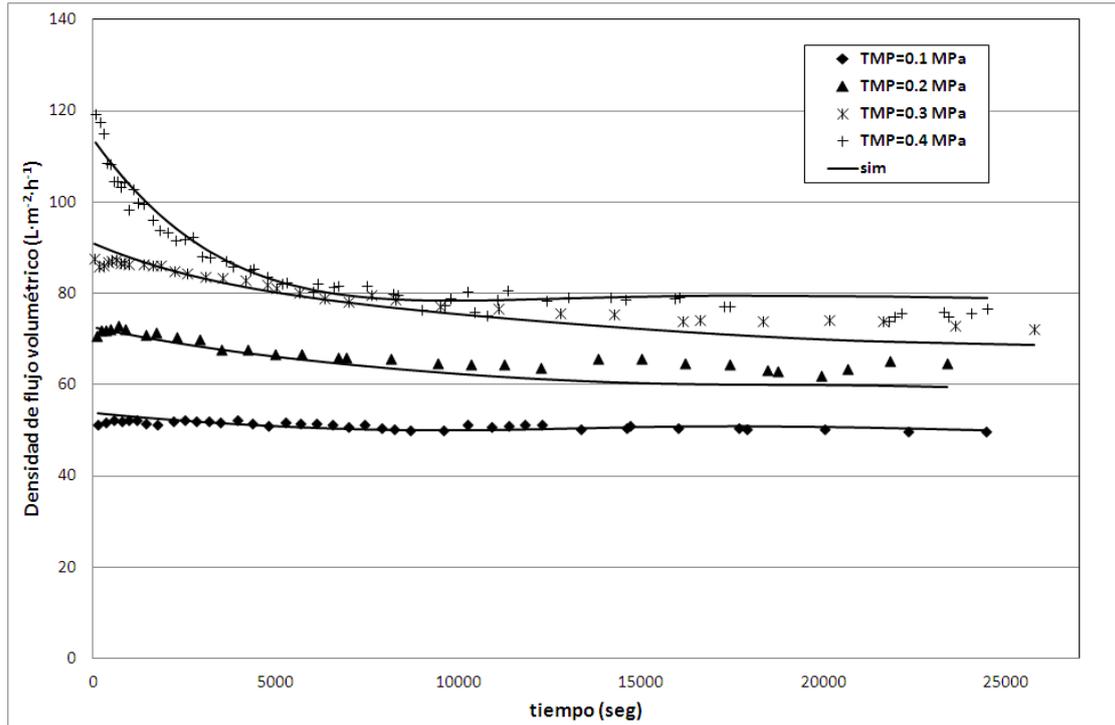


Figura 50: Resultados de la simulación de la red para $CFV=2m/s$. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

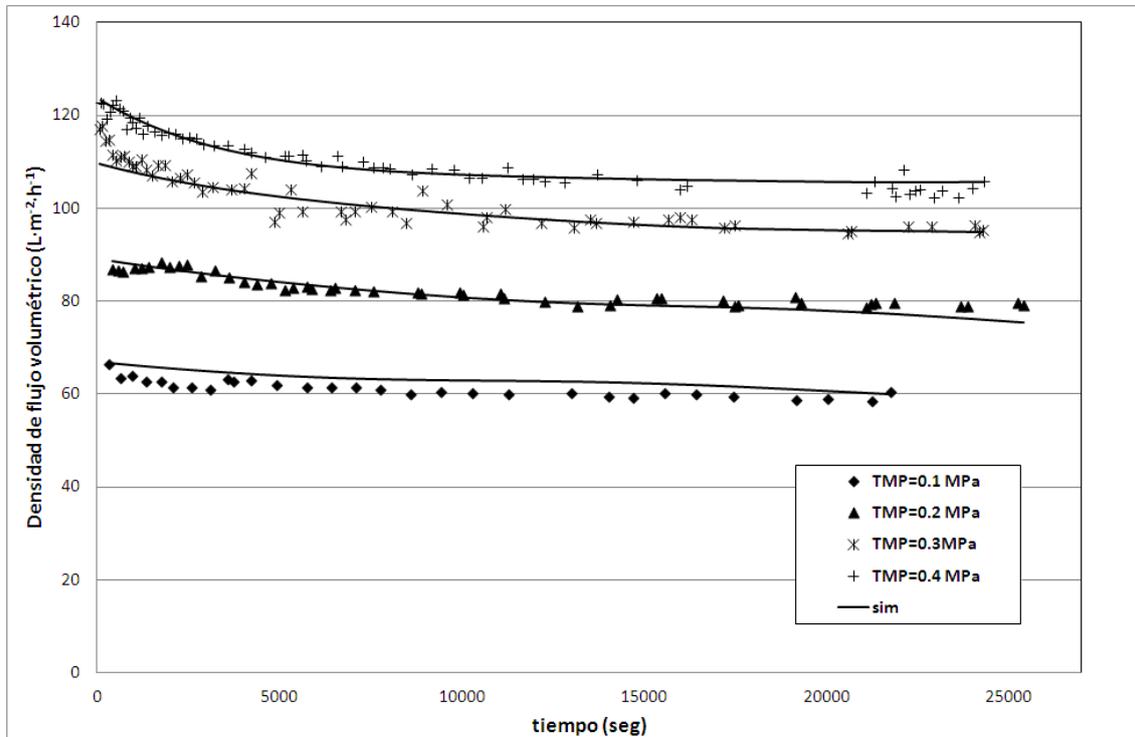


Figura 51: Resultados de la simulación de la red para $CFV=3m/s$. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

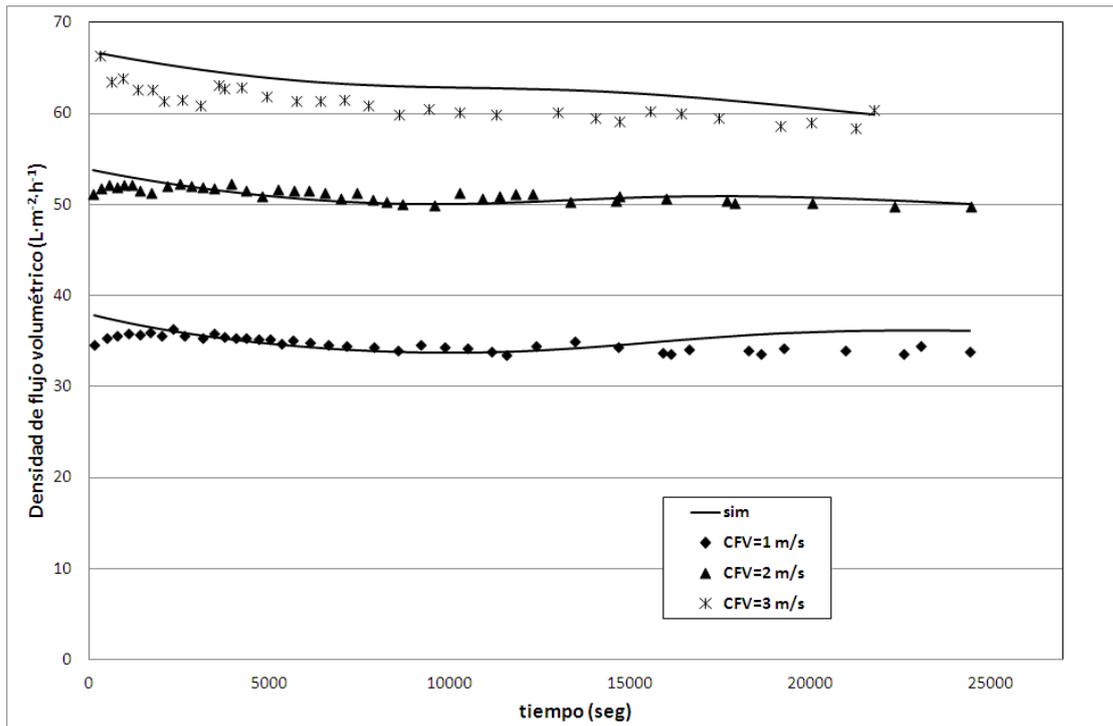


Figura 52: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.1 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

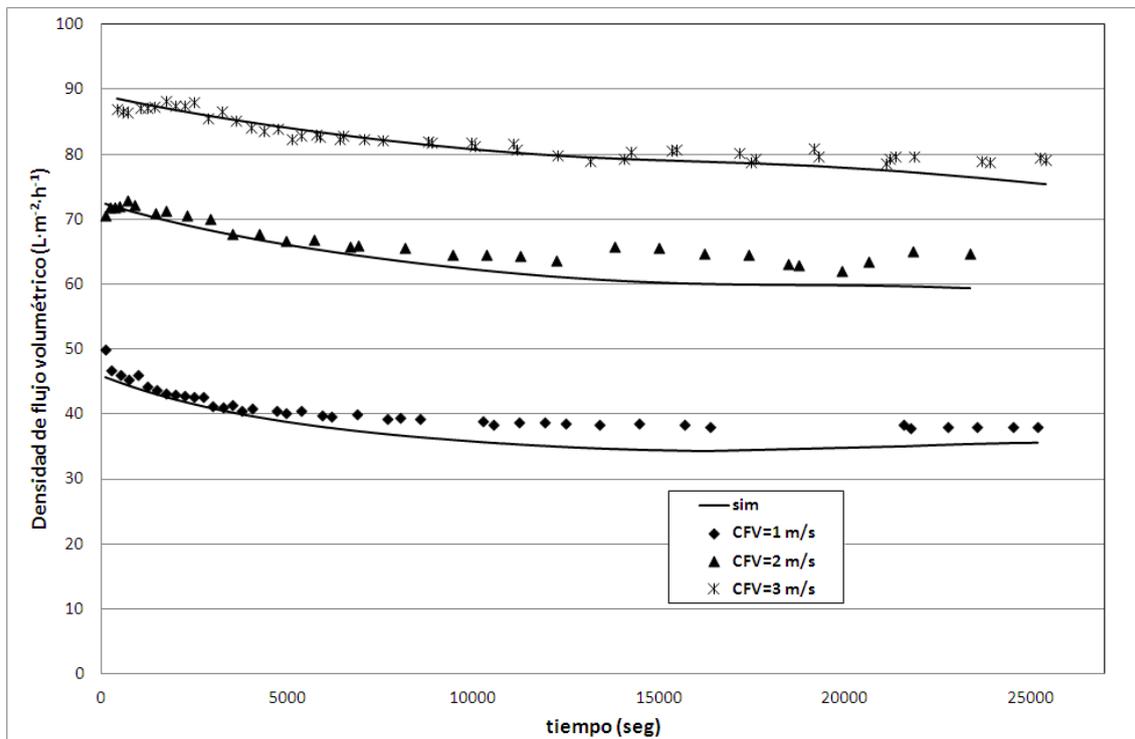


Figura 53: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

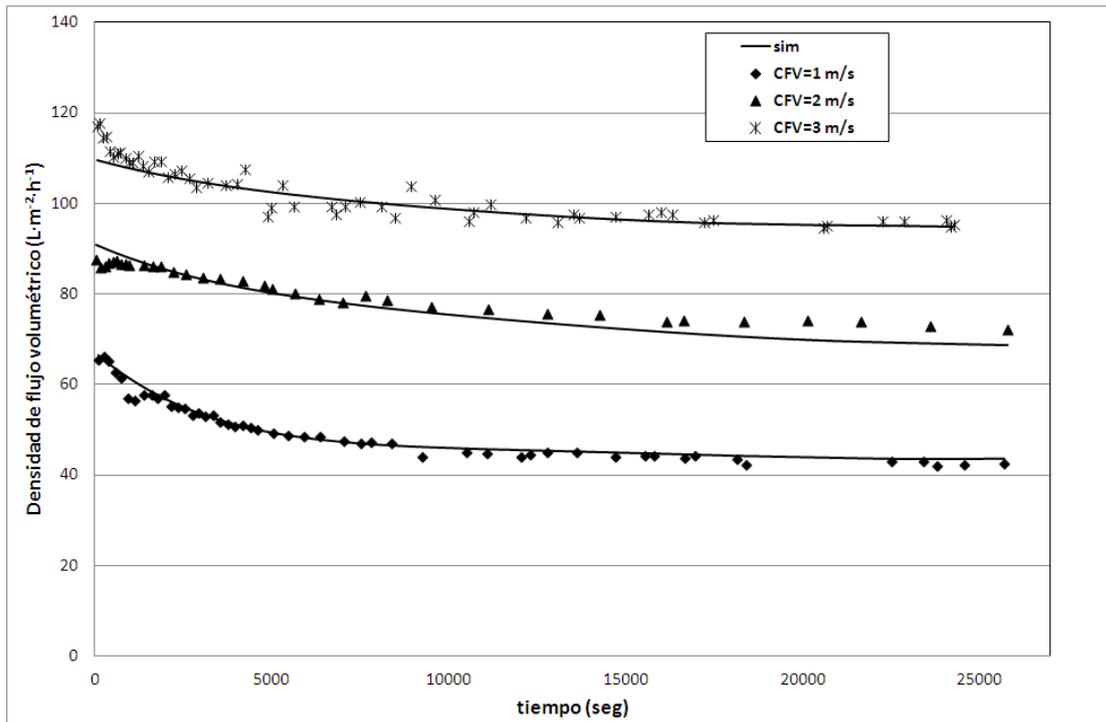


Figura 54: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

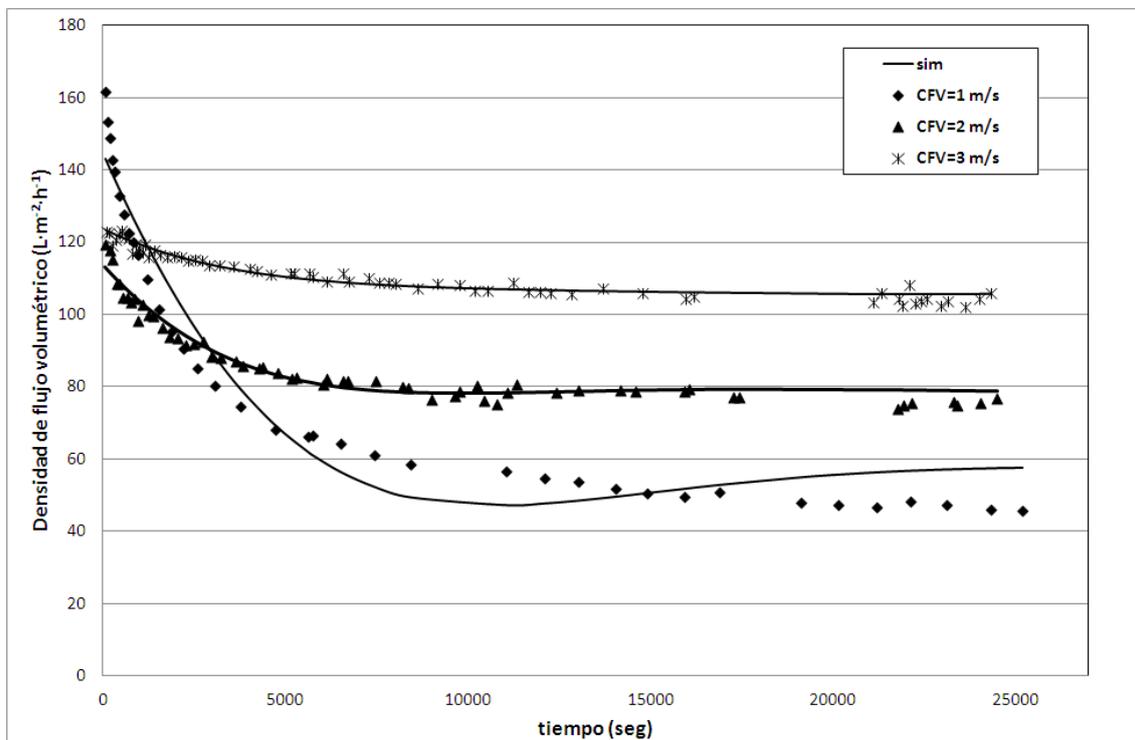


Figura 55: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento de normalización de la densidad de flujo volumétrico, pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP.

A pesar de que la Figura 48 muestra resultados muy precisos, los resultados de las simulaciones muestran ajustes inaceptables, ya que la red neuronal genera evoluciones con desajustes elevados con respecto a los datos experimentales (Figura 49 para TMP 0.1MPa, Figura 52 para CFV 1m/s y 3m/s y en la Figura 53 para CFV 1m/s y 2m/s), evoluciones que no se estabilizan sino que siguen disminuyendo (Figura 50 para TMP=0.3MPa, Figura 51 para TMP=0.2MPa y para la Figura 53 en CFV 3m/s) y evoluciones con aumentos de la densidad de flujo volumétrica cuando debería estabilizarse (Figura 49 para TMP=0.4MPa, Figura 50 para TMP=0.4MPa, Figura 52 para CFV de 1m/s y en la Figura 53 para CFV=1m/s). También hay condiciones bajo las cuales el ajuste es aceptable, pero dado que se ha visto que la red es capaz de obtener ajustes más precisos de las evoluciones de la densidad de flujo volumétrica, esta simulación no se puede considerar aceptable en cuanto ajuste de los datos experimentales.

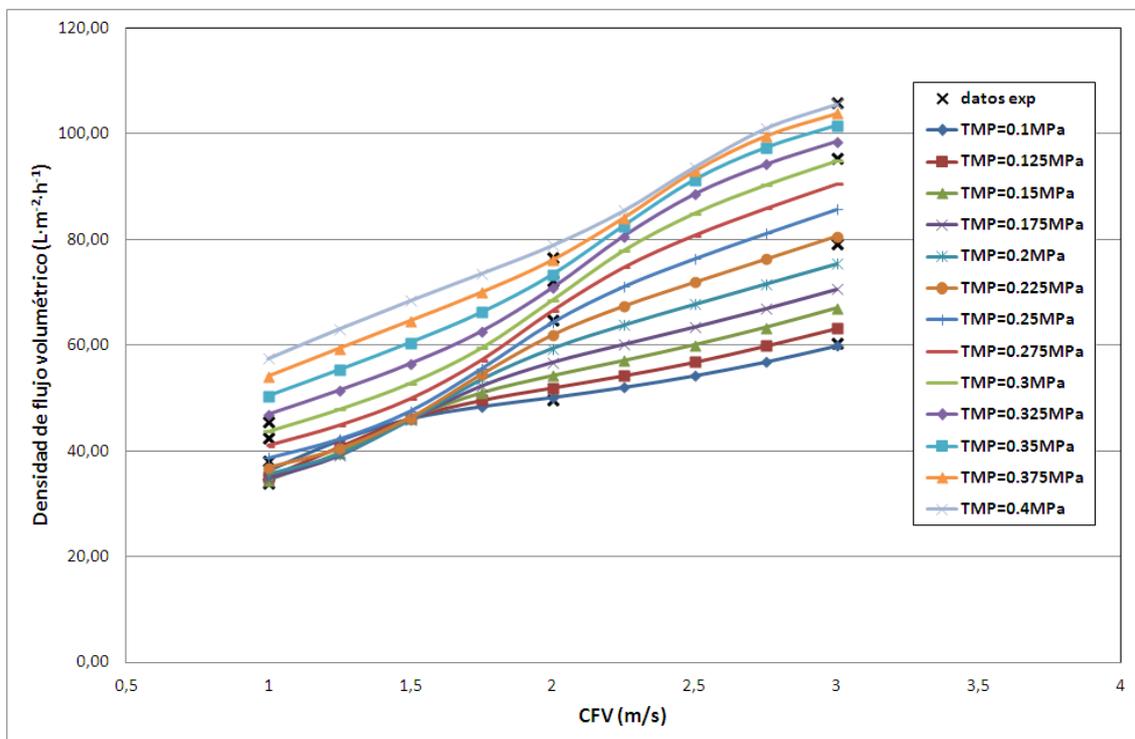


Figura 56: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento 1 pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP. (X datos experimentales)

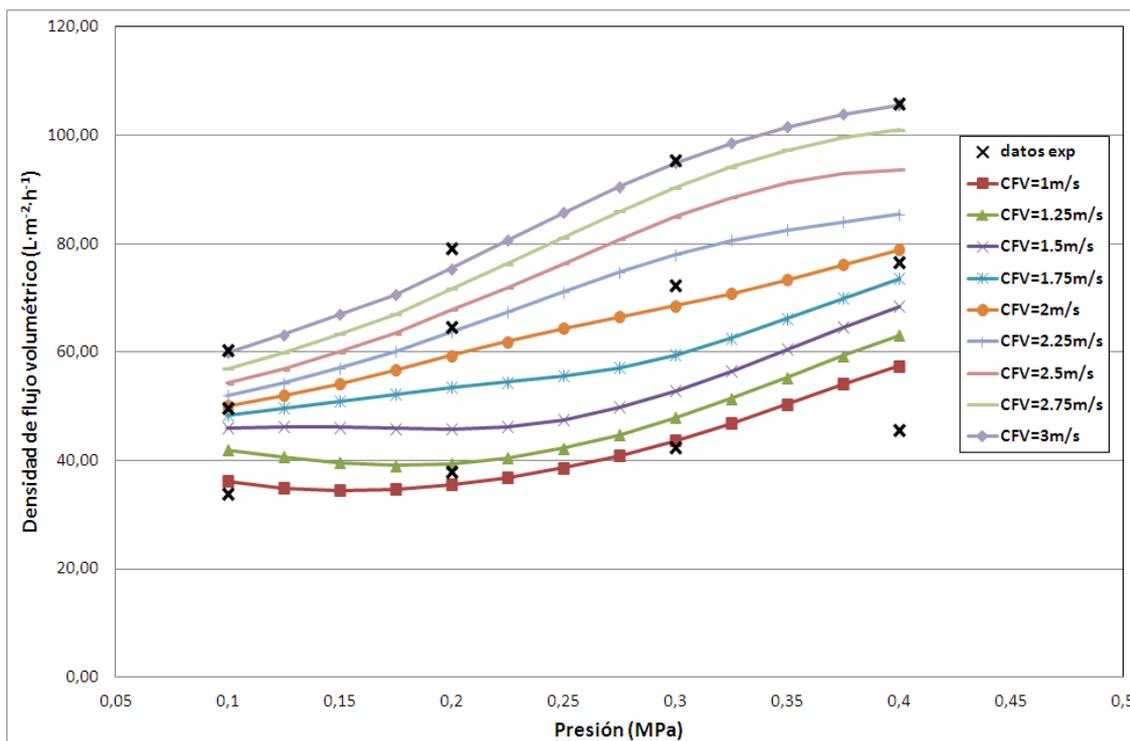


Figura 57: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento 1 pesos iniciales aleatorios y 5 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 5) para los datos de la membrana CARBOSEP. (X datos experimentales)

A pesar de que la Figura 56 y la Figura 57 muestren ajustes muy precisos de las densidades de flujo volumétrico estacionarias, las distribuciones que muestran no son aceptables ya que se ven cambios de tendencia dentro de una misma línea de presión o velocidad y cruces entre líneas de presión.

La Figura 57 muestra un desajuste entre el punto experimental y el punto simulado por la red para presión de 0.4 MPa y velocidad tangencial de 1 m/s. Esta misma figura muestra que, salvo las distribuciones que muestran las líneas CFV de 2.5, 2.75 y 3 m/s, distribuciones de densidades de corriente con cambios de tendencia dentro de la misma distribución de velocidad tangencial.

Analizando los resultados obtenidos en las dos figuras anteriores se observa que no mejoran las distribuciones obtenidas en los resultados estacionarios para los mejores resultados de optimizar la regresión de los datos experimentales. Se observa que la red neuronal es capaz de obtener buenos ajustes de los resultados experimentales, tal y como se ha observado en el apartado 4.1.3 donde se han representado los resultados de la red neuronal que mejor ha ajustado los resultados experimentales para los ensayos desarrollados con la membrana CARBOSEP. También se ha observado que la red neuronal perceptrón multicapa, pese a obtener buenos ajustes de los puntos estacionarios experimentales, no consigue buenas distribuciones de los puntos en

condiciones de ensayo (presión transmembranal y velocidad tangencial) intermedias a las condiciones experimentales.

4.2. Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos de la membrana CARBOSEP

La notación de caracterización de las redes neuronales desarrolladas para base radial en los datos de la membrana CARBOSEP es la siguiente:

- Pret: indica el pretratamiento realizado.
- Spread: indica el valor de difusión de las neuronas dentro de la red (véase 3.2.1).

Antes de introducir que niveles de difusión se van a estudiar, se debe buscar el rango que optimice los parámetros de regresión de los datos experimentales y estacionarios.

Estos ensayos previos de la red se han realizado con los datos sin pretratamiento ya que, a priori, los pretratamientos se han introducido para que la red neuronal pueda ajustar los datos con más facilidad, de manera que en un principio cabe pensar que para estos datos se van a obtener los peores resultados de ajuste de la red neuronal, con lo que los resultados de los coeficientes de regresión para los otros tipos de pretratamiento introducidos se espera que sean mejores que para las redes donde se han introducido los datos sin ningún tipo de pretratamiento.

La Tabla 25 muestra los resultados de la búsqueda del rango óptimo de valores de difusión para las redes neuronales de base radial:

Tabla 25: Búsqueda del rango óptimo del spread para redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos de la membrana CARBOSEP.

Parámetro	Valores						
spread	10	100	500	1000	5000	10000	50000
msne	0.2018	0.20160	30.6267	0.01475	0.012437	0.012466	0.015688
R ²	0.6408	0.6363	0.1591	0.9587	0.9643	0.9642	0.9548
R ² est	-9.2072	-8.2007	-46.748	-2.0075	0.9170	0.9257	0.9342

La Figura 58 muestra los resultados de la Tabla 25, donde los valores en negrita indican valores anómalos para estos parámetros. Para el coeficiente de regresión de los datos estacionarios se va cambiar por 0 (que para este parámetro indica que no existe relación de ningún tipo entre las variables densidad de flujo volumétrica experimental y simulada por la red).

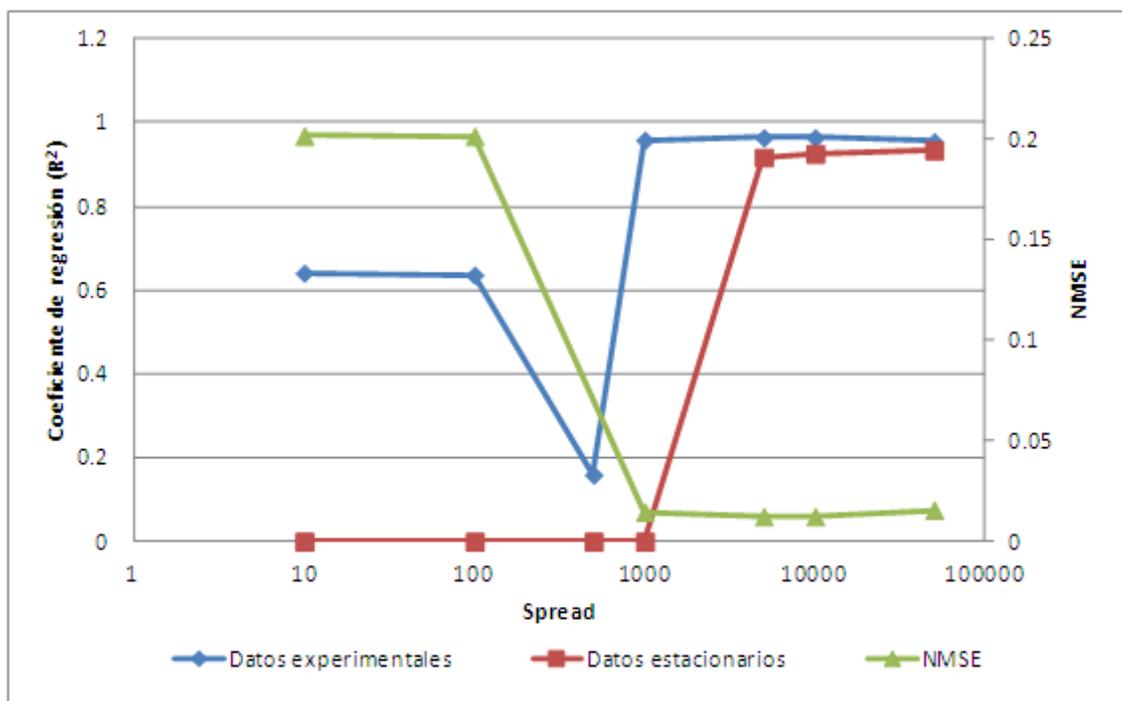


Figura 58: Búsqueda del rango óptimo del spread para redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos de la membrana CARBOSEP.

Se observa que el rango de difusión que optimiza estas variables está por encima de 1000. En el apartado 3.2.1, al hablar de cómo afecta el valor de la difusión al funcionamiento de la red, se ha explicado que no es conveniente que tome valores demasiado elevados, no obstante, los resultados hacen que sea necesarios llegar hasta estos valores para obtener valores aceptables de los coeficientes de regresión empleados.

La Tabla 26 muestra la notación que se va a emplear en la aplicación de ANN de base radial en los datos experimentales de la membrana CARBOSEP.

Tabla 26: Notación de los factores de la red neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
	2	Modelo del ensuciamiento dinámico del sistema
	3	Pretratamiento doble
Spread	15000	-
	20000	-
	25000	-
	30000	-
	35000	-
	40000	-

4.2.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales

Como para las redes neuronales de base radial generan los mismos resultados para las mismas condiciones de inputs, targets y spread, el análisis de la varianza que se puede realizar para los resultados de los parámetros de regresión de este tipo de red neuronal y no es necesario estudiar la interacción entre sus factores.

El resumen del análisis de la varianza realizado se observa en la siguiente tabla:

Tabla 27: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de los resultados de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	0.002886070	3	0.000962022	75.77	0.0000
B:Spread	0.005744040	5	0.001148810	90.48	0.0000
RESIDUAL	0.000190459	15	0.000012697		
TOTAL (CORRECTED)	0.008820570	23			

Se observa que ambos factores tienen efecto estadísticamente significativo sobre la variable respuesta: $[-\log_{10}(1- R^2)]$, asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 59 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento del análisis de la varianza realizado.

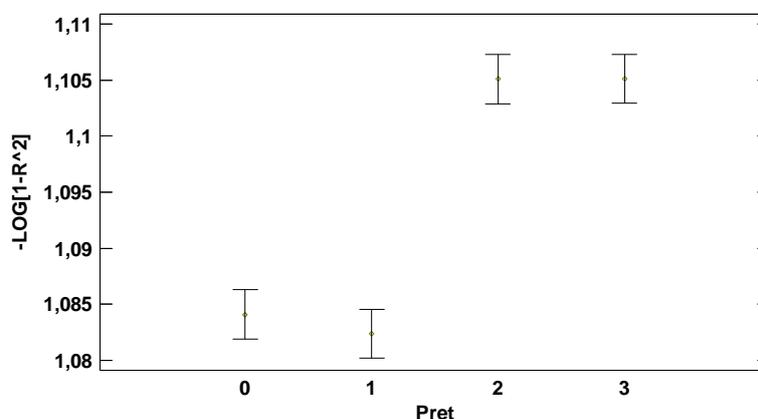


Figura 59: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

La Figura 60 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor spread del análisis de la varianza realizado.

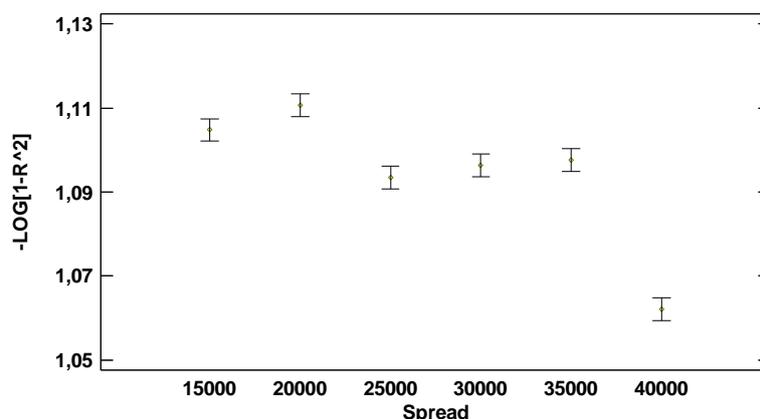


Figura 60: Efecto del valor de spread sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

La Figura 59 muestra el pretratamiento 1 no mejoran la regresión de los datos experimentales en la membrana CARBOSEP empleando la red neuronal e indica que los pretratamientos 2 y 3 presentan los mejores resultados de regresión de los datos experimentales y que apenas hay variación entre ellos.

La Figura 60 muestra que aumentar el valor del spread hasta 40000 disminuye notablemente el coeficiente de regresión de los datos. Se observa que los valores más pequeños de este rango son los que tienen valores sensiblemente más elevados de coeficientes de regresión.

Se observa que en ninguna de las dos figuras se ha llegado al valor de 2, que invirtiendo la ecuación 40 da un valor del coeficiente de regresión de 0.99.

4.2.2. Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales

El resumen del ANOVA para el error cuadrático medio normalizado de las redes neuronales de base radial de los datos experimentales de la membrana CARBOSEP se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 28: Análisis de la varianza para NMSE (o msne) de los resultados de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	0.00000429987	3	0.00000143329	92.83	0.0000
B:Spread	0.00000825022	5	0.00000165004	106.87	0.0000
RESIDUAL	2.31595E-7	15	1.54397E-8		
TOTAL (CORRECTED)	0.0000127817	23			

Se observa, que tal y como se ha obtenido en el ANOVA de $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, ambos parámetros tienen un efecto estadísticamente significativo sobre la variable respuesta: NMSE (o, en nomenclatura del Matlab, msne), asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 61 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

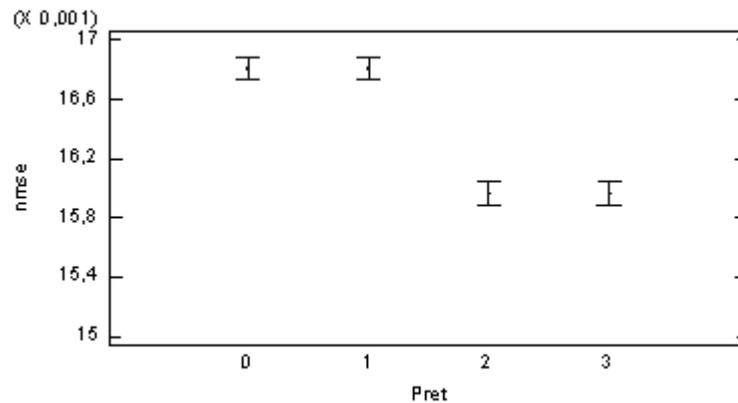


Figura 61 Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

La Figura 62 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

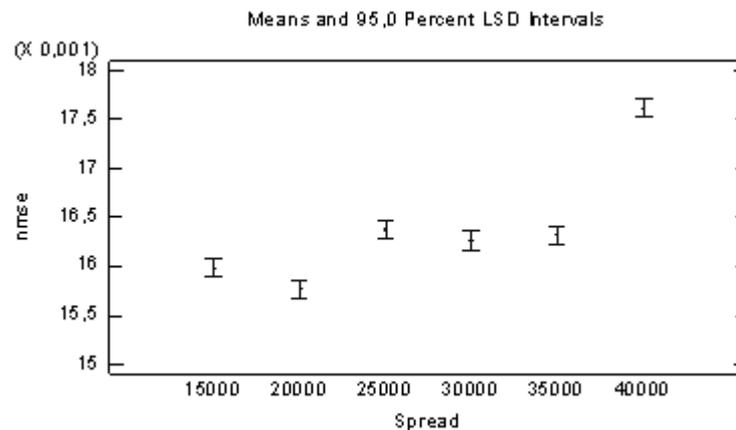


Figura 62 Efecto del valor del spread sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

Se observa que los resultados que muestran estas dos figuras son análogos a los ya vistos en las figuras 59 y 60 para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, de manera que no aportan nueva información sobre el ajuste de las redes neuronales a los datos experimentales.

4.2.3. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2)]$: de la Figura 59, la Figura 60 y la Tabla 27 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

Pret: 2 ó 3 – Spread 20000

En el estudio del análisis de la varianza de NMSE: de la Figura 61, la Figura 62 y la Tabla 28 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

Pret: 2 ó 3 – Spread 20000

De manera que se van a mostrar los datos para Pret 2 y 3 con spread 20000. Los ensayos realizados con estos parámetros dieron los siguientes resultados:

Tabla 29: Resultados de los parámetros de caracterización para Pret=2 y 3 – Spread 20000 para las redes neuronales de base radial en los datos de la membrana CARBOSEP.

Pret	Spread	NMSE	R^2	R^2_{est}
2	20000	0.015398	0.9243	0.8181
3	20000	0.015397	0.9243	0.8182

Se observa que ambos métodos generan resultados prácticamente idénticos, sin embargo se va a escoger el pretratamiento doble (Pret=3) con spread de 20000 ya que presenta un valor del error cuadrático medio normalizado sensiblemente inferior y un coeficiente de regresión para los datos estacionarios sensiblemente superior que los respectivos para el pretratamiento 2.

Los resultados de la simulación de la red neuronal se muestran en las figuras de la 63 a la 72.

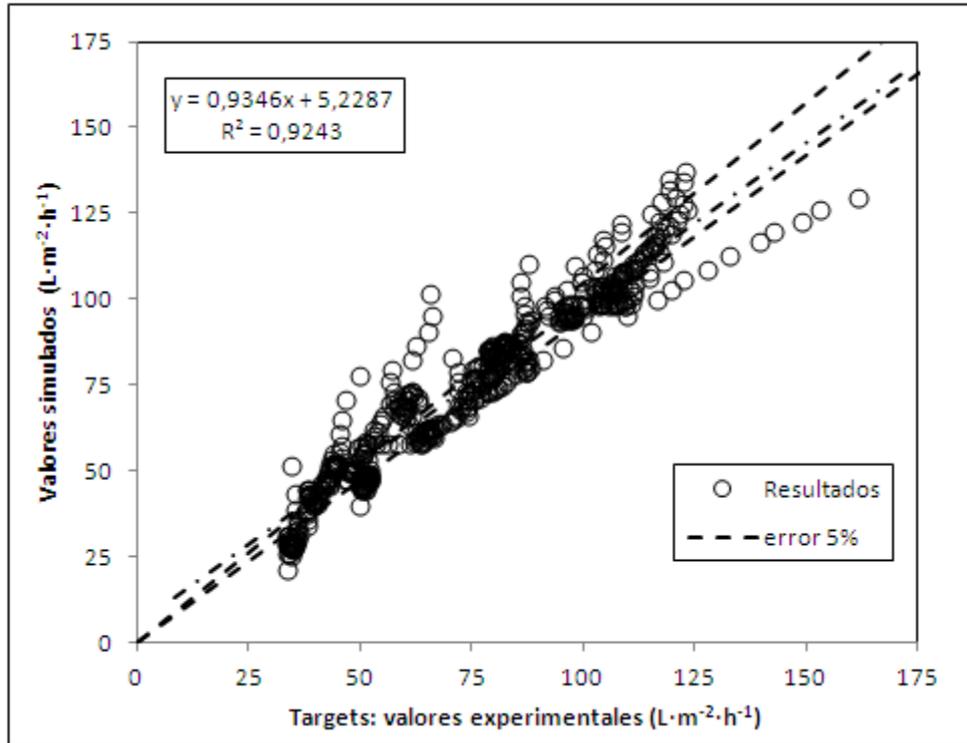


Figura 63: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

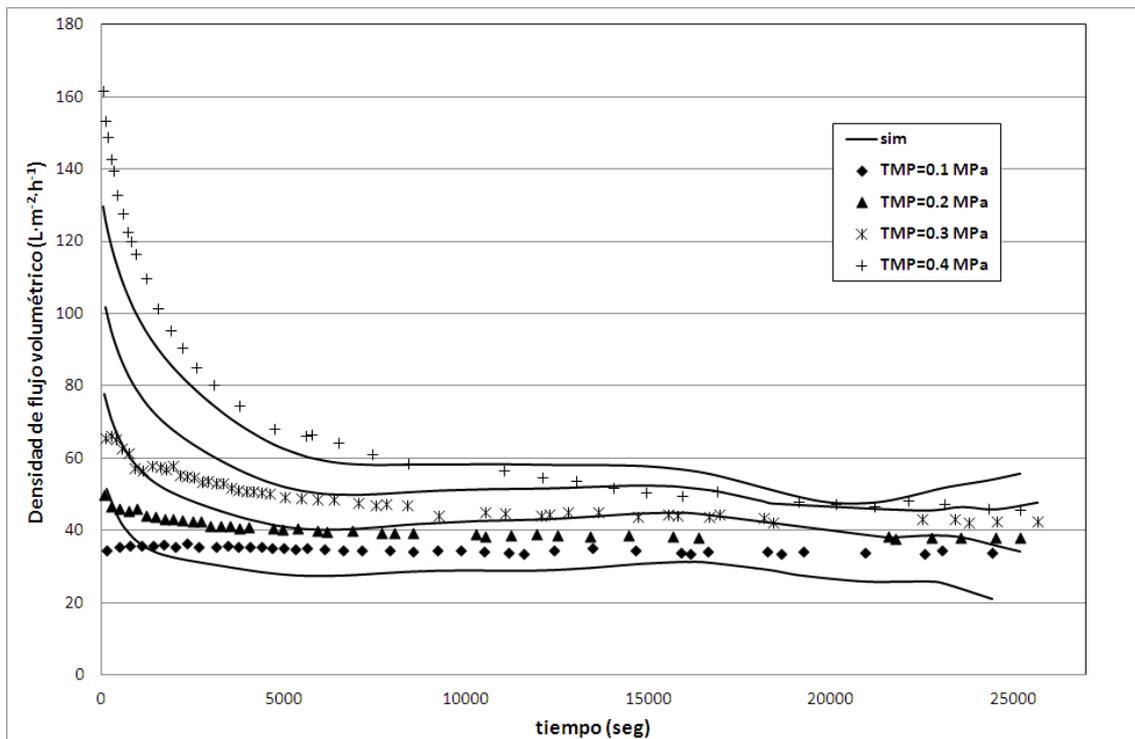


Figura 64: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

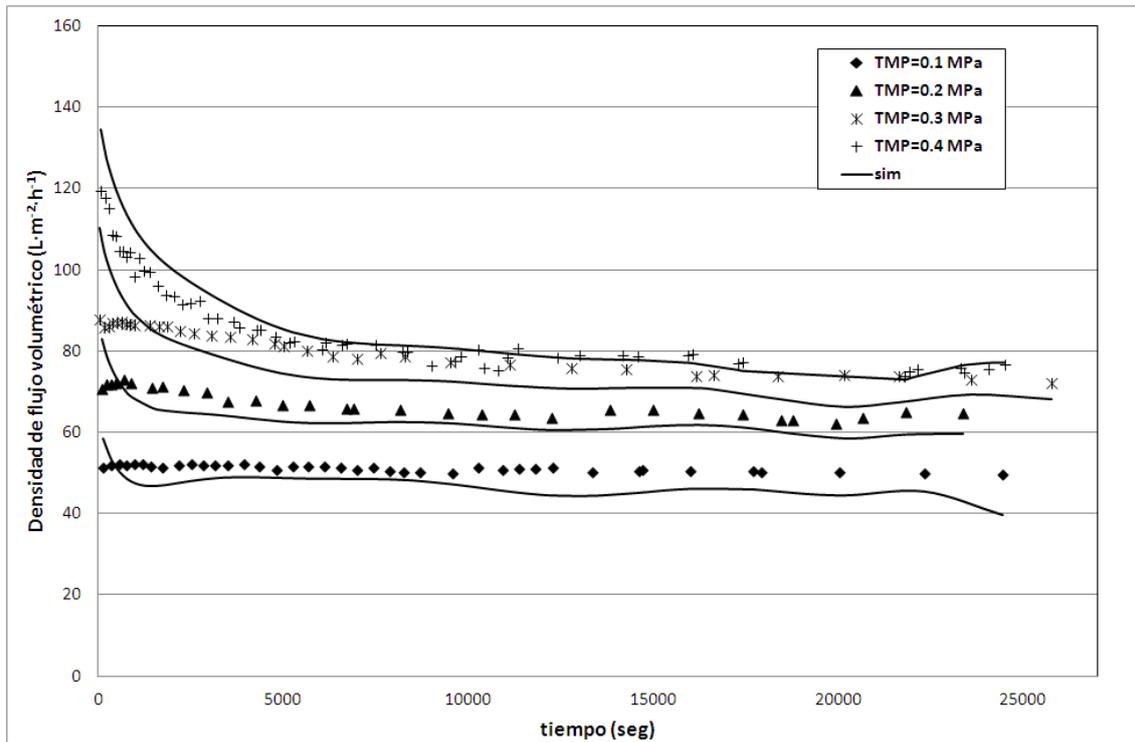


Figura 65: Resultados de la simulación de la red para CFV=2m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

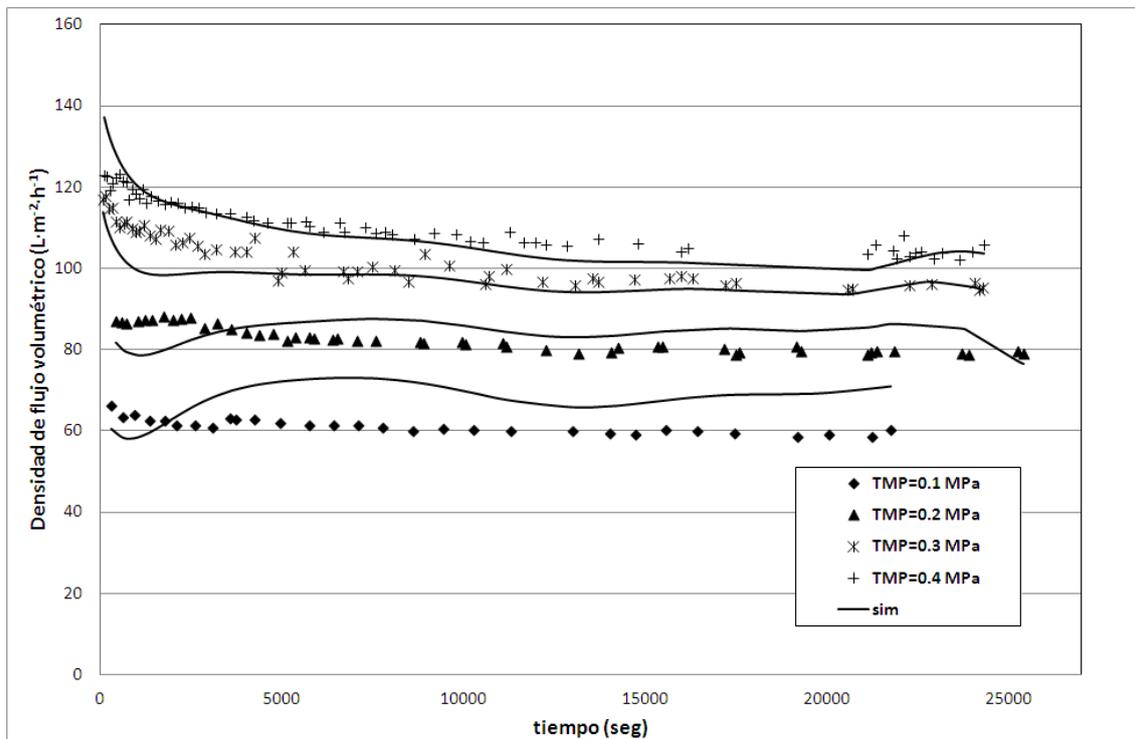


Figura 66: Resultados de la simulación de la red para CFV=3m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

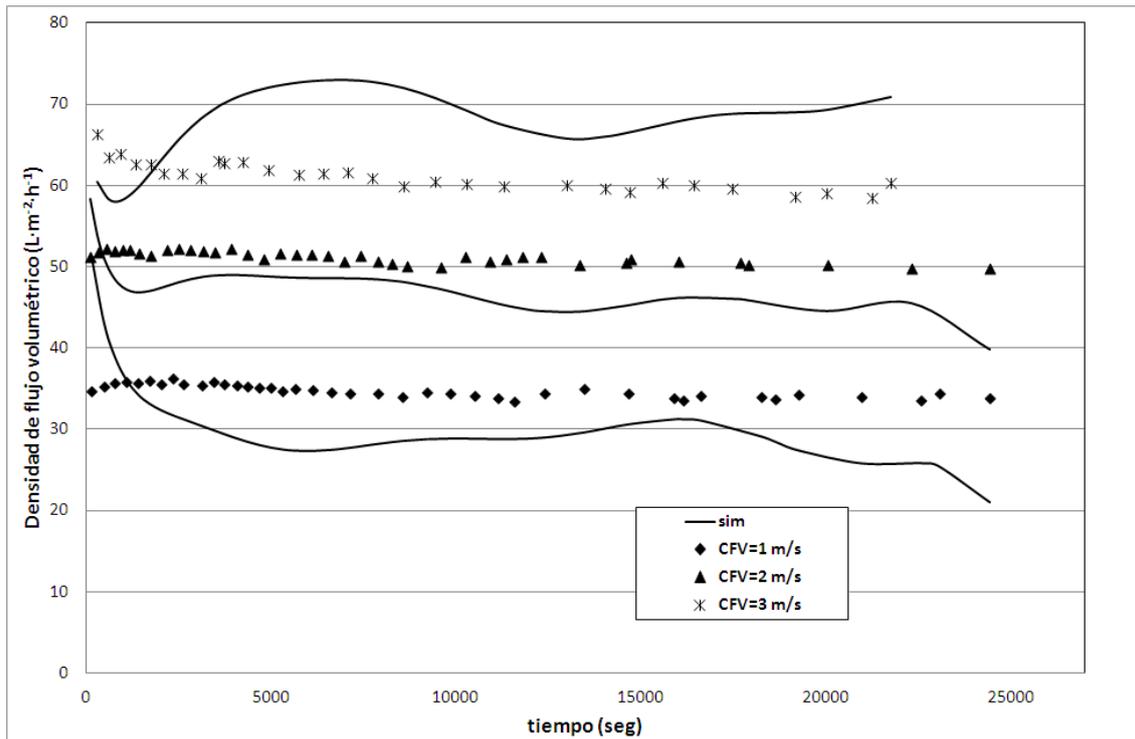


Figura 67: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.1MPa$. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

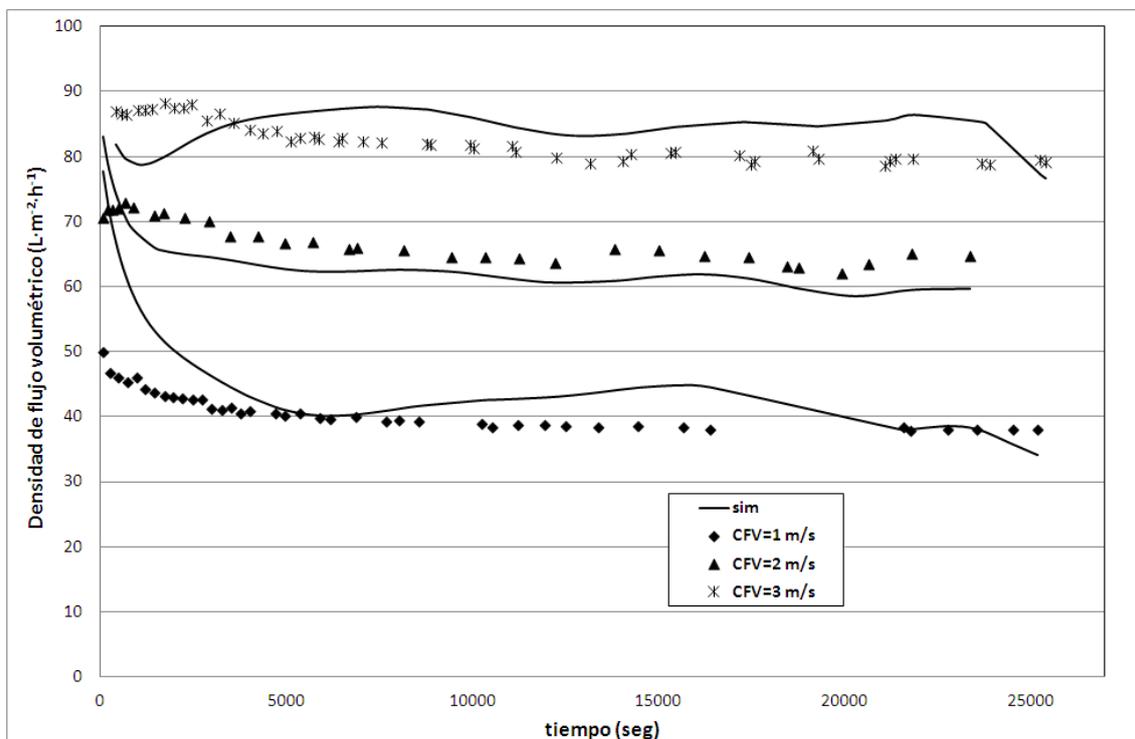


Figura 68: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.2MPa$. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

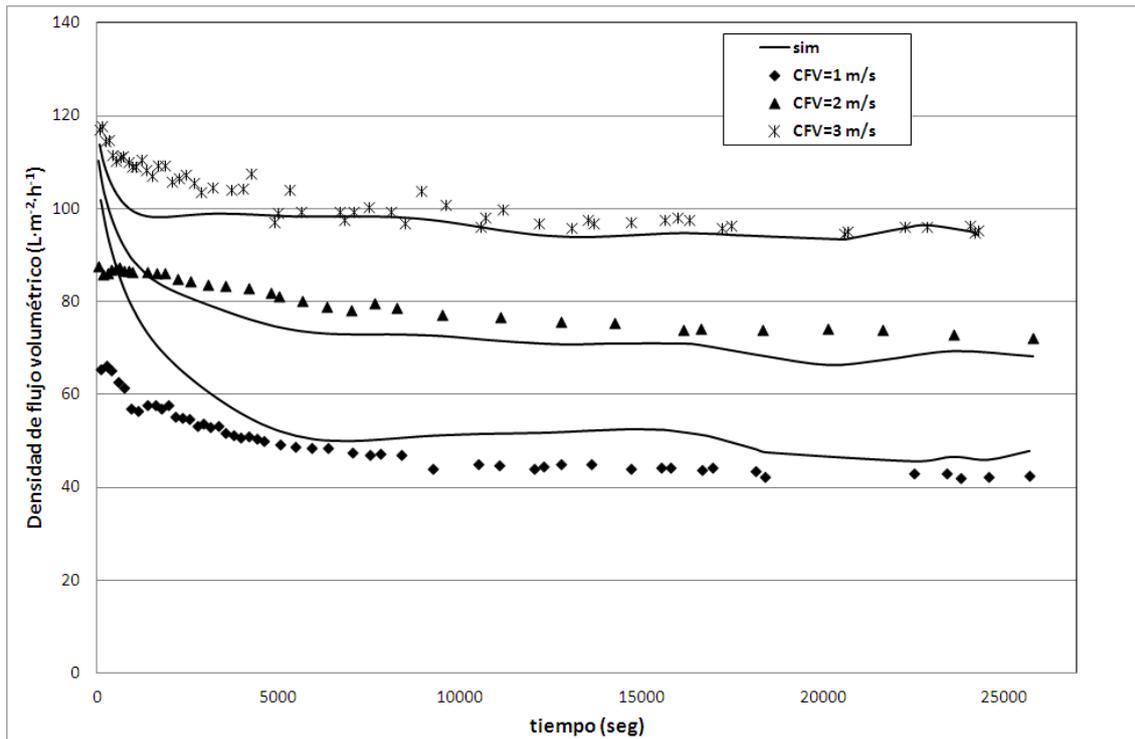


Figura 69: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3MPa. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

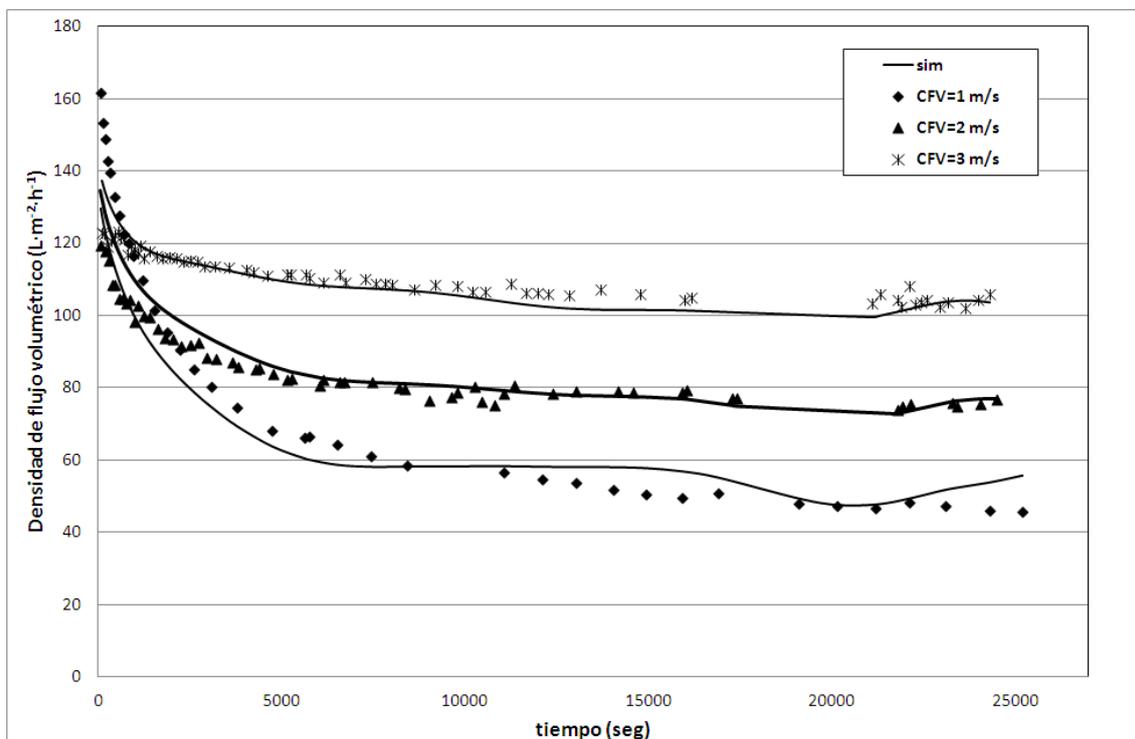


Figura 70: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3MPa. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

Los resultados obtenidos en las figuras anteriores muestran ajustes inaceptables tanto con respecto de los datos experimentales como de la tendencia que estos presentan. El hecho de que hay ensayos, en incluso puntos dentro de un ensayo donde la simulación de la red presente valores cercanos al experimental hace suponer que se trata de puntos empleados en la fase de entrenamiento de la red, de manera que se puede suponer que los ensayos con buenos ajustes de los datos (que no de la tendencia que los datos muestran) son ensayos con un elevado de puntos introducidos en el entrenamiento de la red neuronal.

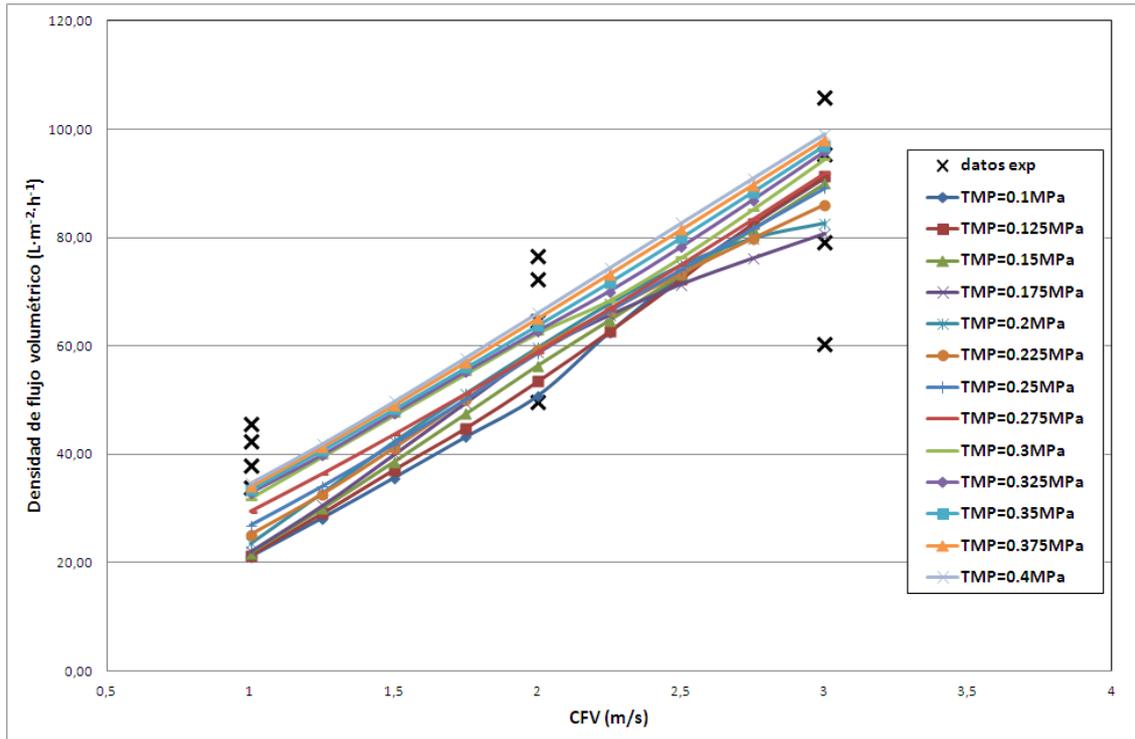


Figura 71: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

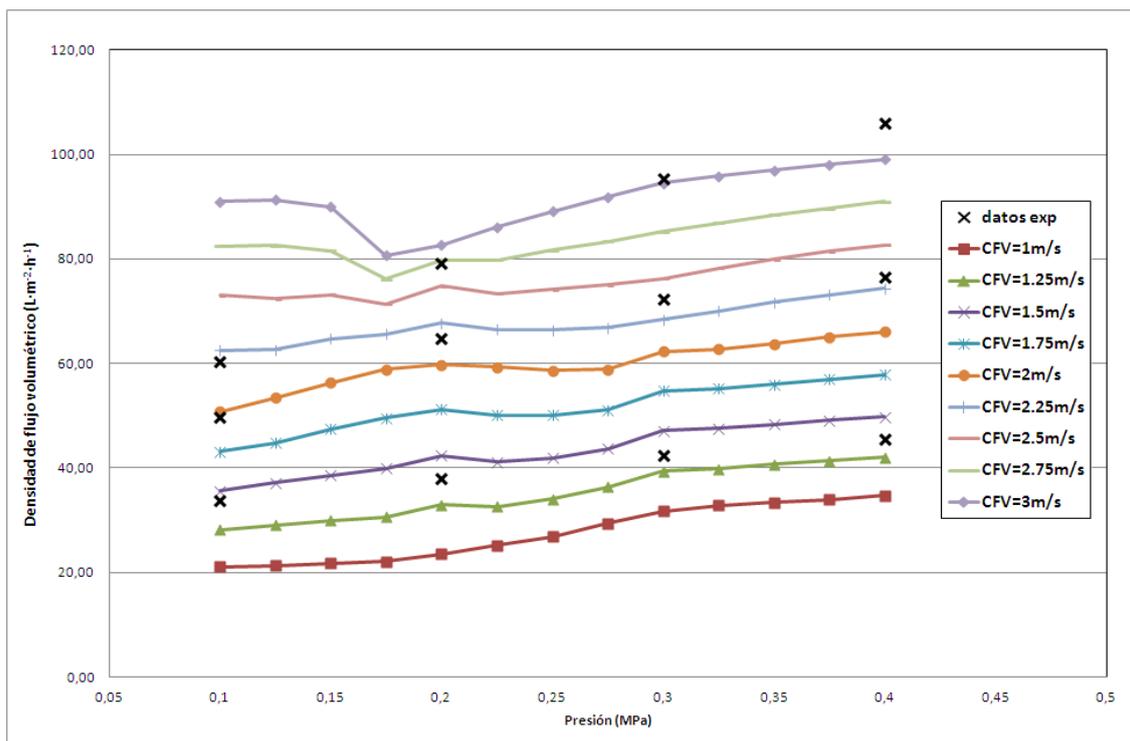


Figura 72: Efecto de la presión transmembranal para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 20000 (Pret 3 – Spread 20000) para los datos de la membrana CARBOSEP.

Los resultados de los resultados estacionarios obtenidos por la red neuronal no describen el funcionamiento del sistema estacionario para velocidades tangenciales y presiones transmembranales dentro del rango de las condiciones ensayadas por (Vincent Vela, 2006). El ajuste a los datos experimentales estacionarios que ofrece la red neuronal es muy deficiente, tal y como se observa en las Figura 71 y Figura 72.

Observando los resultados obtenidos y viendo los que se han obtenido para la red neuronal perceptrón multicapa hacen suponer que los datos experimentales presentan una característica que provoca que las redes neuronales de base radial no sean capaces de obtener buenos ajustes.

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos, tanto en las pruebas previas como en las pruebas realizadas, para el ajuste de los datos mediante redes neuronales de base radial se puede suponer que esta característica que hace que los datos no puedan ser modelados mediante redes neuronales de base radial es el ruido que los datos presentan.

Para confirmarlo se van a presentar los resultados obtenidos para valores de spread bajos. La prueba se realizó para datos con pretratamiento doble y spread de 1. También se introdujeron el total de los datos en la fase de entrenamiento con la intención de ver como ajustaba la red neuronal de base radial la totalidad de los datos. Estos resultados se muestran en las figuras de la 73 a la 79.

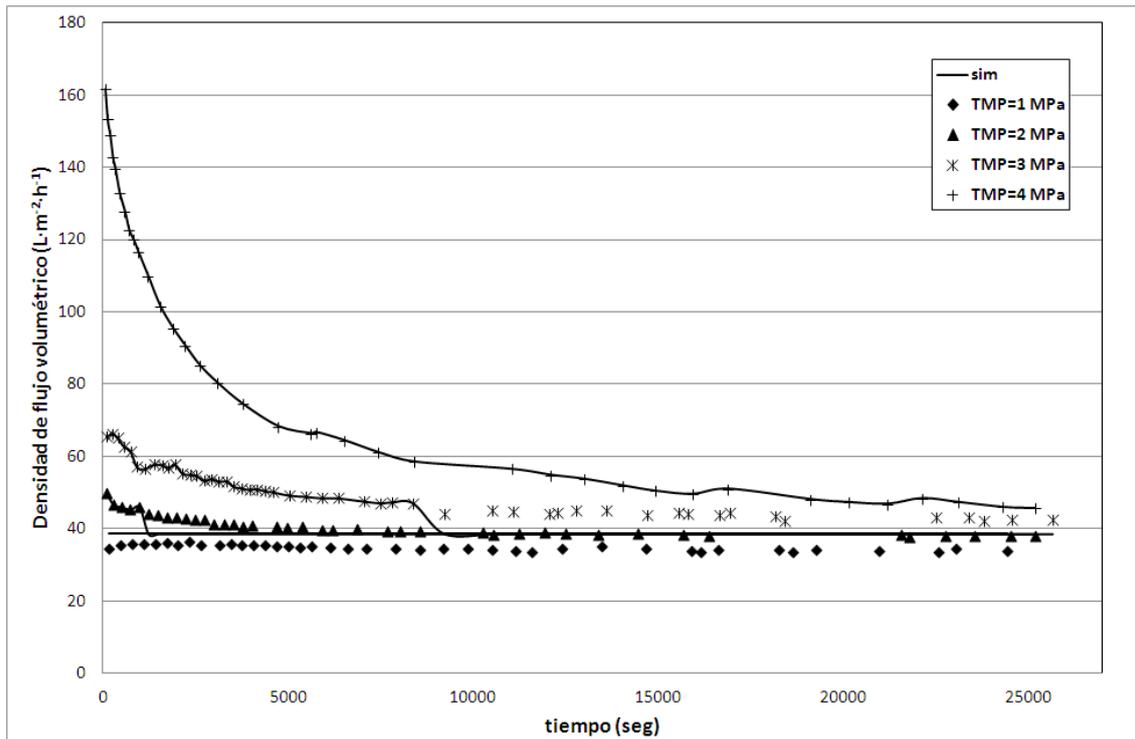


Figura 73: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

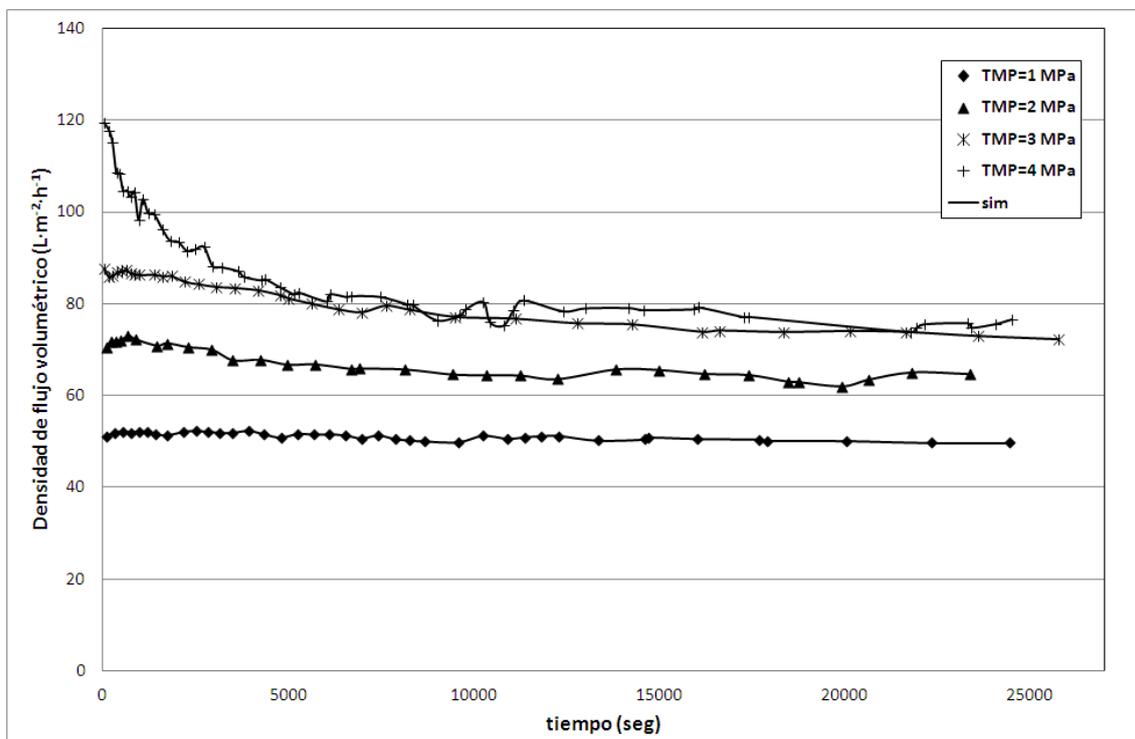


Figura 74: Resultados de la simulación de la red para CFV=2m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

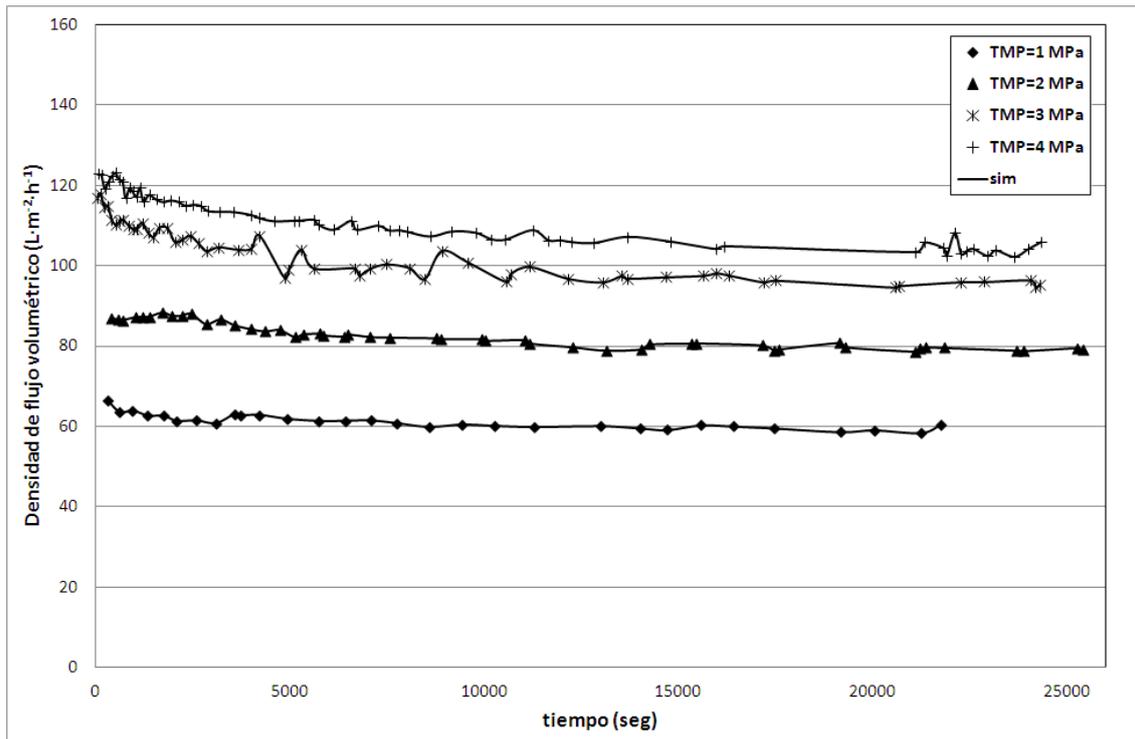


Figura 75: Resultados de la simulación de la red para CFV=3m/s. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

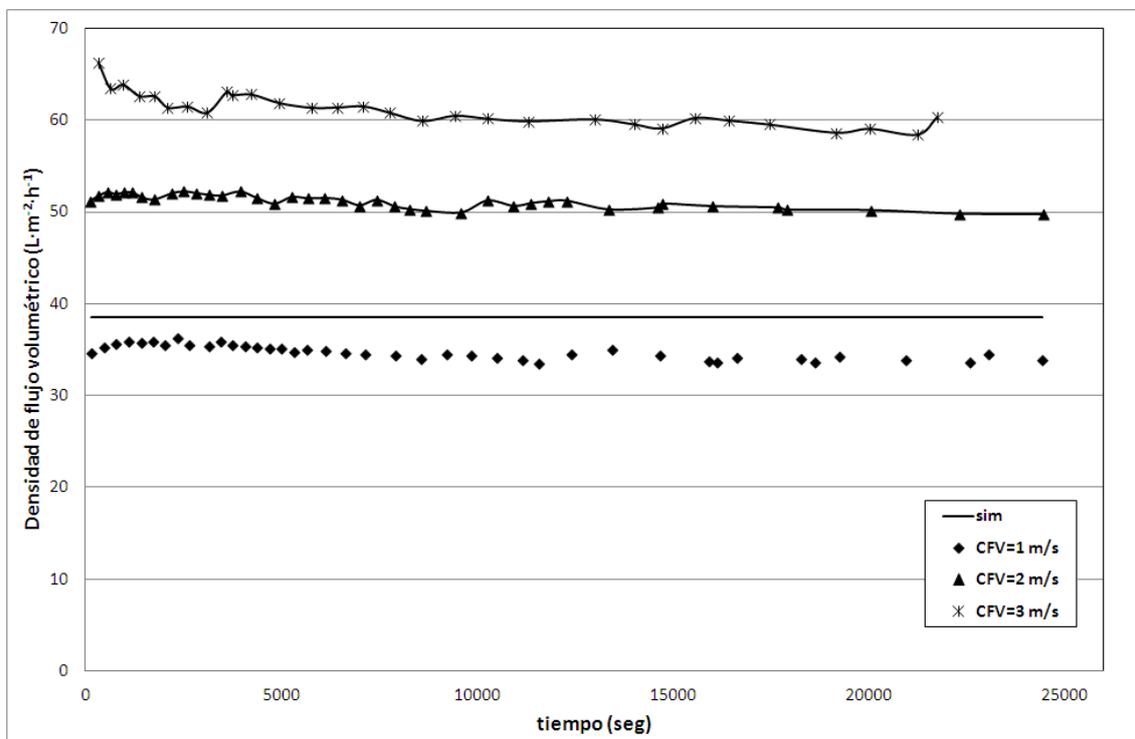


Figura 76: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.1MPa. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

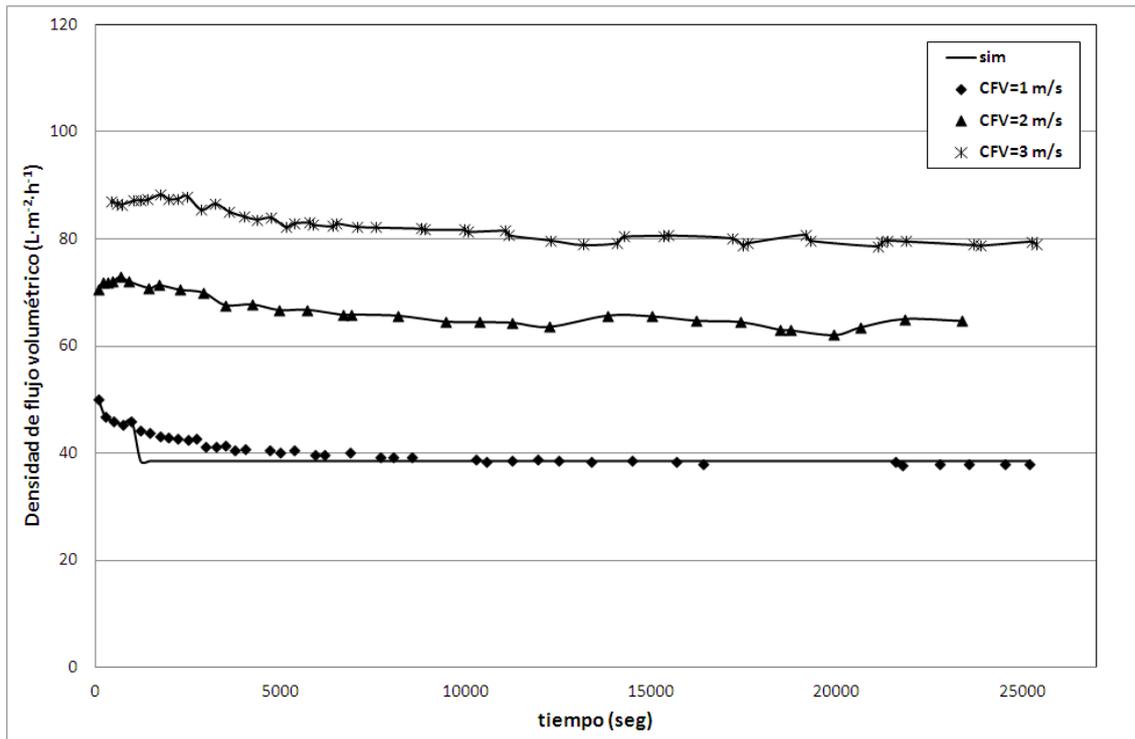


Figura 77: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.2MPa$. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

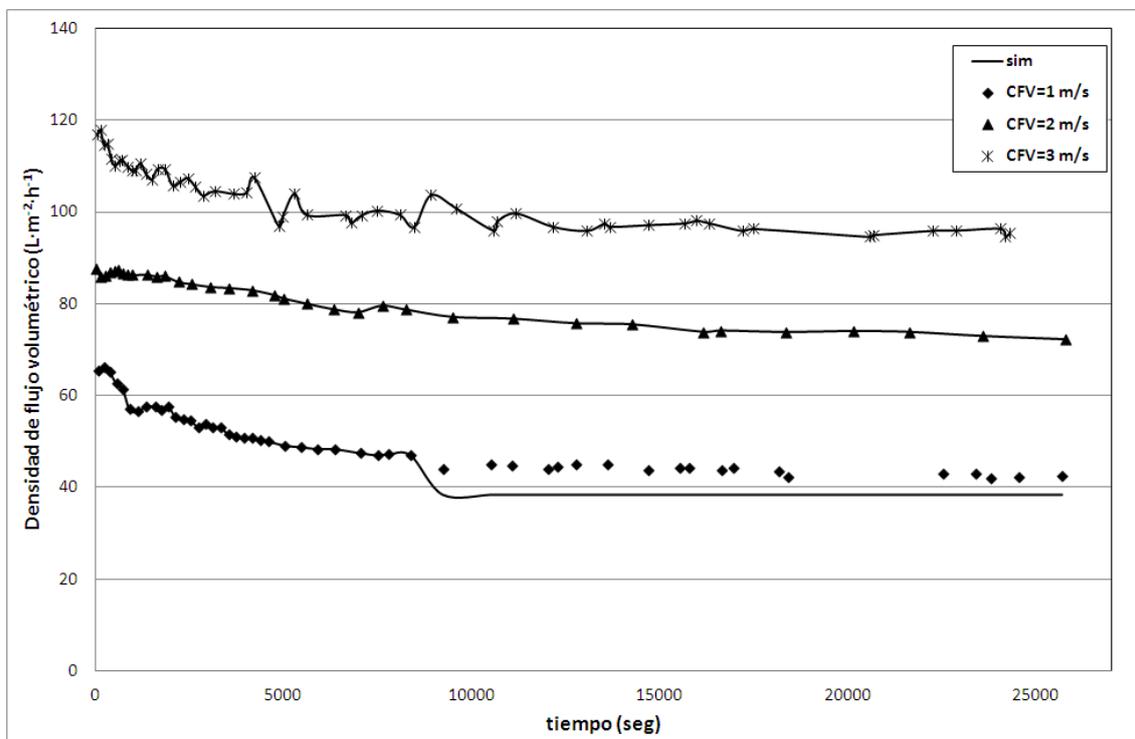


Figura 78: Resultados de la simulación de la red para $TMP=0.3MPa$. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

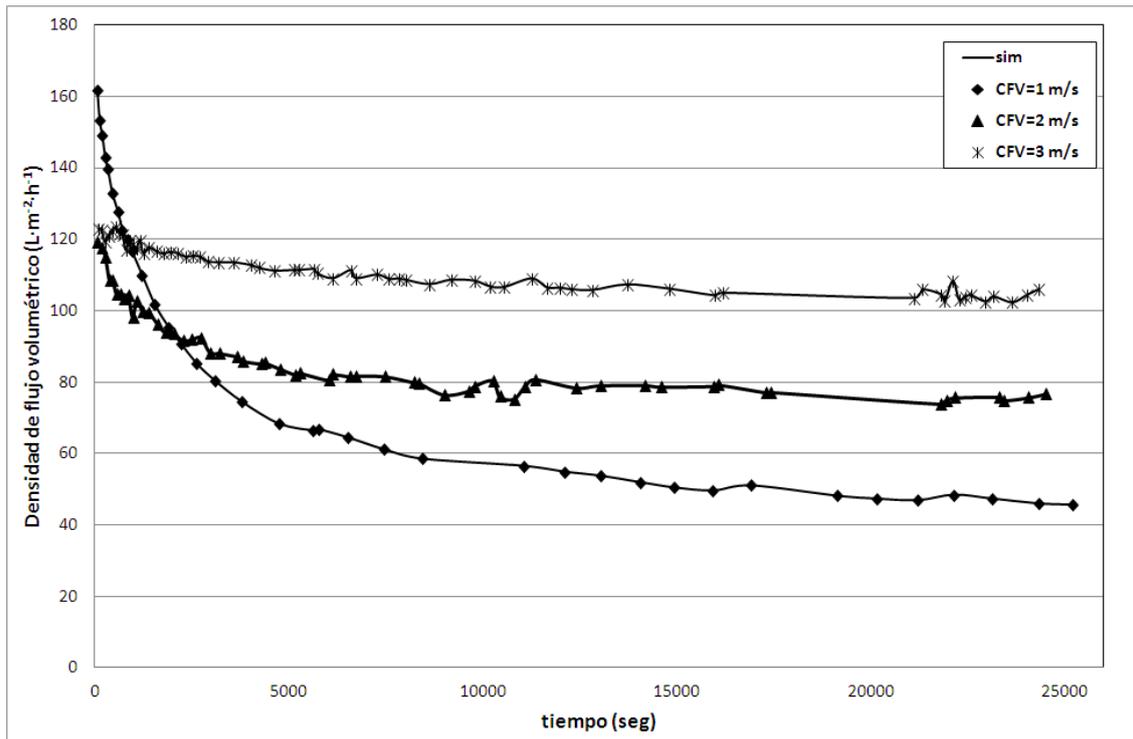


Figura 79: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4MPa. Red neuronal de base radial con pretratamiento doble y spread 1 y con el 100% de los datos introducidos en la fase de entrenamiento para los datos de la membrana CARBOSEP.

Los resultados de las figuras anteriores confirman que este tipo de red intenta ajustar los puntos objetivo (targets) sin tener en cuenta la tendencia real que estos datos presentan. Esto va a generar que si los datos presentan un ruido como el que presentan los datos experimentales que los datos de la membrana CARBOSEP presentan, y cambiando la cantidad de puntos para la fase de entrenamiento a cantidades menores (en este estudio el 50%) la red neuronal ajusta la variabilidad total de los datos entrenados, es decir, la variabilidad debida a la tendencia de los datos con respecto a los inputs (tiempo, presión y velocidad tangencial) y la variabilidad debida al ruido que presentan los datos entrenados. De manera que, cuando se pide a la red neuronal que estime un valor para condiciones de entrada no entrenadas, la variable de salida está distorsionada por el desajuste que el ruido haya podido causar en el entrenamiento de la red neuronal generando los desajustes mostrados en las figuras de la 64 a la 72.

En este caso no se van a mostrar los resultados estacionarios ya que se está analizando los resultados que genera la red neuronal para las condiciones experimentales.

4.3. Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos de la membrana TAMI

Antes de realizar los análisis de la varianza para los parámetros de caracterización, se va a introducir la notación de caracterización de las redes neuronales desarrolladas para perceptrón multicapa en los datos de la membrana TAMI.

- Pret: indica el pretratamiento realizado.
- Pesos: indica la inicialización de los pesos de la red.
- Neur: indica el número de neuronas de la capa intermedia.

La notación se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 30: Notación de los factores de la red neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
Pesos	0	Pesos iniciales nulos
	1	Pesos iniciales aleatorios
Neur	5-6-7-8-9-10	-

4.3.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales

Tal y como se ha explicado en el apartado Coeficiente de regresión (R^2), para evitar incoherencias con los intervalos se va a analizar el $[-\log_{10}(1- R^2)]$. Los resultados del análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 31: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana TAMI.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	0.0400185	1	0.0400185	0.33	0.5702
B:Pesos	2.4436100	1	2.4436100	19.95	0.0000
C:Neur	3.2803300	5	0.6560650	5.36	0.0005
INTERACTIONS					
AB	0.00664575	1	0.0066457	0.05	0.8168
AC	0.62949300	5	0.1258990	1.03	0.4119
BC	0.61915100	5	0.1238300	1.01	0.4215
ABC	0.59822100	5	0.1196440	0.98	0.4415
RESIDUAL	5.8783400	48	0.1224660		
TOTAL (CORRECTED)	13.495800	71			

Se observa que solo la inicialización de los pesos de la red y el número de capas intermedias presentan un efecto estadísticamente significativo sobre la variable respuesta: $[-\log_{10}(1-R^2)]$, asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 80 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

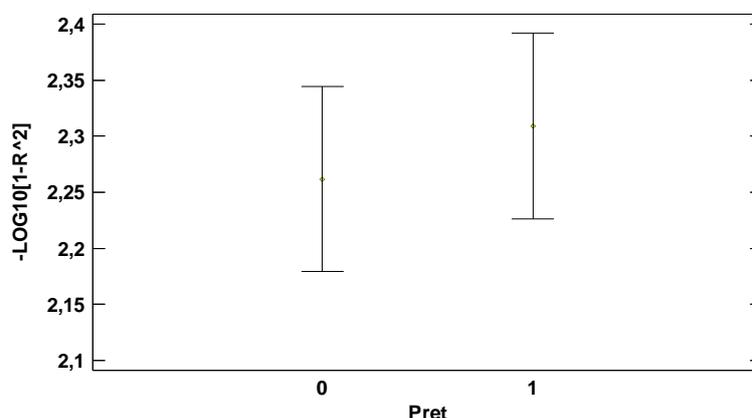


Figura 80: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

La Figura 81 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

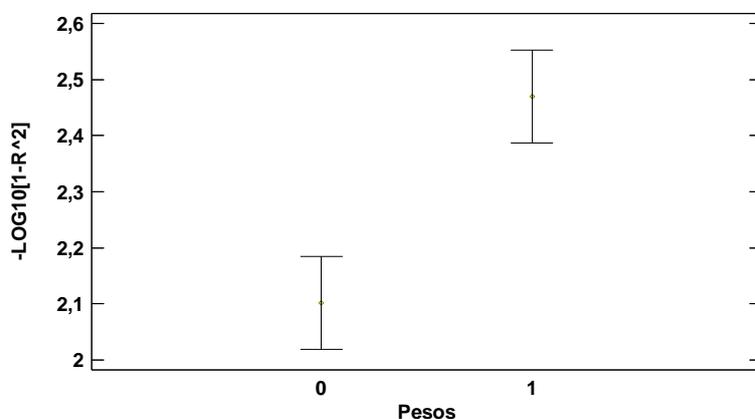


Figura 81: Efecto de la inicialización de los pesos de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

La Figura 82 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

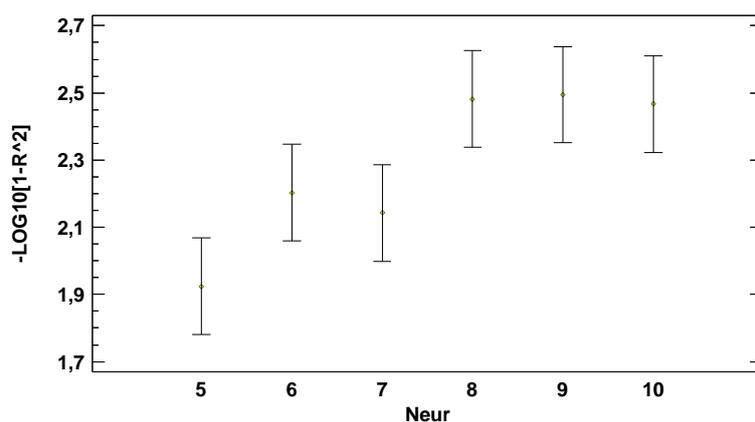


Figura 82: Efecto del número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

La Figura 80 muestra que el pretratamiento no mejora la regresión de los datos experimentales en la membrana TAMI empleando la red neuronal perceptrón multicapa. Los resultados de los intervalos LSD que ofrece el pretratamiento 1 son ligeramente superiores a los del pretratamiento 0, no obstante, los resultados no son suficientes para poder afirmar que el pretratamiento 1 ofrece mejores resultados que los que ofrece el pretratamiento 0.

La Figura 81 muestra que inicializar los pesos con valores aleatorios genera coeficientes de regresión más elevados.

La Figura 82 muestra que entre el rango del número de neuronas para la capa intermedia de la red, el coeficiente de regresión alcanza valores mayores para valores elevados dentro de dicho rango (8-10). Este resultado es mismo que el observado en la Figura 33, de manera que la interpretación que se le ha dado a esta figura (véase el apartado 4.1.1) también es válido para esta figura.

Atendiendo a que las interacciones no tienen efectos significativos sobre la variable respuesta no se van a introducir las representaciones de la visualización de los efectos de las interacciones.

Se observa que estos resultados son similares a los que se obtienen para los resultados de aplicar ANN perceptrón multicapa para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, donde el pretratamiento 0 y 1 no tienen diferencias significativas, los pesos iniciales aleatorios muestran mejores resultados que los nulos y números de neuronas elevados (8-10) para la capa intermedia ofrece mejores resultados que pocas neuronas para la capa intermedia.

4.3.2. Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales

La Tabla 32 muestra el resumen del análisis de la varianza del error cuadrático medio normalizado.

Tabla 32: Análisis de la varianza del NMSE de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana TAMI.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	0.0000025739	1	0.0000025739	0.11	0.7443
B:Pesos	0.0001973120	1	0.0001973120	8.25	0.0061
C:Neur	0.0002172490	5	0.0000434498	1.82	0.1275
INTERACTIONS					
AB	0.0000020992	1	0.0000020992	0.09	0.7683
AC	0.0000453493	5	0.0000090699	0.38	0.8606
BC	0.0001634160	5	0.0000326833	1.37	0.2537
ABC	0.0000452184	5	0.0000090437	0.38	0.8613
RESIDUAL	0.0011483600	48	0.0000239241		
TOTAL (CORRECTED)	0.0018215800	71			

Se observa que solo la inicialización de los pesos de la red presentan un efecto estadísticamente significativo sobre la variable respuesta: el error cuadrático medio normalizado (NMSE o msne), asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 83 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamientos del análisis de la varianza realizado.

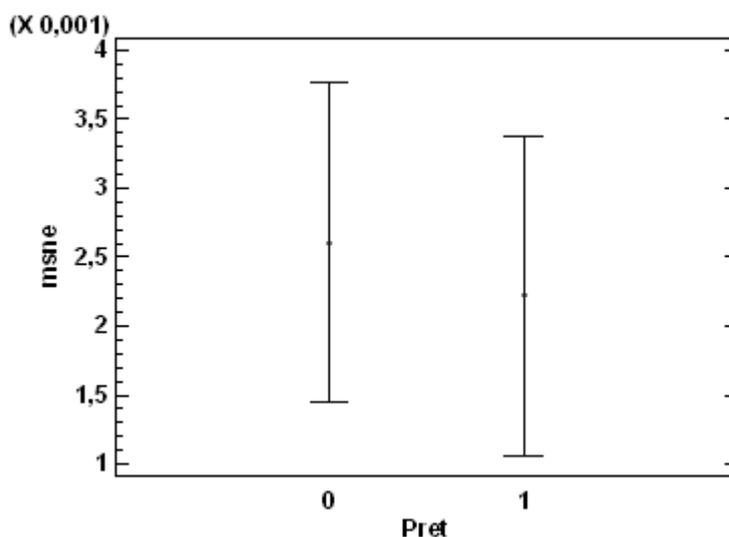


Figura 83: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

La Figura 84 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

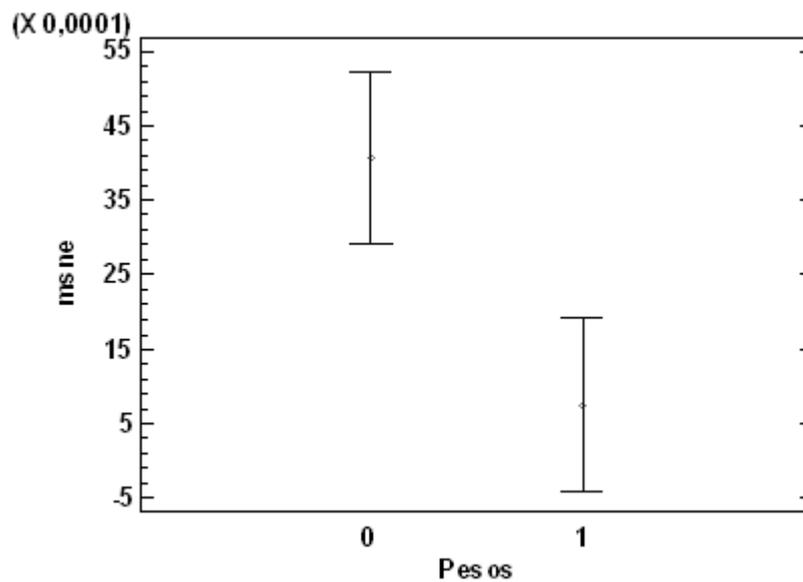


Figura 84: Efecto de la inicialización de los pesos de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

La Figura 85 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal del análisis de la varianza realizado.

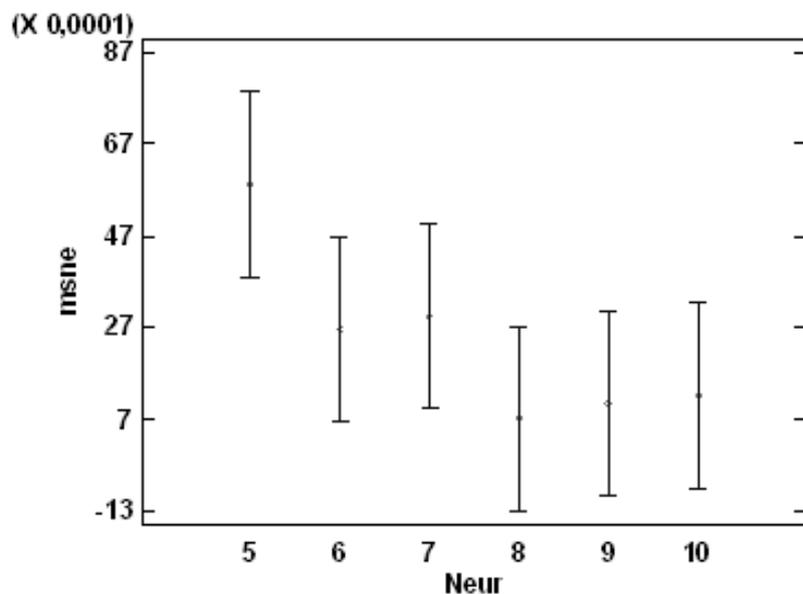


Figura 85: Efecto del número de neuronas de la capa intermedia de la red sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

Los resultados no ofrecen ninguna información adicional de la que se ha obtenido mediante el ANOVA de $[-\log_{10}(1-R^2)]$ de los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana TAMI.

4.3.3. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2)]$: de las figuras de la Figura 80 a la Figura 82 y de la Tabla 31 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

$$\text{Pret}=0 \text{ ó } 1 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=8-10$$

En el estudio del análisis de la varianza de NMSE: de las figuras de la Figura 83 a la Figura 85 y la Tabla 32 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

$$\text{Pret}=0 \text{ ó } 1 - \text{Pesos}=1 - \text{Neur}=8-10$$

Los resultados de implementar estas estrategias se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 33: Resultados de los parámetros de caracterización para Pret=0 y 1 – Pesos=1 – Neur= 8-10 para las redes neuronales perceptrón multicapa en los datos de la membrana TAMI.

Pret	Neur	NMSE	R ²	R ² est
0	8	0.00073666	0.9964	0.6939
	9	0.00041213	0.9980	0.7141
	10	0.00047439	0.9977	0.6738
	8	0.00074828	0.9964	0.7196
	9	0.00043184	0.9979	0.7006
	10	0.00049568	0.9976	0.7123
	8	0.00051243	0.9975	0.7453
	9	0.00063823	0.9969	0.7140
	10	0.00055262	0.9973	0.6342
1	8	0.00052684	0.9975	0.7289
	9	0.00056264	0.9973	0.4892
	10	0.00042487	0.9979	0.7026
	8	0.00054197	0.9974	0.6666
	9	0.00053636	0.9974	0.6916
	10	0.00045034	0.9978	0.6584
	8	0.00052490	0.9975	0.6766
	9	0.00042056	0.9980	0.6428
	10	0.00059948	0.9972	0.7285

Atendiendo a que los resultados de los parámetros R² y NMSE son similares, se va a escoger el mejor resultado de entre los disponibles a partir del ajuste obtenido en las condiciones estacionarias. Realizando un análisis estadístico sencillo (media y

desviación típica de los datos) para los coeficientes de regresión de los datos estacionarios, se observa que no aplicar pretratamiento ofrece mejores resultados de la media. La Tabla 34 muestran los datos de la media y desviación típica de los coeficientes de regresión al cuadrado de los datos estacionarios para las membranas TAMI.

Tabla 34: Análisis estadístico de los coeficientes de regresión de los datos estacionarios de los ensayos realizados con la membrana TAMI.

Pret	Media	Desviación típica
0	0.6928	0.0375
1	0.6790	0.0576

La tabla 35 muestra los resultados de los parámetros de regresión para Pret=0 y pesos iniciales nulos.

Tabla 35: Resultados de los parámetros de caracterización para Pret=0 – Pesos=1 – Neur= 8-10 para las redes neuronales perceptrón multicapa en los datos de la membrana TAMI.

Neur	NMSE	R ²	R ² est
8	0.00073666	0.9964	0.6939
9	0.00041213	0.9980	0.7141
10	0.00047439	0.9977	0.6738
8	0.00074828	0.9964	0.7196
9	0.00043184	0.9979	0.7006
10	0.00049568	0.9976	0.7123
8	0.00051243	0.9975	0.7453
9	0.00063823	0.9969	0.7140
10	0.00055262	0.9973	0.6342

Donde el mejor resultado es la tercera simulación realizada con 8 neuronas en la capa intermedia de la red con inicialización de los pesos de la red de manera aleatoria e introduciendo los datos sin ningún tipo de pretratamiento. Además, en este caso coincide con el mejor resultado de coeficiente de regresión para los datos estacionarios, de manera que para este caso no se requiere un análisis de la varianza posterior del coeficiente de regresión de los datos estacionarios ya que el resultado que se va a representar representa la mejor simulación de los resultados estacionarios.

La presentación de los resultados para este caso, presenta la problemática de que aparece la variable concentración en tres niveles (5, 10 y 15 g/L), de manera que para representar todos los datos se requieren el triple de gráficos que para los resultados

de la membrana CARBOSEP, de manera que, para diferenciarlos, se van a presentar de en primer lugar los datos de la concentración 5 g/L, posteriormente los de 10 g/L y, por último, los resultados con concentración de 15 g/L.

Los resultados de la simulación de la red neuronal se muestran en las figuras de la 86 a la 113.

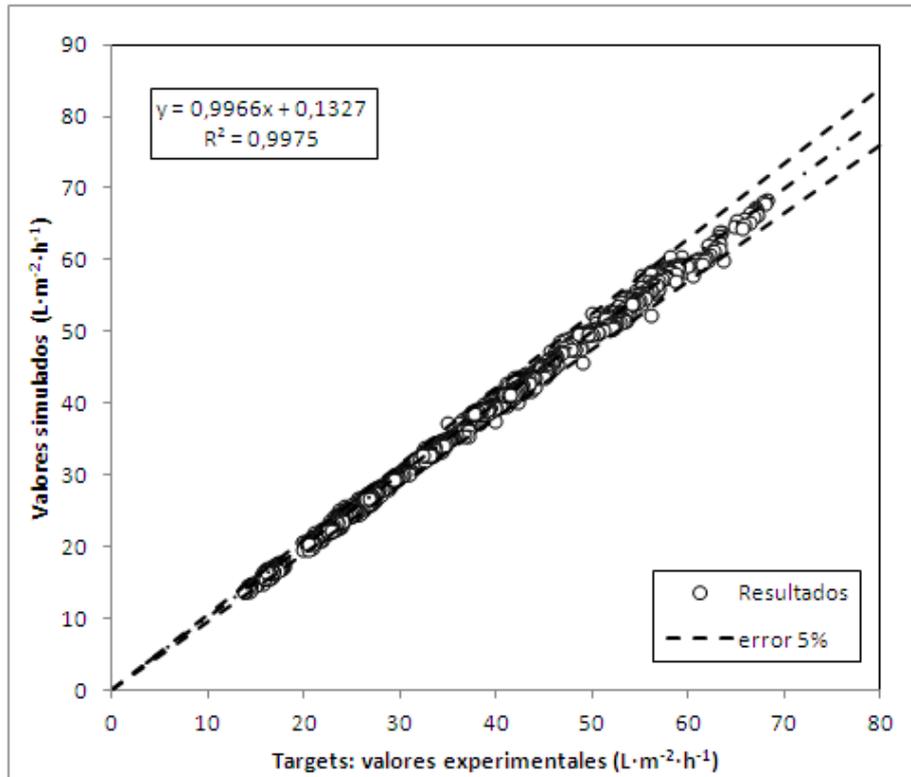


Figura 86: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

Resultados de concentración 5 g/L para la membrana TAMI.

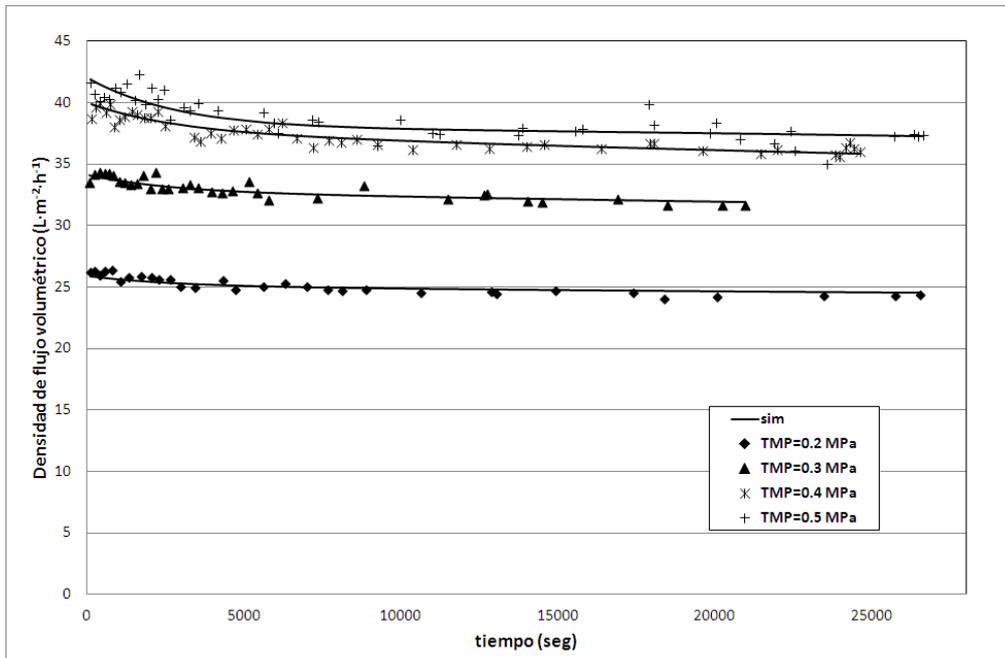


Figura 87: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

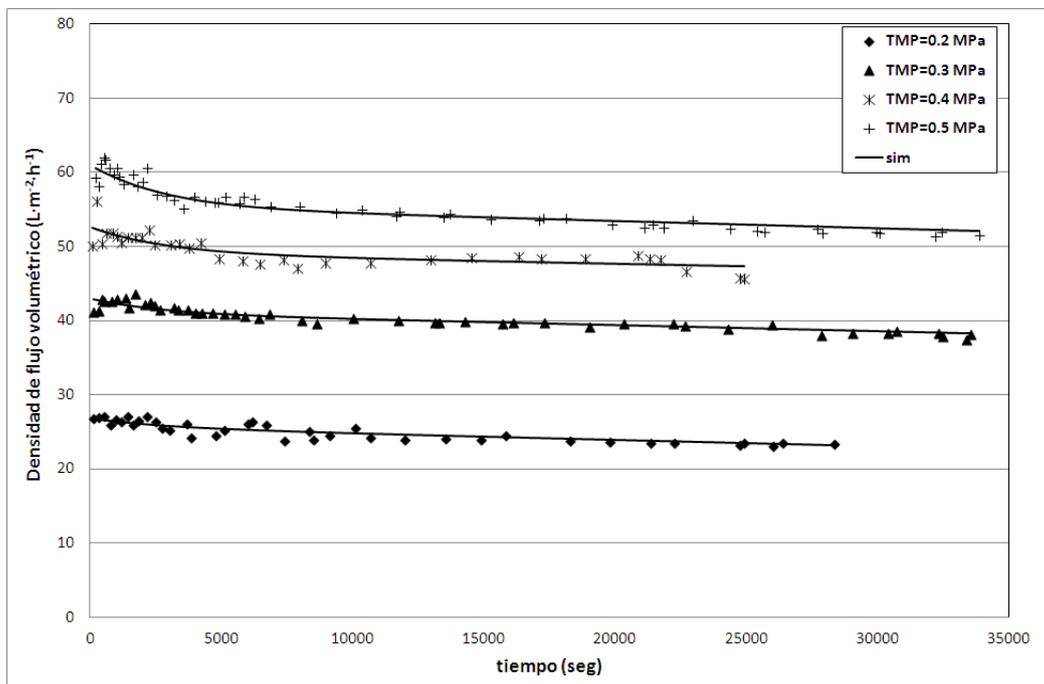


Figura 88: Resultados de la simulación de la red para CFV=2m/s y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana

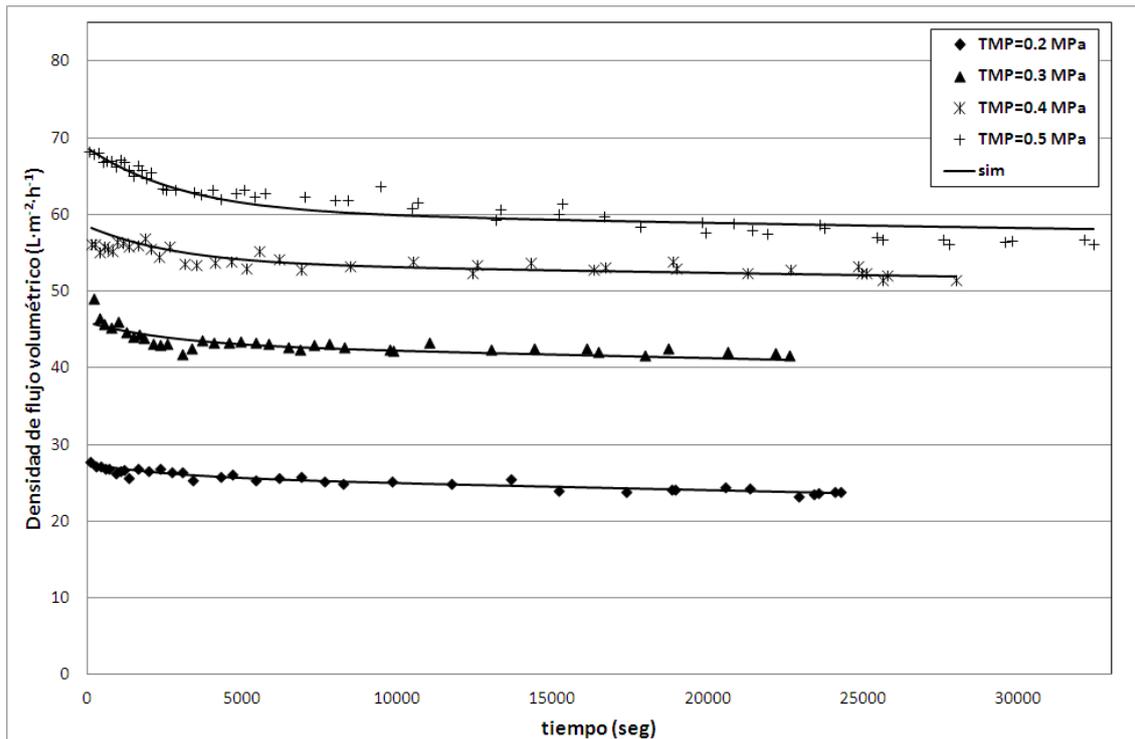


Figura 89: Resultados de la simulación de la red para CFV=3 m/s y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

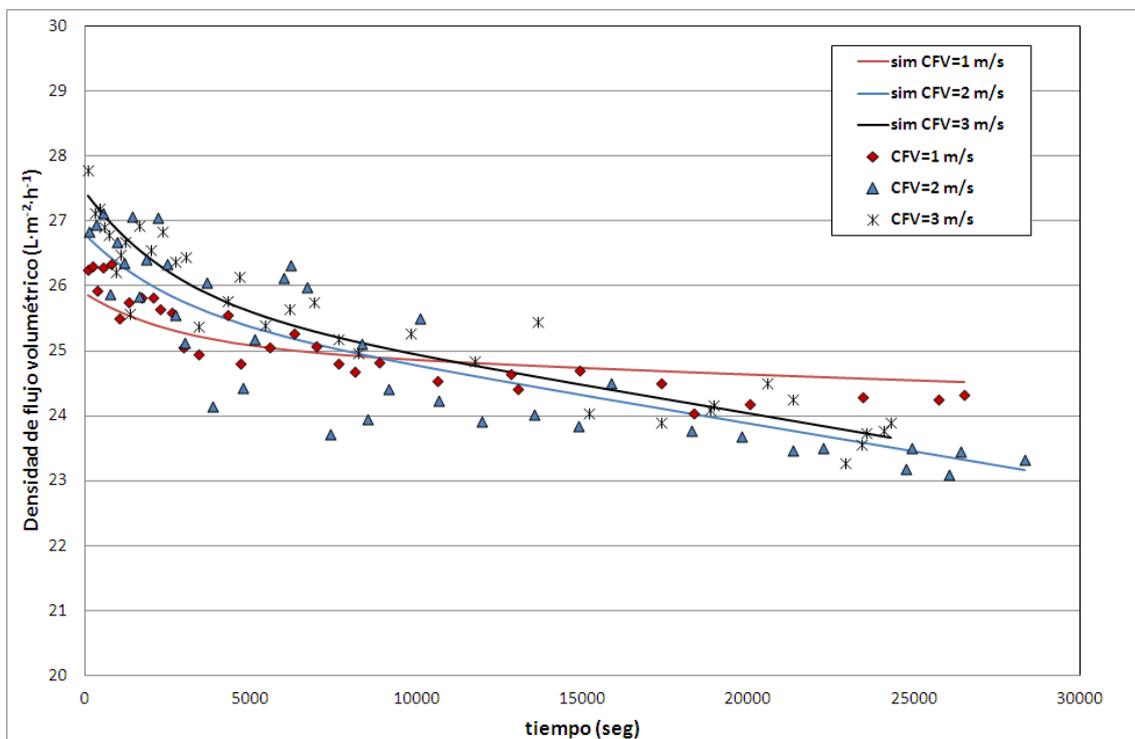


Figura 90: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana

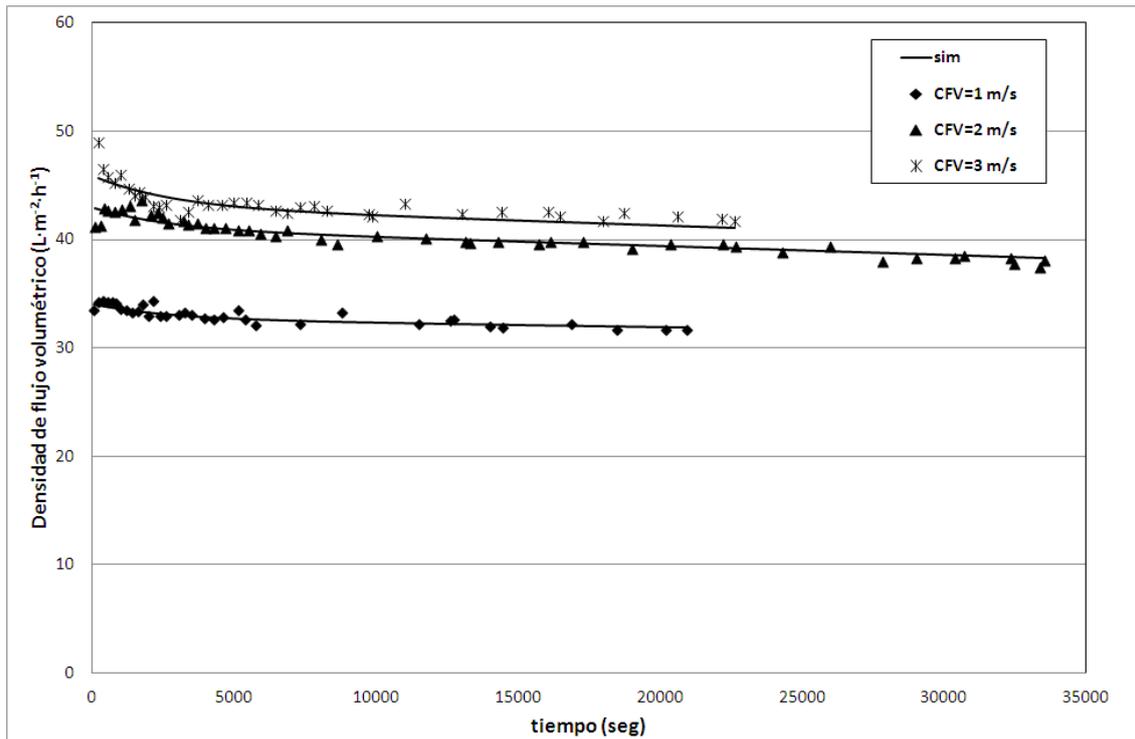


Figura 91: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

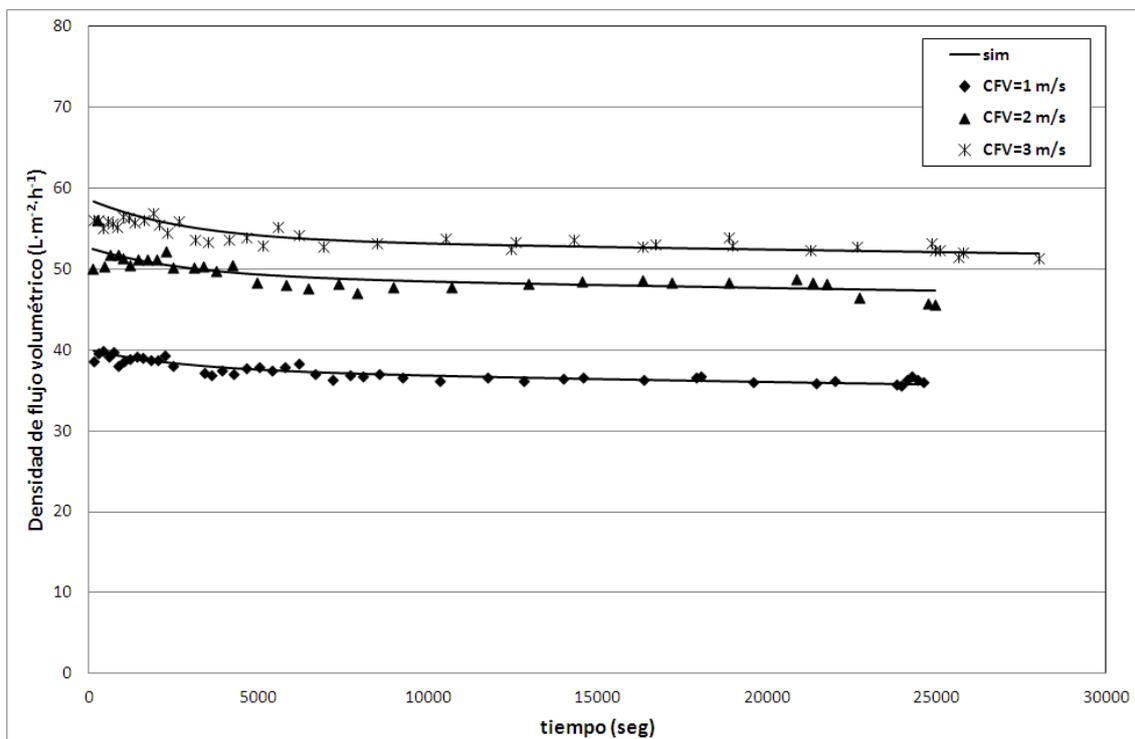


Figura 92: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

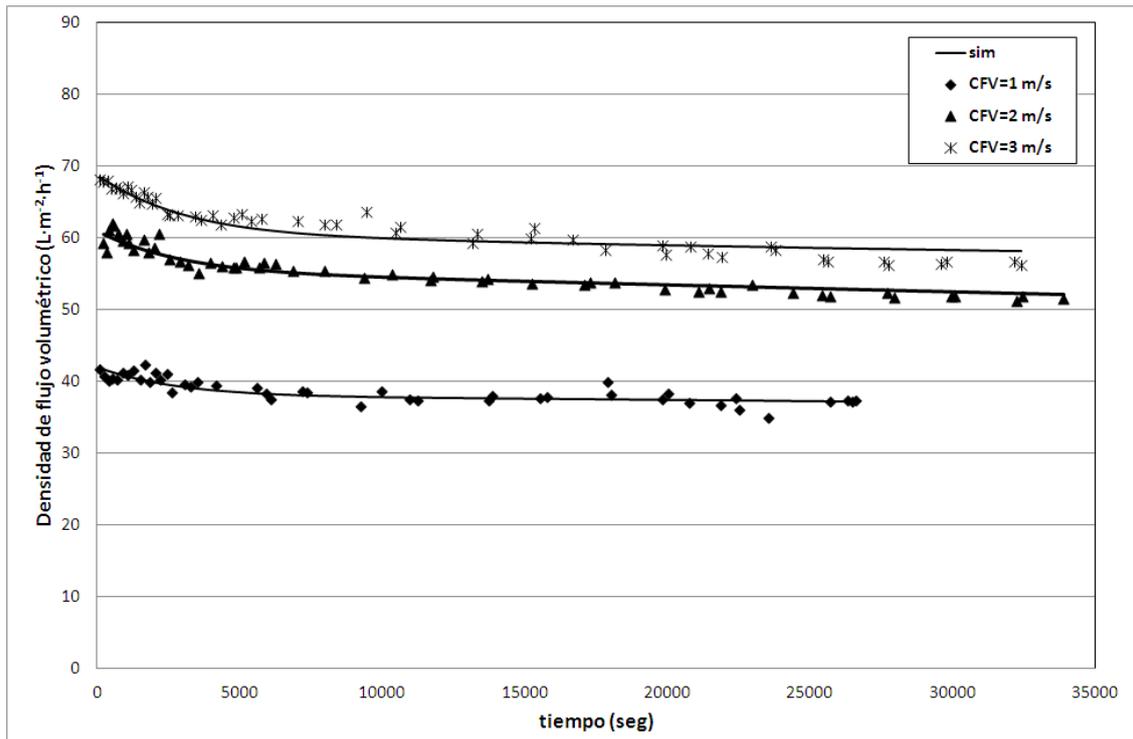


Figura 93: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

Se observa que el ajuste conseguido por la red neuronal a los datos experimentales tiene una gran precisión para los datos de los ensayos con concentración 5 g/L para la membrana TAMI. Incluso en la Figura 90, donde los datos tienen un elevado grado de dispersión con respecto de su tendencia natural, la red neuronal ofrece una representación muy precisa. No obstante, en esta misma figura las representaciones de la red neuronal para CFV=2 m/s y CFV=3 m/s (TMP=0.2 MPa) no tienden a estabilizarse para tiempos elevados de ensayo. En la Figura 91 hay un ligero desajuste para CFV=3 m/s (TMP=0.3 MPa) ya que los datos experimentales indican un descenso más pronunciado de la densidad de flujo volumétrico que la que predice la red.

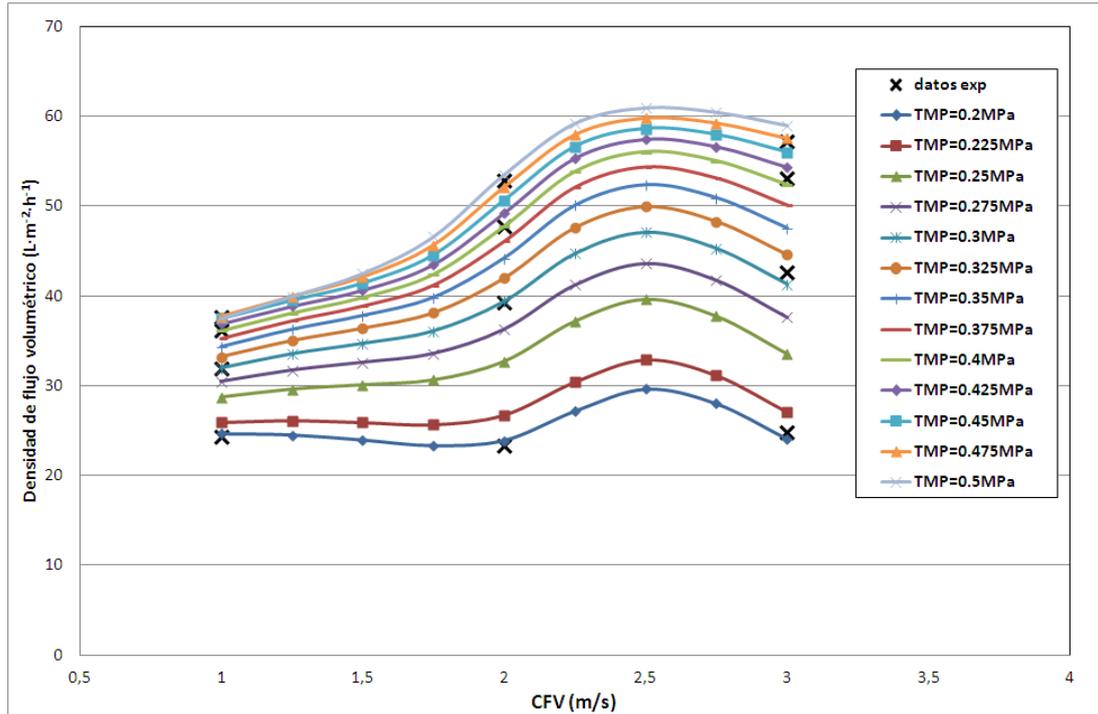


Figura 94: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

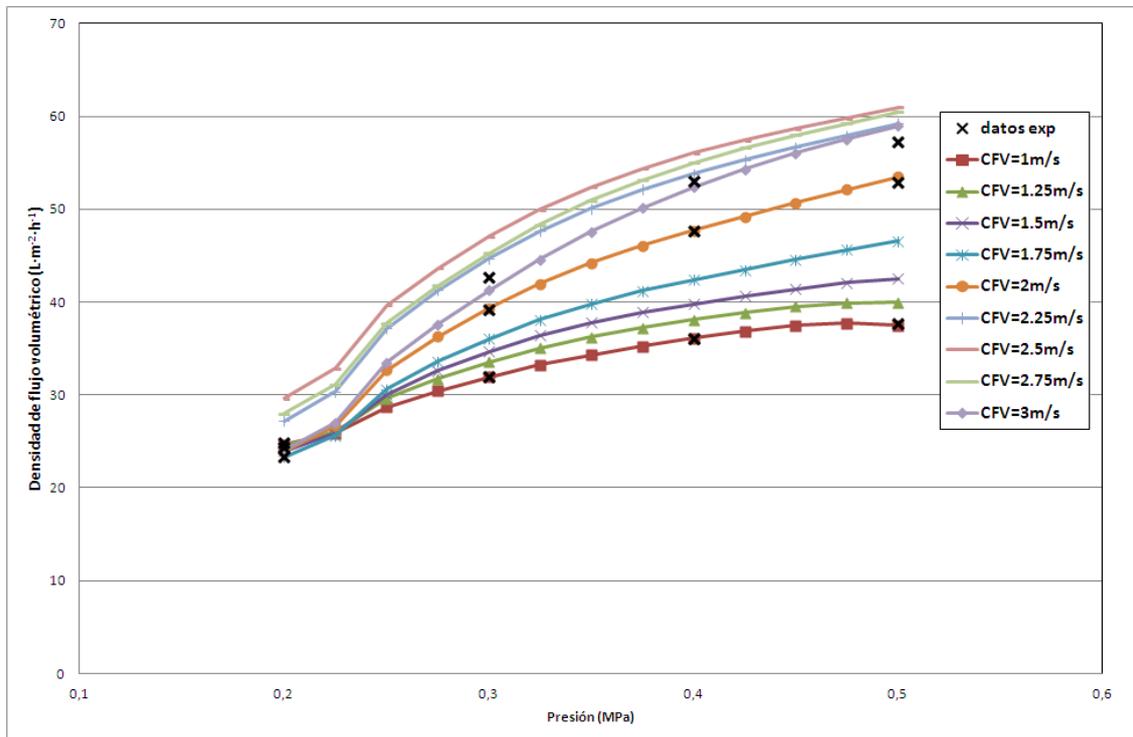


Figura 95: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 5 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

Tal y como se obtenía para los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, los resultados de las simulaciones para condiciones estacionarias muestran un ajuste muy preciso de los datos experimentales en condiciones estacionarias. Sin embargo, tal y como pasa en los resultados estacionarios de la red neuronal perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, la tendencia que estos resultados ofrecen no se puede considerar aceptable debido a las incoherencias que se observan en estas tendencias.

En la Figura 94 se observa una densidad de flujo volumétrico estacionaria máxima para velocidades tangenciales de 2.5 m/s cuando debería estabilizarse a partir de 2m/s. En la Figura 95 se observa que las simulaciones de velocidades tangenciales de 2.25, 2.5 y 2.75 m/s están desajustadas con respecto a los resultados experimentales para presiones bajas (TMP=0.2 MPa). También se observa que, tal y como se ha visto en la Figura 94, el máximo de densidades de flujo volumétrico estacionario producido entre 2 y 3 provoca que las líneas de estas velocidades en la Figura 95 se sitúen por encima de la distribución de CFV=3 m/s. Por último también resulta anómalo el cambio de tendencia que se observa para presiones bajas en la Figura 95.

Resultados de concentración 10 g/L para la membrana TAMI.

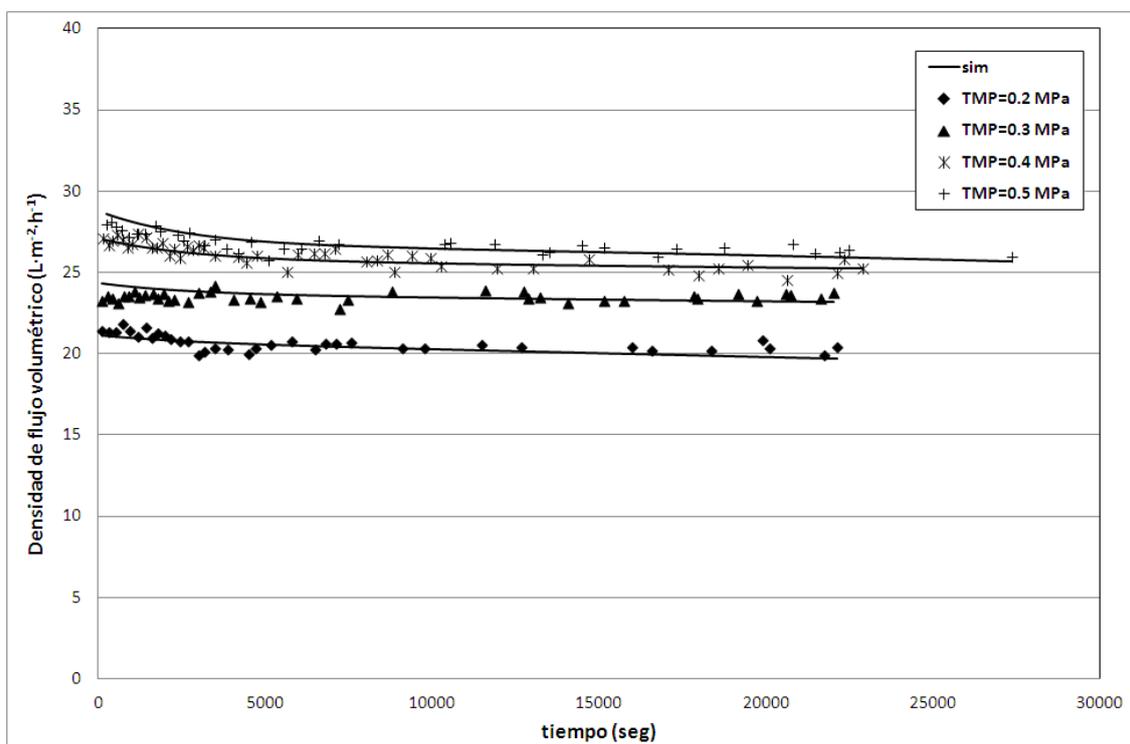


Figura 96: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

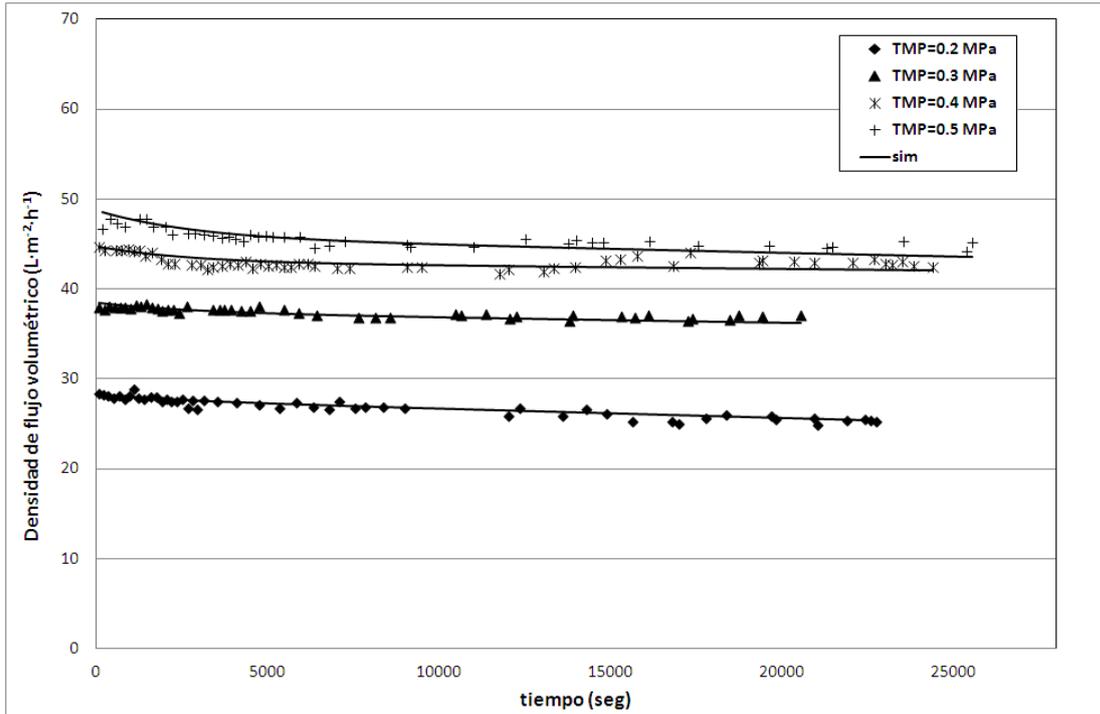


Figura 97: Resultados de la simulación de la red para $CFV=2$ m/s y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

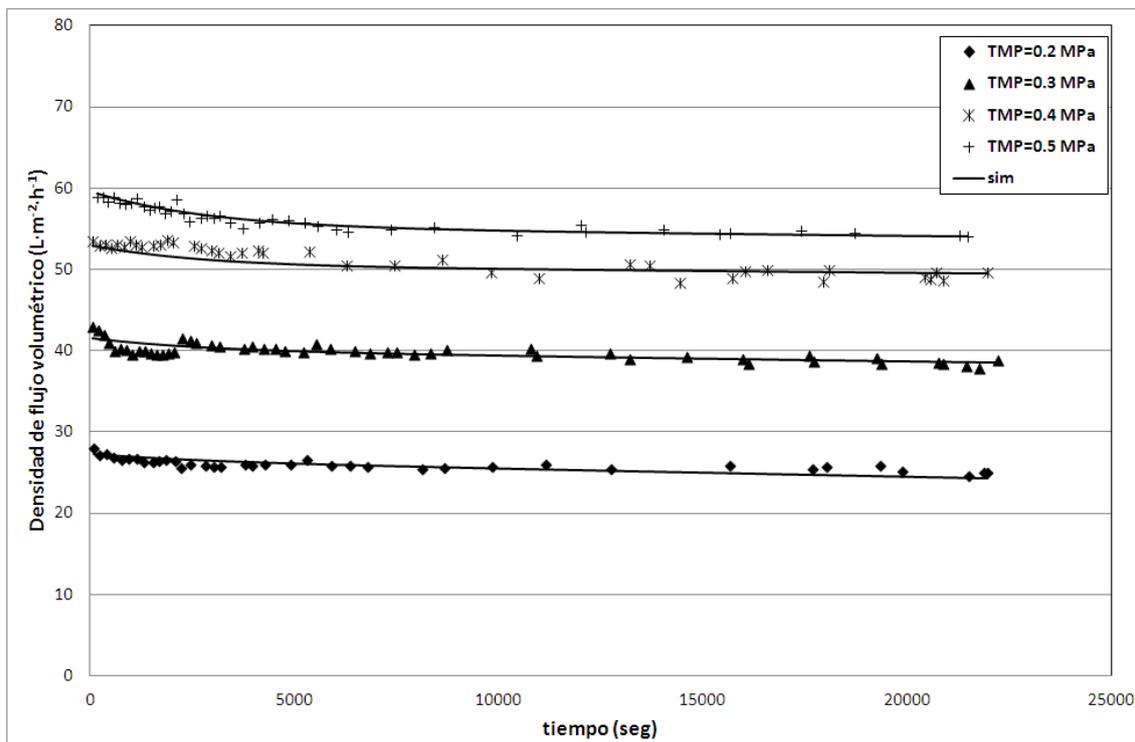


Figura 98: Resultados de la simulación de la red para $CFV=3$ m/s y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

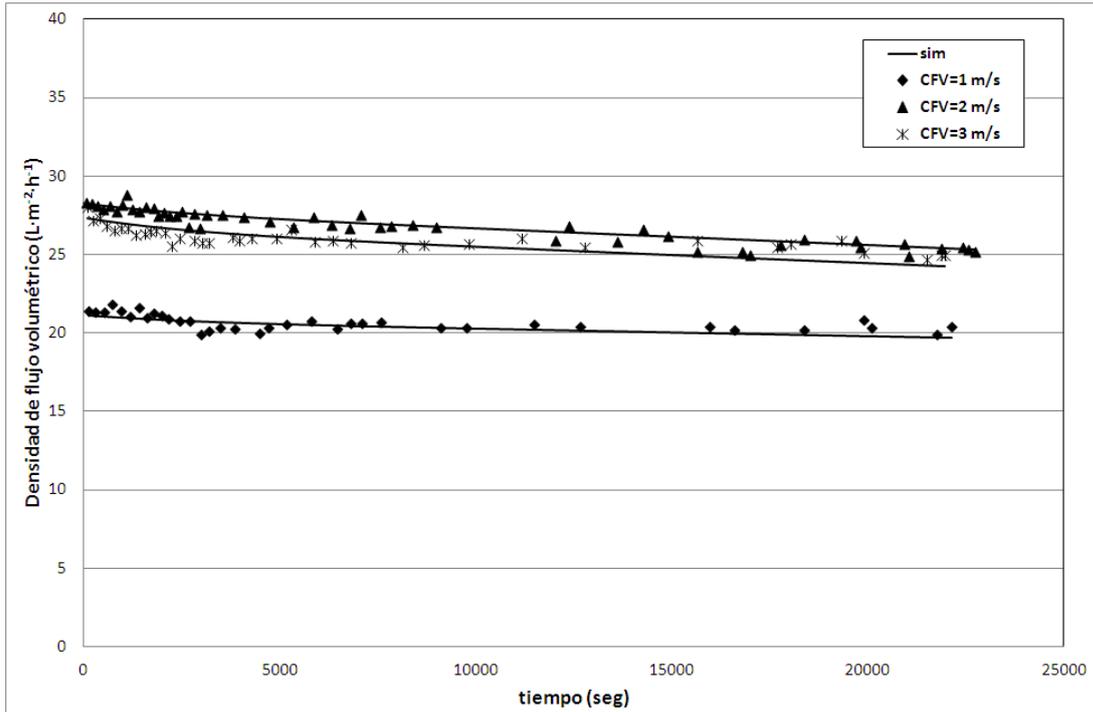


Figura 99: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

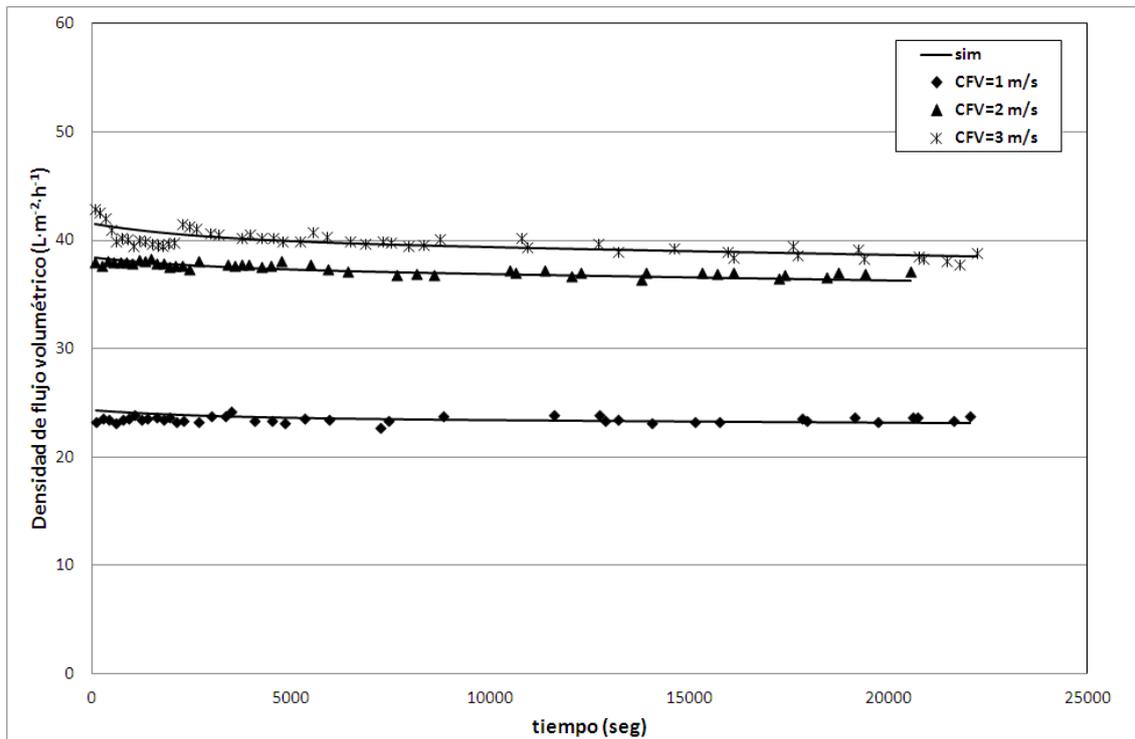


Figura 100: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

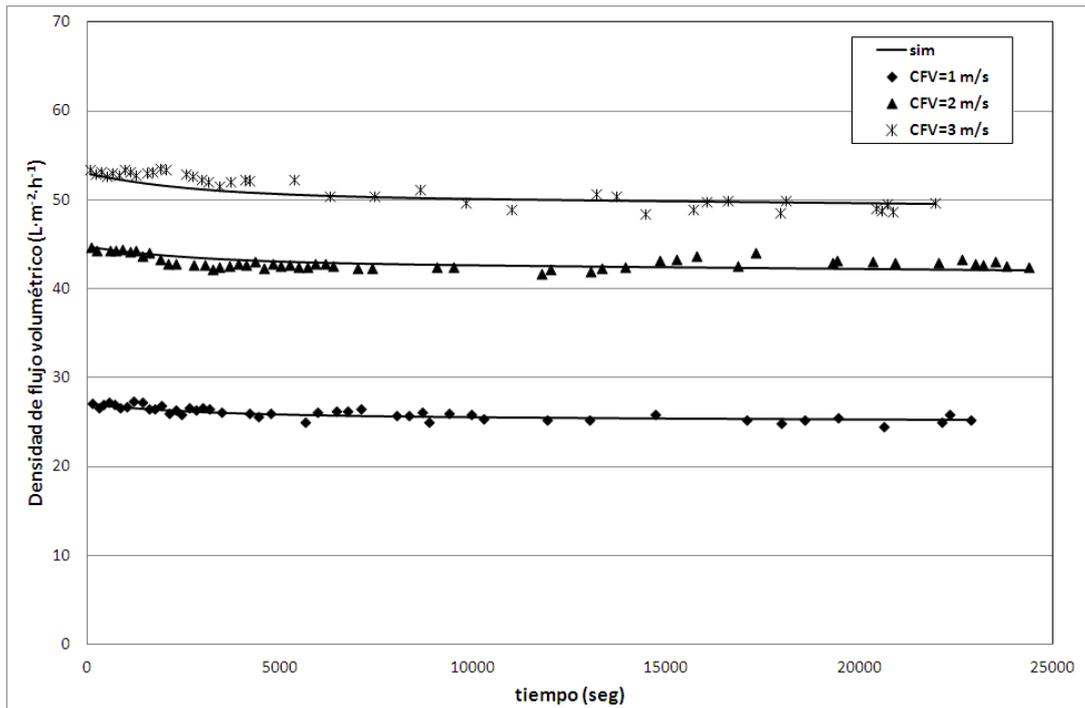


Figura 101: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

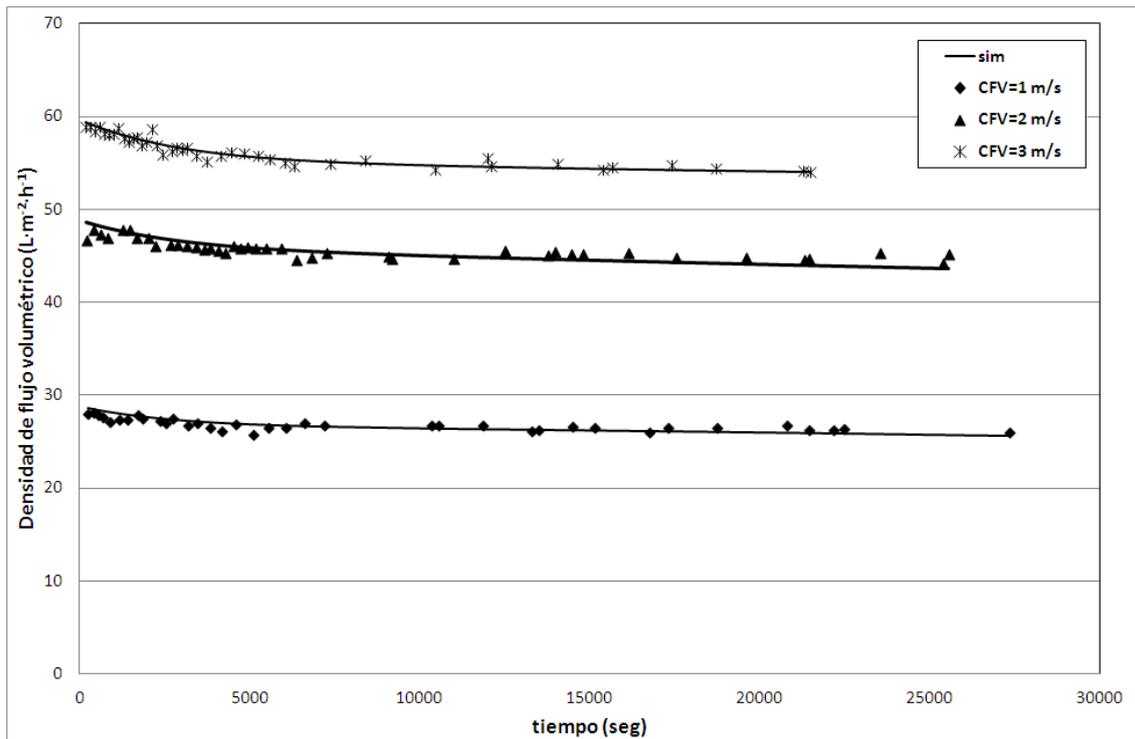


Figura 102: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

Tal y como se observaba para los resultados para la concentración 5 g/L, los resultados que ofrece la red neuronal presentan un elevado ajuste de los datos experimentales. Se observa también que, pese a la gran precisión de la red neuronal, la Figura 99 las simulaciones de la CFV 2 y 3 m/s (para TMP=0.2 MPa) deberían estabilizarse al mismo valor de densidad de flujo volumétrico tal y como se observa en los puntos experimentales para esos dos ensayos, sin embargo, la simulación de CFV 3 m/s sigue disminuyendo sin estabilizarse para los últimos puntos del ensayo.

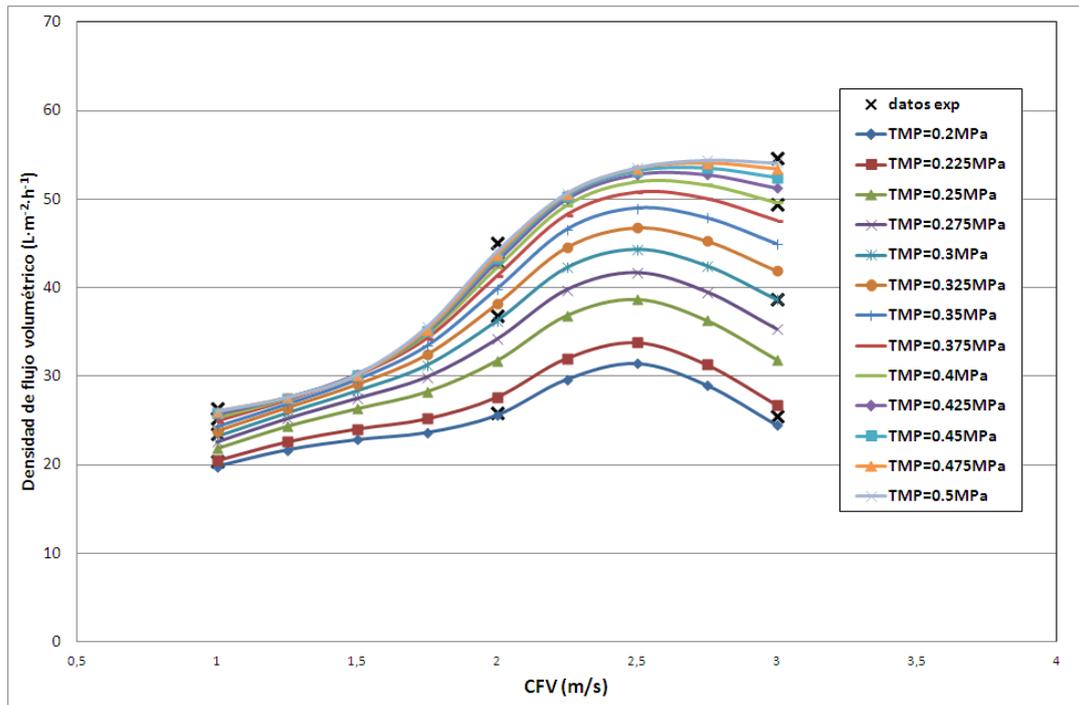


Figura 103: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

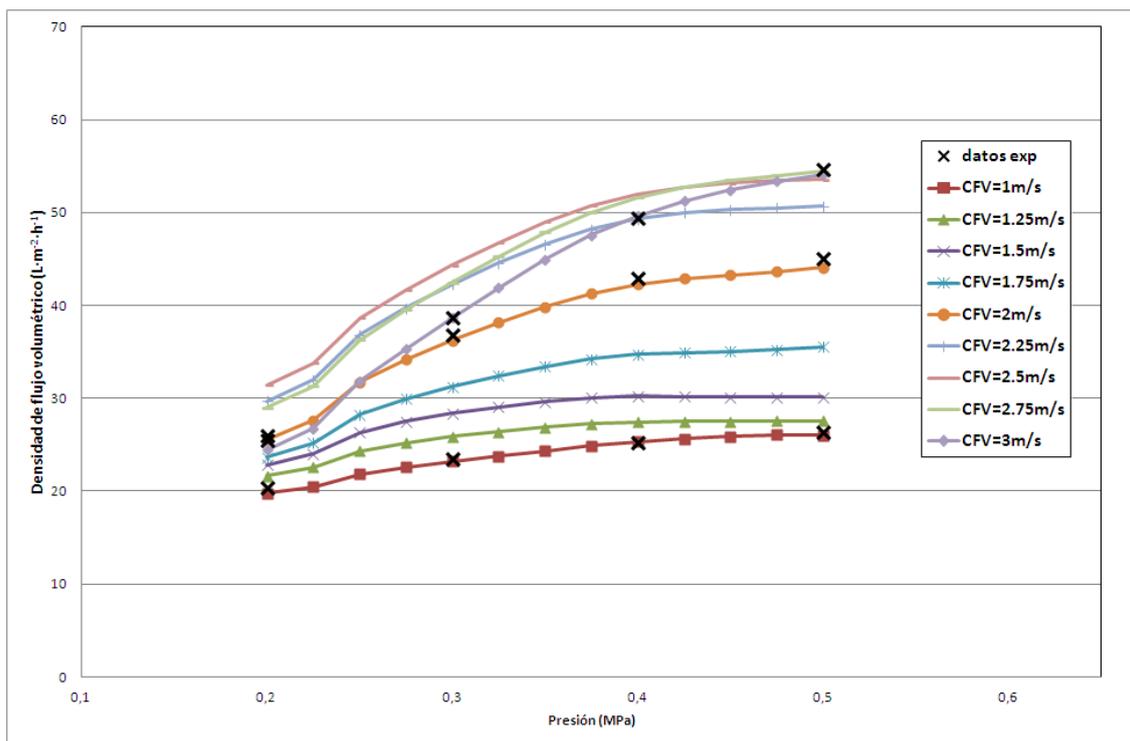


Figura 104: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 10 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

Las observaciones para la Figura 103 y la Figura 104, son las mismas que las realizadas para las respectivas representaciones para la concentración 5 g/L (Figura 94 y Figura 95).

La Figura 103 muestra unas distribuciones con máximos para la CFV de 2.5 m/s, aunque dicho efecto se va mitigando conforme se aumenta la presión. También se observa que la densidad de flujo volumétrica estacionaria no se estabiliza a partir de 2m/s tal y como se presupone de los datos experimentales estacionarios y, para velocidades tangenciales bajas, se observan cambios en la tendencia de las simulaciones estacionarias en vez de seguir un comportamiento lineal. La Figura 104, tal y como se ha visto en la Figura 103, el máximo de densidades de flujo volumétrico estacionario producido entre 2 y 3 provoca que las líneas de estas velocidades en la Figura 103 se sitúen por encima de la distribución de CFV=3 m/s. Por último también resulta anómalo el cambio de tendencia que se observa para presiones bajas en la Figura 104.

Resultados de concentración 15 g/L para la membrana TAMI.

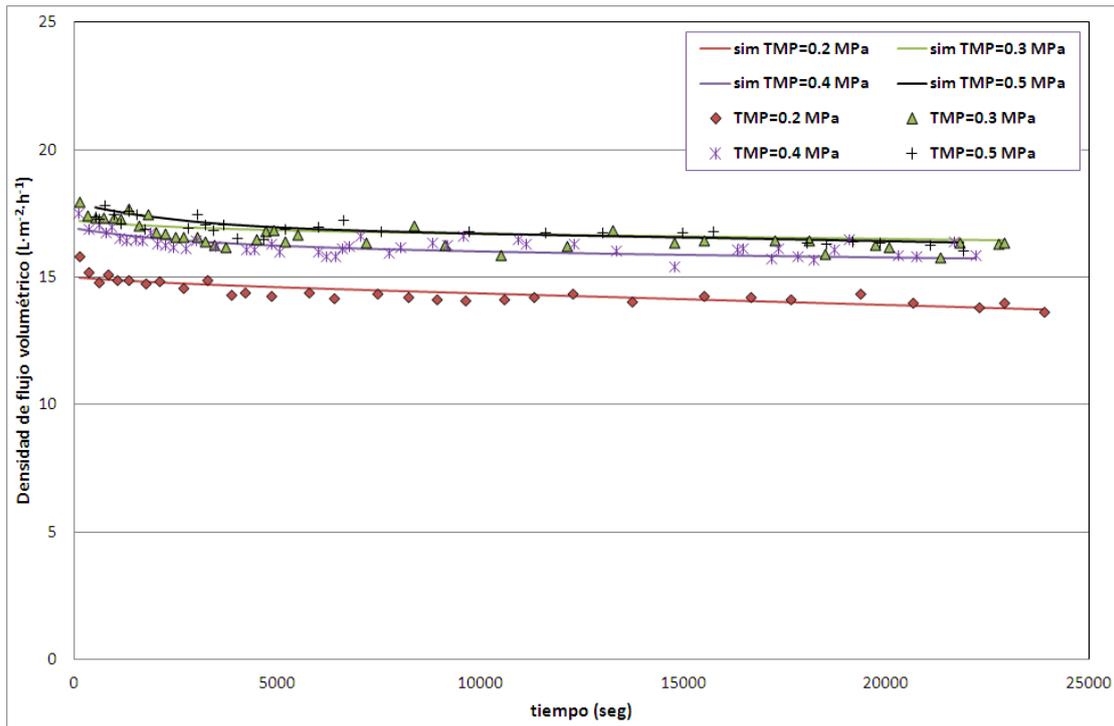


Figura 105: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

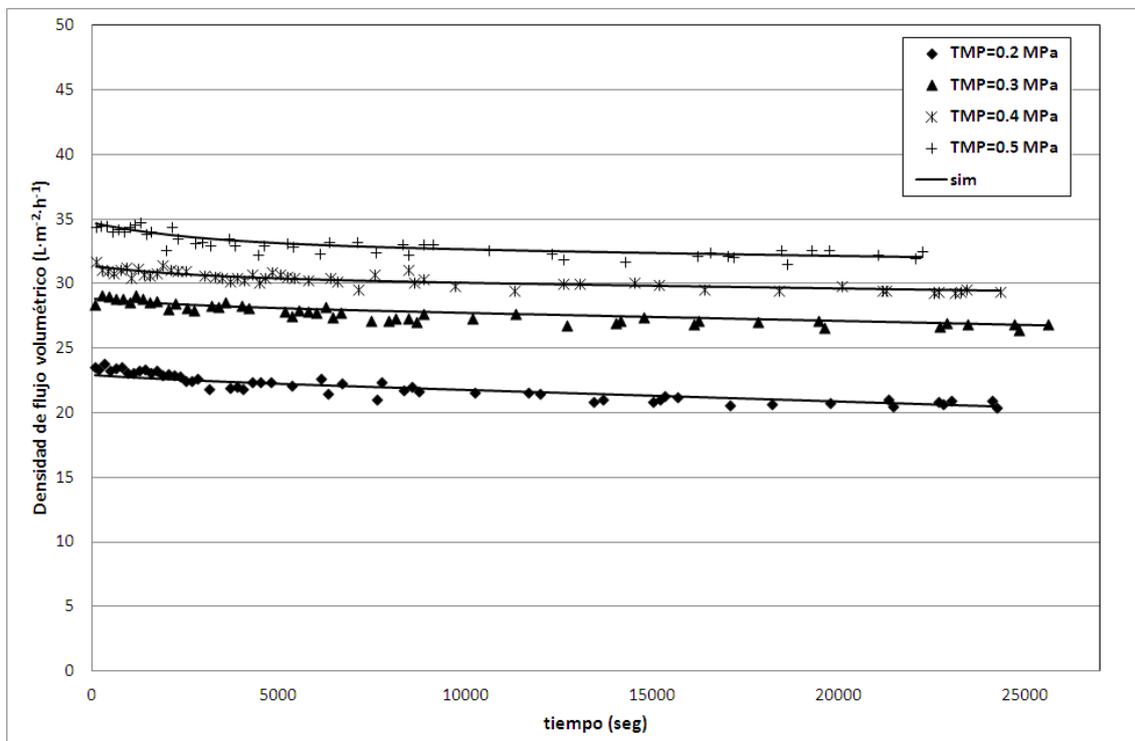


Figura 106: Resultados de la simulación de la red para CFV=2 m/s y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

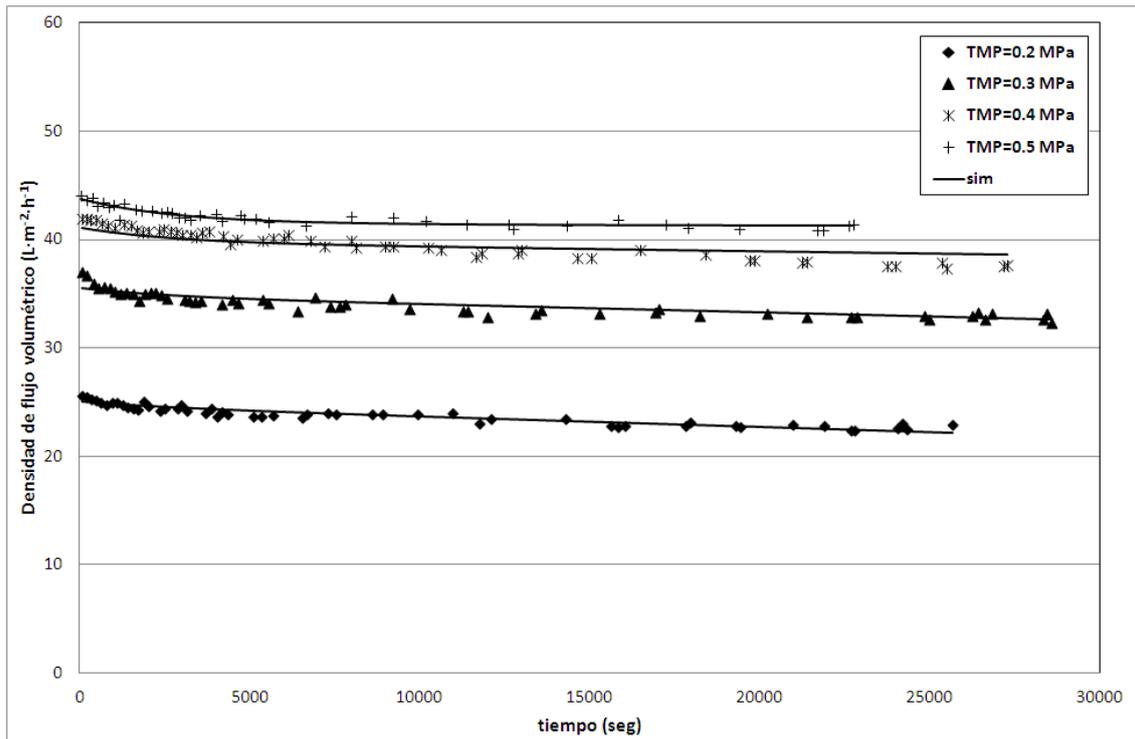


Figura 107: Resultados de la simulación de la red para CFV=3m/s y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

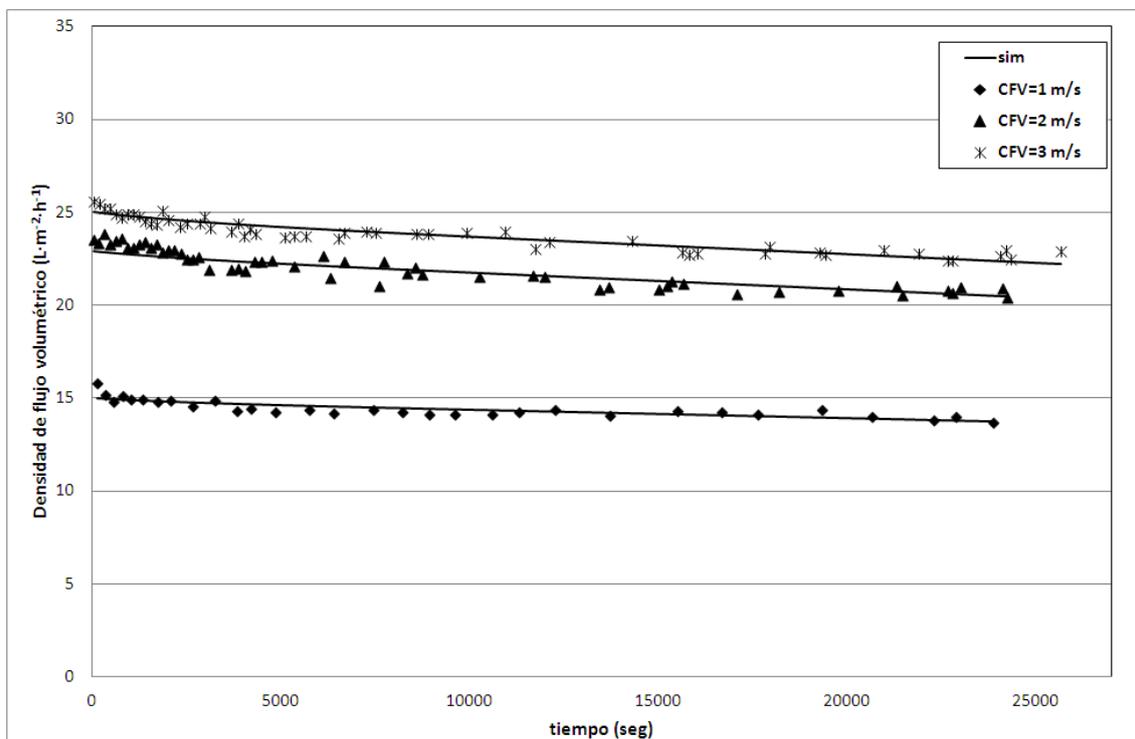


Figura 108: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

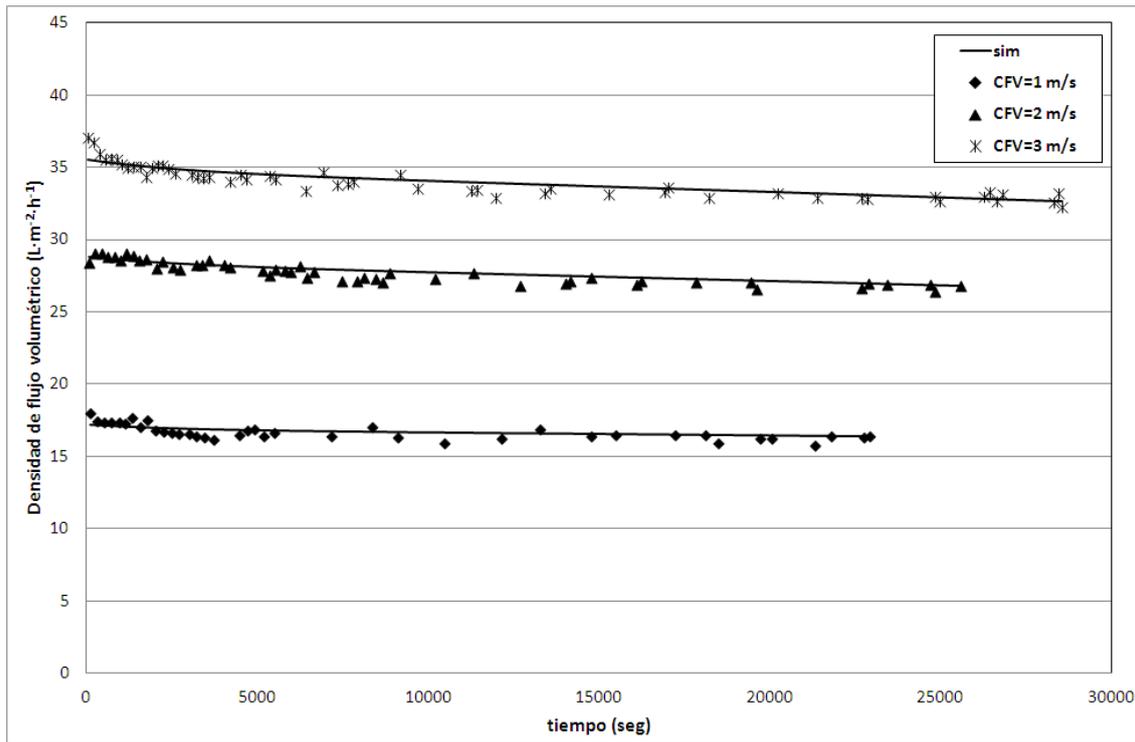


Figura 109: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

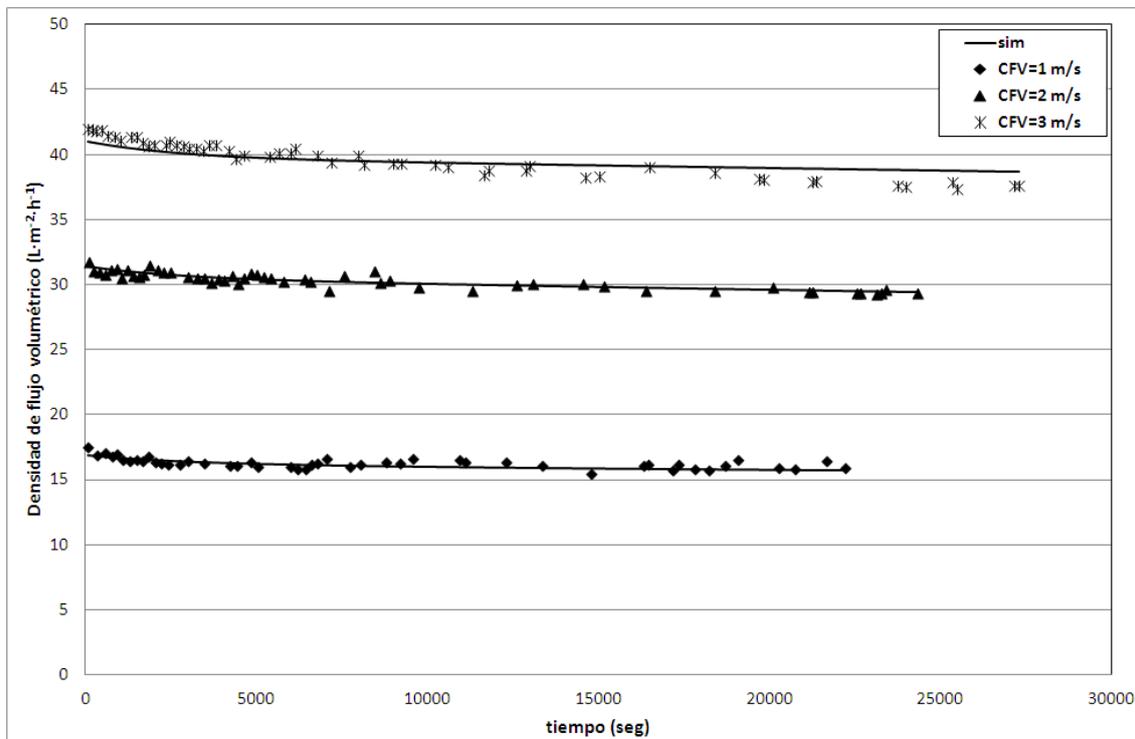


Figura 110: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

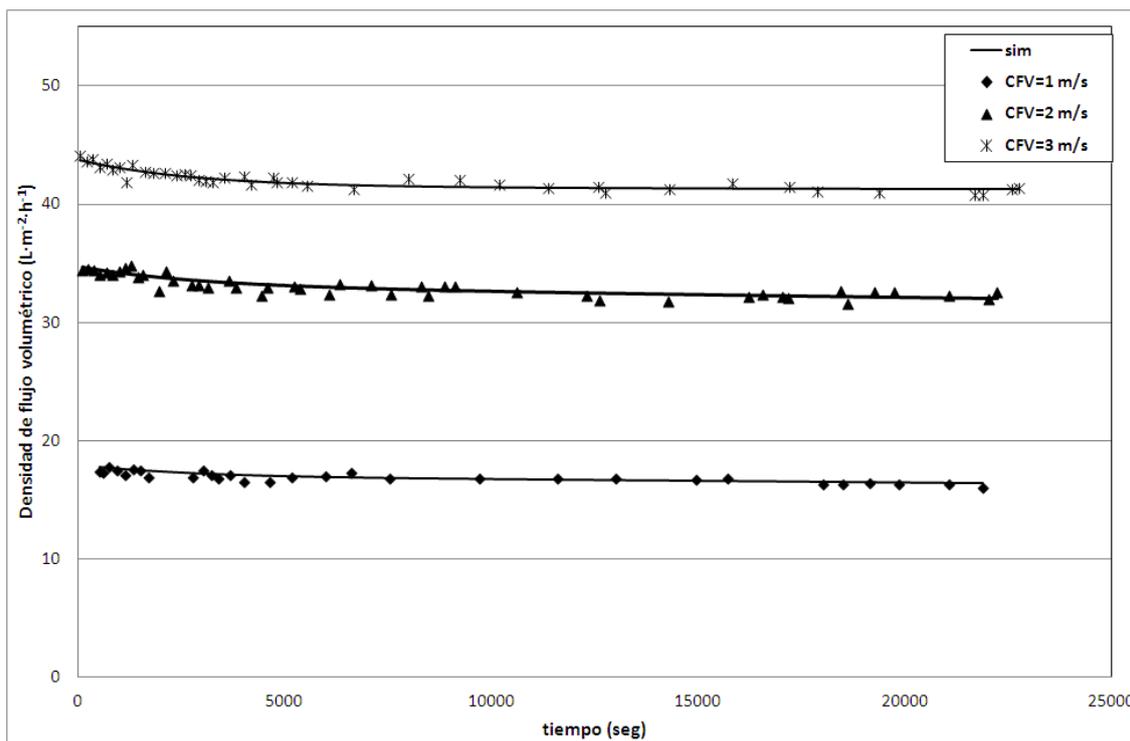


Figura 111: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 0 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI.

Observando las Figuras 105–111, el ajuste de los datos experimentales de los ensayos con concentración de 15 g/L realizados con la membrana TAMI mediante red neuronal perceptrón multicapa es muy preciso tal y como se había observado para los respectivos ajustes para concentraciones de 5 y 10 g/L de la misma membrana mediante este tipo de red.

Hay determinados comportamientos que los datos experimentales muestran que la red no ha sabido modelar. La Figura 107 muestra que la estabilización de la densidad de flujo volumétrico del ensayo a CFV 3 m/s y TMP 0.4 MPa obtenida de la simulación de la red es ligeramente mayor a la que se aprecia para los puntos experimentales para este ensayo; también muestra que para el ensayo TMP 0.3 MPa y CFV 3 m/s no acaba de ajustar la disminución inicial de la densidad de flujo volumétrico. Este último desajuste puede ser debido a la red se le han introducido un total de 36 ensayos y, para la mayoría de ellos, la densidad de flujo volumétrico aparece estabilizada casi desde el comienzo del ensayo. En la Figura 105 para el ensayo a CFV 1 m/s y TMP 0.2 MPa se observa que la simulación de la red neuronal no se estabiliza sino que sigue una tendencia descendente para los últimos puntos de este ensayo. Este efecto también se observa en la Figura 108 para el ensayo a CFV 3 m/s y TMP 0.2 MPa.

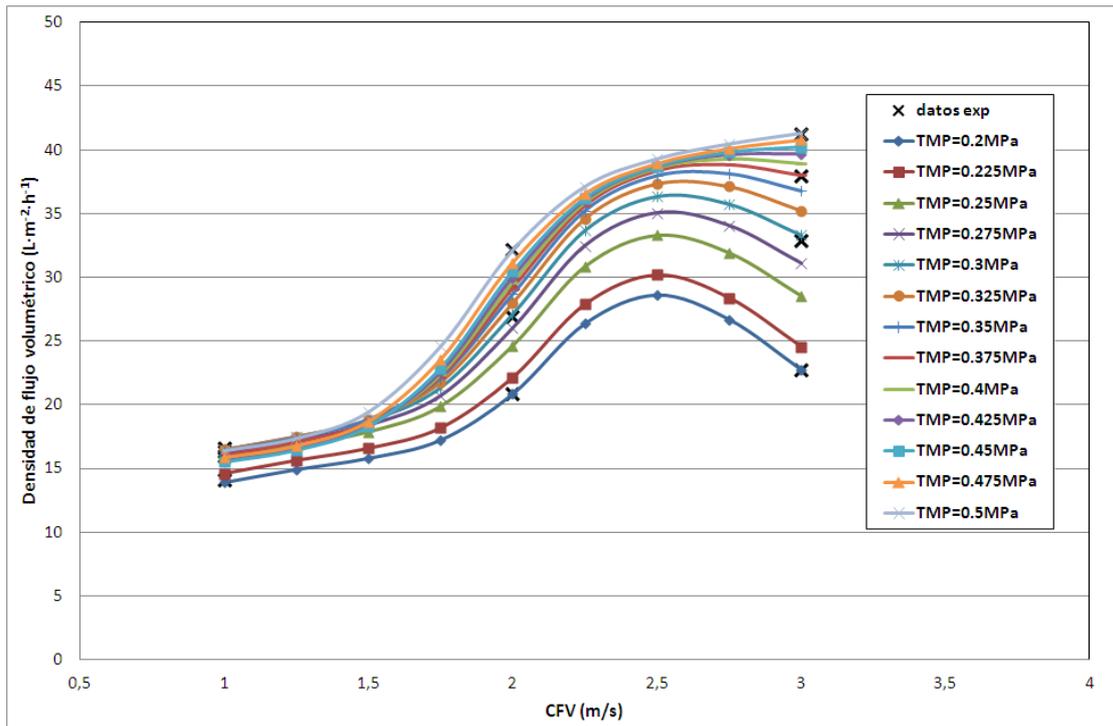


Figura 112: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

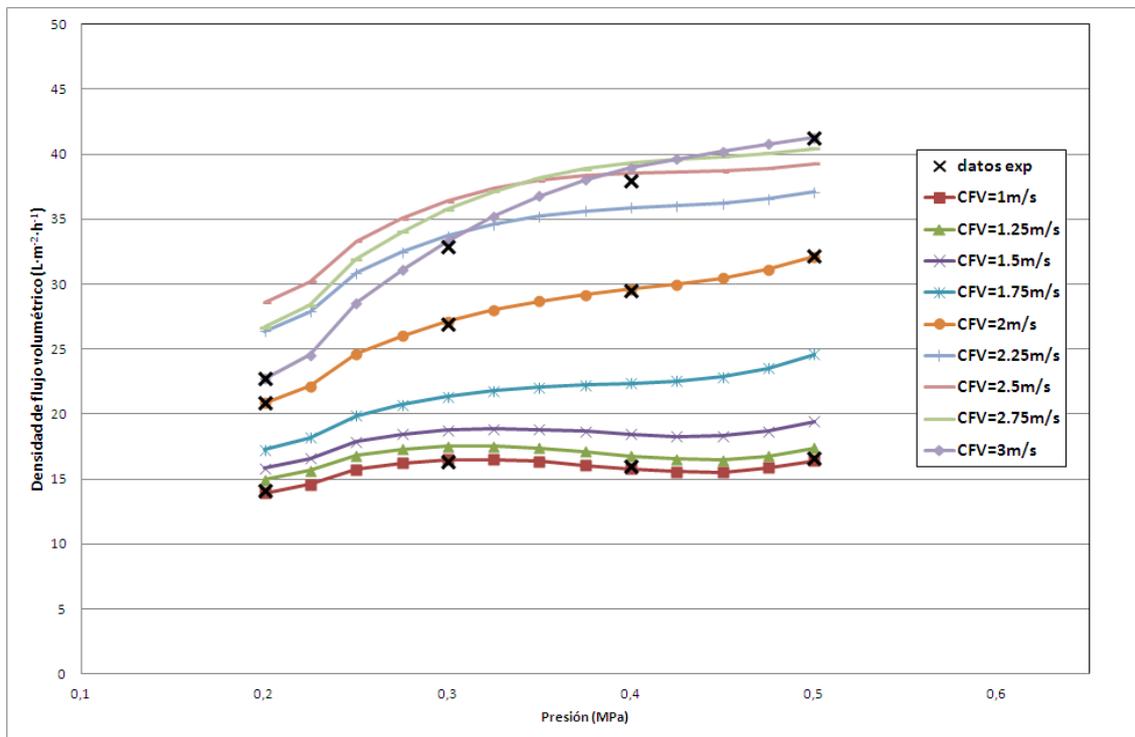


Figura 113: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios para la concentración 15 g/L. Red neuronal perceptrón multicapa sin pretratamiento, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos alea – Neur 8) para los datos de la membrana TAMI (X datos experimentales).

Las observaciones para la Figura 112 y Figura 113, son las mismas que las realizadas para las respectivas representaciones para la concentración 5 g/L y 10 g/L (Figura 94, Figura 95, Figura 103 y la Figura 104).

La Figura 112 muestra unas distribuciones con máximos para la CFV de 2.5 m/s, aunque dicho efecto se va mitigando conforme se aumenta la presión. También se observa que la densidad de flujo volumétrica estacionaria no se estabiliza a partir de 2m/s tal y como se presupone de los datos experimentales estacionarios y, para velocidades tangenciales bajas, se observan cambios en la tendencia de las simulaciones estacionarias en vez de seguir un comportamiento lineal. La Figura 113, tal y como se ha visto en la Figura 112, el máximo de densidades de flujo volumétrico estacionario producido entre 2 y 3 provoca que las líneas de estas velocidades en la Figura 112 se sitúen por encima de la distribución de CFV=3 m/s. Por último también resulta anómalo el cambio de tendencia que se observa para presiones bajas en la Figura 113.

4.4. Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos de la membrana TAMI

Antes de realizar los análisis de la varianza para los parámetros de caracterización, se va a introducir la notación de caracterización de las redes neuronales desarrolladas para base radial en los datos de la membrana TAMI.

- Pret: indica el pretratamiento realizado.
- Spread: indica el valor de difusión de las neuronas dentro de la red neuronal de base radial (véase 3.2.1).

Análogamente a como se ha procedido en la aplicaciones de redes neuronales de base radial para los datos de la membrana CARBOSEP, se debe buscar el rango de difusión (o spread) que optimice los parámetros de regresión de los datos experimentales y estacionarios.

Estos ensayos previos de la red neuronal se han realizado con los datos sin pretratamiento ya que, a priori, los pretratamiento se han introducido para que la red neuronal pueda ajustar los datos con más facilidad, de manera que en un principio cabe pensar que para estos datos se van a obtener los peores resultados de ajuste de la red neuronal, con lo que los resultados de los coeficientes de regresión para los otros tipos de pretratamiento introducidos se espera que sean mejores que para las redes donde se han introducido los datos sin ningún tipo de pretratamiento.

La Tabla 36 muestra los resultados de la búsqueda de los valores óptimos de difusión para las redes neuronales de base radial introduciendo el 100% de los datos en la red neuronal.

Tabla 36: Búsqueda del rango óptimo del spread para redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos de la membrana TAMI. Datos introducidos en la red neuronal en la fase de entrenamiento: 100%.

Parámetro	Valores							
spread	1	10	100	500	1000	2500	5000	10000
msne	0.0079	0.0221	0.0082	0.001441	0.00234	0.01529	0.02296	0.0291
R²	0.9806	0.9449	0.9799	0.9965	0.9943	0.9622	0.9426	0.9267
R²est	-3.28E ⁻¹⁷	0.6854	0.6987	0.8465	0.8119	0.8486	0.8152	0.8308

La Tabla 37 muestra los resultados de la búsqueda de los valores óptimos de difusión para las redes neuronales de base radial introduciendo el 50% de los datos en la red neuronal.

Tabla 37 Búsqueda del rango óptimo del spread para redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos de la membrana TAMI. Datos introducidos en la red neuronal en la fase de entrenamiento: 50%.

Parámetro	Valores					
spread	4500	5000	5500	6000	7000	7500
msne	0.06796	0.025997	0.0258369	0.0297144	0.029592	0.02974998
R2	0.84381	0.93524	0.93576	0.92558	0.92589	0.92548
R2est	0.7323	0.7682	0.7913	0.79737	0.7935	0.79941

Se observa que el coeficiente de regresión de los datos experimentales supera el 90% a partir del valor de 5000. Análogamente al caso de aplicación de redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos desarrollados con la membrana CARBOSEP, se observa que para obtener resultados de los parámetros de regresión aceptables, se debe incurrir en valores de difusión muy elevados.

La Tabla 38 muestra la notación de los diferentes niveles para cada factor estudiado.

Tabla 38: Notación de los factores de la red neuronales perceptrón multicapa para la membrana TAMI.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
Spread	5000	-
	6000	-
	7000	-
	8000	-
	9000	-
	10000	-

4.4.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos experimentales

El resumen del ANOVA realizado sobre los coeficientes de regresión al cuadrado de los ajustes de las redes neuronales para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana TAMI se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 39: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2)]$ de los resultados de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana TAMI.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	6.67653E-10	1	6.67653E-10	0.02	0.8828
B:Spread	0.00597433	5	0.00119487	43087.85	0.0000
RESIDUAL	1.38655E-7	5	2.77309E-8		
TOTAL (CORRECTED)	0.00597447	11			

El único factor con efectos estadísticamente significativos sobre la variable respuesta: $[-\log_{10}(1- R^2)]$ es la valor de difusión (spread), asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 114 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

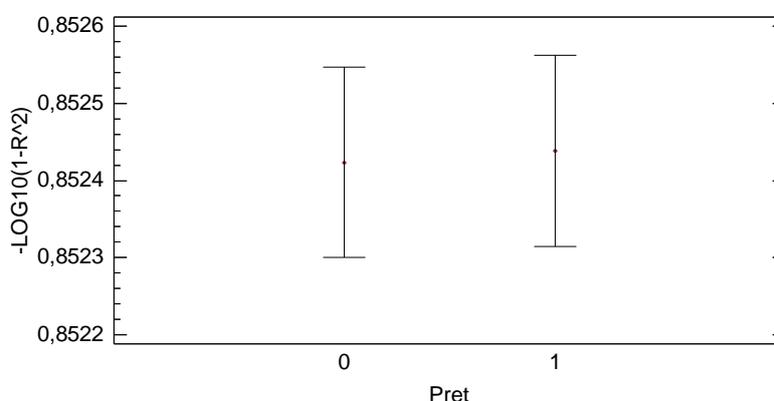


Figura 114: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana TAMI.

La Figura 115 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor spread de la red neuronal empleado del análisis de la varianza realizado.

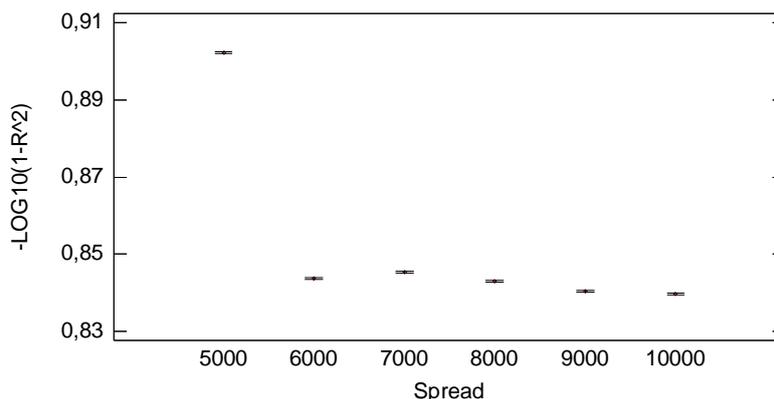


Figura 115: Efecto del valor de difusión (spread) sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana TAMI.

La Figura 114 muestra que aplicar la normalización de la densidad de flujo volumétrico no mejora la regresión de los datos experimentales.

La Figura 115 muestra que aumentar el valor del spread por encima de 5000 disminuye notablemente el coeficiente de regresión de los datos.

Se observa que en ninguna de las dos figuras se ha llegado al valor de 2, que invirtiendo la ecuación 40 da un valor del coeficiente de regresión de 0.99. Las medias observadas para todos los niveles no alcanzan el valor de 1.2, que indica un valor del coeficiente de regresión de aproximadamente 0.94. Esto puede hacer ver que, sin necesidad de visualizar los resultados en las respectivas representaciones, la regresión obtenida tenga poca precisión.

4.4.2. Análisis de la varianza del error cuadrático medio de los datos experimentales

El resumen del ANOVA para el error cuadrático medio normalizado del ajuste de las redes neuronales de base radial a los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana TAMI se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 40: Análisis de la varianza para NMSE de los resultados de la red neuronal de base radial para los ensayos realizados con la membrana TAMI.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Spread	0.0000242781	5	0.00000485561	242780.67	0.0000
B:Pret	0.0	1	0.0	0.00	1.0000
RESIDUAL	1.E-10	5	2.E-11		
TOTAL (CORRECTED)	0.0000242782	11			

El valor de la difusión (spread) tiene efectos significativos sobre la media de la variable respuesta: NMSE (o msne), asumiendo un error de primera especie del 5%. Se observa

que el valor de la suma cuadrática para el factor pretratamiento es nulo. Esto indica que no existe variabilidad para la variable respuesta debida al pretratamiento.

La Figura 116 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

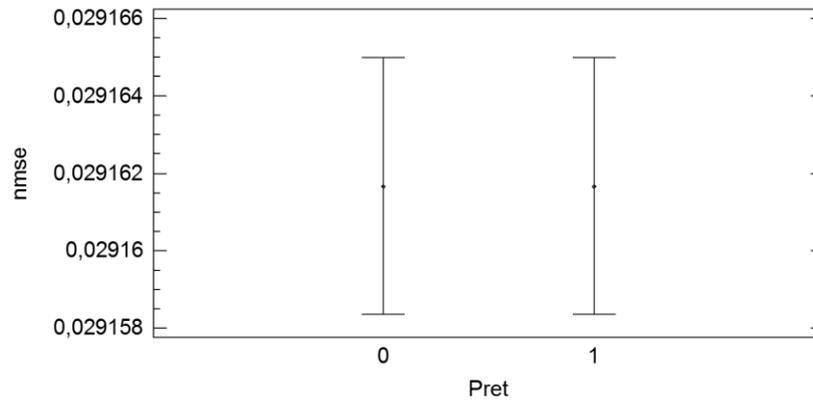


Figura 116: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana TAMI.

La Figura 117 muestra los resultados de los intervalos LSD para los diferentes niveles del factor pretratamiento empleado del análisis de la varianza realizado.

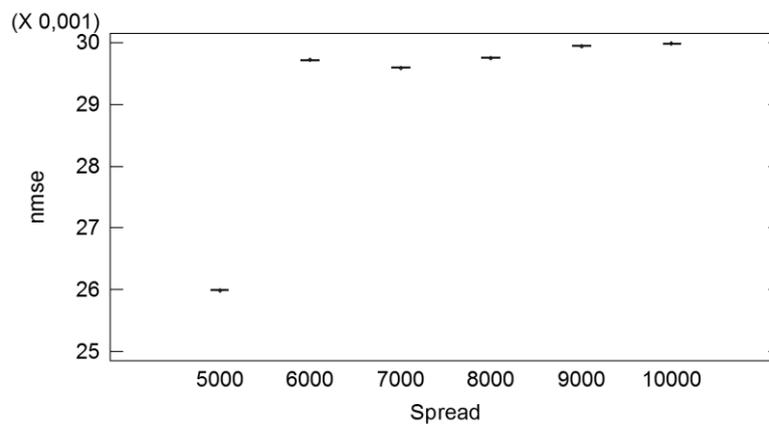


Figura 117: Efecto del valor de difusión (spread) sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta NMSE en la caracterización de los datos experimentales mediante redes neuronales de base radial para la membrana TAMI.

Los resultados mostrados por este análisis no añaden información a la extraída del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2)]$ para la aplicación de redes neuronales de base radial sobre los ensayos realizados para la membrana TAMI.

4.4.3. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos experimentales

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2)]$: de la Figura 114, la Figura 115 y la Tabla 39 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

Pret: 0 ó 1 – Spread 5000

En el estudio del análisis de la varianza de NMSE: de la Figura 116, Figura 117 y la Tabla 40 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

Pret: 0 ó 1 – Spread 5000

De manera que se van a mostrar los datos para Pret 0 y 1 con spread 5000. Los ensayos realizados con estos parámetros dieron los siguientes resultados:

Tabla 41: Resultados de los parámetros de caracterización para spread=5000 para las redes neuronales de base radial en los datos de la membrana TAMI.

Pret	Spread	NMSE	R ²	R ² est
0	5000	0,025997	0,8746	0,8832
1	5000	0,025989	0,8748	0,8832

Se observa que apenas hay variación entre ambas simulaciones, se va escoger el de pretratamiento 1 ya que presenta valores de los parámetros ligeramente mejores que para los del pretratamiento 0.

Los resultados de la simulación de la red neuronal se muestran en las figuras de la 118 a la 145.

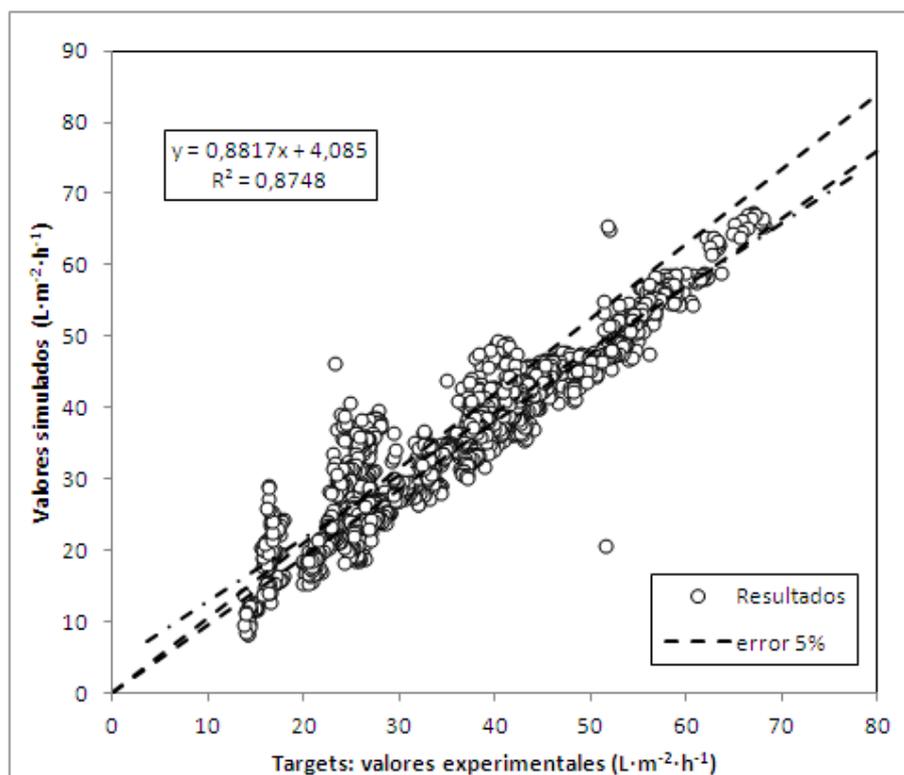


Figura 118: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

Resultados para ensayos con concentración de 5 g/L

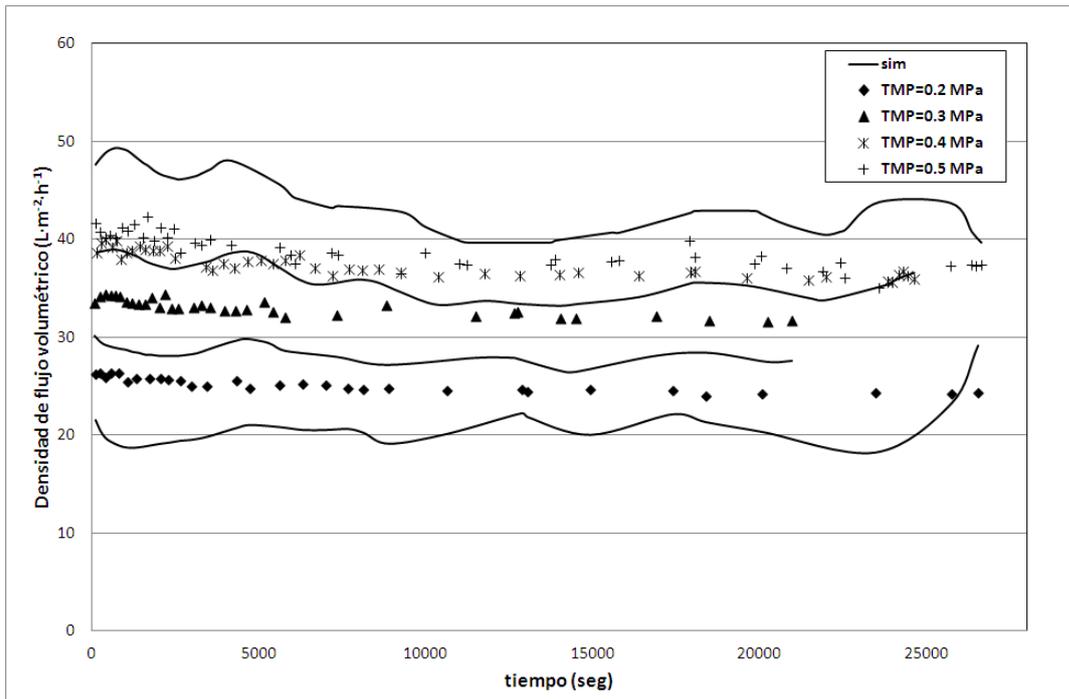


Figura 119: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

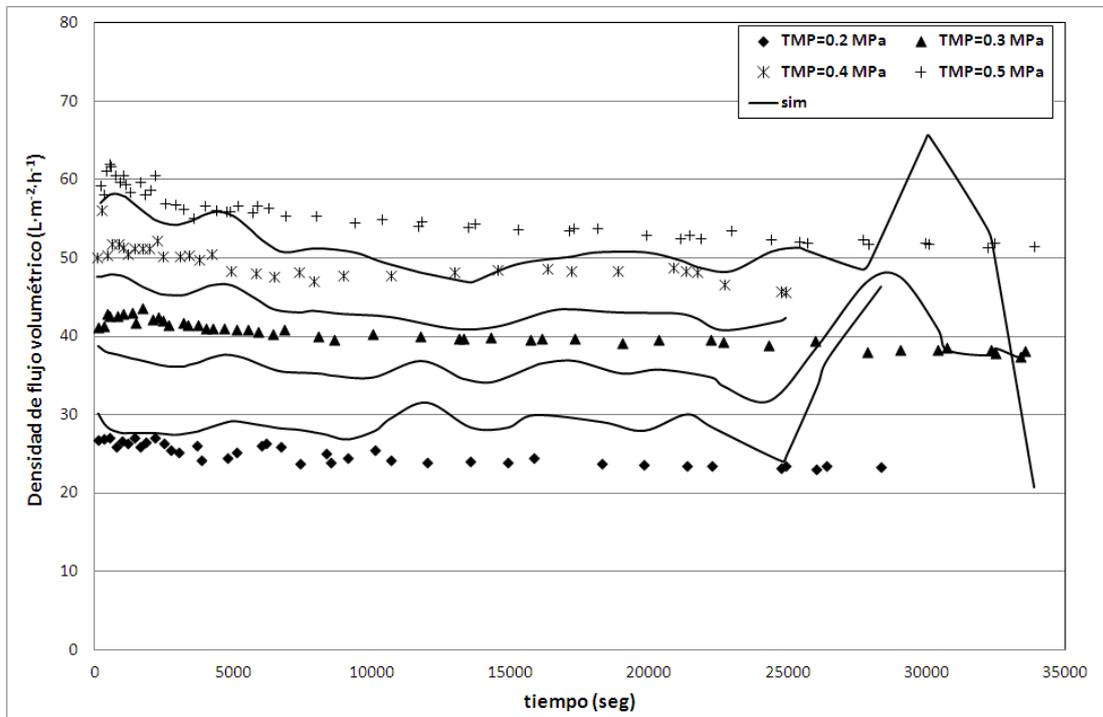


Figura 120: Resultados de la simulación de la red para CFV=2 m/s y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

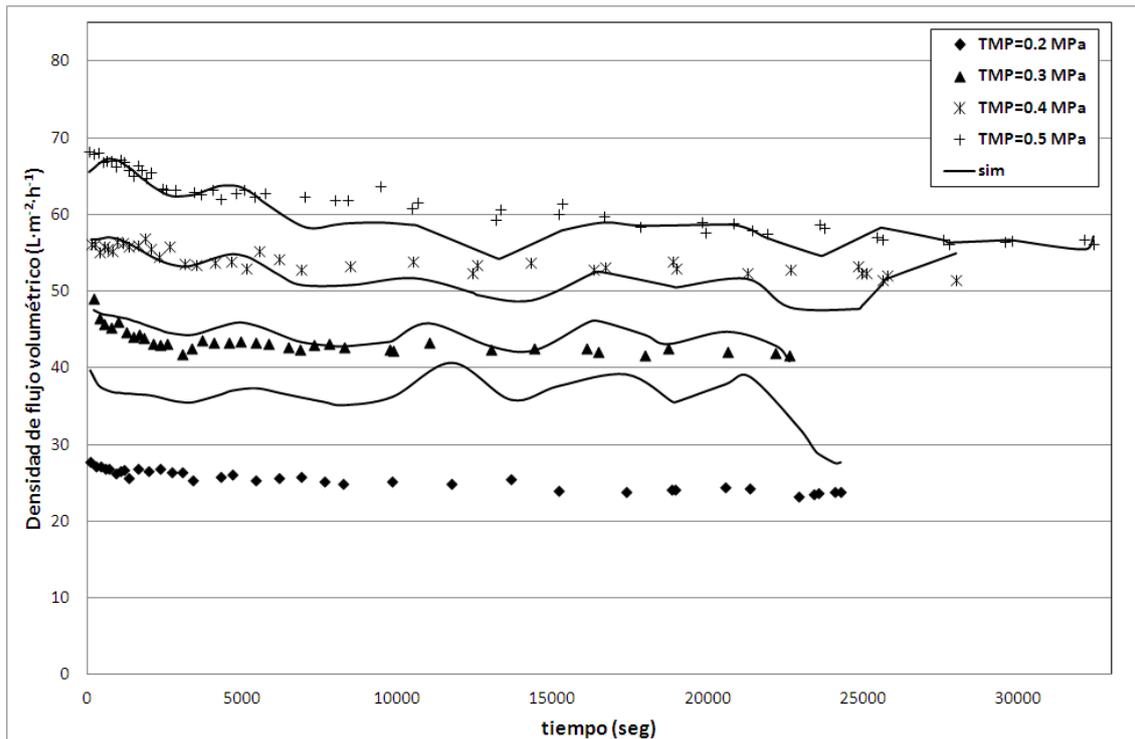


Figura 121: Resultados de la simulación de la red para CFV=3 m/s y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

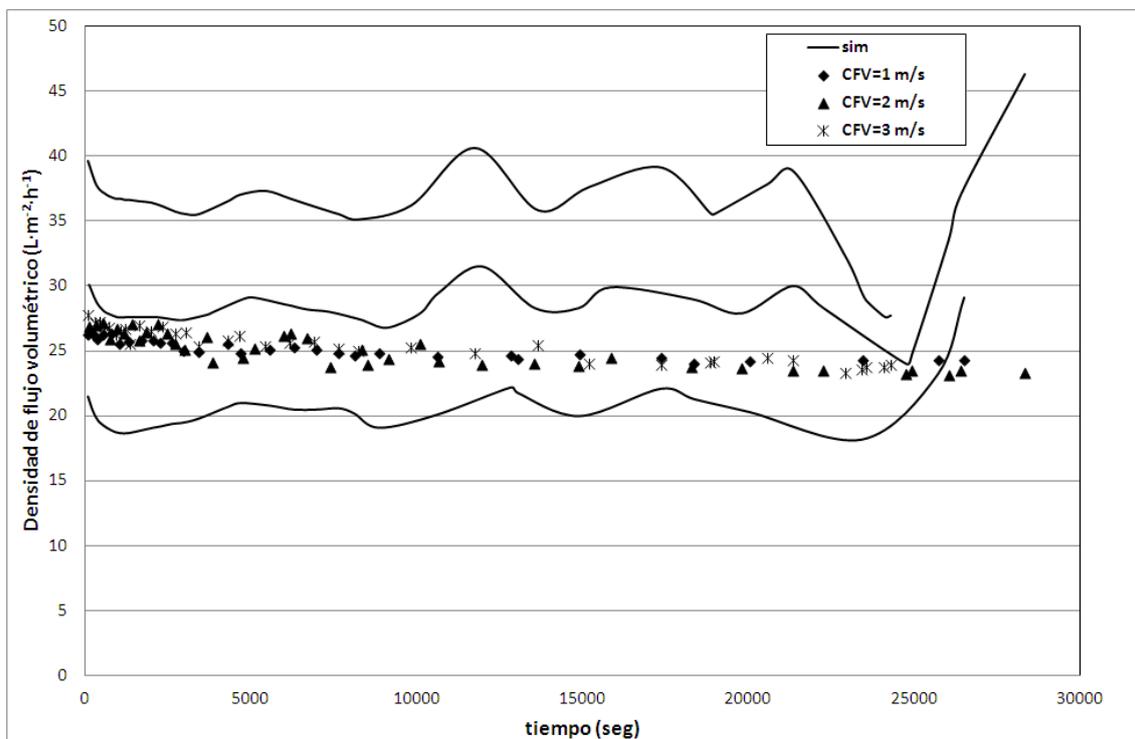


Figura 122: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

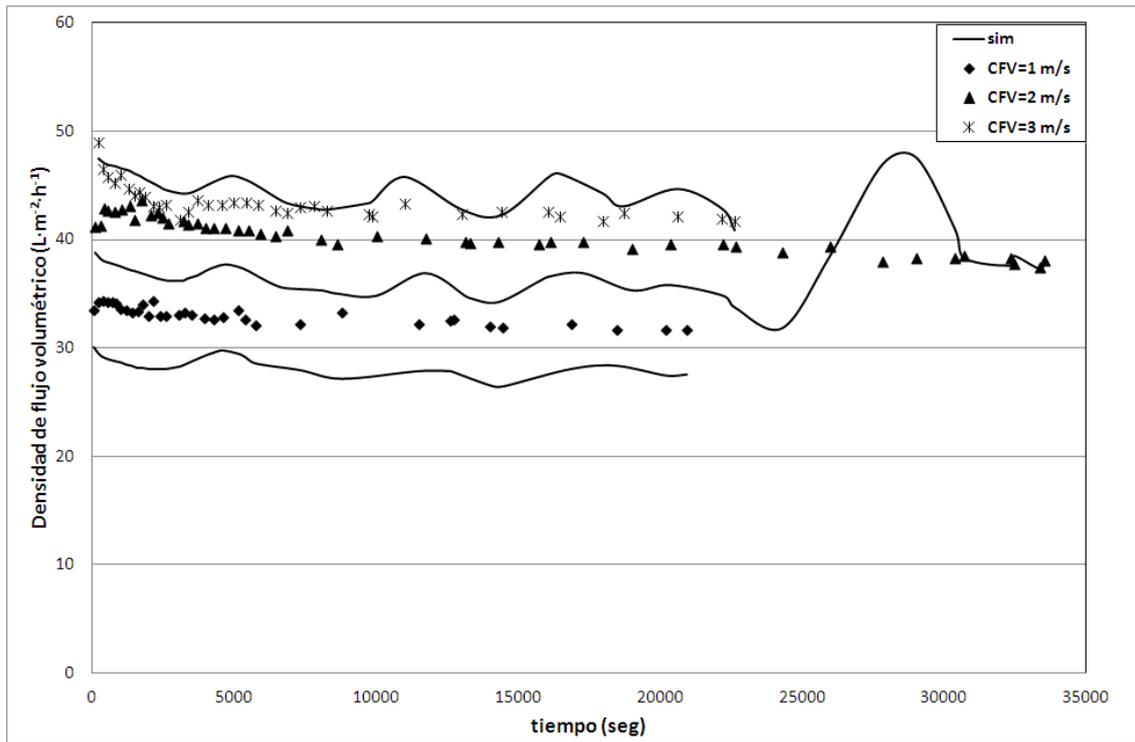


Figura 123: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

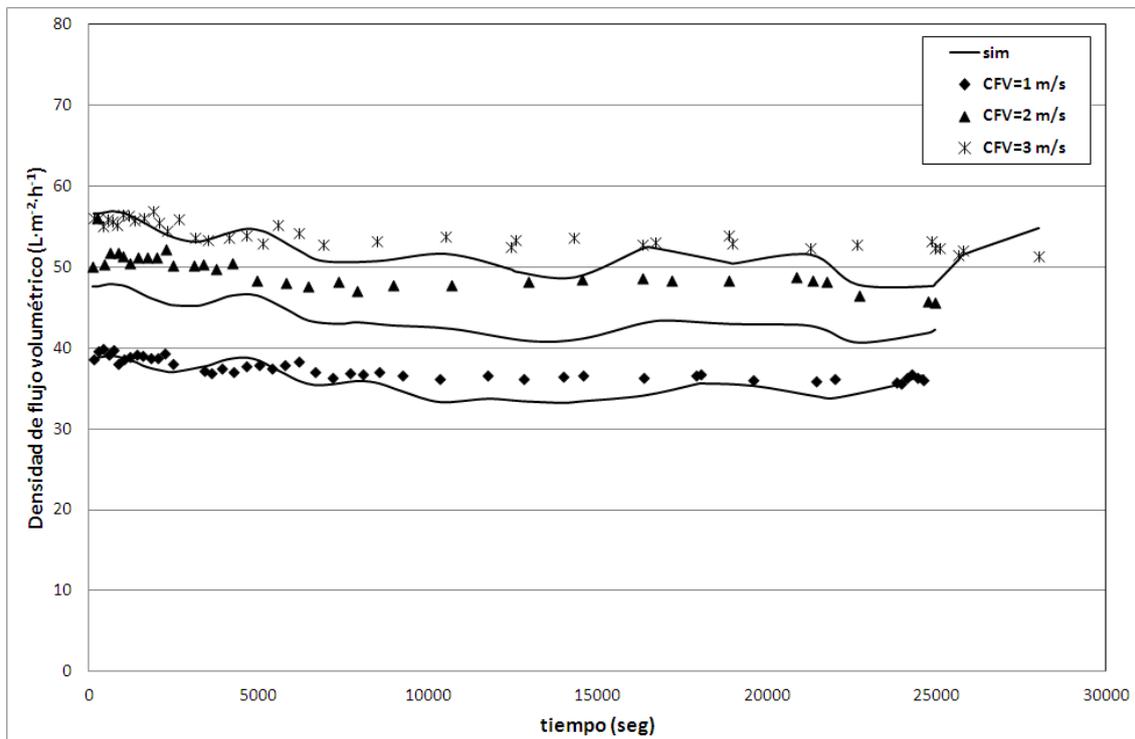


Figura 124: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

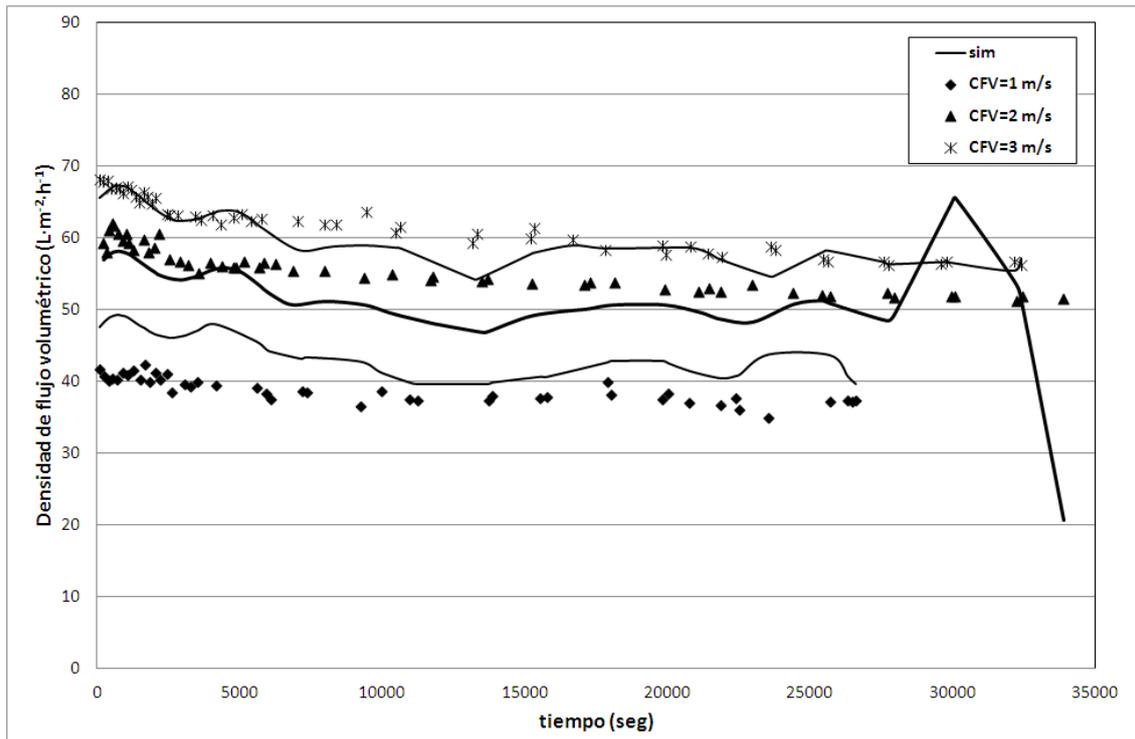


Figura 125: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 5 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

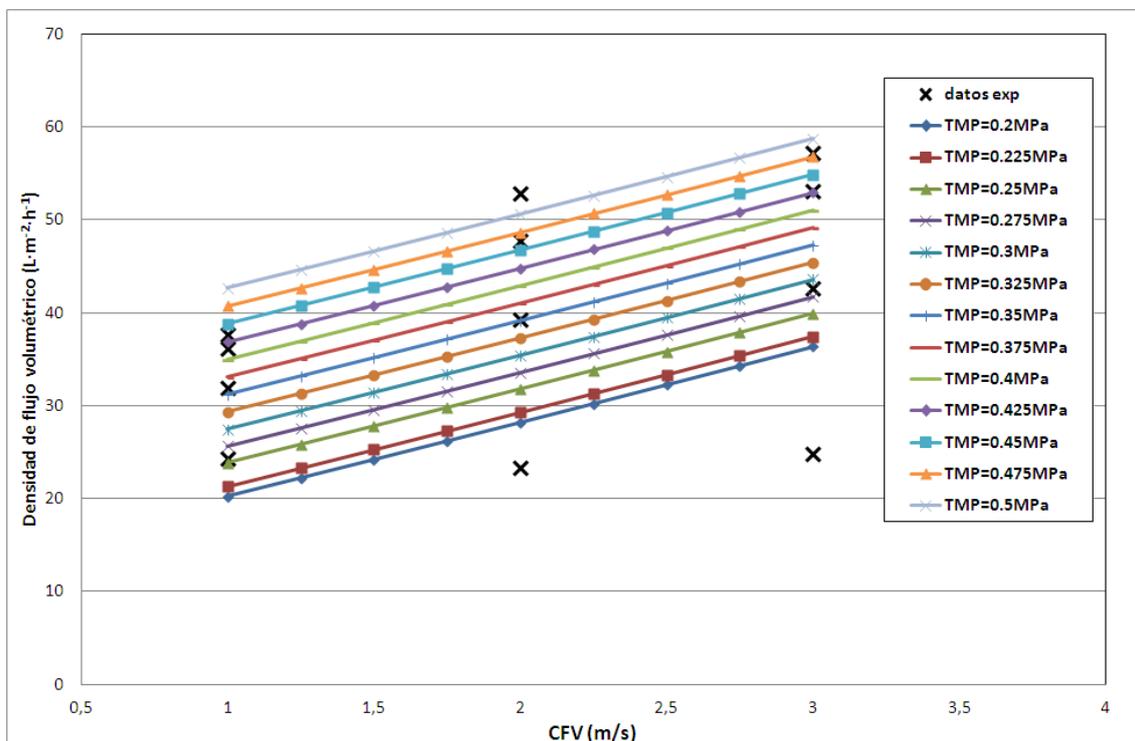


Figura 126: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 5 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

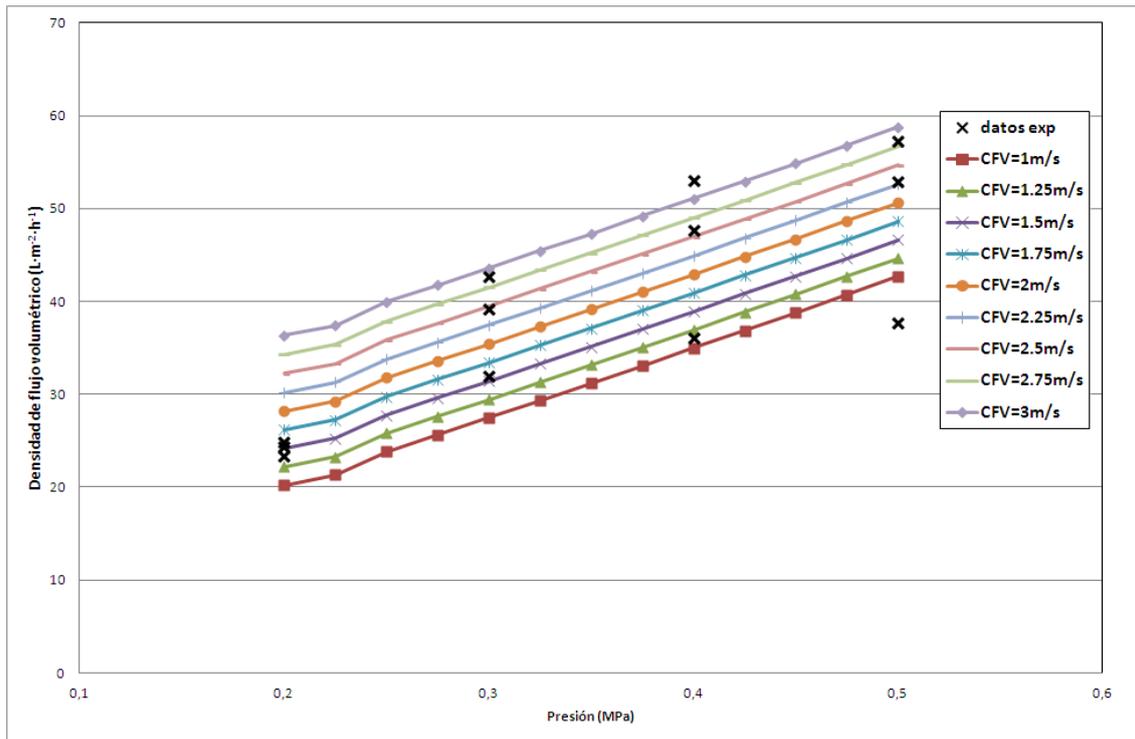


Figura 127: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 5 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

Resultados para ensayos con concentración 10 g/L

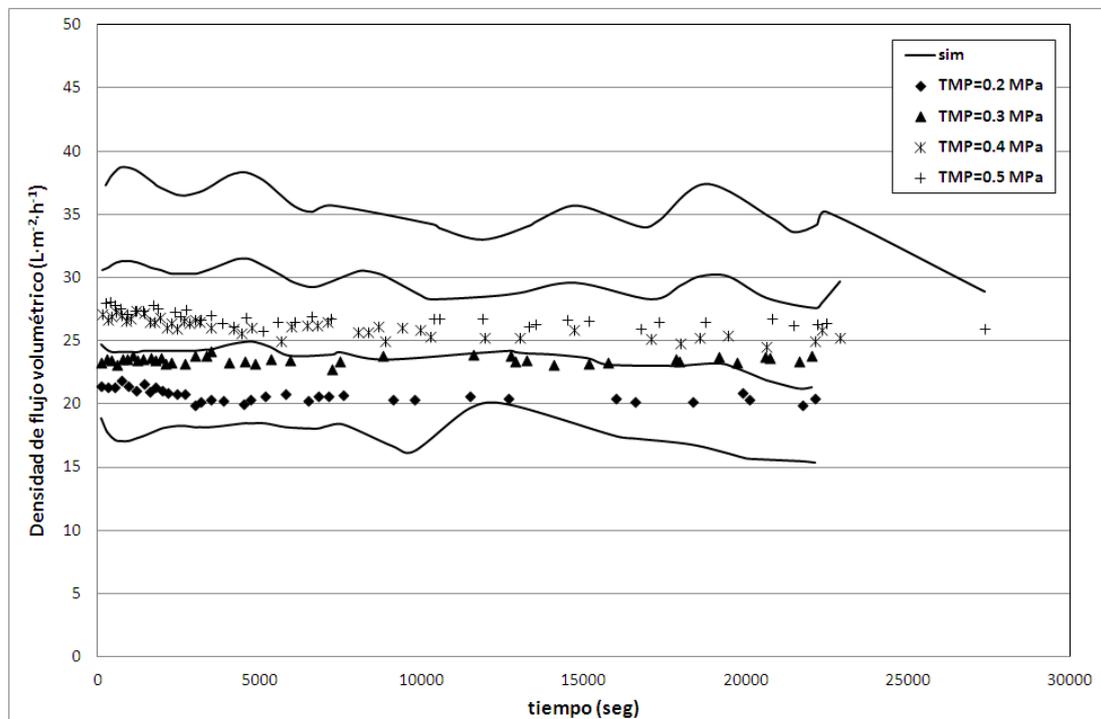


Figura 128: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

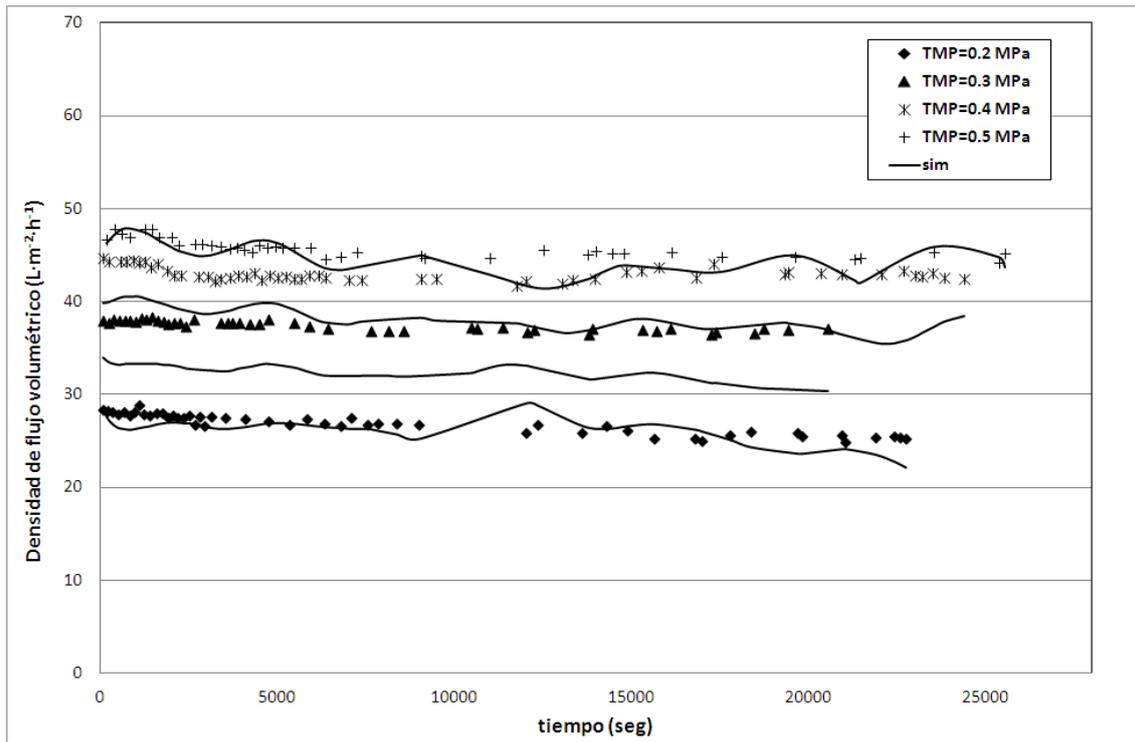


Figura 129: Resultados de la simulación de la red para CFV=2m/s y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

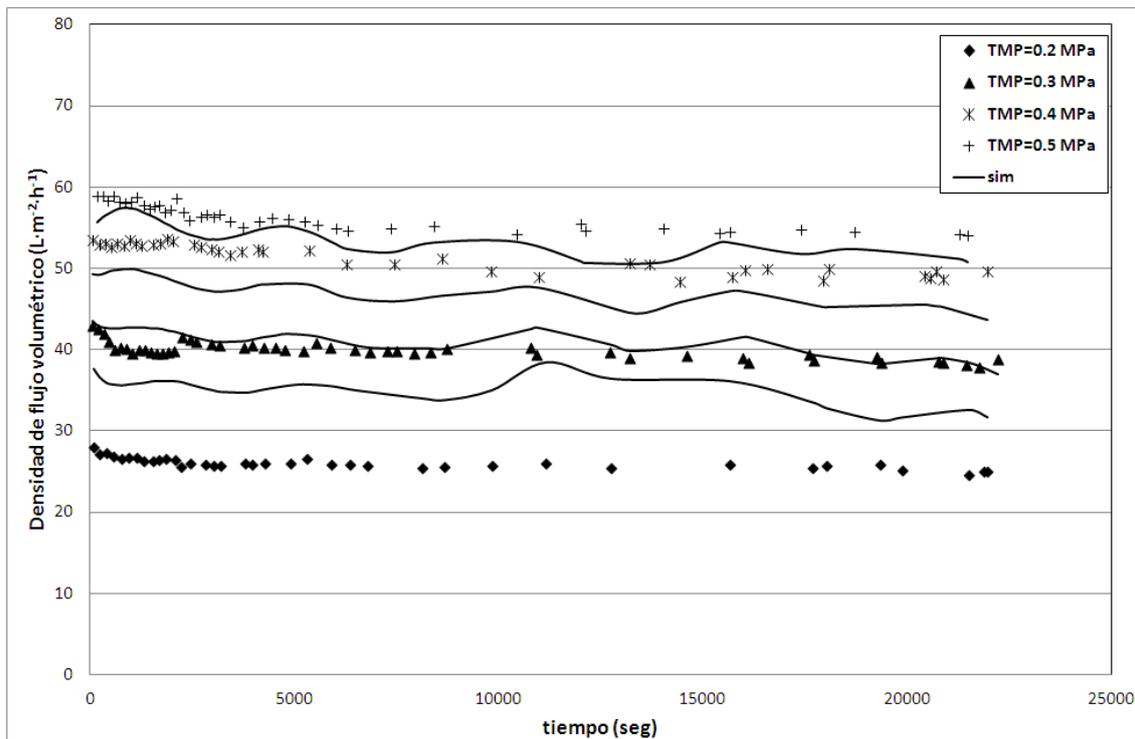


Figura 130: Resultados de la simulación de la red para CFV=3m/s y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

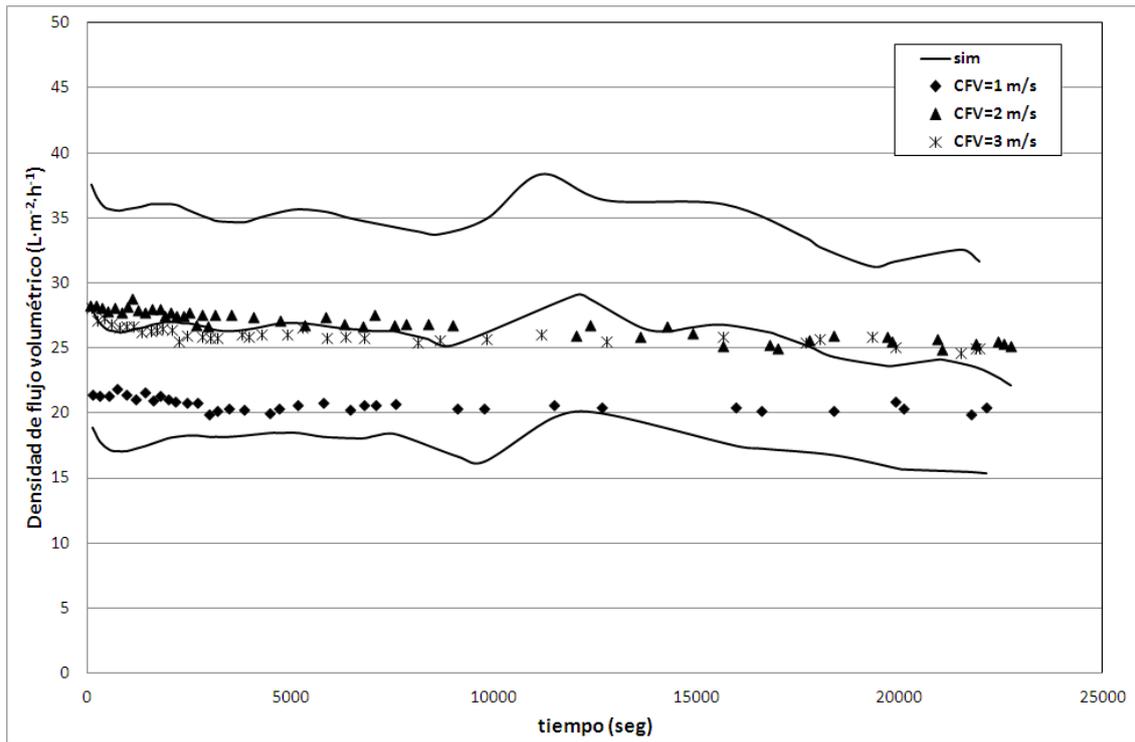


Figura 131: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

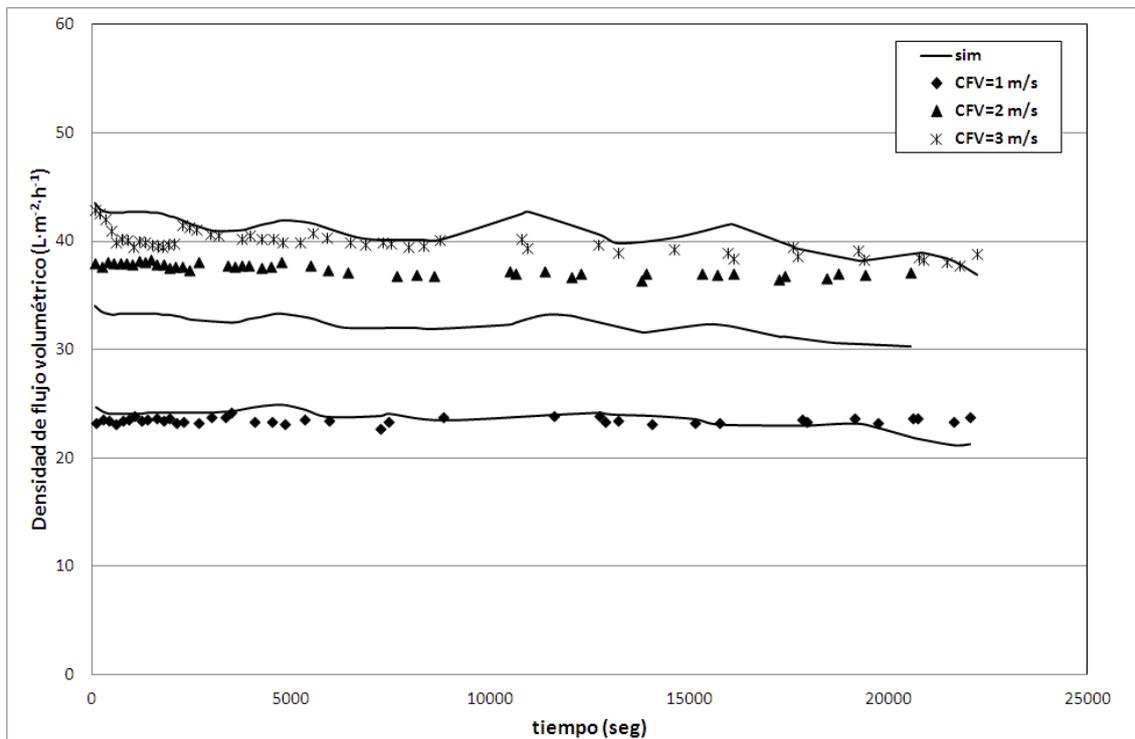


Figura 132: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

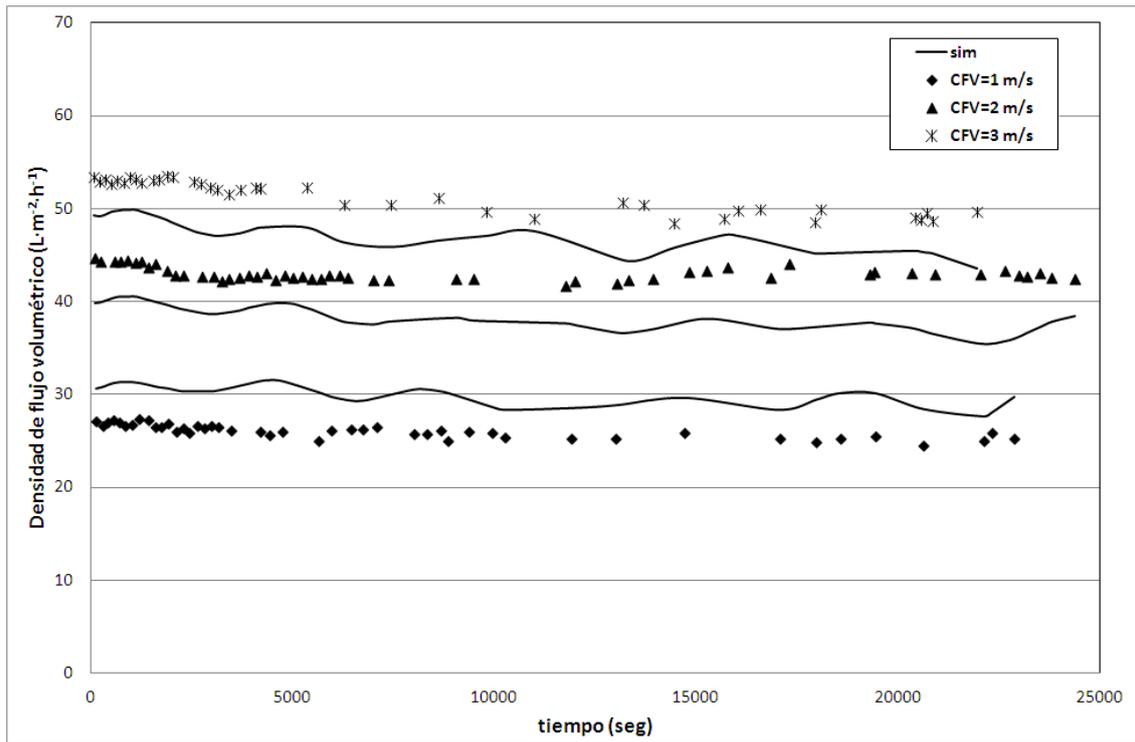


Figura 133: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

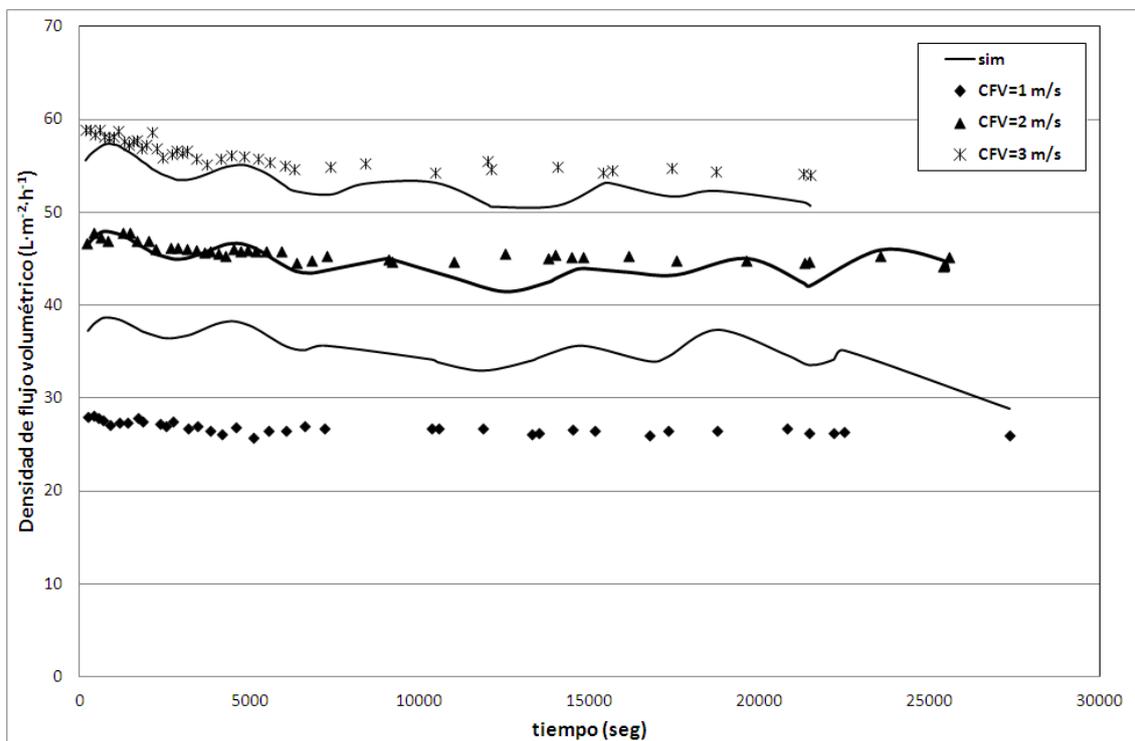


Figura 134: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 10 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

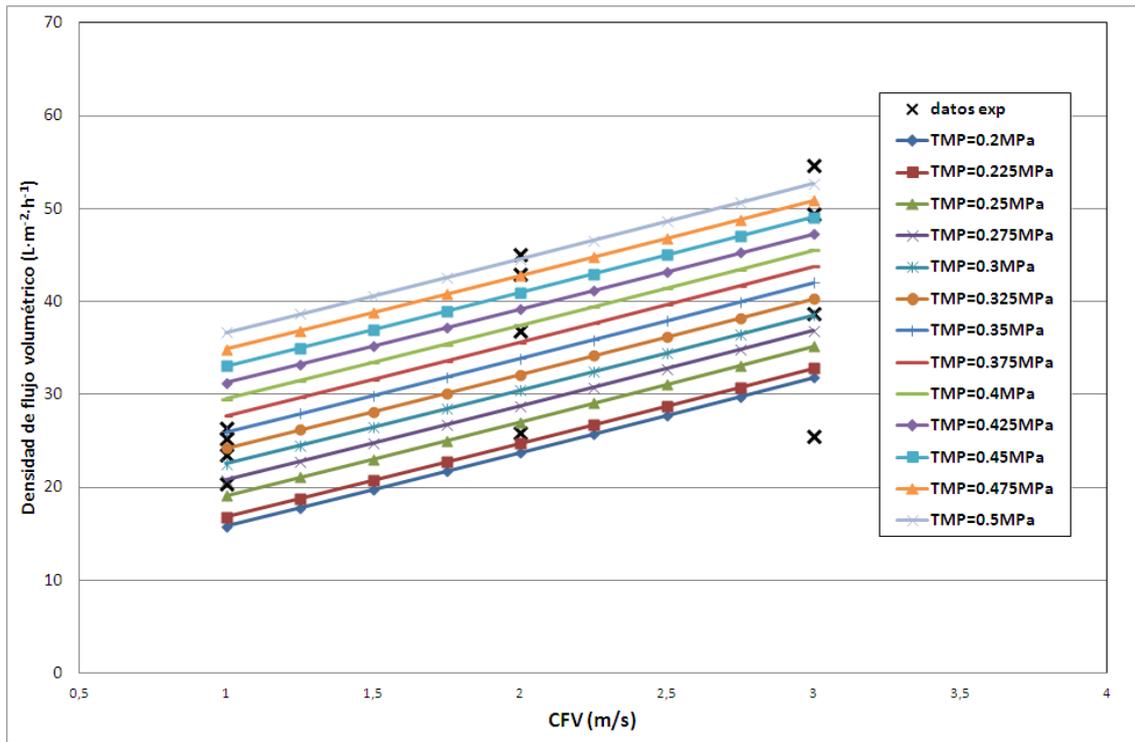


Figura 135: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 10 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

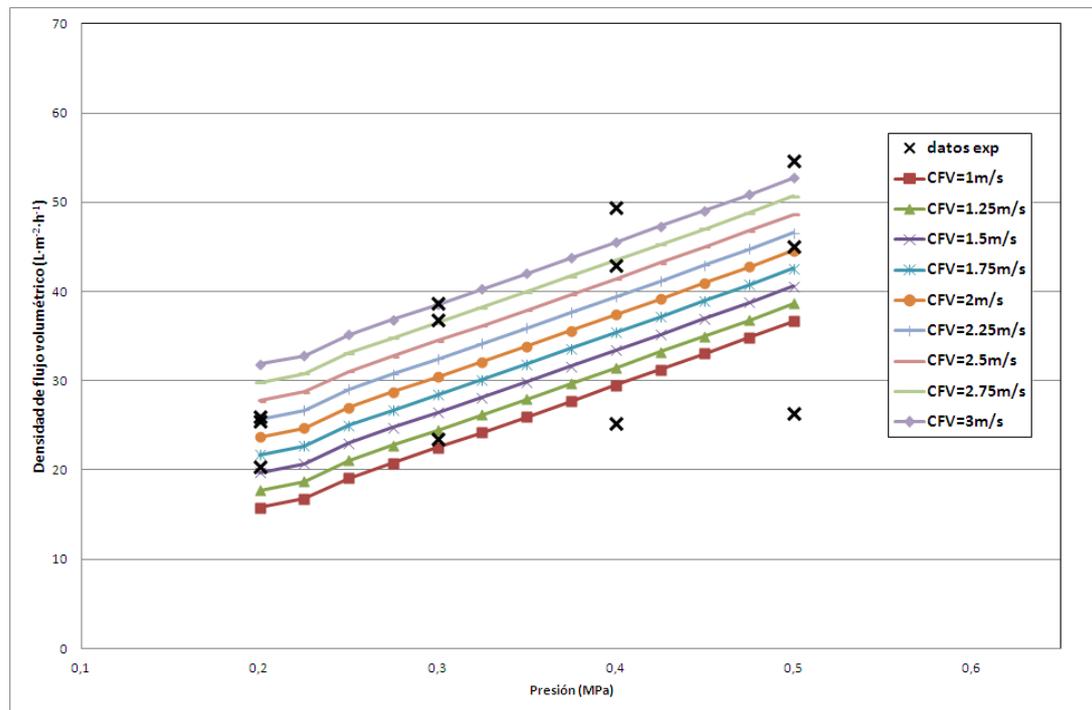


Figura 136: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 10 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

Resultados para los ensayos con concentración de 15 g/L

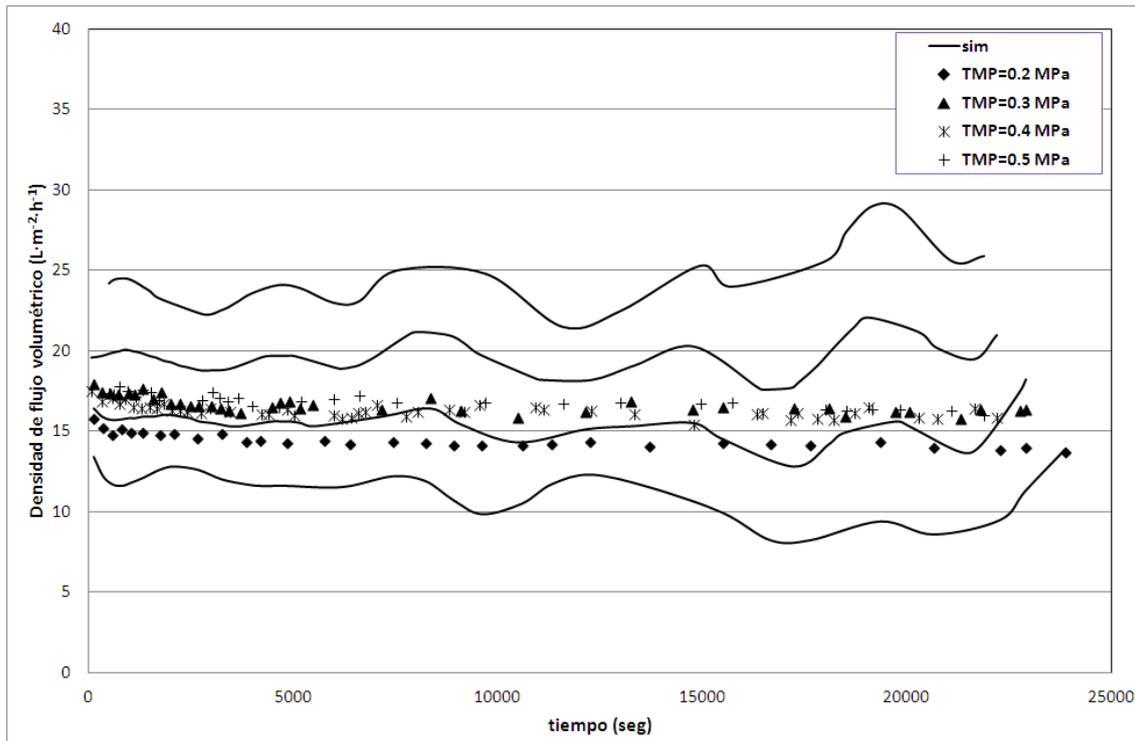


Figura 137: Resultados de la simulación de la red para CFV=1m/s y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

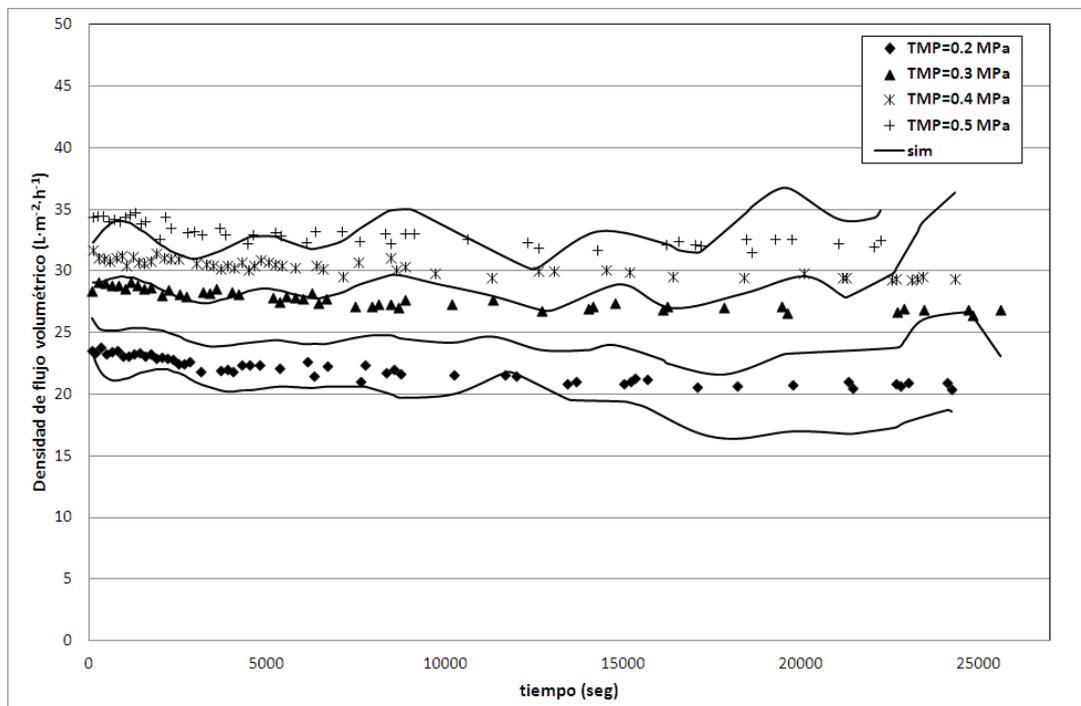


Figura 138: Resultados de la simulación de la red para CFV=2m/s y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

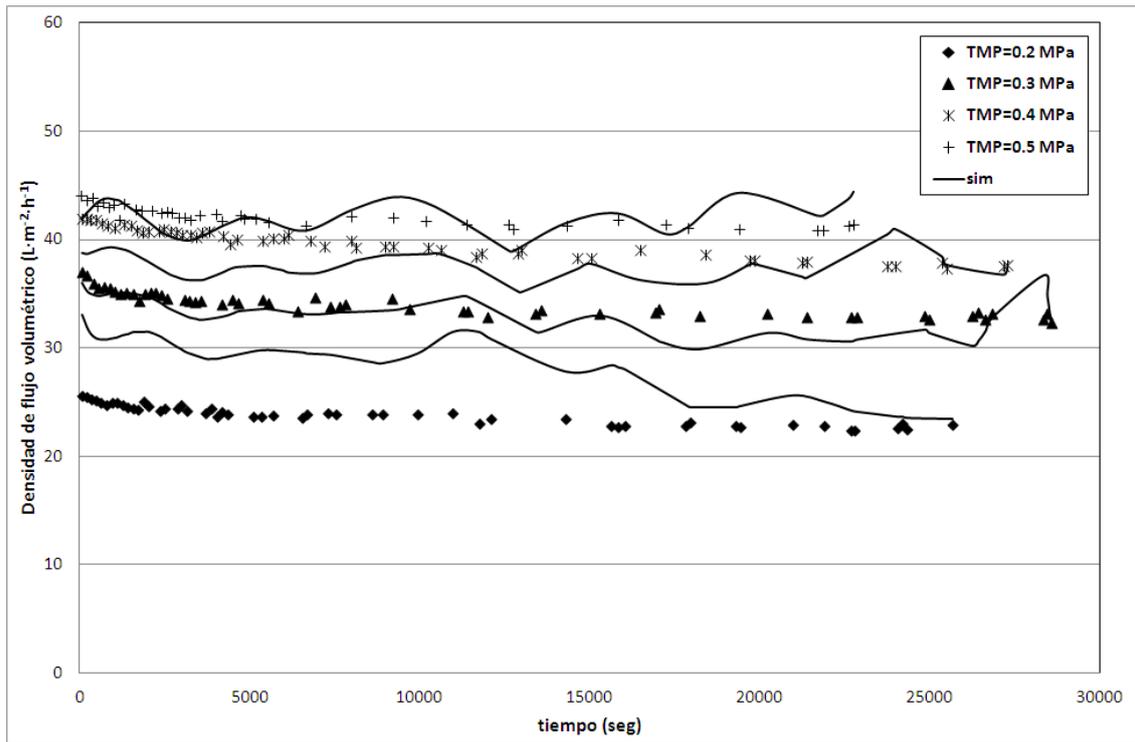


Figura 139: Resultados de la simulación de la red para CFV=3 m/s y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

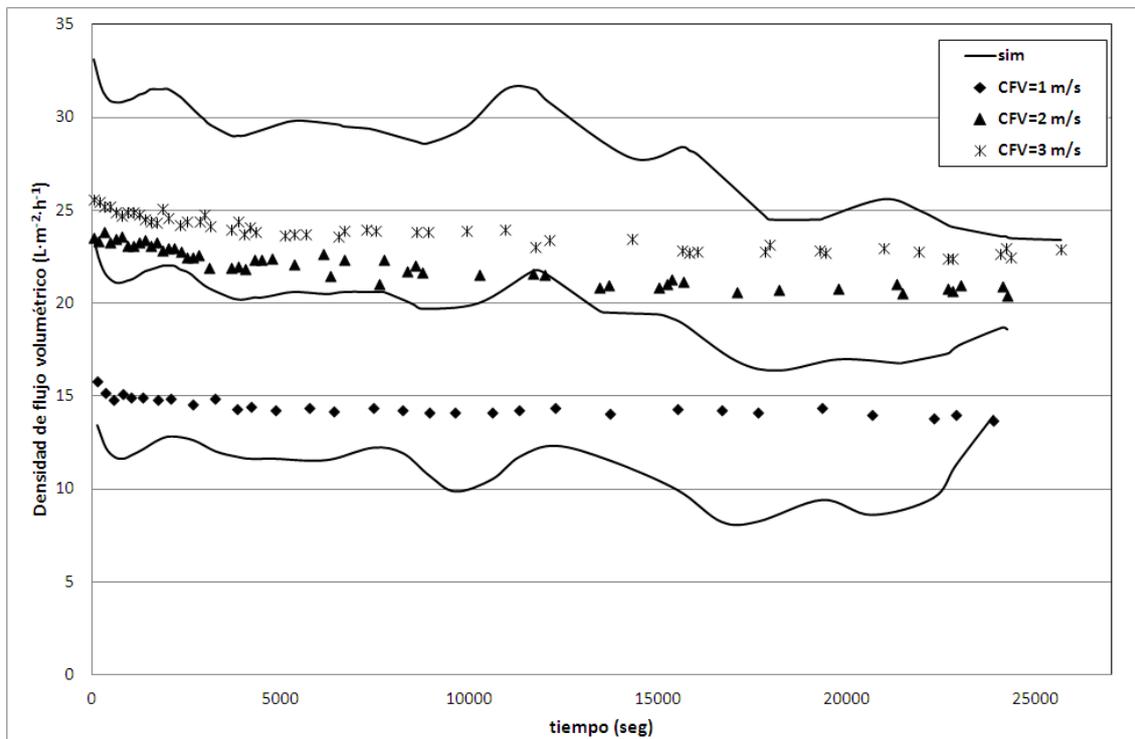


Figura 140: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.2 MPa y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

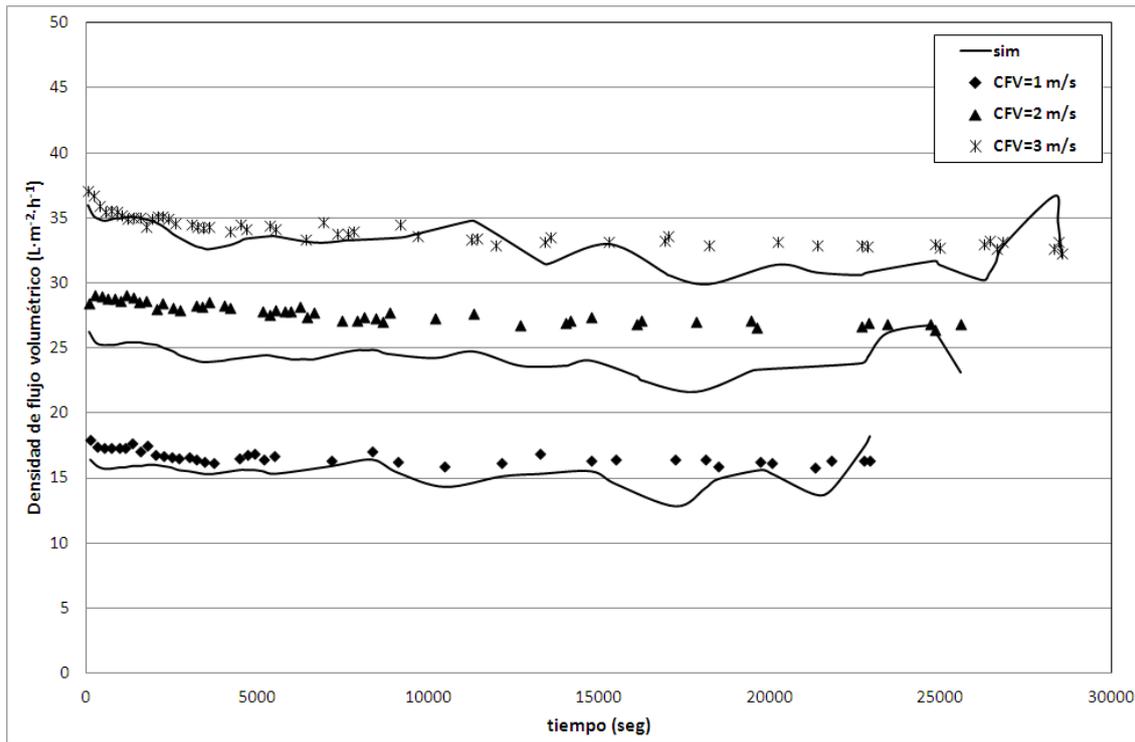


Figura 141: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.3 MPa y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

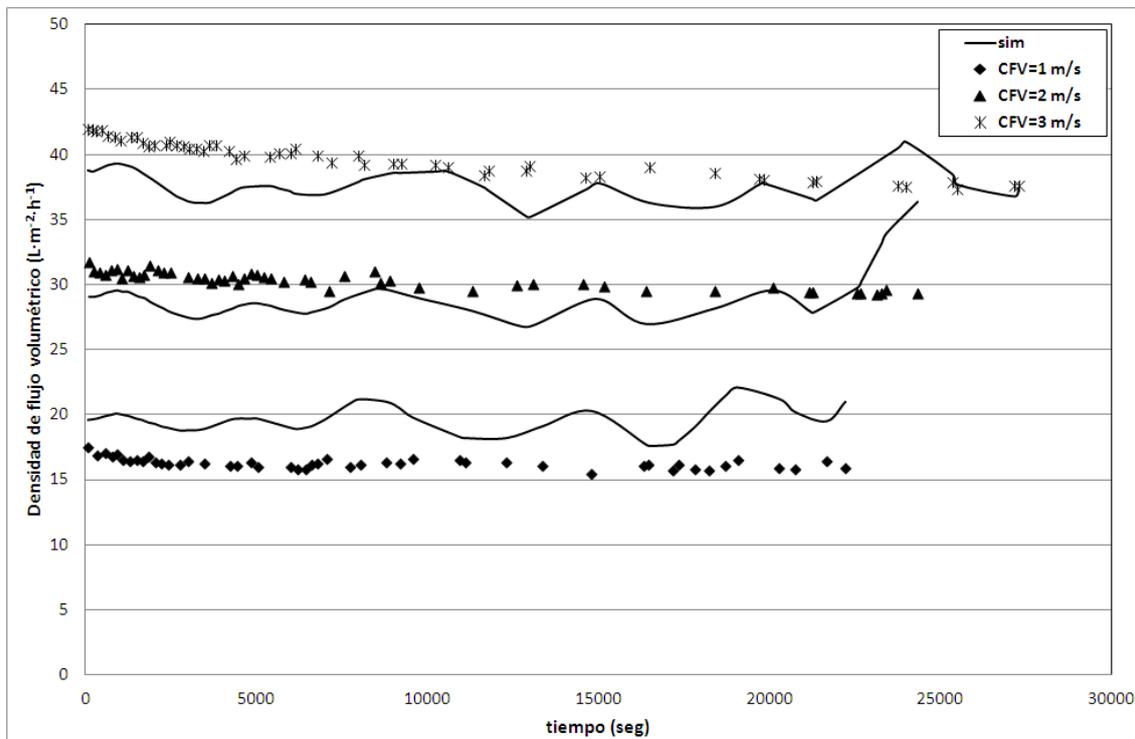


Figura 142: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.4 MPa y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

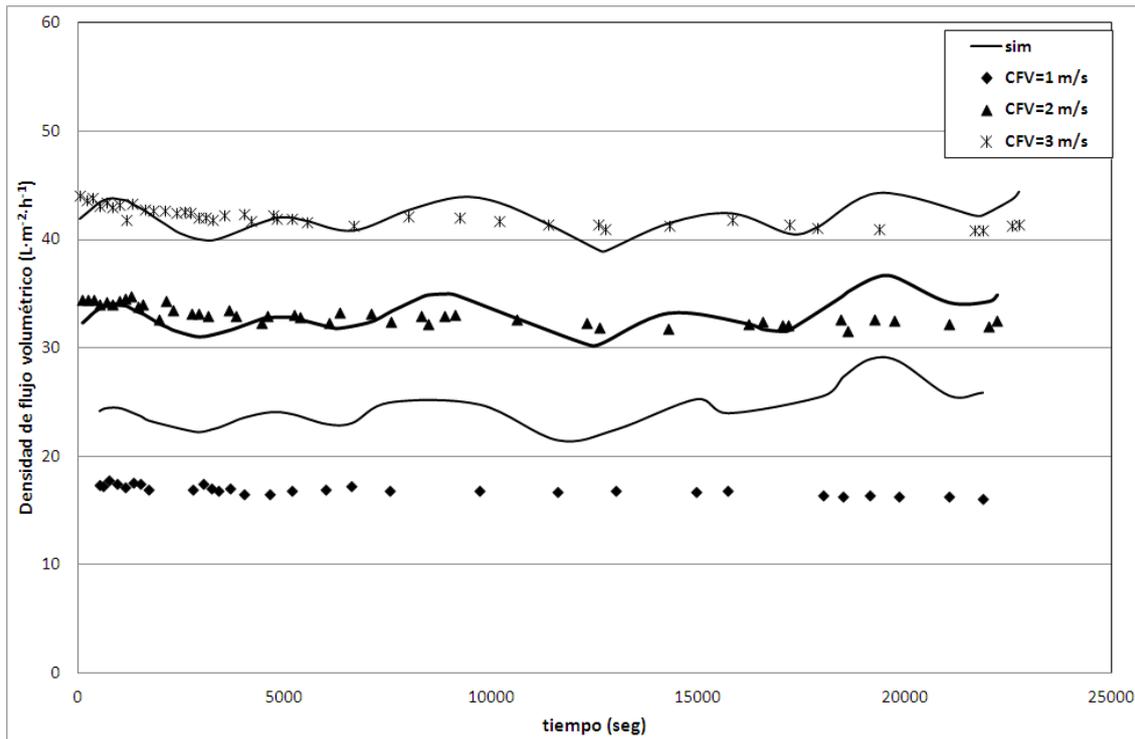


Figura 143: Resultados de la simulación de la red para TMP=0.5 MPa y concentración 15 g/l. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

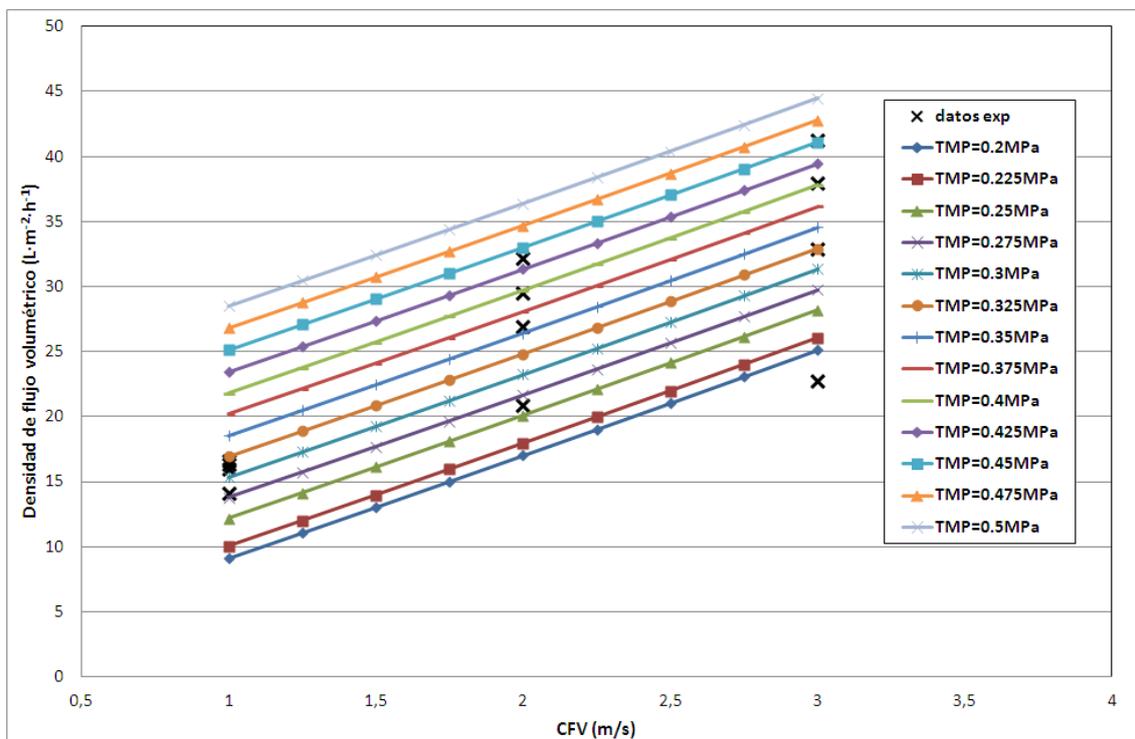


Figura 144: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 15 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

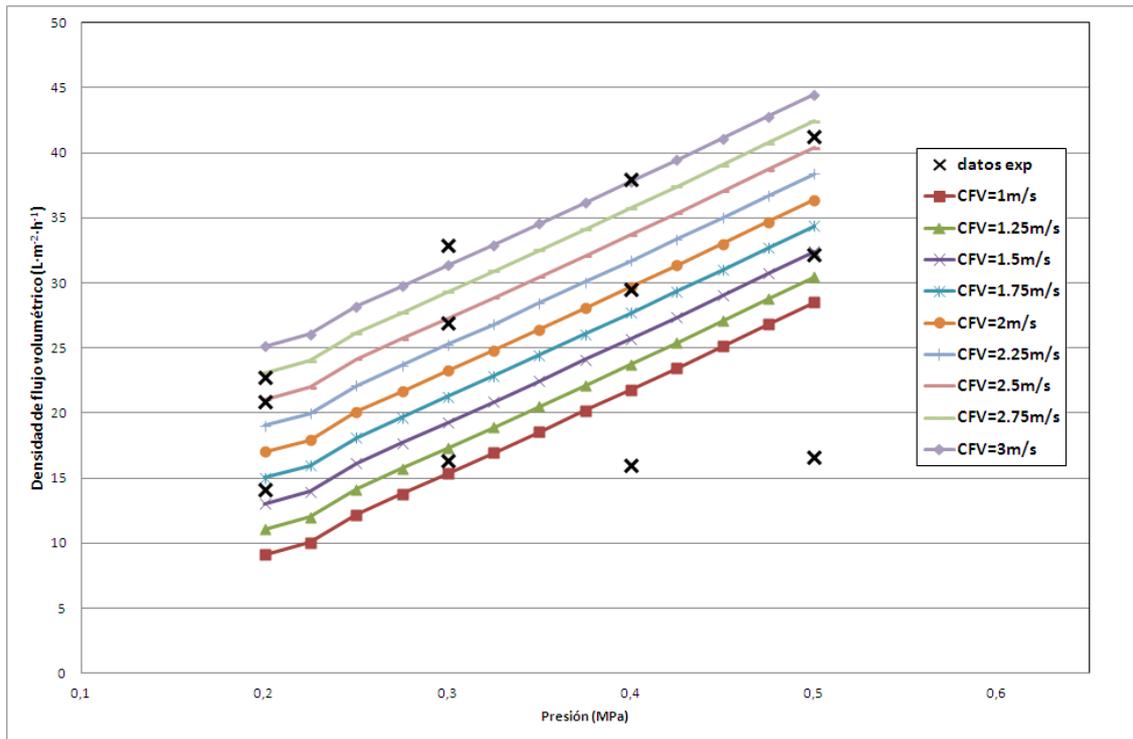


Figura 145: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios con concentración 15 g/L. Red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y spread 5000 (Pret 1 – Spread 5000) para los datos de la membrana TAMI.

Los resultados obtenidos para todas las concentraciones muestran ajustes inaceptables tanto con respecto de los datos experimentales como de la tendencia que estos presentan. El hecho de que hay ensayos, incluso puntos dentro de un ensayo donde la simulación de la red neuronal presenta valores cercanos al experimental hace suponer que se trata de puntos empleados en la fase de entrenamiento de la red, de manera que se puede suponer que las redes con buenos ajustes de los datos (que no de la tendencia que los datos muestran) son ensayos con un elevado de puntos introducidos en el entrenamiento de la red neuronal.

Los ajustes de la red neuronal a los datos estacionarios muestran tendencias lineales (o casi lineales) para la presión transmembranal y para la velocidad tangencial. Se observa que las simulaciones de la red neuronal no se ajustan a los resultados experimentales estacionarios.

Los motivos de la incapacidad de la red neuronal de base radial para ajustar los datos experimentales para la membrana TAMI son los mismos que los que se han explicado para los desajustes de las redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP. De esta manera se identifica el ruido que presentan los datos como la causa de que el estudio de la aplicación de las redes neuronales de base radial, tanto para los resultados de la membrana CARBOSEP como para los resultados de la membrana TAMI, no haya producido resultados aceptables.

4.5. Simulación de nuevos ensayos a condiciones no ensayadas

A. Selección de las condiciones no ensayadas:

A partir de la Tabla 18, se van a escoger 12 nuevas condiciones de ensayos teniendo en cuenta que no deben ni repetirse las condiciones de ensayo experimentales ni crear por duplicado nuevos ensayos con las mismas condiciones.

La selección de las condiciones de los nuevos ensayos se va a realizar de manera aleatoria. Teniendo en cuenta esto, los resultados obtenidos se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 42: Condiciones de presión y velocidad tangencial para los ensayos simulados.

Nuevo ensayo	TMP (MPa)	CFV (m/s)
1	0.10	2.5
2	0.25	1.0
3	0.30	3.0
4	0.35	1.0
5	0.40	2.5
6	0.35	2.0
7	0.25	3.0
8	0.15	1.5
9	0.10	1.5
10	0.25	2.0
11	0.30	2.5
12	0.10	2.5

B. Simulación de los ensayos propuestos:

Aplicando la ecuación 5 para las condiciones de ensayo tiempos de ensayo comprendidos entre 0 y 8 horas, y aplicando valores interpolados para las densidades de flujo volumétricas inicial (J_0) y estacionaria (J_{pss}) y el parámetro K_{ICF} , se obtienen los siguientes resultados:

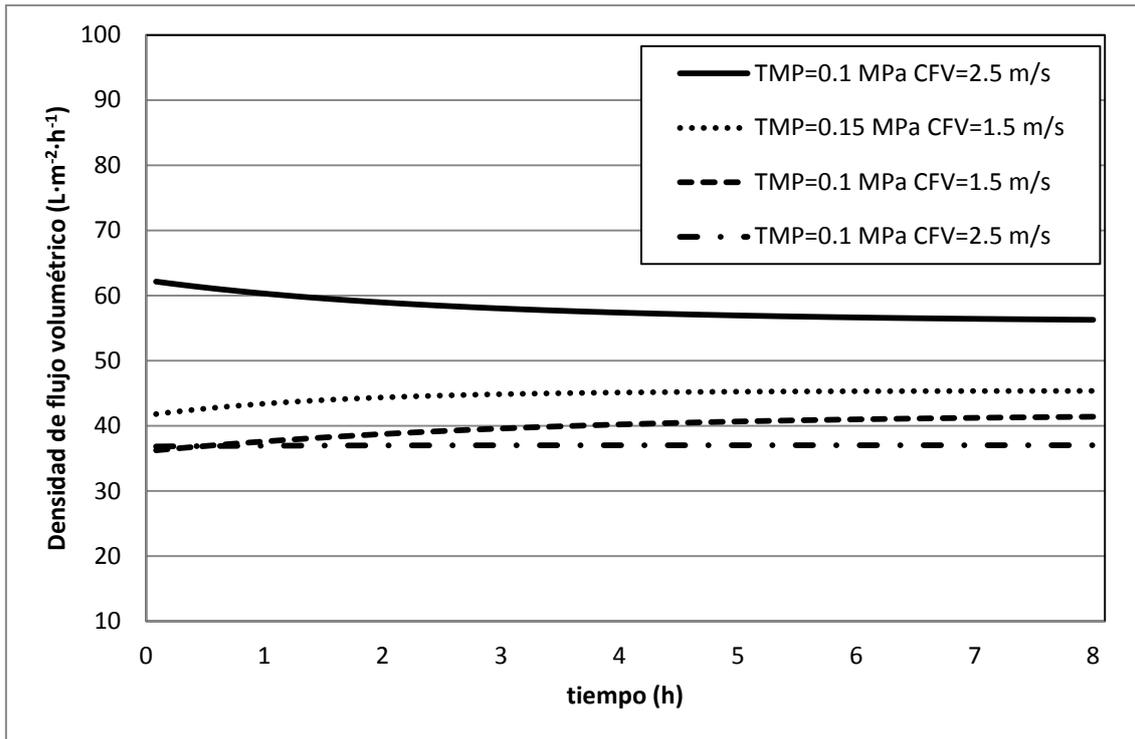


Figura 146: Ensayos simulados para TMP bajas (0.1-0.2 MPa) para la membrana CARBOSEP.

Se observa que los ensayos simulados para presiones y velocidades bajas muestran resultados dinámicos anómalos ya que presentan incrementos iniciales de la velocidad de flujo estacionaria.

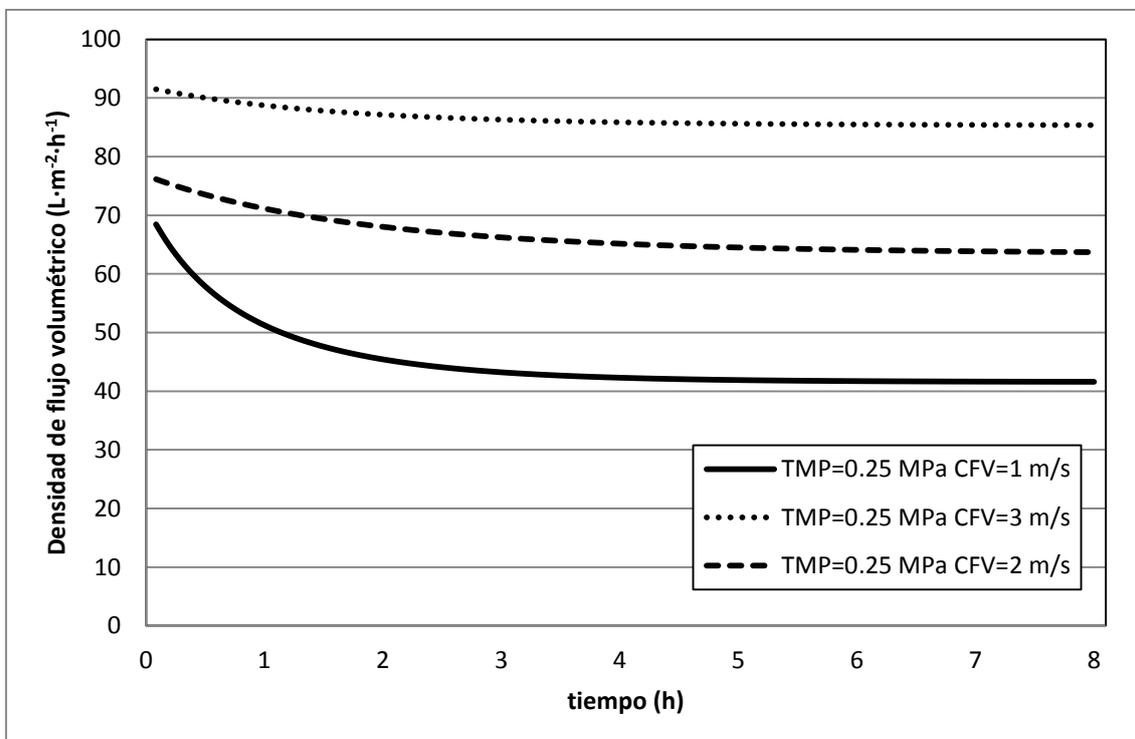


Figura 147: Ensayos simulados para TMP medias (0.2-0.3 MPa) para la membrana CARBOSEP.

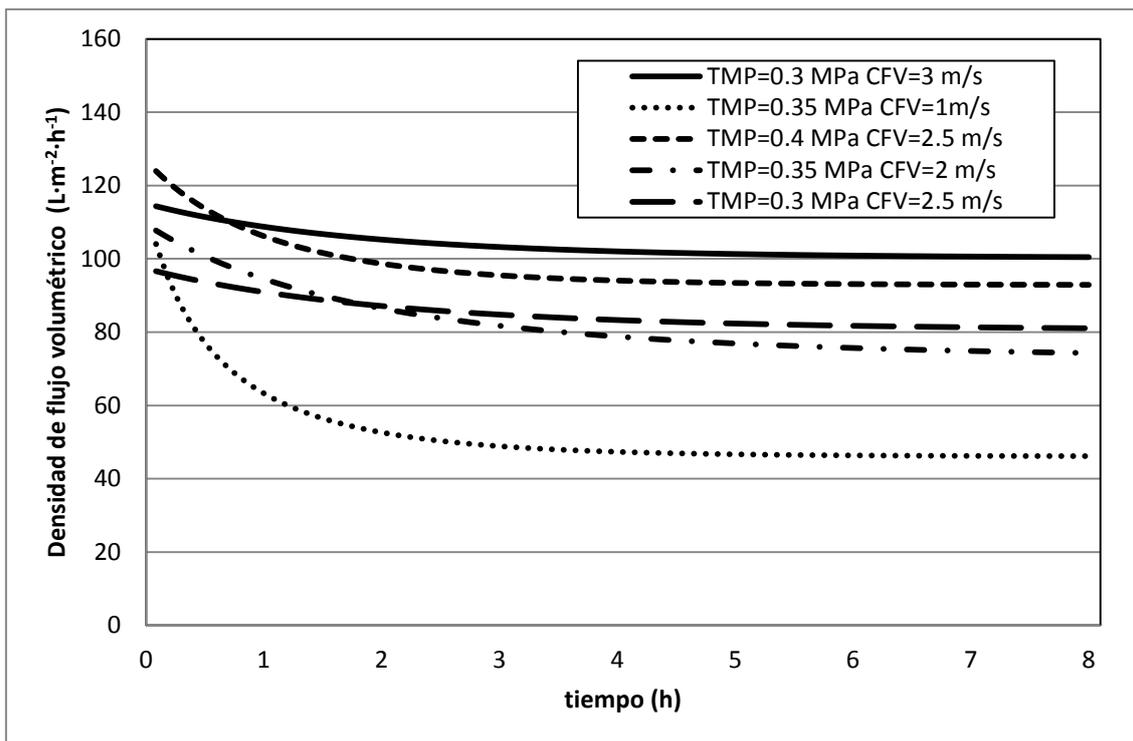


Figura 148: Ensayos simulados para TMP bajas (0.3-0.4 MPa) para la membrana CARBOSEP.

C. Obtención de las densidades de flujo estacionarias para las nuevas condiciones:

Finalmente los resultados obtenidos son los siguientes:

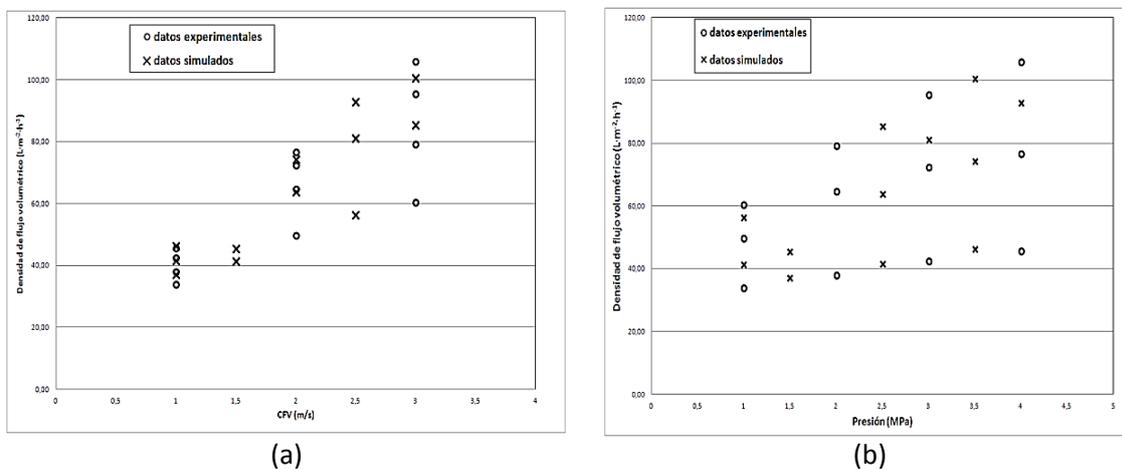


Figura 149: Resultados estacionarios experimentales (O) y resultados estacionarios para condiciones no ensayadas (X) para la membrana CARBOSEP. (a) Efecto de la velocidad tangencial; (b) efecto de la presión transmembranal.

4.6. Aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa a los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP con los ensayos simulados

Aplicando el mismo procedimiento empleado para la aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, en primer lugar se define la notación de los factores con los que se va a trabajar para el caso de aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa para los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP.

- Pret: indica el pretratamiento realizado.
- Pesos: indica la inicialización de los pesos de la red.
- Neur: indica el número de neuronas de la capa intermedia.

La descripción de la notación empleada se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 43: Notación de los factores de la red neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
	2	Modelo del ensuciamiento dinámico del sistema
	3	Pretratamiento doble
Pesos	0	Pesos iniciales nulos
	1	Pesos iniciales aleatorios
Neur	5-6-7-8-9-10	-

4.6.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios

Puesto que se trabajar directamente con los datos estacionarios se va analizar directamente el coeficiente de regresión para los datos estacionarios. El resumen del ANOVA para el $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 44: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ de los resultados de la red neuronal perceptrón multicapa para los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP.

Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
MAIN EFFECTS					
A:Pret	7.15539	3	2.385130	19.10	0.0000
B:Pesos	6.09947	1	6.099470	48.83	0.0000
C:Neur	1.15635	5	0.231271	1.85	0.1101

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
INTERACTIONS					
AB	1.15100	3	0.383666	3.07	0.0314
AC	2.04057	15	0.136038	1.09	0.3767
BC	1.51313	5	0.302626	2.42	0.0409
ABC	1.48485	15	0.098990	0.79	0.6829
RESIDUAL	11.9905	96	0.124901		
TOTAL (CORRECTED)	32.5913	143			

Se observa que la inicialización de los pesos y el pretratamiento empleado, como factores simples, y la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia y el pretratamiento empleado y la interacción entre la inicialización de los pesos de la red y el pretratamiento empleado, presentan efectos estadísticamente significativos sobre la media de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$, asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 150 muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor pretratamiento del análisis de varianza realizado:

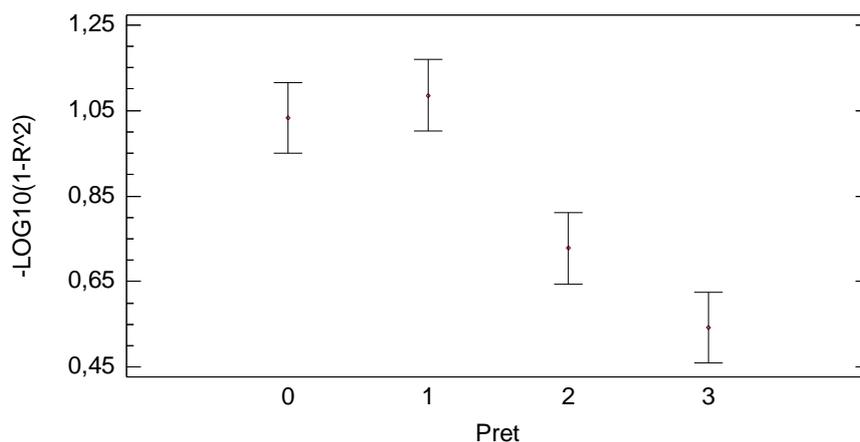


Figura 150: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 151 muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor pesos iniciales de la red neuronal del análisis de varianza realizado:

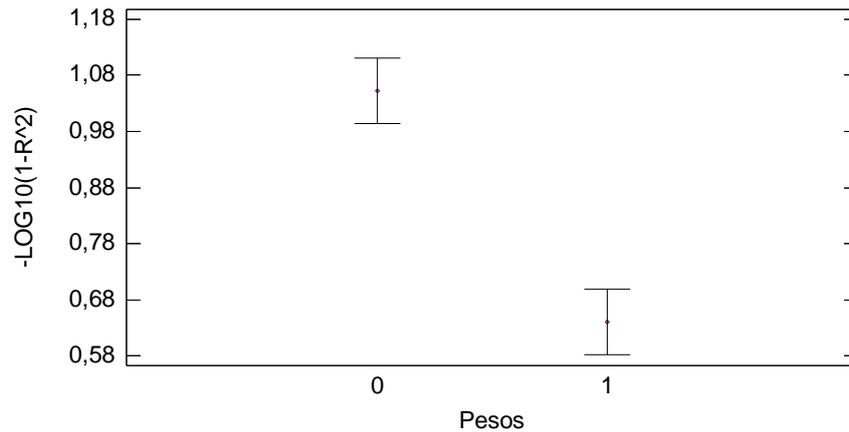


Figura 151: Efecto de la inicialización de los pesos de la red neuronal sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 152 muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal del análisis de varianza realizado:

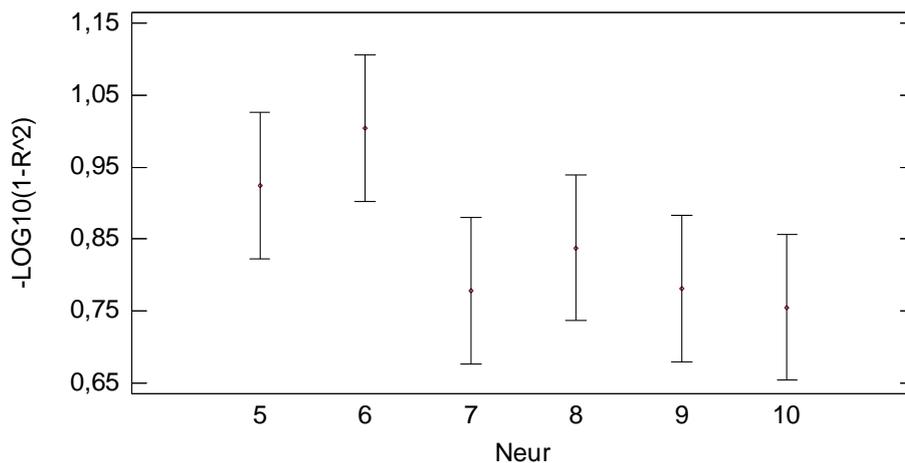


Figura 152: Efecto del numero de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2)]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 153 muestra las medias de los niveles de la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia y la inicialización de los pesos de la red del análisis de varianza realizado:

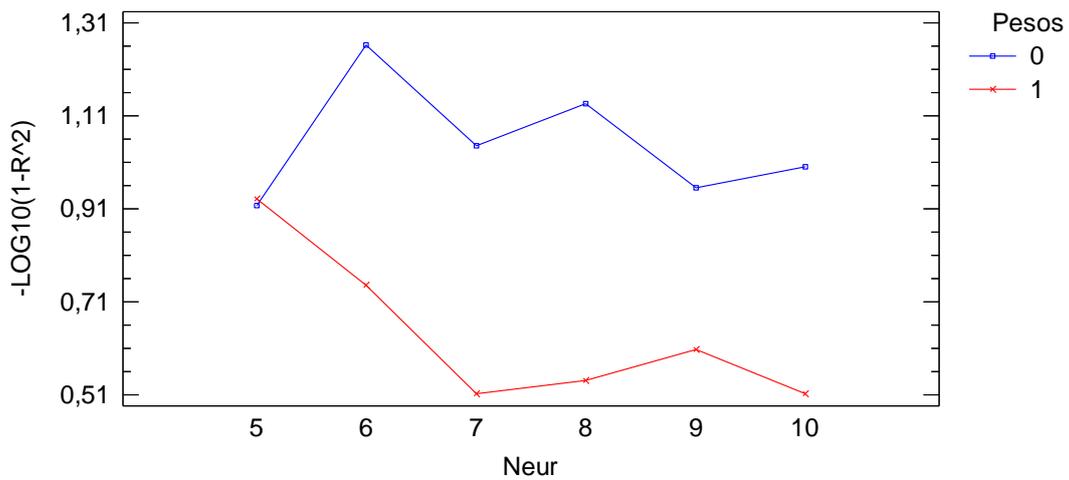


Figura 153: Efecto de la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia y la inicialización de los pesos de la red neuronal sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 154 muestra las medias de los niveles de la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia y el pretratamiento del análisis de varianza realizado:

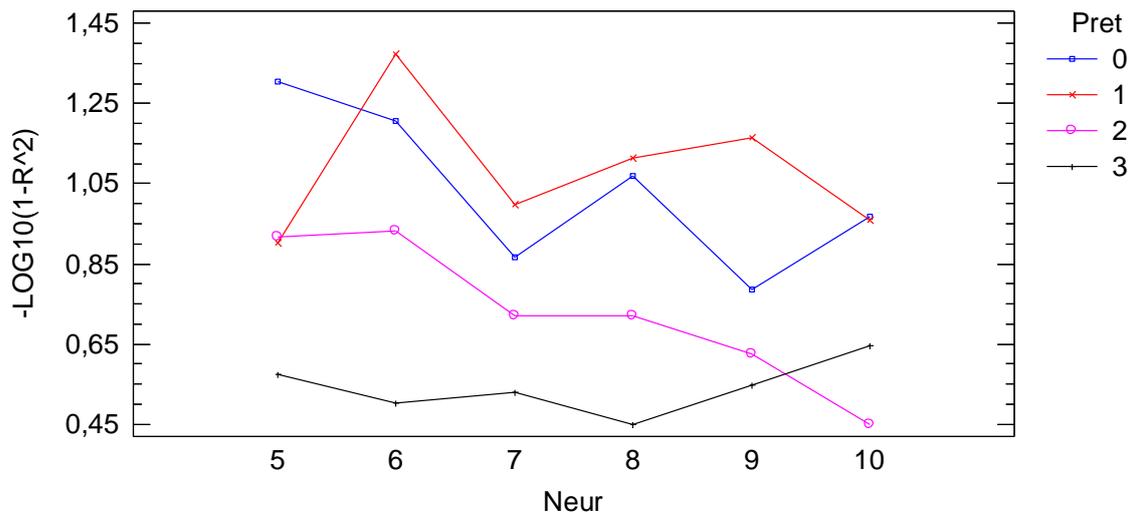


Figura 154: Efecto de la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal y el pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 155 muestra las medias de los niveles de la interacción entre el pretratamiento y la inicialización de los pesos de la red del análisis de varianza realizado:

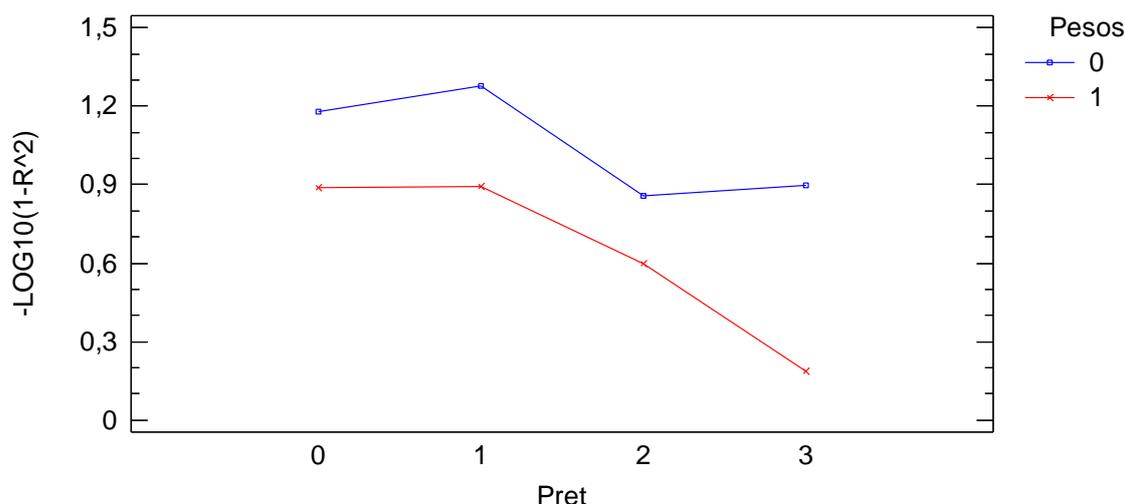


Figura 155: Efecto de la interacción entre la inicialización de los pesos de la red neuronal y el pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales perceptrón multicapa para la membrana CARBOSEP.

La Figura 150 muestra que aplicar el segundo tipo de pretratamiento, ya sea aplicando únicamente este tipo de pretratamiento (Pret=2) o aplicando el pretratamiento doble (Pret=3), genera una disminución en el coeficiente de regresión de los datos estacionarios. Esto es debido a que este tipo de pretratamiento se ha introducido para ajustar la dinámica del proceso y, para los datos estacionarios, la densidad de flujo volumétrico ya está estabilizada.

La Figura 151 muestra que la inicialización de los pesos con valores nulos genera mejores resultados de los coeficientes de regresión de los datos estacionarios obtenidos. Se observa que para el resto de estudio de aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa, tanto en los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP como los realizados con la membrana TAMI, obtienen mejores resultados con inicialización de los pesos en valores aleatorios. Esto puede ser debido a que como las ANN para los datos dinámicos tienen mayor variabilidad que ajustar (al tener que ajustar la tendencia dinámica de cada ensayo) los pesos de la red neuronal requieran mayor magnitud para obtener ajustes más precisos. En cambio, las ANN para los datos estacionarios, únicamente deben ajustar la variabilidad asociada a la presión transmembranal y la velocidad tangencial.

La Figura 152 muestra que pese a que el número de neuronas no tiene efecto significativo sobre la media de los coeficientes de regresión de los datos estacionarios, introducir 5 o 6 neuronas en la capa intermedia genera regresiones de los datos estacionarios sensiblemente más elevados que incrementando el número de neuronas por encima de 6. Se observa que este resultado también entra en contradicción con lo observado en los resultados de las regresiones de la aplicación de redes neuronales

perceptrón multicapa para los datos experimentales de las membranas CARBOSEP Y TAMI.

La Figura 153 muestra que en la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal y la inicialización de los pesos de la red neuronal, el mejor resultado los ofrece la combinación de pesos iniciales nulos con 6 neuronas en la capa intermedia de la red.

La Figura 154 muestra que en la interacción entre el número de neuronas de la capa intermedia de la red neuronal y el pretratamiento empleado que, pese a no tener efectos significativos sobre la media de los coeficientes de regresión de los datos estacionarios, ofrecen resultados sensiblemente superiores en las combinaciones entre 5 neuronas en la capa intermedia y no aplicar pretratamiento (Pret=0) e introducir 6 neuronas en la capa intermedia y aplicar la normalización de la densidad de flujo volumétrico (Pret=1).

La Figura 155 muestra la interacción entre el pretratamiento empleado y la inicialización de los pesos de la red neuronal, que ofrece los mejores resultados en la combinación de pesos iniciales nulos y los pretratamientos 0 y 1.

4.6.2. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$: de las figuras 146 a la 151 y la Tabla 44 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

$$\text{Pret} = 0-1 - \text{Pesos} = 0 - \text{Neur} = 5-6$$

De manera que se van a mostrar los datos para Pret= 0-1 – Pesos= 0 – Neur= 5-6. Los ensayos realizados con estos parámetros dieron los siguientes resultados:

Tabla 45: Resultados de los parámetros de caracterización en Pret=0 y 1 – Pesos=0 – Neur= 5 y 6 para las redes neuronales perceptrón multicapa en los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP.

Pret	Neur	R ² est	Pret	Neur	R ² est
0	5	0.9484	1	5	0.8076
0	6	0.9784	1	6	0.9896
0	5	0.9401	1	5	0.9538
0	6	0.9950	1	6	0.9833
0	5	0.9864	1	5	0.9524
0	6	0.8404	1	6	0.9960

El mejor resultado se obtiene para la segunda simulación de Pret=1 – Pesos=0 – Neur=6.

Los resultados de la simulación de la red neuronal se muestran en la figuras de la 156 a la Figura 158.

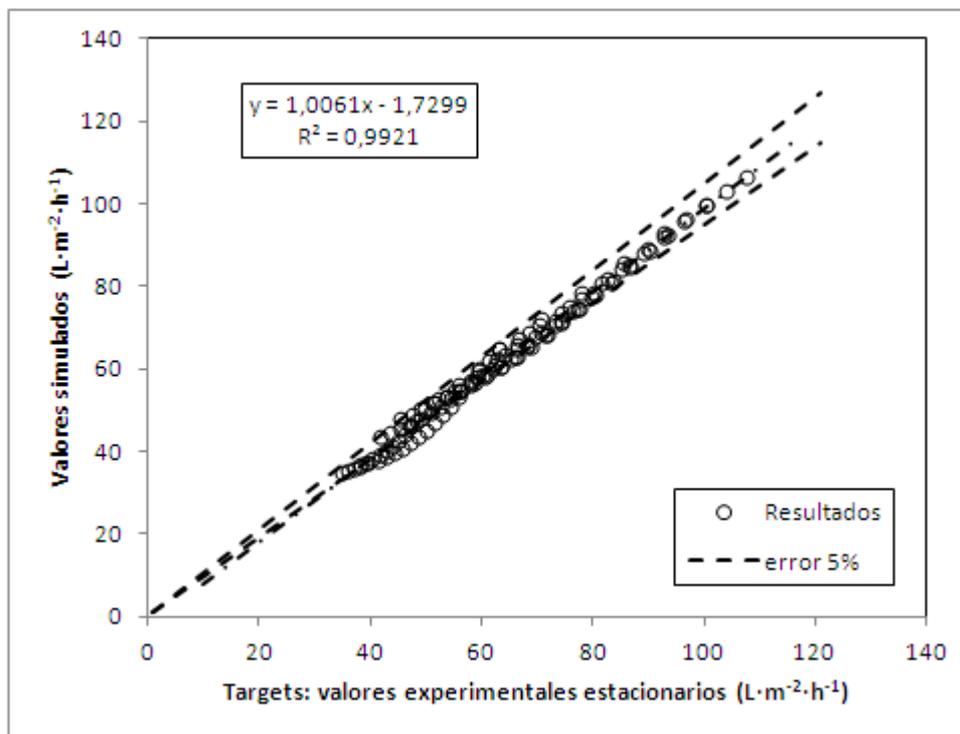


Figura 156: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento 1, pesos iniciales nulos y 6 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos nulos – Neur 6) para los datos estacionarios de la membrana TAMI.

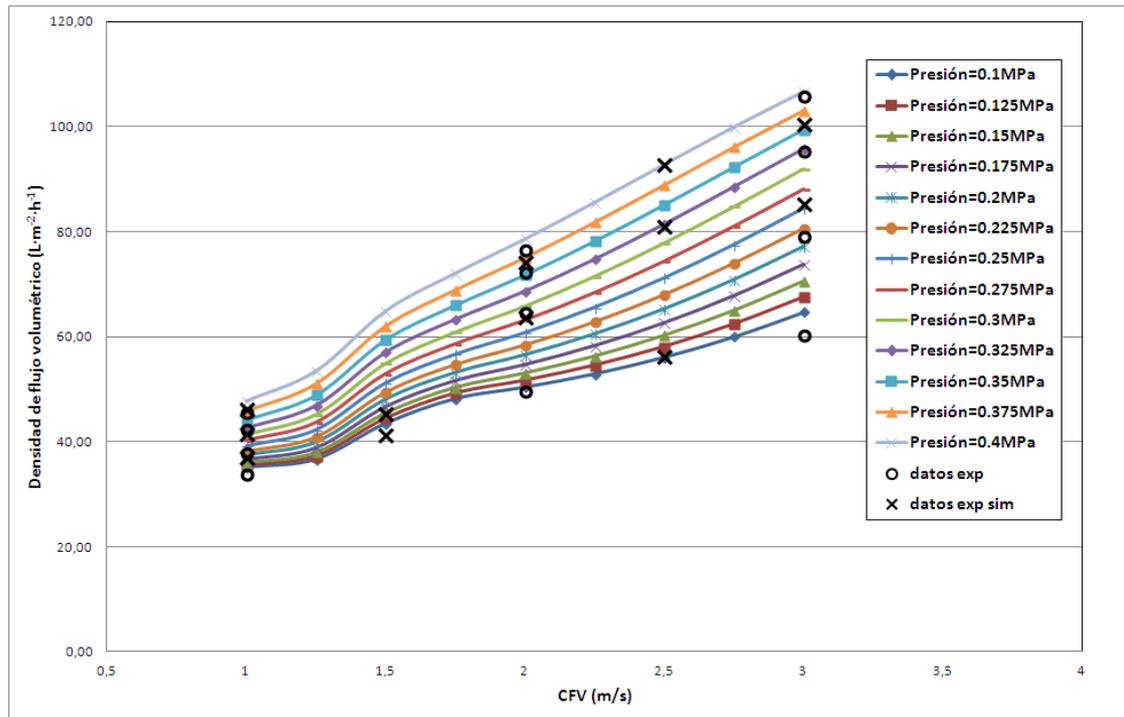


Figura 157: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento 1 pesos iniciales nulos y 6 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos nulos – Neur 6) para los datos de la membrana CARBOSEP. (O datos experimentales y X para los datos experimentales simulados)

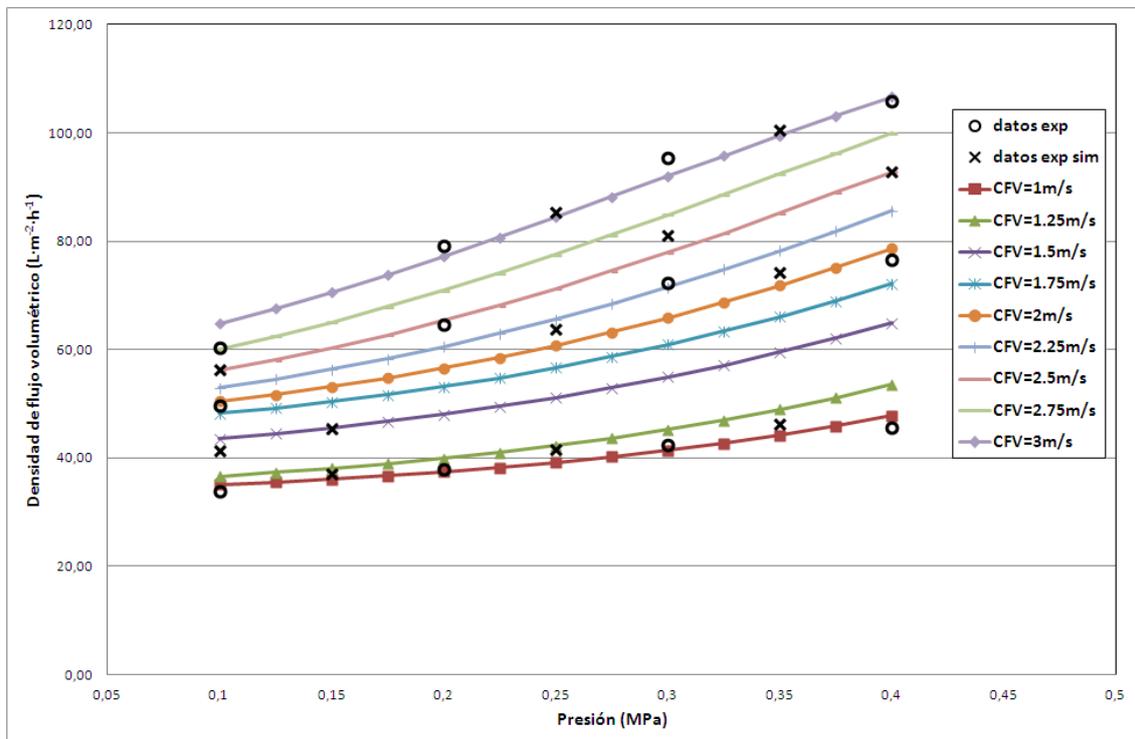


Figura 158: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal perceptrón multicapa con pretratamiento 1 pesos iniciales nulos y 6 neuronas en la capa intermedia (Pret 1 – Pesos nulos – Neur 6) para los datos de la membrana CARBOSEP. (O datos experimentales y X para los datos experimentales simulados)

Se observa que los resultados que ofrece la red neuronal presenta una gran precisión en cuanto a los datos introducidos a la red (tanto los datos experimentales estacionarios como los datos estacionarios simulados mediante un modelo físico). Sin embargo, la Figura 157 revela que para velocidades intermedias entre 1 y 2 m/s no ofrece un comportamiento lineal. Este comportamiento no ofrece mucha diferencia del comportamiento lineal. La Figura 158, sin embargo, muestra un comportamiento lineal con la presión transmembranal para todas las representaciones.

Se observa que la red neuronal perceptrón multicapa no ha sido capaz de ajustar la tendencia de los datos estacionarios del sistema ni incluyendo más puntos estacionarios en condiciones intermedias. Este desajuste está acotado entre velocidades de 1 y 2 m/s y cambia la tendencia que ofrece el sistema desde la linealidad que debería presentar a pequeños escalones donde la tendencia o la pendiente varia sobre todo entre 1.25 y 1.5 m/s.

4.7. Aplicación de redes neuronales de base radial a los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP con los ensayos simulados

Aplicando el mismo procedimiento empleado para la aplicación de redes neuronales de base radial para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, en primer lugar se define la notación de los factores con los que se va a trabajar para el caso de aplicación de redes neuronales base radial para los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP.

- Pret: indica el pretratamiento realizado.
- Spread: indica el valor de difusión de las neuronas dentro de la red neuronal.

Se observó que al intentar el rango de spread óptimo, ya se conseguían buenos valores de regresión de los datos, de manera que se ha empleado el rango de búsqueda para el estudio de bajo qué condiciones se optimiza la regresión de los datos estacionarios.

El resumen de la notación empleada se observa en la siguiente tabla:

Tabla 46: Notación de los factores de la red neuronales de base radial para los datos estacionarios la membrana CARBOSEP.

Elemento	Valores	Explicación
Pret	0	Sin pretratamiento
	1	Normalización de la densidad de flujo volumétrico
	2	Modelo del ensuciamiento dinámico del sistema
	3	Pretratamiento doble

Elemento	Valores	Explicación
Spread	50	-
	100	-
	250	-
	500	-
	750	-
	1000	-

4.7.1. Análisis de la varianza del coeficiente de regresión de los datos estacionarios

El resumen del ANOVA realizado sobre el $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ se observa en la siguiente tabla:

Tabla 47: Análisis de la varianza para $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$ de los resultados de la red neuronal de base radial para los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP. Suma de cuadrados tipo III.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:Pret	13.6509	3	4.550290	129.87	0.0000
B:Spread	2.93263	5	0.586527	16.74	0.0000
RESIDUAL	0.52556	15	0.035037		
TOTAL (CORRECTED)	17.1091	23			

Se observa que ambos factores tienen efectos significativos sobre la media de la variable respuesta: $[-\log_{10}(1- R^2_{est})]$, asumiendo un error de primera especie del 5%.

La Figura 159 muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor pretratamiento del análisis de varianza realizado:

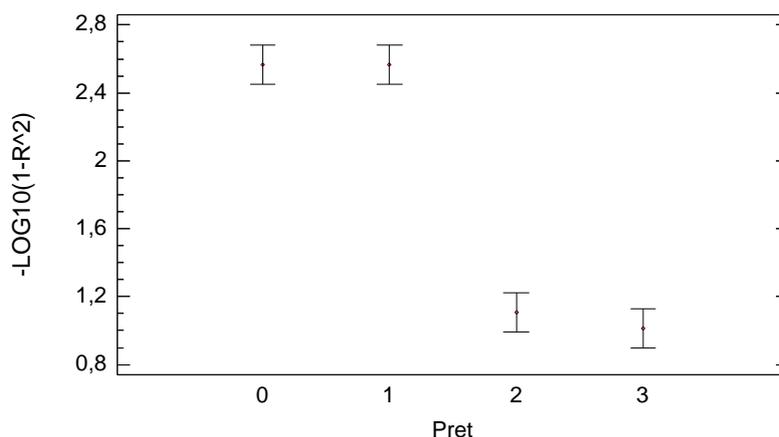


Figura 159: Efecto del pretratamiento empleado sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

La Figura 160 muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor spread de la red neuronal del análisis de varianza realizado:

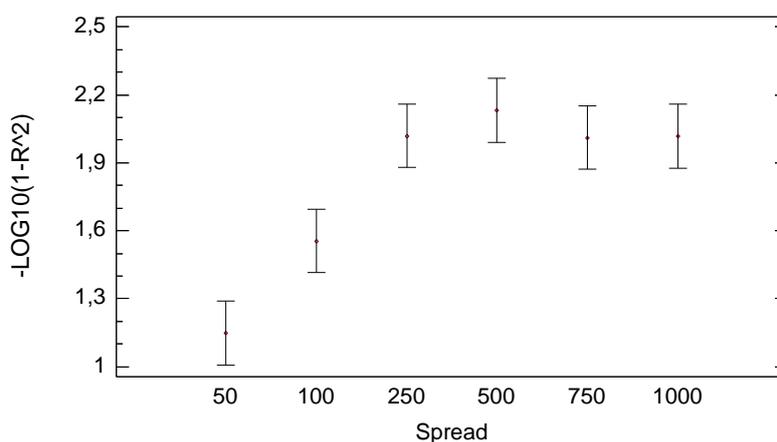


Figura 160: Efecto del valor de spread sobre la media y el intervalo LSD de la variable respuesta $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$ en la caracterización de los datos estacionarios mediante redes neuronales de base radial para la membrana CARBOSEP.

La Figura 159 muestra que aplicar el segundo tipo de pretratamiento, ya sea aplicando únicamente este tipo de pretratamiento (Pret=2) o aplicando el pretratamiento doble (Pret=3), genera una disminución en el coeficiente de regresión de los datos estacionarios. Esto es debido a que este tipo de pretratamiento se ha introducido para ajustar la dinámica del proceso y, para los datos estacionarios, la densidad de flujo volumétrico ya está estabilizada.

La Figura 160 muestra que al coeficiente de regresión se estabiliza a partir de valores de spread de 250. No obstante con el fin de trabajar con valores bajos para el valor de difusión, se van a escoger los valores de 250 y 500.

4.7.2. Selección y presentación de resultados de la simulación óptima de la regresión de los datos estacionarios

En el estudio del análisis de la varianza de $[-\log_{10}(1-R^2_{est})]$: de la Figura 159, la Figura 160 y la Tabla 47 se observa que la mejor regresión de los datos es para las condiciones:

$$\text{Pret} = 0-1 - \text{Spread} = 250-500$$

De manera que se van a mostrar los datos para Pret= 0-1 – Spread= 250-500. Los ensayos realizados con estos parámetros dieron los siguientes resultados:

Tabla 48: Resultados de los parámetros de caracterización en Pret=0 y 1 – Spread=250 y 500 para las redes neuronales de base radial en los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP.

Pret	Spread	R ² est
0	250	0.9981
0	500	0.9981
1	250	0.9981
1	500	0.9981

No hay diferencia entre los resultados obtenidos, de manera que se va a escoger la estrategia más sencilla: Pret=0 – Spread=250.

Se observa que para este caso no se han tendido que introducir valores de difusión excesivamente elevados, tal y como se ha visto en la aplicación de redes neuronales de base radial para los datos experimentales, tanto en los de la membrana CARBOSEP como en los de la membrana TAMI.

Los resultados de la simulación de la red neuronal se muestran en las figuras de la 161 a la 163.

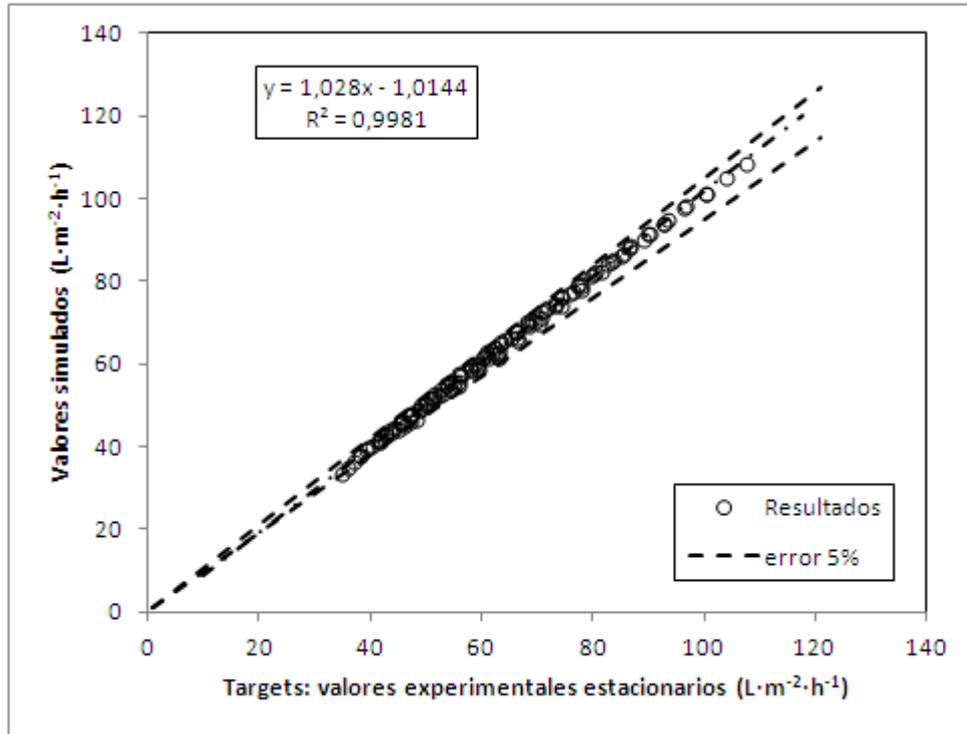


Figura 161: Visualización de la precisión del ajuste de la red neuronal de base radial con pretratamiento 1 y valor de spread 250 (Pret 1 – Spread 250) para los datos estacionarios de la membrana TAMI.

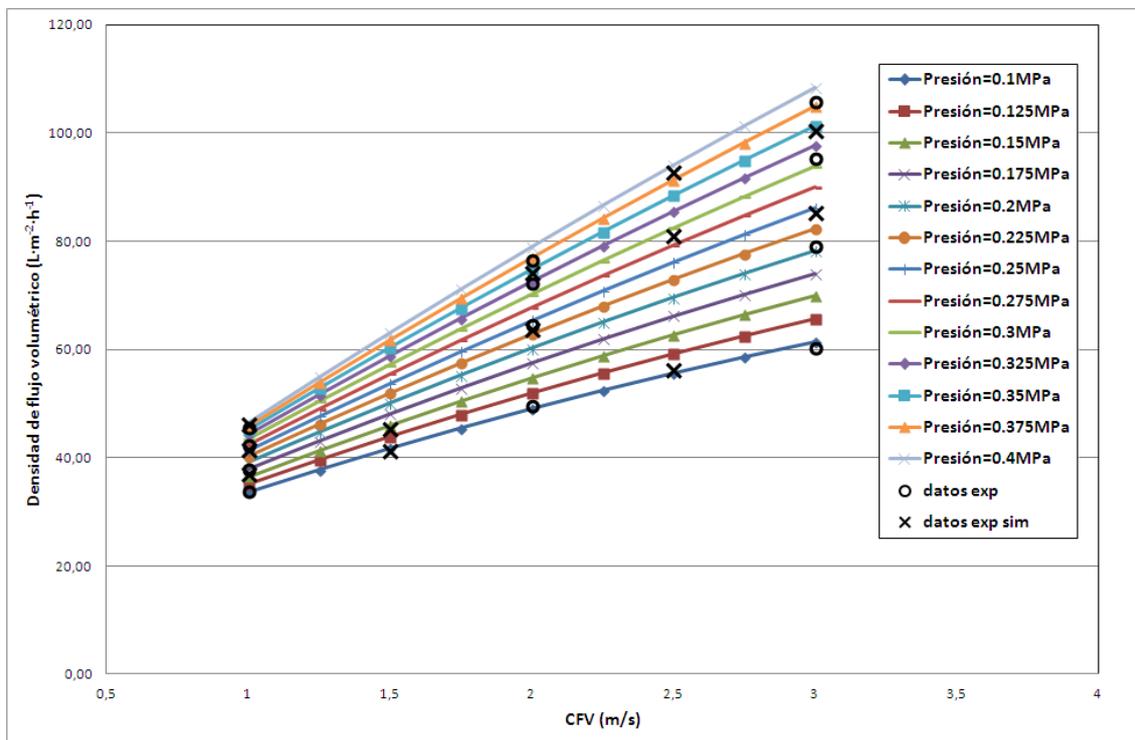


Figura 162: Efecto de la velocidad tangencial para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal base radial con pretratamiento 0 spread 250 (Pret 1 – Spread 250) para los datos de la membrana CARBOSEP. (O datos experimentales y X para los datos experimentales simulados)

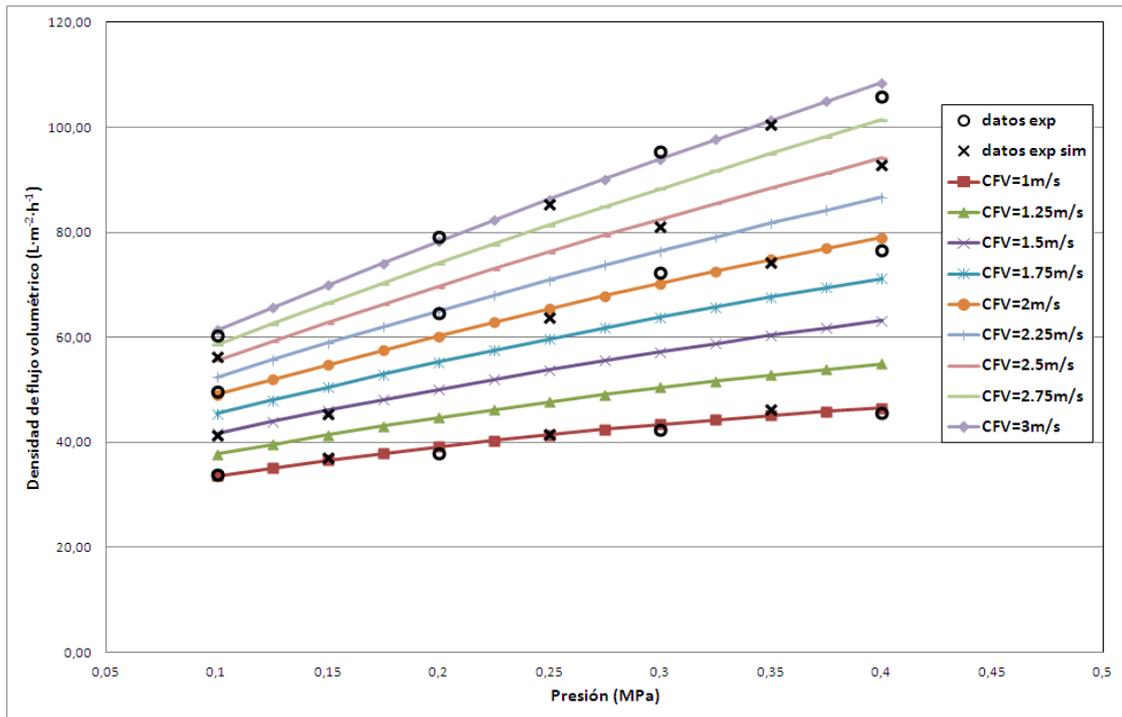


Figura 163: Efecto de la presión para los resultados de la simulación de la red para los datos estacionarios. Red neuronal base radial con pretratamiento 0 spread 250 (Pret 1 – Spread 250) para los datos de la membrana CARBOSEP. (O datos experimentales y X para los datos experimentales simulados)

La observación de ambas figuras muestra que la red ha obtenido una buena regresión tanto de los datos estacionarios como de la tendencia que estos tienen manteniendo la linealidad de la densidad de flujo volumétrico estacionario en todo el rango de velocidades tangenciales y presiones transmembranales simuladas.

5. DISCUSIÓN

5.1. Estrategia de modelización para maximizar el grado de ajuste de las redes neuronales

Mediante los diferentes análisis de la varianza realizados para cada uno de los casos se han obtenido las estrategias que generan el mejor resultado de simulación de la red neuronal artificial para cada caso. El resumen de estos resultados se observa en la Tabla 49:

Tabla 49: Resultados de las mejores estrategias de modelización mediante redes neuronales artificiales.

Datos	ANN	Pret	Pesos	Neur	Spread	R ² (a)	NMSE(a)
CARBOSEP	PM	2-3	Aleatorios	8-10	-	0.9980	0,000356
	BR	2-3	-	-	15000 - 20000 (b)	0.8181	0.015397
TAMI	PM	0-1	Aleatorios	8-10	-	0.9974	0,000512
	BR	0-1	-	-	5000 (b)	0.8748	0,025989
CARBOSEP estacionarios	PM	0-1	Nulos	5-6	-	0.9921	0,0063*
	BR	0-1	-	-	250-1000	0.9981	0,0020*

* Los datos de NMSE para este estudio corresponden a los datos entrenados, no al total de datos ajustados

(a): mejor resultado.

(b): valores de difusión excesivamente elevados. Se han tomado para obtener valores aceptables de los parámetros de regresión.

La Tabla 49 muestra que la aplicación de la red neuronal perceptrón multicapa a los datos experimentales presenta los mismos resultados para la membrana CARBOSEP que para la membrana TAMI salvo el tipo de pretratamiento (ya que para las TAMI no se ha implementado el segundo tipo de pretratamiento). En cuanto a los resultados de la red neuronal de base radial, hay que tener en cuenta que la red neuronal no ha sido capaz de modelar los datos experimentales debido al ruido que los datos experimentales presentan (tanto para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP como los ensayos realizados por con la membrana TAMI) tal y como se ha demostrado en el apartado 4.2.3. En cuanto a los resultados para la modelización de los datos estacionarios de la membrana CARBOSEP, se observa que para ambos tipos de redes neuronales la aplicación del modelo de ensuciamiento dinámico no ha resultado efectiva. Se observa que para los datos estacionarios los resultados en cuanto a la inicialización de los pesos y el número de neuronas iniciales tienen resultados diferentes de los obtenidos para los datos experimentales.

Los datos de los ensayos realizados con la membrana TAMI presentan una disminución dinámica de la densidad de flujo volumétrico muy pequeña para cada ensayo mientras que los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP presentan una disminución del flujo volumétrico más acusada. Esto significa que el comportamiento dinámico que tienen que ajustar las redes neuronales artificiales es menor para el caso de los ensayos realizados con la membrana TAMI. Pese a todo los resultados de la Tabla 49 muestran que el ajuste realizado por las redes neuronales perceptrón multicapa presentan resultados similares para el ajuste realizado para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP como para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana TAMI.

La aplicación del modelo de ensuciamiento dinámico se ha realizado para introducir un input en la red neuronal que indique que la variable respuesta: la densidad de flujo volumétrico debe estabilizarse para tiempos elevados de cada ensayo. Esta es la razón por la que el modelo de ensuciamiento dinámico (pretratamientos 2 y 3) mejora la regresión de los datos de la membrana CARBOSEP.

En cuanto a los datos estacionarios para la membrana CARBOSEP la aplicación de un modelo dinámico de ensuciamiento a partir de las condiciones de ensayo como input no tiene sentido. El valor de los pesos iniciales y el número de neuronas de la capa intermedia, los datos experimentales presentan ruido y hay muchos más datos: 536 datos experimentales para la membrana CARBOSEP, mientras que los datos estacionarios no se ven afectados por el ruido que puedan presentar, ya que al presentan menor cantidad de datos, y son muchos menos datos: 12 datos estacionarios experimentales para la membrana CARBOSEP, más otros 12 datos estacionarios simulados para aplicar las redes neuronales.

Los resultados obtenidos para las ANN perceptrón multicapa son comparables a los recogidos en la Tabla 6 para otros trabajos de redes neuronales artificiales para proceso de membrana. El grado de ajuste es similar, ya que, aunque la mayoría de los autores de los trabajos presentados en la Tabla 6 emplean parámetros de regresión diferentes a los que se han empleado en esta tesis, todos los resultados muestran ajustes muy precisos de las redes neuronales empleadas a los datos experimentales.

5.2. Comparación del ajuste mediante redes neuronales artificiales con respecto del ajuste mediante modelos físicos

En este apartado se comparan los resultados ofrecidos por las redes neuronales con los modelos físicos aplicados a los datos experimentales. Antes de proceder a la comparación entre ambas técnicas de modelización hay que puntualizar una serie de aspectos:

- a) Debido a que para los resultados experimentales de los ensayos realizados con la membrana TAMI no se observa una disminución inicial de la densidad de flujo volumétrico, no se han intentado aplicar modelos físicos dinámicos a estos datos ya que el grado de ajuste de los modelos físicos se determina por la precisión con la que describe la disminución de la densidad de flujo volumétrico con el tiempo hasta alcanzar su valor estacionario.
- b) Entre los modelos físicos empleados sólo muestran resultados satisfactorios la aplicación de modelos de Hermia adaptados para flujo tangencial para los resultados experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, de manera que los ajustes de otros modelos no han resultado satisfactorios, tal y como se ha comentado en el apartado de Motivación.
- c) Debido a que las redes neuronales de base radial no han obtenido ajustes satisfactorios (debido a los desajustes que las simulaciones estas redes neuronales ofrecen) ni para los resultados experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP ni para los ensayos realizados con la membrana TAMI, no se van a tener en cuenta para esta comparación.

Atendiendo a estas puntualizaciones, la comparación de las redes neuronales artificiales con modelos físicos con los datos experimentales que se disponen se reduce a comparar los resultados de la aplicación de redes neuronales perceptrón multicapa con modelos de Hermia adaptados para flujo tangencial para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

Los resultados obtenidos de la aplicación de modelos de Hermia adaptados para flujo tangencial están descritos en (Vincent Vela, 2006) y publicados en (Vincent Vela, et al., 2009). Debido a que el objetivo es comparar el grado de ajuste que ofrece este modelo, se van a recoger directamente los resultados de los coeficientes de regresión. En este artículo se concluía que el modelo que mejor se ajusta a los datos experimentales es el modelo de bloqueo intermedio de poros.

Tal y como se introduce en el apartado 4.1.3, el mejor resultado que ofrecen las redes neuronales perceptrón multicapa para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP, son los realizados con pretratamiento doble de los datos, 8 neuronas en la capa intermedia y pesos iniciales nulos.

Los coeficientes de regresión obtenidos para las redes neuronales representan el ajuste de la red neuronal al total de los datos, de manera que hay que recoger el ajuste para cada ensayo realizado. En la siguiente tabla se observan los resultados de los ajustes para todas las condiciones de ensayos para los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial y para las redes neuronales artificiales.

Tabla 50: Medidas de los coeficientes de correlación (R^2) de la aplicación de los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial frente a la red neuronal artificial perceptrón multicapa para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

TMP (MPa)	CFV (m/s)	Coeficiente de correlación (R^2)				
		Bloque completo	Bloqueo intermedio	Bloque estándar	Capa gel	ANN
0.1	1	0,711	0,710	0,641	0,643	0,5067
	2	0,724	0,725	0,703	0,651	0,5486
	3	0,790	0,791	0,696	0,776	0,7553
0.2	1	0,969	0,972	0,611	0,910	0,8746
	2	0,925	0,923	0,765	0,777	0,9170
	3	0,931	0,930	0,803	0,864	0,9201
0.3	1	0,977	0,980	0,763	0,942	0,9723
	2	0,985	0,984	0,920	0,983	0,9665
	3	0,922	0,923	0,712	0,834	0,9157
0.4	1	0,988	0,997	0,683	0,991	0,9987
	2	0,975	0,979	0,615	0,829	0,9850
	3	0,959	0,960	0,795	0,884	0,9624

Se observa que para ensayos realizados a bajas presiones los respectivos coeficientes de regresión son menores para todos los modelos estudiados mediante los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial.

Se va a descartar para la comparación el bloqueo estándar ya que es el modelo que presenta los coeficientes de regresión más bajos.

En la Tabla 50 se observa que para 0.1 MPa de presión transmembranal los modelos que mejor se ajustan son los de bloqueo de poros completo y bloqueo de poros intermedio, sin ser capaz de llegar a valores de R^2 de 0.8 para ninguna de las velocidades. Para esta presión, el modelo de capa gel y la red neuronal llegan a niveles de coeficientes de regresión similares, siendo el más bajo de los cuatro la regresión obtenida por la red neuronal. Para 0.2 MPa los modelos de bloqueo completo de poros y bloque intermedio de poros siguen siendo los modelos que aportan mejores coeficientes de regresión, sin embargo a velocidades tangenciales de 2 y 3 m/s los resultados de la red neuronal consigue resultados que están casi al mismo nivel que los modelos de bloque completo e intermedio de poros. Para 0.3 MPa la red neuronal consigue resultados ligeramente inferiores a los modelos de bloque completo y bloqueo intermedio mientras que la capa gel sólo consigue valores similares para la velocidad de 2 m/s. Por último para 0.4 MPa la red neuronal consigue valores ligeramente superiores a todos los modelos, siendo los modelos de bloqueo intermedio y bloqueo completo de poros los únicos modelos físicos con valores del coeficiente de regresión similares para todos los valores de velocidades tangenciales.

A la vista de los resultados obtenidos se ha realizado un análisis de la varianza sobre los coeficientes de regresión para determinar si emplear un modelo o la red neuronal influye sobre el ajuste obtenido. No se va a tener en cuenta el modelo de bloqueo estándar ya que se ha observado que no ofrece resultados comparables para ningún ensayo.

Se van a introducir como factores: el tipo de modelización (tipo de modelo físico y red neuronal), presión transmembranal y velocidad tangencial. Las condiciones de ensayo se van a introducir ya que, atendiendo a la Tabla 50, para presiones transmembranales bajas se han conseguido los peores coeficientes de regresión tanto para los modelos físicos como para la red neuronal.

El resumen de los resultados del análisis de la varianza realizado se observan en la Tabla 51:

Tabla 51: Análisis de la varianza para el coeficiente de regresión R^2 obtenidos para las diferentes condiciones de ensayo mediante modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial (salvo el modelo de bloqueo estándar) para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
MAIN EFFECTS					
A:CFV	0.00268205	2	0.00134102	1.20	0.3248
B:Modelo	0.03886230	3	0.01295410	11.57	0.0002
C:TMP	0.55551700	3	0.18517200	165.42	0.0000
INTERACTIONS					
AB	0.01087470	6	0.00181246	1.62	0.1991
AC	0.06693090	6	0.01115520	9.97	0.0001
BC	0.03326180	9	0.00369576	3.30	0.0149
RESIDUAL	0.02014970	18	0.00111943		
TOTAL (CORRECTED)	0.72827800	47			

Se observa que el modelo empleado y la presión transmembranal tienen efectos significativos sobre la media de los coeficientes de regresión obtenidos. Las interacciones de la presión transmembranal con los otros factores también generan efectos estadísticamente significativos sobre la variable respuesta. Todo ello asumiendo un error de primera especie del 5%.

La siguiente figura muestra las medias y los intervalos LSD para los niveles del factor presión transmembranal:

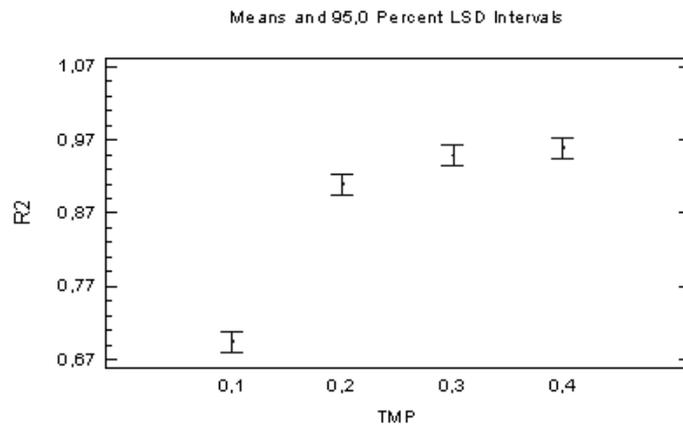


Figura 164: Efecto de la presión transmembranal (TMP), expresada en MPa, sobre los coeficientes de regresión para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

La Figura 164 muestra que la presión 0.1 MPa tiene valores significativamente menores que el resto de presiones transmembranales ensayadas. La presión de 0.2 también presenta valores de regresión menores que para presiones de 0.3 y 0.4 MPa. Esto es debido a que para presiones transmembranales bajas no se observa disminución inicial de la densidad de flujo volumétrico sino que se produce una estabilización casi inmediata a valores estacionarios, de manera que como los datos experimentales para estas presiones no presentan un comportamiento dinámico definido, tanto los modelos de Hermia como las redes neuronales artificiales, no consiguen ajustes tan precisos, ya que en el caso de los modelos de Hermia, las ecuaciones describen un comportamiento dinámico definido, mientras que las redes neuronales artificiales requerirían determinar que para presiones bajas la variable de entrada temporal no afecta sobre la densidad de flujo volumétrico.

La Figura 165 muestra el resultado de las medias e intervalos LSD para los diferentes niveles de los modelos empleados:

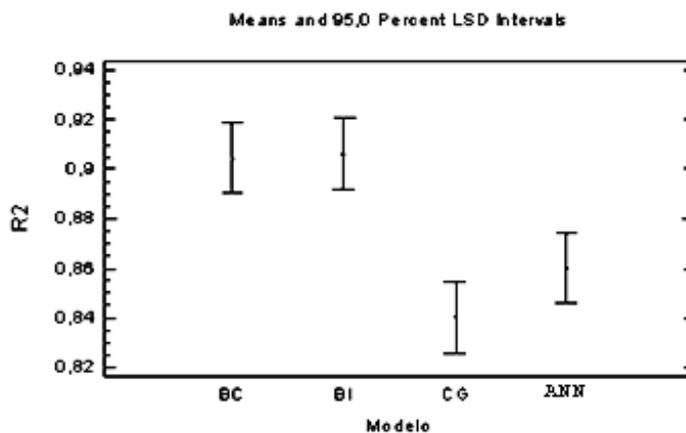


Figura 165: Efecto del modelo empleado (BC: Bloqueo completo; BI bloqueo intermedio; CG: Capa gel; ANN: Red neuronal artificial perceptrón multicapa) sobre los coeficientes de regresión para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

La Figura 165 muestra que tanto la red neuronal perceptrón multicapa como el modelo de capa gel presentan coeficientes de regresión menores que los modelos de bloque completo de poros y bloqueo intermedio de poros. Aunque las redes neuronales presentan valores ligeramente mayores que los de la capa gel, debido al solapamiento de los intervalos LSD, no hay evidencia estadística suficiente como para afirmar que las red neuronal aplicada ofrezca mejores resultados que el modelo de capa gel.

La Figura 166 muestra los resultados de las medias para visualizar el grado de interacción entre los modelos empleados y la presión transmembranal:

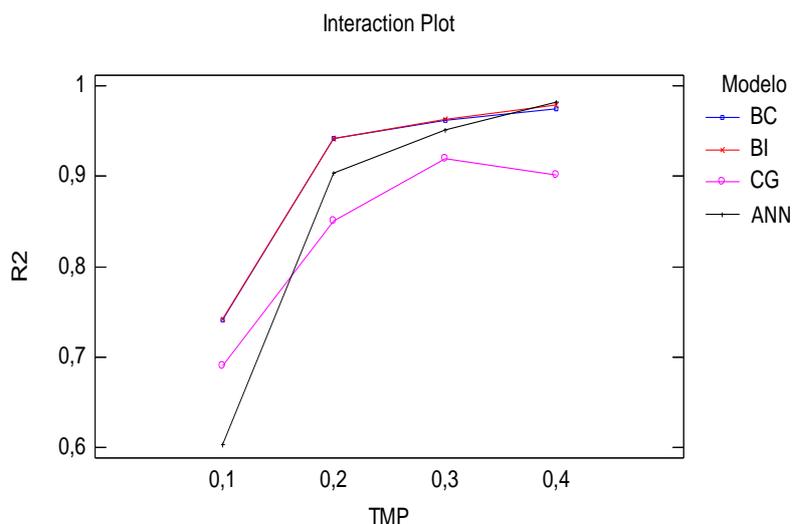


Figura 166: Interacción entre la presión transmembranal y el modelo empleado, la presión transmembranal viene expresada en MPa, (BC: Bloqueo completo; BI bloqueo intermedio; CG: Capa gel; ANN: Red neuronal artificial perceptrón multicapa) sobre los coeficientes de regresión para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

La Figura 166 muestra que los modelos de bloqueo completo de poros y bloqueo intermedio de poros tienen distribuciones casi idénticas. También se observa que las redes neuronales consiguen valores del coeficiente de regresión similares para presiones transmembranales elevadas (0.3 MPa y 0.4MPa).

La última interacción significativa, entre velocidad tangencial y presión transmembranal, no tiene relevancia en el estudio que se está realizando.

Antes de concluir hay que tener en cuenta una serie de aspectos sobre los resultados de los coeficientes de regresión. Las redes neuronales de perceptrón multicapa han sido construidas para minimizar el error cuadrático medio normalizado, no para maximizar el valor del coeficiente de regresión. Las redes neuronales artificiales construidas, tanto las de perceptrón multicapa como las de base radial, y para los datos experimentales de la membrana CARBOSEP y los de la membrana TAMI, para ajustar el total de los datos. Los modelos físicos comparados, en cambio, han sido ajustados ensayo a ensayo, ajustando los coeficientes de las respectivas ecuaciones

para maximizar el coeficiente de regresión del respectivo ensayo. Esto quiere decir que, mientras que la red neuronal artificial perceptrón multicapa ha encontrado un algoritmo único que ajusta los datos experimentales para todos los ensayos, cada uno de los modelos físicos que se han comparado con la red neuronal varían sus coeficientes para cada ensayo. Pese a todo, la red neuronal artificial perceptrón multicapa con pretratamiento doble, pesos iniciales aleatorios y 8 neuronas en la capa intermedia ha obtenido un coeficiente de regresión para el total de los datos de 0.9980.

En la siguiente tabla se observa un resumen cualitativo de las características de ajuste que ofrecen las redes neuronales artificiales frente a los modelos físicos para varios criterios.

Tabla 52: Resultados cualitativos de la comparación de los modelos físicos y redes neuronales artificiales perceptrón multicapa.

Criterio	Modelos físicos	ANN (perceptrón multicapa)
Nº datos para el ajuste	100 %	50 % (en este estudio)
Ajuste	Proceso	Requiere ajustar las ecuaciones de los modelos ensayo a ensayo. Ajusta la totalidad de los datos validando el entrenamiento de la red neuronal realizado.
	Tiempo	Al ajustar ensayo tras ensayo, requiere elevados tiempos de ajuste Una vez se tienen fijadas las estrategias de modelado (para este estudio: pretratamiento, pesos iniciales y neuronas en la capa intermedia) el proceso es casi inmediato.
Validez	Los valores de los coeficientes son válidos para el respectivo ensayo	Algoritmo único para todas las condiciones experimentales.
Resultados	Ecuaciones: su comportamiento está fijado por el valor de los coeficientes de la ecuación.	Algoritmo ajustado. Puede que no ajuste determinados comportamientos de los datos si los objetivos del error admisible se han cumplido.

Criterio	Modelos físicos	ANN (perceptrón multicapa)
Condiciones interpoladas	La determinación de los coeficientes de las ecuaciones se realiza, en la mayoría de casos, de manera empírica.	El algoritmo devolverá un valor para las condiciones introducidas en función del ajuste que haya realizado. El valor que devuelva la red neuronal tendrá mayor calidad cuanto mayor sea el número de niveles de las condiciones experimentales introducidas en la fase de entrenamiento.
Condiciones extrapoladas	La determinación de los coeficientes de las ecuaciones se realiza, en la mayoría de casos, de manera empírica.	Aunque la red neuronal devuelva un valor para condiciones experimentales extrapoladas, este dato no es válido ya que la red neuronal ha encontrado un algoritmo válido para un determinado rango para las condiciones experimentales

Finalmente se van a comparar los resultados de este apartado con otros trabajos. Tan solo se han encontrado dos trabajos donde se realice una comparación entre modelos físicos y redes neuronales artificiales para el campo de tecnología de membranas, y ambos son para microfiltración. Se han encontrado referencias en otros campos donde se han comparado los resultados de aplicar redes neuronales artificiales con modelos teóricos.

Observando la Tabla 7 se observa que en mayor o menor medida, las redes neuronales artificiales ofrecen mejores resultados para los parámetros de regresión. Evidentemente estos resultados no son comparables con este estudio ya que se trata de campos diferentes, o procesos diferentes para el caso de los trabajos con microfiltración, pero da una idea de la comparación de las redes neuronales artificiales con modelos teóricos al aplicarlos sobre una serie de datos experimentales.

6. CONCLUSIONES

Atendiendo al grado de ajuste de las redes neuronales artificiales empleadas:

1. El pretratamiento de los datos mediante los dos mecanismos propuestos mejora el ajuste de la aplicación de redes neuronales artificiales para los datos experimentales de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP. Estos mismos pretratamientos no tienen efectos significativos sobre los parámetros de regresión con respecto a no aplicar ningún tipo de pretratamiento a los datos. Por otra parte la inicialización de los pesos con valores aleatorios genera mejores resultados de los parámetros de regresión que inicializarlos mediante valores nulos.
2. Las redes neuronales artificiales perceptrón multicapa ofrecen un resultados muy precisos de ajustes de los datos experimentales tanto para los datos de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP como los datos de los ensayos realizados con la membrana TAMI. Las redes neuronales de base radial no han conseguido ajustes aceptables de los datos experimentales debido a que el elevado ruido que los datos experimentales presentan altera la modelización de los datos mediante este tipo de red neuronal.
3. Para los datos experimentales, el número de neuronas de la capa intermedia para las redes neuronales perceptrón multicapa que generan los mejores resultados de regresión de los datos tiende a los valores más altos del rango estudiado (8-10). Esto puede ser debido a que el ruido que presentan los datos, y que ha provocado que las redes neuronales de base radial no consigan modelar los datos, dificulta el proceso de ajuste y se requieran más nodos en la red para conseguir un mejor ajuste al comportamiento de los datos.
4. Las redes neuronales artificiales son algoritmos que se ajustan a unos datos con un objetivo de error admisible fijado, de manera que puede conseguir este objetivo de error sin terminar de ajustar todos los comportamientos (para este estudio comportamientos dinámicos) que los datos presentan. Se ha observado que la red neuronal ha generado simulaciones donde la densidad de flujo no se estabiliza e, incluso, aumenta la densidad de flujo para los tiempos finales de un determinado ensayo, también se ha observado que en algunas simulaciones no ha ajustado la disminución inicial de la densidad de flujo volumétrica como reflejan los datos experimentales.
5. Los resultados obtenidos mediante las redes neuronales de tipo perceptrón multicapa para los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP ofrecen resultados comparables a los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial. Para bajos valores de presión transmembranal y de velocidad tangencial la red

neuronal tiene resultados de regresión inferiores a los que se obtienen con los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial. Para los valores más elevados de presión transmembranal, los datos simulados por la red neuronal perceptrón multicapa genera mejores resultados regresión que los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial. A presiones intermedias, los valores de los coeficientes de regresión de la red neuronal perceptrón multicapa son comparables a los modelos de Hermia adaptados al flujo tangencial, superando al modelo de bloqueo estándar de poros, con valores similares para el modelo de capa gel y con valores inferiores a los modelos de bloqueo completo de poros y bloqueo intermedio de poros.

Como conclusión final, los resultados de este estudio confirman que las ANN ofrecen técnicas competitivas con respecto a los modelos físicos para el ajuste de procesos de ultrafiltración. Se ha observado que las ANN no requieren, por lo menos para el caso de UF, distribuciones manuales de los datos en los grupos de entrenamiento, validación y test. En el caso de las ANN de base radial el ruido de los datos ha provocado que este tipo de red neuronal no sea capaz de ajustar los datos. Para solucionar el efecto del ruido podría introducirse un filtro a los datos que elimine el ruido o introducir manualmente los datos para el entrenamiento de la red neuronal.

ANEXO I: Estimación del ensuciamiento dinámico mediante las condiciones ensayadas.

La estimación del ensuciamiento dinámico de los ensayos se va a realizar mediante la ecuación 40. Se observa que esta ecuación requiere el valor de la densidad de flujo volumétrico. Como el objetivo de introducir este parámetro es introducir una variable de entrada o input a la red neuronal artificial que introduzca información sobre la estabilización de la densidad de flujo volumétrico a partir de las condiciones de entrada, no se va introducir la densidad de flujo volumétrico en esta ecuación sino que se introduce una densidad de flujo volumétrico estimado a partir de las condiciones de ensayo. Esta estimación se realiza mediante la ecuación 1.

Para implementar la ecuación 1 se requieren una serie de parámetros obtenidos a partir datos de caracterización de la membrana y del proceso. En primer lugar se requiere la resistencia específica de la capa gel.

$$R'_c = 45 \cdot \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 \cdot a_p^2} \quad (\text{Ec. 49})$$

El a_p es el radio equivalente (o el radio Stokes- Einstein) del PEG definido como una función del peso molecular MW. La ecuación está definida en el sistema internacional de unidades.

$$a_p = (0.262 \cdot MW^{0.5} - 0.3) \cdot 10^{-10} \quad (\text{Ec. 50})$$

La porosidad de la capa gel viene definida por la siguiente ecuación:

$$\varepsilon = 1 - C_{gv} \quad (\text{Ec. 51})$$

C_{gv} es la concentración de la capa gel en porcentaje volumétrico. Para su cálculo se introduce la siguiente ecuación:

$$\frac{C_{gv}}{C_{0v}} = \frac{J_{pss} \cdot D_{int}^{0.11} \cdot \nu^{0.56}}{0.023 \cdot CFV^{0.89} \cdot D^{0.67}} \quad (\text{Ec. 52})$$

Donde D_{int} es el diámetro interno de las membranas empleadas, D es el coeficiente de difusión y ν es la viscosidad cinemática. El coeficiente de difusión se calcula a partir de la ecuación:

$$D = 9.82 \cdot 10^{-9} \cdot MW^{-0.52} \quad (\text{Ec. 53})$$

Con estos parámetros definidos se ha realizado el cálculo del ensuciamiento dinámico de los ensayos realizados tanto para los realizados con la membrana CARBOSEP, como para los realizados con la membrana TAMI.

Resultados para la membrana CARBOSEP

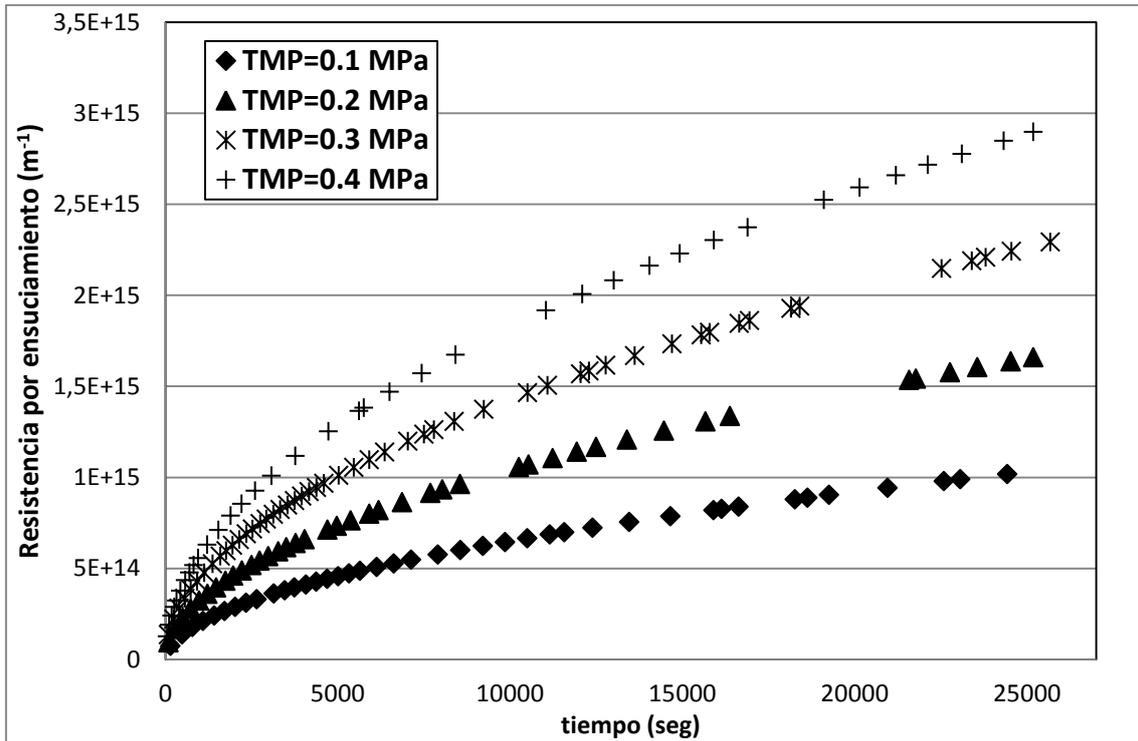


Figura 167: Resultados del ensuciamiento dinámico para los ensayos realizados a una velocidad tangencial de 1 m/s realizados con la membrana CARBOSEP.

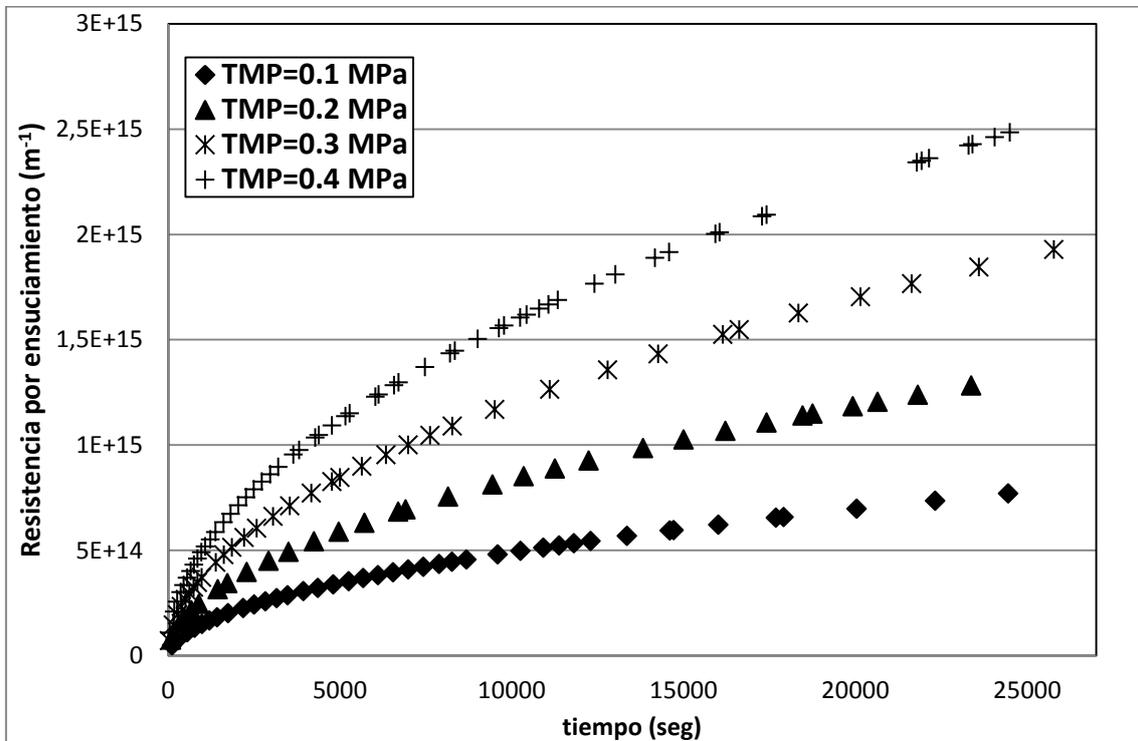


Figura 168: Resultados del ensuciamiento dinámico para los ensayos realizados a una velocidad tangencial de 2 m/s realizados con la membrana CARBOSEP.

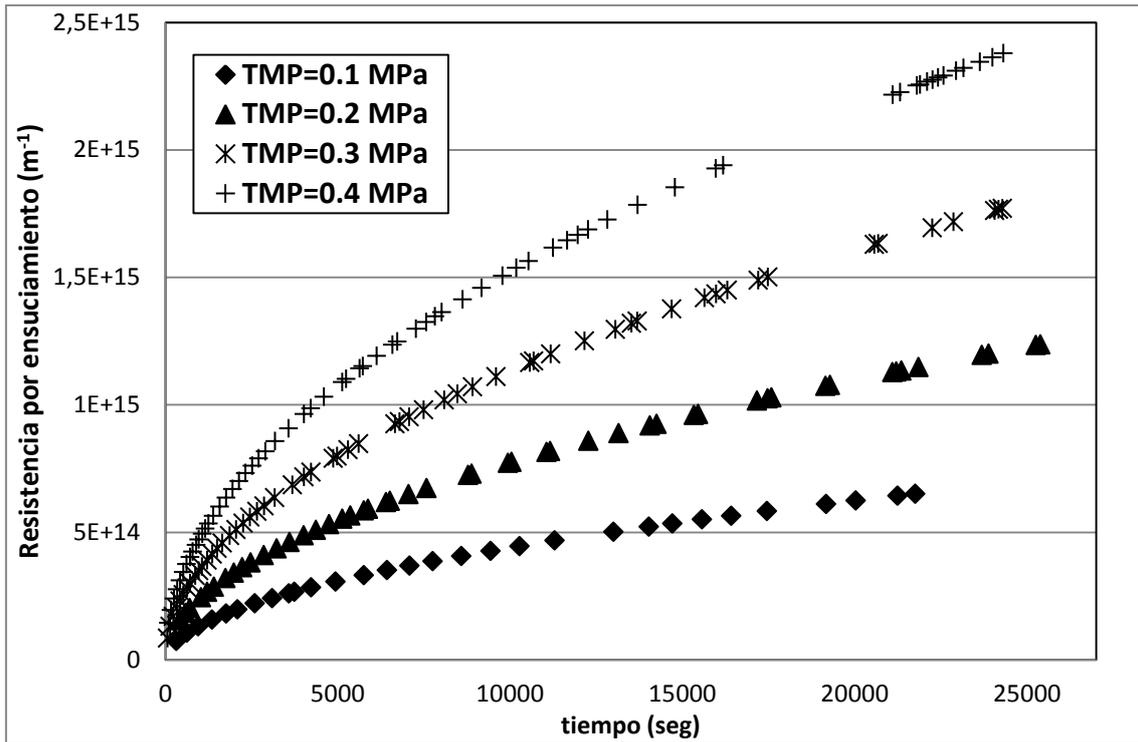


Figura 169: Resultados del ensuciamiento dinámico para los ensayos realizados a una velocidad tangencial de 3 m/s realizados con la membrana CARBOSEP.

ANEXO II: Modelo de regresión de la densidad de flujo volumétrica estacionaria

A. DATOS DE LA MEMBRANA CARBOSEP

Variable independiente: J_{pss} ($L \cdot m^{-2} \cdot hr^{-1}$)

VARIABLES dependientes:

TMP (MPa): Presión transmembranal en MPa.

CFV (m/s): Velocidad tangencial en m/s.

TMP*CFV

Tabla 53: Resumen de los coeficientes del modelo de regresión para los datos estacionarios de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Parameter</i>	<i>Estimate</i>	<i>Standard error</i>	<i>T Statistic</i>	<i>P-Value</i>
CONSTANTE	21.278	5.70621	3.72898	0.0058
TMP	-6.300	20.8361	-0.30236	0.7701
CFV	8.938	2.64146	3.38354	0.0096
TMP*CFV	51.750	9.64526	5.36533	0.0007

Tabla 54: Análisis de la varianza del modelo de regresión para los datos estacionarios de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
Model	5513.110	3	1837.7	197.54	0.0000
Residual	74.425	8	9.3031		
Total (Corr.)	5587.530	11			

R^2 del modelo de regresión = 98.668 %

MAE = 1.95389

La ecuación que presenta el modelo es la siguiente;

$$J_{pss} = 21.2783 - 6.3 \cdot \text{TMP} + 8.9375 \cdot \text{CFV} + 51.75 \cdot \text{TMP} \cdot \text{CFV} \quad (\text{Ec. 54})$$

Donde la presión transmembranal tiene unidades de MPa y la velocidad tangencial tiene unidades de m/s.

Al ser el p-valor de la tabla del análisis de la varianza menor que 0.05, hay una relación estadísticamente significativa entre las variables con el 95% de nivel de confianza.

B. DATOS DE LA MEMBRANA TAMI

Variable dependiente: J_{pss} ($L \cdot m^{-2} \cdot hr^{-1}$)

VARIABLES independientes:

CFV: velocidad tangencial (m/s)

CFV*TMP

TMP*CO

1/CFV

1/CO

1/TMP

donde:

- TMP: presión transmembranal (MPa)
- CFV: velocidad tangencial (m/s)
- CO: Concentración de alimento

Tabla 55: Resumen de los coeficientes del modelo de regresión para los datos estacionarios de los ensayos realizados con la membrana TAMI.

<i>Parameter</i>	<i>Estimate</i>	<i>Standard error</i>	<i>T Statistic</i>	<i>P-Valor</i>
CONSTANTE	83.7571	7.71466	10.8569	0.0000
CFV	-9.52029	1.92576	-4.94366	0.0000
TMP*CFV	31.6571	3.30854	9.5683	0.0000
TMP*CO	-5.55841	0.534019	-10.4086	0.0000
1/CFV	-19.3477	4.43502	-4.3625	0.0001
1/CO	-45.0146	14.3269	-3.14195	0.0038
1/TMP	-5.28804	0.771138	-6.85745	0.0000

Tabla 56: Análisis de la varianza del modelo de regresión para los datos estacionarios de los ensayos realizados con la membrana CARBOSEP.

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
Model	4953.0	6	825.5	188.86	0.0000
Residual	126.758	29	4.37097		
Total (Corr.)	5079.76	35			

R^2 del modelo de regresión = 97.5046 %

MAE = 1.47524

La ecuación que presenta el modelo es la siguiente:

$$j_{pss} = 83.7571 - 9.5029 \cdot CFV + 31.6571 \cdot CFV \cdot TMP - 5.55841 \cdot TMP \cdot CO - \frac{19.3477}{CFV} - \frac{45.0146}{CO} - \frac{5.28804}{TMP} \quad (\text{Ec. 54})$$

Donde la presión transmembranal tiene unidades de MPa, la concentración tiene unidades de g/L y la velocidad tangencial tiene unidades de m/s.

Al ser el p-valor de la tabla del análisis de la varianza menor que 0.05, hay una relación estadísticamente significativa entre las variables con el 95% de nivel de confianza.

7. BIBLIOGRAFÍA

Alcaina Miranda Maria Isabel Procesos de separación de membranas sintéticas, Departamento de Ingeniería Química y Nuclear, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, España.

Aydinera C., Demir I., Yildiz E., Modeling of flux decline in crossflow microfiltration using neural networks: the case of phosphate removal, *Journal of Membrane Science* 248 (2005) 53-62.

Baker R.W. *Membrane technology and applications*. California, EEUU : Wiley, 2004.

Bartlett M.R., Bird M., Measuring and modelling flux recovery during chemical cleaning of MF membranes for processing of the whey protein concentrate, *Journal of Food Engineering* 53 (2002) 143-152.

Bashir Rahmanian, Majid Pakizeh, Seyed Ali Akbar Mansoori, Reza Abedini, Application of experimental design approach and artificial neural network (ANN) for the determination of potential micellar-enhanced ultrafiltration process, *Journal of Hazardous Materials* 187 (2011) 67-74.

Basogain Olabe X., *Redes Neuronales Artificiales y sus Aplicaciones*, Departamento de Ingeniería y Automática , Escuela Superior de Ingeniería de Bilbao, EHU.

Biswajit Sarkar, Aritra Sengupta, Sirshendu De, Sunando DasGupta, Prediction of permeate flux during electric field enhanced cross-flow ultrafiltration—A neural network approach, *Separation and Purification Technology* 65 (2009) 260-268.

Chellam Shankararaman, Artificial neural network model for transient crossflow microfiltration of polydispersed suspensions, *Journal of Membrane Science* 258 (2005) 35-42.

Chen, C.; Yin, H.Q.; Humail, I.; Wang, Y.H.; Qu, X.H., *Int. J. Refract. Met. Hard Mater* 25 (2007) 411–416.

Chen Huaiqun, S. Kim Albert, Prediction of permeate flux decline in crossflow membrane filtration of et al colloidal suspension: a radial basis function neural network approach, *Desalination* 192 (2006) 415-428.

Cheryan M, *Ultrafiltration and Microfiltration Handbook*, New York , CRC Press, Second edition, 1998.

Chuyang Y. Tang, T.H. Chong, Anthony G. Fane, Colloidal interactions and fouling of NF and RO membranes: A review, *Advances in Colloid and Interface Science* 164 (2011) 126–143.

Curcio S., Germana S., Calabrò V., Iorio G., Ultrafiltration of BSA in pulsating conditions: an artificial neural networks approach, *Journal of Membrane Science* 246 (2005) 235–247

Dang Xuanju, Tan Yonghong, Neural networks dynamic hysteresis model for piezoceramic actuator based on hysteresis operator of first-order differential equation, *Physica B* 365 (2005) 173–184.

Darwish N.A., Hilal N., Mohammad H., Al-Zoubi A.W., Neural networks simulation of the filtration of sodium chloride and magnesium chloride solutions using nanofiltration membranes, *Chemical Engineering Research and Design* 75 (2007) 417-430.

Daufin G., Merin U., Labbé J.P., Quémerais A., Kerhervé FL., Cleaning of inorganic membranes after whey and milk ultrafiltration, *Biotechnology and Bioengineering* 38 (1991) 82-89.

Daufin G., Merin U., Kerherve F.L., Labbe J.P., Quemerais A., Bousser C., Efficiency of cleaning agents for an inorganic membrane after milk ultrafiltration, *Journal of Dairy Research* 59 (1992) 29-38.

Davis R.H., Modelling of fouling of crossflow microfiltration membranes, *Separation and Purification Methods* 21 (1992) 75-126.

de Barros S.T.D., Andrade S.T.D., Mendes E.S., Peres L., Study of fouling mechanism in pineapple juice clarification by ultrafiltration, *Journal of Membrane Science* 215 (2003) 213-224.

Guadix A., Zapata J.E., Almecija M.C., Guadix E.M., Predicting the flux decline in milk cross-flow ceramic ultrafiltration by artificial neural networks, *Desalination* 250 (2010) 1118–1120.

Guoliang Ji, Fuguo Li, Qinghua Li, Huiqu Li, Zhi Li, A comparative study on Arrhenius-type constitutive model and artificial neural network model to predict high-temperature deformation behaviour in Aermet100 steel, *Materials Science and Engineering: A* 528 (2011) 4774–4782

H.K Shon, S Vigneswaran, In S Kim, J Cho, H.H Ngo, Effect of pretreatment on the fouling of membranes: application in biologically treated sewage effluent, *Journal of Membrane Science* 234 (2004) 111-120.

Hong-Ying Li, Dong-Dong Wei, Yang-Hua Li, Xiao-Feng Wang, Application of artificial neural network and constitutive equations to describe the hot compressive behavior of 28CrMnMoV steel, *Materials & Design* 35 (2012) 557–562.

J. Serrano Antonio, Soria Emilio, D. Martín José, Redes Neuronales Artificiales, Departamento de Ingeniería Electrónica; Escuela Técnica Superior de Ingeniería. Universidad de Valencia, 2010.

J.M. Gozávez-Zafrilla, D. Sanz-Escribano, J. Lora-García, M.C. León Hidalgo. Nanofiltration of secondary effluent for wastewater reuse in the textile industry, *Desalination* 222 (2008) 272-279.

Jacob S., Jaffrin M.Y., Purification of brown cane sugar solutions by ultrafiltration with ceramic membranes: investigation of membrane fouling, *Separation Science and Technology* 35 (2000) 989-1010..

Kevin K.W. Wan, H.L. Tang, Liu Yang, Joseph C. Lam, An analysis of thermal and solar zone radiation models using an Angstrom–Prescott equation and artificial neural networks, *Energy* 33 (2008) 1115–1127.

Landeras Gorka, Ortiz-Barredo A., López J.J., Comparison of artificial neural network models and empirical and semi-empirical equations for daily reference evapotranspiration estimation in the Basque Country (Northern Spain) agricultural water management 95 (2008) 553 – 565.

Lipnizki F., Opportunities and challenges of using ultrafiltration for the concentration of diluted coating materials, *Desalination* 224 (2008) 98-104.

Liu C., et al. Membrane Chemical Cleaning: From Art to Science. Ed. Corporation Pall. - Port Washington, USA, 2006. - http://www.pall.com/water_19565.asp.

M. Cabassud, N. Delgrange-Vincent, C. Cabassud, L. Durand-Bourlier, J.M. Lainé, Neural Networks: a tool to improve UF plant productivity, *Desalination* 145 (2002) 223-231.

M. Hamachi, M. Cabassud, A. Davin, M. Mietton Peuchot, Dynamic modelling of crossflow microfiltration of bentonite suspension using recurrent neural network, *Chemical Engineering* 2 (1999) 359–366.

Meindersma G.W., Augeraud J., Vergossen F.H.P., Separation of a biocatalyst with ultrafiltration or filtration after bioconversion, *Journal of Membrane Science* 125 (1997) 333-349.

Mohtada Sadrzadeh, Toraj Mohammadi, Javad Ivakpour, Norollah Kasiri, Separation of lead ions from wastewater using electrodialysis: Comparing mathematical and neural network modeling, *Chemical Engineering Journal* 144 (2008) 431–441.

Mulder M., Basic principles of membrane technology, Dordrecht : Kluwer Academic, Second Edition, 2000.

N. Delgrange, C. Cabassud, M. Cabassud, L. Durand-Bourlier, J.M. Lainé, Modelling of ultrafiltration fouling by neural networks. *Desalination* 118 (1998) 213-227.

N. Delgrange-Vincent, C. Cabassud, M. Cabassud, L. Durand-Bourlier, J.M. Lâiné, Neural networks for long term prediction of fouling and backwash efficiency in ultrafiltration for drinking water production. *Desalination* 131 (2000) 353-362.

P. Rai, G.C. Majumdar, S. DasGupta, S. De, Modeling the performance of batch ultrafiltration of synthetic fruit juice and mosambi juice using artificial neural network, *Journal of Food Engineering* 71 (2005) 273-281.

Parnham C.S., Davis R.H., Protein recovery from bacterial cell debris using crossflow microfiltration with backpulsing, *Journal of Membrane Science* 118 (1996) 259-268.

Porter J.J., Porter R.S., Filtration studies of selected anionic dyes using asymmetric titanium dioxide membranes on porous stainless-steel tubes, *Journal of Membrane Science* 101 (1995) 67-81.

Prádanos P., Arribas J.I., Hernández, A. Mass transfer coefficient and retention of PEGs in low pressure cross-flow ultrafiltration through asymmetric membranes, *Journal of Membrane Science* 99 (1995) 1-20.

Purkait M.K., Kumar V., Dinesh, Maity Damodar, Treatment of leather plant effluent using NF followed by RO and permeate flux prediction using artificial neural network, *Chemical Engineering Journal* 151 (2009) 275-285.

R. Chan, V. Chen, Characterization of protein fouling on membranes: opportunities and challenges, *Journal of Membrane Science* 242 (2004) 169-188.

R. Kapoor, D. Pal, J.K. Chakravarty, Use of artificial neural networks to predict the deformation behavior of Zr-2.5Nb-0.5Cu, *Journal of Materials Processing Technology* 169 (2005) 199-205.

Razavi Mohammad A., Mortazavi Ali, Mousavi Mahmoud, Dynamic modelling of milk ultrafiltration by artificial neural network, *Journal of Membrane Science* 220 (2004) 47-58.

Rinaldoni A.N., Taragaza C.C., Campderrós M.E., Pérez Padilla A., Assessing performance of skim milk ultrafiltration by using technical parameters, *Journal of Food Engineering*, 92 (2009) 226-232.

S. Ghandehari, Mohammad Mehdi Montazer-Rahmati, Morteza Asghari, A comparison between semi-theoretical and empirical modeling of cross-flow microfiltration using ANN, *Desalination* 277 (2011) 348-355.

S.M.A. Razavi, S.M. Mousavi, S.A. Mortazavi, Dynamic prediction of milk ultrafiltration performance, a neural network approach, *Chemical Engineering Science* 2003.

Sahoo Goloka Behari, Ray Chittaranjan, Predicting flux decline in crossflow membranes using artificial neural networks and genetic algorithms, *Journal of Membrane Science* 283 (2006) 147-157.

Shetty Grishma R., Chellam Shankararaman, Predicting membrane fouling during municipal drinking water nanofiltration using artificial neural networks, *Journal of Membrane Science* 217 (2003) 69–86.

Sulaiman M.Z., Sulaiman N.M., Abdellah, B., Prediction of dynamic permeate flux during cross-flow ultrafiltration of polyethylene glycol using concentration polarization-gel layer model, *Journal of Membrane Science* 189 (2001) 151-165.

Taragaza C.C., Campderrós M.E., Pérez-Padilla A., Characterization of exponential permeate flux by technical parameters during fouling and membrane cleaning by electric field, *Journal of Membrane Science*, 283 (2006) 339-345.

Teodosiu Carmen, Pastravanu Octavian, Macoveanu Matei, Neural network models for ultrafiltration and backwashing, *Wat. Res.* 34 18 (2000) 4371-4380.

V. Kalaichelvi, D. Sivakumar, R. Karthikeyan, K. Palanikumar, Prediction of the Flow Stress of 6061Al-15% SiC-MMC Composites Using Adaptive Network Based Fuzzy Inference System, *Materials & Design* 30 (2009) 1362–1370.

Villafranca Rafael Romero, Ramajo Luisa Rosa Zúnica, *Métodos Estadísticos en Ingeniería*, Universidad Politécnica de Valencia, 2005.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., Bergantiños Rodríguez E., Analysis of membrane pore blocking models adapted to crossflow ultrafiltration in the ultrafiltration of PEG, *Desalination* 149 (2009) 232-241.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., Bergantiños Rodríguez E., Application of a dynamic model for predicting flux decline in crossflow ultrafiltration, *Desalination* 198 (2006) 303–309.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., J.M. Gozávez-Zafrilla, Bergantiños Rodríguez E., Modelling of flux decline in crossflow ultrafiltration of macromolecules: comparison between predicted and experimental results, *Desalination* 204 (2007) 328–334.

Vincent Vela M.C., Bergantiños Rodríguez E., Álvarez Blanco S., Lora García J., Ultrafiltration permeate flux decline prediction for gel layer forming solutes using monotubular ceramic membranes, *Desalination* 240 (2009) 89-93.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., J.M. Gozávez-Zafrilla, Bergantiños Rodríguez E., Utilization of a shear induced diffusion model to predict permeate flux in the crossflow ultrafiltration of macromolecules, *Desalination* 206 (2007) 61-68.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., Bergantiños Rodríguez E., Application of a dynamic model that combines pore blocking and cake formation in crossflow ultrafiltration, *Desalination* 200 (2006) 138–139.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., Bergantiños Rodríguez E., Prediction of flux decline in the ultrafiltration of macromolecules, *Desalination* 192 (2006) 323–329.

Vincent Vela M.C., Álvarez Blanco S., Lora García J., Crossflow ultrafiltration of cake forming solutes: a non-steady state model, *Desalination* 184 (2005) 347–356.

Vincent Vela María Cinta, Modelado dinámico de procesos de ultrafiltración tangencial aplicados a la separación de macromoléculas, Tesis doctoral, Universidad Politécnica de Valencia, 2006.

W.R. Bowen, M.G. Jones, H.N.S. Yousef, Dynamic ultrafiltration of proteins — a neural network approach, *Journal of Membrane Science* 146 (1998) 225–235.

Walczak Steven, Cerpa Narciso, *Artificial Neural Networks*. pp. 631-635.

Wei Gao, Heng Liang, Jun Ma, Mei Han, Zhong-lin Chen, Zheng-shuang Han, Gui-bai Li, Membrane fouling control in ultrafiltration technology for drinking water production: A review, *Desalination* 272 (2011) 1–8

Wenshan Guo, Huu-Hao Ngo, Jianxin Li, A mini-review on membrane fouling, *Bioresource Technology* (2012) En prensa.

X. Xiao, G.Q. Liu, B.F. Hu, X. Zheng, L.N. Wang, S.J. Chen, A. Ullah, A comparative study on Arrhenius-type constitutive equations and artificial neural network model to predict high-temperature deformation behaviour in 12Cr3WV steel, *Computational Materials Science* 62 (2012) 227–234.

Y. El Rayess, C. Albasi, P. Bacchin, P. Taillandier, J. Raynal, M. Mietton-Peuchot, A. Devatine, Cross-flow microfiltration applied to oenology: A review, *Journal of Membrane Science* 382 (1–2) (2011) 1-19.

Yee K.W.K., Wiley D.E., Bao J., A unified model of the time dependence of flux decline for the long-term ultrafiltration of whey, *Journal of Membrane Science* 332 (2009) 69-80.

Zydney A.L., Ho C-C. and Yuan W, Fouling phenomena during microfiltration: effects of pore blockage, cake filtration and membrane morphology in Bhattacharyya D., Butterfield A. (Eds.) *New insights into membrane science and technology: polymeric and biofunctional membranes (Membrane Science and Technology Series 8)* (2003) 27-45), Elsevier, Amsterdam, Holanda, 2003.