



Centro Universitario de la Defensa en la Escuela Naval Militar

TRABAJO FIN DE GRADO

*Predicción mediante modelos de machine learning de la captura
de CO₂ en zeolitas*

Grado en Ingeniería Mecánica

ALUMNO: Javier Jorge García Lage

DIRECTORES: Iván Garrido González
Leticia Pérez Rial

CURSO ACADÉMICO: 2025-2026

Universida_{de}Vigo



Centro Universitario de la Defensa en la Escuela Naval Militar

TRABAJO FIN DE GRADO

*Predicción mediante modelos de machine learning de la captura
de CO₂ en zeolitas*

Grado en Ingeniería Mecánica
Intensificación en Tecnología Naval
Cuerpo General

UniversidadeVigo

RESUMEN

El presente Trabajo de Fin de Grado analiza la predicción de la capacidad de adsorción de dióxido de carbono (CO_2) en zeolitas mediante técnicas de *Machine Learning*. El incremento de las emisiones de CO_2 constituye uno de los principales problemas medioambientales actuales, lo que impulsa el desarrollo de tecnologías eficientes de captura y almacenamiento. En este contexto, la adsorción en materiales sólidos, especialmente en zeolitas, destaca por su elevada eficiencia, bajo consumo energético y facilidad de regeneración.

El estudio aborda distintos tipos de zeolitas y examina la influencia de variables operativas como la temperatura, la presión y las características del material sobre el proceso adsorbente. Para ello, se realizó una recopilación sistemática de datos experimentales procedentes de la literatura científica, que posteriormente fueron tratados y utilizados como base para el entrenamiento de diversos modelos de regresión.

Se evaluaron diferentes algoritmos de *Machine Learning* con el objetivo de identificar el modelo más adecuado para predecir la cantidad de CO_2 adsorbido. Los resultados permiten comparar el rendimiento de los modelos y determinar condiciones óptimas de operación. En consecuencia, el *Machine Learning* se consolida como una herramienta eficaz para optimizar procesos de captura de carbono y apoyar decisiones en ingeniería de procesos industriales.

PALABRAS CLAVE

Machine Learning, Captura de CO_2 , Zeolitas, Adsorción, Modelos predictivos

AGRADECIMIENTOS

Me gustaría expresar mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que han contribuido, de una forma u otra, a mi formación personal y académica.

En primer lugar, quiero agradecer a mis padres, por su apoyo incondicional, su esfuerzo constante y la confianza que siempre han depositado en mí a lo largo de mi vida. Su respaldo ha sido fundamental para poder alcanzar muchos objetivos en mi vida.

Por otro lado, deseo agradecer a mis compañeros, con quienes he compartido estos años de formación, por el apoyo mutuo, la ayuda prestada en los momentos más exigentes y por haber contribuido a hacer este camino más llevadero.

Por último, quiero expresar un agradecimiento especial a mis tutores de TFG, por su orientación, dedicación y disponibilidad a lo largo de todo el proceso. Su conocimiento, implicación y consejos han sido clave para el desarrollo de este trabajo, muchas gracias Leticia e Iván. Asimismo, hago extensivo este agradecimiento al conjunto del profesorado, por la formación recibida y por haber contribuido a mi desarrollo académico y personal.

CONTENIDO

Contenido	6
Índice de Figuras	8
Índice de Tablas.....	10
1 Introducción y objetivos	11
1.1 Contexto	11
1.2 Objetivos y estructura	11
2 Estado del arte	13
2.1 Captura y almacenamiento de dióxido de carbono (CO ₂).....	13
2.1.1 Problemática ambiental y necesidad de tecnologías de captura de CO ₂	13
2.1.2 Principales técnicas de captura de CO ₂	14
2.1.3 Papel de los materiales adsorbentes en la captura sostenible de CO ₂	16
2.2 Zeolitas como materiales adsorbentes para la captura de CO ₂	16
2.2.1 Estructura y propiedades.....	16
2.3 <i>Machine Learning</i> (ML) como herramienta de predicción de la adsorción de CO ₂ en zeolitas.	27
2.3.1 Introducción al aprendizaje automático (Machine Learning, ML).....	27
2.3.2 Modelos de regresión utilizados	27
2.3.3 Ventajas del Machine Learning frente a métodos tradicionales	31
3 Desarrollo del TFG.....	32
3.1 Obtención y tratamiento de datos web	32
3.1.1 Estrategia de búsqueda bibliográfica	32
3.1.2 Criterios de selección y validación de las fuentes	33
3.2 Explicación del código de <i>Machine Learning</i>	34
4 Resultados y discusión	45
4.1 Fuentes de datos usadas para los modelos	45
4.2 Elección del modelo	53
4.2.1 Zeolita calcinada	53
4.2.2 Zeolita modificada por intercambio iónico.....	54
4.2.3 Zeolita 13X	55
4.2.4 Zeolita 4A	56
4.2.5 Zeolita 5A	57
4.3 Predicción de condiciones óptimas	59
4.3.1 Zeolita Calcinada	59
4.3.2 Zeolita modificada por intercambio iónico.....	62

4.3.3 Zeolita 13X	65
4.3.4 Zeolita 4A	68
4.3.5 Zeolita 5A	71
5 Conclusiones y líneas futuras	76
5.1 Conclusiones generales	76
5.2 Resultado de objetivos	76
5.3 Líneas futuras	77
6 Bibliografía.....	78
Anexo I: Implicaciones Sociales, Económicas y Ambientales	83
Anexo II: Reflexiones Éticas y Sociales	84
Anexo III: Declaración de uso de herramientas de inteligencia artificial generativa.....	85

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2-1 Evolución de las emisiones globales de CO ₂ [5]	14
Figura 2-2 Adsorción de CO ₂ a partir de zeolita [3]	15
Figura 2-3 Proceso de separación por membrana [1]	15
Figura 2-4 Manipulación de muestra en ambiente criogénico [1]	15
Figura 2-5 Proceso de lavado de agua [4]	16
Figura 2-6 Zeolita 13-X [10]	18
Figura 2-7 Zeolita 4-A en polvo [11]	19
Figura 2-8 Zeolita 5-A [12]	19
Figura 2-9 Carbón activo [16]	23
Figura 2-10 Metal Organic Framework [17]	24
Figura 2-11 Gel de sílice	25
Figura 2-12 Alúmina activada [19]	25
Figura 2-13 Regresión lineal	28
Figura 2-14 Regresión Logística	28
Figura 2-15 Algoritmos basados en vecinos	29
Figura 2-16 Ejemplo de árbol de decisión	29
Figura 2-17 Algoritmos de Máquinas de Vectores de Soporte	30
Figura 2-18 Algoritmos probabilísticos	30
Figura 3-1 Importación de librerías	35
Figura 3-2 Carga de datos	35
Figura 3-3 Preprocesamiento de datos	36
Figura 3-4 Definición de modelos	37
Figura 3-5 Entrenamiento y evaluación	38
Figura 3-6 Resumen Final	38
Figura 3-7 Preparación y selección del modelo	39
Figura 3-8 Gráfica Predicho vs Real (2D)	39
Figura 3-9 Superficie de respuesta (3D)	40
Figura 3-10 Obtención de datos para la representación 3D del error absoluto	41
Figura 3-11 Cálculo de error y creación de malla	42
Figura 3-12 Interpolación de la gráfica de errores	42
Figura 3-13 Final del gráfico de errores	43
Figura 3-14 Interpretación estadística	44
Figura 4-1 Ranking modelos según R ²	59
Figura 4-2 Gráfica rectilínea de la zeolita calcinada	60

Figura 4-3 Gráfica 3D error absoluto calcinada	60
Figura 4-4 Análisis de dispersión de la zeolita calcinada.....	61
Figura 4-5 Adsorción en 3D de la zeolita calcinada.....	62
Figura 4-6 Gráfica rectilínea de la zeolita modificada por intercambio iónico.....	63
Figura 4-7 Representación error absoluto modificación por intercambio iónico.....	64
Figura 4-8 Análisis de dispersión de la zeolita modificada por intercambio iónico	64
Figura 4-9 Resultado adsorción 3D de modificada iónicamente	65
Figura 4-10 Gráfica rectilínea de la zeolita 13X	66
Figura 4-11 Error absoluto de zeolita 13X.....	67
Figura 4-12 Análisis de dispersión de la zeolita 13X.....	67
Figura 4-13 adsorción en 3D zeolita 13X	68
Figura 4-14 Gráfica rectilínea de la zeolita 4A	68
Figura 4-15 Error absoluto de zeolita 4A (Temperatura fija).....	69
Figura 4-16 Error absoluto de zeolita 4A (Presión fija)	69
Figura 4-17 Error absoluto de zeolita 4A (Caudal fijo)	70
Figura 4-18 Análisis de dispersión de la zeolita 4A.....	70
Figura 4-19 Representación de la adsorción en 3D fijando temperatura y presión de la zeolita 4A	71
Figura 4-20 Gráfica rectilínea de la zeolita 5A	72
Figura 4-21 Error absoluto de zeolita 5A (Temperatura fija).....	72
Figura 4-22 Error absoluto de zeolita 5A (Presión fija)	73
Figura 4-23 Error absoluto de zeolita 5A (Caudal fijo)	73
Figura 4-24 Análisis de dispersión de la zeolita 5A.....	74
Figura 4-25 Representación 3D fijando presión y temperatura de la zeolita 5A	74

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1 Comparación entre aminas líquidas y zeolitas.....	24
Tabla 4-1 Tabla de zeolitas sintéticas.....	49
Tabla 4-2 Tabla de zeolitas modificadas por intercambio iónico.....	51
Tabla 4-3 Tabla de zeolitas calcinadas.....	52
Tabla 4-4 Zeolita calcinada (50).....	53
Tabla 4-5 Zeolita calcinada (20).....	53
Tabla 4-6 Zeolita calcinada (10).....	53
Tabla 4-7 Zeolita modificada por intercambio iónico (50).....	54
Tabla 4-8 Zeolita modificada por intercambio iónico (20).....	54
Tabla 4-9 Zeolita modificada por intercambio iónico (10).....	54
Tabla 4-10 Zeolita 13X (50).....	55
Tabla 4-11 Zeolita 13X (20).....	55
Tabla 4-12 Zeolita 13X (10).....	56
Tabla 4-13 Zeolita 4A (50).....	56
Tabla 4-14 Zeolita 4A (20).....	56
Tabla 4-15 Zeolita 4A (10).....	57
Tabla 4-16 Zeolita 5A (50).....	57
Tabla 4-17 Zeolita 5A (20).....	57
Tabla 4-18 Zeolita 5A (10).....	58

1 INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 Contexto

El cambio climático constituye uno de los principales desafíos a los que se enfrenta la sociedad actual, siendo el aumento de la concentración de dióxido de carbono (CO₂) en la atmósfera uno de los factores más determinantes. Las emisiones derivadas de la actividad industrial y del uso de combustibles fósiles han provocado un incremento sostenido de este gas de efecto invernadero, generando impactos significativos tanto a nivel ambiental como económico y social.

En este contexto, el desarrollo de tecnologías eficientes para la captura y almacenamiento de CO₂ resulta fundamental para mitigar sus efectos. Entre las distintas alternativas existentes, los procesos de adsorción en materiales sólidos han despertado un gran interés debido a su menor consumo energético y su mayor sostenibilidad en comparación con técnicas tradicionales como la absorción química. En particular, las zeolitas destacan como materiales adsorbentes por su elevada superficie específica, su estabilidad estructural y su alta selectividad hacia el CO₂.

No obstante, la optimización de estos procesos presenta una elevada complejidad debido a la gran cantidad de variables que influyen en la capacidad de adsorción, como la temperatura, la presión o las características del material. En este sentido, el uso de técnicas de *Machine Learning* se plantea como una herramienta eficaz para modelar y predecir el comportamiento del sistema, permitiendo analizar relaciones no lineales y reducir la necesidad de ensayos experimentales.

1.2 Objetivos y estructura

El presente Trabajo de Fin de Grado tiene como objetivo principal el estudio y la predicción de la capacidad de adsorción de dióxido de carbono (CO₂) en zeolitas mediante el uso de modelos de *Machine Learning*, con el fin de aportar una herramienta útil para la optimización de procesos de captura de carbono.

Para alcanzar este objetivo general, se plantean los siguientes objetivos específicos:

- 1) En primer lugar, analizar el estado del arte relacionado con las tecnologías de captura de CO₂, prestando especial atención a los procesos de adsorción en materiales sólidos y, en particular, a las zeolitas como adsorbentes. Este análisis permite comprender tanto la problemática ambiental asociada al CO₂ como las ventajas y limitaciones de los distintos métodos existentes.
- 2) En segundo lugar, estudiar en detalle las propiedades físico-químicas de las zeolitas, incluyendo su estructura, clasificación, mecanismos de adsorción y comportamiento bajo

diferentes condiciones de operación como la temperatura y la presión, variables clave en el proceso de captura.

- 3) Otro de los objetivos fundamentales consiste en la recopilación, análisis y tratamiento de datos experimentales procedentes de la literatura científica, asegurando su fiabilidad mediante criterios de selección rigurosos y su posterior homogeneización para permitir su uso en modelos predictivos.
- 4) Asimismo, se plantea como objetivo el desarrollo e implementación de distintos modelos de *Machine Learning* orientados a la predicción de la cantidad de CO₂ adsorbido en función de variables operativas como la temperatura, la presión y el caudal de entrada. Para ello, se evalúan diferentes algoritmos de regresión, comparando su rendimiento mediante métricas de error en la estimación de la cantidad de adsorción de CO₂ real que permitan determinar el modelo más adecuado.
- 5) Finalmente, se establece como objetivo la interpretación de los resultados obtenidos del modelo más adecuado mediante fundamentos estadísticos, con el propósito de identificar condiciones óptimas de operación, en qué rangos de los parámetros de entrada pierde más precisión y posible justificación, y evaluar el potencial del *Machine Learning* como herramienta en el ámbito de la ingeniería de procesos aplicada a la captura de carbono.

La memoria del presente trabajo se estructura de la siguiente manera: en el capítulo 2 se presenta el estado del arte, en el capítulo 3 se describe el desarrollo metodológico, en el capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos y su discusión, y en el capítulo 5 se recogen las conclusiones y posibles líneas futuras.

2 ESTADO DEL ARTE

2.1 Captura y almacenamiento de dióxido de carbono (CO₂)

2.1.1 Problemática ambiental y necesidad de tecnologías de captura de CO₂

El cambio climático representa uno de los desafíos más críticos de la actualidad, con impactos profundos en el medio ambiente, la economía y la salud global. El aumento acelerado de la temperatura media del planeta es provocado por la creciente concentración de gases de efecto invernadero (GEI), entre los cuales el dióxido de carbono (CO₂) es el principal responsable, representando aproximadamente el 81 % de la composición total de estos gases. Las emisiones antropogénicas provienen mayoritariamente de la quema de combustibles fósiles en plantas de energía (responsables del 40 % de las emisiones), así como de sectores industriales como el cementero y siderúrgico, el transporte y la deforestación [1] [2].

Las consecuencias de este fenómeno incluyen la alteración de patrones climáticos, fenómenos meteorológicos extremos y la acidificación de los océanos debido a la formación de ácido carbónico al disolverse el CO₂ en el agua, lo que pone en riesgo la biodiversidad marina. Ante esta situación, el Acuerdo de París (2015) estableció el compromiso internacional de limitar el incremento de la temperatura global a menos de 2 °C respecto a los niveles preindustriales. Para lograr este objetivo, es imperativo implementar tecnologías de captura y almacenamiento de carbono (CCS- *Carbon Capture and Storage*) que atrapen el gas antes de su liberación a la atmósfera. Además, en el ámbito industrial, la eliminación del CO₂ es una necesidad técnica, ya que su presencia en el gas natural causa corrosión y daños en las tuberías y equipos debido a su naturaleza ácida [2].

La Figura 2-1 representa la evolución histórica de las emisiones globales de dióxido de carbono (CO₂) desde el año 1960 hasta 2020. Estas emisiones, expresadas en gigatoneladas (Gt), reflejan la creciente demanda energética mundial, la industrialización y el uso continuado de combustibles fósiles. Se observa una tendencia claramente ascendente, con un incremento sostenido década tras década, lo que pone de manifiesto el papel central del CO₂ en la crisis climática actual [1].

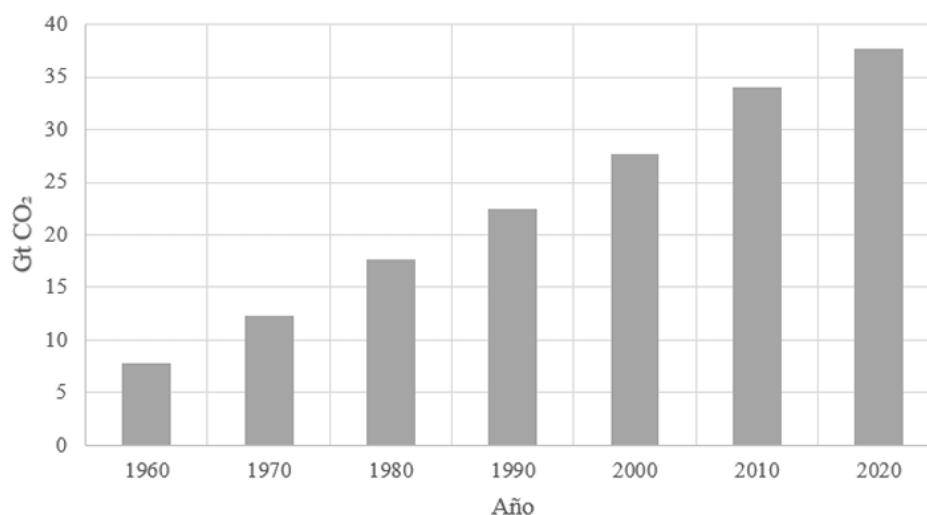


Figura 2-1 Evolución de las emisiones globales de CO₂ [5]

2.1.2 Principales técnicas de captura de CO₂.

Existen diversas categorías tecnológicas para la mitigación de emisiones de CO₂, las cuales se seleccionan en función de la eficiencia, los costes operativos y la aplicación industrial específica [1]

2.1.2.1 Absorción química y física

La absorción química es actualmente la tecnología más extendida a escala industrial, especialmente en procesos de postcombustión. Este método utiliza solventes líquidos como las aminas (MEA, DEA o MDEA), que reaccionan químicamente con el CO₂ para retenerlo. Aunque permite eficiencias de captura superiores al 85-90 %, presenta desventajas críticas como un alto consumo energético para la regeneración del solvente, problemas de corrosión en los equipos y riesgos para la salud humana y el medio ambiente. Por su parte, la absorción física se basa en la solubilidad del gas en el solvente bajo condiciones de presión, sin una reacción química de por medio [1] [2].

2.1.2.2 Adsorción en materiales sólidos

La adsorción consiste en la fijación de moléculas de CO₂ sobre la superficie de un material sólido poroso. Este proceso puede ser físico, mediante fuerzas de Van der Waals, o químico, a través de enlaces covalentes. Entre los adsorbentes más utilizados destacan el carbón activo, los tamices moleculares como las zeolitas, los MOF (*Metal-Organic Frameworks*) y el gel de sílice. La adsorción se considera una alternativa altamente eficiente y sostenible frente a la absorción química debido a su menor consumo energético, simplicidad operacional y la facilidad con la que el material puede ser regenerado mediante cambios de presión (*PSA-Pressure Swing Adsorption*) o temperatura (*TSA-Temperature Swing Adsorption*) [1] [3].

La Figura 2-2 muestra un esquema sencillo y visual de la adsorción en cuestión del CO₂.

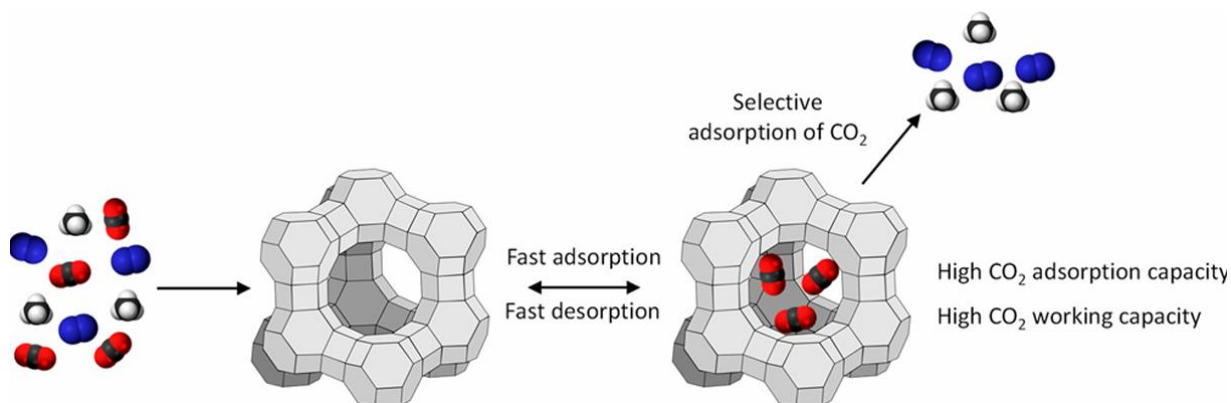


Figura 2-2 Adsorción de CO₂ a partir de zeolita [3]

2.1.2.3 Otras tecnologías

- Membranas: Funcionan como barreras semipermeables que separan los gases basándose en diferencias de tamaño molecular y solubilidad. Destacan por su diseño compacto y facilidad de mantenimiento, aunque suelen tener una menor selectividad que otros métodos. En la Figura 2-3 se observa la separación de gases mediante membranas [1].

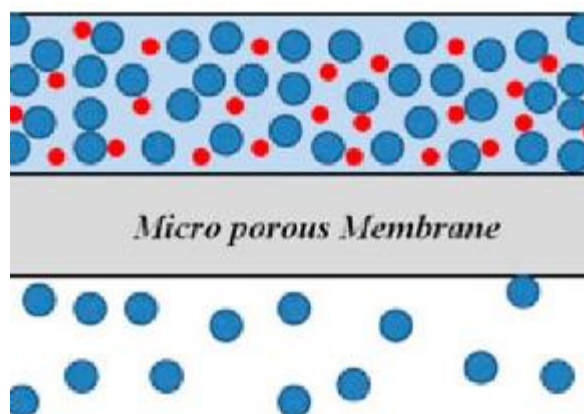


Figura 2-3 Proceso de separación por membrana [1]



Figura 2-4 Manipulación de muestra en ambiente criogénico [1]

- Separación Criogénica: Utiliza temperaturas extremadamente bajas (por debajo de -200 °C) para licuar el CO₂ y separarlo de la mezcla gaseosa. Es útil para obtener CO₂ de alta pureza, pero su

implementación es limitada por su elevadísimo coste energético [1]. En la Figura 2-4 se muestra una separación criogénica.

- **Procesos Biológicos y Lavadores de Agua:** Incluyen la captura mediante organismos vivos o sistemas de limpieza por agua, aunque su aplicación a gran escala industrial es menos común que las técnicas anteriores [2]. En la Figura 2-5 se aprecia un esquema del proceso de lavado de agua.



Figura 2-5 Proceso de lavado de agua [4]

2.1.3 Papel de los materiales adsorbentes en la captura sostenible de CO₂

Los materiales adsorbentes juegan un rol fundamental en la transición hacia soluciones tecnológicas más limpias y económicas. En particular, las zeolitas han surgido como candidatas excepcionales debido a su estructura porosa altamente ordenada, alta superficie específica y estabilidad térmica y química. Su naturaleza cristalina y la presencia de cationes compensadores permiten una adsorción selectiva de CO₂ frente a otros gases como el metano o el nitrógeno, incluso a bajas presiones [1].

Desde el punto de vista de la sostenibilidad, la adsorción en sólidos contribuye directamente a los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), específicamente al ODS 13 (Acción por el clima). Al ser materiales abundantes y a menudo de origen natural, las zeolitas reducen la necesidad de adsorbentes sintéticos costosos y permiten procesos de economía circular, ya que pueden reutilizarse en múltiples ciclos de adsorción-desorción sin perder eficiencia significativa. Económicamente, esta capacidad de regeneración disminuye los costes operativos a largo plazo, posicionando a los materiales adsorbentes como una de las opciones más competitivas para la descarbonización de los sectores energético y químico [1] [2].

2.2 Zeolitas como materiales adsorbentes para la captura de CO₂

2.2.1 Estructura y propiedades

Las zeolitas son materiales cristalinos con una estructura microporosa que las convierte en excelentes adsorbentes para la captura y separación de CO₂. Su composición química está basada en una red tridimensional de tetraedros de silicio (SiO₄) y aluminio (AlO₄) interconectados a través de átomos de oxígeno. Esta estructura genera una serie de cavidades y canales de tamaño molecular que permiten la adsorción selectiva de diferentes gases. La relación entre silicio y aluminio influye en su acidez y capacidad de adsorción. En general, una menor relación Si/Al favorece la atracción de CO₂ debido a la

presencia de cationes compensadores, como sodio, potasio o calcio, que crean sitios activos con alta afinidad por este gas [1].

2.2.2 Clasificación de las zeolitas

Las zeolitas se dividen primordialmente en naturales y sintéticas. Las naturales son minerales abundantes y de bajo coste, aunque suelen presentar impurezas y una estructura menos uniforme. Por el contrario, las sintéticas se fabrican industrialmente para obtener una alta pureza y un tamaño de partícula homogéneo, lo que permite un control más preciso de sus propiedades adsorbentes [2] [3].

2.2.2.1 Zeolitas naturales

El rendimiento adsorbente de las zeolitas depende de manera significativa del tratamiento previo aplicado, ya que este determina la liberación de la porosidad y la activación de los sitios de adsorción disponibles [5]. En función del estado del material, pueden distinguirse los siguientes casos:

Zeolitas sin calcinar:

En su estado natural, las zeolitas contienen agua intracrystalina, humedad superficial y, en algunos casos, restos orgánicos que bloquean parcial o totalmente los microporos. Como consecuencia, la capacidad de adsorción de CO₂ es muy limitada, ya que las moléculas del gas no pueden acceder de forma efectiva a los sitios activos internos del material [5] [4].

Zeolitas calcinadas a diferentes temperaturas:

El tratamiento térmico constituye una etapa esencial para la activación del adsorbente, y su efecto depende en gran medida de la temperatura aplicada [4]:

Bajas temperaturas (≈ 200 °C):

A estas temperaturas se elimina principalmente la humedad superficial; sin embargo, la deshidratación es incompleta y los poros permanecen parcialmente bloqueados. En consecuencia, la activación de los sitios de adsorción es limitada y la capacidad de captura de CO₂ se mantiene reducida [1] [6].

Temperatura óptima (350–400 °C):

En este intervalo se alcanza la máxima capacidad de adsorción, con valores que pueden llegar hasta 18 mg/g o aproximadamente 5.2 mmol/g, según la fuente considerada. La calcinación en este rango permite eliminar el agua estructural y los gases atrapados sin dañar la red cristalina, mejorando de forma significativa la accesibilidad a los microporos [7] [5].

Altas temperaturas (> 600 °C):

Superar este umbral provoca un deterioro progresivo de la estructura cristalina. A partir de aproximadamente 650 °C se observa sinterización y pérdida de cristalinidad, mientras que a temperaturas cercanas a 800 °C el material puede transformarse en fases amorfas e inertes. Este proceso conlleva una reducción drástica de la porosidad y de la superficie específica del adsorbente [1] [6] [4].

Zeolitas modificadas por intercambio iónico:

Este tratamiento consiste en sustituir los cationes originales del material (como Na⁺ o K⁺) por otros con mayor afinidad hacia el CO₂. La introducción de cationes de litio (Li⁺) puede incrementar la capacidad de captura hasta aproximadamente 4.18 veces, debido a su fuerte interacción electrostática con el momento cuadrupolar del CO₂. Otros cationes, como Ca²⁺ y Mg²⁺, también mejoran la afinidad química del material, aunque un intercambio excesivo puede reducir el volumen de poro disponible y limitar la capacidad adsorbente si no se controla adecuadamente [8] [3] [9].

2.2.2.2 Zeolitas sintéticas

Las zeolitas sintéticas de tipo A y X han sido específicamente diseñadas para maximizar tanto la selectividad como la capacidad de trabajo en procesos de separación de gases, especialmente en la captura de CO₂ a bajas presiones. Sus propiedades adsorbentes dependen en gran medida de la estructura cristalina y del tipo de catión compensador presente en la red [8].

Zeolita 13X (faujasita NaX):

La zeolita 13X es un material rico en aluminio, lo que se traduce en una elevada densidad de carga negativa en la red cristalina y, en consecuencia, en una alta concentración de cationes de sodio (Na⁺) como especies compensadoras. Estos cationes generan un intenso campo eléctrico dentro de los microporos, que interactúa fuertemente con el momento cuadrupolar del CO₂. Como resultado, la 13X se sitúa entre los adsorbentes con mayor capacidad de captura a bajas presiones, alcanzando valores de adsorción de hasta aproximadamente 6.3 mmol/g a 1 bar [8]. En la Figura 2-6 se aprecia una imagen de la Zeolita 13-X.



Figura 2-6 Zeolita 13-X [10]

Zeolita 4A (NaA):

La zeolita 4A corresponde a la forma sódica de la zeolita tipo A y se caracteriza por la presencia de cationes Na⁺ distribuidos en posiciones que no bloquean de manera significativa las ventanas de los microporos. Esta disposición facilita la difusión de moléculas pequeñas, como el CO₂, hacia el interior del cristal, lo que se traduce en una cinética de adsorción rápida. Aunque su capacidad total puede ser inferior a la de la 13X, la 4A destaca por su rapidez de respuesta y estabilidad operativa [8]. En la Figura 2-7 se aprecia una imagen de la Zeolita 4A.



Figura 2-7 Zeolita 4-A en polvo [11]

Zeolita 5A (CaA):

La zeolita 5A se obtiene a partir de la zeolita A mediante un proceso de intercambio iónico en el que los cationes Na⁺ son reemplazados por cationes de calcio (Ca²⁺). Al tratarse de un catión bivalente, es necesaria una menor cantidad de cationes para compensar la carga negativa de la red cristalina, lo que da lugar a canales menos obstruidos que en la zeolita 4A. Esta característica mejora tanto la accesibilidad del CO₂ al volumen interno del cristal como la capacidad de adsorción, especialmente en aplicaciones donde se requiere un compromiso entre capacidad y difusión [8]. En la Figura 2-8 se aprecia una imagen de la Zeolita 5A.



Figura 2-8 Zeolita 5-A [12]

2.2.3 Mecanismos de adsorción de CO₂ en zeolitas

La captura de dióxido de carbono (CO₂) mediante zeolitas se fundamenta en la interacción entre las moléculas del gas, que actúan como adsorbato, y la superficie porosa del material sólido, denominado adsorbente. Este proceso tiene lugar mayoritariamente a través de mecanismos de fisisorción, dominados por fuerzas de *Van der Waals* e interacciones electrostáticas débiles. Las entalpías de adsorción asociadas a este tipo de interacción suelen situarse en el intervalo de -25 a -50 kJ/mol, lo que permite

una regeneración relativamente sencilla del material adsorbente mediante cambios moderados de presión o temperatura.

No obstante, en función de la estructura cristalina, el tamaño de poro y la composición química de la zeolita, pueden distinguirse diferentes mecanismos de separación del CO₂. De forma general, estos mecanismos se clasifican en separación por equilibrio, separación cinética, tamizado molecular y mecanismos específicos asociados a la presencia de cationes en la estructura.

A. Mecanismos basados en interacciones electrostáticas (separación por equilibrio)

Este es el mecanismo predominante en zeolitas de poro medio y grande, como las zeolitas de tipo X e Y. Aunque el CO₂ es una molécula globalmente no polar, presenta un elevado momento cuadrupolar y una alta polarizabilidad en comparación con otros gases habituales como el metano (CH₄) o el nitrógeno (N₂). Estas características favorecen una interacción intensa entre el CO₂ y el campo eléctrico generado por los cationes extra-reticulares y los átomos de oxígeno de la red cristalina de la zeolita.

Dentro de este mecanismo se han identificado diversas configuraciones de adsorción:

- Interacción con un solo catión, en la que uno de los átomos de oxígeno de la molécula de CO₂ se coordina directamente con un catión metálico presente en la estructura de la zeolita.
- Mecanismo de puente (bridging), donde ambos átomos de oxígeno del CO₂ interactúan simultáneamente con dos cationes distintos, dando lugar a un complejo de adsorción de geometría lineal o ligeramente curvada. Este tipo de interacción es frecuente en zeolitas intercambiadas con cationes como K⁺ o en estructuras tipo A (LTA).
- Formación de precursores de carbonato, en la que uno de los átomos de oxígeno del CO₂ se une a un catión, mientras que el átomo de carbono interactúa con un oxígeno de la red zeolítica, originando una especie química intermedia de mayor estabilidad [8].

B. Separación cinética y tamizado molecular

En zeolitas de poro pequeño, como las de tipo LTA, CHA o RHO, el tamaño de los canales y cavidades es comparable al diámetro cinético de las moléculas gaseosas, lo que permite que la separación se base en diferencias de tamaño y velocidad de difusión.

- Separación cinética: se apoya en el hecho de que el CO₂ posee un diámetro cinético menor (aproximadamente 3,30 Å (angstrom)) que el nitrógeno (3,64 Å) o el metano (3,80 Å). Como consecuencia, el CO₂ puede difundirse más rápidamente a través de los poros estrechos de la zeolita, mientras que las moléculas de mayor tamaño lo hacen de forma más lenta o quedan parcialmente excluidas.
- Tamizado molecular: representa el caso límite de la separación por tamaño. En este escenario, los poros de la zeolita son lo suficientemente grandes para permitir el paso del CO₂, pero demasiado pequeños para admitir moléculas de mayor diámetro, como el CH₄, alcanzándose así una selectividad prácticamente total [8].

C. Mecanismo de “trampa” o trapdoor

Este mecanismo particular se ha observado en zeolitas como la chabazita (CHA) o la zeolita RHO con bajos valores de la relación Si/Al y la presencia de cationes de gran tamaño, como K⁺ o Cs⁺, situados en las aberturas de los poros. En estas condiciones, los cationes actúan como verdaderas “puertas” que bloquean físicamente el acceso a las cavidades internas para la mayoría de los gases.

Sin embargo, debido a la fuerte interacción electrostática entre el CO₂ y estos cationes, la molécula de CO₂ es capaz de desplazar temporalmente al catión de su posición de equilibrio, permitiendo su entrada en el interior del poro. Otros gases, como el N₂ o el CH₄, no generan una interacción suficientemente intensa como para provocar dicho desplazamiento y, por tanto, quedan excluidos del proceso de adsorción [8].

D. Influencia de la heterogeneidad de la superficie

Las zeolitas presentan una superficie energéticamente heterogénea como consecuencia de la distribución no uniforme de los cationes en su estructura. Durante las primeras etapas del proceso de adsorción, el CO₂ ocupa preferentemente los sitios de mayor energía, asociados a los cationes, lo que se traduce en valores elevados del calor de adsorción. A medida que estos sitios se saturan, las moléculas de CO₂ comienzan a interactuar con los oxígenos de la red cristalina, considerados sitios de menor energía.

Este cambio progresivo en los sitios de adsorción provoca una disminución gradual de la entalpía de adsorción, hasta alcanzar valores similares a los observados en zeolitas de carácter puramente silíceo, donde las interacciones electrostáticas son menos intensas [9] [8].

2.2.4 Influencia de las condiciones de operación

El desempeño de las zeolitas en los procesos de captura de CO₂ no está determinado únicamente por sus características intrínsecas, como la estructura cristalina o la composición química, sino que depende en gran medida de las condiciones bajo las cuales se lleva a cabo el proceso. Variables operativas como la temperatura y la presión ejercen una influencia decisiva sobre la capacidad de adsorción, la selectividad frente a otros gases y la eficiencia energética global del sistema. Por este motivo, la correcta elección y optimización de estos parámetros resulta fundamental para maximizar el rendimiento de los sistemas de captura basados en zeolitas [13] [1].

2.2.4.1 Efecto de la temperatura

La temperatura constituye uno de los factores más relevantes, ya que afecta tanto al equilibrio termodinámico como a la cinética del proceso de adsorción. En el caso de las zeolitas, la captura de CO₂ se produce mayoritariamente mediante fisisorción, un proceso de naturaleza exotérmica. [13] [8] En consecuencia, la influencia de la temperatura puede analizarse a través de los siguientes aspectos principales:

- Relación inversa entre temperatura y capacidad de adsorción:

Debido al carácter exotérmico de la fisisorción, un aumento de la temperatura provoca una disminución de la capacidad de adsorción del CO₂. A temperaturas más elevadas, las moléculas de gas adquieren mayor energía cinética, lo que facilita que superen las fuerzas de atracción existentes entre el adsorbato y la superficie del adsorbente, favoreciendo su retorno a la fase gaseosa. Diversos estudios han puesto de manifiesto que la capacidad máxima de captura de CO₂ en determinadas zeolitas naturales se alcanza a temperaturas cercanas a 0 °C, con valores de hasta 5,2 mmol/g, reduciéndose de forma notable al incrementarse la temperatura hasta 25 °C [7] [3].

- Afinidad y selectividad:

Las zeolitas muestran un comportamiento óptimo dentro de un intervalo de temperaturas comprendido aproximadamente entre 25 °C y 80 °C. Cuando se superan estos valores, la afinidad del material por el CO₂ disminuye y, como consecuencia, también se ve afectada la selectividad frente a otros gases presentes en la mezcla, como el nitrógeno (N₂) o el metano (CH₄) [1].

- Mecanismos dependientes de la temperatura:

En ciertas zeolitas de poro pequeño, como la chabazita o la zeolita RHO, la temperatura influye directamente en mecanismos específicos de adsorción, como el denominado efecto de “trampa molecular” o trapdoor. A bajas temperaturas, los cationes presentes en la estructura pueden obstruir parcialmente los poros, impidiendo la entrada de las moléculas de gas. Sin embargo, al aumentar la temperatura, el movimiento térmico de estos cationes o su interacción selectiva con el CO₂ favorece la apertura de la “puerta”, permitiendo el acceso del gas al interior de la estructura porosa [8].

- Regeneración del adsorbente (desorción):

Aunque las bajas temperaturas son favorables para la captura de CO₂, las temperaturas elevadas desempeñan un papel clave en la regeneración del material adsorbente [13]. En los sistemas de adsorción por oscilación de temperatura (TSA), se aplica calor para debilitar o romper las interacciones entre el adsorbente y el adsorbato, facilitando la desorción del CO₂. En función del tipo de zeolita y de la composición del gas tratado, las temperaturas de regeneración pueden variar considerablemente, situándose generalmente entre los 40 °C en aplicaciones como el biogás y hasta los 350 °C cuando se requiere una desorción completa [5].

2.2.4.2 Efecto de la presión

La presión actúa como la principal fuerza impulsora del proceso de adsorción, condicionando la cantidad de gas que puede ser retenida en la estructura microporosa de la zeolita:

- Incremento de la capacidad con la presión:

La cantidad de CO₂ adsorbido aumenta a medida que se incrementa la presión, hasta alcanzar un punto de saturación [3]. Una presión más elevada intensifica el gradiente de concentración entre la fase gaseosa y la fase sólida, lo que incrementa la probabilidad de colisión de las moléculas de CO₂ con los sitios activos del adsorbente y, por tanto, su fijación en la superficie [13].

- Comportamiento isotérmico de Tipo I:

Las zeolitas suelen presentar isothermas de adsorción de Tipo I, caracterizadas por un aumento pronunciado de la capacidad de adsorción a bajas presiones, donde predominan las interacciones electrostáticas fuertes. A presiones más elevadas, la isoterma tiende a estabilizarse en una meseta, indicando la saturación progresiva de los microporos y de los sitios activos disponibles [14] [8].

- Selectividad y efectos de saturación:

Cuando se trabaja a presiones muy altas, puede observarse una ligera disminución de la selectividad hacia el CO₂. Una vez ocupados los sitios de mayor afinidad, otros gases presentes en la corriente pueden comenzar a adsorberse en los espacios restantes mediante un mecanismo de simple llenado de poros [15].

- Aplicación en procesos PSA:

Este comportamiento constituye la base de los procesos de Adsorción por Oscilación de Presión (PSA) [8]. En este tipo de sistemas, el CO₂ se adsorbe a presiones elevadas y se libera posteriormente mediante una reducción de la presión, que puede llegar hasta condiciones de vacío o presión atmosférica. Este ciclo permite la regeneración del adsorbente de manera eficiente y con un consumo energético relativamente bajo, al no requerir grandes aportes de calor. Se ha comprobado que operar en rangos de presión de hasta 10–30 bar permite alcanzar capacidades de carga elevadas; no obstante, el diseño industrial debe encontrar un equilibrio adecuado entre este beneficio y el coste energético asociado a la compresión del gas [2] [3].

2.2.5 Comparación de zeolitas con otros materiales adsorbentes

En la actualidad, la investigación en materiales sólidos destinados a la captura de CO₂ se orienta principalmente hacia tres grandes familias de adsorbentes: los materiales basados en carbono, las zeolitas y los MOF (Metal-Organic Frameworks). Cada uno de estos grupos presenta ventajas específicas y limitaciones técnicas que dependen tanto de las condiciones de operación —como la presión, la temperatura o la presencia de humedad— como de los costes asociados a su producción y aplicación industrial [8] [15].

A. Materiales basados en carbono (carbón activo)

El carbón activo constituye uno de los principales competidores de las zeolitas, debido fundamentalmente a su bajo coste, su amplia disponibilidad comercial y su elevada estabilidad térmica.

Algunas de las ventajas son que, a diferencia de las zeolitas, los materiales carbonosos presentan un carácter hidrofóbico, lo que los hace poco sensibles a la humedad presente en las corrientes gaseosas. Esta propiedad resulta especialmente ventajosa en aplicaciones donde el secado previo del gas no es viable. Asimismo, a presiones muy elevadas (superiores a 1,0 MPa), el carbón activo puede alcanzar capacidades de saturación de CO₂ superiores a las de determinadas zeolitas, como la zeolita LiX.

No obstante, su principal limitación frente a las zeolitas radica en su menor afinidad y selectividad por el CO₂ a bajas presiones. Esto se debe a que las interacciones moleculares entre el CO₂ y la superficie del carbón activo son relativamente débiles. Mientras que las zeolitas suelen presentar isothermas de adsorción de Tipo I, caracterizadas por un incremento abrupto de la capacidad a bajas presiones, los materiales carbonosos requieren presiones significativamente más altas para alcanzar niveles de eficiencia comparables [14]. La Figura 2-9 muestra una imagen del carbón activo.



Figura 2-9 Carbón activo [16]

B. MOF (Metal-Organic Frameworks)

Los MOF representan una clase de materiales cristalinos avanzados que destacan por poseer superficies específicas extremadamente elevadas, generalmente comprendidas entre 1000 y 4000 m²/g, superando ampliamente los valores típicos de las zeolitas.

Estos materiales presentan algunas de las mayores capacidades de adsorción de CO₂ reportadas en la literatura, especialmente a altas presiones, alcanzando valores de hasta 33,5 mmol/g a 35 bar. Esta característica los convierte en candidatos muy atractivos desde un punto de vista teórico.

Sin embargo, los MOF presentan importantes limitaciones para su implementación industrial. Entre ellas destacan los elevados costes de síntesis y su reducida estabilidad hidrotérmica, lo que dificulta tanto su regeneración como su uso continuado en condiciones reales de operación. Además, en rangos de presión bajos (inferiores a 5 bar), las zeolitas suelen mostrar un rendimiento superior al de la mayoría de los MOF, debido a que la interacción electrostática entre los cationes de la zeolita y las moléculas de CO₂ es considerablemente más intensa que la que se produce en las estructuras de los MOF (*Metal Organic Framework*) convencionales [8]. La Figura 2-10 representa una imagen explicativa del MOF.

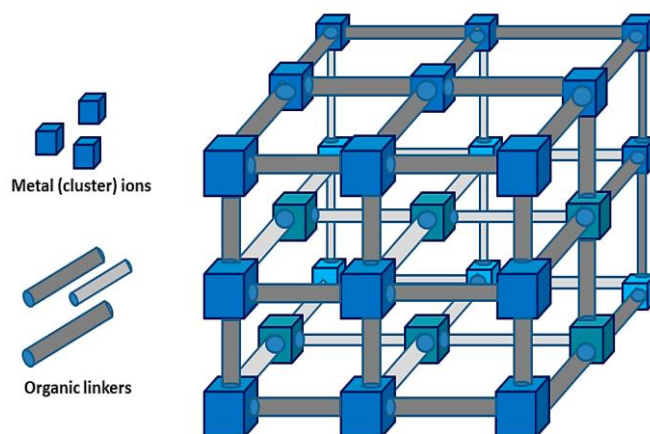


Figura 2-10 Metal Organic Framework [17]

C. Comparación con la absorción química (aminas líquidas)

En comparación con las tecnologías tradicionales de absorción química mediante aminas líquidas, como la monoetanolamina, las zeolitas se presentan como una alternativa más sostenible y operativamente ventajosa.

- Eficiencia energética:

La regeneración de solventes líquidos requiere un aporte energético elevado, ya que implica el calentamiento de grandes volúmenes de disolución para romper los enlaces químicos con el CO_2 . En contraste, la desorción en sistemas basados en zeolitas suele requerir un consumo energético menor [3].

- Operatividad:

Las aminas líquidas presentan problemas asociados a la corrosión de los equipos y a la generación de residuos líquidos potencialmente peligrosos. Por el contrario, las zeolitas son materiales químicamente inertes y térmicamente estables, lo que reduce el desgaste de los sistemas y elimina la necesidad de gestionar residuos líquidos contaminantes [1]. En la Tabla 2-1 la comparación con la absorción de las aminas líquidas.

Parámetro	Zeolitas (adsorción sólida)	Aminas líquidas (absorción química)
Consumo energético	Bajo	Alto
Regeneración	PSA / TSA	Calentamiento del solvente
Corrosión	Baja	Alta
Estabilidad	Alta	Media
Residuos líquidos	No	Sí

Tabla 2-1 Comparación entre aminas líquidas y zeolitas.

D. Otros adsorbentes (gel de sílice y alúmina activada)

- Gel de sílice:

Aunque el gel de sílice se emplea en diversos procesos de adsorción, su capacidad para la captura de CO_2 es, en general, inferior a la de las zeolitas. Por este motivo, su uso se orienta principalmente a la

deshidratación de corrientes gaseosas más que a la separación selectiva de CO₂ [14]. En la Figura 2-11 se aprecia el gel de sílice.



Figura 2-11 Gel de sílice

- Alúmina activada:

La alúmina activada destaca por su buena resistencia mecánica y su estabilidad estructural. Sin embargo, su afinidad específica por el CO₂ es menor si se compara con la fuerte interacción electrostática generada por los cationes presentes en zeolitas como la 13X o la Na-A [18].

En conclusión, las zeolitas sobresalen por ofrecer un equilibrio muy favorable entre una elevada capacidad de adsorción a bajas presiones, una alta selectividad cinética y un coste de producción relativamente reducido. Aunque otros materiales, como los MOF, presentan capacidades teóricas superiores y los materiales carbonosos muestran una mayor tolerancia a la humedad, la estabilidad estructural, la facilidad de regeneración y la madurez tecnológica consolidan a las zeolitas como uno de los materiales más prometedores para aplicaciones industriales, especialmente en procesos de purificación de hidrógeno y biogás [8]. En la Figura 2-12 se aprecia la alúmina activada.



Figura 2-12 Alúmina activada [19]

2.2.6 Limitaciones experimentales en la caracterización de zeolitas

La caracterización precisa de las zeolitas como materiales adsorbentes presenta una serie de desafíos intrínsecos que, si no se consideran adecuadamente, pueden conducir a interpretaciones erróneas tanto de su capacidad real de adsorción de CO₂ como de su estabilidad estructural a lo largo del tiempo. Estas

limitaciones afectan de forma directa a la fiabilidad de los resultados experimentales y, en consecuencia, a la extrapolación de los datos obtenidos hacia aplicaciones prácticas.

Uno de los factores más críticos en la evaluación del comportamiento adsorbente de las zeolitas es su elevada sensibilidad a la humedad. Las moléculas de agua compiten directamente con el CO_2 por los mismos sitios activos del material debido a su fuerte momento dipolar y a su elevada afinidad por las superficies aluminosilicáticas. Incluso la presencia de trazas mínimas de vapor de agua puede provocar una reducción drástica de la capacidad de adsorción. En este sentido, se ha documentado que la capacidad de una zeolita 13X puede disminuir desde valores cercanos a 4,6 mmol/g hasta aproximadamente 1,7 mmol/g con incrementos muy modestos de la humedad relativa. Este fenómeno se ve agravado en zeolitas con bajos ratios Si/Al, las cuales son especialmente vulnerables a procesos de hidrólisis, pudiendo experimentar una degradación progresiva de su estructura cristalina durante ensayos prolongados en ambientes húmedos [8].

Otro aspecto determinante es el tratamiento térmico aplicado durante la activación del material. La calcinación resulta esencial para eliminar moléculas de agua adsorbidas y residuos orgánicos, pero debe realizarse dentro de una ventana de temperatura cuidadosamente controlada. Cuando se superan ciertos umbrales —habitualmente por encima de 600–700 °C en zeolitas naturales o alrededor de 1073 K en zeolitas sintéticas— se produce el colapso parcial o total de la red porosa y la amorfización del cristal. Desde un punto de vista experimental, este fenómeno puede enmascarar la reactividad real del material, ya que la sinterización asociada al sobrecalentamiento incrementa el tamaño efectivo de partícula y reduce la superficie específica disponible, transformando un adsorbente potencialmente activo en un material prácticamente inerte [20].

A estas limitaciones se suman las propias restricciones inherentes a las técnicas de caracterización empleadas. En el análisis químico elemental, métodos ampliamente utilizados como la Fluorescencia de Rayos X (XRF) o la Espectroscopía de Energía Dispersiva (EDX) presentan dificultades significativas para la detección de elementos ligeros, en particular el litio (Li^+). Esta limitación complica la verificación del éxito de los procesos de intercambio iónico cuando se emplean cationes ligeros para modificar la afinidad del material hacia el CO_2 . De igual forma, la determinación de la superficie específica mediante el método BET, basada habitualmente en la adsorción de nitrógeno, puede infraestimar la superficie real accesible al gas, ya que muchos de los microporos internos de la estructura zeolítica (< 2 nm) solo son accesibles a presiones inferiores a las empleadas en los ensayos comerciales convencionales. Como consecuencia, la superficie efectiva disponible para la adsorción de CO_2 puede quedar subrepresentada en los resultados experimentales. Además, en muestras sometidas a calcinación, la cinética de adsorción de gases como el nitrógeno puede ser extremadamente lenta, llegando a requerir varias horas para alcanzar el equilibrio, lo que prolonga los tiempos de ensayo y aumenta el riesgo de deriva instrumental [21].

Desde el punto de vista del tratamiento de los datos, la aplicación de modelos matemáticos de isothermas y cinética introduce asimismo fuentes adicionales de incertidumbre. La linealización de los datos experimentales, especialmente en modelos cinéticos como el de pseudo-segundo orden, puede generar resultados inconsistentes dependiendo del método de ajuste empleado y tiende a ofrecer coeficientes de correlación artificialmente elevados cuando se incluyen numerosos puntos próximos al equilibrio. Por otra parte, modelos clásicos como el de Langmuir se basan en supuestos de homogeneidad energética de la superficie y adsorción monocapa, hipótesis que rara vez se cumplen en zeolitas naturales, caracterizadas por una marcada heterogeneidad estructural y química. Otros modelos, como el de Temkin o el de Dubinin–Radushkevich, presentan rangos de validez limitados, fallando al describir adecuadamente el comportamiento del sistema a concentraciones muy bajas o en el régimen de la ley de Henry [22].

Finalmente, una limitación operativa que a menudo se subestima en los estudios de caracterización inicial es la degradación del adsorbente tras múltiples ciclos de adsorción–desorción. Aunque las zeolitas son, en principio, materiales regenerables, su rendimiento puede disminuir progresivamente debido a

procesos de degradación mecánica, pérdida de cristalinidad o alteraciones químicas inducidas por los ciclos térmicos. La ausencia de una evaluación sistemática de la regenerabilidad puede conducir a una sobreestimación del potencial real del material en aplicaciones industriales a largo plazo

2.3 *Machine Learning* (ML) como herramienta de predicción de la adsorción de CO₂ en zeolitas.

2.3.1 *Introducción al aprendizaje automático (Machine Learning, ML)*

El aprendizaje automático (*Machine Learning*, ML) se ha consolidado en los últimos años como una herramienta eficaz para el análisis y la predicción de procesos complejos en ingeniería química y de materiales. En el ámbito de la captura de CO₂ mediante adsorción en zeolitas, el ML permite modelar relaciones no lineales entre variables experimentales como la temperatura, la presión, el tipo de zeolita, el tratamiento de esa zeolita y la capacidad de adsorción. A diferencia de los modelos clásicos basados en isothermas empíricas, los algoritmos de ML pueden entrenarse a partir de datos experimentales para predecir el comportamiento adsorptivo bajo nuevas condiciones de operación. Esto resulta especialmente útil cuando el número de variables es elevado o cuando los mecanismos físicos no pueden describirse de forma sencilla mediante modelos analíticos. Por tanto, el ML se presenta como una herramienta complementaria para optimizar y predecir la adsorción de CO₂ en zeolitas, reduciendo el número de ensayos experimentales necesarios.

2.3.2 *Modelos de regresión utilizados*

1. Algoritmos basados en modelos lineales

Los algoritmos basados en modelos lineales constituyen una aproximación fundamental dentro del aprendizaje automático, principalmente debido a su simplicidad, eficiencia computacional y facilidad de interpretación. Estos modelos describen la relación entre las variables de entrada y la variable objetivo mediante combinaciones lineales, apoyándose en representaciones algebraicas como vectores y matrices. Por este motivo, suelen emplearse como primer enfoque en problemas de regresión y como referencia para la comparación con modelos más complejos.

Regresión lineal

La regresión lineal es el método clásico para la predicción de variables continuas y tiene como objetivo establecer una relación lineal entre una variable dependiente y una o varias variables independientes. El ajuste del modelo puede realizarse mediante una solución analítica, conocida como Ecuación Normal, o mediante métodos de optimización iterativos, como el Descenso de Gradiente en sus distintas variantes. Asimismo, la regresión polinomial permite extender este enfoque a relaciones no lineales mediante la incorporación de potencias de las variables originales, manteniendo la estructura lineal del modelo. La principal ventaja de este tipo de modelos reside en la interpretabilidad de sus coeficientes, si bien presentan limitaciones cuando el comportamiento del sistema es marcadamente no lineal. La Figura 2-13 muestra un ejemplo de regresión lineal [23].

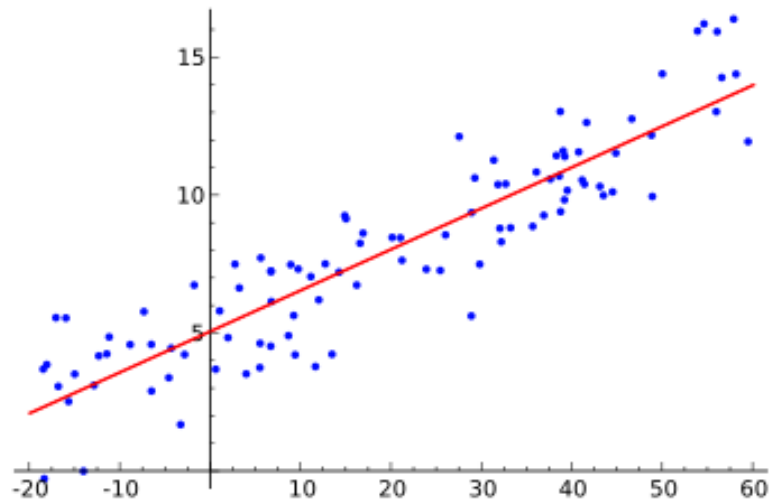


Figura 2-13 Regresión lineal

Regresión logística

La regresión logística, pese a su denominación, se emplea fundamentalmente en problemas de clasificación binaria. Este modelo estima la probabilidad de pertenencia de una observación a una determinada clase mediante el uso de una función logística que restringe la salida al intervalo $[0,1]$. Aunque no resulta adecuada para la predicción directa de magnitudes continuas, puede ser útil para clasificar estados o condiciones discretas del sistema. La Figura 2-14 se muestra [23].

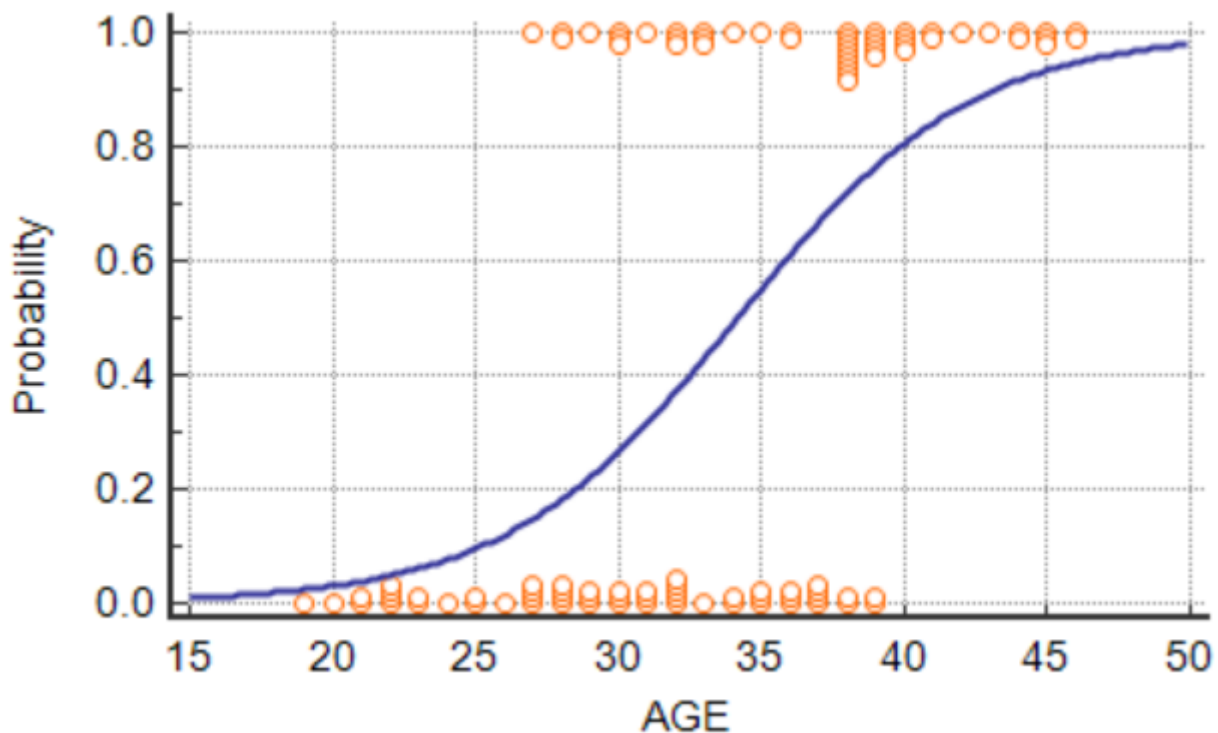


Figura 2-14 Regresión Logística

2. Algoritmos basados en vecinos

Los algoritmos basados en vecinos se fundamentan en la hipótesis de que observaciones similares tienden a encontrarse próximas en el espacio de características. En este contexto, el método de los *k*-vecinos más cercanos (KNN) asigna el valor de una nueva observación a partir del promedio o de la mayoría de los valores correspondientes a sus vecinos más próximos. Este enfoque no requiere una fase

de entrenamiento explícita, lo que simplifica su aplicación, aunque su rendimiento puede verse comprometido en conjuntos de datos de gran tamaño y es especialmente sensible a la escala de las variables, haciendo necesario un preprocesamiento previo de los datos. La Figura 2-15 muestra un ejemplo de gráfica de algoritmos basados en vecinos.

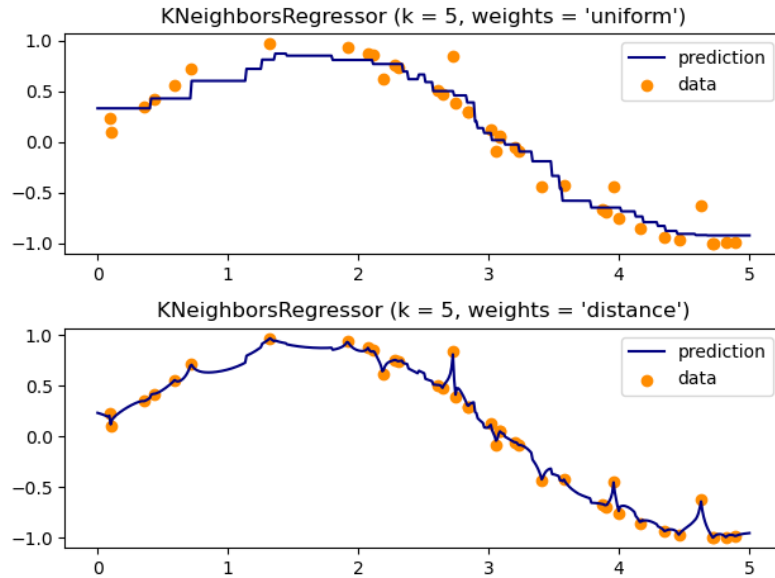


Figura 2-15 Algoritmos basados en vecinos

3. Árboles de decisión y ensambles

Los árboles de decisión dividen el espacio de datos en subconjuntos homogéneos mediante una estructura jerárquica basada en reglas de decisión. En problemas de regresión, la predicción se obtiene a partir del valor medio de las observaciones contenidas en cada hoja del árbol. No obstante, estos modelos presentan una elevada varianza y pueden ser sensibles a pequeñas variaciones en los datos de entrenamiento. Con el fin de reducir este efecto, se emplean métodos de ensamble como *Random Forest* y *Gradient Boosting*, que combinan múltiples árboles para mejorar la robustez del modelo y disminuir el riesgo de sobreajuste. En la Figura 2-16 pFigura 2-16 Ejemplo de árbol de decisiónuede observar un ejemplo de un árbol de decisión y ensamble [23].

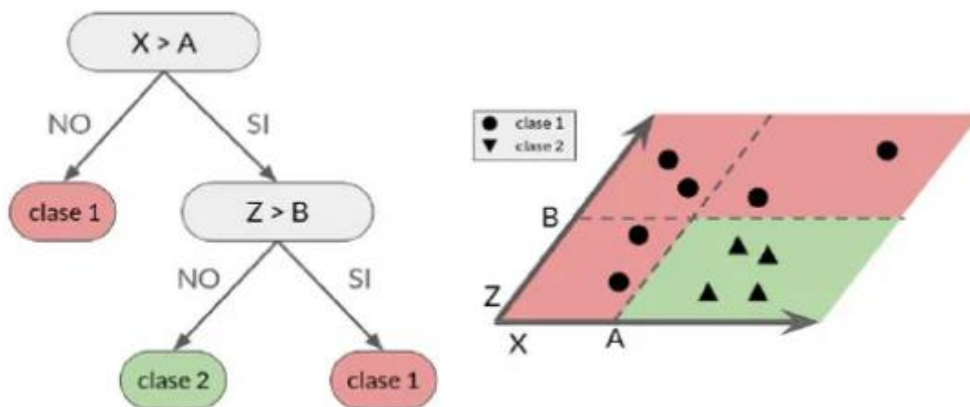


Figura 2-16 Ejemplo de árbol de decisión

4. Algoritmos de Máquinas de Vectores de Soporte

Las Máquinas de Vectores de Soporte (SVM) buscan determinar el hiperplano que mejor representa los datos en el espacio de características, maximizando el margen entre las observaciones. Cuando los datos no son separables linealmente, se recurre al uso de funciones *kernel*, que permiten proyectarlos a espacios de mayor dimensión. En su versión para regresión, estos algoritmos son capaces de modelar relaciones complejas, aunque su coste computacional aumenta con el tamaño del conjunto de datos. En la Figura 2-17 se aprecia una gráfica de algoritmos de máquinas de vectores de soporte.

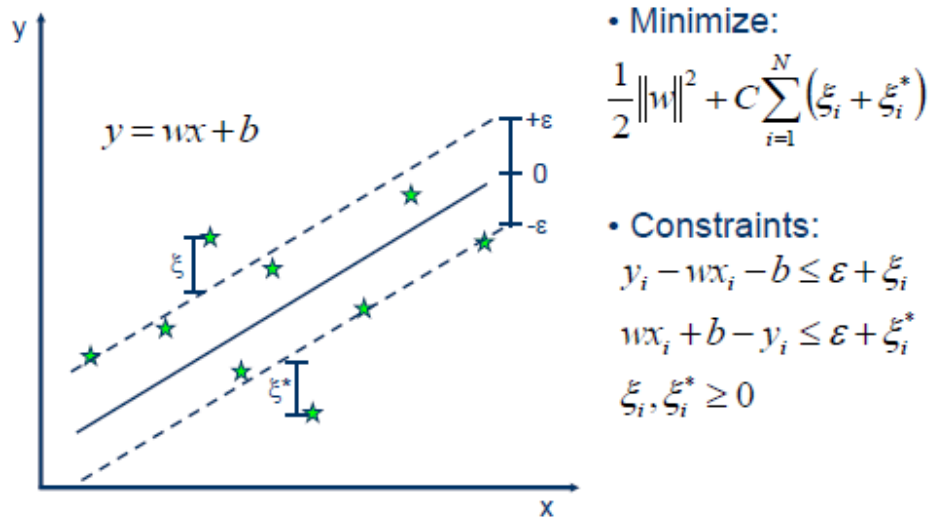


Figura 2-17 Algoritmos de Máquinas de Vectores de Soporte

5. Algoritmos probabilísticos

Los algoritmos probabilísticos se basan en principios estadísticos para realizar predicciones a partir de la estimación de probabilidades. Un ejemplo representativo es el método Naive Bayes, que aplica el teorema de Bayes bajo la hipótesis de independencia entre las variables de entrada. A pesar de que esta suposición rara vez se cumple de forma estricta, estos modelos destacan por su simplicidad y elevada eficiencia computacional. En la Figura 2-18 se puede apreciar un ejemplo de gráfica de algoritmo probabilístico [23].

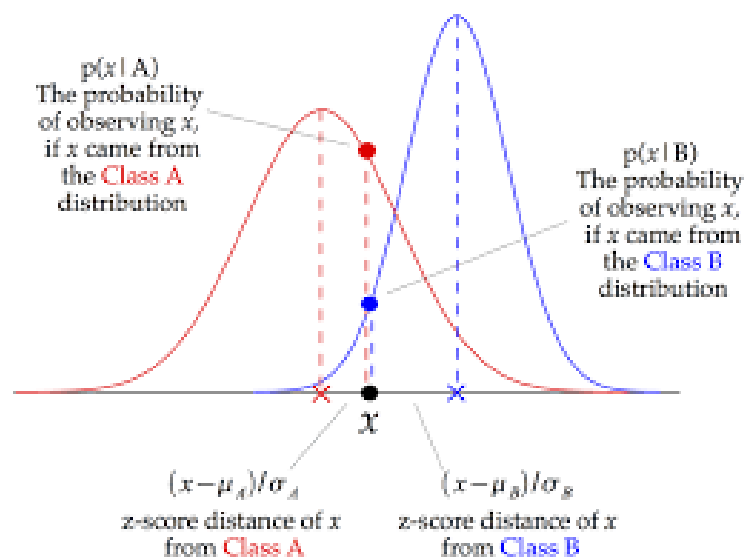


Figura 2-18 Algoritmos probabilísticos

2.3.3 *Ventajas del Machine Learning frente a métodos tradicionales*

El uso del *Machine Learning* (ML) presenta ventajas significativas frente a los enfoques de programación tradicional, especialmente en contextos que implican el manejo de grandes volúmenes de datos o la resolución de problemas con alta complejidad técnica. En primer lugar, destaca la simplificación del código y la reducción de las tareas de mantenimiento. En la programación tradicional, resolver un problema como el filtrado de spam requiere que el programador identifique manualmente patrones y elabore una extensa lista de reglas, lo que dificulta su actualización y gestión. Por el contrario, un sistema basado en ML suele necesitar menos código, resulta más sencillo de mantener y, en muchos casos, alcanza mayores niveles de precisión al detectar dichos patrones de manera automática [23].

Asimismo, otra ventaja relevante es la capacidad de adaptación automática al cambio. Los métodos tradicionales exigen que cualquier modificación en el entorno —como la aparición de nuevas estrategias de spam— sea analizada por una persona, quien debe actualizar las reglas de forma constante. En cambio, los sistemas de ML pueden aprender a partir de nuevos datos y ajustarse a tendencias emergentes sin requerir una intervención continua, lo que los convierte en una solución especialmente adecuada para entornos dinámicos [24].

Por otra parte, el ML permite abordar problemas de alta complejidad que resultan difíciles de resolver mediante algoritmos tradicionales basados en reglas fijas. Tareas como el reconocimiento de voz o de imágenes ilustran esta limitación. En estos casos, el aprendizaje automático se posiciona como la alternativa más eficaz, ya que posibilita que el sistema aprenda directamente de los datos de entrenamiento y capte variaciones de tono, idioma o contexto ambiental, algo que difícilmente puede escalar mediante métodos manuales [24].

Además, el ML no solo automatiza procesos, sino que también favorece el descubrimiento de conocimientos, comúnmente denominado minería de datos. Al analizar lo que ciertos modelos han aprendido —como los árboles de decisión o los modelos lineales— es posible identificar correlaciones inesperadas y nuevas tendencias dentro de grandes conjuntos de datos, contribuyendo así a una mejor comprensión de problemas complejos [24].

Finalmente, los modelos de aprendizaje automático suelen constituir un punto de partida en proyectos de análisis de datos debido a su eficiencia operativa. A largo plazo, esta característica se traduce en ventajas financieras para las organizaciones, ya que permite optimizar procesos y reducir la necesidad de ajustes manuales costosos [25].

3 DESARROLLO DEL TFG

Para el desarrollo de este estudio, se llevó a cabo un análisis detallado del adsorbente empleado, la zeolita. En primer lugar, se procedió a la búsqueda de información relativa a los distintos tipos de zeolitas estudiadas por la comunidad científica y empleadas a nivel industrial. Estos estudios permitieron obtener información valiosa sobre la estructura y propiedades del material, parámetros de relevancia en el proceso de adsorción de gases. A continuación, se recopilieron datos de los diferentes parámetros de relevancia en dicho proceso de adsorción (temperatura o presión a la que se realiza el proceso, cantidad adsorbida de CO₂ bajo las diferentes condiciones operativas o caudal de gases de entrada). Posteriormente, los diversos datos recopilados fueron introducidos como parámetros de entrada en diferentes modelos de *Machine Learning*. Un total de 5 modelos diferentes fueron estudiados para cada tipo de zeolita evaluada, seleccionando aquel que resulta óptimo en cada caso y pudiendo predecir así la cantidad de CO₂ adsorbida bajo diferentes condiciones de presión, temperatura y caudal de gases de entrada.

La selección del modelo óptimo en cada caso conllevó el análisis de diferentes métricas que permitieron valorar el ajuste de dichos modelos a los datos reales permitiendo determinar la bondad del ajuste en cada una de las situaciones. Por último, al modelo con mejor ajuste en cada zeolita, se ha analizado sus resultados en dos contextos distintos:

- 1) Cuantificando el rango óptimo de presión, temperatura y caudal que se debería llevar a cabo para una cantidad de adsorción de CO₂ óptima.
- 2) Detectando y justificando los rangos de los parámetros de entrada en donde el modelo adecuado pierde precisión en sus predicciones, a partir de fundamentos estadísticos.

3.1 Obtención y tratamiento de datos web

El presente subapartado describe el procedimiento seguido para la localización, selección, análisis y explotación de fuentes bibliográficas científicas con el objetivo de obtener los parámetros operativos necesarios para el estudio de la adsorción de CO₂ en zeolitas. En particular, se persiguió la recopilación de datos relativos a presión, temperatura, caudal de gas de entrada y capacidad de adsorción de dióxido de carbono, variables fundamentales para el posterior modelado y análisis del sistema.

3.1.1 Estrategia de búsqueda bibliográfica

La primera fase del trabajo consistió en la definición de una estrategia sistemática de búsqueda de información científica especializada. Para ello, se recurrió a bases de datos académicas de reconocido prestigio en el ámbito de la ingeniería química y de procesos, así como a literatura técnica de referencia en procesos de adsorción y separación de gases.

La búsqueda se orientó hacia publicaciones científicas revisadas por pares y con un alto grado de impacto y citación dentro de la comunidad científica, con el fin de garantizar la fiabilidad, calidad y actualidad de los datos recopilados. Se priorizaron trabajos experimentales que presentaran resultados cuantitativos claramente definidos y metodologías reproducibles.

Este planteamiento permitió establecer una base documental sólida y rigurosa, adecuada para sustentar el desarrollo técnico del presente Trabajo de Fin de Grado.

3.1.2 Criterios de selección y validación de las fuentes

Una vez recopilada la bibliografía inicial, se llevó a cabo un proceso de análisis crítico y selección basado en los siguientes criterios:

1. Relevancia directa con la adsorción de CO₂ en zeolitas de aplicación industrial.
2. Disponibilidad de datos experimentales cuantitativos.
3. Descripción detallada de las condiciones experimentales (rango de presión, temperatura, pureza del gas y procedimiento seguido).

Se descartaron aquellos trabajos que no especificaban adecuadamente las condiciones de operación o cuya información no permitía una correcta interpretación de los resultados.

Este proceso de validación permitió asegurar que los datos empleados en el desarrollo del estudio presentaran un nivel adecuado de rigor científico y comparabilidad.

3.1.3 Extracción y sistematización de datos

Tras la selección definitiva de las fuentes más relevantes, se procedió a la extracción estructurada de los parámetros de interés, entre los que destacan:

- Presión de operación (expresada en bar o kPa).
- Temperatura del sistema (expresada en °C).
- Capacidad de adsorción del CO₂ (mmol/g siendo los milimoles de cantidad de CO₂ adsorbida por gramo de gas usado).
- Tipo y características de la zeolita empleada.

En aquellos casos en los que los resultados se presentaban en formato gráfico, se realizó la digitalización de las curvas experimentales mediante herramientas específicas de extracción de datos, como por ejemplo *Web Plot Digitizer* [26], permitiendo obtener valores numéricos aproximados para su posterior tratamiento.

Toda la información fue posteriormente organizada en tablas comparativas, lo que facilitó la identificación de tendencias, la evaluación de la influencia de la temperatura, la presión, el caudal y la selección de condiciones representativas para el análisis desarrollado en los apartados posteriores.

3.1.4 Tratamiento y homogeneización de la información.

Con el fin de garantizar la coherencia del análisis posterior, los datos recopilados fueron sometidos a un proceso de homogeneización y normalización. Para ello:

- Se unificaron las unidades de presión.
- Se expresaron todas las temperaturas en grados centígrados.
- Se normalizó la capacidad de adsorción en función de la masa del adsorbente (mmol/g).
- Se unificaron las unidades del caudal de entrada.

Asimismo, los datos recopilados fueron plasmados en diferentes tablas Excel, agrupados para cada tipo de zeolita analizada y siguiendo la secuencia adecuada para poder alimentar a los diferentes modelos de *Machine Learning* estudiados.

3.1.5 Consideraciones metodológicas y limitaciones

Dado que el presente trabajo se fundamenta en datos experimentales obtenidos de distintas investigaciones, es necesario considerar la variabilidad inherente a cada configuración experimental (procedimientos de activación del adsorbente, pureza del CO₂, condiciones de pretratamiento, entre otros factores).

Por este motivo, se adoptó un enfoque crítico en la interpretación de los resultados, priorizando tendencias consistentes frente a valores aislados y asegurando que las conclusiones extraídas estuvieran respaldadas por un conjunto de datos suficientemente representativo.

Este enfoque metodológico permitió establecer una base técnica rigurosa sobre la cual se desarrollaron los cálculos y análisis posteriores, reforzando la solidez científica del Trabajo de Fin de Grado.

3.2 Explicación del código de *Machine Learning*

La presente sección tiene como finalidad la preparación de distintos modelos de *Machine Learning* aplicados a la estimación de la capacidad de adsorción de CO₂ en función de las variables operativas del sistema, concretamente la temperatura, la presión y el caudal de gas de entrada, junto a la evaluación de la capacidad predictiva, rango óptimo de los parámetros de entrada para una adsorción de CO₂ óptima y rangos de los parámetros de entrada donde el modelo contiene mayor error.

3.2.1 Desarrollo de la Parte Analítica

La fase analítica del trabajo se centra en la implementación y evaluación de distintos modelos de *Machine Learning* con el objetivo de predecir la cantidad adsorbida a partir de las variables operativas del sistema. El procedimiento seguido responde a la metodología estándar en problemas de regresión supervisada: preparación del entorno, carga y tratamiento de datos, aprendizaje de modelos y evaluación comparativa de resultados.

3.2.1.1 Importación de librerías

En esta primera etapa se importan las bibliotecas necesarias para el análisis de datos y la construcción de los modelos. *Pandas* y *NumPy* se utilizan para la manipulación y el cálculo numérico, mientras que *matplotlib* se reserva para la visualización de resultados. El desarrollo se llevó a cabo en *Google Colab*, lo que requirió la conexión con *Google Drive* para acceder al conjunto de datos almacenado en formato *CSV*. Asimismo, se establece las herramientas de *scikit-learn* tanto para el preprocesamiento como para la evaluación y modelado. En particular, se incluyen funciones para la división de datos, escalado, cálculo de métricas y distintos algoritmos de regresión como se puede apreciar en la Figura 3-1.

```
# 1. IMPORTACIÓN DE LIBRERÍAS
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from google.colab import drive
from sklearn.model_selection import train_test_split, cross_val_score, KFold
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, r2_score

# Modelos
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.svm import SVR
from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor, GradientBoostingRegressor
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor
```

Figura 3-1 Importación de librerías

3.2.1.2 Carga de datos

La carga de datos se realiza desde Google Drive mediante un procedimiento interactivo. En primer lugar, se monta la unidad de Drive, permitiendo el acceso a los archivos. Posteriormente, el usuario introduce la ruta del archivo CSV, lo que aporta flexibilidad al código.

Se incorpora además una verificación sobre la presencia de la variable *Caudal_Gas_Entrada*, ya que el modelo puede trabajar bien con presión y temperatura, o bien juntando como tercer parámetro el caudal de gas de entrada, ya que para algunas zeolitas el tercer parámetro no se ha encontrado en la literatura. En función de esta condición, se asignan dinámicamente los nombres de las columnas.

El archivo se lee mediante *read_csv*, considerando la ausencia de encabezados el uso del punto como símbolo decimal y el uso de punto y coma como separador. Finalmente, se valida que el número de columnas sea correcto y se visualizan las primeras filas del *DataFrame* para comprobar que la carga se ha realizado adecuadamente como se puede apreciar en la Figura 3-2.

```
# 2. CARGA DE DATOS DESDE GOOGLE DRIVE
# Montamos el Drive
drive.mount('/content/drive')

# --- CONFIGURACIÓN ---
# Cambia esta ruta por la ubicación real de tu archivo en Drive
# Ahora la ruta se pedirá al usuario

try:
    ruta_archivo = input("Por favor, introduce la ruta completa de tu archivo CSV en Google Drive: ")

    # Preguntar al usuario si el CSV incluye 'Caudal_Gas_Entrada'
    while True:
        respuesta_caudal = input("¿Tu archivo CSV incluye la columna 'Caudal_Gas_Entrada'? (sí/no): ").lower()
        if respuesta_caudal in ['sí', 'si', 'no']:
            break
        else:
            print("Respuesta no válida. Por favor, responde 'sí' o 'no'.")

    incluir_caudal = (respuesta_caudal == 'sí' or respuesta_caudal == 'si')

    # Se asume que el CSV no tiene encabezados. Si los tiene, cambia header=None a header=0
    df = pd.read_csv(ruta_archivo, header=None, sep=',')

    # Asignamos nombres dinámicamente según la respuesta del usuario y validamos la cantidad de columnas
    if incluir_caudal:
        if len(df.columns) == 4:
            df.columns = ['Temperatura', 'Presion', 'Caudal_Gas_Entrada', 'Cantidad_Adsorbida']
            print("Detectadas 4 columnas: 'Temperatura', 'Presion', 'Caudal_Gas_Entrada', 'Cantidad_Adsorbida'")
            features = ['Temperatura', 'Presion', 'Caudal_Gas_Entrada']
        else:
            raise ValueError("Has indicado que el archivo tiene 'Caudal_Gas_Entrada', pero se detectaron "
                              f"{len(df.columns)} columnas. Se esperaban 4.")
    else:
        if len(df.columns) == 3:
            df.columns = ['Temperatura', 'Presion', 'Cantidad_Adsorbida']
            print("Detectadas 3 columnas: 'Temperatura', 'Presion', 'Cantidad_Adsorbida'. 'Caudal_Gas_Entrada' no está presente y no se usa")
            features = ['Temperatura', 'Presion']
        else:
            raise ValueError("Has indicado que el archivo NO tiene 'Caudal_Gas_Entrada', pero se detectaron "
                              f"{len(df.columns)} columnas. Se esperaban 3.")

    print("Primeras 5 filas de tus datos:")
```

Figura 3-2 Carga de datos

3.2.1.3 Preprocesamiento de datos

En esta fase se preparan los datos para el aprendizaje. Se separa las variables independientes (*X*) de la variable objetivo (*y*), correspondiente a la cantidad adsorbida.

A continuación, los datos se dividen en conjuntos de entrenamiento (80 %) y validación (20 %), garantizando la reproducibilidad mediante el parámetro *random state*, parámetro que permite redistribuir de forma aleatoria datos que van a entrenamiento y a validación.

En este trabajo se han utilizado distintos valores de *random state* (10, 20 y 50) con el objetivo de analizar la estabilidad de los modelos frente a diferentes particiones de los datos.

Posteriormente, se aplica un escalado mediante *StandardScaler*. Este ajusta los datos de entrenamiento y a los de validación, evitando la fuga de información. Además, se escala también la variable objetivo, lo que mejora el rendimiento de determinados modelos y la estabilidad de las predicciones. Este escalamiento consiste en que los datos de cada variable tengan siempre una media de cero y una desviación típica de uno. En la Figura 3-3 se observa un ejemplo del código sobre el preprocesamiento de datos.

```
# 3. PREPROCESAMIENTO
X = df[features].values
y = df['Cantidad_Adsorbida'].values

# Solicitar el valor de random_state al usuario
while True:
    try:
        user_random_state = int(input("Por favor, introduce un valor entero para random_state: "))
        break
    except ValueError:
        print("Entrada no válida. Por favor, introduce un número entero.")

# División 80% Aprendizaje - 20% Testeo
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.20, random_state=user_random_state)

# Escalado de datos (Fundamental para SVR y KNN, bueno para los demás)
scaler_X = StandardScaler()
scaler_y = StandardScaler()

X_train_s = scaler_X.fit_transform(X_train) # Transforma los valores de T, y por separado de P, para que tengan ambos media igual
```

Figura 3-3 Preprocesamiento de datos

3.2.1.4 Definición de modelos

Se seleccionan cinco modelos de regresión con el objetivo de comparar distintos enfoques de aprendizaje.

La regresión lineal se utiliza como modelo base. El modelo SVR (*Support Vector Regression*), con kernel RBF (*Radial Basis Function*), permite capturar relaciones no lineales, ajustándose mediante parámetros como C (es un parámetro en SVR que regula cuánto se penalizan los errores, controlando el equilibrio entre ajuste a los datos y capacidad de generalización) y epsilon. Por otro lado, *Random Forest* y *Gradient Boosting* representan métodos de ensamble que mejoran la capacidad de generalización mediante la combinación de múltiples árboles de decisión, ya sea en paralelo o de forma secuencial. Finalmente, el modelo KNN (*K-Nearest Neighbors*) basa sus predicciones en la proximidad entre observaciones, considerando un número determinado de vecinos. Los valores numéricos de los hiperparámetros figurados en la Figura 3-4 son valores estándar usado en el estado del arte.

```
# 4. DEFINICIÓN DE LOS 5 MODELOS
modelos = {
    "Regresión Lineal": LinearRegression(),
    "SVR (Support Vector)": SVR(kernel='rbf', C=100, epsilon=0.1), # Kernel radial es estándar para adsorción
    "Random Forest": RandomForestRegressor(n_estimators=100, random_state=user_random_state),
    "Gradient Boosting": GradientBoostingRegressor(n_estimators=100, random_state=user_random_state),
    "K-Nearest Neighbors": KNeighborsRegressor(n_neighbors=5)
}

print("\n" + "="*60)
print(" INICIO DEL PROCESO DE ENTRENAMIENTO Y EVALUACIÓN")
print("="*60)

results = []

for nombre, modelo in modelos.items():
    print(f"\nProcesando: {nombre}...")

    # --- A. ENTRENAMIENTO ---
    # MODIFICACIÓN: Usamos y_train_s para el entrenamiento
```

Figura 3-4 Definición de modelos

3.2.1.5 Aprendizaje y evaluación

Cada modelo aprende utilizando los datos de entrenamiento escalados, ajustando sus parámetros internos para aprender las relaciones entre variables. Posteriormente, se generan predicciones sobre el conjunto de validación.

Dado que los datos han sido normalizados, las predicciones se desescalan antes de su evaluación para poder compararlas con los valores reales.

El rendimiento de los modelos se evalúa mediante distintas métricas: el MAE (*Mean Absolute Error*), que mide el error medio absoluto; el MSE (*Mean Squared Error*), que penaliza más los errores grandes; el RMSE (*Root Mean Squared Error*), que facilita la interpretación en unidades originales; y el coeficiente R², que indica la capacidad explicativa del modelo. Los resultados se almacenan para su posterior análisis comparativo. En la Figura 3-5 aparece el código que hace referencia a este apartado.

```
modelo.fit(X_train_s, y_train_s)

# --- B. PREDICCIÓN (Sobre el 20% restante) ---
y_pred_scaled = modelo.predict(X_test_s)
# MODIFICACIÓN: Desescalamos las predicciones para compararlas con y_test original
y_pred = scaler_y.inverse_transform(y_pred_scaled.reshape(-1, 1)).ravel()

# --- C. CÁLCULO DE ERRORES ---
mae = mean_absolute_error(y_test, y_pred)
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
rmse = np.sqrt(mse)
r2 = r2_score(y_test, y_pred)

results.append([nombre, r2, rmse, mae])

print(f" -> Error Absoluto Medio (MAE): {mae:.4f}")
print(f" -> Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE): {rmse:.4f}")
print(f" -> Coeficiente de Determinación (R2 Test): {r2:.4f}")
```

Figura 3-5 Entrenamiento y evaluación

3.2.1.6 Resumen final

Finalmente, los resultados se organizan en un *DataFrame* que recoge las métricas de cada modelo como se puede ver en la Figura 3-6. Estos se ordenan en función del valor de R^2 en el conjunto de validación, lo que permite identificar de forma directa el modelo con mejor rendimiento.

La presentación en formato tabular facilita la comparación entre algoritmos y permite seleccionar el modelo más adecuado para describir el comportamiento del sistema.

```
# 5. RESUMEN FINAL
res_df = pd.DataFrame(results, columns=["Modelo", "R2 (Test)", "RMSE (mmol/g)", "MAE (mmol/g)"])
res_df = res_df.sort_values(by="R2 (Test)", ascending=False)

print("\n" + "="*60)
print(" RESUMEN COMPARATIVO (Ordenado por mejor R2)")
print("="*60)
print(res_df)
```

Figura 3-6 Resumen Final

3.2.2 Parte Gráfica: Representación e Interpretación del Modelo

Una vez evaluados cuantitativamente los distintos modelos de *Machine Learning*, se procedió a la representación gráfica del modelo seleccionado con el objetivo de facilitar su interpretación física, validar su capacidad predictiva, analizando el rango óptimo de las condiciones de entrada para la mayor absorción posible en cada zeolita, y determinar y justificar los rangos de dichas condiciones entrada donde el modelo predice peor a base de cálculos estadísticos.

3.2.2.1 Preparación y selección del modelo

En esta etapa se preparan las herramientas necesarias para la visualización de los resultados como se ve en la Figura 3-7. Se emplean las librerías *matplotlib* para gráficos bidimensionales y *mpl_toolkits.mplot3d* para representaciones tridimensionales.

El procedimiento permite seleccionar de forma interactiva uno de los modelos previamente aprendidos, lo que aporta flexibilidad en el análisis. Una vez seleccionado, el modelo aprende nuevamente con los datos escalados para asegurar su correcta disponibilidad en esta fase.

Posteriormente, se generan predicciones sobre el conjunto de validación escalado, las cuales son desescaladas para obtener valores en las unidades originales. Esto permite una comparación directa y coherente con los datos reales.

```
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
# 1. Seleccionar el modelo a graficar (el usuario lo elegirá)
model_options = ", ".join(modelos.keys())
while True:
    selected_model_name = input(f"Por favor, introduce el nombre exacto del modelo que deseas graficar (Opciones: {model_options}): ")
    if selected_model_name in modelos:
        mejor_modelo_nombre = selected_model_name
        break
    else:
        print("Nombre de modelo no válido. Por favor, introduce uno de los nombres de la lista.")

mejor_modelo = modelos[mejor_modelo_nombre]

# Aseguramos que el modelo esté entrenado con todos los datos disponibles para la gráfica
mejor_modelo.fit(X_train_s, y_train_s)

# Predicciones sobre el set de prueba para el gráfico 2D
y_pred_scaled = mejor_modelo.predict(X_test_s)
y_pred_graf = scaler_y.inverse_transform(y_pred_scaled.reshape(-1, 1)).ravel()

nombre_modelo_graficar = mejor_modelo_nombre
```

Figura 3-7 Preparación y selección del modelo

3.2.2.2 Gráfica Predicho vs Real (2D)

Se representa un diagrama de dispersión en el que se comparan los valores reales de la cantidad adsorbida con los valores predichos por el modelo como se observa en la Figura 3-8. Este tipo de gráfico permite evaluar visualmente la precisión del modelo.

Se incluye una línea diagonal que representa el ajuste ideal ($x = y$). Cuanto más próximos se encuentren los puntos a esta línea, mejor será la capacidad predictiva del modelo. La dispersión respecto a dicha línea proporciona una medida visual del error.

```
# --- GRÁFICA 1: PREDICHO VS REAL (2D) ---
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(y_test, y_pred_graf, color='blue', alpha=0.6, edgecolors='k', label='Datos de Prueba')
plt.plot([min(y_test), max(y_test)], [min(y_test), max(y_test)], color='red', linestyle='--', lw=2, label='Línea Ideal (x=y)')
plt.xlabel('Cantidad Real (Experimental) [mmol/g]', fontsize=12)
plt.ylabel('Cantidad Predicha (Modelo) [mmol/g]', fontsize=12)
plt.title(f'Ajuste del Modelo: {nombre_modelo_graficar}', fontsize=14)
plt.legend()
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.7)
plt.show()
```

Figura 3-8 Gráfica Predicho vs Real (2D)

3.2.2.3 Superficie de respuesta 3D

La representación tridimensional permite analizar cómo varía la cantidad adsorbida en función de las variables de entrada. Para ello, se construye una superficie de predicción utilizando dos variables como ejes, mientras que una tercera, en caso de existir, se mantiene fija en su valor medio. En la Figura 3-9 se puede apreciar el desarrollo.

Se genera una malla de puntos mediante *meshgrid*, que posteriormente se estandariza utilizando el mismo escalado aplicado durante el aprendizaje. A partir de esta malla, el modelo realiza predicciones que, tras ser desescaladas, permiten construir la superficie tridimensional.

Dicha superficie se representa mediante un mapa de color que facilita la interpretación de los valores de adsorción. Además, se superponen los datos reales del conjunto de validación, lo que permite comparar directamente el ajuste del modelo.

Se incluyen etiquetas, título descriptivo y una barra de color que mejora la interpretación de los resultados. Asimismo, se define un ángulo de visualización adecuado para facilitar el análisis de la superficie.

```
# --- GRÁFICA 2: SUPERFICIE DE RESPUESTA 3D (Modelo) con Puntos Reales ---

fig = plt.figure(figsize=(12, 10))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')

# Define the features that can be varied (initially all features)
available_varying_features = list(features)
fixed_param_name = None
fixed_param_value = None

if len(features) > 2: # Implies 'Caudal_Gas_Entrada' is present and we have 3 features
    print(f"\nPara la gráfica 3D, necesitamos fijar uno de los parámetros a su valor medio.")
    print(f"Los parámetros disponibles son: {'', '.join(features)}")
    while True:
        choice = input(f"¿Qué parámetro quieres fijar a su valor medio para la gráfica 3D? (Escribe el nombre exacto: ")
        if choice in features:
            fixed_param_name = choice
            available_varying_features.remove(fixed_param_name)
            # Calculate the mean of the chosen fixed parameter
            fixed_param_value = df[fixed_param_name].mean()
            print(f"Se fijará '{fixed_param_name}' a su valor medio: {fixed_param_value:.2f}")

            if choice in features:
                fixed_param_name = choice
                available_varying_features.remove(fixed_param_name)
                # Calculate the mean of the chosen fixed parameter
                fixed_param_value = df[fixed_param_name].mean()
                print(f"Se fijará '{fixed_param_name}' a su valor medio: {fixed_param_value:.2f}")
                break
            else:
                print("Nombre de parámetro no válido. Por favor, elige uno de la lista.")

# Determine which two features will vary
feature_var1_name = available_varying_features[0]
feature_var2_name = available_varying_features[1]

# Create a meshgrid for the two varying features
range_var1 = np.linspace(X[:, features.index(feature_var1_name)].min(), X[:, features.index(feature_var1_name)].max(), 30)
range_var2 = np.linspace(X[:, features.index(feature_var2_name)].min(), X[:, features.index(feature_var2_name)].max(), 30)

vv_var1, vv_var2 = np.meshgrid(range_var1, range_var2)

# Prepare the input grid for prediction, filling in the fixed parameter
grid_plano_base = np.zeros((vv_var1.size, len(features)))

# Map the varying features to their correct columns in grid_plano_base
grid_plano_base[:, features.index(feature_var1_name)] = vv_var1.ravel()
grid_plano_base[:, features.index(feature_var2_name)] = vv_var2.ravel()

# If a parameter was fixed, assign its mean value to its column
if fixed_param_name:
    grid_plano_base[:, features.index(fixed_param_name)] = fixed_param_value

# B. Estandarizar la malla (¡Importante! El modelo aprendió con datos escalados)
grid_plano_s = scaler_X.transform(grid_plano_base)

# C. Predecir la Cantidad_Adsorbida para toda la malla
y_pred_scaled_surface = mejor_modelo.predict(grid_plano_s)
Z_superficie = scaler_y.inverse_transform(y_pred_scaled_surface.reshape(-1, 1)).ravel()
```

Figura 3-9 Superficie de respuesta (3D)

3.2.2.4 Interpretación de resultados

Las representaciones gráficas permiten evaluar tanto la precisión del modelo como su comportamiento frente a las variables de entrada. El gráfico 2D ofrece una visión clara del ajuste global, mientras que la superficie 3D facilita la comprensión de las relaciones entre variables y la respuesta del sistema.

Además, la comparación entre la superficie predicha y los datos reales permite identificar regiones en las que el modelo presenta mayor o menor precisión, aportando información relevante sobre su capacidad de generalización además de la estimación de los rangos óptimos de los parámetros entrada para la adsorción máxima de CO₂.

3.2.3 Parte Gráfica: Error absoluto

En esta etapa se analiza la distribución del error del modelo mediante una representación tridimensional del error absoluto, lo que permite identificar en qué regiones del espacio de variables el modelo presenta mayor desviación respecto a los valores reales (Figura 3-10).

```
# =====
# GRÁFICA: SUPERFICIE DE ERROR ABSOLUTO 3D
# =====

import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
from scipy.interpolate import griddata

# Obtener los datos del test y las predicciones del modelo seleccionado
# 'X_test' y 'y_test' son del conjunto de prueba original
# 'y_pred_graf' son las predicciones desescaladas del modelo seleccionado sobre X_test_s
```

Figura 3-10 Obtención de datos para la representación 3D del error absoluto

En primer lugar, se calcula el error absoluto para cada punto del conjunto de validación como la diferencia en valor absoluto entre los datos experimentales y las predicciones del modelo. Este cálculo permite cuantificar la magnitud del error sin considerar su signo, facilitando su interpretación.

A continuación, se preparan los datos necesarios para la interpolación. Con el objetivo de mantener la coherencia con la superficie de respuesta previamente generada, se emplean las mismas variables de entrada que se consideraron en dicha representación, es decir, aquellas que no fueron fijadas a un valor constante. A partir del conjunto de validación, se extraen estas variables y se asocian con los valores de error absoluto correspondientes, generando así un conjunto de puntos en el espacio de variables junto con su error asociado.

Posteriormente, se reutiliza la malla de puntos definida en la representación tridimensional anterior, lo que garantiza la comparabilidad entre ambas superficies. Esta malla define el dominio sobre el cual se desea estimar el error del modelo (Figura 3-11).

```

# 1. Calcular el error absoluto
abs_error = np.abs(y_test - y_pred_graf)

# 2. Extraer Temperatura y Presión del X_test para los puntos reales
# Se asume que vv_var1 y vv_var2 de la celda anterior corresponden a Temperatura y Presión
# o las dos variables que varían en la gráfica 3D anterior.
# Para la gráfica de error, asumiremos que las variables que varían son las mismas
# que se usaron para la superficie del modelo, lo que implica que
# los puntos de error se mapearán en el mismo plano base de las variables 'no fijas'.

# Es crucial que las variables de la superficie de error coincidan con las de la superficie del modelo.
# Por lo tanto, usaremos feature_var1_name y feature_var2_name, y vv_var1, vv_var2
# definidos en la celda anterior.

# Asegurémonos de que las variables de entrada para la interpolación sean las correctas.
feature_error_var1 = X_test[:, features.index(feature_var1_name)]
feature_error_var2 = X_test[:, features.index(feature_var2_name)]

# 3. Crear una malla (grid) para la interpolación del error (reutilizamos vv_var1 y vv_var2 del gráfico anterior)
# Estos ya están definidos como vv_var1 y vv_var2 en la celda anterior.

```

Figura 3-11 Cálculo de error y creación de malla

La estimación del error en toda la superficie se realiza mediante un proceso de interpolación, utilizando la función *griddata*. A partir de los valores conocidos en los puntos experimentales, se calculan valores de error en el resto de la malla mediante interpolación cúbica, lo que permite obtener una superficie continua y suave que representa la variación del error en función de las variables de entrada (Figura 3-12).

```

# 4. Interpolar los errores sobre la malla
# Necesitamos los puntos (Variable1, Variable2) y sus errores correspondientes
points = np.array([feature_error_var1, feature_error_var2]).T
values = abs_error

Z_error_interp = griddata(points, values, (vv_var1, vv_var2), method='cubic')

# 5. Graficar la superficie de error 3D
fig_error = plt.figure(figsize=(12, 10))
ax_error = fig_error.add_subplot(111, projection='3d')

# Dibujar la superficie de error
surf_error = ax_error.plot_surface(vv_var1, vv_var2, Z_error_interp, cmap='plasma', alpha=0.8, rstride=1, cstride=
    label=f'Superficie de Error Absoluto ({nombre_modelo_graficar})')

# Crear un 'proxy' para la leyenda de la superficie de error
surf_error_proxy = plt.Rectangle((0,0), 1, 1, fc=surf_error.cmap(0.5), alpha=0.8)

# Dibujar los puntos reales del test (opcional, para ver dónde se calculó el error)
ax_error.scatter(feature_error_var1,

```

Figura 3-12 Interpolación de la gráfica de errores

El resultado es una superficie tridimensional que muestra la distribución del error absoluto del modelo, proporcionando una herramienta visual muy útil para identificar zonas de mayor imprecisión y evaluar la calidad del ajuste en diferentes regiones del dominio. En la Figura 3-13 se aprecia la parte del código que representa la parte descrita.

```
# Crear un 'proxy' para la leyenda de la superficie de error
surf_error_proxy = plt.Rectangle((0,0), 1, 1, fc=surf_error.cmap(0.5), alpha=0.8)

# Dibujar los puntos reales del test (opcional, para ver dónde se calculó el error)
ax_error.scatter(feature_error_var1,
                 feature_error_var2,
                 abs_error, color='blue', s=30, alpha=0.8, edgecolors='k', label='Errores Absolutos Reales (Test)')

# Etiquetas y Títulos
ax_error.set_xlabel(f'{feature_var1_name} {get_unit(feature_var1_name)}', fontsize=12, labelpad=10)
ax_error.set_ylabel(f'{feature_var2_name} {get_unit(feature_var2_name)}', fontsize=12, labelpad=10)
ax_error.set_zlabel('Error Absoluto |y_real - y_predicho| (mmol/g)', fontsize=12, labelpad=10)
ax_error.set_title(f'Superficie de Error Absoluto para el Modelo: {nombre_modelo_graficar}{title_fixed_part}', fontsize=15)

# Barra de color para referencia de la superficie de error
cbar_error = fig_error.colorbar(surf_error, ax=ax_error, shrink=0.5, aspect=10, label='Error Absoluto (mmol/g)')

ax_error.legend([surf_error_proxy, ax_error.collections[0]], ['Superficie de Error Interpolada', ax_error.collections[0].get_label()])
ax_error.view_init(elev=30, azim=60) # Ángulo de vista inicial
```

Figura 3-13 Final del gráfico de errores

3.2.4 Interpretación estadística

En esta etapa se analiza la relación entre las variables de entrada y el error absoluto del modelo, con el objetivo de identificar en qué condiciones presenta mayor imprecisión.

Para ello, se generan gráficos de dispersión que representan cada característica frente al error, lo que permite una evaluación visual de posibles patrones o rangos problemáticos. Además, se calculan los coeficientes de correlación de Pearson y Spearman, que permiten cuantificar la relación lineal y monótona, respectivamente, entre cada variable y el error. Con relación monótona significa que a medida que una variable crece, la otra tiende a hacerlo o hacerlo inversamente, pero no necesariamente a un ritmo constante, es decir, lineal.

Este análisis facilita la identificación de tendencias, como un posible aumento del error en determinados rangos de temperatura, presión y caudal de entrada, y permite formular hipótesis sobre el comportamiento del modelo.

No obstante, debido al reducido tamaño del conjunto de validación, los resultados deben interpretarse con cautela, ya que no presentan una validez estadística robusta. Por ello, este análisis se considera exploratorio y sirve principalmente para detectar posibles limitaciones del modelo y orientar futuras mejoras. La Figura 3-14 muestra el código de la interpretación estadística.

```
print("\n--- Análisis de Correlación y Visualización ---")

# Re-define get_unit function here to ensure it's available in this cell
def get_unit(feature_name):
    if feature_name == 'Temperatura':
        return '[°C]'
    elif feature_name == 'Presion':
        return '[bar]'
    elif feature_name == 'Caudal_Gas_Entrada':
        return '[l/min]'
    return ''

for i, feature in enumerate(analysis_features):
    plt.subplot(1, len(analysis_features), i + 1)
    plt.scatter(df_test_analysis[feature], df_test_analysis['Absolute_Error'], alpha=0.7)
    plt.title(f'Error Absoluto vs. {feature}')
    plt.xlabel(f'{feature} {get_unit(feature)}', fontsize=10) # Added units to xlabel
    plt.ylabel('Error Absoluto |y_real - y_predicho| [mmol/g]')
    plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

# Calculate Pearson correlation coefficient

    # Calculate Pearson correlation coefficient
    correlation_pearson = df_test_analysis[feature].corr(df_test_analysis['Absolute_Error'], method='pearson')
    print(f"Correlación Pearson entre {feature} y Error Absoluto: {correlation_pearson:.4f}")

    # Calculate Spearman correlation coefficient
    correlation_spearman = df_test_analysis[feature].corr(df_test_analysis['Absolute_Error'], method='spearmanr')
    print(f"Correlación Spearman entre {feature} y Error Absoluto: {correlation_spearman:.4f}")

plt.tight_layout()
plt.show()
```

Figura 3-14 Interpretación estadística

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Fuentes de datos usadas para los modelos

En las siguientes tablas se recogen las fuentes de datos correspondientes a los distintos tipos de zeolitas analizadas. En dichas tablas se incluyen los distintos tipos de zeolitas analizadas, así como las variables de entrada y salida utilizadas para el modelado y la referencia bibliográfica de la que se han extraído los datos experimentales.

4.1.1 Zeolitas sintéticas

En la Tabla 4-1 se recogen las fuentes de datos correspondientes a las zeolitas sintéticas empleadas en el desarrollo de los modelos. En ella se incluyen los distintos tipos de zeolitas analizadas, así como las variables de entrada y salida utilizadas para el modelado y la referencia bibliográfica de la que se han extraído los datos experimentales.

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencia
5A					
1	0,1	25	0,5	0,52	[27]
2	0,2	25	0,5	0,88	
3	0,3	25	0,5	1,12	
4	0,5	25	0,5	1,62	
5	0,8	25	0,5	2,05	
6	1	25	0,5	2,3	
7	1,5	25	0,5	2,75	
8	2	25	0,5	3,1	
9	3	25	0,5	3,6	
10	4	25	0,5	3,95	
11	5	25	0,5	4,2	[28]

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencia
12	6	25	0,5	4,35	
13	8	25	0,5	4,53	
14	0,5	60	0,7	1,25	
15	1	60	0,7	1,55	
16	2	60	0,7	1,95	
17	3	60	0,7	2,3	
18	4	60	0,7	2,55	
19	5	60	0,7	2,75	
20	1	100	0,9	1,1	
21	2	100	0,9	1,35	
22	3	100	0,9	1,55	
23	4	100	0,9	1,7	
24	5	100	0,9	1,85	
25	6	100	0,9	2	
26	0,5	25	1	1,58	
27	1	25	1	2,2	
28	2	25	1	2,95	
29	3	25	1	3,4	
30	4	25	1	3,75	
31	5	25	1	4,05	
32	6	25	1	4,25	
33	7	25	1	4,4	
34	8	25	1	4,5	
35	1	40	0,8	1,9	[27]
36	2	40	0,8	2,4	
37	3	40	0,8	2,85	
38	4	40	0,8	3,15	
39	5	40	0,8	3,35	
40	6	40	0,8	3,5	

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencia
4A					
1	0,1	25	0,5	0,45	[29]
2	0,2	25	0,5	0,78	
3	0,3	25	0,5	1,02	
4	0,5	25	0,5	1,55	
5	0,8	25	0,5	2,1	
6	1	25	0,5	2,72	[30]
7	1,5	25	0,5	3,05	
8	2	25	0,5	3,35	
9	3	25	0,5	3,75	
10	4	25	0,5	4,05	
11	5	25	0,5	4,25	
12	6	25	0,5	4,4	
13	8	25	0,5	4,6	
14	0,5	40	0,7	1,35	
15	1	40	0,7	1,8	
16	2	40	0,7	2,3	
17	3	40	0,7	2,7	
18	4	40	0,7	3,05	
19	5	40	0,7	3,25	
20	1	60	0,8	1,3	[29]
21	2	60	0,8	1,7	
22	3	60	0,8	2,05	
23	4	60	0,8	2,35	
24	5	60	0,8	2,55	
25	6	60	0,8	2,7	
26	1	100	1	0,95	
27	2	100	1	1,2	

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencia
28	3	100	1	1,4	
29	4	100	1	1,55	
30	5	100	1	1,7	
31	6	100	1	1,85	
13X					
1	0,1	25	-	1,1	[31]
2	0,5	25	-	2,6	
3	1	25	-	3,5	
4	2	25	-	4,2	[32]
5	5	25	-	4,7	[33]
6	10	25	-	5,3	[33]
7	20	25	-	6,2	[34]
8	32	25	-	7,4	[32]
9	1	30	-	3,3	[7]
10	5	30	-	4,5	
11	1	35	-	3	
12	5	35	-	4,1	[35]
13	1	50	-	2,6	[36]
14	5	50	-	3,5	[35]
15	1	75	-	2,1	[32]
16	5	75	-	2,9	[33]
17	1	100	-	1,6	[33]
18	1	120	-	0,7	[34]
19	1	25	-	3,6	[32]
20	5	25	-	5	[31]
21	15	25	-	6	
22	30	25	-	7,2	
23	0,5	25	-	3,4	[7]
24	1	25	-	5,19	

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencia
25	2	25	-	5,45	
26	3	25	-	5,6	
27	5	25	-	5,75	
28	10	25	-	5,9	
29	1	25	-	3,5	[35]
30	5	25	-	4,7	[36]
31	32	25	-	7,4	[35]
32	1	20	-	3,2	[31]
33	1	35	-	2,9	
34	1	50	-	2,6	
35	5	25	-	5,2	[32]
36	1	10	-	4	[33]
37	20	25	-	6,5	[33]
38	1	25	-	3,6	[34]
39	1	120	-	0,7	[32]

Tabla 4-1 Tabla de zeolitas sintéticas

4.1.2 Zeolitas modificadas por intercambio iónico

En la Tabla 4-2 se recopilan los datos correspondientes a las zeolitas modificadas mediante procesos de intercambio iónico utilizadas en este trabajo. Para cada caso se indican el tipo de zeolita modificada, las variables de entrada y salida empleadas en el modelado y la referencia bibliográfica de la que se han obtenido los datos. Este tipo de modificación permite alterar las propiedades químicas y adsorbentes de las zeolitas, lo que resulta de interés para evaluar su influencia.

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencias
Na ⁺					
1	0,2	25	-	0,35	[7]
2	0,5	25	-	0,80	
3	1	25	-	1,60	
4	2	25	-	2,30	
5	3	25	-	2,75	

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencias
6	5	25	-	3,10	
7	10	25	-	3,40	
8	15	25	-	3,55	
9	1	25	-	3,40	
10	5	25	-	4,90	[37]
11	1	30	-	3,10	[38]
12	1	50	-	2,70	[39]
13	1	25	-	2,20	[40]
14	5	25	-	3	[40]
K⁺					
1	0,2	25	-	0,28	[7]
2	0,5	25	-	0,65	
3	1	25	-	1,30	
4	2	25	-	1,95	
5	3	25	-	2,40	
6	5	25	-	2,75	
7	10	25	-	3,05	
8	15	25	-	3,20	
9	1	25	-	2,60	
10	5	25	-	3,50	[37]
11	1	30	-	2,40	[38]
12	1	50	-	2	[39]
13	1	25	-	1,80	[40]
14	5	25	-	2.50	[40]
Ca²⁺					
1	0,2	25	-	0,20	[7]
2	0,5	25	-	0,50	
3	1	25	-	0,95	

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Q entrada (L/min)	q (mmol/g)	Referencias
4	2	25	-	1,45	
5	3	25	-	1,80	
6	5	25	-	2,10	
7	10	25	-	2,30	
8	15	25	-	2,45	
9	1	25	-	2,60	
10	5	25	-	3,50	[37]
11	1	30	-	2,40	[38]
12	1	50	-	2	[39]
13	1	25	-	1,80	[40]
14	5	25	-	2,50	[40]

Tabla 4-2 Tabla de zeolitas modificadas por intercambio iónico

4.1.3 Zeolitas naturales

La Tabla 4-3 presenta las fuentes bibliográficas de las que se han obtenido los datos correspondientes a las zeolitas naturales calcinadas consideradas en este estudio. En ella se indican los parámetros de entrada utilizados en los modelos y las referencias de trabajos científicos. Las zeolitas naturales se caracterizan por su origen geológico y por presentar una mayor variabilidad en su composición y propiedades, lo que aporta diversidad al conjunto de datos empleado en el análisis.

	Presión (bar)	Temperatura (°C)	q (mmol/g)	Q entrada (L/min)	Referencia
Temperatura de calcinación 650°C					
1	1	25	0,95	-	[19]
2	2	25	1,55	-	
3	3	25	1,90	-	
4	4	25	3,20	-	
5	5	25	2,05	-	
Temperatura de calcinación 550°C					
6	3	20	2,97	-	[5]
7	30	0	5,22	-	
Temperatura de calcinación 400°C					
8	0,2	25	0,18	-	[11]
9	0,5	25	0,42	-	
10	1	0	1,35	-	
11	2	0	2,30	-	
12	3	0	2,90	-	
13	5	0	3,40	-	
14	10	0	4,10	-	
15	1	10	1,10	-	
16	2	10	1,75	-	
17	3	10	2,05	-	
18	5	10	2,20	-	
19	10	10	2,30	-	
20	15	10	2,36	-	
21	0,2	10	0,25	-	
22	0,5	10	0,55	-	
23	0,2	0	0,40	-	
24	0,5	0	0,75	-	

Tabla 4-3 Tabla de zeolitas calcinadas

4.2 Elección del modelo

4.2.1 Zeolita calcinada

En la Tabla 4-4, Tabla 4-5 y Tabla 4-6 se presenta el *Random State* 50, 20 y 10, respectivamente. Como se puede comprobar, en todos los casos el modelo que ha presentado un mejor ajuste es *Gradient Boosting*, llegando a alcanzar un R^2 superior a 0,99 en el caso de *Random State* 50.

<i>Random State</i> 50			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>Gradient Boosting</i>	0,991166	0,10652	0,097662
<i>Random Forest</i>	0,920276	0,319994	0,26544
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,829533	0,467915	0,326008
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,548575	0,761446	0,632
Regresión Lineal	0,197919	1,015	0,965594

Tabla 4-4 Zeolita calcinada (50)

<i>Random State</i> 20			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>Gradient Boosting</i>	0,652528	0,511383	0,367739
<i>Random Forest</i>	0,338014	0,705848	0,61538
Regresión Lineal	0,198807	0,776525	0,583453
<i>K-Nearest Neighbors</i>	-0,046669	0,887547	0,6452
<i>SVR (Support Vector)</i>	-0,891781	1,193	0,96214

Tabla 4-5 Zeolita calcinada (20)

<i>Random State</i> 10			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>Gradient Boosting</i>	0,77796	0,481734	0,299229
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,775947	0,483913	0,280583
<i>Random Forest</i>	0,769687	0,490626	0,45402
Regresión Lineal	0,145762	0,944889	0,828335
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,12284	0,957483	0,796

Tabla 4-6 Zeolita calcinada (10)

En este caso el mejor modelo indudablemente es el Gradient Boosting, pues es el que tiene el mayor R^2 en los tres índices estudiados.

4.2.2 Zeolita modificada por intercambio iónico

En la Tabla 4-7, Tabla 4-8 y Tabla 4-9 se presenta el *Random State* 50, 20 y 10, respectivamente. Como se puede comprobar, en el caso del *Random State* 10, el modelo que ha presentado un mejor ajuste es *Gradient Boosting*, sin embargo, en los otros dos índices el mejor modelo es el *SVR*.

<i>Random State 50</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,245378	0,899576	0,845411
<i>Gradient Boosting</i>	0,030043	1,01988	0,830832
<i>Random Forest</i>	-0,06161	1,066982	0,900862
Regresión Lineal	-0,61555	1,316234	1,130412
<i>K-Nearest Neighbors</i>	-1,23957	1,549728	1,207778

Tabla 4-7 Zeolita modificada por intercambio iónico (50)

<i>Random State 20</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,567346	0,594622	0,455805
<i>Random Forest</i>	0,270178	0,772287	0,615051
<i>Gradient Boosting</i>	0,242737	0,786671	0,633615
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,054725	0,878920	0,672222
Regresión Lineal	-0,302662	1,031777	0,871003

Tabla 4-8 Zeolita modificada por intercambio iónico (20)

<i>Random State 10</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>Gradient Boosting</i>	0,376172	1,19997	0,971595
<i>Random Forest</i>	0,374764	1,201323	0,987342
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,298759	1,272246	0,994444
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,256751	1,3098	0,978976
Regresión Lineal	-0,028882	1,541063	1,300207

Tabla 4-9 Zeolita modificada por intercambio iónico (10)

Tras estas tres tablas se concluye que el mejor modelo teniendo en cuenta los tres índices de Random State es el *SVR (Support Vector)* que es el que en general tiene el mayor R^2 .

4.2.3 Zeolita 13X

En *Random State* con índice 50, se puede observar en la Tabla 4-10 que el mejor modelo es el *SVR (Support Vector Regression)*.

<i>Random State 50</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,685565	0,713428	0,51726
<i>Random Forest</i>	0,678617	0,721267	0,60348
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,639953	0,763422	0,58125
<i>Gradient Boosting</i>	0,628217	0,775763	0,654197
Regresión Lineal	0,422049	0,967231	0,807738

Tabla 4-10 Zeolita 13X (50)

En *Random State* con índice 20, se puede observar en la Tabla 4-11 que el mejor modelo teniendo en cuenta el R^2 sería el *Random Forest*.

<i>Random State 20</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>Random Forest</i>	0,84403	0,594157	0,499611
<i>Gradient Boosting</i>	0,823885	0,631362	0,562258
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,811658	0,652912	0,52553
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,786687	0,694847	0,63125
Regresión Lineal	0,769941	0,721607	0,540668

Tabla 4-11 Zeolita 13X (20)

En *Random State* con índice 10, se puede observar en la Tabla 4-12 que el mejor modelo teniendo en cuenta el R^2 sería el *K-Nearest Neighbors*.

<i>Random State 10</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,907523	0,544576	0,41875
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,904997	0,551962	0,343695
<i>Gradient Boosting</i>	0,903426	0,556508	0,448658

Regresión Lineal	0,895926	0,577713	0,512903
<i>Random Forest</i>	0,889078	0,596417	0,533852

Tabla 4-12 Zeolita 13X (10)

Tras estas tres tablas se concluye que el mejor modelo teniendo en cuenta los tres índices de Random State es el *SVR (Support Vector Regression)* que es el que en general tiene el mayor R^2 .

4.2.4 Zeolita 4A

En la Tabla 4-13, Tabla 4-14 y Tabla 4-15 se presenta el *Random State* 50, 20 y 10, respectivamente. Como se puede comprobar, en todos los casos el modelo que ha presentado un mejor ajuste es *SVR (Support Vector Regression)*, llegando a alcanzar un R^2 superior a 0,99 en el caso de *Random State* 50.

<i>Random State 50</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,99317	0,09316	0,070378
<i>Gradient Boosting</i>	0,96168	0,220658	0,193244
<i>Random Forest</i>	0,870413	0,405777	0,363586
Regresión Lineal	0,806628	0,495682	0,375511
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,783902	0,524001	0,478

Tabla 4-13 Zeolita 4A (50)

<i>Random State 20</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,989125	0,109558	0,088023
<i>Gradient Boosting</i>	0,9055	0,322952	0,285465
<i>Random Forest</i>	0,890096	0,34828	0,315357
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,783705	0,488591	0,357143
Regresión Lineal	0,686258	0,588448	0,451877

Tabla 4-14 Zeolita 4A (20)

<i>Random State 10</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,93776	0,188804	0,146434
<i>Random Forest</i>	0,658138	0,442488	0,369271
<i>Gradient Boosting</i>	0,601091	0,477985	0,439289

Regresión Lineal	0,532204	0,517613	0,403421
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,256001	0,652774	0,536571

Tabla 4-15 Zeolita 4A (10)

En este caso el mejor modelo es indudablemente el *SVR (Support Vector Regression)*.

4.2.5 Zeolita 5A

En la Tabla 4-16, Tabla 4-17 y Tabla 4-18 se presenta el *Random State* 50, 20 y 10, respectivamente. Como se puede comprobar, en todos los casos el modelo que ha presentado un mejor ajuste es *SVR (Support Vector Regression)*, llegando a alcanzar un R^2 superior a 0,98 en el caso de *Random State* 10.

<i>Random State 50</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,958543	0,209985	0,136365
<i>Random Forest</i>	0,863127	0,381546	0,296913
<i>Gradient Boosting</i>	0,847784	0,402364	0,337678
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,77499	0,489204	0,36775
Regresión Lineal	0,768569	0,496135	0,406253

Tabla 4-16 Zeolita 5A (50)

<i>Random State 20</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,937482	0,184954	0,125987
<i>Gradient Boosting</i>	0,930979	0,194335	0,166178
<i>Random Forest</i>	0,873681	0,262902	0,190663
Regresión Lineal	0,649761	0,437767	0,301745
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,148328	0,682648	0,54375

Tabla 4-17 Zeolita 5A (20)

<i>Random State 10</i>			
Modelo	R^2	RMSE (mmol/g)	MAE (mmol/g) ²
<i>SVR (Support Vector)</i>	0,984015	0,120626	0,106584
<i>Gradient Boosting</i>	0,928949	0,254316	0,234548

<i>Random State 10</i>			
<i>Random Forest</i>	0,842416	0,378745	0,303512
Regresión Lineal	0,776367	0,451189	0,376545
<i>K-Nearest Neighbors</i>	0,663108	0,553779	0,4505

Tabla 4-18 Zeolita 5A (10)

Con el objetivo de realizar una comparación global del rendimiento predictivo de los distintos modelos de aprendizaje automático, se llevó a cabo un análisis de clasificación basado en el coeficiente de determinación (R^2). Este parámetro se empleó como criterio principal de evaluación debido a que permite medir el grado en que el modelo es capaz de explicar la variabilidad de los datos experimentales, siendo valores más cercanos a 1 indicativos de un mejor ajuste entre los valores predichos y los valores reales.

Para establecer una comparación homogénea entre los modelos evaluados (*Gradient Boosting*, *Random Forest*, *Support Vector Regression SVR*, *K-Nearest Neighbors* y Regresión Lineal), se aplicó un sistema de puntuación basado en el valor de R^2 obtenido en cada una de las tablas correspondientes a las diferentes zeolitas y configuraciones de *random state*. En cada caso, los modelos fueron ordenados de mayor a menor valor de R^2 , asignando 1 punto al modelo con el mayor coeficiente de determinación y 5 puntos al modelo con el menor valor. Los modelos intermedios recibieron puntuaciones progresivas de acuerdo con su posición en la clasificación.

Posteriormente, se procedió a sumar los puntos obtenidos por cada modelo en todas las tablas analizadas, que incluyen los resultados correspondientes a las cinco zeolitas estudiadas (zeolita calcinada, zeolita modificada por intercambio iónico, zeolita 13X, zeolita 4A y zeolita 5A) y a los tres valores de *random state* considerados (10, 20 y 50). De este modo, se obtuvo una puntuación total acumulada para cada algoritmo, permitiendo evaluar su rendimiento global a lo largo de todos los conjuntos de datos analizados.

En este sistema de clasificación, un menor número de puntos acumulados indica un mejor comportamiento predictivo, ya que implica que el modelo ha ocupado posiciones superiores en la mayoría de las comparaciones basadas en R^2 . A partir de este procedimiento, se elaboró un ranking global de los modelos, lo que permitió identificar cuál de ellos presenta un rendimiento más consistente en la predicción de la adsorción de CO_2 bajo diferentes condiciones operativas y para distintos tipos de zeolitas.

Los resultados obtenidos muestran que el modelo *Support Vector Regression (SVR)* presenta el mejor rendimiento global al obtener la menor puntuación total acumulada, seguido por *Gradient Boosting* y *Random Forest*. Por el contrario, *K-Nearest Neighbors* y la regresión lineal presentan puntuaciones significativamente mayores, lo que indica una menor capacidad para reproducir con precisión el comportamiento experimental de los datos analizados. Estos resultados sugieren que los modelos basados en métodos no lineales y técnicas de aprendizaje más avanzadas son más adecuados para describir la relación entre las variables de operación y la capacidad de adsorción de CO_2 en zeolitas.

En la Figura 4-1 se presenta la clasificación global de los modelos analizados, donde se compara su rendimiento predictivo considerando todas las zeolitas estudiadas.

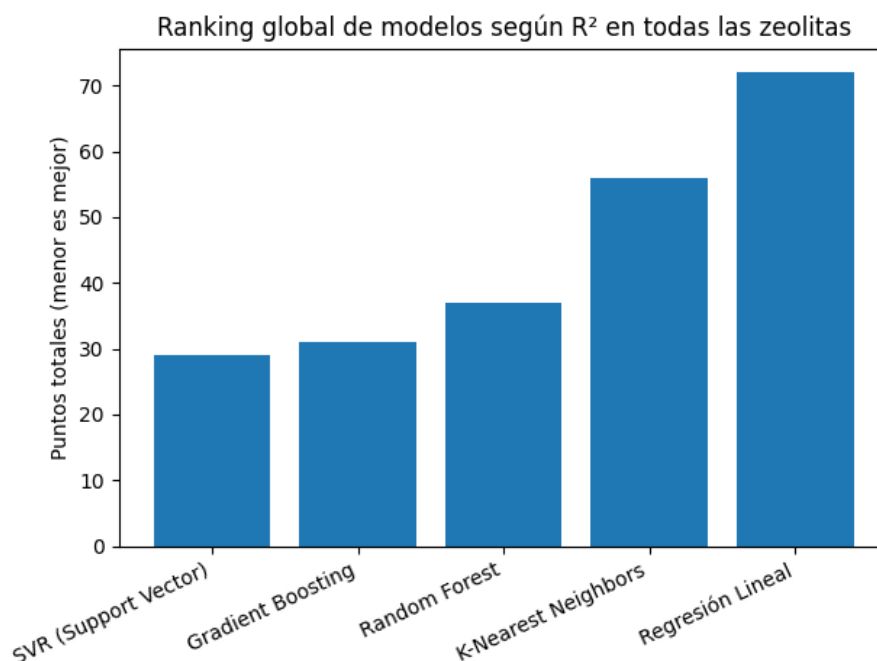


Figura 4-1 Ranking modelos según R^2

4.3 Predicción de condiciones óptimas

4.3.1 Zeolita Calcinada

Tras analizar el comportamiento de la zeolita calcinada en el apartado anterior, se puede concluir que el modelo que ofrece un mejor rendimiento predictivo es el *Gradient Boosting*, empleando un *random state* de 50. Esta elección se fundamenta en que dicho modelo presenta el valor más elevado del coeficiente de determinación R^2 (0,991166), en el *RMSE* (0,10652 mmol/g) y un *MAE* (0,097662 (mmol/g)²), por lo que al aproximarse tanto a 1 el R^2 se considera un buen ajuste.

La Figura 4-2 muestra la comparación entre los valores experimentales de adsorción de CO₂ y los valores predichos por el modelo *Gradient Boosting*. La línea discontinua roja representa la predicción ideal, donde los valores predichos coinciden exactamente con los valores experimentales. Como se observa, la mayoría de los puntos se encuentran próximos a dicha línea, lo que indica que el modelo presenta una buena capacidad de predicción y reproduce adecuadamente el comportamiento experimental de los datos.

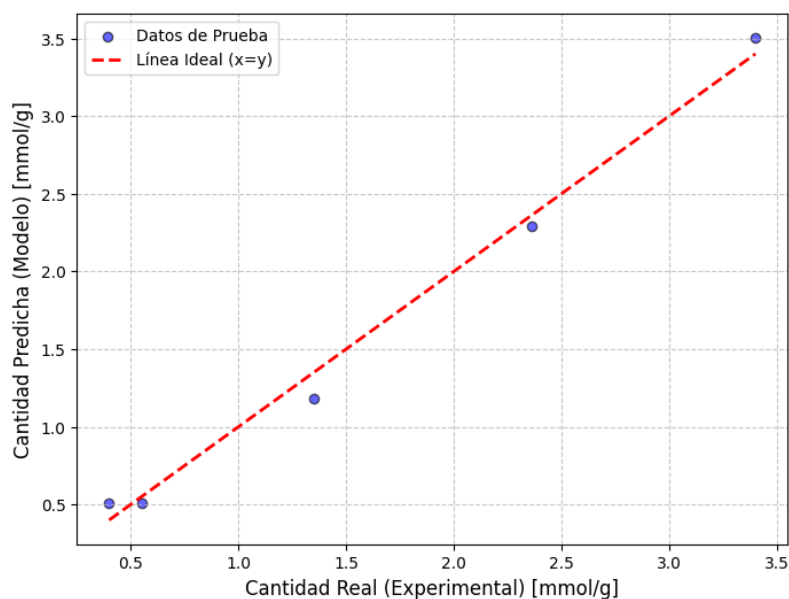


Figura 4-2 Gráfica rectilínea de la zeolita calcinada

A continuación, la Figura 4-3 muestra la superficie del error absoluto del modelo *Gradient Boosting* en función de la temperatura y la presión. El eje vertical representa el error absoluto entre los valores experimentales y los valores predichos por el modelo. Los colores indican la magnitud del error, donde los tonos más oscuros corresponden a errores menores y los tonos más claros a errores mayores. Se observa que la mayor parte de la superficie presenta valores de error relativamente bajos, lo que indica que el modelo mantiene una buena capacidad de predicción en las diferentes condiciones experimentales analizadas.

Superficie de Error Absoluto para el Modelo: Gradient Boosting

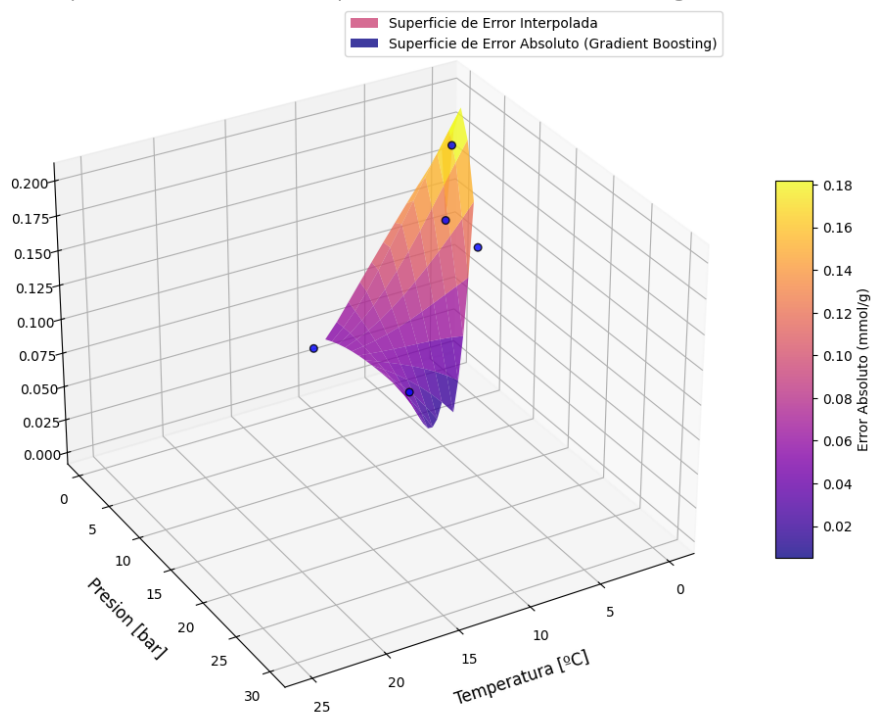


Figura 4-3 Gráfica 3D error absoluto calcinada

En la siguiente Figura 4-4 se puede observar el análisis de correlación realizado entre las variables de entrada y el error absoluto del modelo que muestra que la temperatura presenta una correlación

negativa fuerte con el error de predicción (Pearson = -0.8289 ; Spearman = -0.8660), lo que indica que el modelo tiende a cometer menores errores a temperaturas más elevadas. Por otro lado, la presión muestra una correlación negativa débil con el error (Pearson = -0.2836 ; Spearman = -0.2000), lo que sugiere que su influencia en la precisión del modelo es limitada. Los gráficos de dispersión confirman estas observaciones, evidenciando una tendencia clara de reducción del error con el aumento de la temperatura, mientras que no se aprecia una relación definida entre la presión y el error del modelo.

--- Análisis de Correlación y Visualización ---

Correlación Pearson entre Temperatura y Error Absoluto: -0.8289

Correlación Spearman entre Temperatura y Error Absoluto: -0.8660

Correlación Pearson entre Presion y Error Absoluto: -0.2836

Correlación Spearman entre Presion y Error Absoluto: -0.2000

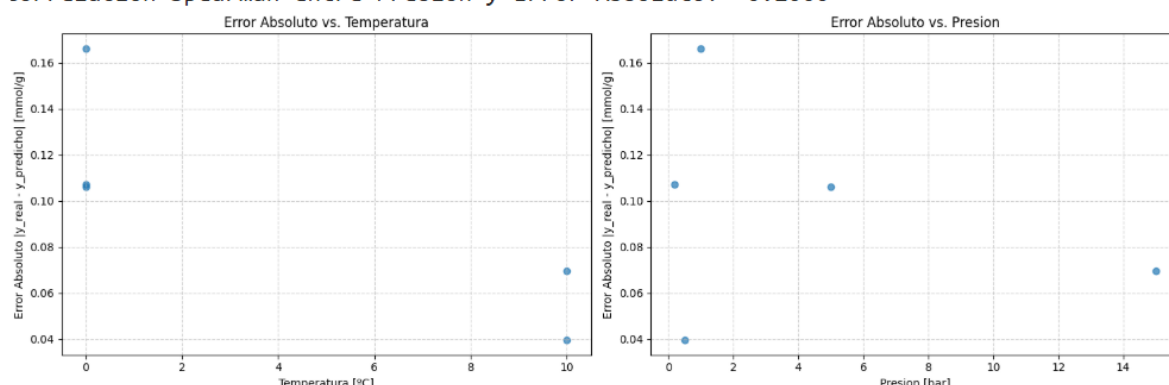


Figura 4-4 Análisis de dispersión de la zeolita calcinada

El comportamiento observado para la zeolita calcinada puede explicarse a partir de los cambios estructurales que se producen durante el proceso de calcinación. Este tratamiento térmico elimina moléculas de agua y posibles impurezas presentes en los microporos del material, lo que incrementa la accesibilidad de los poros y mejora la disponibilidad de los sitios activos para la adsorción de CO₂.

La adsorción de CO₂ en zeolitas se produce principalmente mediante fisisorción, un proceso exotérmico gobernado por fuerzas de van der Waals e interacciones electrostáticas entre el gas y la superficie del adsorbente. Debido a este carácter exotérmico, el aumento de la temperatura tiende a reducir la cantidad de CO₂ adsorbido. Por otro lado, el aumento de la presión favorece la adsorción al incrementar la concentración de moléculas de CO₂ disponibles para ocupar los microporos del material como se aprecia en la Figura 4-5. Este comportamiento es característico de las isothermas de adsorción tipo I, típicas de materiales microporosos como las zeolitas. Los resultados obtenidos concuerdan, por tanto, con el comportamiento esperado para este tipo de materiales adsorbentes [42].

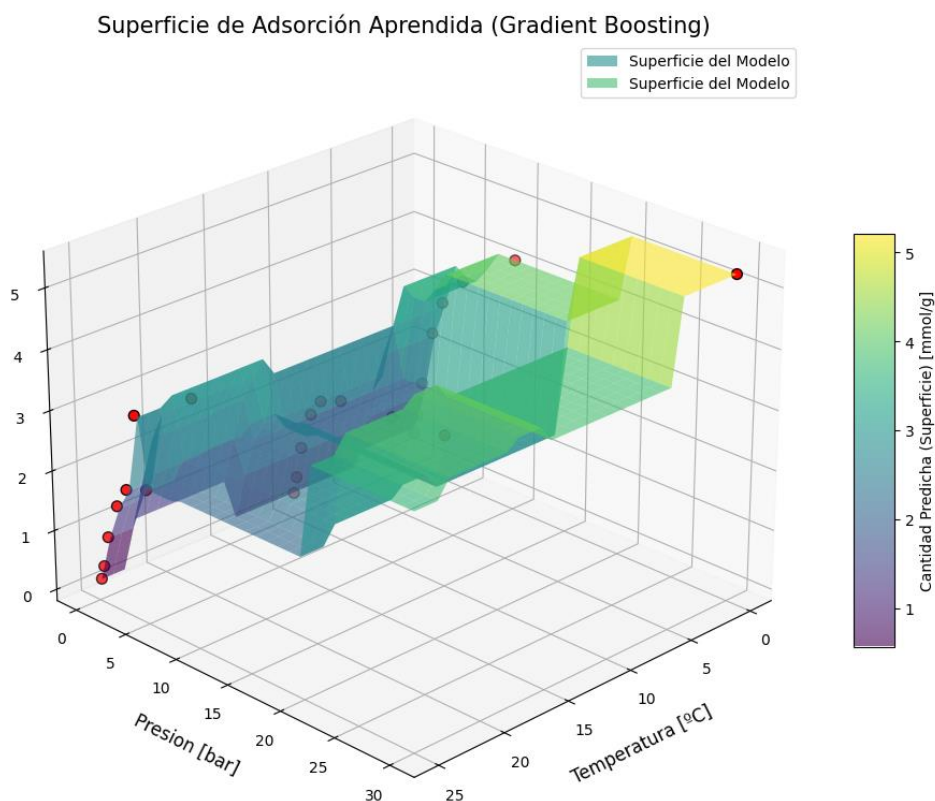


Figura 4-5 Adsorción en 3D de la zeolita calcinada

4.3.2 Zeolita modificada por intercambio iónico

Tras analizar el comportamiento de la zeolita modificada por intercambio iónico en el apartado anterior, se puede concluir que el modelo que ofrece un mejor rendimiento predictivo es el *SVR* (*Support Vector*), empleando un *random state* de 20. Esta elección se fundamenta en que dicho modelo presenta el valor más elevado del coeficiente de determinación R^2 (0,567346), un RMSE (0,594622 mmol/g) y un MAE (0,455805(mmol/g) ²), en este caso el ajuste presenta cierta debilidad confirmando la lejanía al 1 en R^2 .

La Figura 4-6 muestra la comparación entre los valores experimentales de adsorción de CO₂ y los valores predichos por el modelo *SVR*. Como cabía esperar de acuerdo con el valor bajo de R^2 obtenido, se puede apreciar cómo los valores experimentales no se superponen con la línea discontinua roja que representa la predicción ideal, por tanto existe una desviación de los valores predichos frente los valores experimentales. Se observa que la mayoría de los puntos no se sitúan próximos a dicha línea, lo que indica una no tan buena capacidad predictiva del modelo, observándose un mejor ajuste a valores bajos y un empeoramiento de del mismo a valores más elevados de adsorción, lo que refleja pequeñas diferencias entre las predicciones del modelo y los datos experimentales.

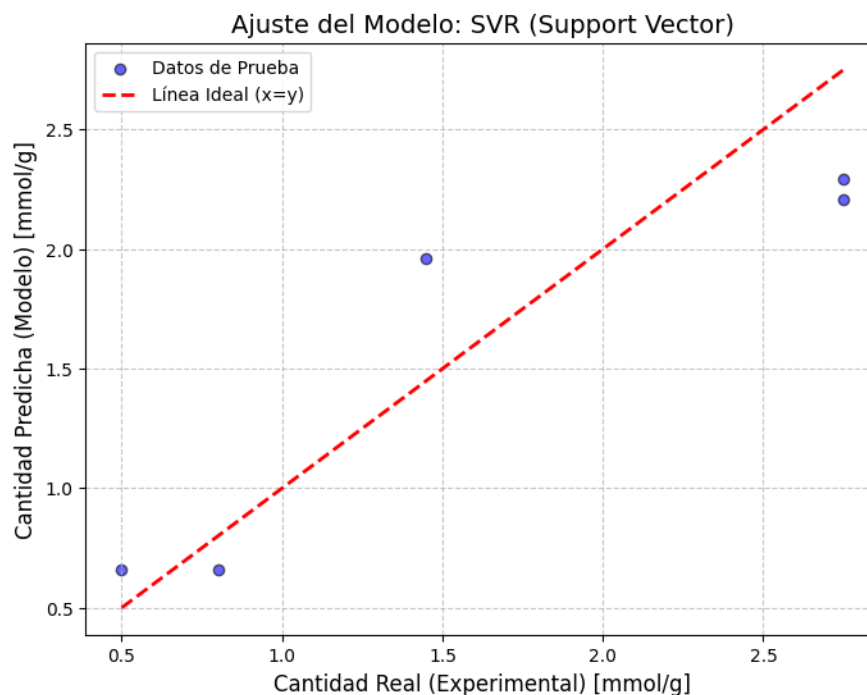


Figura 4-6 Gráfica rectilínea de la zeolita modificada por intercambio iónico

La Figura 4-7 muestra la superficie del error absoluto del modelo SVR en función de la temperatura y la presión. Los puntos azules representan los errores reales del conjunto de validación, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación del error entre dichos puntos. En general, se observa que el error del modelo tiende a disminuir ligeramente a presiones más elevadas, mientras que

a temperaturas y presiones más bajas los errores son mayores. En conjunto, el modelo presenta una precisión aceptable en la mayoría de las condiciones analizadas.

Superficie de Error Absoluto para el Modelo: SVR (Support Vector)

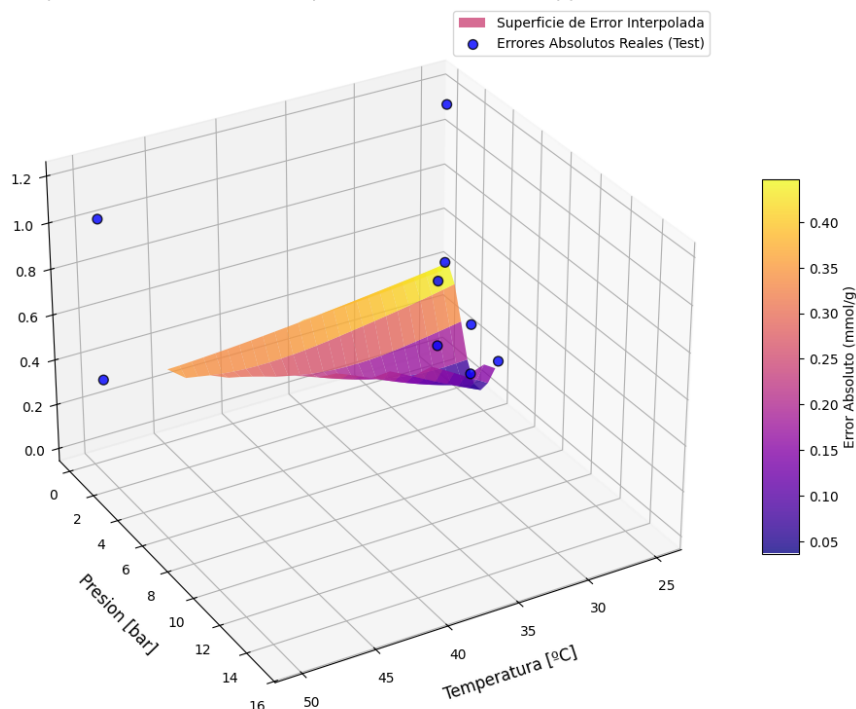


Figura 4-7 Representación error absoluto modificación por intercambio iónico

La Figura 4-8 muestra el análisis de correlación entre temperatura, presión y el error absoluto del modelo. Los resultados indican que la temperatura presenta una correlación positiva moderada con el error ($Pearson = 0,3790$ y $Spearman = 0,4140$), lo que sugiere que el error tiende a aumentar ligeramente a temperaturas más altas. En cambio, la presión muestra una correlación negativa ($Pearson = -0,3618$ y $Spearman = -0,2635$), indicando que el error del modelo tiende a disminuir al aumentar la presión. Los gráficos de dispersión confirman estas tendencias, mostrando mayor dispersión del error a temperaturas altas y menores errores a presiones más elevadas.

--- Análisis de Correlación y Visualización ---

Correlación Pearson entre Temperatura y Error Absoluto: 0.3790

Correlación Spearman entre Temperatura y Error Absoluto: 0.4140

Correlación Pearson entre Presion y Error Absoluto: -0.3618

Correlación Spearman entre Presion y Error Absoluto: -0.2635

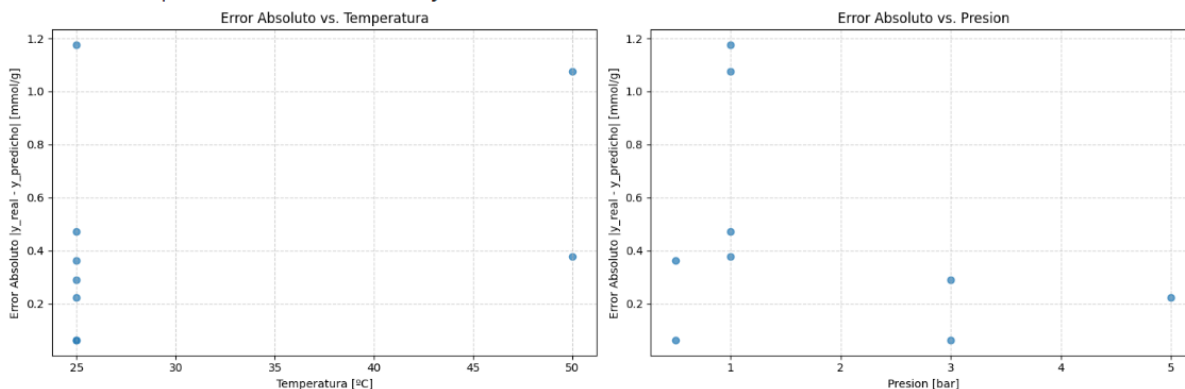


Figura 4-8 Análisis de dispersión de la zeolita modificada por intercambio iónico

La modificación de la zeolita mediante intercambio iónico altera la naturaleza de los cationes presentes en la estructura cristalina, lo que modifica el campo electrostático dentro de los microporos. Estos cationes desempeñan un papel fundamental en la adsorción de CO₂, ya que generan sitios activos capaces de interactuar con la molécula de CO₂, que presenta un momento cuadrupolar significativo.

La sustitución de los cationes originales por otros de diferente tamaño o carga puede modificar la intensidad de estas interacciones electrostáticas y, en consecuencia, la afinidad del material por el CO₂. Este efecto explica las variaciones observadas en el comportamiento del sistema frente a cambios de temperatura y presión.

En general, el aumento de la presión favorece la adsorción al incrementar la probabilidad de ocupación de los microporos por moléculas de CO₂, mientras que el aumento de la temperatura puede reducir la cantidad adsorbida debido al carácter exotérmico del proceso de fisisorción, como se puede apreciar en la Figura 4-9. Los resultados obtenidos concuerdan con el comportamiento esperado para zeolitas modificadas, donde la capacidad de adsorción depende en gran medida del tipo de cationes presentes en la estructura del material [43].

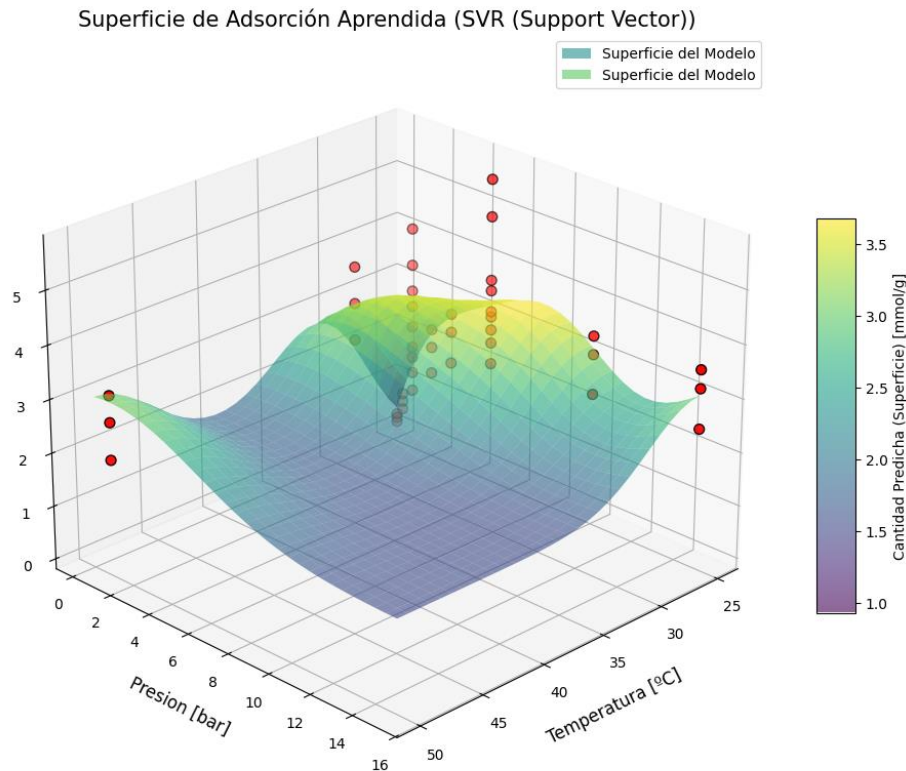


Figura 4-9 Resultado adsorción 3D de modificada iónicamente

4.3.3 Zeolita 13X

Tras analizar el comportamiento de la zeolita 13X en el apartado anterior, se puede concluir que el modelo que ofrece un mejor rendimiento predictivo es el *K-Nearest Neighbors (KNN)*, empleando un *random state* de 10. Esta elección se fundamenta en que dicho modelo presenta el valor más elevado del coeficiente de determinación R^2 (0,907523), un *RMSE* (0,544576 mmol/g) y un *MAE* (0,41875 (mmol/g)²), en este caso presenta un buen ajuste ya que su R^2 es próximo a 1.

La Figura 4-10 muestra la comparación entre los valores experimentales y los valores predichos por el modelo *K-Nearest Neighbors (KNN)*. La línea discontinua roja representa la línea ideal ($x = y$), donde las predicciones coincidirían exactamente con los valores reales. En general, los puntos se sitúan

relativamente cerca de esta línea, lo que indica que el modelo presenta un buen ajuste y una capacidad razonable de predicción. No obstante, se observan algunas desviaciones puntuales, lo que refleja pequeños errores de predicción en determinados valores experimentales. En conjunto, el modelo reproduce adecuadamente la tendencia de los datos experimentales.

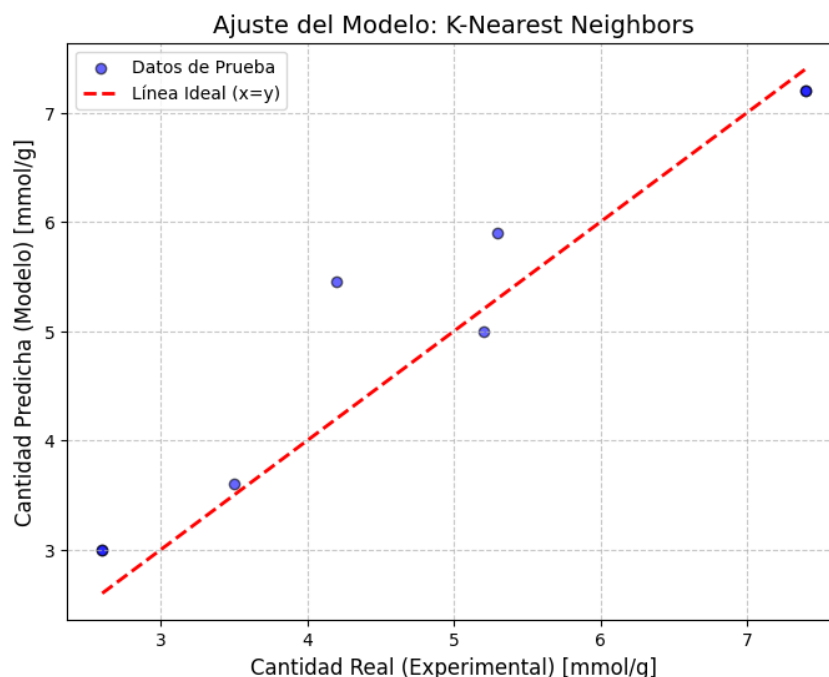


Figura 4-10 Gráfica rectilínea de la zeolita 13X

La Figura 4-11 muestra la superficie del error absoluto del modelo K-Nearest Neighbors (KNN) en función de la temperatura y la presión. La superficie interpolada representa la variación del error en el espacio de variables, mientras que los puntos azules corresponden a los errores absolutos obtenidos en los datos de prueba. En general, se observa que el error varía según la combinación de temperatura y presión, presentando valores más altos en determinadas regiones del espacio analizado, pero sin una tendencia clara. Esta representación permite visualizar cómo las condiciones operativas influyen en el rendimiento del modelo y facilita la identificación de zonas donde las predicciones son más precisas.

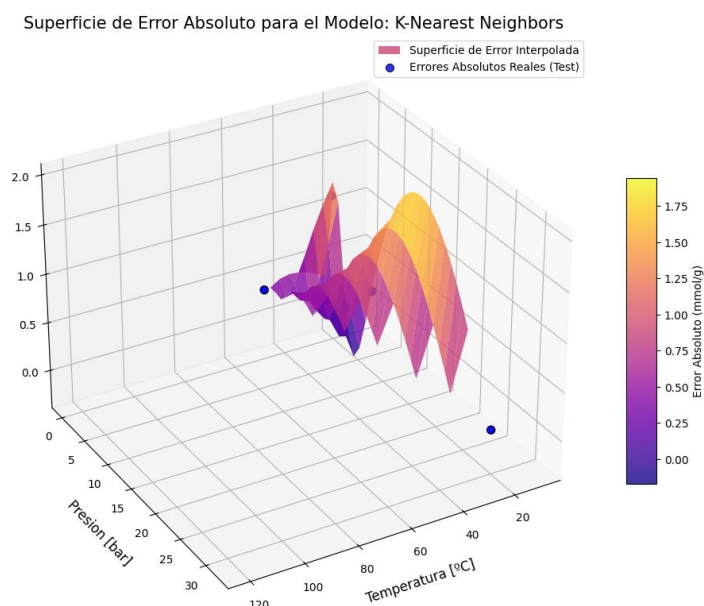


Figura 4-11 Error absoluto de zeolita 13X

La Figura 4-12 muestra el análisis de correlación entre la temperatura, la presión y el error absoluto del modelo. Los resultados indican que la temperatura presenta una correlación prácticamente nula con el error (Coeficiente de Pearson = $-0,0311$ y Coeficiente de Spearman = $0,2598$), lo que sugiere que no existe una relación lineal clara entre ambas variables. Por otro lado, la presión muestra una correlación negativa débil (Coeficiente de Pearson = $-0,3375$ y Coeficiente de Spearman = $-0,1013$), indicando que el error del modelo tiende a disminuir ligeramente a medida que aumenta la presión. Los gráficos de dispersión respaldan estos resultados, mostrando una distribución de puntos sin una tendencia clara en el caso de la temperatura y una ligera tendencia decreciente del error con la presión.

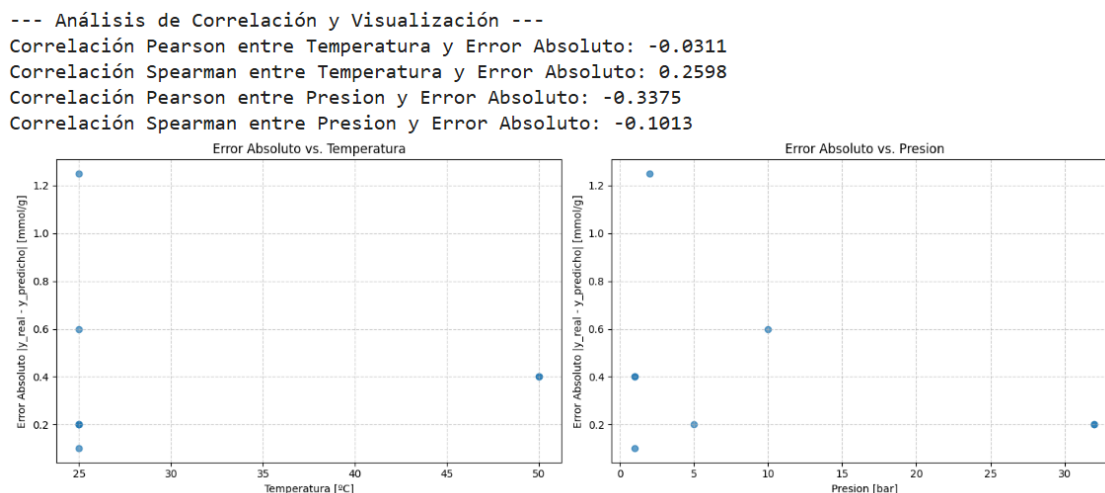


Figura 4-12 Análisis de dispersión de la zeolita 13X

La zeolita 13X es uno de los materiales más utilizados para la captura de CO₂ debido a su elevada superficie específica y a su estructura microporosa con cavidades relativamente grandes, de aproximadamente 10 Å (1 nanómetro). Este tamaño de poro facilita la difusión de las moléculas de CO₂ hacia el interior del material y permite una elevada capacidad de adsorción [44].

Además, la zeolita 13X contiene cationes compensadores, generalmente Na⁺, que generan campos electrostáticos dentro de los microporos. Estas cargas favorecen la interacción con el CO₂, que posee un momento cuadrupolar elevado, lo que incrementa la afinidad del material por este gas.

En este tipo de zeolitas, como se puede observar en la Figura 4-13 el aumento de la presión favorece la adsorción debido al incremento de la concentración de CO₂ disponible para ocupar los microporos. Por otro lado, la influencia de la temperatura puede ser menos marcada dentro de ciertos rangos operativos, lo que coincide con la baja correlación observada entre temperatura y error del modelo. Este comportamiento es coherente con la elevada capacidad de adsorción y la estabilidad del proceso en zeolitas tipo X [44].

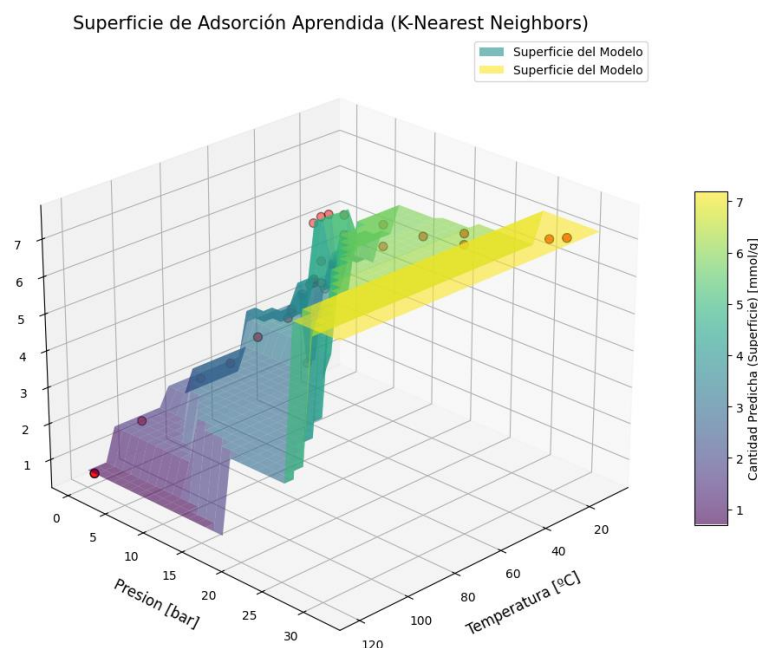


Figura 4-13 adsorción en 3D zeolita 13X

4.3.4 Zeolita 4A

Tras analizar el comportamiento de la zeolita 4A previamente, el modelo que ofrece un mejor rendimiento predictivo es el *SVR* (*Support Vector*), empleando un *random state* de 50. Esta elección se fundamenta en que dicho modelo presenta el valor más elevado del coeficiente de determinación R^2 (0,99317), *RMSE* (0,09316 mmol/g) y *MAE* (0,070378(mmol/g)²), en este caso presenta un buen ajuste ya que su R^2 es próximo a 1.

La Figura 4-14Figura 4-20 muestra la comparación entre los valores experimentales de adsorción de CO₂ y los valores predichos por el modelo *SVR*. La línea discontinua roja representa la predicción ideal, donde los valores predichos coinciden exactamente con los valores experimentales. Como se observa, la mayoría de los puntos se sitúan muy próximos a dicha línea e incluso encima, lo que indica que el modelo presenta una buena capacidad predictiva y reproduce adecuadamente la tendencia de los datos experimentales.

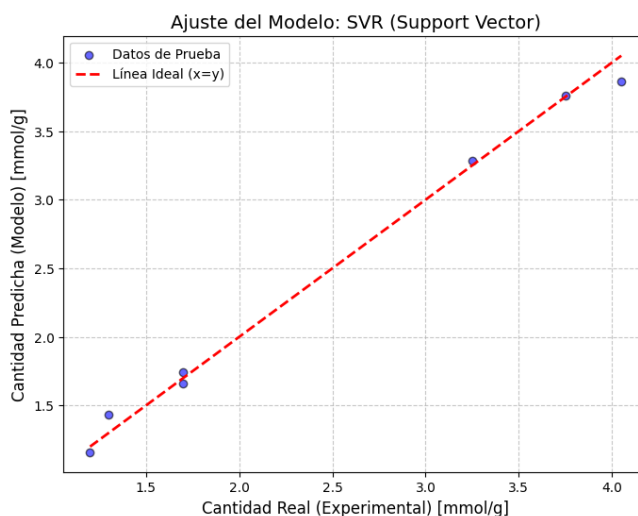


Figura 4-14 Gráfica rectilínea de la zeolita 4A

La Figura 4-15 muestra la superficie del error absoluto del modelo *SVR* en función de la presión y del caudal de entrada del gas. Dado que el modelo considera tres variables de entrada, fue necesario fijar la temperatura en un valor constante que resulta ser el valor medio (49,19 °C) para poder representar gráficamente el comportamiento del error en tres dimensiones. Los puntos azules representan los errores obtenidos en el conjunto de validación, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación de dichos valores. En general, se observa que el modelo presenta errores relativamente bajos en la mayor parte del dominio analizado, menos en la zona central del rango de presiones, lo que indica una buena capacidad predictiva bajo diferentes condiciones operativas.

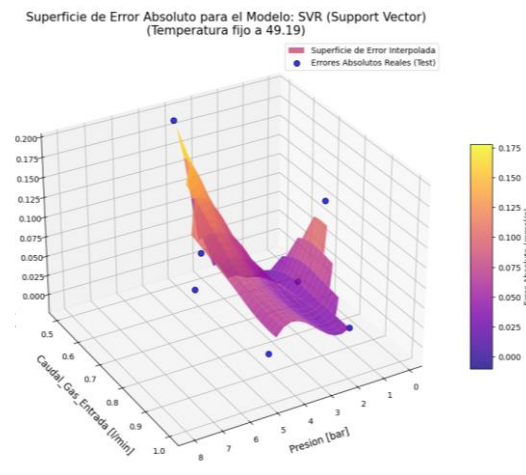


Figura 4-15 Error absoluto de zeolita 4A (Temperatura fija)

La Figura 4-16 muestra la superficie del error absoluto del modelo *SVR* en función de la temperatura y del caudal de entrada del gas, manteniendo la presión constante en 2,90 bar. Al igual que en el caso anterior los puntos azules representan los errores obtenidos en el conjunto de prueba, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación del error entre dichos puntos. Los colores más oscuros indican errores menores y los más claros errores mayores. En general, se observa que el error del modelo se mantiene relativamente bajo en la mayoría de las condiciones analizadas, lo que indica una buena capacidad predictiva del modelo, menos a bajas temperaturas.

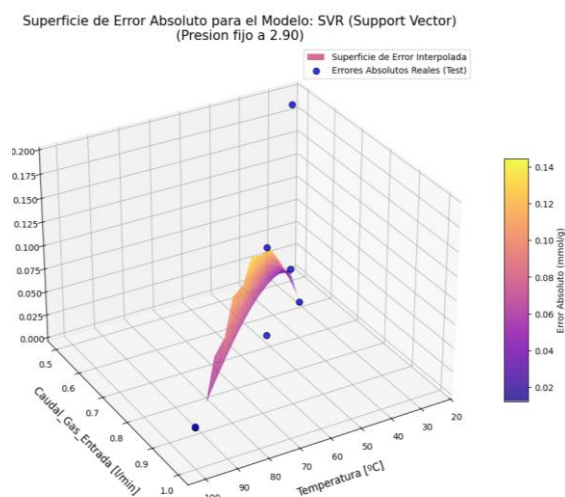


Figura 4-16 Error absoluto de zeolita 4A (Presión fija)

La Figura 4-17 muestra la superficie del error absoluto del modelo *SVR* en función de la temperatura y la presión, manteniendo el caudal de entrada del gas constante en 0,69 L/min. Los puntos azules corresponden a los errores obtenidos en el conjunto de prueba, mientras que la superficie coloreada

representa una interpolación de dichos errores. En esta representación, los tonos más oscuros se asocian a errores menores y los más claros a errores mayores. De forma general, el modelo presenta errores relativamente bajos en la mayor parte de las condiciones analizadas, lo que refleja una buena capacidad predictiva; sin embargo, a bajas temperaturas se observa un incremento del error, y en el caso de la presión no se identifica una tendencia clara.

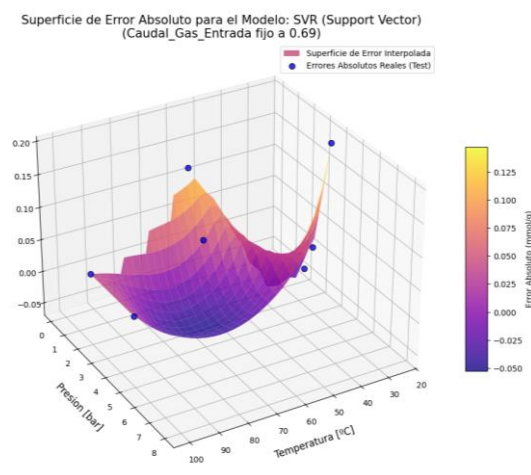


Figura 4-17 Error absoluto de zeolita 4A (Caudal fijo)

La Figura 4-18 muestra el análisis de correlación entre las variables de entrada (temperatura, presión y caudal de entrada del gas) y el error absoluto del modelo SVR. Los coeficientes de correlación de Pearson y Spearman indican que la relación entre estas variables y el error del modelo es débil, ya que los valores obtenidos se encuentran próximos a cero. Los gráficos de dispersión muestran la distribución del error absoluto respecto a cada variable, sin observarse una tendencia clara. Esto sugiere que el error del modelo no depende fuertemente de ninguna de estas variables dentro del rango de condiciones analizadas, aunque por las gráficas previas se apreciaba más nítidamente que a menor temperatura se aumenta el valor de error respaldado aquí también por sus coeficientes de Pearson (-0,3001) y Spearman (0,00367) en cuanto a lo que la temperatura se refiere. En cuanto a la presión, Pearson (-0,1395) y Spearman (-0,4364). Por último, teniendo en cuenta el caudal del gas de entrada, Pearson (-0,3183) y Spearman (0,0367).

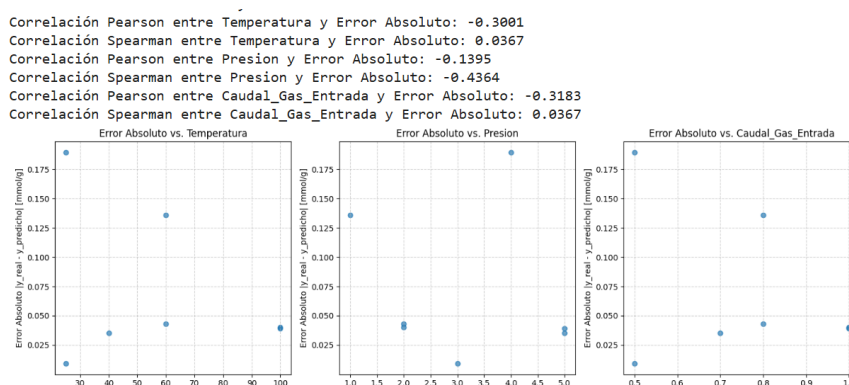


Figura 4-18 Análisis de dispersión de la zeolita 4A

El comportamiento observado para la zeolita 4A puede explicarse a partir de sus propiedades físico-químicas. Este material presenta una estructura con poros muy pequeños, de aproximadamente 4 Å (0,4 nm), ligeramente mayores que el tamaño de una molécula de CO₂, cuyo diámetro es cercano a 3,3 Å. Esta similitud de tamaños facilita que las moléculas de CO₂ puedan penetrar en los microporos y quedar retenidas en su interior [45].

Además, la estructura de la zeolita contiene cationes, generalmente Na⁺, que generan campos electrostáticos dentro de los poros. Debido a que el CO₂ posee un momento cuadrupolar, se producen interacciones electrostáticas entre el gas y estos cationes, lo que aumenta la afinidad del material por el CO₂.

En cuanto a las condiciones de operación, el aumento de la presión favorece la adsorción al incrementar la cantidad de moléculas de CO₂ disponibles para ocupar los microporos. Por otro lado, como muestra la Figura 4-19 dado que la adsorción es un proceso exotérmico, temperaturas moderadas favorecen la retención del gas en el material adsorbente. Estos resultados concuerdan con las propiedades conocidas de la zeolita 4A y confirman su eficacia para la captura de CO₂ [45].

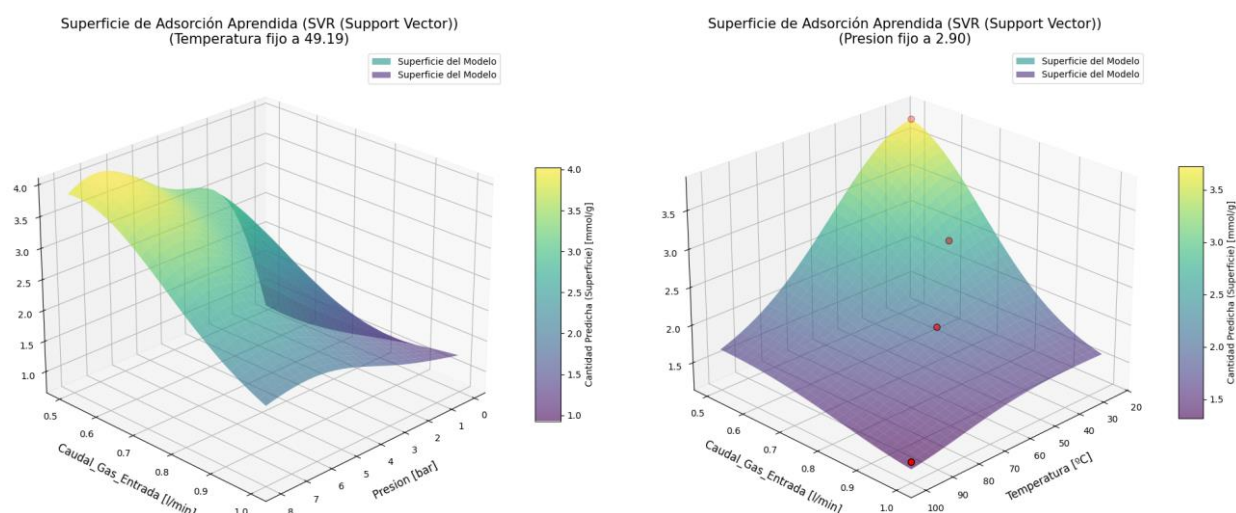


Figura 4-19 Representación de la adsorción en 3D fijando temperatura y presión de la zeolita 4A

4.3.5 Zeolita 5A

Tras analizar el comportamiento de la zeolita 5A en el apartado anterior, se puede concluir que el modelo que ofrece un mejor rendimiento predictivo es el *SVR (Support Vector)*, empleando un *random state* de 10. Esta elección se fundamenta en que dicho modelo presenta el valor más elevado del coeficiente de determinación R^2 (0,984015), $RMSE$ (0,120626 mmol/g) y MAE (0,106584 (mmol/g) ²), en este caso presenta un buen ajuste ya que su R^2 es próximo a 1.

La Figura 4-20 muestra la comparación entre los valores experimentales de adsorción de CO₂ y los valores predichos por el modelo SVR. La línea discontinua roja representa la predicción ideal, donde los valores predichos coinciden exactamente con los valores experimentales. Como se observa, la mayoría de los puntos se sitúan próximos a dicha línea, lo que indica que el modelo presenta una buena capacidad predictiva y reproduce adecuadamente la tendencia de los datos experimentales.

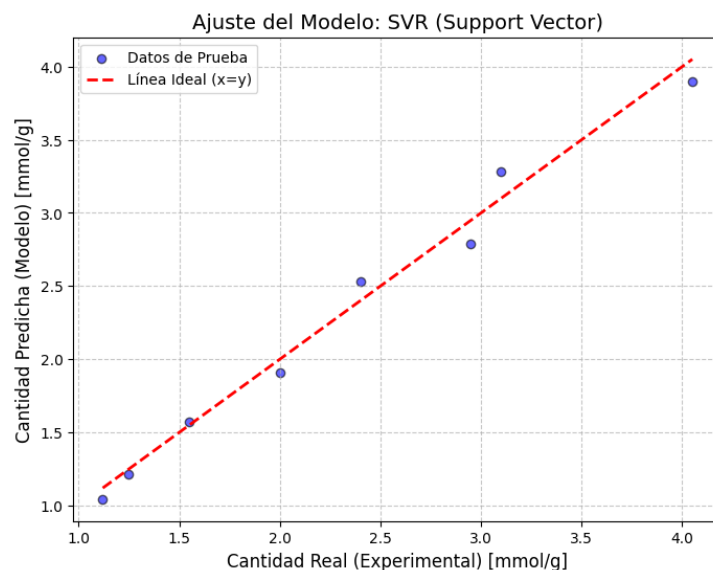


Figura 4-20 Gráfica rectilínea de la zeolita 5A

La Figura 4-21 muestra la superficie del error absoluto del modelo *SVR* en función de la presión y del caudal de entrada del gas. Dado que el modelo considera tres variables de entrada, fue necesario fijar la temperatura en un valor constante que resulta ser el valor medio de los datos de temperatura (43,75 °C) para poder representar gráficamente el comportamiento del error en tres dimensiones. Los puntos azules representan los errores obtenidos en el conjunto de validación, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación de dichos valores. En general, se observa que el modelo presenta mayores errores a menor caudal de gas de entrada y menor error a menor presión.

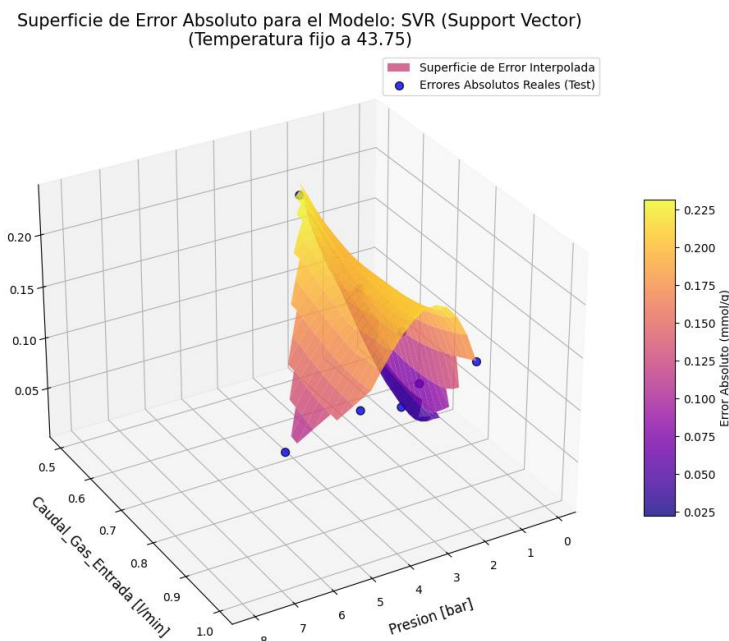


Figura 4-21 Error absoluto de zeolita 5A (Temperatura fija)

La Figura 4-22 muestra la superficie del error absoluto del modelo *SVR* en función de la temperatura y del caudal de entrada del gas, manteniendo la presión constante en un valor de 3,16 bar. Los puntos azules representan los errores obtenidos en el conjunto de validación, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación de dichos valores. En general, se observa que el error del modelo se mantiene dentro de un rango relativamente bajo en la mayoría de las condiciones analizadas,

menos en bajas temperaturas y alto caudal de entrada, lo que indica una buena capacidad predictiva del modelo.

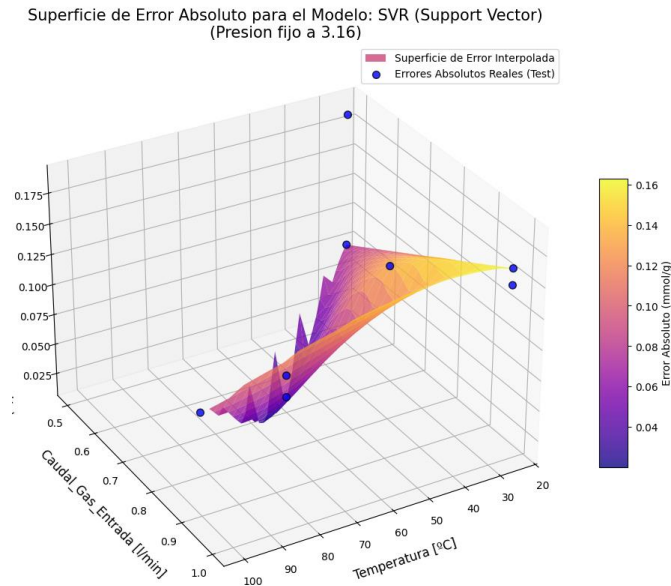


Figura 4-22 Error absoluto de zeolita 5A (Presión fija)

La Figura 4-23 muestra la superficie del error absoluto del modelo SVR en función de la temperatura y la presión, manteniendo constante el caudal de entrada del gas en 0,75 L/min. Los puntos azules representan los errores obtenidos en el conjunto de validación, mientras que la superficie coloreada corresponde a una interpolación de dichos valores. En general, se observa que el error del modelo se mantiene dentro de un rango relativamente bajo en la mayoría de las condiciones analizadas, lo que indica una buena capacidad predictiva del modelo. No obstante, se nota un aumento considerable de error a temperaturas entre los 40° C y los 20° C manteniéndose a bajas presiones.

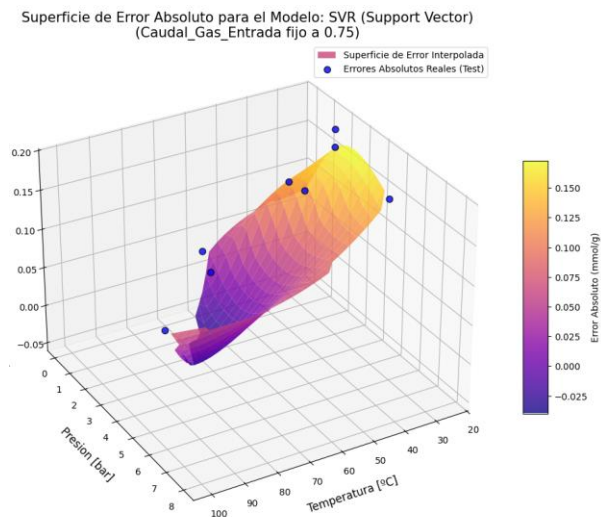


Figura 4-23 Error absoluto de zeolita 5A (Caudal fijo)

Como se puede apreciar en la Figura 4-24 con los coeficientes de *Spearman* (-0,6513) y el coeficiente de *Pearson* (-0,5508), el análisis de correlación muestra que la temperatura es la variable que presenta una mayor relación con el error del modelo, ya que existe una correlación negativa moderada que indica una mejora en la precisión del modelo a temperaturas más elevadas. Por otro lado, tanto la presión como el caudal de entrada del gas presentan correlaciones positivas débiles, lo que sugiere que

su influencia en el error del modelo es menor. Esto se demuestra también con los coeficientes en cuanto a la presión de *Pearson* (0,3506) y *Spearman* (0,5367) y en cuanto al caudal de *Pearson* (0,2309) y *Spearman* (0,2788).

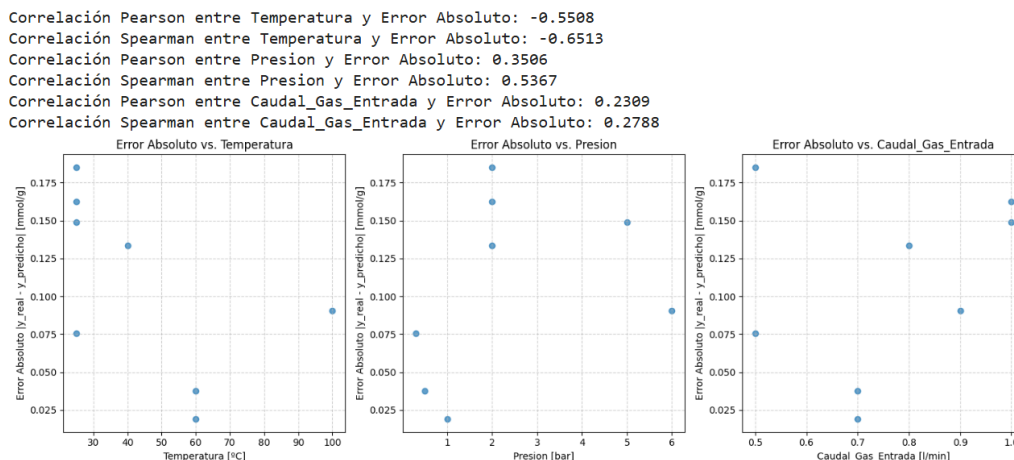


Figura 4-24 Análisis de dispersión de la zeolita 5A

La zeolita 5A presenta una estructura microporosa con ventanas de aproximadamente 5 Å (0,5nm), lo que permite la adsorción selectiva de moléculas pequeñas como el CO₂. Este tamaño de poro facilita la entrada del gas en los microporos, donde las moléculas quedan retenidas mediante interacciones físicas con la superficie del material.

En este tipo de zeolitas, los cationes presentes en la estructura generan campos electrostáticos que favorecen la interacción con moléculas polares o con momento cuadrupolar, como el CO₂. Estas interacciones aumentan la afinidad del adsorbente por el gas y explican su elevada capacidad de adsorción.

El incremento de la presión favorece la ocupación de los microporos al aumentar la concentración de CO₂ disponible en la fase gaseosa. Por otro lado, debido al carácter exotérmico de la fisisorción, temperaturas moderadas favorecen la retención del gas en el material adsorbente como muestra la Figura 4-25. Los resultados obtenidos en el estudio concuerdan con el comportamiento esperado para zeolitas tipo A, ampliamente utilizadas en procesos de separación y captura de gases [46].

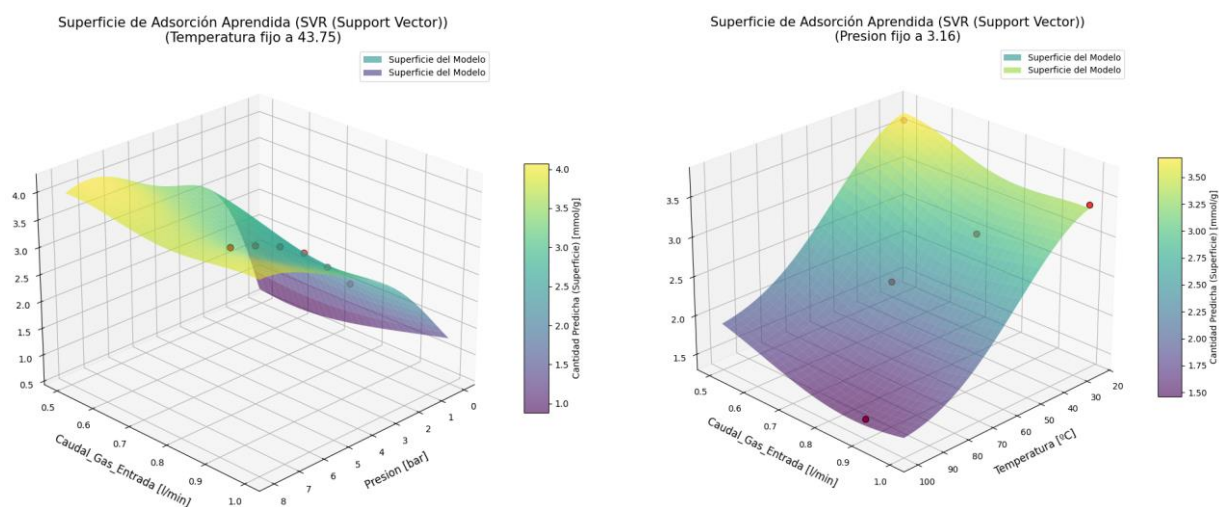


Figura 4-25 Representación 3D fijando presión y temperatura de la zeolita 5A

Considerando tanto la capacidad de adsorción obtenida como la distribución del error, se observa que la zeolita 13X presenta, en términos generales, el mejor comportamiento. Este material

no solo alcanza valores elevados de adsorción de CO₂, sino que además muestra una buena estabilidad del modelo, con errores relativamente bajos en la mayor parte del rango de condiciones analizadas. Aunque otras zeolitas pueden mostrar comportamientos favorables en condiciones específicas, la 13X destaca por ofrecer el mejor equilibrio entre capacidad de captura y precisión predictiva del modelo, posicionándose como la opción más adecuada dentro del conjunto de materiales estudiados.

5 CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

5.1 Conclusiones generales

A partir del análisis realizado mediante diferentes modelos de *Machine Learning*, se ha podido evaluar la capacidad predictiva de estos métodos para estimar la cantidad de CO₂ adsorbido en diversos tipos de zeolitas (calcinada, modificada por intercambio iónico, 13X, 5A y 4A) bajo distintas condiciones operativas. En general, los resultados muestran una buena concordancia entre los valores experimentales y los valores predichos, lo que se refleja en los valores elevados del coeficiente de determinación R^2 y en los bajos valores de error obtenidos en la mayoría de los casos.

El estudio comparativo de los distintos algoritmos indica que los modelos *Gradient Boosting* y *Support Vector Regression (SVR)* son los que presentan un mejor rendimiento global, siendo capaces de reproducir de forma adecuada el comportamiento experimental de los datos. Por el contrario, modelos más simples como la regresión lineal presentan en general una menor capacidad de ajuste.

El análisis de las superficies de error y de los gráficos de dispersión, junto con los coeficientes de *Pearson* y *Spearman* han permitido evaluar la estabilidad de las predicciones frente a variaciones en las variables operativas del sistema, como la temperatura, la presión y el caudal de entrada del gas. En la mayoría de los casos, los errores de predicción se mantienen dentro de un rango moderado, lo que indica que los modelos seleccionados presentan un comportamiento robusto frente a cambios en las condiciones experimentales.

Asimismo, el análisis de correlación sugiere que la temperatura presenta una mayor influencia en la precisión del modelo, observándose en varios casos una disminución del error a medida que aumenta esta variable. Por el contrario, la presión y el caudal de entrada muestran correlaciones más débiles con el error, lo que indica una menor influencia directa dentro del rango de condiciones analizadas.

En conjunto, los resultados obtenidos demuestran que las técnicas de *Machine Learning* utilizadas constituyen herramientas eficaces para la modelización del proceso de adsorción de CO₂ en zeolitas, permitiendo predecir su comportamiento bajo diferentes condiciones operativas con un nivel de precisión adecuado, coincidiendo los rangos óptimos predichos de los parámetros de operación para una máxima adsorción de CO₂ con respecto al estado del arte.

5.2 Resultado de objetivos

A lo largo del desarrollo del presente Trabajo de Fin de Grado se han cumplido los objetivos planteados, alcanzando los resultados esperados desde el punto de vista teórico.

En primer lugar, se ha realizado un análisis del estado del arte en relación con la captura de CO₂, permitiendo contextualizar la problemática ambiental y justificar la necesidad de desarrollar tecnologías

más eficientes y sostenibles. En este sentido, se ha puesto de manifiesto el papel relevante de las zeolitas como materiales adsorbentes debido a sus propiedades estructurales y su elevada selectividad hacia el CO₂.

Además, se ha llevado a cabo un estudio detallado de las características de las zeolitas y de los mecanismos que gobiernan el proceso de adsorción. Este análisis ha permitido comprender la influencia de variables clave como la temperatura y la presión, así como las limitaciones asociadas al uso de estos materiales en condiciones reales de operación.

Por otro lado, se ha cumplido el objetivo de recopilación y tratamiento de datos experimentales procedentes de diversas fuentes bibliográficas, aplicando criterios de selección y homogeneización. Este proceso ha permitido construir una base de datos consistente y adecuada para su utilización en modelos de *Machine Learning*.

En relación con el objetivo principal del trabajo, se han desarrollado e implementado distintos modelos de *Machine Learning* capaces de predecir la capacidad de adsorción de CO₂ en zeolitas. La evaluación comparativa de estos modelos ha permitido identificar aquellos con mejor rendimiento, demostrando la viabilidad de estas técnicas como herramienta predictiva en este ámbito.

Finalmente, se ha realizado una validación de los resultados obtenidos mediante el análisis de métricas y representaciones gráficas, lo que ha permitido interpretar adecuadamente el comportamiento de los modelos y determinar condiciones óptimas de operación.

En conjunto, los resultados obtenidos confirman que el uso de técnicas de *Machine Learning* constituye una alternativa eficaz y prometedora para la predicción y optimización de procesos de captura de CO₂ en zeolitas, cumpliéndose así el objetivo general del Trabajo de Fin de Grado.

5.3 Líneas futuras

A partir de los resultados obtenidos en el presente Trabajo de Fin de Grado, se identifican diversas líneas de investigación futura orientadas a ampliar el alcance del estudio y reforzar su aplicabilidad en entornos reales.

En primer lugar, una línea de especial interés es la validación experimental de los resultados obtenidos mediante los modelos de *Machine Learning*. En este sentido, se propone la realización de ensayos en laboratorio que permitan evaluar la capacidad de adsorción de CO₂ en zeolitas bajo las condiciones operativas óptimas predichas por los modelos desarrollados. Esta validación permitiría contrastar las predicciones teóricas con resultados experimentales, reforzando la fiabilidad del modelo y facilitando su aplicación práctica en sistemas reales.

En segundo lugar, resulta relevante la ampliación y mejora de la base de datos empleada. El uso de datos procedentes de diferentes fuentes bibliográficas introduce cierta variabilidad en las condiciones experimentales. Por ello, la generación de una base de datos más amplia y homogénea permitiría mejorar la precisión y robustez de los modelos predictivos.

Otra línea de investigación podría consistir en la exploración de modelos de *Machine Learning* más avanzados, como redes neuronales profundas o enfoques híbridos que combinen modelos físicos con técnicas de aprendizaje automático. Estos métodos podrían mejorar la capacidad de capturar relaciones no lineales complejas y aumentar la precisión de las predicciones.

Por otro lado, sería interesante extender el estudio a otros materiales adsorbentes, como los MOF o materiales carbonosos, con el objetivo de comparar su comportamiento con el de las zeolitas y evaluar su potencial en aplicaciones industriales de captura de CO₂.

6 BIBLIOGRAFÍA

- [1] P. Vélez Suárez, «Efecto de la calcinación en el proceso de captura de CO₂,» 2025.
- [2] S. K. Wahono, J. Stalin, J. Addai-Mensah, W. Skinner, A. Vinu y K. Vasilev, «Microporous and Mesoporous Materials (Elsevier),» 1 enero 2020. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.109871>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [3] A. Arefi Pour, S. Sharifnia, R. NeishaboriSalehi y M. Ghodrati, «Journal of Natural Gas Science and Engineering,» 19 Agosto 2015. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.08.033>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [4] O. Cadar, M. Senila, M.-A. Hoaghia, D. Scurtu, I. Miu y E. A. Levei, «Molecules,» 31 mayo 2020. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.3390/molecules25112570>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [5] Irvan, B. Trisakti, S. Maulina, R. Sidabutar, Iriany y M. S. Takriff, «Journal of Engineering Science and Technology,» 1 Octubre 2018. [En línea]. Available: https://jestec.taylors.edu.my/Vol%2013%20Issue%2010/13_10_15.pdf. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [6] L. E. Burris y M. C. G. Juenger, «Construction and Building Materials,» 29 agosto 2020. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119988>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [7] S. K. Wahono, J. Stalin, J. Addai-Mensah, W. Skinner, A. Vinu y K. Vasilev, «Microporous and Mesoporous Materials,» 1 enero 2020. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.109871>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [8] D. G. Boer, J. Langerak y P. P. Pescarmona, «ACS Applied Energy Materials,» 21 febrero 2023. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1021/acsaem.2c03605>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [9] R. Maceiras, J. Feijoo, L. Pérez-Rial, V. Alfonsín y P. Falcón, «Fuel,» 7 agosto 2024. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132732>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [10] C. C. a. C. S. GmbH, «C&CS #597 Zeolite 13X Gas Drying CO₂ Adsorption,» 2 febrero 2025. [En línea]. Available: <https://www.candcs.de/en/products/ccs-597-zeolite-13x-gas-drying-co2-adsorption/>. [Último acceso: 2 febrero 2025].

- [11] P. Washing-Detergents.com, «Soda Ash Flakes, Sodium Hydroxide Solid Caustic Soda – Strong Alkali Material,» 2 febrero 2025. [En línea]. Available: <https://portuguese.washing-detergents.com/sale-11354725-soda-ash-flakes-sodium-hydroxide-solid-caustic-soda-strong-alkali-material.html>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [12] Made-in-China.com, «Calcium Synthetic Zeolite 5A Price Molecular Sieve Desiccant 5A Beads for CH₄ Removal Adsorbent,» 2 febrero 2025. [En línea]. Available: <https://image.made-in-china.com/2f0j00hDycJNrGSIqw/Calcium-Synthetic-Zeolite-5A-Price-Molecular-Sieve-Desiccant-5A-Beads-for-CH4-Removal-Adsorbent.webp>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [13] E. I. Ugwu, A. Othmani y C. C. Nnaji, «International Journal of Environmental Science and Technology,» 14 agosto 2022. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1007/s13762-021-03560-3>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [14] Y. Park, D.-K. Moon, Y.-H. Kim, H. Ahn y C.-H. Lee, «Adsorption,» 22 marzo 2014. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1007/s10450-014-9608-x>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [15] Q. Liu, P. He, X. Qian, Z. Fei, Z. Zhang, X. Chen, J. Tang, M. Cui, X. Qiao y Y. Shi, «Energy & Fuels,» 7 noviembre 2017. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.7b02543>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [16] BioGuía, «Carbón activado: de qué se trata y cuáles son sus usos,» 2 febrero 2025. [En línea]. Available: https://www.bioguia.com/bienestar/carbon-activado-de-que-se-trata-cuales-son-sus-usos_87892243.html. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [17] R. Rodríguez-Fabián, J. Herrera-Vásquez, M. Chicaiza-Caicedo y M. Silva-Cárdenas, «Recent Trends in Zeolite Research: Synthesis, Environmental Applications and Future Perspectives,» *Zeolites*, vol. 5, nº 1, p. 1, 2024.
- [18] X. Zha, F. Li, B. Feng, X. Zhang y R. He, «ACS Omega,» 16 abril 2024. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1021/acsomega.4c00987>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [19] J. Zeolite, «A complete guide on how to regenerate activated alumina,» 2 febrero 2025. [En línea]. Available: <https://www.jalonzeolite.com/es/a-complete-guide-on-how-to-regenerate-activated-alumina/>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [20] J. Izumi y M. Suzuki, «Adsorption,» 1 enero 2000. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1023/A:1008966403701>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [21] N. Mortazavi, M. Bahadori, A. Marandi, S. Tangestaninejad, M. Moghadam, V. Mirkhani y I. Mohammadpoor-Baltork, «Sustainable Chemistry and Pharmacy,» 19 agosto 2021. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.scp.2021.100495>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [22] E. I. Ugwu, A. Othmani y C. C. Nnaji, «International Journal of Environmental Science and Technology,» 14 agosto 2022. [En línea]. Available: <https://doi.org/10.1007/s13762-021-03560-3>. [Último acceso: 2 febrero 2025].
- [23] A. Géron, *Aprende Machine Learning con Scikit-Learn, Keras y TensorFlow: Conceptos, herramientas y técnicas para conseguir sistemas inteligentes*, Madrid: Anaya Multimedia, 2023.
- [24] F. Bravo y P. Badilla, *Introducción a Machine Learning*, Santiago de Chile: Departamento de Ciencias de la Computación, Universidad de Chile, s.f..

- [25] X. Zha, F. Li, B. Feng, X. Zhang y R. He, «Removal of gas pollutants using calcined zeolite in a honeycomb rotor adsorption system,» *ACS Omega*, pp. 19493-19503, 2024.
- [26] A. LLC, «WebPlotDigitizer,» 2 Febrero 2025. [En línea]. Available: <https://apps.automeris.io/wpd4/>. [Último acceso: 23 Marzo 2026].
- [27] S. Brandani y D. M. Ruthven, «Intrinsic adsorption properties of CO₂ on 5A and 13X zeolite,» *Microporous and Mesoporous Materials*, vol. 76, n° <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2004.07.015>, p. 139–152, 2004.
- [28] D. M. Ruthven y S. C. Reyes, «The diffusion behavior of CO₂ adsorption from a CO₂/N₂ mixture in zeolite 13X,» *Microporous and Mesoporous Materials*, vol. 104, n° <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2006.11.030>, p. 59–66, 2007.
- [29] H. Ahn, C. H. Lee y J. Yang, «Adsorption equilibria of CO₂ and N₂ on zeolite 13X and zeolite 5A,» *Adsorption*, vol. 9, n° <https://doi.org/10.1023/A:1025167801358>, p. 181–188, 2003.
- [30] J. Lee, J. Kim y C. H. Lee, «Adsorption equilibria of CO₂ and N₂ on zeolite 13X,» *RSC Advances*, vol. 10, n° <https://doi.org/10.1039/D0RA10902A>, p. 37909–37917, 2020.
- [31] H. Al-Zoubi, M. A. Al-Ghouthi y M. Abu-Haija, «Adsorption of carbon dioxide on zeolite materials: equilibrium and thermodynamic studies,» *Heliyon*, vol. 10, n° <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e16703>, 2024.
- [32] F. Gholipour, A. Niaei y D. Salari, «Adsorption equilibrium of methane and carbon dioxide on zeolite 13X,» *Separation and Purification Technology*, vol. 160, n° <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2016.01.008>, pp. 1-7, 2016.
- [33] Q. H. Dirar y K. F. Loughlin, «Intrinsic adsorption properties of CO₂ on 5A and 13X zeolite,» *Adsorption*, vol. 19, n° <https://doi.org/10.1007/s10450-013-9543-2>, p. 1149–1163, 2013.
- [34] S.-R. Jeong, H. Park, Y. Ko, K.-M. Kim y C.-H. Lee, «Adsorption characteristics and separation behavior of binder and binderless zeolite LiX pellets: O₂, N₂, and CO₂,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 490, n° <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.151143>, p. 151143, 2024.
- [35] S. Cavenati, C. A. Grande y A. E. Rodrigues, «Adsorption Equilibrium of Methane, Carbon Dioxide, and Nitrogen on Zeolite 13X at High Pressures,» *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 49, n° <https://doi.org/10.1021/jc0498917>, p. 1095–1101, 2004.
- [36] J. A. Delgado, M. A. Uguina, J. L. Sotelo y V. I. Águeda, «Adsorption equilibrium of carbon dioxide, methane, and nitrogen on zeolite 13X,» *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 51, n° <https://doi.org/10.1021/jc0601803>, p. 1527–1533, 2006.
- [37] S. Cavenati, C. A. Grande y A. E. Rodrigues, «Adsorption equilibrium of methane, carbon dioxide, and nitrogen on zeolite 13X at high pressures,» *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 49, n° <https://doi.org/10.1021/jc0498917>, pp. 1095-1101, 2004.
- [38] R. V. Siriwardane, M.-S. Shen, E. P. Fisher y J. A. Poston, «Adsorption of CO₂ on molecular sieves and activated carbon,» *Energy & Fuels*, vol. 15, n° <https://doi.org/10.1021/ef000241s>, p. 279–284, 2001.
- [39] J.-R. Li, R. J. Kuppler y H.-C. Zhou, «Selective gas adsorption and separation in metal-organic frameworks,» *Chemical Society Reviews*, vol. 38, n° <https://doi.org/10.1039/B802426J>, p. 1477–1504, 2009.

- [40] D. W. Breck, *Zeolite Molecular Sieves: Structure, Chemistry and Use*, New York: John Wiley & Sons, 1974.
- [41] D. M. Ruthven, *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*, New York: John Wiley & Sons, 1984.
- [42] R. T. Yang, *Gas Separation by Adsorption Processes*, Boston: Butterworth-Heinemann, 1997.
- [43] R. V. Siriwardane, M.-S. Shen, E. P. Fisher y J. A. Poston, «Adsorption of CO₂ on molecular sieves and activated carbon,» *Energy & Fuels*, vol. 15, n° <https://doi.org/10.1021/ef000241s>, p. 279–284, 2001.
- [44] S. Choi, J. H. Drese y C. W. Jones, «Adsorbent materials for carbon dioxide capture from large anthropogenic point sources,» *ChemSusChem*, vol. 2, n° <https://doi.org/10.1002/cssc.200900036>, pp. 796-854, 2009.
- [45] Q. Wang, J. Luo, Z. Zhong y A. Borgna, «CO₂ capture by solid adsorbents and their applications: current status and new trends,» *Energy & Environmental Science*, vol. 4, n° <https://doi.org/10.1039/C0EE00064G>, pp. 42-55, 2011.

ANEXO I: IMPLICACIONES SOCIALES, ECONÓMICAS Y AMBIENTALES

El presente Trabajo de Fin de Grado se centra en el análisis del proceso de adsorción de dióxido de carbono (CO₂) en diferentes zeolitas mediante el uso de técnicas de *Machine Learning*. Aunque el objetivo principal del trabajo es el desarrollo de modelos predictivos para estimar la cantidad de CO₂ adsorbido bajo distintas condiciones operativas, los resultados obtenidos presentan implicaciones relevantes desde el punto de vista ambiental, social, económico e industrial.

Desde una perspectiva ambiental, el estudio de materiales adsorbentes para la captura de CO₂ contribuye al desarrollo de tecnologías orientadas a la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero. La captura de carbono es una de las estrategias consideradas a nivel internacional para mitigar el cambio climático. En este contexto, el uso de herramientas de modelización basadas en *machine learning* permite optimizar las condiciones de operación de los procesos de adsorción, reduciendo la necesidad de realizar numerosos ensayos experimentales y favoreciendo un uso más eficiente de recursos y energía durante el desarrollo de estas tecnologías.

En cuanto a las implicaciones sociales, la reducción de emisiones contaminantes contribuye a la protección del medio ambiente y a la mejora de la calidad de vida de la población. El desarrollo de soluciones tecnológicas que permitan disminuir el impacto ambiental de las actividades industriales representa un aspecto clave dentro de las estrategias actuales de sostenibilidad y transición energética.

Desde el punto de vista económico e industrial, la aplicación de técnicas de *Machine Learning* en el análisis de procesos industriales permite mejorar la eficiencia en el diseño y optimización de sistemas de captura de CO₂. La capacidad de predecir el comportamiento de los materiales adsorbentes bajo diferentes condiciones operativas puede contribuir a reducir costes asociados a la experimentación y al desarrollo de nuevos procesos industriales, facilitando la identificación de condiciones de operación más eficientes.

Finalmente, aunque el presente trabajo se centra en el análisis de datos y modelización computacional, los procesos industriales relacionados con la captura y tratamiento de gases requieren considerar aspectos de seguridad y control de procesos, especialmente en lo referente a la operación de sistemas de adsorción y manejo de gases.

En conjunto, el trabajo desarrollado pone de manifiesto la importancia de aplicar herramientas avanzadas de análisis y modelización para mejorar la eficiencia de los procesos de captura de CO₂, contribuyendo al desarrollo de tecnologías más sostenibles desde el punto de vista ambiental, social, económico e industrial.

ANEXO II: REFLEXIONES ÉTICAS Y SOCIALES

El presente Trabajo de Fin de Grado aborda el estudio y la predicción de la capacidad de adsorción de dióxido de carbono (CO_2) en zeolitas mediante el uso de modelos de *Machine Learning*, enmarcándose en un contexto global caracterizado por la necesidad urgente de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y mitigar el cambio climático.

Desde un punto de vista ético, el desarrollo de tecnologías orientadas a la captura de CO_2 responde a una responsabilidad colectiva hacia la protección del medio ambiente y el bienestar de las generaciones futuras. La ingeniería, en este sentido, no solo debe centrarse en la eficiencia técnica, sino también en la sostenibilidad de las soluciones propuestas. La utilización de zeolitas como materiales adsorbentes representa una alternativa más respetuosa con el entorno en comparación con otras técnicas tradicionales, al presentar un menor consumo energético y una mayor capacidad de regeneración, lo que reduce el impacto ambiental asociado a su uso.

En el ámbito social, la implementación de tecnologías de captura de carbono puede contribuir a la mejora de la calidad de vida, al reducir la contaminación atmosférica y sus efectos sobre la salud. Asimismo, estas tecnologías favorecen la transición hacia modelos energéticos más sostenibles, impulsando sectores industriales más limpios y generando nuevas oportunidades de desarrollo tecnológico y empleo cualificado.

Por otro lado, el uso de técnicas de *Machine Learning* plantea también consideraciones éticas relacionadas con la fiabilidad y el uso de los datos. En este trabajo, los modelos se han entrenado a partir de datos experimentales procedentes de la literatura científica, lo que exige un tratamiento riguroso de la información para evitar sesgos o interpretaciones erróneas que puedan derivar en conclusiones incorrectas. La transparencia en la metodología y la validación de los resultados constituyen, por tanto, aspectos fundamentales desde una perspectiva ética.

En conclusión, el presente trabajo no solo contribuye al avance técnico en el ámbito de la captura de CO_2 , sino que también se alinea con principios éticos y sociales orientados a la sostenibilidad, la responsabilidad ambiental y el desarrollo de tecnologías al servicio de la sociedad.

ANEXO III: DECLARACIÓN DE USO DE HERRAMIENTAS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL GENERATIVA

En el desarrollo del presente Trabajo de Fin de Grado, se ha hecho uso puntual de herramientas de inteligencia artificial generativa como apoyo complementario en determinadas fases del trabajo.

Estas herramientas han sido empleadas exclusivamente con fines de asistencia en la redacción, mejora de la expresión escrita y estructuración de algunos contenidos, así como para la revisión lingüística de textos en lengua inglesa. En ningún caso han sustituido el trabajo técnico, analítico o científico desarrollado por el autor.

El diseño del estudio, la recopilación y tratamiento de datos experimentales, el desarrollo de los modelos de *Machine Learning*, la implementación del código, el análisis de resultados y la elaboración de conclusiones han sido realizados íntegramente por el autor del trabajo.

Asimismo, se garantiza que toda la información técnica, resultados obtenidos y aportaciones incluidas en este TFG son originales y han sido elaboradas de manera autónoma, respetando en todo momento los principios de integridad académica.

El uso de herramientas de inteligencia artificial se ha llevado a cabo de forma responsable, crítica y transparente, empleándolas como apoyo y no como sustituto del proceso de aprendizaje ni de la capacidad de análisis propia.