

**“PREDICCIÓN DE DENSIDAD Y VISCOSIDAD DEL
BIODIÉSEL A PARTIR DE REDES NEURONALES
ARTIFICIALES”**

TESIS

QUE PRESENTA

MIRNA JIMENA HERNÁNDEZ SÁNCHEZ
MATRICULA 2181800299

PARA OBTENER EL GRADO DE
**MAESTRA EN CIENCIAS
(ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE)**

CODIRECTORES DE TESIS:

DR. LUIS FELIPE RAMÍREZ VERDUZCO
DR. EDUARDO SALVADOR PÉREZ CISNEROS

JURADO ASIGNADO:

DRA. MARÍA TERESA LÓPEZ ARENAS
DR. LUIS FELIPE RAMÍREZ VERDUZCO
DR. ELÍAS MARTÍNEZ HERNÁNDEZ



Iztapalapa, Ciudad de México, agosto 2021.



RESUMEN

El triple efecto del agotamiento de las reservas de combustibles fósiles, la contaminación por el uso de combustibles convencionales y la demanda cada vez mayor de energía, ha incentivado la búsqueda de fuentes alternativas de energía, que sean limpias, sostenibles, confiables y económicamente viables.

La biomasa es una fuente alternativa de energía, a partir de la cual se pueden obtener diversos tipos de biocombustibles, entre ellos destaca el biodiésel, el cual es una alternativa prometedora para sustituir al diésel fósil, ya que cuenta con propiedades físicas similares.

El biodiésel utilizado en motores diésel debe cumplir con una serie de estándares de calidad, dentro de los que destacan la densidad y viscosidad, ya que ambas propiedades están relacionadas con parámetros de rendimiento y potencia de salida del motor, además es necesario conocer dichas propiedades para el diseño, construcción, operación, optimización y control de procesos.

La determinación de la densidad y viscosidad del biodiésel se realiza con base en métodos estándar de prueba, por lo que el costo de la ejecución es alto, técnicamente desafiante, consume tiempo y energía, por lo que en este trabajo se han desarrollado modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos (componentes puros del biodiésel), biodiésel puro y mezclas de biodiésel.

Los modelos fueron desarrollados utilizando bases de datos experimentales recopilados de literatura y redes neuronales artificiales, las cuales son una herramienta para el diseño de modelos matemáticos. Cada modelo fue diseñado con base en una red neuronal de avance de dos capas, una oculta y una de salida, donde las funciones sigmoide e identidad fungieron como funciones transferencia.

En los modelos de predicción de propiedades de ésteres alquílicos se consideraron como variables de entrada la temperatura y los grupos funcionales presentes en la estructura de cada compuesto, mientras que en los modelos de predicción de



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

propiedades de biodiésel puro y mezclas de biodiésel las variables de entrada fueron la temperatura y composición de alquil ésteres presentes en el biocombustible.

Se realizaron ensayos con 2, 4, 6, 8 y 10 neuronas, pero el número de neuronas óptimo coincidió en todos los casos y fue de 10, ya que, a mayor número de neuronas, el modelo reproduce con mayor exactitud los datos experimentales. El algoritmo de entrenamiento de regularización bayesiana fue el más adecuado para modelar el comportamiento lineal de la densidad frente a la temperatura, mientras que el algoritmo de entrenamiento de Levenberg-Marquard fue seleccionado como el más apropiado para modelar el comportamiento no lineal de la viscosidad en función de la temperatura. En todos los casos, hay una gran concordancia entre los datos experimentales y los calculados debido a que tienen coeficientes de correlación mayores a 0.99.

En la literatura se pueden encontrar diversos modelos de predicción de propiedades del biodiésel, sin embargo, los desarrollados en este estudio representan un aporte a la literatura por ser capaces de predecir propiedades tanto de biodiésel puros como de mezclas en un amplio rango de temperatura, además, otro aspecto que diferencia los modelos de predicción desarrollados es que fueron diseñados considerando 15 ésteres metílicos, a fin de representar con mayor exactitud la composición de cualquier biodiésel puro o mezcla de biodiésel.

ABSTRACT

The triple effect of the depletion of fossil fuel reserves, pollution from conventional fuels, and the increasing energy demand has encouraged the search for alternative energy sources that are clean, sustainable, reliable, and economically viable.

Biomass is an alternative energy source to produce biofuels. For example, biodiesel, which is obtained from vegetable oils or animal fats and can be used in engines replacing fossil diesel since its similar physical properties.

The biodiesel used in diesel engines must comply with a series of quality standards, among which density and viscosity stand out since both properties are related to performance parameters and engine power output, where it is also necessary to know these properties to the design, construction, operation, optimization and control of processes.

The determination of the density and viscosity of biodiesel is carried out based on standard test methods, so the cost of execution is high, technically challenging, time and energy-consuming, so we have been developed prediction models in this work density and dynamic viscosity of alkyl esters (pure components of biodiesel), pure biodiesel and biodiesel blends.

We developed the models using experimental databases collected from the literature and artificial neural networks, a useful tool to design mathematical models. Each model was designed based on a two-layer advance neural network, one hidden and one output, where the sigmoid and identity functions served as transfer functions.

We considered the temperature and functional groups present in each compound as input variables for the models in charge of predicting the alkyl esters properties.

On the other hand, the models for predicting the properties of pure biodiesel and biodiesel mixtures the input variables were the temperature and composition of alkyl esters present in the biofuel.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

We carried out trials with 2, 4, 6, 8, and 10 neurons, where the optimal number of neurons coincided in all cases and was 10. Since as the number of neurons increases, the model reproduces the experimental data more accurately. The Bayesian regularization training algorithm was the most suitable for modeling the linear behavior of density versus temperature. The Levenberg-Marquart training algorithm was the most appropriate for modeling the non-linear behavior of viscosity as a function of temperature. In all cases, there is a good concordance between the experimental and calculated data because they have correlation coefficients greater than 0.99.

Although we can find various models to predict the biodiesel density and viscosity, the models developed in this study represent a novel contribution to predict the properties of both pure biodiesel and mixtures in a wide temperature range. Also, we constructed those models using 15 methyl esters for the accurate estimation of the composition of any pure biodiesel or biodiesel mixture.



CONTENIDO

Lista de Tablas	III
Lista de Ilustraciones.....	V
Nomenclatura	VII
1. Introducción	1
2. Objetivos.....	4
2.1 Objetivo general.....	4
2.2 Objetivos particulares	4
3. Marco Teórico.....	5
3.1 Biodiésel	5
3.2 Densidad.....	15
3.3 Viscosidad	22
3.4 Correlación entre la estructura química de los componentes puros del biodiésel y la densidad y viscosidad del mismo.....	26
3.5 Redes Neuronales Artificiales	27
4. Metodología.....	35
4.1 Recolección de datos experimentales.	36
4.2 Selección de la aplicación.....	37
4.3 Definición de los datos de entrada y salida de las redes.	38
4.4 Selección de datos de validación, prueba y entrenamiento.	40
4.5 Definición del número de neuronas en la capa oculta.	42
4.6 Entrenamiento de las redes	42
4.7 Selección de la configuración óptima.....	44
4.8 Validación y uso de las redes.	45
5. Resultados y Discusión.....	48



5.1 Recolección de datos experimentales	48
5.2 Selección de la aplicación.....	51
5.3 Definición de los datos de entrada y salida de las redes.	52
5.4 Selección de datos de validación, prueba y entrenamiento.	53
5.5 Definición del número de neuronas en la capa oculta.	54
5.6 Entrenamiento de las redes	55
5.7 Selección de la configuración optima.....	55
5.8 Validación y uso de las redes.	74
6. Conclusiones y recomendaciones	78
7. Bibliografía.....	80
Apéndice A.....	93
Apéndice B.....	95
Apéndice C.....	97
Apéndice D.....	99

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades deseables del biodiésel.	6
Tabla 2. Clasificación de los biocombustibles con base en el tipo de biomasa utilizada para producirlos.....	8
Tabla 3. Estructura química de algunos ácidos grasos.	10
Tabla 4. Propiedades del biodiésel y su importancia	11
Tabla 5. Estándares de biodiésel en Estados Unidos, Europa e India, y el estándar de diésel en Estados Unidos.	13
Tabla 6. Relación de la densidad del biodiésel con otras de sus propiedades.	17
Tabla 7. Modelos de predicción de densidad.	18
Tabla 8. Modelos de predicción de viscosidad	23
Tabla 9. Funciones de transferencia o activación empleadas en los modelos de ANN	32
Tabla 10. Algoritmos de entrenamiento de propagación hacia atrás.....	34
Tabla 11. Estructura química de algunos ésteres alquílicos en función de sus grupos funcionales.	38
Tabla 12. Corridas "experimentales" realizadas para cada modelo de predicción.	44
Tabla 13. Métricas para evaluar el desempeño de las RNA.	44
Tabla 14. Métricas utilizadas para validar los modelos desarrollados a partir de RNA.	46
Tabla 15. Conformación de las matrices para evaluar los modelos de predicción de propiedades generados.....	47
Tabla 16. Extensión de las bases de datos generadas.	48
Tabla 17. Tamaño de las matrices de entrada y salida para los modelos generados.	52
Tabla 18. Distribución de los subconjuntos de datos de entrenamiento, validación y prueba.	53
Tabla 19. Arquitectura de las redes neuronales realizadas.....	55
Tabla 20. Funciones generadas para la optimización de los modelos desarrollados.	55
Tabla 21. Resultados.	56



Tabla 22. Matriz de pesos y bias para el modelo D_RB_10.....	58
Tabla 23. Matriz de pesos y bias para el modelo V_LM_10.....	59
Tabla 24. Matriz de pesos y bias para el modelo Bio_D_RB_10.....	61
Tabla 25. Matriz de pesos y bias para el modelo Bio_V_LM_10.....	63
Tabla 26. R, AAD y σ para cada subconjunto de cada modelo desarrollado.	75
Tabla 27. Comparación entre diversos modelos de predicción de propiedades del biodiésel.	75

LISTA DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1. Reacción de transesterificación para producir biodiésel y glicerol.	7
Ilustración 2. Estructura química de un triglicérido	9
Ilustración 3. Hitos relevantes en el desarrollo y uso del biodiésel.....	14
Ilustración 4. Tareas que los modelos ANN pueden resolver.....	29
Ilustración 5. Representación gráfica de la neurona modelo McCulloch-Pitts o unidad de umbral binario.....	31
Ilustración 6. Arquitectura de A) Redes neuronales de avance y B) redes neuronales recurrentes o de retroalimentación.....	32
Ilustración 7. Diagrama de flujo para el proceso de diseño de una red neuronal. .	35
Ilustración 8. Composición de las bases de datos experimentales de A) Densidad de ésteres alquílicos y B) Viscosidad dinámica de ésteres alquílicos.	49
Ilustración 9. Porcentaje de datos experimentales compilados para A) Densidad de biodiésel puro y mezclas de biodiésel y B) Viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel.	50
Ilustración 10.Arquitectura simplificada de las redes neuronales desarrolladas....	51
Ilustración 11. Arquitectura de las ANN desarrolladas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica de EA.	57
Ilustración 12. Arquitectura de las ANN desarrolladas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica de EA.	60
Ilustración 13. Efecto de la temperatura sobre la densidad de A) Ésteres metílicos y B) Ésteres etílicos	65
Ilustración 14. Efecto de la temperatura sobre la viscosidad dinámica de A) Ésteres metílicos y B) Ésteres etílicos.....	66
Ilustración 15. Efecto de la temperatura sobre la densidad de biodiesel algunos biodiéselos puros.	67
Ilustración 16. Efecto de la temperatura sobre la viscosidad dinámica de algunos biodiéselos puros.	68
Ilustración 17. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función D_RB_10. A) Entrenamiento y B) Prueba.....	70



Ilustración 18. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función $V_{LM_{10}}$. A) Entrenamiento B) Validación y C) Prueba. 71

Ilustración 19. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función $Bio_D_RB_{10}$. A) Entrenamiento y B) Prueba. 72

Ilustración 20. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función $Bio_V_LM_{10}$. A) Entrenamiento B) Validación y C) Prueba. 73

NOMENCLATURA

Abreviatura	Significado
GEI	Gases de Efecto Invernadero
FAAE	Ésteres Alquílicos de Ácidos Grasos, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Alkyl Esters
FAME	Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Methyl Esters
FAEE	Ésteres Etílicos de Ácidos Grasos, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Ethyl Esters
VO's	Aceites Vegetales, por sus siglas en inglés, Vegetable Oils
ASTM	Sociedad Americana para Pruebas y Materiales, por sus siglas en inglés, American Society for Testing and Materials
CEN	Comité Europeo de Normalización
IS	Norma India, por sus siglas en inglés, Indian Standard
ONU	Organización de las Naciones Unidas
NOx	Óxidos de nitrógeno
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
SOx.	Óxidos de azufre
CP	Punto de nube, por sus siglas en inglés, Cloud Point
PP	Punto de fluidez por sus siglas en inglés, Pour Point
CFPP	Punto de obstrucción del filtro frío, por sus siglas en inglés, Cold Filter Plugging Point
FPT	Tendencia de obstrucción del filtro, por sus siglas en inglés, Filter Plugging Tendency
HHV	Poder calorífico, por sus siglas en inglés, High Heating Value
FP	Punto de inflamación, por sus siglas en inglés, Flash Point
CN	Número de cetano, por sus siglas en inglés, Cetane Number
NNF	Ajuste de Red Neuronal, por sus siglas en inglés, Neural Net Fitting



ANN	Redes Neuronales Artificiales, por sus siglas en inglés, Artificial Neural Networks
RNA	Redes Neuronales Artificiales
AAD	Desviación Media Absoluta, por sus siglas en inglés, Average Absolute Deviation
R^2	Coeficiente de determinación
R	Coeficiente de correlación
σ	Desviación estándar
Q_{LOO}^2	Coeficiente de correlación con validación cruzada, comúnmente logrado por dejar uno afuera (LOO, por sus siglas en inglés, Leave-one-out,)
Q_{ext}^2	Coeficiente de correlación de validación externa
LCA	Análisis de Ciclo de Vida, por sus siglas en inglés, Lifecycle Assessment
LM	Retropropagación de Levenberg-Marquard
RB	Retropropagación de regularización bayesiana
GCE	Retropropagación de gradiente conjugado escalado
%m/m	Porcentaje en masa
x_i	Fracción mol
w_i	Fracción masa
Tr	Temperatura reducida
ω	Factor acéntrico
V	Volumen molar
Z_{RA}	Factor de compresibilidad



1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, dos temas fundamentales en torno a la política energética internacional son la seguridad energética y la mitigación efectiva del cambio climático. Por un lado, el consumo de energía a nivel mundial se ha incrementado como consecuencia del crecimiento rápido de la población y del desarrollo económico, tecnológico e industrial. Por otro lado, las emisiones de Gases de Efecto Invernadero (GEI) asociadas al uso en exceso de combustibles fósiles han generado problemas ambientales, tales como el calentamiento global a causa del cambio climático [1].

Esta situación ha incentivado una extensa investigación sobre fuentes alternativas de energía, que sean seguras, con baja huella de carbono, y que además de reducir el impacto ambiental sean sostenibles y renovables. La mejora de tecnologías capaces de explotar dichas fuentes energéticas es imprescindible para alcanzar el desarrollo sostenible, cuyos tres pilares son el desarrollo económico, el desarrollo social y la protección ambiental [2].

Uno de los sectores clave en la transición energética es el de transporte, por lo que en las últimas décadas se ha prestado más atención a la producción y uso de biocombustibles, en especial el biodiésel [3].

El biodiésel es una alternativa prometedora para sustituir a los combustibles convencionales tipo diésel fósil porque sus propiedades físicas son muy similares. Algunas de las ventajas del biodiésel ante el diésel de origen fósil incluyen la biodegradabilidad, no toxicidad, niveles más bajos de emisiones contaminantes, alto índice de cetano, bajo contenido de azufre, emisiones menores de óxidos de nitrógeno (NOx), renovabilidad y alta susceptibilidad a la oxidación [4].

Generalmente, el biodiésel se produce a través de una conversión química denominada transesterificación, donde un aceite vegetal o grasa animal reaccionan con un alcohol en presencia de un catalizador para producir biodiésel, conformado principalmente por ésteres alquílicos de ácidos grasos (FAAE, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Alkyl Esters) y glicerina [5].

Con el propósito de que el biodiésel sea utilizado en motores diésel y calefacción debe cumplir con una serie de estándares de calidad. En la Unión Europea, los requerimientos para biodiésel se reúnen en la norma CEN (Comité Europeo de Normalización) EN 14214, en Estados Unidos en la ASTM (Sociedad Americana para Pruebas y Materiales, por sus siglas en inglés, American Society for Testing and Materials) D6751 y en India en la IS (Norma India, por sus siglas en inglés, Indian Standard) 15607. Dos propiedades fundamentales al seleccionar combustibles para motores diésel son la densidad y viscosidad [6].

La viscosidad y la densidad de los combustibles son parámetros clave porque juegan un papel importante en la inyección y atomización del combustible respectivamente, además, ambas propiedades están relacionadas con parámetros de rendimiento y potencia de salida del motor, además son parámetros requeridos como datos de entrada en los modelos de combustión predictiva del motor [7].

En el caso del biodiésel, dichas propiedades son función de las materias primas a partir de las cuales se produce este biocombustible, por lo tanto, diversos autores han propuesto diferentes modelos de predicción de densidad y viscosidad de biodiésel y sus componentes puros FAAE [8]–[12]. Sin embargo, la mayor parte de ellos no son universales, es decir que han sido desarrollados para predecir las propiedades de determinados tipos de biodiésel, otros sólo son capaces de predecir propiedades a una sola temperatura o en un rango limitado de la misma, en el marco teórico se discuten con mayor profundidad los modelos de predicción de densidad y viscosidad de diversos autores. Otra área de oportunidad que se observó al analizar los modelos de predicción de propiedades de biodiésel encontrados en la literatura es la exactitud con la que se representa la composición, ya que hay autores que sólo consideran los ésteres alquílicos que se encuentran en mayor proporción en la naturaleza.

De lo anterior se infiere la necesidad de trabajar en modelos novedosos de predicción de densidad y viscosidad de biodiésel y sus componentes puros que reúnan las siguientes características:

🌱 Precisión comparable a la asociada a los modelos de predicción convencionales basados en ecuaciones de estado, métodos de contribución de grupos o reglas de mezclado.

🌱 Aplicables en un rango amplio de temperatura.

🌱 Aplicables a compuestos puros y mezclas¹.

🌱 Dependientes de la composición de alquil ésteres y la temperatura.

🌱 Capaces de representar con exactitud la composición de una amplia gama de biodiésel tanto puros como mezclas de los mismos.

Sujeto a lo anterior, se han desarrollado modelos matemáticos, estadísticos y redes neuronales artificiales (ANN, por sus siglas en inglés, Artificial Neural Networks) para predecir las propiedades del biodiésel. Los modelos de ANN parten de una base de datos experimentales conocidos, para predecir las propiedades del biodiésel a partir de su composición y, aunque poseen un alto nivel de precisión, aún son pocos los modelos de predicción de densidad y viscosidad del biodiésel a partir de ANN que cuentan con las características listadas anteriormente, por lo que en éste trabajo se decidió utilizar dicha herramienta para desarrollar modelos de predicción de densidad y viscosidad del biodiésel, ya que son aptas para la solución de problemas lineales y no lineales. Dichas redes están inspiradas en el sistema nervioso biológico y trabajan de manera similar al cerebro humano. Las células nerviosas artificiales, denominadas neuronas se encargan de procesar la información de entrada y generar un resultado ajustado de salida [13].

¹ Las mezclas de biodiésel se refieren a un biocombustible generado de la combinación de biodiésel producidos a partir de diferentes materias primas, ya sea aceites vegetales o grasas animales.


2. OBJETIVOS


La determinación de la densidad y viscosidad del biodiésel es indispensable para evaluar su posible uso en motores diésel. Aunque estas propiedades se pueden valorar experimentalmente, las técnicas de inteligencia artificial como las ANN también se pueden utilizar para predecir dichas propiedades.


2.1 OBJETIVO GENERAL


Desarrollar modelos matemáticos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel, utilizando Redes Neuronales Artificiales (RNA).

2.2 OBJETIVOS PARTICULARES

 Desarrollar un modelo de predicción de densidad de ésteres alquílicos en función de la temperatura haciendo uso de la aplicación Ajuste de Red Neuronal (NNF, por sus siglas en inglés, Neural Net Fitting) del software MATLAB®.

 Elaborar un modelo de predicción de densidad de biodiésel puro y mezclas de biodiésel en función de la composición de ésteres alquílicos y temperatura, usando la aplicación NNF del software MATLAB®.

 Desarrollar un modelo de predicción de viscosidad dinámica de ésteres alquílicos en función de la temperatura haciendo uso de la aplicación NNF del software MATLAB®.

 Elaborar un modelo de predicción de viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel en función de la composición de ésteres alquílicos y temperatura, usando la aplicación NNF del software MATLAB®.

3. MARCO TEÓRICO

La energía se ha convertido en un factor clave para impulsar el desarrollo económico de las naciones, lo que ha ocasionado un aumento en la demanda de energía y por ende la explotación acelerada de los combustibles fósiles [14].

Los combustibles fósiles son limitados, no renovables y además su uso genera gases de efecto invernadero (GHG, por sus siglas en inglés, Greenhouse Gases), los cuales fomentan el deterioro ambiental a causa del cambio climático [15].

El agotamiento de las reservas de combustibles fósiles, la contaminación por el uso de dichos combustibles y la demanda cada vez mayor de energía, ha llevado a la búsqueda de fuentes alternativas de energía, que sean limpias, sostenibles, confiables y económicamente viables.

Un ejemplo de energía renovable es la bioenergía derivada de la biomasa, caracterizada por su neutralidad en emisiones de dióxido de carbono (CO_2) a la atmósfera, así como por su abundancia y versatilidad. Los biocombustibles líquidos, utilizados para el transporte y los procesos industriales son productos energéticos procedentes de la biomasa.

Un biocombustible de creciente interés en el mercado es el biodiésel, ya que puede sustituir al diésel de origen fósil en los motores, y también puede usarse como combustible para calefacción. La producción actual de biodiésel es pequeña en relación con el diésel de petróleo, sin embargo, existen oportunidades para expandir la producción en muchas regiones [16].

3.1 BIODIÉSEL

El biodiésel es un combustible alternativo al diésel fósil podría proporcionar seguridad e independencia energética a nivel regional y global. Se elabora a partir de recursos renovables como aceites vegetales, grasas animales, aceite de cocina usado e incluso algas. Por sus propiedades físicas similares a las del diésel fósil, el biodiésel puede mezclarse con diésel de petróleo y ser utilizado en motores diésel. En la Tabla 1, se encuentran algunas propiedades físicas deseables del biodiésel.

La combustión del biodiésel es más limpia a comparación de la del diésel convencional, ya que es esencialmente libre de azufre y compuestos aromáticos [17].

Tabla 1. Propiedades deseables del biodiésel.

Nombre común	Biodiésel (bio-diésel)
Nombre químico común	Éster (m)etílico de ácido graso
Gama de fórmulas químicas	C14-C24 ésteres (m)etílicos C15-25 H28-48 O2
Viscosidad cinemática (mm ² /s, a 313 K)	3.3-5.2
Densidad (kg/m ³ , a 288 K)	860-894
Punto de ebullición (K)	>475
Punto de inflamación (K)	430-455
Rango de destilación (K)	470-600
Presión de vapor (mmHg, a 295 K)	<5
Solubilidad en agua	Insoluble en agua
Apariencia física	Líquido transparente o ámbar
Olor	Ligero olor a humedad y jabón
Biodegradabilidad	Más biodegradable que el diésel de petróleo
Reactividad	Estable, pero se debe evitar el contacto con agentes oxidantes fuertes

Adaptado de: Demirbas, A. (2008). Biodiesel: A Realistic Fuel Alternative for Diesel Engines. (Springer-Verlag London Limited, Ed.). Turkey.

En comparación con el diésel fósil, el biodiésel tiene un mayor número de cetano (por lo tanto, una mejor calidad de ignición), una mejor biodegradabilidad, un punto de inflamación más alto, una mejor propiedad lubricante, un bajo contenido de azufre, pero un menor poder calorífico, mayor densidad y mayor viscosidad, por lo que, es menos adecuado para climas fríos debido a la gelificación, enturbiamiento y rendimiento general reducido [18].

Estudios de Evaluación de Ciclo de Vida (LCA, por sus siglas en inglés Life Cycle Assessment) han demostrado que el biodiésel produce un 20–80% menos de emisiones contaminantes con respecto al diésel fósil [19].

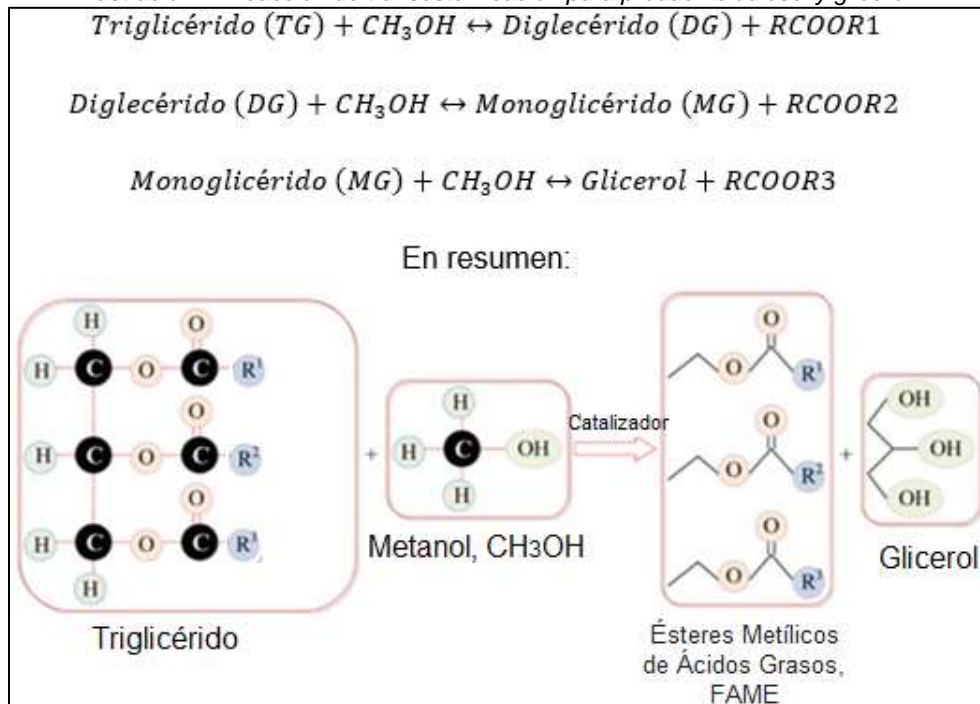
Las mezclas de biodiésel se denominan BXX, donde XX indica la cantidad de biodiésel en la mezcla, es decir, una mezcla B80 está compuesta por 80% biodiésel y 20% de diésel fósil). Una de las propiedades más atractivas del biodiésel es su miscibilidad con el diésel fósil, ya que mezclas B20 e inferiores tienen propiedades similares al diésel fósil, de tal manera que se pueden utilizar en motores de

combustión interna de encendido por compresión existentes sin necesidad de modificarlos. [5].

Químicamente, el biodiésel se define como una mezcla de monoalquil ésteres de ácidos grasos de cadena larga derivados de biolípidos renovables. Típicamente el biodiésel se produce mediante un proceso de transesterificación, donde un aceite vegetal o grasa animal reaccionan con metanol o etanol en presencia de un catalizador para producir una mezcla de ésteres metílicos o etílicos (biodiésel) y glicerina. En este proceso, la viscosidad del material original se reduce entre 10 y 15 veces, originalmente los aceites vegetales son extremadamente viscosos, por ejemplo, un aceite de semilla de cártamo presenta una viscosidad de 31.6 mm²/s a 311 K, y el biodiésel obtenido a partir de dicho aceite posee una viscosidad de 2.9 mm²/s [20].

Como muestra la Ilustración 1, la reacción de transesterificación se produce en tres etapas, en las que los triglicéridos se convierten en diglicéridos, monoglicéridos y finalmente glicerol, dichas etapas son reacciones reversibles y consecutivas [19].

Ilustración 1. Reacción de transesterificación para producir biodiésel y glicerol.













Adaptado de: Kegl, B., Kegl, M., & Pehan, S. (2013). Green Diesel engines. (Springer, Ed.), Studies in Systems, Decision and Control (Vol. 93). London.

La última etapa, donde se forman los ésteres de alquilo y glicerol a través de la reacción entre monoglicéridos y metanol determina la velocidad de reacción global, ya que los monoglicéridos son los compuestos intermediarios más estables. Estequiométricamente, la reacción requiere tres moles de alcohol por cada mol de triglicérido. Sin embargo, se suele usar un exceso de alcohol a fin de desplazar el equilibrio químico hacia productos [19].

En la reacción de transesterificación el metanol y etanol se usan con mayor frecuencia. El etanol es un alcohol ecológico y renovable debido a su producción a partir de recursos biológicos agrícolas, pero el metanol es preferido por encima del etanol en vista de su bajo costo y sus propiedades físicas y químicas [21].

Tabla 2. Clasificación de los biocombustibles con base en el tipo de biomasa utilizada para producirlos.

Generación	Descripción	Ejemplos
Primera	Biocombustibles producidos a partir de materias primas en competencia con la industria de alimentos y piensos.	<ul style="list-style-type: none">  Bioetanol procedente de cultivos de caña de azúcar, remolacha azucarera y almidón (maíz y trigo).  Biodiésel procedente de cultivos oleaginosos como colza, girasol, soja, aceite de palma y aceites comestibles de desecho.  Biogás derivado del almidón.
Segunda	Biocombustibles producidos a partir de cultivos no alimentarios (cultivos energéticos), o materias primas basadas en residuos.	<ul style="list-style-type: none">  Biogás derivado de residuos.  Biocombustibles de materiales lignocelulósicos como residuos de la agricultura, silvicultura e industria.  Biocombustibles de cultivos energéticos como el sorgo.
Tercera	Biocombustibles producidos utilizando microorganismos acuáticos como las algas.	<ul style="list-style-type: none">  Biodiésel producido con algas.  Hidrógeno de algas.
Cuarta	Biocombustibles basados en cultivos con alta eficiencia solar	<ul style="list-style-type: none">  Tecnología de carbono negativo.  Tecnología del futuro.

Adaptado de: Pande, M., & Bhaskarwar, A. (2012). Biomass Conversion to Energy. (Springer, Ed). Berlin.

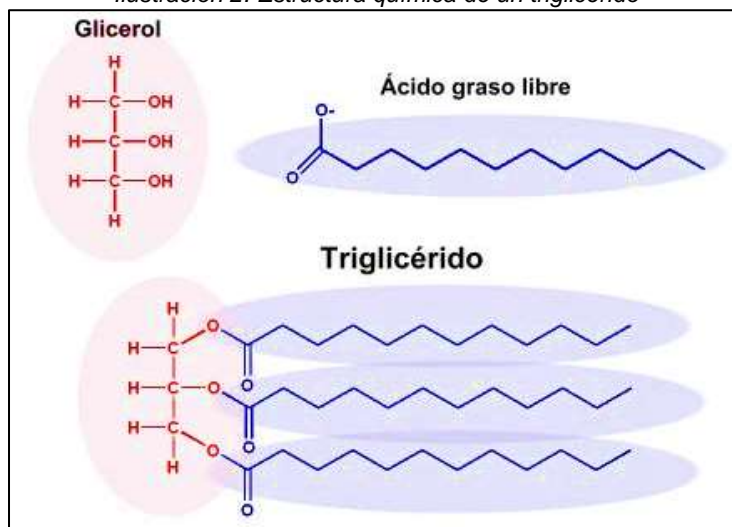
Los biocombustibles se clasifican en cuatro categorías de acuerdo a la naturaleza de la biomasa utilizada para producirlos. La Tabla 2 proporciona una clasificación de los biocombustibles con ejemplos representativos para cada categoría [22].

Para producir biodiésel se puede utilizar cuatro tipos de biolípidos como: (i) aceites vegetales (VO's, por sus siglas en inglés, Vegetable Oils) vírgenes (por ejemplo aceite de colza, soja, mostaza, palma, girasol, cáñamo, e incluso de algas), (ii)

residuos de VO's, (iii) grasas animales (como sebo y manteca) y (iv) VO's no comestibles (ya sea aceite de jatropa, nimbo de la India o ricino) [5].

Los VO's se componen principalmente de triglicéridos (90 a 98%), la composición restante corresponde a monoglicéridos y diglicéridos (2 a 10%), así como de ácidos grasos libres, fosfolípidos, carotenos, tocoferoles, compuestos de azufre y trazas de agua (1 a 5%). Los triglicéridos a su vez se conforman por una molécula de glicerol unida a tres ácidos grasos de estructura variable, como se ve en la Ilustración 2 [23].

Ilustración 2. Estructura química de un triglicérido



Tomado de la red internacional

Los ácidos grasos que componen a una molécula de triglicérido varían en el número de átomos de carbono y su grado de insaturación, dependiendo del número de enlaces dobles pueden ser saturados (ningún doble enlace), monosaturados (un doble enlace) y poliinsaturados (más de dos dobles enlaces). Los ácidos grasos se abrevian poniendo el número de carbonos seguido del de dobles enlaces separados por dos puntos, como se muestra en la Tabla 3.

Los ácidos grasos más abundantes en la naturaleza y por lo tanto en los VO's y grasas animales son: palmítico (16:0), esteárico (18:0), oleico (18:1), linoleico (18:2) y linolénico (18:3) [24].

Tabla 3. Estructura química de algunos ácidos grasos.

Nombre del ácido graso	Abreviatura	Fórmula condensada	Estructura
Ácido caprílico	C8:0	C ₈ H ₁₆ O ₂	
Ácido cáprico	C10:0	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido láurico	C12:0	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido mirístico	C14:0	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido palmítico	C16:0	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{13}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido esteárico	C18:0	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido araquidónico	C20:0	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{17}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido behénico	C22:0	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido lignocérico	C24:0	C ₂₄ H ₄₈ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{21}\text{CH}_2\text{COOH}$
Ácido miristoleico	C14:1	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	
Ácido palmitoleico	C16:1	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$
Ácido oleico	C18:1	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$
Ácido gadoleico	C20:1	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$
Ácido erúxico	C22:1	C ₂₂ H ₄₂ O ₂	
Ácido nervónico	C24:1	C ₂₄ H ₄₆ O ₂	$\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_{13}\text{COOH}$
Ácido linoleico	C18:2	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	
Ácido linolénico	C18:3	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	

Realizada por el autor

Los orígenes de los VO's o grasas animales son diversos, de hecho se han identificado más de 350 cultivos oleaginosos potencialmente útiles para la producción de biocombustibles alrededor del mundo [2].

La elección de la materia prima depende de las condiciones climatológicas de la región, los costos de producción, transporte y almacenamiento, la disponibilidad del recurso a lo largo del año, además de la presencia de especies endémicas en el país [25].

Las propiedades del biodiésel son función del perfil de ácidos grasos del aceite vegetal o grasa animal, el tipo de alcohol y catalizador utilizados durante su síntesis, la calidad de la materia prima, el grado de conversión, el grado de refinación y las condiciones de almacenamiento. La importancia de cada una de las propiedades del biocombustible se enlista en la Tabla 4 [18].

Tabla 4. Propiedades del biodiésel y su importancia

Propiedad	Importancia
Índice de acidez	Es una medida de la estabilidad del combustible.
Viscosidad cinemática	La viscosidad es la resistencia que tiene un líquido a fluir, y juega un papel importante en los procesos de atomización en los motores de combustión.
Densidad	La densidad determina la cantidad de combustible que se inyectará en la cámara de combustión para producir una cantidad fija de energía.
Número de cetano	Es una medida del retraso de ignición de los combustibles después de ser inyectados en la cámara de combustión.
Estabilidad a la oxidación	Es una medida de la estabilidad del combustible frente a la oxidación térmica, la oxidación trae como consecuencia un aumento de la viscosidad.
Azufre	Es un contaminante no deseable en los combustibles debido a que promueve la formación de óxidos de azufre (SOx).
Cenizas sulfatadas	Es una medida de impurezas inorgánicas en el combustible.
Contaminación total	Es una medida de impurezas totales en el combustible.
Punto de nube	Es la temperatura a la cual se hacen visibles los cristales que se forman en el seno del líquido cuando una muestra de combustible se enfría gradualmente.
Punto de fluidez	Temperatura a la cual el crecimiento y posterior aglomeración de los cristales son tales que se impide el libre flujo del combustible cuando el recipiente que lo contiene se coloca en un plano horizontal.
Taponamiento del filtro frío	La temperatura a la cual el combustible no pasa a través de un filtro en un tiempo estipulado bajo condiciones de prueba estándar.
Corrosión al cobre	Es una medida de la corrosividad del combustible hacia el cobre.
Fósforo	Es un contaminante no deseable en los combustibles debido a que envenena a los convertidores catalíticos.
Metales del grupo I	Es una medida de la eliminación incompleta de catalizadores alcalinos homogéneos (basados en Na/K).

Continuación de Tabla 4

Propiedad	Importancia
Metales del grupo II	Es una medida de la eliminación incompleta de catalizadores heterogéneos básicos (basados en Ca/Mg).
Contenido de humedad	Es la cantidad de agua, expresada como un porcentaje del peso que tiene un combustible con respecto al peso seco del mismo.
Residuo de carbono	Es una medida de la combustión incompleta del combustible.
Punto de inflamación	Es una medida de la inflamabilidad del combustible.
Glicerina total	Es una medida de la conversión incompleta y/o purificación incompleta.
Glicerina libre	Es una medida de la efectividad del proceso de purificación.
Contenido de ácido linoléico (18:3)	Útil en la determinación de la estabilidad oxidativa del combustible.
Ácidos grasos poliinsaturados (>4 dobles enlaces)	No deberían formar parte del biocombustible ya que su presencia impacta en otras propiedades, como la estabilidad a la oxidación, la viscosidad y densidad.
Contenido de ésteres	Es una medida de la conversión de materia prima a biodiésel.
Contenido de metanol	Se cuantifica el metanol ya que éste no debería formar parte del biocombustible después de haber sido purificado. El punto de inflamación está directamente relacionado con el contenido de metanol, por lo que se ha implementado el uso opcional de uno u otro análisis.
Número de saponificación	Una medida indirecta del peso molecular promedio de los ácidos grasos.
Índice de yodo	Una medida del grado de insaturación.

Adaptado de Avagyan, A. B., & Singh, B. (2019). Biodiesel: Feedstocks, Technologies, Economics and Barriers. (Springer, Ed.). Singapore.

Además de la estabilidad química y térmica a largo plazo, número de cetano, punto de nube (CP, por sus siglas en inglés, Cloud Point), punto de fluidez (PP, por sus sigla en inglés, Pour Point), punto de obstrucción del filtro frío (CFPP, por sus siglas en inglés, Cold Filter Plugging Point), punto de inflamación, tendencia de obstrucción del filtro (FPT, por sus siglas en inglés, Filter Plugging Tendency), corrosividad, lubricidad, composición química, contenido de contaminantes y contenido de agua, la densidad y viscosidad son propiedades importantes del biocombustible debido a que tienen un impacto en el rendimiento del motor diésel [26].

Como ya se ha mencionado, el biodiésel debe tener propiedades similares al del diésel fósil a fin de poder reemplazarlo en motores diésel. En la Tabla 5 se enumeran la especificación de propiedades del biodiésel contenidas en las normas estadounidense, europea e india.

Tabla 5. Estándares de biodiésel en Estados Unidos, Europa e India, y el estándar de diésel en Estados Unidos.

Propiedad	ASTM D6751 Biodiésel	EN 14214 Biodiésel	IS 15607 Biodiésel	ASTM D975 Diésel n°2	
Índice de acidez (mg KOH/g, máx.)	0.5	0.5	0.5	*	
Viscosidad cinemática (mm ² /s a 40°C, máx.)	1.9-6	3.5-5	5.2-6	1.9-4.1	
Densidad (g/cm ³ a 15°C, máx.)	*	0.86-0.9	0.86-0.9	*	
Número de cetano (adimensional)	47	51	51	40	
Estabilidad a la oxidación (h a 110°C, mín.)	3	6	6	*	
Contenido total de azufre (mg/kg, máx.)	0.0015	10	50	0.5	
Cenizas sulfatadas (%m/m, máx.)	0.02	0.02	0.02	0.01	
Contaminación total (mg/kg, máx.)	24	24	24	*	
Punto de nube (°C)	Reportar	Reportar	*	*	
Punto de fluidez (°C)	Reportar	Reportar	*	*	
Taponamiento del filtro en frío (°C)	Reportar	Reportar	*	*	
Corrosión al cobre (3h a 50°C, máx.)	3	1	1	3	
Contenido de fósforo (ppm, máx.)	10	10	10	*	
Metales del grupo I (mg/kg, máx.)	5	5	Reportar	*	
Metales del grupo II (mg/kg, máx.)	5	5	Reportar	*	
Contenido de humedad (%v/v, máx.)	0.05	0.05	0.05	0.05	
Residuo de carbono (%m/m, máx.)	0.05	0.05	0.05	0.15	
Punto de inflamación (°C, mín)	93	120	120	52	
Glicerina total (%m/m, máx.)	0.24	0.25	.025	*	
Glicerina libre (%m/m, máx.)	0.02	0.02	0.02	*	
Contenido de ácido linoléico (18:3) (%mol/mol, máx.)	*	12	*	*	
Contenido de ácidos grasos poliinsaturados (>4 dobles enlaces) (%mol/mol, máx.)	*	1	*	*	
Contenido de ésteres (%m/m, máx.)	*	96.5	96.5	*	
Contenido de metanol	A) Contenido de metanol (%v/v, máx.)	0.2	0.2	0.2	*
	B) Punto de inflamación (°C, mín.)	130	*	120	*
Índice de yodo (g l ₂ /100, máx.)	*	120	Reportar	*	

* No requerido/reportado

Adaptado de Avagyan, A. B., & Singh, B. (2019). Biodiesel: Feedstocks, Technologies, Economics and Barriers. (Springer, Ed.). Singapore.

Aunque la primera transesterificación documentada se llevó a cabo antes de la invención del motor diésel, no fue sino hasta el siglo XX que se publicó el primer estándar para biodiésel, como se indica en la Ilustración 3, dónde se destacan algunos de los hitos más relevantes en el desarrollo y uso del biodiésel.

Ilustración 3. Hitos relevantes en el desarrollo y uso del biodiésel.



Realizada por el autor

Aunque anteriormente ya se han listado algunas propiedades del biodiésel y su importancia, en resumen, se puede decir que las propiedades físicas y químicas del biodiésel influyen directamente en el rendimiento del motor diésel, en las emisiones generadas a partir de la combustión del mismo y en el costo de producción del biocombustible. Dentro de las propiedades más importantes del biodiésel, entre las que se encuentran la estabilidad a la oxidación, el índice de cetano, el punto de nube, punto de fluidez, taponamiento del filtro en frío, punto de inflamación, corrosividad, lubricidad, composición química, contenido de contaminantes y contenido de agua, destacan la densidad y viscosidad [26].

Tanto la viscosidad como la densidad varían en función de la temperatura. En principio, la viscosidad del biocombustible se utiliza como un indicador que determina la facilidad de arranque del motor, el grado de conversión del proceso de transesterificación, la calidad de la etapa de inyección del combustible y la calidad de la mezcla de combustión aire-combustible [12].

Además de ser función de la temperatura, la densidad también tiene la capacidad de afectar el rendimiento del combustible, porque otras propiedades como el poder calorífico, el índice de cetano y la viscosidad están relacionadas con la densidad. Asimismo, los procesos de atomización y combustión también se ven afectados por el comportamiento de la densidad del combustible frente a la variación de temperatura [27].

A continuación, se discuten más a fondo las particularidades de la densidad y viscosidad, cómo se determinan experimentalmente, cómo afectan al rendimiento del motor, su relación con otras propiedades del biodiésel y, las ventajas y desventajas de algunos modelos de predicción disponibles en la literatura.

3.2 DENSIDAD

La densidad es una propiedad clave del biodiésel, ésta varía en función de la presión y la temperatura y se define como la masa por unidad de volumen. De acuerdo al método descrito en la norma UNE-EN ISO 3675, Petróleo crudo y productos petrolíferos líquidos, determinación de la densidad en laboratorio, método del

aerómetro, se puede determinar experimentalmente la densidad a 15°C de petróleo crudo, productos petrolíferos líquidos y mezclas de productos petrolíferos líquidos y no petrolíferos utilizados normalmente en estado líquido y que tengan una presión de vapor Reid (la presión de vapor Reid es un ensayo empírico que mide la presión en lb/in² ejercida por los vapores o componentes livianos del crudo o de un producto del petróleo, en un recipiente cerrado a una temperatura de 100 °F o 38 °C) igual o inferior a 100 kPa, utilizando un aerómetro de vidrio [28].

Ésta norma internacional es apropiada para determinar la densidad de líquidos fluidos opacos y transparentes, como el biodiésel. El densímetro, como también se le conoce al aerómetro, es un aparato cuyo funcionamiento está basado en el principio de Arquímedes, se compone de un flotador de vidrio con un lastre de mercurio en su parte inferior, en el otro extremo se encuentra una escala de medida en unidades de densidad. Para llevar a cabo la medición, la muestra se coloca en una probeta y se lleva a la temperatura deseada mediante un baño térmico, posteriormente el densímetro previamente calibrado se introduce suavemente en el líquido hasta que este flote libremente, la lectura de la densidad se toma en el punto donde se encuentra el menisco, para tener una buena lectura se recomienda colocar los ojos al nivel del líquido.

Debido a que la densidad del combustible influye directamente en el desarrollo del rociado de combustible, el consumo específico de combustible, la potencia del motor, el desgaste, la formación de depósitos y emisiones de escape, la densidad del biodiésel está especificada entre 860-900 kg/m³ a 15°C en la EN14214, sin embargo, en la norma estadounidense no está especificada [26].

En los motores diésel, la inyección del combustible y el mezclado con aire se llevan a cabo bajo condiciones de presión de 15-50 MPa y temperatura de 300-350 K. Tanto la densidad como la viscosidad influyen significativamente en las características del proceso de inyección de combustible porque, a bajas temperaturas, la densidad y viscosidad del biodiésel aumentan, lo que conlleva un aumento en la caída de presión a través del filtro y una mayor resistencia a fluir a través de la bomba de baja presión [26].

El consumo del combustible está sujeto a la densidad del combustible debido a que la cantidad de combustible inyectado a la cámara de combustión se mide en volumen y, al variar la densidad en función de la temperatura, la cantidad de masa entregada aumenta o disminuye según la densidad del combustible. Debido a que la cantidad de masa varía, la potencia de salida del motor también se ve afectada, tomando en cuenta el balance de materia y energía del motor [29].

Además, tal como indica la Tabla 6, la densidad se relaciona con otras propiedades importantes del biocombustible como el poder calorífico [30] (HHV, por sus siglas en inglés, High Heating Value), el punto de inflamación [31] (FP, por sus siglas en inglés, Flash Point), el número de cetano [32] (CN, por sus siglas en inglés, Cetane Number) y la viscosidad. De hecho, se ha demostrado que un aumento en la densidad conlleva un aumento en la viscosidad, por ejemplo, cuando la densidad de cierto biodiésel aumenta de 0.848 a 0.885 g/cm³, la viscosidad aumenta de 2.8 a 5.1 cSt [33].

Tabla 6. Relación de la densidad del biodiésel con otras de sus propiedades.

N°	Ecuación	Variables y desviación
Poder calorífico		
1	$HHV = 74.468 - 0.038 \rho$ para biodiésel, MJ/kg	ρ : Densidad del combustible líquido (kg/m ³)
Punto de inflamación		
2	$FP (^{\circ}C) = 1.1248 T_b - 103.9907 \rho$, para B100	T_b (K): Punto de ebullición de la mezcla de biodiésel ρ : Densidad de la mezcla de biodiésel Desviación <1.2%, más adecuada para mezclas de biodiésel
Número de cetano		
3	$CN = \sum_i^n x_i CN_i$ Regla de mezclado	ρ : Densidad (g/cm ³ a 75 °C) Desviación <3.6%
3.1	$CN = 7206.14 - 8648.96 \rho$ Para FAME saturados	
Viscosidad		
4	$v = \frac{\eta}{\rho}$	ρ : Densidad η : Viscosidad dinámica v : Viscosidad cinemática

Realizada por el autor

Con el objetivo de reducir costos y tiempo de experimentación, diversos autores han desarrollado modelos de predicción de densidad de biodiésel o de sus componentes puros, FAAE. En la Tabla 7 se han recopilado algunos modelos de predicción encontrados en la literatura.

Tabla 7. Modelos de predicción de densidad.

N°	Ecuación	Variables y desviación
Modelos dependientes de presión y temperatura		
5	$\rho \left(\frac{g}{cm^3} \right) = C_1 T^2 + C_2 T P + C_3 T + C_4 P + C_5$	T (C): Temperatura P(MPa): Presión C ₁ -C ₅ : Constantes del modelo obtenidas por ajuste Desviación: 8% para FAME y 7.3% para Ésteres Etílicos de Ácidos Grasos (FAEE, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Ethyl Esters)
6	$\rho \left(\frac{kg}{m^3} \right) = 1036 - 0.643T + 0.00423P$	T(K): Temperatura P(kPa): Presión absoluta Desviación: < 3%
7	$\frac{\partial \rho}{\partial P} = \frac{1}{u^2} + \frac{T \alpha_p^2}{C_p}$ $\Delta \rho = \int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{1}{u^2} + \frac{T \alpha_p^2}{C_p} \right) dp \approx \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{u^2} dp + \frac{\alpha_p^2}{C_p} \Delta p$	$\partial \rho / \partial P$: Variación de la densidad en función de la presión α : Expansión térmica isobárica C _p : Capacidad calorífica específica u: Velocidad del sonido Desviación: <3.3%
Modelos basados en ecuaciones de estado		
8	$\rho_i = \frac{\rho_0(T, P = 0.1MPa)}{\left[1 - C \ln \left(\frac{B + P}{B + 0.1} \right) \right]}$ $\rho_0(T, P = 0.1MPa) = a_1 + a_2 T + a_3 T^2$ $B = b_1 + b_2 T + b_3 T^2, C = c_0 + c_1 T$	$\rho_0(T, P = 0.1MPa)$: Densidad de referencia T(K): Temperatura P(MPa): Presión B y C: Parámetros dependientes de la temperatura. Desviación: <0.01%
9	$\rho = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + b) + b(v - b)}$ $\alpha_{ii}(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.2699\omega_i^2)(1 - T_{r,i}^{0.5})]^2$	ω : Factor acéntrico α : Función dependiente de la temperatura (T) v: Volumen molar b: Parámetro de co-volumen de ecuaciones cúbicas de estado T(K): Temperatura P(MPa): Presión -7% < Desviación < 1%
10	$\rho = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{\alpha(T)}{V_m(V_m + b)}$ $-\frac{1}{2} \left(\frac{RT}{V_m} \right) \left(1 + \frac{1}{V_m} \frac{\partial \ln g}{\partial (1/V_m)} \right) \sum_i x_i \sum_{A_i} (1 - X_{A_i})$	V _m : Volumen molar X _{Ai} : Fracción de sitios A en la molécula i X _i : Fracción mol del componente i T (K): Temperatura P (MPa): Presión A y B: Sitios de enlace en una molécula dada 0.79% < Desviación < 2.5%
11	$\ln \frac{P_c M}{\rho R T} = \ln V^{(0)} + \omega \ln V^{(1)}$ $\ln V^{(0)} = 1.39644 - 24.076 T_r + 102.615 T_r^2 - 255.719 T_r^3 + 355.805 T_r^4 - 256.617 T_r^5 + 75.1088 T_r^6$ $\ln V^{(1)} = 13.4412 - 135.7437 T_r + 533.380 T_r^2 - 1091.453 T_r^3 + 1231.43 T_r^4 - 728.227 T_r^5 + 176.737 T_r^6$	V: Volumen molar T _r : Temperatura reducida, T _r =T/T _c ω : Factor acéntrico V _j : Volumen molar del componente j Desviación: < 4.68%
Modelos basados en el método de contribución de grupos		
12	$\rho_i = 1000 \left(\frac{MW_i}{V_i} \right) = 1000 \left(MW_i / \sum n_i \Delta v_i \right)$	ρ_i y ρ_m : Densidad de componentes puros y biodiésel en kg/m ³ MW _i : Peso molecular en g/mol
12.1	$\Delta v_i = A_i + B_i T + C_i T^2$	V: Volumen molar en cm ³ /mol
12.2	$\rho_m = 1000 \left(\sum x_j MW / \sum x_j V_j \right)$	n: Número del grupo i Δv_i : Volumen molar del grupo i en cm ³ /mol T: Temperatura en K A _i , B _i , C _i : Constantes del grupo i V _j : Volumen molar del componente j en cm ³ /mol x _j : Fracción molar del componente j 0.2% < Desviación < 0.7%

Continuación Tabla 7

N°	Ecuación	Variables y desviación
Modelos basados en la ecuación de Rackett modificada		
13	$\rho \left(\frac{kg}{m^3} \right) = \rho_R \left(\frac{kg}{m^3} \right) / Z_{RA}^\Phi$ $\phi = \left(1 - \frac{T}{T_C} \right)^{2/7} - \left(1 - \frac{T_R}{T_C} \right)^{2/7}$	Ecuación de Rackett Modificada ρ_R : Densidad de referencia Φ : Coeficiente de fugacidad T, T_R, T_C : Temperatura, Temperatura de referencia, Temperatura crítica en K Desviación: 1-2.5%
14	$Z_{RA} = 0.29056 - 1.08775\omega$ $Z_{RAm} = \sum_i^n x_i Z_{RAi}$	Método de Rackett-Yamada ω : Factor acéntrico x_i : Fracción molar del componente i Z_{RAi} : Factor de compresibilidad del componente i Desviación: 1.13-1.22%
15	$Z_{RA} = 0.2908 - 0.099\omega + 0.04\omega^2$ $Z_{RAm} = \sum_i^n x_i Z_{RAi}$	Método de Rackett-Soave ω : Factor acéntrico x_i : Fracción molar del componente i Z_{RAi} : Factor de compresibilidad del componente i Desviación: 0.89-2.17%
16	$\log \rho = \log \rho_R - \Phi \log Z_{RA}$ $\log Z_{RA} = \frac{\sum X_j Y_j}{\sum X_j^2}$ $X_j = \phi_j = \left(1 - \frac{T}{T_C} \right)^{1/7} \left(1 - \frac{T_R}{T_C} \right)^{2/7}$ $Y_j = \log(\rho_R / \rho_j)$	Método Rackett-Meng ρ_R : Densidad de referencia Φ : Coeficiente de fugacidad Z_{RAi} : Factor de compresibilidad del componente i T, T_R, T_C : Temperatura, Temperatura de referencia, Temperatura crítica en K.
Modelos basados en la estructura molecular		
17	$\rho_i = 851.471 + \frac{250.718db + 280.899 - 92.18(m - 1)}{1.214 + n}$	ρ_i : Densidad de FAME en kg/m ³ a 15°C n: número de átomos de carbonos en el ácido graso original m: número de carbonos en el alcohol original db: número de dobles enlaces en el ácido graso original
18	$\rho_i = 0.8463 + \frac{4.9}{M_i} + 0.118N$	ρ_i : Densidad del i-FAME en g/cm ³ a 20°C N: Número de dobles enlaces en el FAME dado M: Peso molecular Desviación: <0.43%
19	$\rho_i = 1.069 + \frac{3.575}{M_i} + 0.0113N - 7.41 \times 10^{-4}T$	N: Número de dobles enlaces en el FAME dado M: Peso molecular T: Temperatura en K Desviación: < 0.43%
Modelos basados en la estructura molecular aproximados mediante ANN		
20	$\rho_B = \frac{-4.468}{1 + \exp(n_{s1\rho})} + 4.1775$	$n_{s1\rho}$: Parámetros estimados por neurona Arquitectura: 16:1:1 Nivel de confianza 99%
21	$\rho_{FAME} = \frac{-0.468}{1 + \exp(n_{s1\rho})} + 1.1502$ $n_{s1\rho} = -0.736T + 1.9578NC - 2.0782NH$	NC: Número de átomos de carbono NH: Número de átomos de hidrógeno T: Temperatura Arquitectura: 3:1:1 Nivel de confianza 99%

Adaptado de Sajjadi, B., Aziz, A., Raman, A., & Arandiyani, H. (2016). A comprehensive review on properties of edible and non-edible vegetable oil-based biodiesel: Composition, specifications and prediction models.

Ya que la temperatura, presión y el perfil de FAAE son los factores principales que determinan la densidad del biodiésel, se han desarrollado trabajos donde se estudia la variación de la densidad del biodiésel y/o sus componentes puros con la temperatura a una determinada presión o, la variación de la densidad con la presión a una temperatura constante. En dichos trabajos se observa que al igual que la de otros líquidos, la densidad del biodiésel disminuye cuando la temperatura desciende o en caso de que la presión aumente [2].

La capacidad predicción que presentan este tipo de modelos de acuerdo a la desviación reportada es alta, sin embargo, para usarlos se deben tener en cuenta diversos factores como son, el rango de temperatura y presión bajo las cuales se puede aplicar el modelo, también se debe considerar si se trata de un modelo de predicción de densidad de biodiésel o bien de predicción de densidad de FAAE.

Otros autores se han decantado por estudiar el comportamiento de la densidad del biodiésel y sus componentes puros mediante modelos de caja blanca, basados en primeros principios en aras de obtener las mejores aproximaciones. Dichos modelos están basados en relaciones matemáticas entre las variables, temperatura, presión, volumen y concentración para el caso de las mezclas, es decir, ecuaciones de estado. Para poder aplicar estos modelos es necesario conocer el valor de otras variables, por ejemplo, temperatura reducida (T_r), factor acéntrico (ω) y volumen molar (V), además en algunos casos se requiere determinar el valor de constantes específicas para cada compuesto mediante datos experimentales. Como se puede apreciar en la Tabla 7, la mayor parte de este tipo de modelos solo han sido aplicados para predecir el comportamiento de la densidad de los componentes puros del biodiésel.

Otra alternativa para aproximar la densidad del biodiésel consiste en enfocarse exclusivamente en la estructura molecular de los compuestos puros, donde se le asigna cierta contribución a cada grupo funcional presente en el compuesto. En el caso particular de los FAAE, los parámetros de contribución de grupos para predecir la densidad corresponden a los siguientes grupos funcionales CH_2 , CH_3 , CH= y

-COO-. Estos métodos se basan en el peso molecular y el volumen molar de cada compuesto y la desviación que presentan está entre 0.2% y 0.7%.

También es posible estimar los volúmenes o densidades molares de líquidos saturados en función de la temperatura mediante correlaciones generalizadas como la ecuación de Rackett modificada, sin embargo, para aplicar dicha ecuación se requiere conocer variables como el factor de compresibilidad (Z_{RA}), el cual es un parámetro significativo y afecta directamente la precisión del modelo. Para conocer el valor de Z_{RA} y la T_r , otro parámetro requerido por el modelo, se requieren datos experimentales del valor de la densidad en función de la temperatura, por lo que se han sugerido varios modelos para determinar Z_{RA} , a fin de lograr la mejor predicción de la densidad del biodiésel.

Por otro lado, dado que la densidad del biodiesel depende principalmente de las materias primas a partir de las cuales se produce, se han desarrollado modelos basados en la estructura original de los ácidos grasos, el número de átomos de carbono, y los dobles enlaces. Dichos modelos se sustentan en el hecho de que las propiedades termodinámicas del biodiésel están relacionadas con la estructura molecular de sus componentes puros, pero no se pueden considerar como modelos de caja blanca ya que son correlaciones aplicables sólo dentro los marcos de referencia bajo los cuales fueron desarrollados, ya sea en términos de temperatura, presión o incluso de las especies químicas para los que fueron concebidos. A pesar de las cuestiones mencionadas anteriormente, el nivel de confianza de este tipo de modelos es del 99%.

Dicho lo anterior, es posible aproximar la densidad el biodiésel mediante diversos métodos que van desde los más robustos, como los de caja blanca para los que se requiere conocer otras variables, así como la teoría detrás de las ecuaciones, hasta los de caja gris y negra los cuales cuentan con ciertas restricciones de uso, debido a los términos bajo los cuales fueron desarrollados, pero cuentan con un gran nivel de confianza.

3.3 VISCOSIDAD

La viscosidad es una propiedad termofísica de los fluidos, definida como la resistencia de un líquido a fluir bajo gravedad debido a la fricción interna. De acuerdo al método descrito en la norma ASTM D 445, Método estándar de prueba para viscosidad cinemática de líquidos transparentes y opacos (y cálculo de la viscosidad dinámica), es posible determinar experimentalmente la viscosidad cinemática a 40°C, de líquidos opacos y transparentes, como el biodiésel, midiendo el tiempo que tarda en fluir por gravedad un determinado volumen de la muestra a través de un viscosímetro capilar de vidrio calibrado, bajo condiciones reproducibles y a una temperatura conocida y controlada. La viscosidad dinámica se calcula multiplicando la viscosidad cinemática por la densidad, ambas determinadas a la misma temperatura [34].

El valor de viscosidad de fluidos es utilizado como referencia en procesos experimentales e industriales como el mezclado, bombeo, extrusión, entre otros, en el caso de los combustibles juega un papel importante en los procesos de inyección de combustible, combustión y mezclado con aire [4].

Una alta viscosidad afecta la atomización del combustible después de la inyección, lo que promueve la formación de depósitos en el motor. En los sistemas de inyección mecánica, una alta viscosidad conduce a pérdidas de combustible, provocando un proceso de inyección deficiente, una evolución más rápida de la presión y por lo tanto un tiempo de inyección avanzado. También es importante conocer la variación de la viscosidad en función de la temperatura para el diseño de los intercambiadores de calor en el sistema de suministro de combustible [26].

La viscosidad del combustible afecta el rendimiento del sistema de inyección porque algunas bombas de inyección pueden experimentar un desgaste excesivo y pérdida de potencia debido a la fuga del inyector o la bomba, en caso de que la viscosidad sea demasiado baja. Si la viscosidad del combustible es demasiado alta, puede causar resistencia a la bomba, dañar el filtro y afectar negativamente los patrones

de rociado de combustible. En general, los combustibles con baja viscosidad tienen propiedades pobres de lubricación [26].

Uno de los principales problemas asociados con el biodiésel es que su viscosidad es mayor que la del diésel de petróleo. La viscosidad del diésel fósil es de 9 a 17 veces menor que la de los VO's y 1.6 veces menor que la del biodiésel. En la EN 14214 se especifica la viscosidad cinemática del biodiésel a 40°C entre 3.5 y 5 mm²/s y en la ASTM D6751 entre 1.9 y 6 mm²/s [2].

En la Tabla 8 se encuentran diversos modelos de predicción de viscosidad dinámica ya sea de biodiésel o sus componentes puros.

Tabla 8. Modelos de predicción de viscosidad

N°	Ecuación	Variables y desviación
22	$\mu = \sum_i^n x_i \mu_i$ o $\ln \mu = \sum_i^n x_i \ln \mu_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j G_{ij}$	Regla de mezclado G _{ij} =Parámetro de interacción
Modelos dependientes de temperatura		
23	$\mu(\text{mm}^2/\text{s}) = \exp\left(A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2}\right)$	A, B y C son constantes T: Temperatura en K μ : Viscosidad cinemática (mm ² /s) Desviación < 3.5% pero mas precisa para mezclas
24	$\eta_i(\text{mPa} \cdot \text{s}) = \exp\left(A + \frac{B}{T - T_0}\right)$	η_i : Viscosidad dinámica del compuesto i A,B: Parámetros de ajuste T y T ₀ : Temperatura en K Desviación: <5.3% Desviación revisada: < 4.7%
Modelos basados en el método de contribución de grupos		
25	$\ln(\eta_i) = \sum_k N_k \left(A_{1k} + \frac{B_{1k}}{T} - C_{1k} \ln T - D_{1k} T \right) + \left(M_i \sum_k N_k \left(A_{2k} + \frac{B_{2k}}{T} - C_{2k} \ln T - D_{2k} T \right) \right) + Q$ $Q = (f_0 + Nc f_1)q + (s_0 + Nsc s_1)$	η_i : Viscosidad dinámica en mPa·s T: Temperatura en K N _k : Número de grupos k en la molécula i M: Peso molecular del componente que multiplica el "término de perturbación" A _{1k} , B _{1k} , C _{1k} , D _{1k} , A _{2k} , B _{2k} , C _{2k} , D _{2k} : Parámetros de regresión f ₀ , f ₁ , s ₀ , s ₁ : Constantes optimizadas Nc: Número total de átomos de carbono en la molécula Ncs: Número de carbonos del alcohol La desviación promedio es alrededor del 8% a alta temperatura.
Modelos basados en la estructura molecular		
26	$\ln(\eta_i) = -18.354 + 2.362 \ln M_i - 0.127 N_{DB} + \frac{2009}{T}$	η_i : Viscosidad dinámica en mPa·s N _{DB} : Número de dobles enlaces T: Temperatura en K Desviación: <6.39%

Continuación de Tabla 8

Modelos basados en la estructura molecular aproximados mediante ANN		
27	$\mu_B = \frac{46.443}{1 + \exp(n_{1s\mu})} + 4.1775$	μ_B : Viscosidad dinámica $n_{1s\mu}$: Parámetros estimados por neurona Arquitectura: 16:1:1 Nivel de confianza 99%
28	$\mu_{FAME} = \frac{29.4338}{1 + \exp(n_{1s\mu})} + 0.5934$ $n_{1s\mu} = 3.2404T + 0.0032NC - 3.4536NH + 2.8558$	μ_{FAME} : Viscosidad dinámica de FAME's NC: Número de átomos de carbono NH: Número de átomos de hidrógeno T: Temperatura Arquitectura: 3:1:1 Nivel de confianza 99%

Adaptado de Sajjadi, B., Aziz, A., Raman, A., & Arandiyani, H. (2016). A comprehensive review on properties of edible and non-edible vegetable oil-based biodiesel: Composition, specifications and prediction models. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 63, 62–92.

Cabe destacar que la mayoría de los modelos presentados en la Tabla 8 se centra en el cálculo de la viscosidad de los componentes puros del biodiésel, ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Methyl Esters) o ésteres etílicos de ácidos grasos (FAEE, por sus siglas en inglés, Fatty Acid Ethyl Esters) debido a que la viscosidad del biodiésel se puede estimar a partir de la viscosidad de sus compuestos puros utilizando una regla de mezclado [2].


Como se mencionó antes, al igual que la densidad, la viscosidad varía en función de la temperatura, por lo que se puede aproximar mediante modelos dependientes de la temperatura. Generalmente estas ecuaciones cuentan con parámetros de ajuste, los cuales se determinan mediante un conjunto de datos experimentales, y son propios de cada compuesto puro, ya sea FAME o FAEE. En el caso de los modelos de predicción de viscosidad de biodiesel, los parámetros mencionados son propios de cada tipo de biodiésel, entonces se debe tener presente la variabilidad de las materias primas, inclusive hablando de biodiésel procedentes de un mismo tipo de materia prima ya que los perfiles de ácidos grasos pueden variar.


Dado que los componentes puros del biodiésel pueden entenderse como series homologas a causa de que poseen un mismo grupo funcional y cada elemento se diferencia del otro por el número de grupos $-CH_2-$ presentes en su estructura, los métodos de contribución de grupos representan otra alternativa para estimar la viscosidad de dichas sustancias.

En vista de que la viscosidad de los compuestos puros del biodiésel disminuye en función del nivel de saturación y aumenta con la longitud de cadena del éster, algunos autores han desarrollado modelos basados en la estructura molecular de los compuestos en cuestión, tomando como variables el peso molecular, el número de dobles enlaces y el número de átomos de carbono presentes, sin embargo, algunos de estos modelos sólo aplican a una temperatura dada. Además, en caso de querer conocer la viscosidad de cierto biodiésel se debe recurrir a una regla de mezclado.

Con base en la revisión de los modelos de predicción de densidad y viscosidad encontrados en la literatura, se puede señalar que, aún queda camino por recorrer en este campo, dada la variedad de materias primas de las que se puede obtener dicho biocombustible, sin dejar de lado el hecho de que la determinación experimental de cualquier propiedad termodinámica representa una inversión de tiempo y dinero, así como un conocimiento de las técnicas y el manejo del equipo empleado en dichas determinaciones.

Por consiguiente, este trabajo resuelve algunas limitantes que presentan los modelos reportados.

 Modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos: Las ecuaciones desarrolladas son aplicables en un amplio rango de temperatura y para emplearlas no se requiere de datos experimentales, únicamente se requiere conocer la estructura del compuesto de interés (FAME o FAEE).

 Modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel: Para hacer uso de las ecuaciones desarrolladas sólo se requiere conocer el perfil de FAME del biocombustible, ya sea que se trate de un biodiésel puro o de una mezcla de biodiésel y la temperatura. A diferencia de otros modelos, los desarrollados son aplicables en un amplio rango de temperatura.

Al igual que los modelos de contribución de grupos, los desarrollados en este trabajo se fundamentan en la relación que guarda la estructura molecular de los

componentes puros del biodiésel con sus propiedades termodinámicas (densidad y viscosidad), por lo que en seguida se hace una revisión del tema.

3.4 CORRELACIÓN ENTRE LA ESTRUCTURA QUÍMICA DE LOS COMPONENTES PUROS DEL BIODIÉSEL Y LA DENSIDAD Y VISCOSIDAD DEL MISMO.

Las propiedades físicas del biodiésel están determinadas por las propiedades individuales de los compuestos puros que lo conforman. A su vez, las propiedades de los diversos FFAE están determinadas por sus características químicas estructurales, es decir, la cadena de ácido graso y el fragmento de alcohol en el extremo de la molécula [35].

La densidad de los compuestos puros del biodiésel, FFAE es afectada por: i) longitud de cadena de carbonos del ácido graso y del segmento de alcohol, a mayor longitud de cadena, mayor densidad del combustible y ii) grado de insaturación, la densidad aumenta con el número de insaturaciones [36].

Las características químicas de los componentes puros que influyen en la viscosidad del biodiésel son: i) longitud de la cadena de átomos de carbono y peso molecular, a medida que aumenta la longitud de la cadena y el peso molecular, el grado de interacción intermolecular se incrementa y en consecuencia la viscosidad, de hecho, los metil ésteres presentan menor viscosidad que los etil ésteres de un ácido graso equivalente [2]. Este efecto se hace más evidente a bajas temperaturas, donde los movimientos moleculares son aún más restringidos, ii) la presencia de dobles enlaces, la viscosidad disminuye con el grado de insaturación y iii) la configuración espacial, los compuestos con configuración trans son más viscosos que los que cuentan con configuración cis [36].

Dada la relación que hay entre la estructura química de los componentes puros del biodiésel (FAME y FFAE) y sus propiedades físicas como la densidad y la viscosidad, en este trabajo se utilizaron RNA para encontrar funciones matemáticas que relacionaran dichas variables, adicionalmente se incluyó la temperatura.

Posteriormente, las RNA también fueron empleadas para encontrar funciones matemáticas que relacionaran la composición de biodiésel o mezclas de biodiésel con la densidad y viscosidad del biocombustible. Dada la variación de dichas propiedades en función de la temperatura, esta también fue incluida.

3.5 REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Las ANN se pueden aplicar para resolver una variedad de problemas tales como reconocimiento de patrones, predicción, optimización, memoria asociativa y control, por lo que han sido aprovechadas por los investigadores en las diferentes áreas de la ciencia y la ingeniería química no ha sido la excepción [37].


En los últimos años, las ANN han sido utilizadas en el campo de la ingeniería química para predecir diferentes propiedades termofísicas como la conductividad térmica y la tensión superficial [36].


Como ya se mencionó anteriormente, la densidad y viscosidad del biodiésel se determinan utilizando métodos experimentales que proporcionan resultados precisos. Esta determinación experimental se realiza con base en métodos estándar de prueba, por lo que el costo de la ejecución de este tipo de pruebas es alto, técnicamente desafiante, consume energía y tiempo. En caso de poder sortear los escenarios anteriores, la disponibilidad de un laboratorio bien equipado para realizar estas pruebas es escasa. Debido a lo anterior, los modelos matemáticos, los modelos estadísticos y herramientas tales como las ANN se han utilizado para predecir las propiedades del biodiésel [11].


Saldana et al. [38] demostraron la posibilidad de utilizar ANN para predecir la densidad y la viscosidad dinámica de los compuestos de biocombustibles, reportaron diferentes modelos con un coeficiente de correlación (R) entre 0.985 y 0.995. Como se observa en las Tabla 7 y Tabla 8 los modelos basados en ANN reproducen apropiadamente la densidad y viscosidad dinámica del biodiésel e incluso son más precisos que los métodos empíricos y teóricos (basados en ecuaciones de estado, métodos de contribución de grupos o reglas de mezclado).

En consecuencia, los modelos basados en el entrenamiento de ANN han ganado popularidad debido a su capacidad de predicción precisa, incluso con bases de datos pequeñas. Esta metodología puede ser una herramienta útil para ser incorporada en simuladores para procesos de control y optimización [39].

Inspiradas en redes neuronales biológicas, las ANN son sistemas de computación paralelos masivos que consisten en un número extremadamente grande de procesadores simples con muchas interconexiones. Las ANN constan de una capa de entrada, una o varias capas ocultas y una capa de salida [40]:


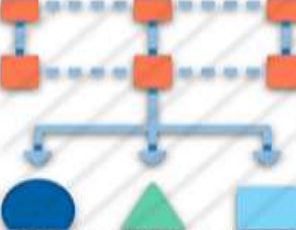
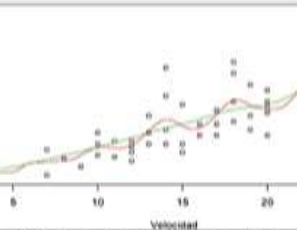
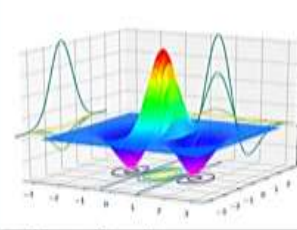

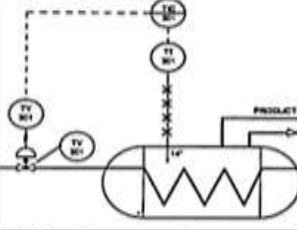
 **Capa de entrada:** La capa que toma la entrada del conjunto de datos se denomina capa de entrada. Las neuronas de esta capa simplemente se encargan de transferir los valores de las entradas a la siguiente capa.

 **Capas ocultas:** Las capas posteriores a la capa de entrada se denominan capas ocultas y están formadas por aquellas neuronas cuyas entradas provienen de capas anteriores y cuyas salidas pasan a neuronas de capas posteriores.


 **Capa de salida:** La última capa de la red neuronal se denomina capa de salida y es la responsable de producir un valor o un vector de valores que dependerán del problema a resolver. La elección de la función de activación en la capa de salida está fuertemente limitada por el tipo de problema que se esté modelando.


Los modelos ANN intentan utilizar algunos principios de "organización" análogos a los utilizados por el cerebro humano, esto les permite solucionar una gran variedad de problemas, como los que se observan en la Ilustración 4, ya sea de clasificación de patrones, agrupamiento y caracterización, aproximación de funciones, predicción y previsión, optimización, memoria direccionable y de contenido, así como también de control. En seguida se hace una revisión del objetivo de la ANN al solucionar los distintos tipos de problemas mencionados [37].


Ilustración 4. Tareas que los modelos ANN pueden resolver


<h3>Clasificación de patrones</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Reconocimiento de patrones. • Reconocimiento de voz. • Clasificación de electrocardiogramas. • Clasificación de células sanguíneas. 	<h3>Agrupamiento y categorización</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Procesamiento de datos. • Compresión de datos. • Análisis exploratorio de datos. 	<h3>Aproximación de funciones</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Varios problemas de modelado en ingeniería y ciencia requieren de la aproximación de una función desconocida que relacione dos parejas de datos. 	<h3>Predicción y prevision</h3> <table border="1"> <tr> <td>Domingo, 14</td> <td>Lunes, 15</td> </tr> <tr> <td> 23°/10°</td> <td> 23°/9°</td> </tr> <tr> <td>Martes, 16</td> <td>Miércoles, 17</td> </tr> <tr> <td> 23°/10°</td> <td> 24°/11°</td> </tr> <tr> <td>Jueves, 18</td> <td>Viernes, 19</td> </tr> <tr> <td> 19°/8°</td> <td> 19°/8°</td> </tr> <tr> <td>Sábado, 20</td> <td>Domingo, 21</td> </tr> <tr> <td> 20°/9°</td> <td> 23°/10°</td> </tr> </table> <ul style="list-style-type: none"> • Predicción del clima u otras cuestiones a futuro. • Se utilizan en la toma de decisiones en negocios, ciencia e ingeniería. 	Domingo, 14	Lunes, 15	23°/10°	23°/9°	Martes, 16	Miércoles, 17	23°/10°	24°/11°	Jueves, 18	Viernes, 19	19°/8°	19°/8°	Sábado, 20	Domingo, 21	20°/9°	23°/10°
Domingo, 14	Lunes, 15																		
23°/10°	23°/9°																		
Martes, 16	Miércoles, 17																		
23°/10°	24°/11°																		
Jueves, 18	Viernes, 19																		
19°/8°	19°/8°																		
Sábado, 20	Domingo, 21																		
20°/9°	23°/10°																		
<h3>Optimización</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Es aplicada en matemáticas, estadística, ingeniería, medicina, o economía. • Un típico ejemplo es el de un vendedor que quiere maximizar sus ganancias 	<h3>Memoria direccionable por contenido</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Construcción de bases de datos de información multimedia. • Es capaz de arrojar un buen resultado incluso si el input está distorsionado o es parcial. 	<h3>Control</h3>  <ul style="list-style-type: none"> • Un sistema de control se encarga de regular el comportamiento de otro sistema, a fin de reducir las probabilidades de fallo y obtener los resultados deseados (setpoint) 																	


Realizada por el autor


 Clasificación de patrones: La tarea de un patrón de clasificación es asignar a un patrón de entrada representado por un vector característico una de las muchas clases preespecificadas, dichos patrones de entrada pueden ser la forma de honda del habla o un símbolo escrito a mano.


 Agrupamiento y categorización: También es conocido como aprendizaje no supervisado de patrones de clasificación, ya que por sí solo el algoritmo de agrupamiento explora las similitudes entre los patrones alimentados y les asigna una categoría, sin necesidad de proveer datos con etiquetas de clase predeterminadas.

 Aproximación de funciones: La tarea de este tipo de redes es aproximar una función de correlación desconocida, dados dos conjuntos de datos, uno de entrada (input) y uno de salida (output). Cabe mencionar que los problemas abordados en este trabajo entran dentro de esta categoría.

 Predicción y previsión: Con base en un conjunto de datos variables en el tiempo, el objetivo de este tipo de redes es predecir el valor de la variable en algún momento del futuro.

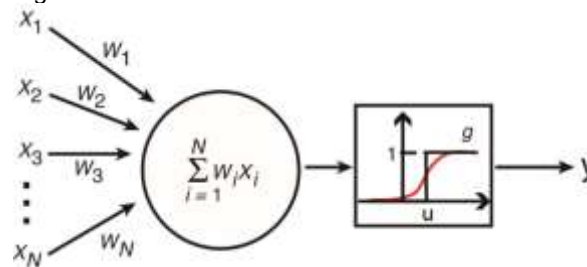
 Optimización: En diversos campos del conocimiento pueden plantearse problemas de optimización, ya que el trabajo de un algoritmo de optimización es encontrar una solución a una función objetivo que se maximiza o minimiza dado un conjunto de condiciones.

 Memoria direccionable por contenido: Según el modelo de cómputo de von Neumann, una entrada en la memoria es accedida solo mediante su dirección, la cual es independiente del contenido en la memoria. Sin embargo, si se comete algún error en el cálculo de dicha dirección, la respuesta puede arrojar un elemento completamente diferente. En la memoria direccionable o por contenido, como su nombre lo indica, esta puede acceder mediante su contenido, es decir que el contenido de la memoria puede ser recordado incluso mediante una entrada parcial o contenido distorsionado.

 Control: El objetivo de los sistemas de control es generar una respuesta con base en la medición de una variable a un tiempo dado, donde el sistema sigue una trayectoria deseada, determinada por el modelo de referencia.

La investigación alrededor de ANN ha experimentado tres periodos de evolución. El primero fue debido al trabajo pionero de McCulloch y Pitts, donde propusieron una unidad de umbral binario como modelo computacional para una neurona artificial, en la Ilustración 5 se muestra una representación de dicha unidad. El segundo ocurrió en la década de 1960 con el teorema de convergencia del perceptrón² de Rosenblatt. Desde el inicio de la década de 1980 las ANN han recibido un interés renovado, los principales desarrollos incluyen el enfoque energético de Hopfield y la propagación hacia atrás para perceptrones multicapa [37].

Ilustración 5. Representación gráfica de la neurona modelo McCulloch-Pitts o unidad de umbral binario.



Adaptado de Krogh, A. (2008). What are artificial neural networks? Nature Biotechnology, 26 (2), 195–197.

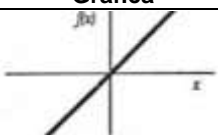
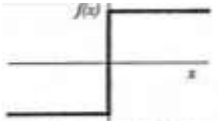
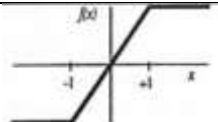
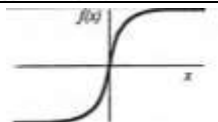
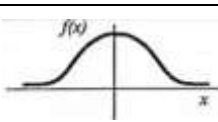
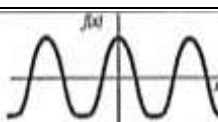
En el modelo McCulloch-Pitts, la neurona recibe entradas desde N fuentes externas, numeradas desde 1 hasta N. La entrada i es llamada X_i y su peso asociado se denomina W_i . La entrada total es la suma ponderada de todas las entradas, $\sum_{i=1}^N W_i X_i = W_1 X_1 + W_2 X_2 + \dots + W_N X_N$; si esta, estuviera por debajo del umbral u , la salida es 1, de lo contrario toma el valor de 0. La salida puede ser expresada como $g(\sum_{i=1}^N W_i X_i - u)$, donde g es la función escalón unitario, la cual es 0 cuando el argumento es negativo y 1 cuando el argumento es positivo (el valor real en cero no es importante, en tal caso se elige 1) [41].

La función de transferencia también denominada función de activación, puede ser la función escalón unitario, la función identidad o la función sigmoidea, una de las más utilizadas en ANN al ser una función estrictamente creciente que exhibe suavidad y tiene las propiedades asintóticas deseadas, como lo ilustra la curva roja

² El perceptrón es la forma más simple de una red neuronal

de la Ilustración 5. Las funciones de activación más empleadas en los modelos de ANN se muestran en la Tabla 9 [41].

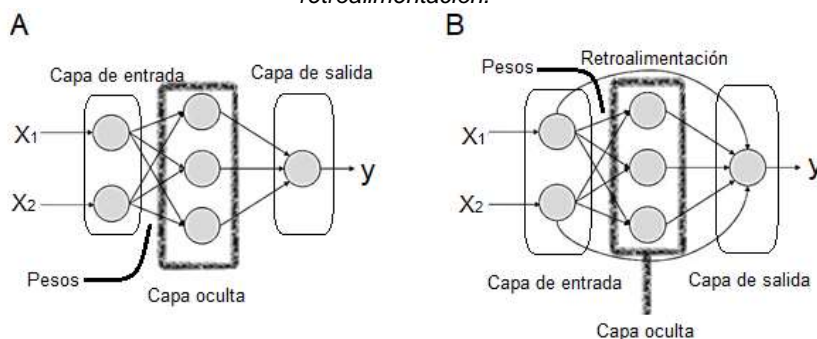
Tabla 9. Funciones de transferencia o activación empleadas en los modelos de ANN

Función	Ecuación	Rango	Gráfica
Identidad	$y = x$	$[-\infty, +\infty]$	
Escalón unitario	$y = \text{sign}(x)$ $y = H(x)$	$\{-1, +1\}$ $\{0, +1\}$	
Lineal a tramos	$y = \begin{cases} -1, & \text{si } x < -l \\ x, & \text{si } -l \leq x \leq +l \\ +1, & \text{si } x > +l \end{cases}$	$[-1, +1]$	
Sigmoidea	$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ $y = \text{tgh}(x)$	$[0, +1]$ $[-1, +1]$	
Gaussiana	$y = Ae^{-Bx^2}$	$[0, +1]$	
Sinusoidal	$y = A \text{sen}(\omega x + \varphi)$	$[-1, +1]$	

Tomado de Palacios, F. J. (n.d.). Redes Neuronales con GNU/Linux. Fecha de consulta 18/Abril/2020, de https://www.ibiblio.org/pub/linux/docs/LuCaS/Presentaciones/200304curso-glista/redes_neuronales/curso-glista-redes_neuronales-html/index.html

Las ANN pueden representarse mediante la Ilustración 6, un gráfico dirigido y ponderado, las neuronas artificiales son simbolizadas por nodos y las líneas de interconexión entre las salidas y entradas neuronales representan los pesos.

Ilustración 6. Arquitectura de A) Redes neuronales de avance y B) redes neuronales recurrentes o de retroalimentación.



Realizada por el autor

Dependiendo del patrón de conexión o arquitectura, las ANN se agrupan en dos categorías [37]:

🌱 Redes neuronales de avance (Feedforward Networks, por su traducción al inglés), cuya representación gráfica no tiene retroalimentación. Pueden ser multicapa con conexiones unidireccionales, carecen de memoria debido a que su respuesta a una entrada es independiente de la red anterior y son sistemas estáticos.

🌱 Redes neuronales recurrentes o de retroalimentación (Recurrent or Feedback Networks, por su traducción al inglés), como su nombre lo indica, en su representación gráfica hay bucles debido a las conexiones de retroalimentación, cuando un nuevo patrón de entrada se presenta, la neurona calcula la salida. Debido a las rutas de retroalimentación, el estado de la red se modifica a cada que una o varias entradas se cambian, por lo cual son sistemas dinámicos.

A las reglas de entrenamiento o aprendizaje que la red utiliza para asignar los pesos se les conoce como algoritmos de aprendizaje, uno de ellos es el llamado mecanismo de aprendizaje de propagación hacia atrás o retropropagación (Backpropagation, por su traducción al inglés), útil en el entrenamiento de redes neuronales de avance con una o varias capas, puede manejar diferentes funciones de transferencia en una sola red, generalmente este algoritmo de aprendizaje se utiliza para aproximación de funciones, asociación de patrones y clasificación de patrones [42].

El término retropropagación se refiere al proceso por el cual se pueden calcular los derivados del error de la red, con respecto a los pesos y sesgos de la red. Hay varios algoritmos diferentes de entrenamiento de propagación hacia atrás, sin embargo, como en este trabajo se utilizó el software MATLAB® para la creación de las redes neuronales desarrolladas, la Tabla 10 resume los algoritmos de entrenamiento con los que dispone dicho software para la solución de problemas mediante ANN en general, luego, en el apartado de metodología se indica cuáles de ellos fueron utilizados en esta tesis [42].

Tabla 10. Algoritmos de entrenamiento de propagación hacia atrás.

Función	Descripción
Descenso de gradiente básico.	Respuesta lenta, puede usarse en entrenamiento en modo incremental
Descenso gradiente con impulso.	Generalmente más rápido que la función anterior. Se puede utilizar en entrenamiento en modo incremental.
Tasa de aprendizaje adaptativo.	Entrenamiento más rápido que las funciones de descenso de gradiente, pero solo se puede usar en el entrenamiento en modo por lotes.
Retropropagación resiliente.	Algoritmo simple de entrenamiento en modo por lotes con convergencia rápida y requisitos mínimos de almacenamiento.
Algoritmo de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves.	Tiene los requisitos de almacenamiento más pequeños de los algoritmos de gradiente conjugado.
Algoritmo de gradiente conjugado de Polak-Ribière.	Requisitos de almacenamiento ligeramente mayores que la función anterior. Convergencia más rápida en algunos problemas.
Algoritmo de gradiente conjugado Powell-Beale.	Requisitos de almacenamiento ligeramente mayores que la función anterior. Generalmente convergencia más rápida.
Algoritmo de gradiente conjugado a escala.	El único algoritmo de gradiente conjugado que no requiere búsqueda de línea. Un muy buen algoritmo de entrenamiento de propósito general
Método BFGS cuasi-Newton.	Requiere el almacenamiento de una matriz Hessiana aproximada y tiene más cómputo en cada iteración que los algoritmos de gradiente conjugado, pero generalmente converge en menos iteraciones.
Método secante de un paso.	Compromiso entre los métodos de gradiente conjugado y los métodos cuasi-Newton
Algoritmo de Levenberg-Marquardt.	El algoritmo de entrenamiento más rápido para redes de tamaño moderado. Tiene función de reducción de memoria para usar cuando el conjunto de entrenamiento es grande.
La regularización bayesiana.	Modificación del algoritmo de entrenamiento Levenberg-Marquardt para producir redes que se generalicen bien. Reduce la dificultad de determinar la arquitectura de red óptima.

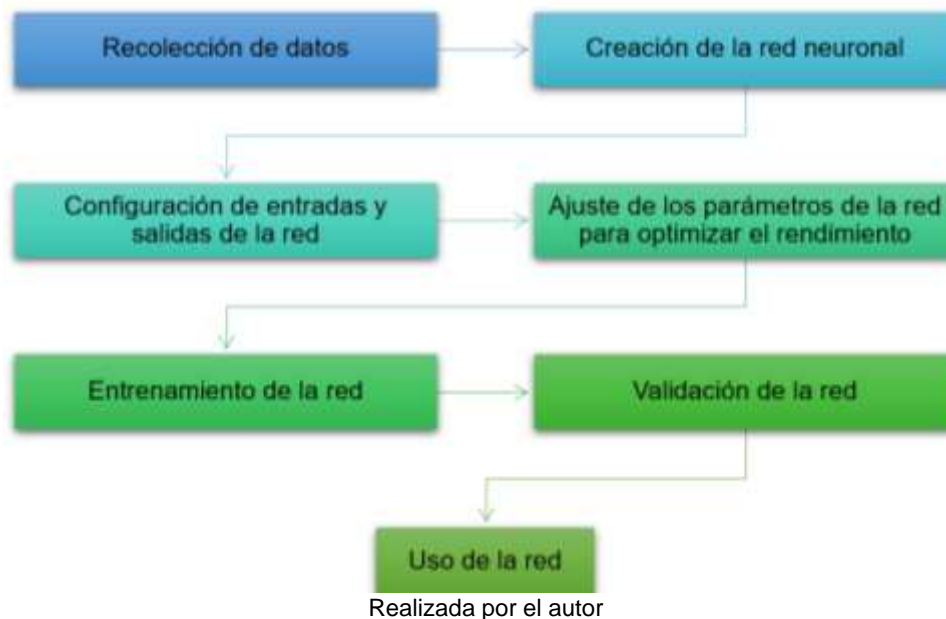
Adaptado de Demuth, H., & Beale, M. (2002). *Neural network Toolbox User's Guide*. (I. The MathWorks, Ed.) (Version 4). Massachusetts.

4. METODOLOGÍA

Las actividades que se llevaron a cabo para desarrollar modelos matemáticos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos, biodiésel puro y mezclas de biodiésel, utilizando RNA se relatan a continuación.

Cada aplicación o software para crear redes neuronales artificiales es única, sin embargo, el proceso de diseño de una red neuronal puede dividirse en seis etapas principales, como se observa en la Ilustración 7. Sólo después de haber cumplido con la validación de la red neuronal ésta se podrá utilizar para realizar predicciones.

Ilustración 7. Diagrama de flujo para el proceso de diseño de una red neuronal.




Como se mencionó anteriormente, cada programa informático cuenta con su propia metodología de uso, por lo que, a pesar de que en la Ilustración 7 se especifican los pasos generales para el diseño de una red neuronal, en seguida, se describe la metodología particular utilizada en este trabajo para diseñar redes neuronales a partir de la aplicación del software MATLAB® especializada en el diseño de las mismas.


4.1 RECOLECCIÓN DE DATOS EXPERIMENTALES.


Se recopilaron datos experimentales reportados en la literatura científica de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos, biodiésel puro y mezclas de biodiésel en un rango amplio de temperatura. Dicha información se encuentra resumida en los apéndices de este trabajo, aunque la versión detallada también se puede consultar en:


<https://1drv.ms/u/s!Aji2xo1hIziudDziYUqMpm4KCaA?e=q17HSA>

La mencionada información fue agrupada en cuatro conjuntos de datos, de acuerdo a los modelos de predicción a desarrollar: A) Densidad de ésteres alquílicos. B) Viscosidad dinámica de ésteres alquílicos. C) Densidad de biodiésel puro y mezclas de biodiésel y D) Viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel.

 La densidad y la viscosidad son dos propiedades importantes hablando en términos de compuestos puros como de biocombustibles, no obstante, en la literatura se puede encontrar más información experimental para la densidad que para la viscosidad.


 Otro factor que influye en la disponibilidad de datos experimentales de viscosidad de ésteres alquílicos como de biodiésel y mezclas de biodiésel es la diversidad de artículos científicos que reportan únicamente viscosidad cinemática o dinámica, pero omiten la densidad, dificultando la conversión de unidades de viscosidad dinámica a cinemática o viceversa, según se requiera.


 Para elaborar las bases de datos experimentales tanto de densidad como de viscosidad dinámica de biodiésel y mezclas de biodiésel se buscó información de biocombustibles compuestos por ésteres etílicos y metílicos, sin embargo, la información hallada respecto a biocombustibles conformados por ésteres etílicos resultó ser menor, por lo que se decidió descartarla.


 Así mismo de la revisión de la literatura que reporta las propiedades termodinámicas de biodiésel puro se observa una tendencia a la determinación de las propiedades de ciertos tipos de biodiésel, en algunos otros casos sólo se reporta la viscosidad dinámica a la temperatura de 313.15 K.


4.2 SELECCIÓN DE LA APLICACIÓN.

En este trabajo se utilizó el software MATLAB® para la creación de las redes neuronales desarrolladas. Este programa cuenta con diversas aplicaciones, entre ellas se encuentran las denominadas matemáticas, estadísticas y de optimización, las cuales a su vez contienen cuatro asistentes útiles en la solución de diferentes tipos de problemas, como clasificación, regresión y agrupación de datos, reducción de dimensionalidad, pronóstico de series de tiempo y modelado y control de sistemas dinámicos [42].

 Aplicación de ajuste de red neuronal (Neural Network Fitting App, por su traducción al idioma inglés): Es útil en problemas de ajuste, donde se desea que una red neuronal asigne una función de correlación entre un conjunto de datos de entrada (input) y un conjunto de datos de salida (output).

 Aplicación de reconocimiento de patrones de red neuronal (Neural Network Pattern Recognition App, por su traducción al idioma inglés): Disponible para la solución de problemas de reconocimiento de patrones, donde se desea que una red neuronal clasifique las entradas en un conjunto de categorías objetivo.

 Aplicación de agrupación de redes neuronales (Neural Network Clustering App, por su traducción al idioma inglés): Se recomienda para solucionar problemas de agrupamiento, donde se desea que una red neuronal agrupe datos por similitud.

 Aplicación de redes neuronales de series temporales (Neural Network Time Series App, por su traducción al idioma inglés): Esta herramienta permite resolver tres tipos de problemas de series temporales no lineales a) Autorregresivo no lineal con entrada externa, predice la serie $y(t)$ dados los valores pasados d de $y(t)$ y otra serie $x(t)$ b) Autorregresivo no lineal, predice series $y(t)$ dados los valores pasados d de $y(t)$ c) Entrada-salida no lineal, predice la serie $y(t)$ dados los valores pasados d de la serie $x(t)$.

Dado que la naturaleza de los problemas abordados en este trabajo es de ajuste, se trabajó con la aplicación NNF del software MATLAB® para generar los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos, biodiésel puro y mezclas de biodiésel.

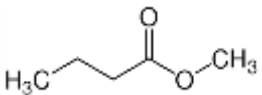
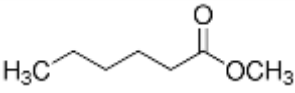
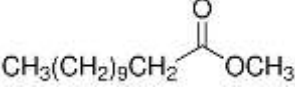
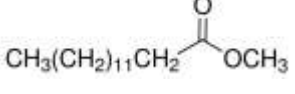
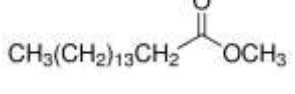
4.3 DEFINICIÓN DE LOS DATOS DE ENTRADA Y SALIDA DE LAS REDES.

En esta etapa se especificaron las variables de entrada y salida de las redes neuronales y por lo tanto de los modelos de predicción de propiedades.

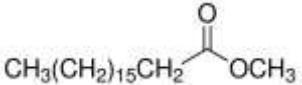
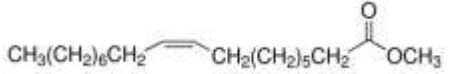

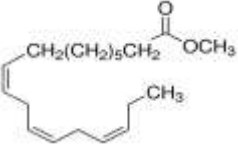
En el diseño de los modelos de predicción de densidad y viscosidad de ésteres alquílicos se consideraron la temperatura y la estructura química del éster como datos de entrada.

Para trasladar la estructura química de los ésteres a valores numéricos, cada compuesto se clasificó de acuerdo a los grupos funcionales en su estructura molecular, $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2-$, $=\text{CH}$ y $-\text{COO}-$, este último define a los ésteres y como se muestra en la Tabla 11, se hizo distinción entre compuestos con más de 7 átomos de carbono y un número menor o igual a 7 átomos de carbono, pues a medida que aumenta la longitud de cadena, el grado de interacción intermolecular se incrementa, entonces dichas interacciones son diferentes en los compuestos considerados como de cadena corta (≤ 7 átomos de carbono) y los considerados de cadena larga (>7 átomos de carbono).

Tabla 11. Estructura química de algunos ésteres alquílicos en función de sus grupos funcionales.

Compuesto	Estructura	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-$	$=\text{CH}-$	$-\text{COO}-$ ($\text{C} \leq 7$)	$-\text{COO}-$ ($\text{C} > 7$)
Butirato de metilo		2	2	0	1	0
Caproato de metilo		2	4	0	1	0
Laurato de metilo		2	10	0	0	1
Miristato de metilo		2	12	0	0	1
Palmitato de metilo		2	14	0	0	1

Continuación de Tabla 11.

Compuesto	Estructura	-CH ₃	-CH ₂ -	=CH-	-COO- (C ≤ 7)	-COO- (C > 7)
Estearato de metilo		2	16	0	0	1
Oleato de metilo		2	14	2	0	1
Linoleato de metilo		2	12	4	0	1
Linolenato de metilo		2	10	6	0	1

Realizada por el autor

Además, el comportamiento de los FAAE al ser una serie homologa presentan un comportamiento similar al de los hidrocarburos ante la presión, es decir que, a medida que las moléculas son más pequeñas, a condiciones de presión atmosférica los compuestos tenderán a estar en fase gas, mientras que los compuestos con moléculas grandes tenderán a estar en fase líquida, así entonces la densidad tendrá un comportamiento diferente debido al cambio de fase, de hecho, esta consideración también se ha hecho en otros trabajos donde se construyeron modelos de predicción de propiedades mediante contribución de grupos [43].

Por otro lado, tal como su nombre lo indica, las variables de salida de los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos fueron la densidad y viscosidad respectivamente.

Al igual que en los modelos anteriores, para los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel se consideraron la temperatura y la composición como datos de entrada, esto con el propósito de incluir el efecto de ambas variables sobre la densidad y viscosidad, por un lado, la dependencia de la densidad y viscosidad con la temperatura y por otro, la influencia

del perfil de FAAE sobre las mencionadas propiedades, tal como se ha hecho en otros modelos [10], [11], [44], [45].


A fin de englobar una amplia gama de biodiésels y mezclas, se consideraron 15 ésteres metílicos, C8:0, C10:0, C12:0, C14:0, C16:0, C16:1, C18:0, C18:1, C18:2, C18:3, C20:0, C20:1, C22:0, C22:1 y C24:0.

Otro aspecto a considerar al hablar de la composición es el manejo de unidades, ya que se puede expresar en porcentaje en masa (%m/m), fracción mol (x_i) y fracción masa (w_i). Sin embargo, se optó por trabajar con la composición en w_i para realizar los modelos de predicción de propiedades del biodiésel puro y mezclas de biodiésel ya que la gran mayoría de artículos alrededor del tema reportan la composición en w_i . Esta decisión se ve respaldada por lo encontrado por otros autores [9], [10], [13], quienes también utilizan dicha unidad para reportar composición al realizar modelos de predicción similares a los desarrollados en este trabajo.


De la misma manera que en los modelos anteriores, las variables de salida de los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel fueron las propiedades, densidad y viscosidad respectivamente.


4.4 Selección de datos de validación, prueba y entrenamiento.

Luego de haber cargado uno de los cuatro conjuntos disponibles a la aplicación NNF para desarrollar el modelo de predicción correspondiente, la siguiente etapa consiste en seleccionar los datos de validación, prueba y entrenamiento es decir que, el total de los datos alimentados se divide de forma aleatoria en tres subconjuntos.

 Entrenamiento: Estos datos se utilizan durante la etapa de entrenamiento de la red, la cual se ajusta de acuerdo al error de dichos datos. El porcentaje de datos destinados para este fin debe ser el mayor de entre las tres secciones ya que este subconjunto debe ser lo suficientemente grande como para generar resultados

significativos, además debe ser representativo de todo el conjunto de datos. En este trabajo se utilizó para todas las “corridas experimentales” realizadas la proporción que establece el software por defecto, es decir que el 70% de cada conjunto de datos fue destinado al entrenamiento de cada modelo.

 Validación: Debido a que esta colección de datos no es utilizada para el entrenamiento de la red, con ellos se puede evaluar la generalización de la red y también son aprovechados para detener el entrenamiento del modelo cuando la generalización deja de mejorar. El porcentaje de datos utilizados para los objetivos mencionados anteriormente en todas las “corridas experimentales” realizadas fue de 15%, correspondiente con lo que está predefinido en el programa informático.

 Prueba: Esta serie de datos a diferencia de los casos anteriores, no tienen ningún efecto en el entrenamiento de la red, por lo que son destinados para evaluar el rendimiento de la red durante y después de la etapa de entrenamiento. El 15% de los datos recopilados para el desarrollo de cada modelo fue destinado para realizar la tarea descrita anteriormente y en todas las “corridas experimentales” ejecutadas en este trabajo se utilizó el porcentaje indicado.

Recordando que en el caso de las “corridas experimentales” realizadas en este trabajo se optó por utilizar las proporciones que establece el software por defecto, cabe mencionar que la literatura en torno al tema establece que los datos de entrenamiento suelen ser la mayoría, se recomienda un 50% o más, usualmente hasta 80% y los datos de validación y prueba suelen mantenerse en igual proporción, ya sea 25–25%, 15%-15% o 10–10% [46].

Es importante tomar en cuenta que cada uno de estos conjuntos debe ser representativo del conjunto completo de datos, es decir que los subconjuntos de prueba y validación cubran la misma región del espacio de entrada que el conjunto de entrenamiento. El método más simple para dividir los datos es seleccionar cada conjunto al azar del total de datos [47].

4.5 DEFINICIÓN DEL NÚMERO DE NEURONAS EN LA CAPA OCULTA.

El último paso, antes de llevar a cabo el entrenamiento de la red, consiste en especificar el número de neuronas en la capa oculta de red neuronal.


En virtud de que no existe una técnica concreta para determinar el número de neuronas en la capa oculta, he incluso el programa informático recomienda que se regrese a este paso y se cambie la cantidad de neuronas en caso de que la red no funcione bien después del entrenamiento, dicha cifra se determinó haciendo un barrido desde 2 hasta 10 neuronas.

Al realizar todos los modelos se comenzó utilizando un número de neuronas reducido y un tamaño de paso pequeño (de 2 en 2), esto a fin de garantizar que se llegara al número de neuronas óptimo, ya que, si se hubiera utilizado un tamaño de paso grande (de 5 en 5), cabría la posibilidad de pasar por alto el número de neuronas óptimo y se obtendrían modelos sobre especificados, que a pesar de contar con un número mayor de neuronas tengan un bajo rendimiento y una pobre capacidad de predicción.


En cuanto a los modelos de predicción de propiedades formulados en este trabajo, se realizaron experiencias o “corridas experimentales” con 2, 4, 6, 8 y 10 neuronas, no obstante, es fundamental comprender que sólo se realizaron “corridas experimentales” con este número de neuronas porque así lo requirieron los problemas abordados, es decir que, con esta definición del número de neuronas, la red alcanzó un buen desempeño. En caso de no haber alcanzado un buen funcionamiento, se hubiera requerido realizar experiencias con un número mayor de neuronas en la capa oculta de la red.


4.6 ENTRENAMIENTO DE LAS REDES

En esta etapa se seleccionó el algoritmo de entrenamiento de las redes. La aplicación NNF dispone de tres algoritmos de retropropagación.

 Retropropagación de Levenberg-Marquardt (LM): Este algoritmo normalmente requiere más memoria que los demás, sin embargo, es el más rápido

en la caja de herramientas. Es una función de entrenamiento que actualiza los valores de peso y sesgo según la optimización de Levenberg-Marquardt. El entrenamiento se detiene automáticamente cuando la generalización deja de mejorar, como lo indica un aumento en el error cuadrático medio³ de las muestras de validación. Por sus características, es altamente recomendado como algoritmo de primera elección.

 Retropropagación de regularización bayesiana (RB): Este algoritmo normalmente requiere más tiempo, pero puede resultar en una buena generalización para conjuntos de datos que presenten alguna complicación, ya sea que contengan un número reducido de datos o que contengan datos ruidosos⁴. Al igual que el algoritmo anterior, este actualiza los valores de peso y sesgo según la optimización de Levenberg-Marquardt pero minimiza una combinación de errores al cuadrado y pesos, luego entonces determina la combinación correcta para producir una red que generalice bien, a este proceso se le conoce como regularización bayesiana.

 Retropropagación de gradiente conjugado escalado (GCE): Este algoritmo requiere menos memoria en comparación con los demás. Es una función de entrenamiento que actualiza los valores de peso y sesgo de acuerdo con el método de gradiente conjugado escalado. El entrenamiento se detiene automáticamente cuando la generalización deja de mejorar, como lo indica un aumento en el error cuadrático medio del conjunto de datos de validación.

Con el propósito de determinar el algoritmo de entrenamiento, en todos los casos bajo estudio se realizó un primer cálculo con 10 neuronas utilizando cada uno de los algoritmos de retropropagación disponibles, a partir de ese primer cálculo se decidió descartar el algoritmo de GCE dada su pobre capacidad de generalización y realizar “corridas experimentales” utilizando los algoritmos restantes, LM y RB en todos los casos. Así entonces para desarrollar cada uno de los modelos

³ El error cuadrático medio es la diferencia cuadrática promedio entre las salidas del modelo y los valores objetivo. Los valores más bajos son mejores. Cero significa que no hay error.

⁴ Se define ruido como una señal aleatoria que se superpone a la señal original y confunde al destinatario.

desarrollados se ejecutaron 10 “corridos experimentales”, en la Tabla 12 se da la descripción de cada experiencia.

Tabla 12. Corridos “experimentales” realizadas para cada modelo de predicción.

Modelo		Algoritmo de aprendizaje	Número de neuronas				
Ésteres alquílicos	Densidad	LM	2	4	6	8	10
		RB	2	4	6	8	10
	Viscosidad	LM	2	4	6	8	10
		RB	2	4	6	8	10
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	LM	2	4	6	8	10
		RB	2	4	6	8	10
	Viscosidad	LM	2	4	6	8	10
		RB	2	4	6	8	10

Realizada por el autor

4.7 SELECCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN OPTIMA.

A fin de seleccionar las redes entrenadas que presentaran el mejor rendimiento para cada caso bajo estudio, se evaluó el desempeño de las mismas, cuyos criterios de diseño se detallan en la Tabla 12. Para hacerlo se utilizaron el Coeficiente de correlación (R), la Desviación Media Absoluta (AAD, por sus siglas en inglés, Average Absolute Deviation), y la Desviación estándar (σ) como métricas para evaluar cómo las estimaciones de las redes entrenadas se correlacionan con los datos experimentales. En la Tabla 13 se mencionan las ecuaciones y una breve descripción de las métricas utilizadas para evaluar el desempeño de las redes entrenadas.

Tabla 13. Métricas para evaluar el desempeño de las RNA.




N°	Ecuación	Métrica	Descripción
29	$R = \frac{\sum_{k=1}^n (x_{exp} - \bar{x}_{exp})(x_{pred} - \bar{x}_{pred})}{\sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{exp} - \bar{x}_{exp})^2 \sum_{k=1}^n (x_{pred} - \bar{x}_{pred})^2}}$ <p>Donde n es el número de observaciones; k es el número de variables; x_{exp} & x_{pred} son los valores observados y calculados; \bar{x}_{exp} & \bar{x}_{pred} son los valores promedio de los valores observados y calculados, respectivamente.</p>	R	Este índice se utiliza para medir el grado de relación lineal entre dos variables cuantitativas y continuas, es un valor sin unidades y varía en el intervalo [-1, 1]. En tanto el coeficiente de correlación esté más cerca de ± 1 , la correlación será positiva o negativa. Un coeficiente de correlación que está más cerca de 0, indica una correlación nula o débil.
30	$\% \varepsilon = \frac{x_{pred} - x_{exp}}{x_{pred}} \times 100$ <p>Donde x_{exp} & x_{pred} son los valores observados y calculados.</p>	% ε	El porcentaje de error mide las diferencias existentes entre el valor estimado por el modelo y los valores experimentales.

Continuación de Tabla 13

N°	Ecuación	Métrica	Descripción
31	$AAD = \frac{\sum_{i=1}^n x_i - \bar{x} }{n}$ <p>Donde n es el número de observaciones; x_i el porcentaje de error entre los valores observados y calculados; \bar{x} el promedio del porcentaje de error.</p>	AAD	Es una estadística que resume la dispersión o variabilidad estadística. La AAD indica la media aritmética de los valores absolutos de las desviaciones respecto a la media.
32	$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}$ <p>Donde n es el número de observaciones; x_i el porcentaje de error entre los valores observados y calculados; \bar{x} el promedio del porcentaje de error.</p>	σ	Es la medida de dispersión más común y se utiliza para indicar qué tan dispersos están los datos con respecto a la media. Entre mayor sea la desviación estándar, mayor será la dispersión de los datos.

Realizada por el autor

Después de haber evaluado el desempeño de las redes entrenadas según las métricas descritas anteriormente, se eligieron las que presentaron el mejor rendimiento, dado que se realizaron varias “corridas experimentales” por cada modelo de predicción desarrollado. Las pautas para seleccionar las RNA que presentaron el mejor rendimiento por cada caso bajo estudio fueron las siguientes.

-  Desviación Media Absoluta: Mínima
-  Coeficiente de correlación: Cercano a la unidad
-  Desviación estándar: Mínima

Cabe mencionar que, al evaluar el desempeño de las redes entrenadas, tanto R, AAD y σ fueron calculadas con base en el conjunto entero de datos destinado para crear los modelos de predicción de cada caso bajo estudio.

4.8 VALIDACIÓN Y USO DE LAS REDES.

Una vez determinadas las cuatro RNA que presentaron el mejor rendimiento, una por cada modelo de predicción desarrollado en este trabajo, se realizó la validación de la capacidad de predicción de cada modelo propuesto, ya que las métricas como R, AAD y σ reflejan principalmente el ajuste entre los datos predichos y los experimentales, sin embargo, de acuerdo a estudios recientes [48], [49], una buena capacidad de ajuste no significa que los modelos presenten una buena capacidad de predicción; Especialmente hablando de modelos matemáticos que cuantifiquen

la relación entre las características estructurales de un compuesto y sus propiedades, tal como es la naturaleza de los modelos planteados en esta investigación.

Para realizar la validación de modelos desarrollados a partir de RNA se dispone de la validación interna y la externa, la validación interna se utiliza para evaluar la capacidad de predicción de los cuatro modelos propuestos y la validación externa para determinar tanto la generalización y la verdadera capacidad de predicción de los modelos propuestos. Las ecuaciones manejadas para realizar la validación interna y externa de modelos como presentados se encuentran en la Tabla 14.

Tabla 14. Métricas utilizadas para validar los modelos desarrollados a partir de RNA.

N°	Ecuación	Variables
33	$Q_{LOO}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{\text{entrenamiento}} (y_i^{\text{exp}} - y_i^{\text{pred}})^2}{\sum_{i=1}^{\text{entrenamiento}} (y_i^{\text{exp}} - \bar{y})^2}$	Q_{LOO}^2 : Coeficiente de correlación con validación cruzada, comúnmente logrado por dejar uno afuera (LOO, por sus siglas en inglés, Leave-one-out,). $y_i^{\text{exp}}, y_i^{\text{pred}} & \bar{y}$: Valores experimentales, predichos y el promedio del conjunto de entrenamiento, respectivamente.
34	$Q_{ext}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{\text{prueba}} (y_i^{\text{exp}} - y_i^{\text{pred}})^2}{\sum_{i=1}^{\text{prueba}} (y_i^{\text{exp}} - \bar{y}_{\text{entrenamiento}})^2}$	Q_{ext}^2 : Coeficiente de correlación de validación externa $y_i^{\text{exp}} & y_i^{\text{pred}}$: Valores experimentales, predichos del conjunto de prueba. $\bar{y}_{\text{entrenamiento}}$: Promedio de los valores experimentales del conjunto de entrenamiento.

Realizada por el autor

Para $Q_{LOO}^2 > 0.5$, la capacidad de predicción es considerada satisfactoria, y para $Q_{LOO}^2 > 0.9$ es excelente [50].

Sin embargo, ya que dichas validaciones se fundamentan por dejar un dato afuera y de acuerdo con las capacidades de la aplicación utilizada para realizar este trabajo no es factible realizar dicha tarea, se optó por calcular R, AAD y σ para cada subconjunto de datos, así entonces se corrobora que todos los subconjuntos repliquen los datos experimentales. Prestando especial atención a las métricas estadísticas arrojadas por el subconjunto de prueba, ya que, al no formar parte de los datos de entrenamiento, son una demostración y validación indirecta de que el modelo predice adecuadamente los datos experimentales.

Luego de haber validado los modelos matemáticos de predicción de propiedades desarrollados a base de RNA y con el fin de habilitarlos para su uso posterior, los

archivos dónde se encuentran las funciones generadas fueron colocados en la nube. Dichos archivos se encuentran disponibles en:

<https://1drv.ms/u/s!Aji2xo1hIziuDziYUqMpm4KCaA?e=g17HSA>

Para poder hacer uso de las funciones es necesario disponer del software dónde se generaron, MATLAB® y seguir las instrucciones consecutivas:

1. Acceder al software.
2. En una ventana de comando se define la matriz a evaluar, cabe mencionar que el tamaño de la misma depende del modelo que se desee utilizar y el número de escenarios a calcular como se muestra en la Tabla 15.
3. Evaluar la función con la matriz de datos⁵.

Tabla 15. Conformación de las matrices para evaluar los modelos de predicción de propiedades generados.

Modelo	Ejemplo de la matriz a evaluar	Donde
Ésteres alquílicos	$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \end{bmatrix}$	Filas=Número de casos a evaluar. Columnas= Número de grupos funcionales en la estructura del éster a evaluar (-CH ₃ , -CH ₂ -, =CH, -COO- si C ≤ 7, -COO- si C > 7 y temperatura (K).
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} & b_{17} & b_{18} & b_{19} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} & b_{27} & b_{28} & b_{29} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} & b_{35} & b_{36} & b_{37} & b_{38} & b_{39} \\ b_{110} & b_{111} & b_{112} & b_{113} & b_{114} & b_{115} \\ b_{210} & b_{211} & b_{212} & b_{213} & b_{214} & b_{215} \\ b_{310} & b_{311} & b_{312} & b_{313} & b_{314} & b_{315} \end{bmatrix}$	Filas= Número de casos a evaluar Columnas=Concentración (wi) de C8:0, C10:0, C12:0, C14:0, C16:0, C16:1, C18:0, C18:1, C18:2, C18:3, C20:0, C20:1, C22:0, C22:1, C24:0 y temperatura (K).

Realizada por el autor

⁵ Para que MATLAB ejecute una función es necesario que esta se encuentre en el folder actual, de lo contrario el software arroja un aviso pidiendo que se realice dicha acción.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este apartado se presentan y analizan los resultados obtenidos durante el desarrollo de este trabajo.

5.1 RECOLECCIÓN DE DATOS EXPERIMENTALES

Los datos experimentales recopilados se agruparon en bases de datos, a partir de las cuales se desarrollaron los cuatro modelos de predicción mencionados anteriormente. En la Tabla 16 se reporta la extensión de cada colección de datos, debido a su amplitud, un resumen de los mismos se encuentra en los apéndices de este texto.

Tabla 16. Extensión de las bases de datos generadas.

Base de datos		Número de datos experimentales recopilados de literatura	Apéndice
Ésteres alquílicos	Densidad	1284	A
	Viscosidad	948	B
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	699	C
	Viscosidad	641	D

Realizada por el autor

Las observaciones realizadas durante la recopilación de datos se detallan a continuación:


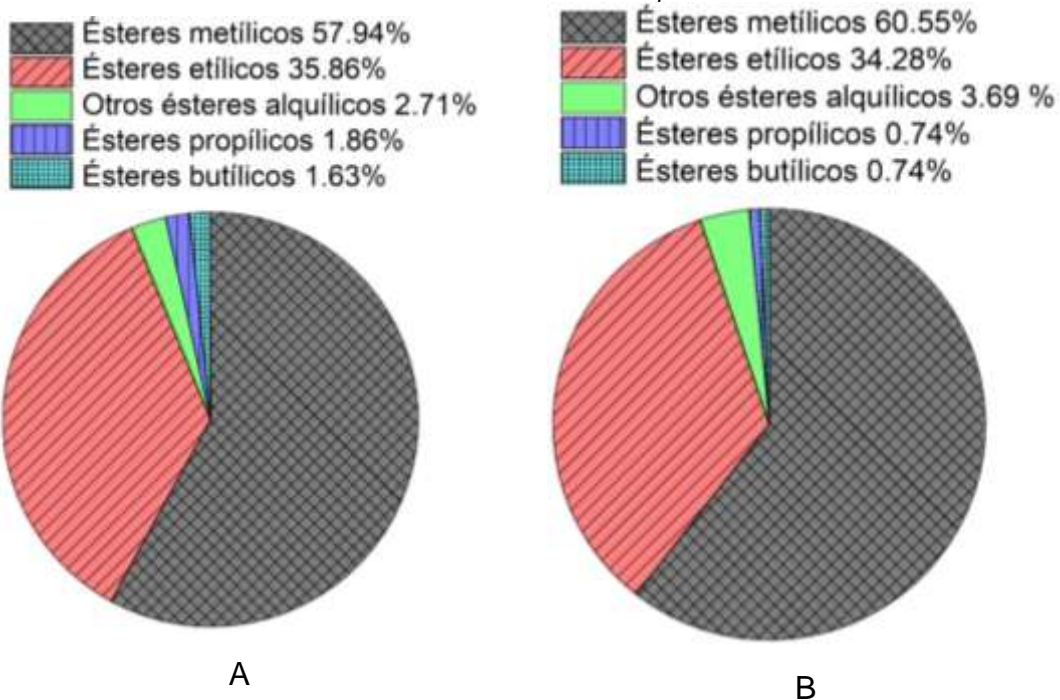


 En la literatura se reportan datos experimentales de propiedades termodinámicas de diversos ésteres alquílicos, sin embargo, en el caso de la densidad y viscosidad dinámica hay un sesgo hacia los ésteres etílicos y metílicos. Esta situación se ve reflejada en la composición de las bases de datos generadas; en el apéndice A, el 57.94% de los datos corresponde a información referente a ésteres metílicos y el 35.86% a ésteres etílicos, en cuando al apéndice B, el 60.09% de los datos corresponde a información referente a ésteres metílicos y el 34.69% a ésteres etílicos. Con el fin de comprender a profundidad la composición de las bases de datos realizadas, la Ilustración 8 muestra una gráfica circular donde se representa el porcentaje de información recabada por cada tipo de éster.


Ilustración 8. Composición de las bases de datos experimentales de A) Densidad de ésteres alquílicos y B) Viscosidad dinámica de ésteres alquílicos.



Realizada por el autor

 En vista de que la distribución de los datos de densidad y viscosidad de ésteres alquílicos presenta sesgos hacia ésteres metílicos y etílicos, esto se traducirá en límites de aplicación de los modelos. Se espera que los modelos de predicción arrojen buenas aproximaciones tratándose de ésteres metílicos y etílicos, sin embargo, se deben tomar con cautela las predicciones hechas por los modelos hablando de otro tipo de ésteres ya que no serán precisas.

 En el apéndice C, se reporta que, el 34.19% de los datos corresponde a información referente a mezclas de biodiésel y el 65.81% a biocombustibles puros, en cuanto al apéndice D, se reporta que, el 29.95% de los datos corresponde a información referente a mezclas de biodiésel y el 70.05% a ésteres etílicos.

 Tomando en cuenta la densidad de los biocombustibles puros, la Ilustración 9A muestra que el 24.13% es información referente a biodiésel de palma, el 19.35% a biodiésel de jatropha y el 13.48% a biodiésel de soya.


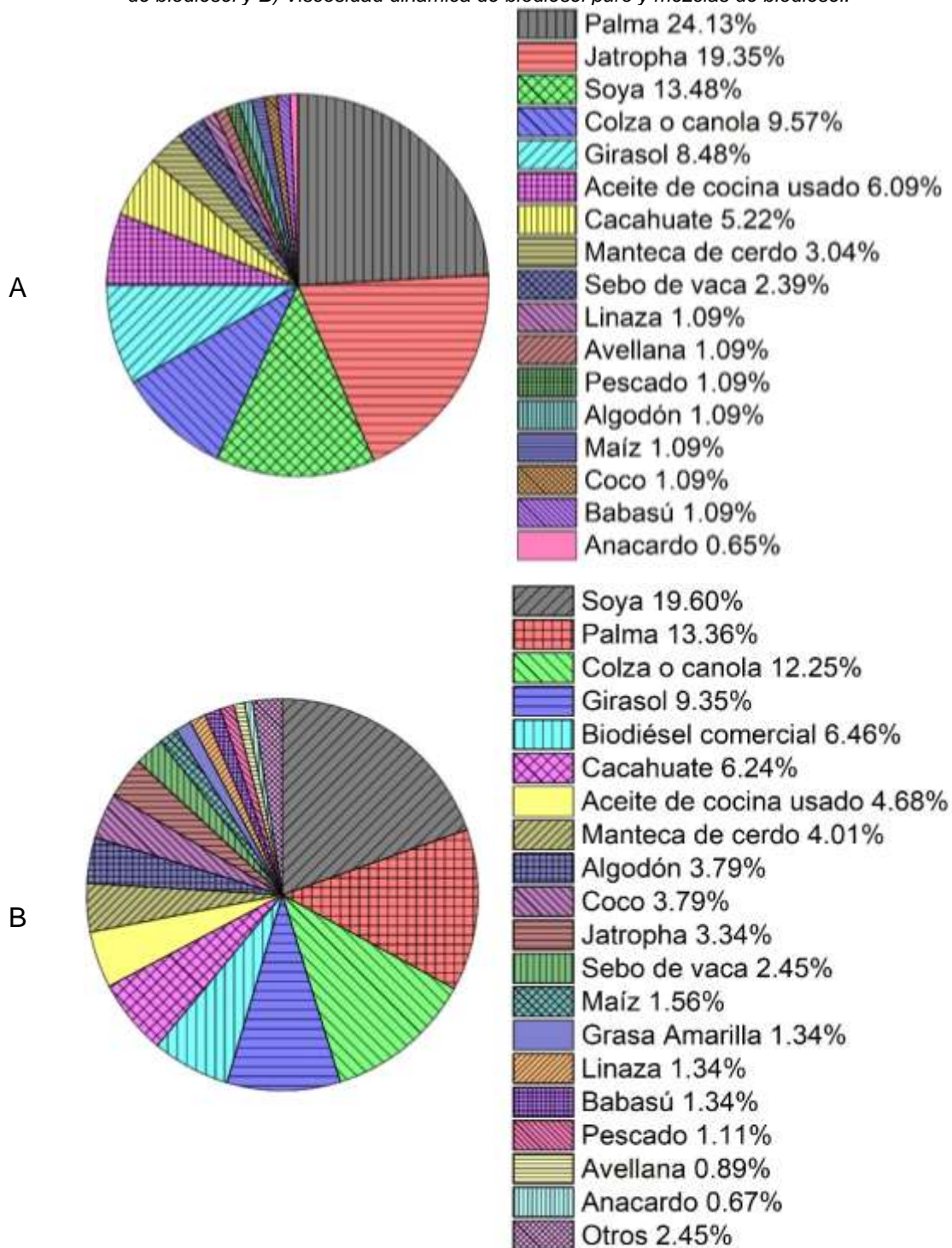
 Tomando en cuenta la viscosidad de los biocombustibles puros, la Ilustración 9B muestra que el 19.6% es información referente a biodiésel de soya, el 13.36% a biodiésel de palma y el 13.48% a biodiésel de colza.

Ilustración 9. Porcentaje de datos experimentales compilados para A) Densidad de biodiésel puro y mezclas de biodiésel y B) Viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel.



Realizada por el autor

5.2 SELECCIÓN DE LA APLICACIÓN

Debido a que el desarrollo de modelos matemáticos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel requiere del ajuste de parámetros, se utilizó la aplicación NNF del software MATLAB®, para el diseño de las redes neuronales.

Al seleccionar la aplicación NNF, la arquitectura básica de la red queda definida, posteriormente se establecen detalles cómo cuántas neuronas y capas se desea utilizar, cuántas entradas y salidas debe tener la red, así como el tipo de función de entrenamiento a utilizar [47].

La aplicación mencionada resuelve problemas de ajuste de entrada-salida mediante una red neuronal de avance de dos capas, una capa oculta y una de salida. Las funciones sigmoide e identidad están preestablecidas como funciones de entrenamiento en la capa oculta y de transferencia en la capa de salida. Dicha arquitectura ha sido ampliamente validada y ha demostrado ser precisa en la mayoría de los trabajos donde se abordan problemas de ajuste [11]. Un prototipo simplificado de dicha arquitectura se muestra en la Ilustración 10. Mas adelante se expone a detalle la arquitectura de cada red neuronal realizada.

Ilustración 10. Arquitectura simplificada de las redes neuronales desarrolladas.



Realizada por el autor

Cabe mencionar que la arquitectura de red neuronal estándar para problemas de ajuste es el perceptrón multicapa, con neuronas tansig en las capas ocultas y lineales en la capa de salida. Generalmente en las capas ocultas la función de transferencia tansig se prefiere sobre la logsig ya que la función tansig produce valores de salida (los cuales son entradas a la siguiente capa) normalizados, cercanos a cero, mientras que la logsig genera valores positivos [47].

En cuanto al número de capas, para la mayoría de los problemas de ajuste, una sola capa oculta es suficiente, sin embargo, en caso de que los resultados no sean satisfactorios, a veces se utilizan dos capas, aunque sería raro en un problema estándar de ajuste. Solo en problemas muy difíciles se han utilizados redes profundas, con múltiples capas, lo cual no fue necesario en este trabajo [47].

La función lineal o identidad se recomienda como función de transferencia en la capa de salida porque en los problemas de ajuste, la salida objetivo es una variable continua, como son las propiedades bajo estudio [47].

Aunque las redes de base radial también se pueden utilizar para resolver problemas de ajuste, donde la función de transferencia gaussiana se usa en la capa oculta, y la función de transferencia lineal en la capa de salida, para solucionar los problemas abordados en esta tesis, se decidió utilizar redes de dos capas con funciones de transferencia sigmoideas en las capas ocultas y funciones de transferencia lineales en las capas de salidas, ya que de acuerdo a lo anterior, ésta arquitectura se considera un aproximador universal para resolver problemas de ajuste [47].

5.3 DEFINICIÓN DE LOS DATOS DE ENTRADA Y SALIDA DE LAS REDES.

Como se explicó en el apartado 4.3, en esta etapa se especificaron las variables de entrada y salida de las redes neuronales y por lo tanto de los modelos de predicción de propiedades planteados. Los productos obtenidos en este paso constan de archivos en Excel donde se encuentran las matrices de entrada y salida alimentadas al software, resultado del manejo de los datos recopilados. En la Tabla 17 se resume el tamaño de las matrices generadas.

Tabla 17. Tamaño de las matrices de entrada y salida para los modelos generados.

Modelo		Matriz de entrada	Matriz de salida
Ésteres alquílicos	Densidad	6x1284	1x1284
	Viscosidad	6x948	1x948
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	16x699	1x699
	Viscosidad	16x641	1x641

Realizada por el autor

En cuanto a las matrices generadas cabe destacar los siguientes puntos:

🌱 En las matrices de entrada el número de filas corresponde al número de variables de entrada.

🌱 En las matrices de salida el número de filas corresponde al número de variables de salida, es decir, densidad o viscosidad.

🌱 En las matrices de entrada como en las de salida el número de filas es igual al número de datos experimentales obtenidos de literatura.

Cabe mencionar que se hace hincapié en esta sección ya que detalla las características que deben tener los archivos de Excel alimentados al software.

5.4 SELECCIÓN DE DATOS DE VALIDACIÓN, PRUEBA Y ENTRENAMIENTO.

Como ya se dijo, después de haber cargado al software los datos de entrada y salida de cada modelo, la aplicación NNF divide en forma aleatoria el total de los datos alimentados en tres subconjuntos (entrenamiento, validación y prueba). La distribución de los datos se lleva a cabo en forma aleatoria con el fin de garantizar que los subconjuntos de prueba y validación cubran la misma región del espacio de entrada que el conjunto de entrenamiento, en la Tabla 18 se encuentra la distribución utilizada para el desarrollo de cada modelo de predicción hecho.

Tabla 18. Distribución de los subconjuntos de datos de entrenamiento, validación y prueba.

Modelo		Datos totales	Subconjuntos Algoritmo de entrenamiento LM	Subconjuntos Algoritmo de entrenamiento RB
Ésteres alquílicos	Densidad	1284	Entrenamiento (70%):898 Validación (15%):193 Prueba (15%):193	Entrenamiento (85%): 1091 Prueba (15%):193
	Viscosidad	948	Entrenamiento (70%): 664 Validación (15%):142 Prueba (15%):142	Entrenamiento (85%):805 Prueba (15%):143
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	699	Entrenamiento (70%):489 Validación (15%):105 Prueba (15%):105	Entrenamiento (85%):594 Prueba (15%):105
	Viscosidad	641	Entrenamiento (70%): 449 Validación (15%): 96 Prueba (15%):96	Entrenamiento (85%): 544 Prueba (15%): 97

Realizada por el autor

Como se observa en la Tabla 18, al utilizar el algoritmo de entrenamiento RB, la aplicación NNF divide en forma aleatoria el total de los datos alimentados sólo en dos subconjuntos, entrenamiento y prueba.

Recordando que el subconjunto de validación se utiliza para detener el entrenamiento del modelo cuando la generalización deja de mejorar, es preciso destacar que la regularización bayesiana constituye un criterio de parada para el entrenamiento, dicho criterio implica modificar la función del error cuadrático medio con el propósito de mejorar la capacidad de generalización del modelo de red neuronal, es decir, lograr una mayor adaptabilidad de la red a los diversos casos que se le pueden presentar.

Es por eso que en el algoritmo RB, las paradas de validación están deshabilitadas ($\text{max_fail}=0$), de esta forma el entrenamiento continúa hasta que se encuentre una combinación óptima de errores y pesos. Sin embargo, es posible lograr una minimización de peso/sesgo con tiempos de entrenamiento más cortos si la validación se habilita estableciendo max_fail en 6 o algún otro valor estrictamente positivo [42], lo cual no se llevó a cabo, entonces, en las corridas donde se utilizó este algoritmo de entrenamiento, el 85% de datos se destinaron para el entrenamiento del modelo y el 15% restante para la prueba del mismo.

5.5 DEFINICIÓN DEL NÚMERO DE NEURONAS EN LA CAPA OCULTA.

Los parámetros definidos en esta etapa fueron el número de neuronas en la capa oculta de cada red neuronal, con lo cual quedó especificada por completo la arquitectura de las redes neuronales artificiales elaboradas al ejecutar las corridas “experimentales” detalladas en la Tabla 12.

En la Tabla 19 se expone la arquitectura de las redes neuronales realizadas, por lo general, la topología de las redes neuronales se denota escribiendo el número de neuronas en la capa de entrada, seguido por el número de neuronas en la(s) capa(s) ocultas según sea el caso, y finalmente se encuentra el número de neuronas en la capa de salida.

Tabla 19. Arquitectura de las redes neuronales realizadas

Modelo		Arquitectura				
Ésteres alquílicos	Densidad	6:2:1	6:4:1	6:6:1	6:8:1	6:10:1
	Viscosidad	6:2:1	6:4:1	6:6:1	6:8:1	6:10:1
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	16:2:1	16:4:1	16:6:1	16:8:1	16:10:1
	Viscosidad	16:2:1	16:4:1	16:6:1	16:8:1	16:10:1

Realizada por el autor

5.6 ENTRENAMIENTO DE LAS REDES

Los resultados obtenidos en esta etapa corresponden al compendio de archivos generados al realizar las corridas “experimentales” detalladas en la Tabla 12, entre los que se encuentran: a) la función generada, b) los datos utilizados para entrenamiento, c) los datos utilizados para prueba, y d) los datos utilizados para validación en cada una de las “corridas experimentales”.

En el caso de las funciones generadas, a cada archivo se le asignó un nombre compuesto por una letra D o V según se tratara de un modelo de predicción de densidad o viscosidad, la abreviatura del algoritmo de aprendizaje y el número de neuronas utilizadas, separados por un guion bajo. Para diferenciar los modelos de predicción de propiedades de ésteres alquílicos de los de predicción de propiedades de biodiésel puro y mezclas de biodiésel, se les antepuso el prefijo Bio a estos últimos, así como se muestra en la Tabla 20.

Tabla 20. Funciones generadas para la optimización de los modelos desarrollados.

Modelo		Nombre de la función				
Ésteres alquílicos	Densidad	D_LM_2	D_LM_4	D_LM_6	D_LM_8	D_LM_10
		D_RB_2	D_RB_4	D_RB_6	D_RB_8	D_RB_10
	Viscosidad	V_LM_2	V_LM_4	V_LM_6	V_LM_8	V_LM_10
		V_RB_2	V_RB_4	V_RB_6	V_RB_8	V_RB_10
Biodiésel puro y mezclas de biodiésel	Densidad	Bio_D_LM_2	Bio_D_LM_4	Bio_D_LM_6	Bio_D_LM_8	Bio_D_LM_10
		Bio_D_RB_2	Bio_D_RB_4	Bio_D_RB_6	Bio_D_RB_8	Bio_D_RB_10
	Viscosidad	Bio_V_LM_2	Bio_V_LM_4	Bio_V_LM_6	Bio_V_LM_8	Bio_V_LM_10
		Bio_V_RB_2	Bio_V_RB_4	Bio_V_RB_6	Bio_V_RB_8	Bio_V_RB_10

Realizada por el autor

5.7 SELECCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN OPTIMA.

En esta etapa se evaluó el rendimiento de las funciones mencionadas en la Tabla 20, a fin de seleccionar las que presentaran el mejor desempeño, para hacerlo se calculó AAD, R y σ , los resultados se dan a conocer en la Tabla 21, en ella se

destaca en negritas los modelos seleccionados con base en los criterios que ya se han presentado, AAD mínima, R cercano a la unidad y σ mínima. Cabe recordar que, al evaluar el desempeño de las redes entrenadas, tanto R, AAD y σ fueron calculadas con base en el conjunto entero de datos.

Tabla 21. Resultados.

Modelos de predicción de propiedades de ésteres alquílicos							
Densidad				Viscosidad dinámica			
	AAD	R	σ		AAD	R	σ
D_LM_2	0.41	0.9903	4.47	V_LM_2	14.9	0.987	0.33
D_LM_4	0.36	0.9944	3.38	V_LM_4	4.6	0.9968	0.17
D_LM_6	0.36	0.9943	3.41	V_LM_6	5.1	0.9968	0.17
D_LM_8	0.38	0.9934	3.66	V_LM_8	3.94	0.9976	0.14
D_LM_10	0.34	0.9948	3.25	V_LM_10	4.34	0.9977	0.14
D_RB_2	0.39	0.9919	4.05	V_RB_2	7.25	0.995	0.21
D_RB_4	0.35	0.9947	3.27	V_RB_4	4.49	0.997	0.16
D_RB_6	0.35	0.9948	3.25	V_RB_6	4.18	0.9976	0.14
D_RB_8	0.35	0.9909	4.28	V_RB_8	3.67	0.9982	0.13
D_RB_10	0.24	0.9965	2.66	V_RB_10	3.48	0.9985	0.12
Modelos de predicción de propiedades de biodiésel y mezclas de biodiésel							
Densidad				Viscosidad dinámica			
	AAD	R	σ		AAD	R	σ
Bio_D_LM_2	0.1229	0.9925	0.35	Bio_V_LM_2	6.9903	0.9775	2.65
Bio_D_LM_4	0.1069	0.9948	0.33	Bio_V_LM_4	7.006	0.9831	2.65
Bio_D_LM_6	0.1068	0.9962	0.33	Bio_V_LM_6	6.0324	0.9818	2.46
Bio_D_LM_8	0.078	0.9958	0.28	Bio_V_LM_8	5.8662	0.9869	2.42
Bio_D_LM_10	0.0786	0.9961	0.28	Bio_V_LM_10	5.8921	0.99	2.43
Bio_D_RB_2	0.1258	0.9926	0.35	Bio_V_RB_2	6.2347	0.9879	2.5
Bio_D_RB_4	0.0832	0.9958	0.29	Bio_V_RB_4	5.8924	0.9894	2.43
Bio_D_RB_6	0.0591	0.9983	0.24	Bio_V_RB_6	5.3744	0.9916	2.32
Bio_D_RB_8	0.0553	0.9987	0.24	Bio_V_RB_8	4.4912	0.992	2.12
Bio_D_RB_10	0.0184	0.9997	0.14	Bio_V_RB_10	3.7272	0.9951	1.93

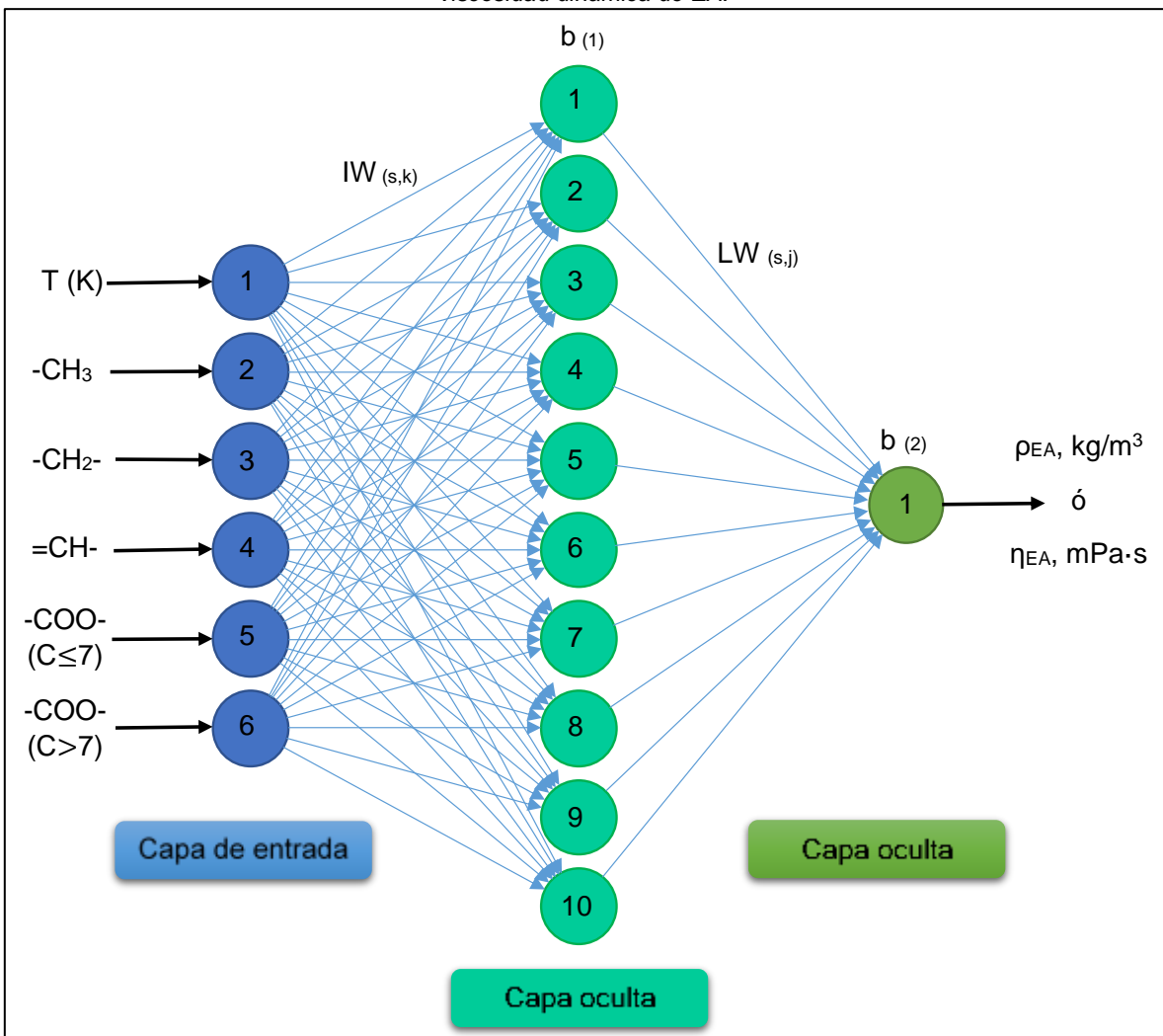
Realizada por el autor

Como se observa en la Tabla 21, en todos los casos bajo estudio, a medida que aumenta el número de neuronas en la capa oculta el rendimiento de la red mejora, ya que R es más cercano a la unidad mientras el número de neuronas en las capas ocultas de las redes aumenta. Del mismo modo se observa que las RNA que fueron

entrenadas con el algoritmo RB presentan mejores rendimientos que las entrenadas con el algoritmo LM, aun utilizando el mismo número de neuronas en la capa oculta.

Por otra parte, en la Ilustración 11 se detalla la arquitectura de las redes seleccionadas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica de los compuestos puros del biodiésel, dónde se observa que hay 6 neuronas en la capa de entrada, 10 en la capa oculta y 1 en la capa de salida, así mismo se pueden ver representados los pesos y las bias.

Ilustración 11. Arquitectura de las ANN desarrolladas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica de EA.



En seguida se muestran las matrices de pesos y bias para los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos en las Tablas 22 y 23 respectivamente.

Tabla 22. Matriz de pesos y bias para el modelo D_RB_10.

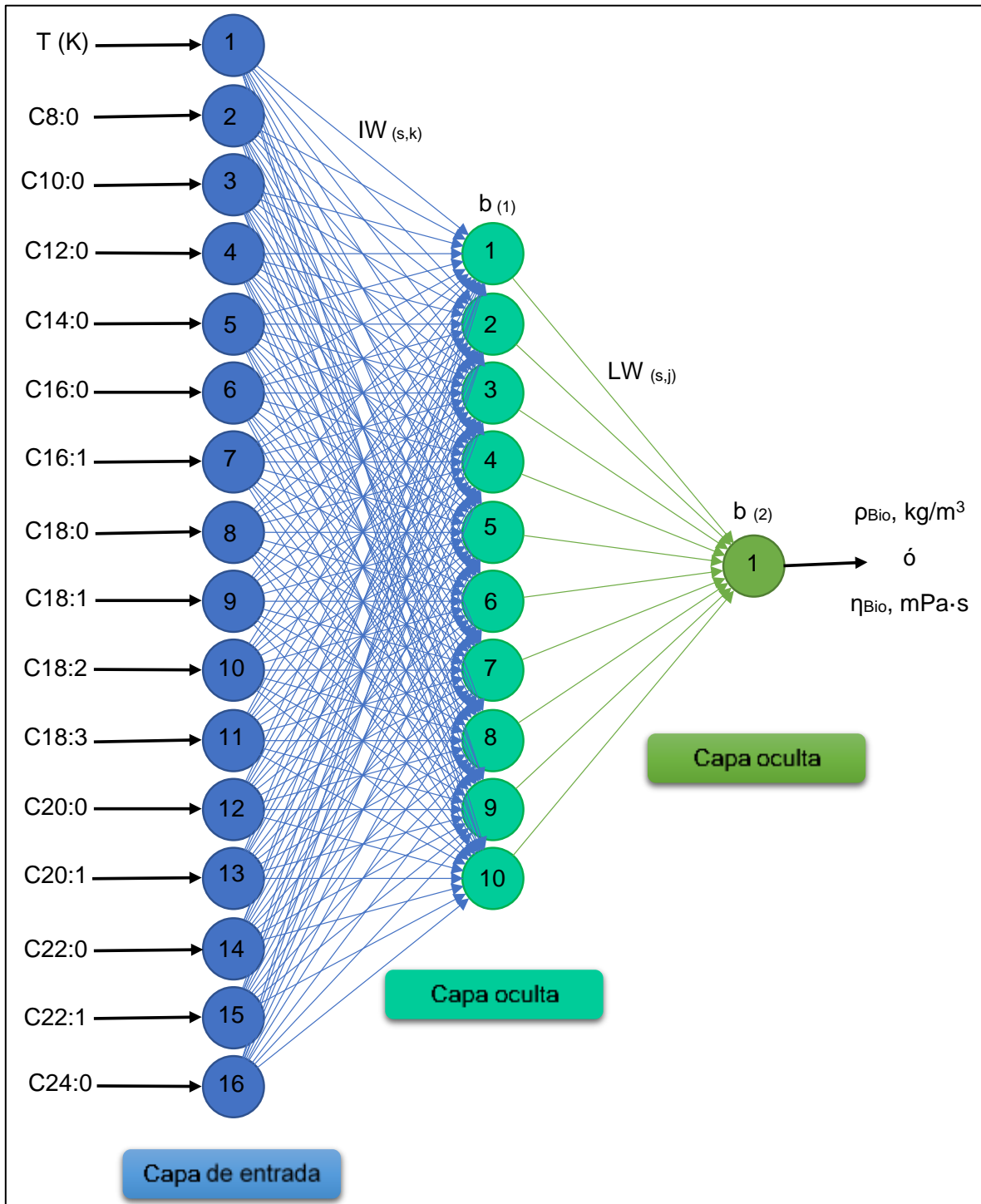
IW(s,k)	IW(1,1)	IW(1,2)	IW(1,3)	IW(1,4)	IW(1,5)	IW(1,6)
	-1.2194	-3.9652	-1.5172	-0.6838	0.6838	0.0045
	IW(2,1)	IW(2,2)	IW(2,3)	IW(2,4)	IW(2,5)	IW(2,6)
	-1.8036	-4.2677	-2.1738	-1.0794	1.0794	0.0198
	IW(3,1)	IW(3,2)	IW(3,3)	IW(3,4)	IW(3,5)	IW(3,6)
	0.3333	4.2085	0.5294	-0.3925	0.3925	-0.0062
	IW(4,1)	IW(4,2)	IW(4,3)	IW(4,4)	IW(4,5)	IW(4,6)
	-0.8807	-1.1301	-0.7572	-0.0251	0.0251	0.2984
	IW(5,1)	IW(5,2)	IW(5,3)	IW(5,4)	IW(5,5)	IW(5,6)
	-0.0250	-1.0126	-0.9646	0.6191	-0.6191	-0.0370
	IW(6,1)	IW(6,2)	IW(6,3)	IW(6,4)	IW(6,5)	IW(6,6)
	-0.0048	0.2574	0.3212	0.1295	-0.1295	-0.1403
	IW(7,1)	IW(7,2)	IW(7,3)	IW(7,4)	IW(7,5)	IW(7,6)
	1.0400	4.2956	4.3193	2.3782	-2.3782	-0.0425
	IW(8,1)	IW(8,2)	IW(8,3)	IW(8,4)	IW(8,5)	IW(8,6)
	-0.2202	-9.0254	0.3872	0.3678	-0.3678	0.0502
	IW(9,1)	IW(9,2)	IW(9,3)	IW(9,4)	IW(9,5)	IW(9,6)
	-2.3346	-7.3645	0.6218	-1.2219	1.2219	-0.0118
	IW(10,1)	IW(10,2)	IW(10,3)	IW(10,4)	IW(10,5)	IW(10,6)
	-2.2816	-14.9000	1.7143	-1.9391	1.9391	0.1253
LW(s,j)	LW(1,1)	LW(2,1)	LW(3,1)	LW(4,1)	LW(5,1)	LW(6,1)
	2.6696	-1.8271	5.1005	-1.2148	2.2154	3.8048
	LW(7,1)	LW(8,1)	LW(9,1)	LW(10,1)		
	-3.7703	3.5925	1.3861	-1.2304		
b(1)	-1.2108					
	-1.7557					
	0.3333					
	-0.8538					
	-0.0403					
	-0.1357					
	1.0292					
	-0.2200					
	-2.3308					
	-2.3381					
b(2)	-2.0852					

Tabla 23. Matriz de pesos y bias para el modelo V_LM_10.

IW(s,k)	IW(1,1)	IW(1,2)	IW(1,3)	IW(1,4)	IW(1,5)	IW(1,6)
	0.0691	1.8026	-2.7082	-0.6829	1.5708	1.4603
	IW(2,1)	IW(2,2)	IW(2,3)	IW(2,4)	IW(2,5)	IW(2,6)
	-0.2618	2.8523	0.1563	0.5993	-1.2631	-0.4490
	IW(3,1)	IW(3,2)	IW(3,3)	IW(3,4)	IW(3,5)	IW(3,6)
	-1.2389	0.3825	0.7952	-0.6439	1.3811	0.8244
	IW(4,1)	IW(4,2)	IW(4,3)	IW(4,4)	IW(4,5)	IW(4,6)
	1.7905	0.0037	0.3232	-0.0917	-1.9901	0.8891
	IW(5,1)	IW(5,2)	IW(5,3)	IW(5,4)	IW(5,5)	IW(5,6)
	-1.4559	2.4199	2.1578	-0.2481	0.3365	-1.2520
	IW(6,1)	IW(6,2)	IW(6,3)	IW(6,4)	IW(6,5)	IW(6,6)
	-3.0405	-1.7704	-1.3652	-2.1700	1.9596	1.3554
	IW(7,1)	IW(7,2)	IW(7,3)	IW(7,4)	IW(7,5)	IW(7,6)
	-1.1006	-7.2110	4.8933	2.1165	-3.8145	-0.9000
	IW(8,1)	IW(8,2)	IW(8,3)	IW(8,4)	IW(8,5)	IW(8,6)
	1.3645	-2.7302	1.6392	-0.4969	0.0350	2.2034
	IW(9,1)	IW(9,2)	IW(9,3)	IW(9,4)	IW(9,5)	IW(9,6)
	0.9939	-1.5724	0.0714	-0.5894	-1.2397	2.5682
	IW(10,1)	IW(10,2)	IW(10,3)	IW(10,4)	IW(10,5)	IW(10,6)
	1.5003	-1.0401	-0.5807	-0.9507	0.8424	0.4628
LW(s,j)	LW(1,1)	LW(2,1)	LW(3,1)	LW(4,1)	LW(5,1)	LW(6,1)
	0.0632	0.0572	0.6066	-0.6878	0.1797	0.1015
	LW(7,1)	LW(8,1)	LW(9,1)	LW(10,1)		
	0.7187	-0.1193	-2.7623	1.4574		
b(1)	-2.6406					
	1.6597					
	0.5098					
	0.7834					
	0.5232					
	-1.2037					
	-0.8163					
	1.0122					
	3.3275					
	2.2414					
b(2)	1.3290					

En la Ilustración 12 se detalla la arquitectura de las redes elegidas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica del biodiésel puro y mezclas, en seguida en las Tablas 24 y 25 se encuentran las matrices de pesos y bias.

Ilustración 12. Arquitectura de las ANN desarrolladas para modelar el comportamiento de la densidad y viscosidad dinámica de EA.



Realizada por el autor

Tabla 24. Matriz de pesos y bias para el modelo Bio_D_RB_10.

$IW_{(s,k)}$	$IW_{(1,1)}$	$IW_{(1,2)}$	$IW_{(1,3)}$	$IW_{(1,4)}$	$IW_{(1,5)}$	$IW_{(1,6)}$
	-4.5149	0.4780	-1.7909	1.3653	0.6435	0.4380
	$IW_{(1,7)}$	$IW_{(1,8)}$	$IW_{(1,9)}$	$IW_{(1,10)}$	$IW_{(1,11)}$	$IW_{(1,12)}$
	-0.2796	0.3066	0.5040	-1.0474	-0.9870	2.5134
	$IW_{(1,13)}$	$IW_{(1,14)}$	$IW_{(1,15)}$	$IW_{(1,16)}$		
	1.6480	-0.3214	1.3429	0.2333		
	$IW_{(2,1)}$	$IW_{(2,2)}$	$IW_{(2,3)}$	$IW_{(2,4)}$	$IW_{(2,5)}$	$IW_{(2,6)}$
	-1.2587	-2.8142	-1.6659	-3.7354	-3.0914	-0.3881
	$IW_{(2,7)}$	$IW_{(2,8)}$	$IW_{(2,9)}$	$IW_{(2,10)}$	$IW_{(2,11)}$	$IW_{(2,12)}$
	2.8838	1.2825	1.9624	4.4385	0.2906	2.3269
	$IW_{(2,13)}$	$IW_{(2,14)}$	$IW_{(2,15)}$	$IW_{(2,16)}$		
	2.2236	4.4853	2.9099	5.0698		
	$IW_{(3,1)}$	$IW_{(3,2)}$	$IW_{(3,3)}$	$IW_{(3,4)}$	$IW_{(3,5)}$	$IW_{(3,6)}$
	-1.0750	1.6328	-0.1780	0.7371	-0.0330	0.8824
	$IW_{(3,7)}$	$IW_{(3,8)}$	$IW_{(3,9)}$	$IW_{(3,10)}$	$IW_{(3,11)}$	$IW_{(3,12)}$
	0.1089	-1.3554	-2.6531	-1.7953	1.9857	2.4988
	$IW_{(3,13)}$	$IW_{(3,14)}$	$IW_{(3,15)}$	$IW_{(3,16)}$		
	0.0355	0.7673	0.3812	0.1522		
	$IW_{(4,1)}$	$IW_{(4,2)}$	$IW_{(4,3)}$	$IW_{(4,4)}$	$IW_{(4,5)}$	$IW_{(4,6)}$
	3.5105	-0.8040	0.6595	1.2590	0.1337	0.1967
	$IW_{(4,7)}$	$IW_{(4,8)}$	$IW_{(4,9)}$	$IW_{(4,10)}$	$IW_{(4,11)}$	$IW_{(4,12)}$
	0.1575	-0.9640	-1.7170	0.0405	0.8340	-2.4334
	$IW_{(4,13)}$	$IW_{(4,14)}$	$IW_{(4,15)}$	$IW_{(4,16)}$		
	-2.0835	0.4022	-1.6647	-0.2089		
	$IW_{(5,1)}$	$IW_{(5,2)}$	$IW_{(5,3)}$	$IW_{(5,4)}$	$IW_{(5,5)}$	$IW_{(5,6)}$
	2.2462	-4.3377	-3.7492	-3.7300	-2.8996	-0.8221
	$IW_{(5,7)}$	$IW_{(5,8)}$	$IW_{(5,9)}$	$IW_{(5,10)}$	$IW_{(5,11)}$	$IW_{(5,12)}$
	3.0601	1.6781	2.2651	4.5357	0.2488	2.3059
	$IW_{(5,13)}$	$IW_{(5,14)}$	$IW_{(5,15)}$	$IW_{(5,16)}$		
	2.2658	4.4812	2.9373	5.0622		
	$IW_{(6,1)}$	$IW_{(6,2)}$	$IW_{(6,3)}$	$IW_{(6,4)}$	$IW_{(6,5)}$	$IW_{(6,6)}$
	-1.6736	1.1774	2.1011	2.2402	0.0013	-0.5206
	$IW_{(6,7)}$	$IW_{(6,8)}$	$IW_{(6,9)}$	$IW_{(6,10)}$	$IW_{(6,11)}$	$IW_{(6,12)}$
	-3.4990	-0.4238	0.1291	-1.3724	2.9625	1.7324
	$IW_{(6,13)}$	$IW_{(6,14)}$	$IW_{(6,15)}$	$IW_{(6,16)}$		
	0.7769	1.6555	0.4230	0.1533		
	$IW_{(7,1)}$	$IW_{(7,2)}$	$IW_{(7,3)}$	$IW_{(7,4)}$	$IW_{(7,5)}$	$IW_{(7,6)}$
	-0.2364	0.8295	-0.0589	-1.0681	-0.4917	-0.0730
	$IW_{(7,7)}$	$IW_{(7,8)}$	$IW_{(7,9)}$	$IW_{(7,10)}$	$IW_{(7,11)}$	$IW_{(7,12)}$
	0.2512	-0.0982	-0.3236	0.1552	-0.6795	-0.1435
	$IW_{(7,13)}$	$IW_{(7,14)}$	$IW_{(7,15)}$	$IW_{(7,16)}$		
	0.2167	-0.3067	-0.5421	-0.1996		
	$IW_{(8,1)}$	$IW_{(8,2)}$	$IW_{(8,3)}$	$IW_{(8,4)}$	$IW_{(8,5)}$	$IW_{(8,6)}$
	2.8269	-0.9605	-0.2537	-0.2835	-0.6137	-0.8242
	$IW_{(8,7)}$	$IW_{(8,8)}$	$IW_{(8,9)}$	$IW_{(8,10)}$	$IW_{(8,11)}$	$IW_{(8,12)}$
	0.3366	0.3169	1.4007	0.7786	0.6402	0.5876
	$IW_{(8,13)}$	$IW_{(8,14)}$	$IW_{(8,15)}$	$IW_{(8,16)}$		
	-0.4604	0.3065	0.4004	0.2134		
	$IW_{(9,1)}$	$IW_{(9,2)}$	$IW_{(9,3)}$	$IW_{(9,4)}$	$IW_{(9,5)}$	$IW_{(9,6)}$
	-0.4153	-2.0146	1.3806	0.9893	0.4402	0.1586
	$IW_{(9,7)}$	$IW_{(9,8)}$	$IW_{(9,9)}$	$IW_{(9,10)}$	$IW_{(9,11)}$	$IW_{(9,12)}$
	-0.5664	-0.2493	-0.0002	-0.0436	0.6890	0.5742
	$IW_{(9,13)}$	$IW_{(9,14)}$	$IW_{(9,15)}$	$IW_{(9,16)}$		
	-0.3536	0.0832	0.0056	-0.0492		



Continuación de Tabla 24

$IW_{(s,k)}$	$IW_{(10,1)}$	$IW_{(10,2)}$	$IW_{(10,3)}$	$IW_{(10,4)}$	$IW_{(10,5)}$	$IW_{(10,6)}$
	0.7052	-0.4285	-0.3773	0.4237	0.9489	0.0437
	$IW_{(10,7)}$	$IW_{(10,8)}$	$IW_{(10,9)}$	$IW_{(10,10)}$	$IW_{(10,11)}$	$IW_{(10,12)}$
	-2.4848	-0.7175	-0.9532	0.3333	0.6976	1.4400
	$IW_{(10,13)}$	$IW_{(10,14)}$	$IW_{(10,15)}$	$IW_{(10,16)}$		
	0.0172	-0.4657	-1.4955	-0.0339		
$LW_{(s,j)}$	$LW_{(1,1)}$	$LW_{(2,1)}$	$LW_{(3,1)}$	$LW_{(4,1)}$	$LW_{(5,1)}$	$LW_{(6,1)}$
	-1.9893	3.4771	-4.1555	-2.1108	-3.4831	4.1450
	$LW_{(7,1)}$	$LW_{(8,1)}$	$LW_{(9,1)}$	$LW_{(10,1)}$		
	2.6995	-2.0363	4.9240	-1.3312		
$b_{(1)}$	-0.3926					
	-0.3502					
	0.8668					
	0.8632					
	-0.5256					
	0.5662					
	-0.9961					
	1.7596					
0.6981						
-0.1697						
$b_{(2)}$	-0.5359					

Realizada por el autor

Tabla 25. Matriz de pesos y bias para el modelo Bio_V_LM_10

$IW_{(s,k)}$	$IW_{(1,1)}$	$IW_{(1,2)}$	$IW_{(1,3)}$	$IW_{(1,4)}$	$IW_{(1,5)}$	$IW_{(1,6)}$
	0.9958	-1.1778	0.1099	0.4615	-0.7760	1.0871
	$IW_{(1,7)}$	$IW_{(1,8)}$	$IW_{(1,9)}$	$IW_{(1,10)}$	$IW_{(1,11)}$	$IW_{(1,12)}$
	1.4573	1.5583	1.8171	1.7272	0.9472	-1.8243
	$IW_{(1,13)}$	$IW_{(1,14)}$	$IW_{(1,15)}$	$IW_{(1,16)}$		
	-0.9079	1.8470	-1.6356	-3.7280		
	$IW_{(2,1)}$	$IW_{(2,2)}$	$IW_{(2,3)}$	$IW_{(2,4)}$	$IW_{(2,5)}$	$IW_{(2,6)}$
	-1.0230	1.3105	1.6215	0.5379	0.6336	0.5555
	$IW_{(2,7)}$	$IW_{(2,8)}$	$IW_{(2,9)}$	$IW_{(2,10)}$	$IW_{(2,11)}$	$IW_{(2,12)}$
	0.5210	1.0577	-1.3347	1.3436	-0.9340	2.8770
	$IW_{(2,13)}$	$IW_{(2,14)}$	$IW_{(2,15)}$	$IW_{(2,16)}$		
	2.5449	0.4583	1.7376	-3.0776		
	$IW_{(3,1)}$	$IW_{(3,2)}$	$IW_{(3,3)}$	$IW_{(3,4)}$	$IW_{(3,5)}$	$IW_{(3,6)}$
	0.5663	0.5552	-1.1016	-0.4276	-4.4424	-0.7337
	$IW_{(3,7)}$	$IW_{(3,8)}$	$IW_{(3,9)}$	$IW_{(3,10)}$	$IW_{(3,11)}$	$IW_{(3,12)}$
	-0.5660	1.9925	2.7979	-1.2557	3.1226	-0.1119
	$IW_{(3,13)}$	$IW_{(3,14)}$	$IW_{(3,15)}$	$IW_{(3,16)}$		
	-0.1865	0.7574	-0.8911	1.7745		
	$IW_{(4,1)}$	$IW_{(4,2)}$	$IW_{(4,3)}$	$IW_{(4,4)}$	$IW_{(4,5)}$	$IW_{(4,6)}$
	0.9498	-2.0484	0.0410	-0.7618	0.3993	-0.2715
	$IW_{(4,7)}$	$IW_{(4,8)}$	$IW_{(4,9)}$	$IW_{(4,10)}$	$IW_{(4,11)}$	$IW_{(4,12)}$
	2.7193	2.9356	0.9956	-1.1666	3.6258	2.3240
	$IW_{(4,13)}$	$IW_{(4,14)}$	$IW_{(4,15)}$	$IW_{(4,16)}$		
	2.4957	0.7686	0.1369	-5.2079		
	$IW_{(5,1)}$	$IW_{(5,2)}$	$IW_{(5,3)}$	$IW_{(5,4)}$	$IW_{(5,5)}$	$IW_{(5,6)}$
	0.1012	1.5124	-1.9506	-0.5616	0.9165	-0.3795
	$IW_{(5,7)}$	$IW_{(5,8)}$	$IW_{(5,9)}$	$IW_{(5,10)}$	$IW_{(5,11)}$	$IW_{(5,12)}$
	0.5247	2.8443	4.6092	0.2571	3.7135	-0.9147
	$IW_{(5,13)}$	$IW_{(5,14)}$	$IW_{(5,15)}$	$IW_{(5,16)}$		
	-4.0026	-1.9896	2.4271	0.6130		
	$IW_{(6,1)}$	$IW_{(6,2)}$	$IW_{(6,3)}$	$IW_{(6,4)}$	$IW_{(6,5)}$	$IW_{(6,6)}$
	-1.3783	-1.2787	-1.5308	-0.4684	-0.6894	0.4518
	$IW_{(6,7)}$	$IW_{(6,8)}$	$IW_{(6,9)}$	$IW_{(6,10)}$	$IW_{(6,11)}$	$IW_{(6,12)}$
	-0.9451	-1.3808	-1.8216	-1.1116	-1.1393	-1.1644
	$IW_{(6,13)}$	$IW_{(6,14)}$	$IW_{(6,15)}$	$IW_{(6,16)}$		
	-0.2801	-0.8749	3.0737	-1.8449		
	$IW_{(7,1)}$	$IW_{(7,2)}$	$IW_{(7,3)}$	$IW_{(7,4)}$	$IW_{(7,5)}$	$IW_{(7,6)}$
	-0.4041	-0.3407	-0.3216	-0.3879	-0.0893	-0.4627
	$IW_{(7,7)}$	$IW_{(7,8)}$	$IW_{(7,9)}$	$IW_{(7,10)}$	$IW_{(7,11)}$	$IW_{(7,12)}$
	0.0085	-0.3975	-0.4904	-0.3775	-0.0919	0.0811
	$IW_{(7,13)}$	$IW_{(7,14)}$	$IW_{(7,15)}$	$IW_{(7,16)}$		
	0.0946	-0.2987	-0.0103	-1.1524		
	$IW_{(8,1)}$	$IW_{(8,2)}$	$IW_{(8,3)}$	$IW_{(8,4)}$	$IW_{(8,5)}$	$IW_{(8,6)}$
	-0.9178	-2.1579	-1.5263	1.0011	-1.0828	0.4996
	$IW_{(8,7)}$	$IW_{(8,8)}$	$IW_{(8,9)}$	$IW_{(8,10)}$	$IW_{(8,11)}$	$IW_{(8,12)}$
	-0.3316	-1.2867	2.7754	0.1823	2.6290	-1.6001
	$IW_{(8,13)}$	$IW_{(8,14)}$	$IW_{(8,15)}$	$IW_{(8,16)}$		
	0.8811	-0.3664	-2.6116	2.0439		
	$IW_{(9,1)}$	$IW_{(9,2)}$	$IW_{(9,3)}$	$IW_{(9,4)}$	$IW_{(9,5)}$	$IW_{(9,6)}$
	-0.4614	-1.2377	0.9836	1.2380	0.3222	-1.5181
	$IW_{(9,7)}$	$IW_{(9,8)}$	$IW_{(9,9)}$	$IW_{(9,10)}$	$IW_{(9,11)}$	$IW_{(9,12)}$
	0.3084	3.1513	1.5417	1.2104	1.9701	-1.2673
	$IW_{(9,13)}$	$IW_{(9,14)}$	$IW_{(9,15)}$	$IW_{(9,16)}$		
	-3.4828	0.5812	-2.0091	3.1510		



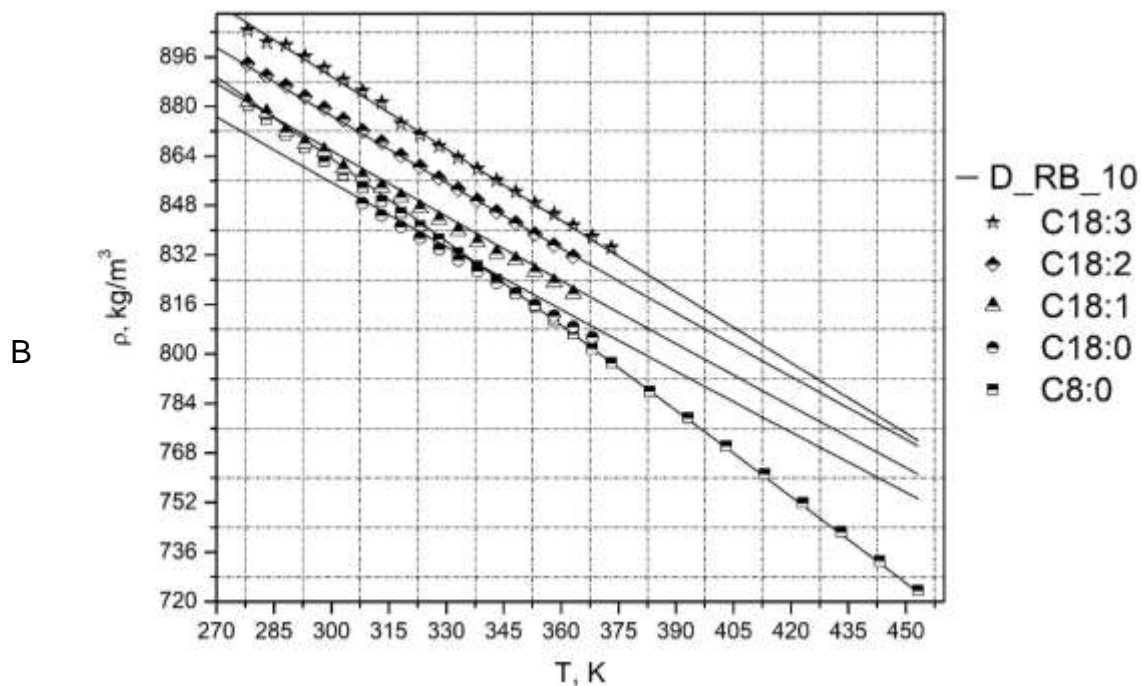
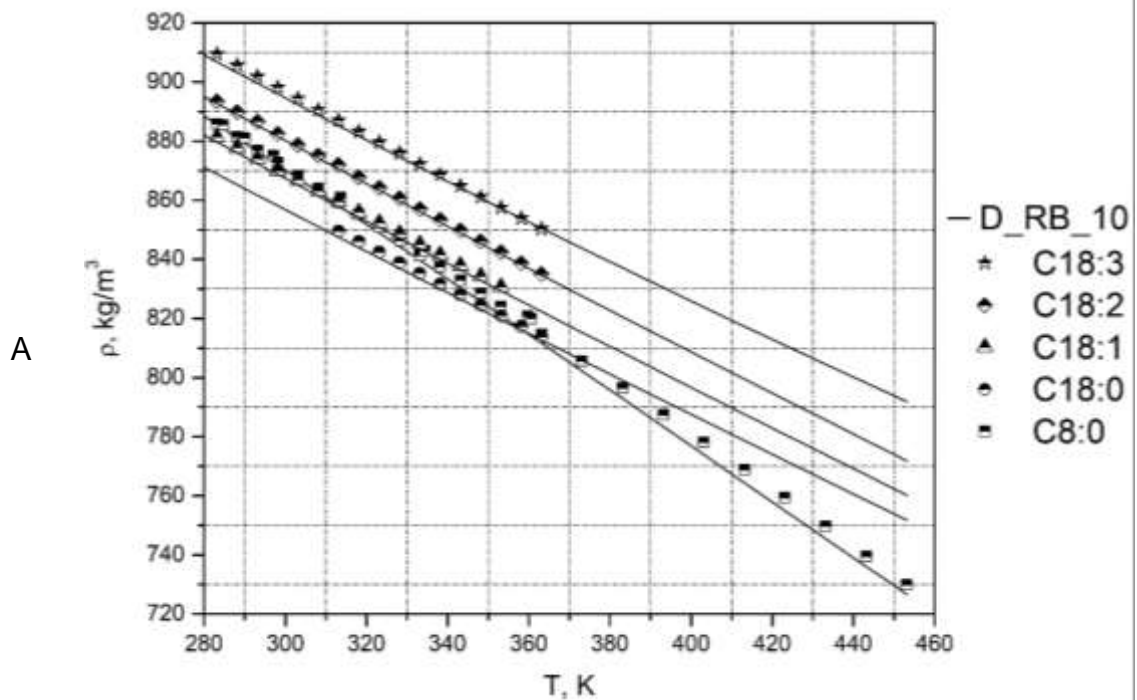
Continuación de Tabla 25

$IW_{(s,k)}$	$IW_{(10,1)}$	$IW_{(10,2)}$	$IW_{(10,3)}$	$IW_{(10,4)}$	$IW_{(10,5)}$	$IW_{(10,6)}$
	-0.0877	-0.6699	-0.6390	-0.2772	-1.3723	-0.7184
	$IW_{(10,7)}$	$IW_{(10,8)}$	$IW_{(10,9)}$	$IW_{(10,10)}$	$IW_{(10,11)}$	$IW_{(10,12)}$
	0.0318	-0.1994	-0.4436	0.3697	-0.4440	-0.6456
$IW_{(10,13)}$	$IW_{(10,14)}$	$IW_{(10,15)}$	$IW_{(10,16)}$			
	0.2359	-0.3616	-0.0445	0.2065		
$LW_{(s,j)}$	$LW_{(1,1)}$	$LW_{(2,1)}$	$LW_{(3,1)}$	$LW_{(4,1)}$	$LW_{(5,1)}$	$LW_{(6,1)}$
	0.2645	1.5444	0.0140	0.0105	0.0189	0.1600
	$LW_{(7,1)}$	$LW_{(8,1)}$	$LW_{(9,1)}$	$LW_{(10,1)}$		
	1.6894	0.1826	0.0688	1.5400		
$b_{(1)}$	-2.1347					
	1.1003					
	-1.5119					
	4.8106					
	-1.5582					
	-8.5439					
	-4.0749					
	-0.8099					
1.4886						
1.7511						
$b_{(2)}$	0.9073					

Realizada por el autor

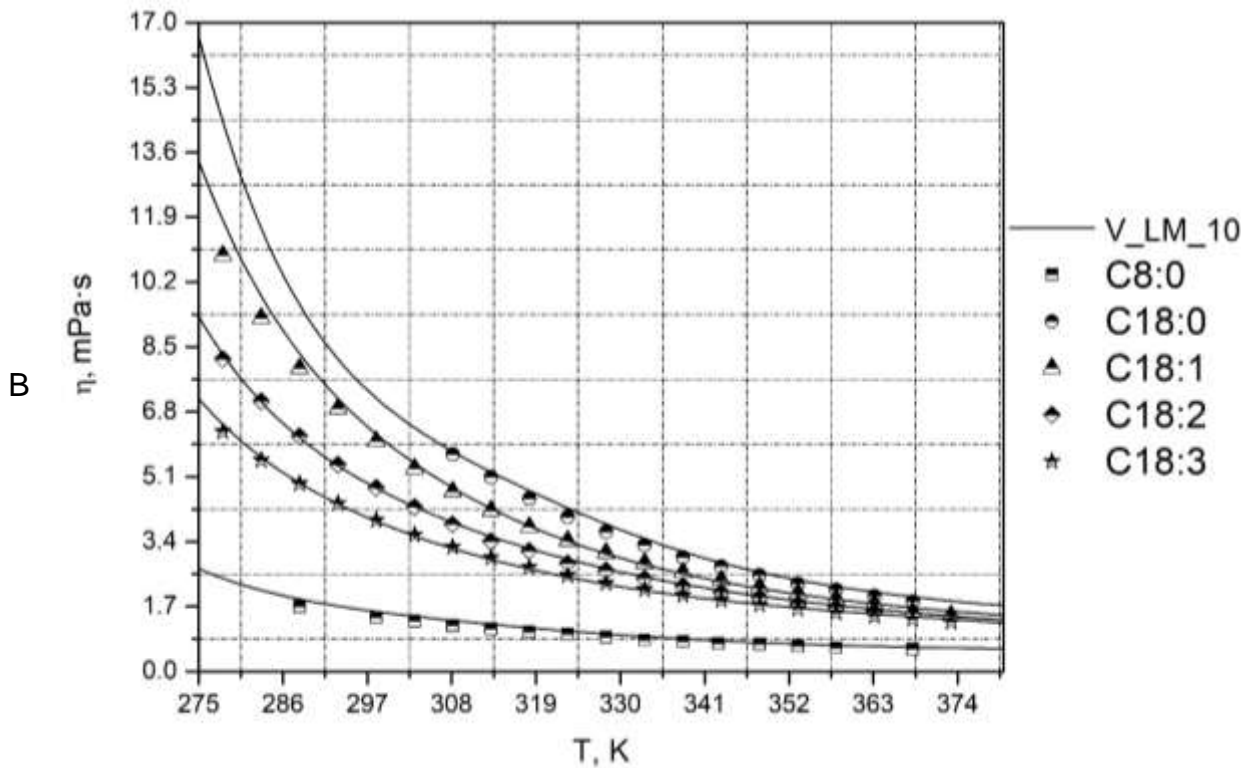
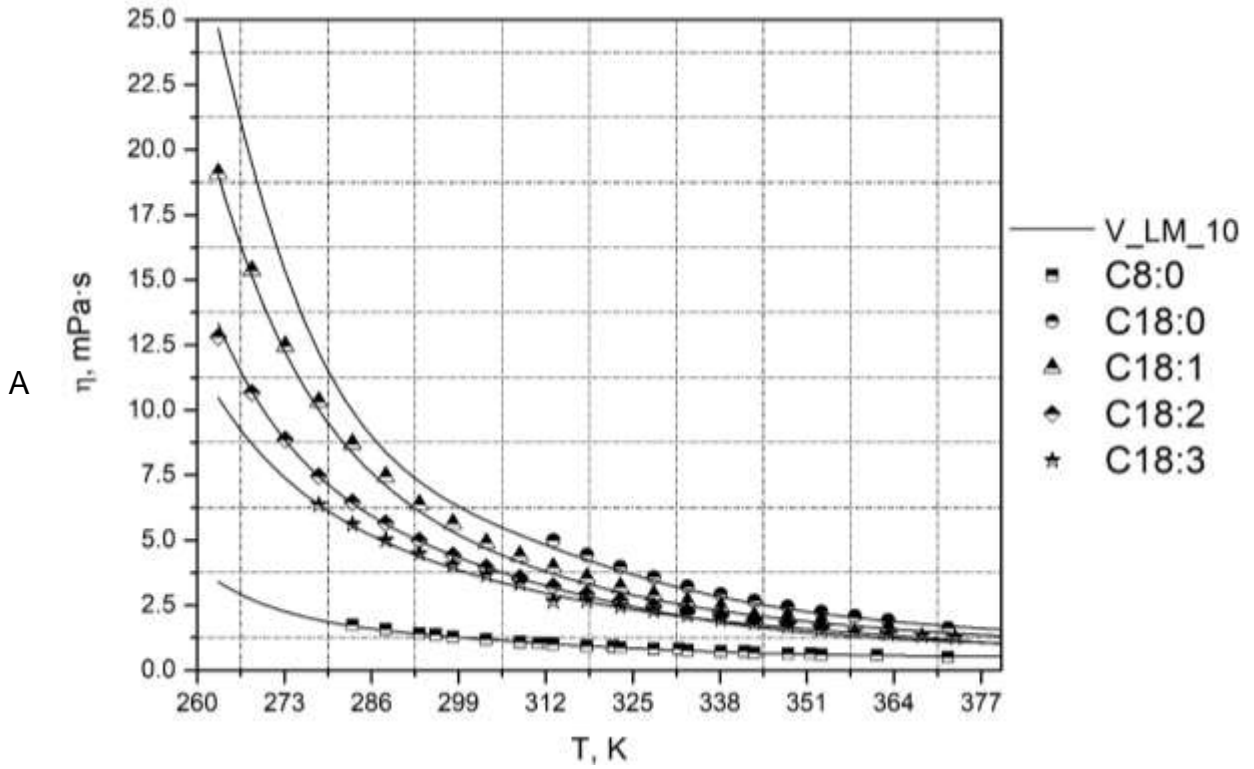
Por otro lado, en las Ilustraciones 13 y 14 se observa cómo los modelos desarrollados para predecir la densidad y viscosidad de los compuestos puros del biodiésel capturan el comportamiento de la densidad y viscosidad como función de la temperatura.

Ilustración 13. Efecto de la temperatura sobre la densidad de A) Ésteres metílicos y B) Ésteres etílicos



Realizada por el autor

Ilustración 14. Efecto de la temperatura sobre la viscosidad dinámica de A) Ésteres metílicos y B) Ésteres etílicos

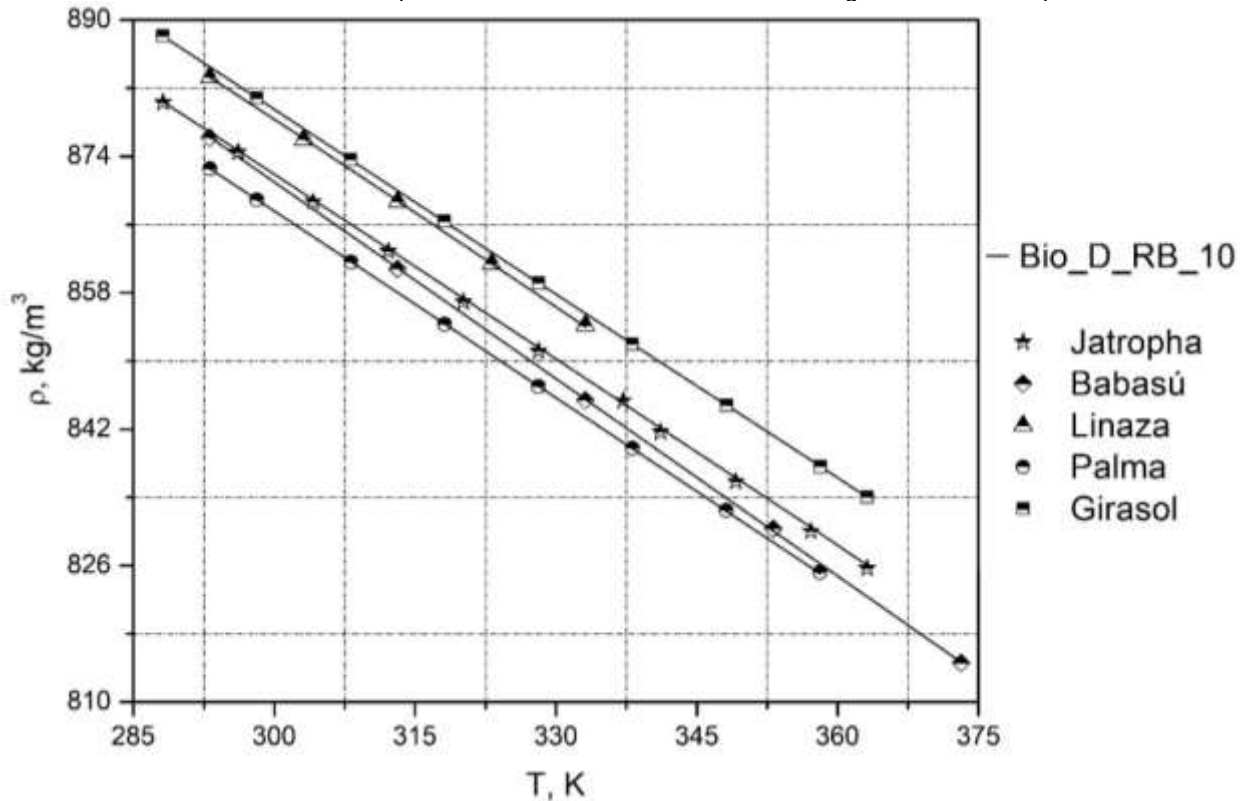


Realizada por el autor

En las Ilustraciones 13 y 14, se representan los datos experimentales con puntos y los datos arrojados al evaluar la función correspondiente (D_{RB_10} y V_{LM_10}) con líneas, en ambas ilustraciones se observa de forma gráfica que los modelos desarrollados son capaces de reproducir el comportamiento de las propiedades bajo estudio en el rango de temperatura en el que se encuentran los datos experimentales.

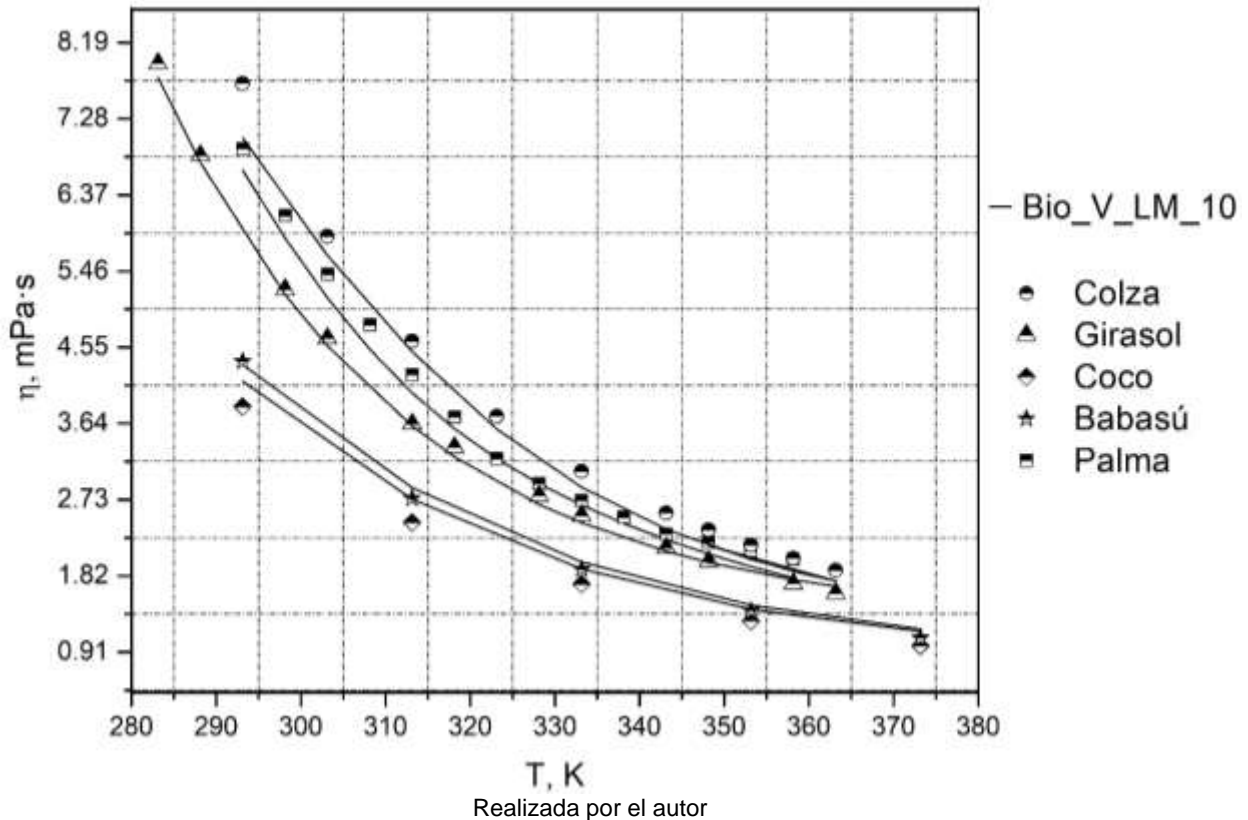
Del mismo modo, en las Ilustraciones 15 y 16 se observa gráficamente que los modelos desarrollados a partir de RNA para predecir la densidad y viscosidad dinámica para biodiésel puro y mezclas de biodiésel ($Bio_D_{RB_10}$ y $Bio_V_{LM_10}$) son capaces de reproducir el comportamiento de dichas propiedades en el rango de temperatura en el que se encuentran los datos experimentales.

Ilustración 15. Efecto de la temperatura sobre la densidad de biodiesel algunos biodiésel puros.



Realizada por el autor

Ilustración 16. Efecto de la temperatura sobre la viscosidad dinámica de algunos biodiésel puros.



Aunque no fue el propósito de este trabajo, también debe señalarse que los modelos realizados reproducen las tendencias ya conocidas de las propiedades bajo estudio, es decir que, la densidad disminuye con el aumento de la temperatura de manera lineal y la viscosidad dinámica disminuye al aumentar la temperatura de forma no lineal.

Así mismo, es relevante mencionar que al graficar el comportamiento de los modelos de predicción de viscosidad dinámica, se observó que las RNA diseñadas a partir del algoritmo de entrenamiento RB son capaces de reproducir el comportamiento de la propiedad en el rango de temperatura en el que se encuentran los datos experimentales, en ambos casos (ésteres alquílicos y biodiésel puro y mezclas de biodiésel), sin embargo, a temperaturas mayores se presentó una caída súbita de la propiedad, llegando incluso a tomar valores negativos, lo cual no representa el comportamiento real de la propiedad y carece de significado físico, por lo que se decidió seleccionar los modelos representados por las funciones V_LM_10, Ilustración 14 y Bio_V_LM_10, Ilustración 16 para predecir la viscosidad

dinámica de ésteres alquílicos y biodiésel puro y mezclas respectivamente, estos modelos son capaces de reproducir el comportamiento de la viscosidad dinámica en un rango de temperatura más amplio que el de los datos experimentales.

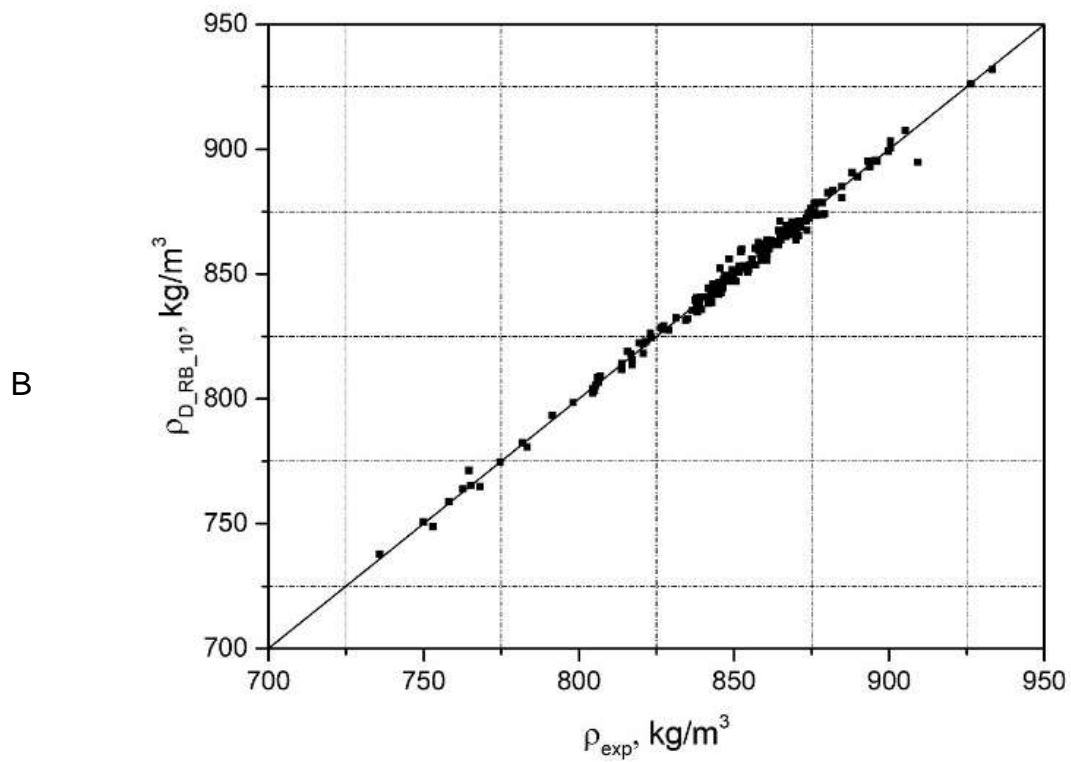
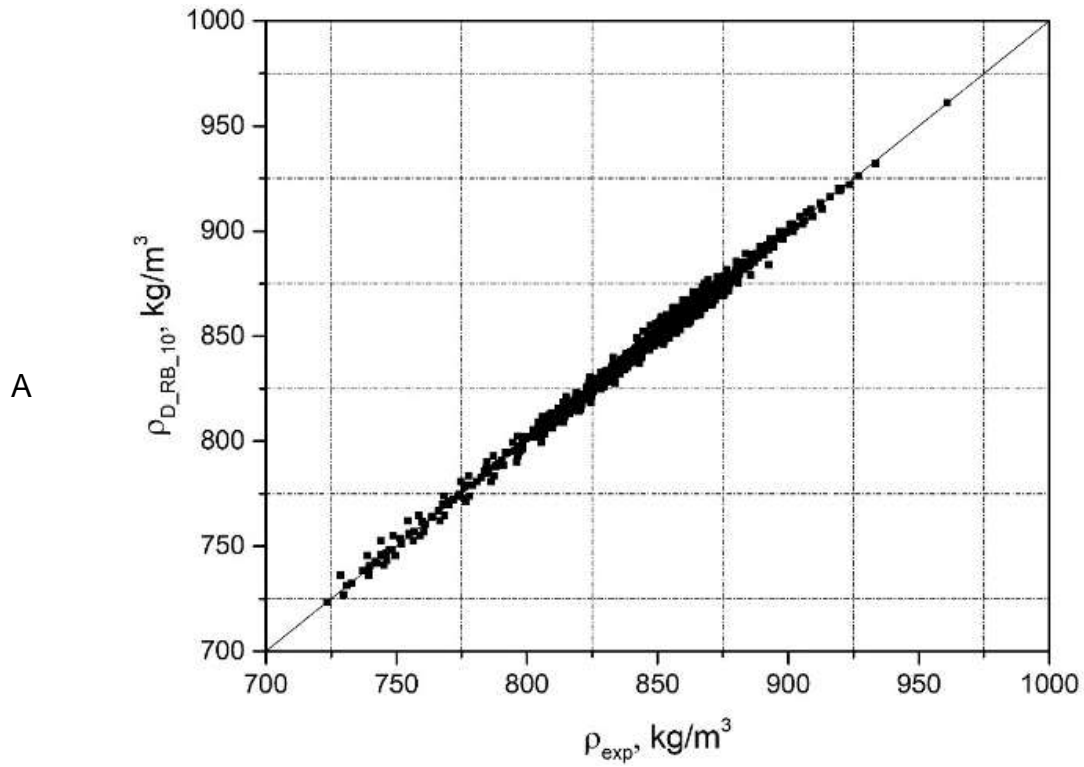
Por otra parte, los gráficos de paridad (Parity Plots, por su traducción al inglés) representan otra herramienta para comparar los datos experimentales con los calculados por los modelos matemáticos desarrollados en este trabajo.

Dichos gráficos son fácilmente comprensibles ya que cada punto tiene coordenadas (x, y) , donde x es el valor arrojado por el modelo e y es el valor experimental correspondiente. Algunas veces suele agregarse una línea de la ecuación $y = x$ como referencia, la cual forma un ángulo de 45° , entonces mientras más alejados se encuentren los puntos de dicha línea, la capacidad de predicción del modelo es más pobre, en el caso contrario, donde la mayoría de puntos se encuentran sobre la línea mencionada la capacidad de predicción del modelo es mejor.

En seguida se muestran los gráficos de paridad afines con cada uno de los modelos de predicción de propiedades desarrollados, en principio se encuentran los gráficos referentes a los componentes puros del biodiésel D_RB_10, en la Ilustración 17 y V_LM_10 en la Ilustración 18, en seguida están los gráficos de paridad que corresponden a los modelos de predicción de propiedades del biodiésel puro y mezclas del mismo, Bio_D_RB_10 en la Ilustración 19 y Bio_V_LM_10 en la Ilustración 20.

En el caso de los gráficos de paridad asociados a la predicción de densidad se observa poca dispersión, lo cual está directamente relacionado con la capacidad de predicción de los modelos. También salta a la vista que, el comportamiento de la densidad en función de la temperatura es relativamente más fácil de modelar que la variación de la viscosidad dinámica frente a la temperatura, ya que se puede notar una mayor dispersión en los gráficos de paridad pertenecientes a los modelos de viscosidad dinámica.

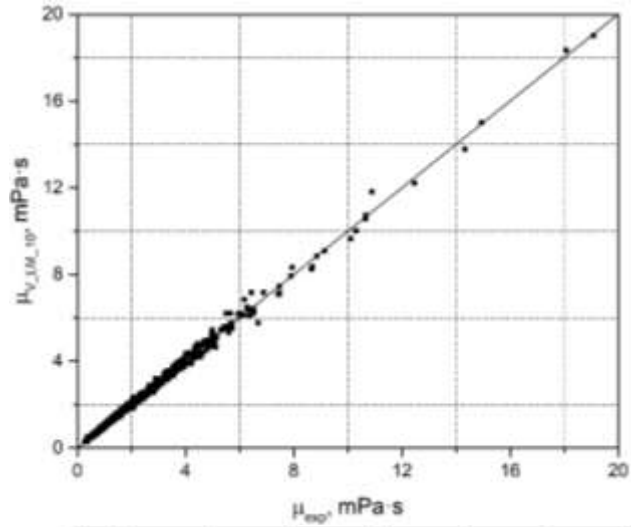
Ilustración 17. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función D_RB_10 . A) Entrenamiento y B) Prueba.



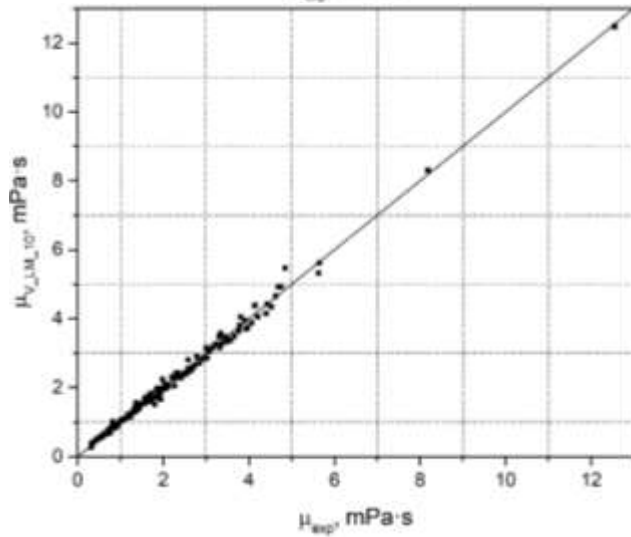
Realizada por el autor

Ilustración 18. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función V_{LM_10} . A) Entrenamiento B) Validación y C) Prueba.

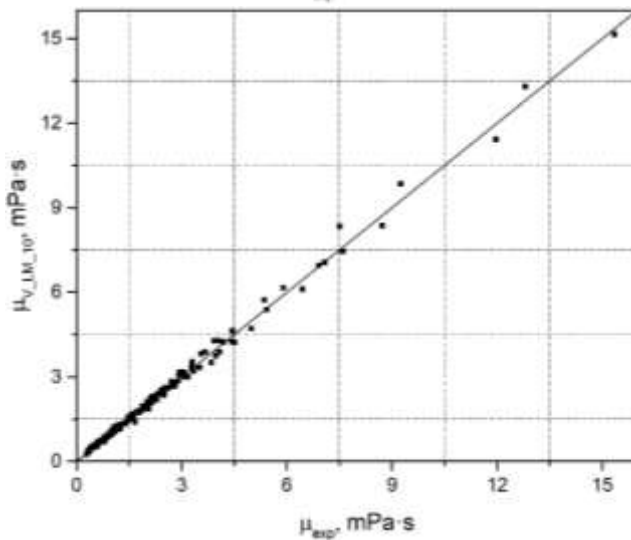
A



B

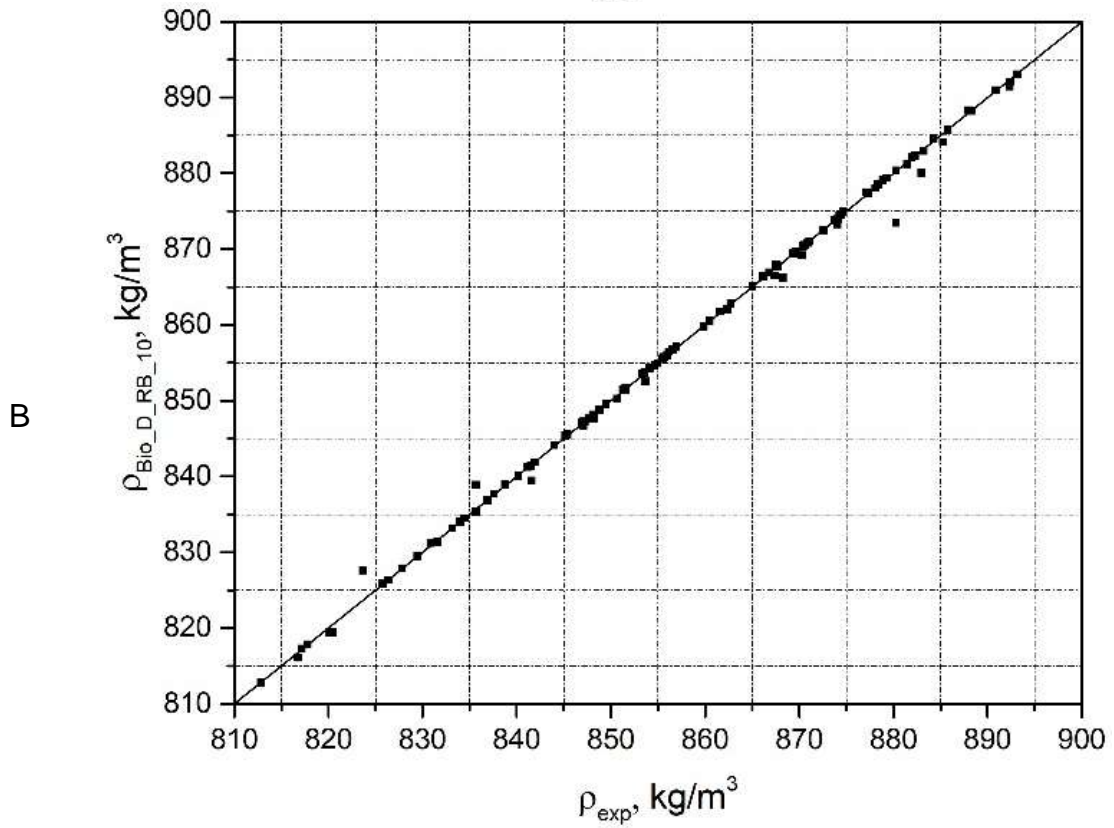
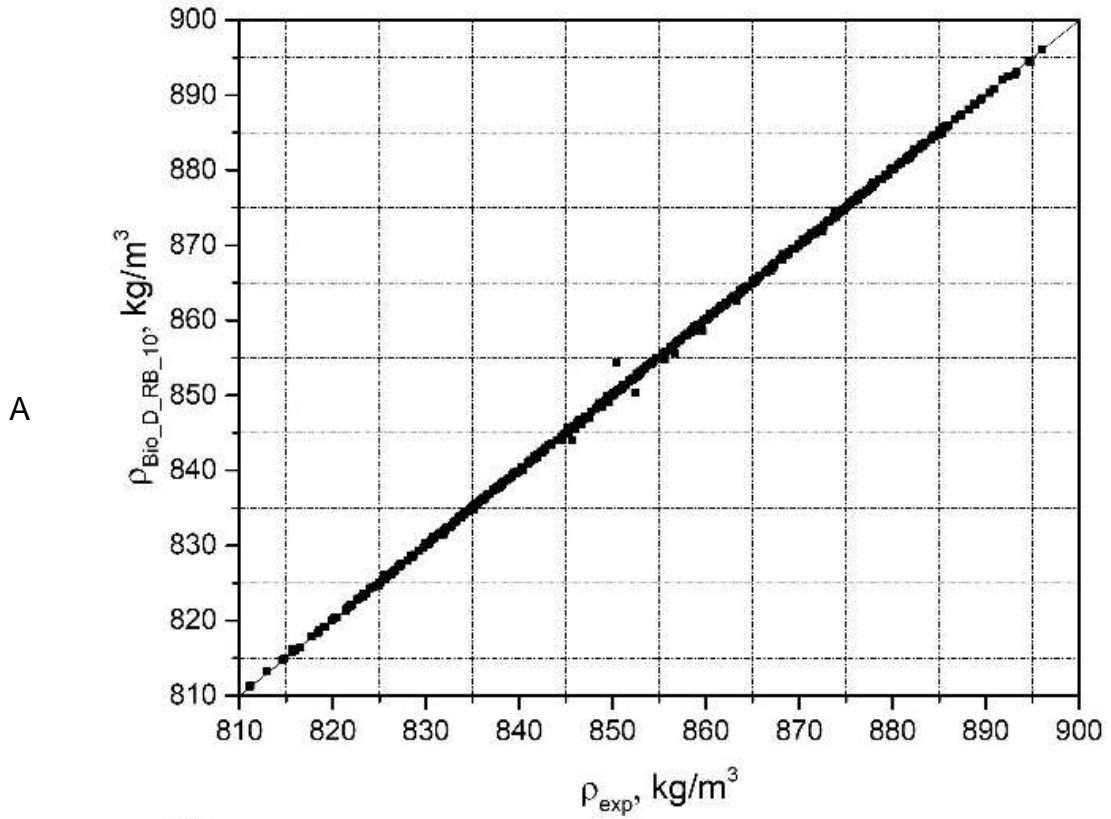


C



Realizada por el autor

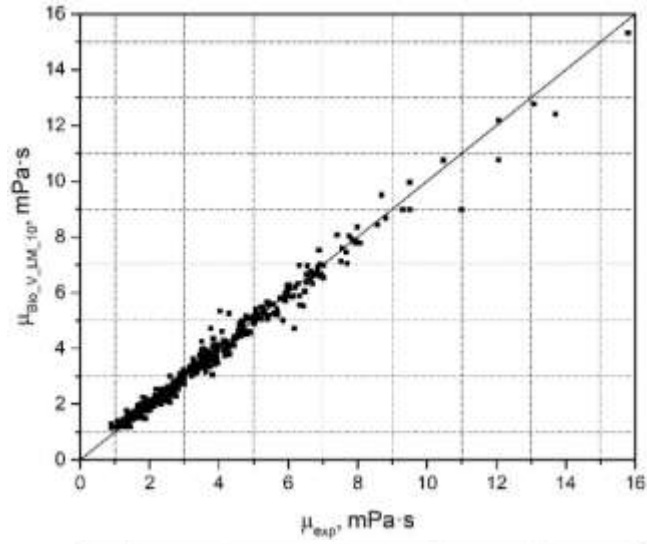
Ilustración 19. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función Bio_D_RB_10. A) Entrenamiento y B) Prueba.



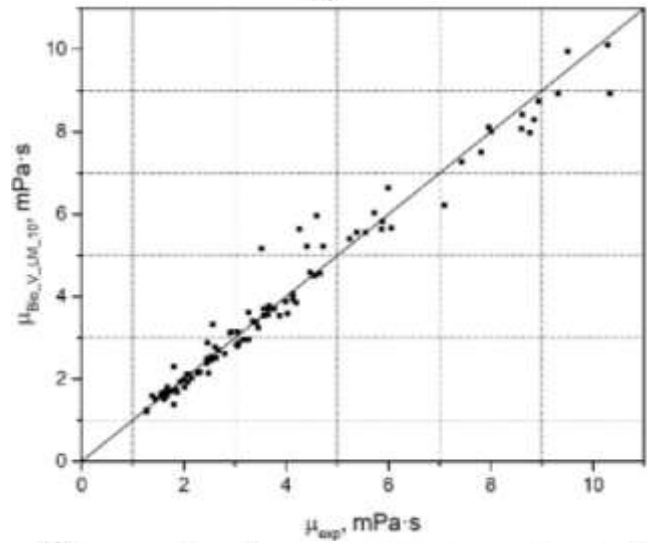
Realizada por el autor

Ilustración 20. Gráficos de paridad del modelo asociado con la función Bio_V_LM_10. A) Entrenamiento B) Validación y C) Prueba.

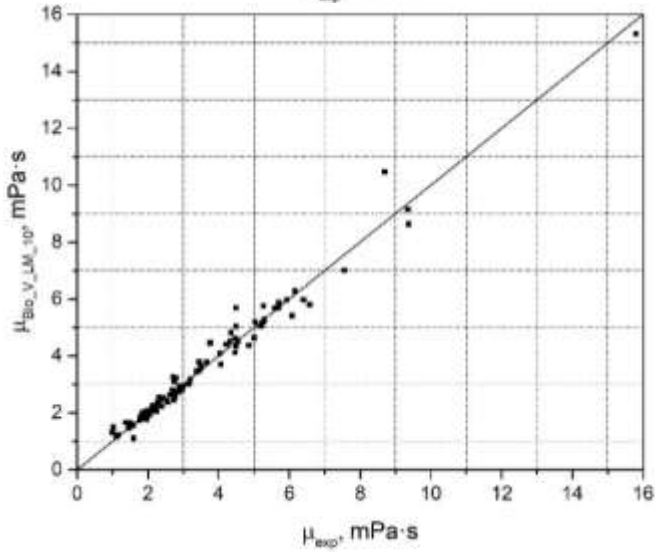
A



B



C



Realizada por el autor

Los hallazgos encontrados en esta etapa se detallan a continuación:

🌱 En todos los casos las RNA diseñadas con 10 neuronas en la capa oculta y entrenadas con el algoritmo de aprendizaje RB son las que cuentan con mayor capacidad de ajuste en términos estadísticos.

🌱 Al modelar las propiedades bajo estudio mediante RNA, se observa que el algoritmo de aprendizaje RB es superior al LM, pues comúnmente se obtienen mejores aproximaciones usando el algoritmo de entrenamiento RB. Aunque en otros casos también se puede dar la situación contraria, la cual ocurre con menor frecuencia.

🌱 El número de neuronas requerido para reproducir satisfactoriamente el comportamiento de la densidad de una serie homologa como la de los ésteres alquílicos es menor que el número de neuronas requerido para predecir la densidad del biodiésel y mezclas de biodiésel, dado que se trata de un problema más complejo. Un comportamiento similar ocurre en el caso de la viscosidad dinámica.

🌱 Dado que la densidad tiene un comportamiento lineal con respecto a la temperatura su modelamiento presenta menos dificultades a comparación del modelamiento de la viscosidad, la cual presenta un comportamiento no lineal con respecto a la temperatura.

5.8 VALIDACIÓN Y USO DE LAS REDES.

Recordando que las métricas utilizadas para seleccionar los modelos que presentaran el mejor rendimiento, R , AAD y σ sólo reflejan la capacidad de ajuste entre los entre los datos predichos y los experimentales, en este trabajo se utilizó la validación interna para evaluar la capacidad de predicción de los cuatro modelos propuestos y la validación externa para determinar tanto la generalización y la verdadera capacidad de predicción de los modelos propuestos.

En la Tabla 26 se muestran los cálculos correspondientes a R , AAD y σ , para cada subconjunto de datos para los modelos seleccionados. Dado que $R > 0.9$ en todos los casos, la capacidad de predicción se considera excelente.

Tabla 26. R, AAD y σ para cada subconjunto de cada modelo desarrollado.

Función	Subconjunto de entrenamiento			Subconjunto de validación			Subconjunto de prueba		
	R	AAD	σ	R	AAD	σ	R	AAD	σ
D_RB_10	0.9965	0.25	2.65	-	-	-	0.9963	0.24	2.73
V_LM_10	0.9978	4.15	0.14	0.9970	4.42	0.12	0.9976	5.16	0.16
Bio_D_RB_10	0.9999	0.01	0.12	-	-	-	0.9989	0.05	0.99
Bio_V_LM_10	0.9916	5.6	0.28	0.9851	6.75	0.40	0.9885	6.39	0.34

Realizada por el autor

Adicional a la validación de los modelos propuestos, éstos fueron comparados con otros encontrados en la literatura. Rocabrano V. [10] y O.Giwa S. [11], realizaron modelos de predicción de propiedades del biodiésel en función de la temperatura basados en RNA, similares a los desarrollados en este trabajo. Por otro lado, Jekayinfa S. [12] y Ramírez V. [8] desarrollaron modelos empíricos para la estimación de propiedades de algunos tipos de biodiésel y sus mezclas. En la Tabla 27 se muestra un análisis comparativo entre los modelos desarrollados por los autores antes mencionados y los realizados en este trabajo, cabe mencionar que dicha comparación se hizo con base en la capacidad de ajuste de los modelos ya que los autores no reportan otras métricas.

Tabla 27. Comparación entre diversos modelos de predicción de propiedades del biodiésel.

Modelos de predicción de densidad del biodiésel		
Autor	Descripción del modelo	Capacidad de ajuste del modelo
Rocabrano V. [10]	Arquitectura tipo 16:1:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento LM, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos y temperatura.	R=0.99208
O.Giwa S. [11]	Arquitectura tipo 6:5:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento LM, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos (C16:0, C18:0, C18:1, C18:2 y C18:3) y temperatura.	R ² =0.994
Jekayinfa S. [12]	El autor desarrolló modelos de predicción de densidad en un rango de temperatura de 283.15 a 313.15 K para 7 diferentes tipos de biodiésel puro (girasol, maíz, algodón, aceite de cocina usado, canola, palma, oliva). Las variables de entrada son la composición de ésteres metílicos (C12:0, C14:0, C16:0, C16:1, C18:0, C18:1, C18:2 y C18:3).	0.0115>R ² ≤0.985
Ramírez V. [8]	Elaboró modelos de predicción de densidad para mezclas de biodiésel (colza+coco, soya+coco y algodón+babasú) en un rango de temperatura de 293.15 a 373.15 K, las variables de entrada de los modelos son la temperatura y el porcentaje en volumen del primer componente de la mezcla.	0.9995>R≤0.9998
Este trabajo	La arquitectura del modelo es 16:10:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento RB, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos y temperatura, es aplicable a biodiésel puro y mezclas de biodiésel.	R=0.9997


Continuación de Tabla 27

Modelos de predicción de viscosidad del biodiésel		
Autor	Descripción del modelo	Capacidad de ajuste del modelo
Rocabruno V. [10]	Arquitectura tipo 16:1:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento LM, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos y temperatura. El modelo predice viscosidad dinámica.	$R=0.98255$
O.Giwa S. [11]	Arquitectura tipo 5:7:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento LM, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos (C16:0, C18:0, C18:1, C18:2 y C18:3) y sólo es capaz de predecir la viscosidad cinemática a 313.15 K.	$R^2=0.958$
Jekayinfa S. [12]	El autor desarrolló modelos de predicción de viscosidad cinemática en un rango de temperatura de 283.15 a 313.15 K para 7 diferentes tipos de biodiésel puro (girasol, maíz, algodón, aceite de cocina usado, canola, palma, oliva). Las variables de entrada son la composición de ésteres metílicos (C12:0, C14:0, C16:0, C16:1, C18:0, C18:1, C18:2 y C18:3).	$0.097 > R^2 \leq 0.971$
Ramírez V. [8]	Elaboró modelos de predicción de viscosidad cinemática para mezclas de biodiésel (colza+coco, soya+coco y algodón+babású) en un rango de temperatura de 293.15 a 373.15 K, las variables de entrada de los modelos son la temperatura y el porcentaje en volumen del primer componente de la mezcla.	$0.9924 > R \leq 0.9988$
Este trabajo	La arquitectura del modelo es 16:10:1, se utilizó el algoritmo de entrenamiento LM, las variables de entrada constan de la composición de ésteres metílicos y temperatura, es aplicable a biodiésel puro y mezclas de biodiésel.	$R=0.99$

Realizada por el autor

Como se observa, los modelos realizados en esta tesis a diferencia de los de otros autores destacan por ser aplicables a diversos biodiésel puros, así como mezclas de los mismos en un rango amplio de temperatura, otra característica sobresaliente de los modelos diseñados es que se consideraron 15 ésteres etílicos para representar la composición del biocombustible. La Tabla 27 también muestra que la capacidad de ajuste de los modelos desarrollados en esta tesis es mejor que la de los otros.

Pese a que los modelos diseñados en este trabajo fueron validados de forma estadística, se debe tomar en cuenta las siguientes consideraciones al momento de emplearlos:

 Es posible evaluar los modelos de predicción de densidad en un rango de temperatura más amplio que el de los datos experimentales, dado el



comportamiento lineal de la propiedad, sin embargo, la extrapolación debe realizarse con cautela.

🌱 Al hacer uso de los modelos de predicción de viscosidad dinámica no se recomienda realizar cálculos en un rango de temperatura más amplio que el de los datos experimentales⁶.

🌱 Siempre que se utilicen los modelos de predicción de propiedades de biodiésel puro y mezclas de biodiésel se debe tomar en cuenta la distribución de los datos experimentales a partir de los cuales se diseñaron, ya que no se recomienda estimar propiedades de algún tipo de biodiésel no considerado en los datos experimentales.

⁶ La información respecto al rango de temperaturas de los datos experimentales se encuentra en los apéndices de este texto.

6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Se desarrollaron nuevos modelos matemáticos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel, utilizando RNA.

También se elaboraron modelos matemáticos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de ésteres alquílicos, componentes puros del biodiésel, a partir de RNA.

Los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de biodiésel puro y mezclas de biodiésel se elaboraron a partir 699 y 641 datos experimentales respectivamente. Mientras que los modelos de predicción de densidad y viscosidad dinámica de los componentes puros del biodiésel se elaboraron a partir 699 y 641 datos experimentales.

Cada modelo fue diseñado con base en una red neuronal de avance de dos capas, una oculta y una de salida, donde las funciones sigmoide e identidad fungieron como funciones transferencia.

Los modelos de predicción de densidad se diseñaron a partir del algoritmo de entrenamiento RB con la utilización de 10 neuronas en la capa oculta. La arquitectura de las redes neuronales fue 6:10:1 y 16:10:1 para los modelos de predicción de densidad de ésteres alquílicos, biodiésel puro y mezclas de biodiésel respectivamente.

Los modelos de predicción de viscosidad dinámica se diseñaron a partir del algoritmo de entrenamiento LM, también se utilizaron 10 neuronas. La arquitectura de las redes neuronales fue 6:10:1 y 16:10:1 para los modelos de predicción de viscosidad dinámica de ésteres alquílicos, biodiésel puro y mezclas de biodiésel respectivamente.

Existe buena concordancia entre los resultados experimentales y calculados, debido a que el coeficiente de correlación global y el de cada subconjunto de datos fue mayor a 0.99 en la mayoría de los casos. Además, dado que R , AAD y σ , de cada

subconjunto de datos concuerda con el global, la capacidad de predicción se considera excelente.

Ya que la densidad presenta un comportamiento lineal frente a la temperatura y la viscosidad un comportamiento no lineal ante la temperatura, al utilizar el mismo número de neuronas en la capa oculta, los modelos de predicción de densidad presentan mejores ajustes que los modelos de predicción de viscosidad

Se recomienda utilizar modelos de predicción de propiedades como los realizados en este estudio a fin de reducir el costo y el tiempo de análisis experimentales empleados en la determinación de las propiedades bajo estudio, densidad y viscosidad dinámica de mezclas de biodiésel, biodiésel y sus componentes puros. Sin embargo, en caso de que se cuente con los recursos, siempre será preferible realizar la determinación experimental de dichas propiedades.

Los modelos de predicción de propiedades desarrollados podrían ser implementados en software de diseño y análisis de procesos industriales, o algunos otros donde se requiera conocer la densidad o viscosidad dinámica de mezclas de biodiésel, biodiésel puro o de sus componentes a diferentes temperaturas.

En la literatura se pueden encontrar diversos modelos de predicción de propiedades del biodiésel, sin embargo, los desarrollados en este estudio destacan por ser capaces de predecir propiedades tanto de biodiésel puros como de mezclas en un amplio rango de temperatura, utilizando una sola ecuación. Otro punto a destacar es que, en el diseño de los modelos, se consideraron 15 ésteres metílicos para representar con mayor exactitud la composición de cualquier biodiésel puro o mezcla de biodiésoles, aunque esto implica conocer a detalle la composición del sistema bajo estudio.

7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] M. M. Parascanu, F. Sandoval-salas, G. Soreanu, J. L. Valverde, and L. Sanchez-silva, “Valorization of Mexican biomasses through pyrolysis , combustion and gasi fi cation processes,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 71, no. November 2016, pp. 509–522, 2017.
- [2] B. Sajjadi, A. Aziz, A. Raman, and H. Arandiyana, “A comprehensive review on properties of edible and non-edible vegetable oil-based biodiesel : Composition , speci fi cations and prediction models,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 63, pp. 62–92, 2016.
- [3] G. R. Ivaniš, I. R. Radovic, V. B. Veljkovic, and M. L. Kijevcanin, “Biodiesel density and derived thermodynamic properties at high pressures and moderate temperatures,” *Fuel*, vol. 165, pp. 244–251, 2016.
- [4] A. Roosta, “A Predictive Correlation for Dynamic Viscosity of Fatty Acid Methyl Esters and Biodiesel,” no. June, pp. 741–750, 2019.
- [5] A. Demirbas, *Biodiesel: A Realistic Fuel Alternative for Diesel Engines*. Turkey, 2008.
- [6] G. Knothe and K. R. Steidley, “A Comprehensive Evaluation of the Density of Neat Fatty Acids and Esters,” *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 91, pp. 1711–1722, 2014.
- [7] G. R. Moradi, B. Karami, and M. Mohadesi, “Densities and Kinematic Viscosities in Biodiesel – Diesel Blends at Various Temperatures,” vol. 2, 2013.
- [8] L. F. Ramírez-Verduzco, B. E. García-Flores, J. E. Rodríguez-Rodríguez, and A. Del Rayo Jaramillo-Jacob, “Prediction of the density and viscosity in biodiesel blends at various temperatures,” *Fuel*, vol. 90, no. 5, pp. 1751–1761, 2011.

- [9] L. F. Ramírez-Verduzco, J. E. Rodríguez-Rodríguez, and A. R. Jaramillo-Jacob, "Predicting cetane number , kinematic viscosity , density and higher heating value of biodiesel from its fatty acid methyl ester composition," *Fuel*, vol. 91, pp. 102–111, 2012.
- [10] C. I. Rocabrano-Valdés, L. F. Ramírez-Verduzco, and J. A. Hernández, "Artificial neural network models to predict density, dynamic viscosity, and cetane number of biodiesel," *Fuel*, vol. 147, pp. 9–17, 2015.
- [11] S. O. Giwa, S. O. Adekomaya, K. O. Adama, and M. O. Mukaila, "Prediction of selected biodiesel fuel properties using artificial neural network," *Front. Energy*, vol. 9, no. 4, pp. 433–445, 2015.
- [12] S. Jekayinfa, A. Adebayo, M. A. Sulaiman, and V. Ayoola, "Prediction of Density and Viscosity of Biodiesel Fuel From Fatty Acid Methyl Ester (Fame) Composition," *Arid Zo. J. Eng. Technol. Environment*, vol. 15, no. 3, pp. 519–534, 2019.
- [13] M. Gulum, F. K. Onay, and A. Bilgin, "Evaluation of Predictive Capabilities of Regression Models and Artificial Neural Networks for Density and Viscosity Measurements of Different Biodiesel-Diesel-Vegetable Oil Ternary Blends," vol. 22, pp. 179–205, 2018.
- [14] Z. Singh, "Sustainable Development Goals : Challenges and Opportunities," *Indian J. Public Health*, vol. 60, no. 4, pp. 247–250, 2016.
- [15] Naciones Unidas, "La Agenda 2030 y los Objetivos de Desarrollo Sostenible Una oportunidad para América Latina y el Caribe." Santiago, p. (LC/G.2681-P/Rev.3), 2018.
- [16] A. Danhiya, *Bioenergy: Biomass to Biofuels*. London, 2015.
- [17] V. Nelson and K. Starcher, *Introduction to bioenergy*. 2017.
- [18] A. B. Avagyan and B. Singh, *Biodiesel: Feedstocks , Technologies ,*

Economics and Barriers. Singapore, 2019.

- [19] M. Tabatabaei and M. Aghbashlo, *Biodiesel From Production to Combustion*. Switzerland, 2019.
- [20] A. Demirbas, "Biodiesel from vegetable oils via transesterification in supercritical methanol," *Energy Convers. Manag.*, vol. 43, pp. 2349–2356, 2002.
- [21] S. Baroutian, K. Shahbaz, F. S. Mjalli, M. A. Hashim, and I. M. AlNashef, "Densities and Viscosities of Binary Blends of Methyl Esters + Ethyl Esters and Ternary Blends of Methyl Esters + Ethyl Esters + Diesel Fuel from T = (293.15 to 358.15) K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 57, pp. 1387–1395, 2012.
- [22] M. Pande and A. N. Bhaskarwar, *Biomass Conversion to Energy*. Berlin, 2012.
- [23] H. Wang, "Biofuels Production from Hydrotreating of Vegetable Oil Using Supported Noble Metals, and Transition Metal Carbide and Nitride," Wayne State University, 2012.
- [24] S. K. Hoekman, A. Broch, C. Robbins, E. Cenicerros, and M. Natarajan, "Review of biodiesel composition , properties , and specifications," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 16, no. 1, pp. 143–169, 2012.
- [25] M. J. Hernández Sánchez, "Implementación en Aspen de un modelo de reacción para la producción de diésel verde a partir de aceite de palma en un reactor de lecho fijo," Universidad Nacional Autónoma de México, 2016.
- [26] B. Kegl, M. Kegl, and S. Pehan, *Green Diesel engines*, vol. 93. London, 2013.
- [27] E. Alptekin and M. Canakci, "Determination of the density and the viscosities of biodiesel- diesel fuel blends," *Renew. Energy*, vol. 33, no. 12, pp. 2623–2630, 2008.
- [28] A. E. de N. y C. (AENOR), *Petróleo crudo y productos petrolíferos líquidos*

Determinación de la densidad en laboratorio Método del aerómetro. Madrid, 1999, pp. 1–15.

- [29] C. Özgür and E. Tosun, "Prediction of density and kinematic viscosity of biodiesel by artificial neural networks," *Energy Sources, Part A Recover. Util. Environ. Eff.*, vol. 39, no. 10, pp. 985–991, 2017.
- [30] A. Demirbas, "Prediction of Higher Heating Values for Biodiesels from Their Physical Properties," *Energy sources*, vol. 31, no. 8, pp. 633–638, 2009.
- [31] E. A. Ateeq, "Biodiesel Viscosity and Flash Point Determination," An-Najah National University, 2015.
- [32] B. Freedman and M. O. Bagby, "Predicting cetane numbers of n-alcohols and methyl esters from their physical properties," *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 67, pp. 656–671, 1990.
- [33] A. Demirbas, "Relationships derived from physical properties of vegetable oil and biodiesel fuels," *Fuel*, vol. 87, pp. 1743–1748, 2008.
- [34] American National Standard British, *Standard Test Method for Kinematic Viscosity of Transparent and Opaque Liquids (and Calculation of Dynamic Viscosity)*. Unites States, 2009, pp. 1–10.
- [35] A. A. Refaat, "Correlation between the chemical structure of biodiesel and its physical properties," *Int. J. Environ. Sci. Technol.*, vol. 6, no. 4, pp. 677–694, 2009.
- [36] S. M. Hosseini, M. Pierantozzi, and J. Moghadasi, "Viscosities of some fatty acid esters and biodiesel fuels from a rough hard-sphere-chain model and artificial neural network," *Fuel*, vol. 235, pp. 1083–1091, 2019.
- [37] A. K. Jain and J. Mao, "Artificial neural networks: A tutorial," *Computer (Long. Beach. Calif.)*, vol. 29, no. 3, pp. 31–44, 1996.

- [38] D. A. Saldana, L. Starck, P. Mougin, B. Rousseau, N. Ferrando, and B. Creton, "Prediction of density and viscosity of biofuel compounds using machine learning methods," *Energy and Fuels*, vol. 26, no. 4, pp. 2416–2426, 2012.
- [39] T. Eryilmaz, M. Arslan, M. K. Yesilyurt, and A. Taner, "Comparison of empirical equations and artificial neural network results in terms of kinematic viscosity prediction of fuels based on hazelnut oil methyl ester," *Environ. Prog. Sustain. Energy*, vol. 35, no. 6, pp. 1827–1841, 2016.
- [40] J. R. Fernández, "Aprendizaje automático para flujos de datos," Universidad Politécnica de Madrid, 2019.
- [41] A. Krogh, "What are artificial neural networks?," *Nat. Biotechnol.*, vol. 26, no. 2, pp. 195–197, 2008.
- [42] H. Demuth and M. Beale, *Neural network Toolbox User's Guide*, Version 4. Massachusetts, 2002.
- [43] H. Hsu, Y. Sheu, and C. Tu, "Viscosity estimation at low temperatures ($T_r < 0.75$) for organic liquids from group contributions," *Chem. Eng. J.*, vol. 88, pp. 27–35, 2002.
- [44] R. Ceriani *et al.*, "Group Contribution Model for Predicting Viscosity of Fatty Compounds," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 52, no. 3, pp. 965–972, 2007.
- [45] I. Barabás, "Predicting the temperature dependent density of biodiesel-diesel-bioethanol blends," *Fuel*, vol. 109, pp. 563–574, 2013.
- [46] I. H. Witten, E. Frank, and M. A. Hall, *Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques*, Third Edit. Burlington, MA: Morgan Kaufmann, 2011.
- [47] M. T. Hagan, H. B. Demuth, M. H. Beale, and O. De Jesús, *Neural Network Design*, 2nd ed. 2014.
- [48] R. Wang, J. Jiang, Y. Pan, H. Cao, and Y. Cui, "Prediction of impact sensitivity

- of nitro energetic compounds by neural network based on electrotopological-state indices," *J. Hazard. Mater.*, vol. 166, no. 1, pp. 155–186, 2009.
- [49] A. Tropsha, P. Gramatica, and V. K. Gombar, "The importance of being earnest: Validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models," *QSAR Comb. Sci.*, vol. 22, no. 1, pp. 69–77, 2003.
- [50] S. Belmadani, S. Hanini, M. Laidi, C. Si-Moussa, and M. Hamadache, "Artificial Neural Network Models for Prediction of Density and Kinematic Viscosity of Different Systems of Biofuels and Their Blends with Diesel Fuel. Comparative Analysis," *Kem. u Ind.*, vol. 69, no. 7–8, pp. 355–364, 2020.
- [51] I. Del Pozo, M. Cartes, F. Lloovell, and A. Mejía, "Densities and interfacial tensions for fatty acid methyl esters (from methyl formate to methyl heptanoate) + water demixed mixtures at atmospheric pressure conditions," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 121, pp. 121–128, 2018.
- [52] C. Liu, H. Ku, and C. Tu, "Densities and Viscosities of Five Alkyl Esters with Nitroethane Systems at (293 . 15 , 303 . 15 , and 313 . 15) K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 44, no. 2, pp. 360–364, 1999.
- [53] M. M. Palaiologou, "Densities , Viscosities , and Refractive Indices of Some Alkyl Esters with 4-Chlorotoluene Systems at (293 . 15 , 298 . 15 , and 303 . 15) K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 41, no. 5, pp. 1036–1039, 1996.
- [54] G. Zhao, Z. Yuan, J. Yin, and S. Ma, "Thermophysical properties of fatty acid methyl and ethyl esters," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 134, pp. 195–212, 2019.
- [55] M. Lapuerta, J. Rodríguez-Fernández, and O. Armas, "Correlation for the estimation of the density of fatty acid esters fuels and its implications . A proposed Biodiesel Cetane Index," *Chem. Phys. Lipids*, vol. 163, no. 7, pp. 720–727, 2010.
- [56] T. H. Gouw and J. C. Vlughter, "Physical properties of fatty acid methyl esters.

- I. density and molar volume,” *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 41, no. 2, pp. 142–145, 1964.
- [57] M. J. Pratas, S. Freitas, M. B. Oliveira, C. Monteiro, and A. S. Lima, “Densities and Viscosities of Fatty Acid Methyl and Ethyl Esters,” *J. Chem. Eng. Data*, vol. 55, no. 9, pp. 3983–3990, 2010.
- [58] A. I. Vogel, “Physical properties and chemical constitution.,” *J. Chem. Soc.*, no. 0, pp. 624–644, 1948.
- [59] D. Li, M. Guo, X. Wang, S. Lin, W. Jia, and G. Wang, “Measurement and correlation of density and viscosity of binary mixtures of fatty acid (methyl esters + methylcyclohexane),” *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 137, no. 108, pp. 86–93, 2019.
- [60] X. Wang, X. Wang, and J. Chen, “Experimental investigations of density and dynamic viscosity of n -hexadecane with three fatty acid methyl esters,” *Fuel*, vol. 166, pp. 553–559, 2016.
- [61] M. A. Aissa, G. R. Ivanis, I. R. Radovic, and M. Lj, “Experimental Investigation and Modeling of Thermophysical Properties of Pure Methyl and Ethyl Esters at High Pressures,” *Energy and Fuels*, vol. 31, pp. 7110–7122, 2017.
- [62] K. Y. Liew and C. E. Seng, “Molal volumes of somen-Fatty acids and their methyl and ethyl esters,” *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 69, no. 8, pp. 734–740, Aug. 1992.
- [63] E. H. I. Ndiaye, M. Habrioux, L. L. Paredes, and F. Xavier, “Speed of Sound, Density, and Derivative Properties of Ethyl Myristate, Methyl Myristate, and Methyl Palmitate under High Pressure,” *J. Chem. Eng. Data*, vol. 58, pp. 1371–1377, 2013.
- [64] S. M. Rasulov, I. A. Isaev, and S. M. Orakova, “Viscosity and Density of Methyl Palmitate,” *High Temp.*, vol. 57, no. 2, pp. 298–300, 2019.

- [65] M. J. Pratas, S. Freitas, M. B. Oliveira, S. C. Monteiro, S. Lima, and A. P. Coutinho, "Densities and Viscosities of Minority Fatty Acid Methyl and Ethyl Esters Present in Biodiesel," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 56, pp. 2175–2180, 2011.
- [66] Y. Sheu and C. Tu, "Densities , Viscosities , Refractive Indices , and Surface Tensions for 12 Flavor Esters from T) 288 . 15 K to T) 358 . 15 K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 50, pp. 1706–1710, 2005.
- [67] Shigley J. W., C. W. Bonhorst, P. M. Liang, P. M. Althouse, and H. O. Triebold, "n of a) a series of ethyl esters and b) a series of ethanoate esters," *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 32, no. 4, pp. 213–215, 1955.
- [68] National Oceanic and Atmospheric Administration, "CAMEO Chemicals." [Online]. Available: <https://cameochemicals.noaa.gov/chemical/1108>. [Accessed: 09-Jul-2020].
- [69] D. B. K. Kumar, K. R. Reddy, G. S. Rao, P. B. Sandhyasri, Z. Begum, and C. Rambabu, "Measurements of some physical properties of binary liquid mixtures (N-methyl-2-pyrrolidone + an aliphatic ester) at several temperatures and data processing of viscosity and ultrasonic speed," *J. Mol. Liq.*, vol. 183, pp. 31–44, 2013.
- [70] B. González, N. Calvar, Á. Domínguez, and J. Tojo, "Dynamic viscosities of binary mixtures of cycloalkanes with primary alcohols at T = (293.15, 298.15, and 303.15) K: New UNIFAC-VISCO interaction parameters," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 39, no. 2, pp. 322–334, 2007.
- [71] A. Pal and H. Kumar, "Excess molar volumes, and viscosities of tetraethylene glycol dimethyl ether with methyl acetate, ethyl acetate, and propyl acetate at (298.15, 308.15, and 318.15) K," *J. Mol. Liq.*, vol. 89, no. 1–3, pp. 189–206, 2000.
- [72] A. T. Gros and R. O. Feuge, "Surface and interfacial tensions, viscosities, and

other physical properties of some n-aliphatic acids and their methyl and ethyl esters," *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 29, no. 8, pp. 313–317, 1952.

- [73] J. L. Trenzado, J. S. Matos, L. Segade, and E. Carballo, "Densities, viscosities, and related properties of some (methyl ester + alkane) binary mixtures in the temperature range from 283.15 to 313.15 K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 46, no. 4, pp. 974–983, 2001.
- [74] X. Wang, S. Zhu, and X. Wang, "Liquid viscosities for methyl hexanoate, methyl heptanoate, methyl caprylate, and methyl nonanoate at high pressures," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 133, pp. 285–291, 2019.
- [75] W. Yuan, A. C. Hansen, and Q. Zhang, "Predicting the temperature dependent viscosity of biodiesel fuels," *Fuel*, vol. 88, no. 6, pp. 1120–1126, 2009.
- [76] C. A. W. Allen, K. C. Watts, R. G. Ackman, and M. J. Pegg, "Predicting the viscosity of biodiesel fuels from their fatty acid ester composition," *Fuel*, vol. 78, no. 11, pp. 1319–1326, 1999.
- [77] G. Knothe and K. Steidley, "Kinematic viscosity of biodiesel components (fatty acid alkyl esters) and related compounds at low temperatures," *Fuel*, vol. 86, no. 16, pp. 2560–2567, 2007.
- [78] C. Su, C. Zhu, T. Lai, T. Wang, X. Liu, and M. He, "Temperature and pressure dependence of densities and viscosities for binary mixtures of methyl decanoate plus n-heptane," *Thermochim. Acta*, vol. 670, no. October, pp. 211–218, 2018.
- [79] M. Habrioux, J. P. Bazile, G. Galliero, and J. L. Daridon, "Viscosities of fatty acid methyl and ethyl esters under high pressure: Methyl caprate and ethyl caprate," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 60, no. 3, pp. 902–908, 2015.
- [80] M. He, T. Lai, and X. Liu, "Measurement and correlation of viscosities and densities of methyl dodecanoate and ethyl dodecanoate at elevated pressures," *Thermochim. Acta*, vol. 663, no. December 2017, pp. 85–92, 2018.

- [81] M. Habrioux, D. Nasri, and J. L. Daridon, "Measurement of speed of sound, density compressibility and viscosity in liquid methyl laurate and ethyl laurate up to 200 MPa by using acoustic wave sensors," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 120, pp. 1–12, 2018.
- [82] M. Habrioux, J. P. Bazile, G. Galliero, and J. L. Daridon, "Viscosities of Fatty Acid Methyl and Ethyl Esters under High Pressure: Methyl Myristate and Ethyl Myristate," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 61, no. 1, pp. 398–403, 2016.
- [83] X. Liu *et al.*, "Densities and Viscosities of Ethyl Heptanoate and Ethyl Octanoate at Temperatures from 303 to 353 K and at Pressures up to 15 MPa," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 62, no. 8, pp. 2454–2460, 2017.
- [84] W. R. Liau, M. Tang, and Y. P. Chen, "Densities and viscosities of butyl acrylate + 1-butanol and ethyl laurate + 1-butanol at 293.15, 303.15, and 313.15 K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 43, no. 5, pp. 826–829, 1998.
- [85] M. J. Pratas, S. V. D. Freitas, M. B. Oliveira, S. C. Monteiro, and S. Lima, "Biodiesel Density: Experimental Measurements and Prediction Models," *Energy and Fuels*, vol. 25, pp. 2333–2340, 2011.
- [86] S. Baroutian, M. K. Aroua, A. A. A. Raman, and N. M. N. Sulaiman, "Density of palm oil-based methyl ester," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 53, no. 3, pp. 877–880, 2008.
- [87] G. K. Latinwo, D. S. Aribike, and S. A. Kareem, "Comparative Study of Biodiesels Produced from Unrefined Vegetable Oils," *Nat. Sci.*, vol. 8, no. 9, pp. 102–106, 2010.
- [88] H. Veny, S. Baroutian, M. K. Aroua, M. Hasan, A. A. Raman, and N. M. N. Sulaiman, "Density of Jatropha Curcas Seed Oil and its Methyl Esters: Measurement and Estimations," *Int. J. Thermophys.*, vol. 30, no. 2, pp. 529–541, 2009.
- [89] F. X. Feitosa, M. D. L. Rodrigues, C. B. Veloso, C. L. Cavalcante, M. C. G.

- Albuquerque, and H. B. De Sant'Ana, "Viscosities and Densities of Binary Mixtures of Coconut + Colza and Coconut + Soybean Biodiesel at Various Temperatures," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 55, no. 9, pp. 3909–3914, 2010.
- [90] C. A. Nogueira, F. X. Feitosa, F. A. N. Fernandes, R. S. Santiago, and H. B. De Sant'ana, "Densities and Viscosities of Binary Mixtures of Babassu Biodiesel + Cotton Seed or Soybean Biodiesel at Different Temperatures," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 55, no. 11, pp. 5305–5310, 2010.
- [91] M. L. Huber, E. W. Lemmon, A. Kazakov, L. S. Ott, and T. J. Bruno, "Model for the Thermodynamic Properties of a Biodiesel Fuel," *Energy and Fuels*, vol. 23, no. 7, pp. 3790–3797, 2009.
- [92] F. M. R. Mesquita, F. X. Feitosa, R. S. Santiago, and H. B. De Santana, "Density, Excess Volumes, and Partial Volumes of Binary Mixtures of Soybean Biodiesel + Diesel and Soybean Biodiesel + n -Hexadecane at Different Temperatures and Atmospheric Pressure," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 56, no. 1, pp. 153–157, 2011.
- [93] R. C. Parente *et al.*, "Excess Volumes and Deviations of Viscosities of Binary Blends of Sunflower Biodiesel + Diesel and Fish oil Biodiesel + Diesel at Various Temperatures," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 56, no. 7, pp. 3061–3067, 2011.
- [94] J. J. Cano-Gómez, G. A. Iglesias-Silva, P. Rivas, C. O. Díaz-Ovalle, and F. De Jesús Cerino-Córdova, "Densities and Viscosities for Binary Liquid Mixtures of Biodiesel + 1-Butanol, + Isobutyl Alcohol, or + 2-Butanol from 293.15 to 333.15 K at 0.1 MPa," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 62, no. 10, pp. 3391–3400, 2017.
- [95] J. P. Davis, D. Geller, W. H. Faircloth, and T. H. Sanders, "Comparisons of biodiesel produced from unrefined oils of different peanut cultivars," *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 86, no. 4, pp. 353–361, 2009.

- [96] L. T. Vargas-Ibáñez, G. A. Iglesias-Silva, J. J. Cano-Gómez, C. Escamilla-Alvarado, and M. A. Berrones-Eguiluz, "Densities and Viscosities for Binary Liquid Mixtures of Biodiesel + 1-Pentanol, 2-Pentanol, or 2-Methyl-1-Butanol from (288.15 to 338.15) K at 0.1 MPa," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 63, no. 7, pp. 2438–2450, 2018.
- [97] C. A. Nogueira *et al.*, "Density and Viscosity of Binary Systems Containing (Linseed or Corn) Oil, (Linseed or Corn) Biodiesel and Diesel," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 60, no. 11, pp. 3120–3131, 2015.
- [98] M. Gülüm and A. Bilgin, "Measurements and empirical correlations in predicting biodiesel-diesel blends' viscosity and density," *Fuel*, vol. 199, pp. 567–577, 2017.
- [99] S. Phankosol, K. Sudaprasert, S. Lilitchan, K. Aryasuk, and K. Krisnangkura, "Estimation of density of biodiesel," *Energy and Fuels*, vol. 28, no. 7, pp. 4633–4641, 2014.
- [100] S. Sanford, J. White, and P. Shah, "Feedstock and biodiesel characteristics report," *Renew. Energy Group, Inc.*, no. 2009, pp. 1–136, 2009.
- [101] R. Ceriani, C. B. Gonçalves, and J. A. P. Coutinho, "Prediction of viscosities of fatty compounds and biodiesel by group contribution," *Energy and Fuels*, vol. 25, no. 8, pp. 3712–3717, 2011.
- [102] S. V.D. Freitas, M. J. Pratas, R. Ceriani, Á. S. Lima, and J. A. P. Coutinho, "Evaluation of predictive models for the viscosity of biodiesel," *Energy and Fuels*, vol. 25, no. 1, pp. 352–358, 2011.
- [103] A. M. Duncan, A. Ahosseini, R. McHenry, C. D. Depcik, S. M. Stagg-Williams, and A. M. Scurto, "High-pressure viscosity of biodiesel from soybean, canola, and coconut oils," *Energy and Fuels*, vol. 24, no. 10, pp. 5708–5716, 2010.
- [104] J. C. Chavarria-Hernandez and D. E. Pacheco-Catalán, "Predicting the kinematic viscosity of FAMEs and biodiesel: Empirical models," *Fuel*, vol. 124,

pp. 212–220, 2014.

- [105] Q. Shu, B. Yang, J. Yang, and S. Qing, “Predicting the viscosity of biodiesel fuels based on the mixture topological index method,” *Fuel*, vol. 86, no. 12–13, pp. 1849–1854, 2007.
- [106] W. Yuan, A. C. Hansen, and Q. Zhang, “Predicting th Physical Properties of Biodiesel for Combustion Modeling,” *Am. Soc. Agric. Eng.*, vol. 46, no. 6, pp. 1487–1493, 2003.
- [107] B. Esteban, J. R. Riba, G. Baquero, A. Rius, and R. Puig, “Temperature dependence of density and viscosity of vegetable oils,” *Biomass and Bioenergy*, vol. 42, pp. 164–171, 2012.
- [108] D. F. Ruan, Z. H. Chen, K. F. Wang, Y. Chen, and F. Yang, “Physical property prediction for waste cooking oil biodiesel,” *Open Fuels Energy Sci. J.*, vol. 7, no. 1, pp. 62–68, 2014.
- [109] S. Phankosol, K. Sudaprasert, S. Lilitchan, K. Aryusuk, and K. Krisnangkura, “An Empirical Equation for Estimation of Kinematic Viscosity of Fatty Acid Methyl Esters and Biodiesel,” *J. Am. Oil Chem. Soc.*, vol. 92, no. 7, pp. 1051–1061, 2015.
- [110] C. B. Gonçalves, R. Ceriani, J. Rabelo, M. C. Maffia, and A. J. A. Meirelles, “Viscosities of fatty mixtures: Experimental data and prediction,” *J. Chem. Eng. Data*, vol. 52, no. 5, pp. 2000–2006, 2007.

APÉNDICE A

Base de datos experimentales de densidad de ésteres alquílicos en un rango amplio de temperatura.

n_{exp}	Compuesto	Temperatura, K	Referencia
1	Formiato de metilo	298.15	[51]
7	Acetato de metilo	293.15 - 313.15	[51]–[53]
1	Propionato de metilo	298.15	[51]
1	Butirato de metilo	298.15	[51]
1	Valerato de metilo	298.15	[51]
14	Caproato de metilo	293.15 - 413.15	[51], [54]
16	Heptanoato de metilo	293.15 - 433.15	[51], [54]
56	Caprílato de metilo	283.15 - 453.15	[6], [54]–[58]
12	Pelargonato de metilo	288.15 - 313.15	[6], [55], [56]
79	Metil caprato	278.15 - 453.15	[6], [54]–[60]
11	Undecanoato de metilo	288.15 - 313.15	[6], [55], [56]
91	Lláurato de metilo	283.15 - 453.15	[6], [54]–[61]
11	Tridecanoato de metilo	288.15 - 313.15	[6], [55], [56]
73	Mirístato de metilo	293.15 - 453.15	[6], [54]–[57], [59], [60], [62], [63]
6	Miristoleato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
13	Pentadecanoato de metilo	293.15 - 313.15	[6], [55], [56]
39	Palmitato de metilo	304.35 - 383.15	[6], [55]–[57], [63], [64]
30	Palmitoleato de metilo	278.15 - 363.15	[6], [65]
22	Estearato de metilo	313.15 - 363.15	[35]–[37], [62]
60	Oleato de metilo	283.15 - 353.15	[6], [35]–[37]
34	Linoleato de metilo	278.15 - 363.15	[6], [35]–[37]
30	Linolenato de metilo	278.15 - 363.15	[6], [65]
6	Nonadecenoato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
12	Araquídato de metilo	313.15 - 373.15	[55], [56], [65]
38	Gadoleato de metilo	278.15 - 373.15	[6], [65]
6	Eicosadienoato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Eicosatrienoato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Araquidonato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
8	Behénato de metilo	338.15 - 373.15	[65]
31	Eruciato de metilo	278.15 - 363.15	[55], [56], [6], [65]
6	Docosahexaenoato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
8	Lignocerato de metilo	338.15 - 373.15	[65]
6	Nervonato de metilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Acetato de etilo	293.15 - 313.15	[52], [53]

n_{exp}	Compuesto	Temperatura, K	Referencia
3	Propionato de etilo	293.15 - 313.15	[52]
22	Caproato de etilo	288.15 - 423.15	[54], [66], [67]
16	Heptanoato de etilo	293.15 - 443.15	[54]
60	Caprílato de etilo	278.15 - 453.15	[6], [54], [57], [60], [66], [67]
6	Pelargonato de etilo	288.15 - 313.15	[6], [54], [57], [60]
49	Etil caprato	283.15 - 453.15	[6], [54], [57], [60]
6	Undecanoato de etilo	288.15 - 313.15	[6]
61	Lláurato de etilo	283.15 - 453.15	[6], [54], [57], [60], [61], [67]
6	Tridecanoato de etilo	288.15 - 313.15	[6]
66	Mirístato de etilo	283.15 - 453.15	[6], [54], [57], [61], [63], [67]
6	Pentadecanoato de etilo	288.15 - 313.15	[6]
18	Palmitato de etilo	303.15 - 368.15	[57], [67]
16	Estearato de etilo	308.15 - 368.15	[57], [67]
48	Oleato de etilo	278.15 - 363.15	[6], [57], [61]
24	Linoleato de etilo	278.15 - 363.15	[6], [65]
26	Linolenato de etilo	278.15 - 373.15	[6], [65]
12	Araquídato de etilo	318.15 - 373.15	[65]
6	Gadoleato de etilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Nervonato de etilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Acetato de propilo	293.15 - 313.15	[52], [53]
6	Caprílato de propilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Pelargonato de propilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Decanoato de propilo	288.15 - 313.15	[6]
3	Acetato de butilo	293.15 - 313.15	[52]
6	Caprílato de butilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Pelargonato de butilo	288.15 - 313.15	[6]
6	Caprato de butilo	288.15 - 313.15	[6]
5	Acetato de hexilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de octilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de decilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de dodecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de tetradecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de hexadecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de octadecilo	308.15 - 368.15	[67]

APÉNDICE B

Base de datos experimentales de viscosidad dinámica de ésteres alquílicos en un rango amplio de temperatura.

n_{exp}	Compuesto	Temperatura, K	Referencia
11	Formiato de metilo	274.82 - 302.59	[68]
14	Acetato de metilo	293.15 - 318.15	[52], [53], [69]–[71]
1	Butirato de metilo	348.15	[72]
5	Valerato de metilo	283.15 - 313.15	[73]
25	Caproato de metilo	283.15 - 353.15	[62], [72]–[74]
26	Heptanoato de metilo	283.15 - 353.15	[62], [73], [74]
43	Caprilato de metilo	283.15 - 372.05	[57], [62], [74]–[76]
8	Pelargonato de metilo	299.19 - 360.96	[74]
70	Caproato de metilo	263.15 - 371.95	[57], [59], [60], [62], [72], [75], [77]–[79]
94	Laurato de metilo	278.15 - 373.15	[44], [57], [59]–[62], [72], [74]–[77], [80], [81]
45	Miristato de metilo	293.15 - 372.05	[44], [57], [59], [60], [72], [75], [76], [82]
35	Palmitato de metilo	304.45 - 372.45	[57], [64], [75], [76], [44]
18	Palmitoleato de metilo	278.15 - 363.15	[57]
15	Estearato de metilo	310.95 - 372.05	[57], [75]
36	Oleato de metilo	263.15 - 363.15	[57], [76], [77], [44]
34	Linoleato de metilo	263.15 - 353.15	[57], [76], [77], [44]
27	Linolenato de metilo	278.15 - 373.15	[76], [65], [44]
11	Araquídato de metilo	323.15 - 373.15	[65]
20	Gadoleato de metilo	278.15 - 373.15	[65]
9	Behénato de metilo	333.15 - 373.15	[65]
19	Eruciato de metilo	278.15 - 363.15	[65], [76]
8	Lignocerato de metilo	338.15 - 373.15	[65]
15	Acetato de etilo	293.15 - 348.15	[52], [53], [69]–[72]
3	Propionato de etilo	293.15 - 313.15	[52]
1	Butirato de etilo	350.15	[72]
14	Caproato de etilo	288.15 - 368.15	[66], [67], [72]
5	Heptanoato de etilo	312.73 - 352.71	[83]
26	Caprilato de etilo	288.15 - 368.15	[60], [66], [67], [72], [76], [83]
32	Caproato de etilo	283.15 - 368.15	[57], [60], [67], [72], [76], [79]
59	Llaurato de etilo	283.15 - 373.15	[57], [60], [61], [67], [72], [76], [80], [81], [84]
47	Miristato de etilo	283.15 - 373.15	[57], [61], [67], [72], [82]
19	Palmitato de etilo	303.15 - 368.15	[57], [67], [72]
17	Estearato de etilo	308.15 - 368.15	[57], [67], [72]
37	Oleato de etilo	278.15 - 373.15	[57], [61], [76]
18	Linoleato de etilo	278.15 - 363.15	[65]



n_{exp}	Compuesto	Temperatura, K	Referencia
20	Linolenato de etilo	278.15 - 373.15	[65]
12	Araquidato de etilo	318.15 - 373.15	[65]
7	Acetato de propilo	293.15 - 313.15	[52], [53], [71],
7	Acetato de butilo	293.15 - 318.15	[52], [69]
5	Acetato de hexilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de octilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de decilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de dodecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de tetradecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de hexadecilo	308.15 - 368.15	[67]
5	Acetato de octadecilo	308.15 - 368.15	[67]

APÉNDICE C

Base de datos experimentales de densidad de biodiésel y mezclas de biodiésel en un rango amplio de temperatura.

n_{exp}	Biodiésel (FAME)	Temperatura, K	Referencia
111	Palma	288.15 - 373.15	[21], [85]–[87]
89	Jatropha	288.15 - 363.15	[21] [88]
62	Soja	278.15 - 373.15	[85], [89]–[92]
44	Colza	273.15 - 373.15	[45], [85], [89]
39	Girasol	278.15 - 373.15	[3], [85], [93]
28	Residuos de aceite de cocina	288.15 - 373.15	[45], [94]
24	Cacahuete	288.15 - 373.15	[95]
14	Manteca de cerdo	298.15 - 363.15	[3]
11	Sebo de vaca	288.15 - 338.15	[96]
5	Linaza	293.15 - 333.15	[97]
5	Avellana	283.15 - 313.15	[98]
5	Pescado	293.15 - 373.15	[93]
5	Algodón	293.15 - 373.15	[99]
5	Maíz	293.15 - 373.15	[97]
5	Coco	293.15 - 373.15	[89]
5	Babasú	293.15 - 373.15	[90]
3	Anacardo	288.15 - 373.15	[87]
5	Coco + Colza (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.2 + 0.8)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.5 + 0.5)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.7 + 0.3)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.2 + 0.8)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[89]



n_{exp}	Biodiésel (FAME)	Temperatura, K	Referencia
5	Algodón + Babasú (0.16 + 0.84)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.19 + 0.81)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.29 + 0.71)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.49 + 0.51)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.68 + 0.32)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.5 + 0.5)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[90]
18	Colza+ Palma	278.15 - 363.15	[85]
17	Soja + Palma	283.15 - 363.15	[85]
36	Soja + Colza	278.15 - 363.15	[85]
18	Soja + Colza + Palma	278.15 - 363.15	[85]

APÉNDICE D

Base de datos experimentales de viscosidad dinámica de biodiésel y mezclas de biodiésel en un rango amplio de temperatura.

n _{exp}	Biodiésel (FAME)	Temperatura, K	Referencia
88	Soja	273.15 - 373.15	[75], [76], [89], [90], [100]–[106]
60	Palma	288.15 - 373.15	[21], [75], [76], [87], [100]–[102], [104], [105]
55	Canola	273.15 - 373.15	[75], [76], [89], [100]–[105]
42	Girasol	283.15 - 373.15	[3], [93], [100], [102], [105]
29	Biodiésel comercial	283.15 - 413.15	[102], [107]
28	Cacahuete	288.15 - 373.15	[76], [95], [104], [105]
21	Residuos de aceite de cocina	283.15 - 373.15	[94], [103], [108]
18	Manteca de cerdo	298.15 - 373.15	[3], [100], [105]
17	Algodón	293.15 - 373.15	[90], [105], [109]
17	Coco	283.15 - 373.15	[75], [76], [89], [103]–[105]
15	Jatropha	293.15 - 358.15	[21], [109]
11	Sebo de vaca	288.15 - 338.15	[96]
7	Maíz	293.15 - 373.15	[97], [100], [105]
6	Grasa Amarilla	293.15 - 373.15	[75], [100]
6	Linaza	293.15 - 333.15	[97], [100]
6	Babasú	293.15 - 373.15	[97], [100]
5	Pescado	293.15 - 373.15	[93]
4	Avellana	283.15 - 313.15	[98]
3	Anacardo	288.15 - 373.15	[87]
1	Cártamo	313.15	[100]
1	Salvado de arroz	313.15	[100]
1	Semilla de perilla	313.15	[100]
1	Moringa	313.15	[100]
1	Cáñamo	313.15	[100]
1	Onagra	313.15	[100]
1	Café	313.15	[100]
1	Camelina	313.15	[100]
1	Grasa de la leche	313.15	[100]
1	Borraja	313.15	[100]
1	Alga	313.15	[100]
24	Mezclas de ésteres metílicos de ácidos grasos	298.15 - 343.15	[76], [110]
5	Coco + Colza (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.2 + 0.8)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[89]



n_{exp}	Biodiésel (FAME)	Temperatura, K	Referencia
5	Coco + Colza (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.5 + 0.5)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.7 + 0.3)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Colza (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.2 + 0.8)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[89]
5	Coco + Soja (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[89]
5	Algodón + Babasú (0.16 + 0.84)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.19 + 0.81)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.29 + 0.71)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.49 + 0.51)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.68 + 0.32)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[90]
5	Algodón + Babasú (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.1 + 0.9)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.3 + 0.7)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.4 + 0.6)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.5 + 0.5)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.6 + 0.4)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja +Babasú (0.8 + 0.2)	293.15 - 373.15	[90]
5	Soja + Babasú (0.9 + 0.1)	293.15 - 373.15	[90]
18	Soja + Colza	278.15 - 363.15	[85]