



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**DISEÑO DE UNA RED NEURONAL PARA LA PREDICCIÓN DE
LA PRODUCCIÓN DE METANOL EN UNA PLANTA DE
HIDROGENACIÓN DE CO₂**

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: FRANCIS ANTHONY PARRA LARA

DIRECTOR: Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO

Riobamba – Ecuador

2020

© 2020, Francis Anthony Parra Lara

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Francis Anthony Parra Lara, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor/autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 15 de junio de 2020



Francis Anthony Parra Lara

060462800-8

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo propuesta tecnológica, DISEÑO DE UNA RED NEURONAL PARA LA PREDICCIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE METANOL EN UNA PLANTA DE HIDROGENACIÓN DE CO₂, realizado por el señor: FRANCIS ANTHONY PARRA LARA, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA

Ing. Mayra Paola Zambrano Vinuesa

2020-06-15

PRESIDENTE DEL TRIBUNAL

Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco

2020-06-15

DIRECTOR DE TRABAJO DE

TITULACIÓN

Ing. Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco

2020-06-15

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a mi familia, especialmente a mi hermano mayor y abuelo, quienes han apoyado el desarrollo de mi carrera durante todo este tiempo y supieron guiar mi camino. También dedico este trabajo a mis amigos y amigas que han compartido un muy valioso tiempo conmigo y me brindaron su apoyo actuando como una segunda familia para mí.

Francis.

AGRADECIMIENTO

Agradezco profundamente a mis maestros que supieron inculcarme sus conocimientos para poder desarrollar el presente trabajo, especialmente al ingeniero Daniel Chuquín quien me brindó la oportunidad para desarrollar el presente trabajo y a la ingeniera Marlene García, por haber sido un gran apoyo durante la culminación del pensum académico. También agradezco a mi familia y amigos por impulsarme a finalizar este proyecto. Finalmente, agradezco a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo y en especial al grupo de investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, “GISAI” por apoyar y permitir el desarrollo del proyecto; y a su vez a la Facultad de Ciencias, por su gran y noble labor educativa.

Francis.

TABLA DE CONTENIDO

RESUMEN	XIII
SUMMARY	XIV
CAPITULO I	
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Antecedentes	1
1.2 Planteamiento del problema	2
1.3 Justificación del proyecto	3
1.4 Objetivos	4
1.4.1 <i>Objetivo General</i>	4
1.4.2 <i>Objetivos específicos</i>	4
1.5 Alcance	4
CAPITULO II	
2 MARCO TEÓRICO REFERENCIAL	5
2.1 Estado del Arte	5
2.2 Bases Teóricas	7
2.2.1 <i>Proceso de Hidrogenación</i>	7
2.2.1.1 <i>Proceso de Hidrogenación de CO₂ a Metanol</i>	7
2.2.1.2 <i>Cinética de la Hidrogenación de CO₂</i>	8
2.2.2 <i>Dwsim</i>	9
2.2.2.1 <i>Características del simulador Dwsim</i>	9
2.2.3 <i>Redes Neuronales</i>	10
2.2.3.1 <i>Componentes de una red Neuronal</i>	10
2.2.3.2 <i>Entrenamiento de la Red</i>	11
CAPITULO III	
3 METODOLOGÍA	12
3.1 Determinación de las variables de estudio.	13
3.1.1 <i>Selección de variables de variables</i>	14
3.1.2 <i>Operación de Variables</i>	15
3.2 Simulación en el software Dwsim	15
3.3 Validación de la simulación	19
3.4 Obtención de los datos necesarios	20
3.5 Diseño de la Red	20
3.6 Entrenamiento y Validación de la red	24
3.7 Análisis Estadístico	26
CAPITULO IV	

4	GESTIÓN DEL PROYECTO	27
4.1	Cronograma.....	27
4.2	Recursos y Materiales: humanos, equipos y financiamiento	27
4.2.1	<i>Presupuesto.....</i>	28
4.2.2	<i>Talento Humano.....</i>	28
4.2.3	<i>Recursos Materiales</i>	28
4.3	Resultados Discusión y Análisis de Resultados.....	29
4.3.1	<i>Simulación y Obtención de Datos en Dwsim</i>	29
4.3.2	<i>Diseño y Programación de la Red Neuronal.....</i>	36
4.3.2.1	<i>Lectura y Normalización de Datos</i>	36
4.3.2.2	<i>Diseño de la Red Neuronal.....</i>	37
4.3.3	<i>Análisis Estadístico de los Datos Arrojadados por la Red</i>	44
4.3.3.1	<i>Análisis ANOVA</i>	44
4.3.3.2	<i>Análisis de Medias.....</i>	45
4.3.4	<i>Prueba de la Red Neuronal</i>	46
5	CONCLUSIONES	48
6	RECOMENDACIONES	49
	GLOSARIO	
	BIBLIOGRAFÍA	
	ANEXOS	

INDICE DE TABLAS

Tabla 1-3: Condiciones de Entrada de Reactivos a la Sección de Hidrogenación	14
Tabla 2-3: Operación de variables.....	15
Tabla 3-3: Valores de Parámetros Cinéticos Reordenados	18
Tabla 4-3: Condiciones de entrada del flujo de CO ₂	18
Tabla 5-3: Condiciones de Entrada de H ₂	19
Tabla 6-3: Condiciones de operación del Intercambiador 033	19
Tabla 7-3: Validación de la Simulación Efectuada en DWSIM	20
Tabla 8-3: Rangos de Operación de las Variables Independientes	20
Tabla 1-4: Cronograma del Proyecto	27
Tabla 2-4: Presupuesto del Proyecto	28
Tabla 3-4: Talento Humano del Proyecto.....	28
Tabla 4-4: Recursos Materiales del Proyecto	28
Tabla 5-4: Resultados del Reactor de Lecho empacado	29
Tabla 6-4: Resultados Precalentador de Reactivos.....	29
Tabla 7-4: Resultados Compresor de Hidrogeno.....	30
Tabla 8-4: Resultados Corriente de Metanol Purificado.....	30
Tabla 9-4: Condiciones de Alimentación de CO ₂	31
Tabla 10-4: Condiciones de Alimentación de H ₂	31
Tabla 11-4: Datos de Flujo de Metanol Obtenidos de Dwsim.....	32
Tabla 12-4: Variables Auxiliares	36
Tabla 13-4: Análisis ANOVA	44
Tabla 14-4: Tabla de Medias.....	45
Tabla 15-4: Resultados de prueba de la Red	46
Tabla 16-4: Tabla ANOVA de Prueba de la Red	47

INDICE DE FIGURAS

Figura 1-2: Vías de Hidrogenación del CO ₂ para producir metanol.	8
Figura 2-2: Estructura de una d Neuronal	10
Figura 1-3: Metodología de desarrollo del Proyecto	12
Figura 2-3: Diagrama de Flujo de la Planta de Hidrogenación	14
Figura 3-3: Planta de Hidrogenación en Dwsim	17
Figura 4-3: Asistente de Diseño de Red en Matlab	21
Figura 5-3: Interfaz de Selección de Datos	22
Figura 6-3: Selección de grupo de datos	23
Figura 7-3: Selección del Numero de Neuronas.....	23
Figura 8-3: Selección del algoritmo de entrenamiento de red	24
Figura 9-3: Proceso de Entrenamiento de la Red	25

INDICE DE GRÁFICOS

Grafico 1-4: Flujo de Metanol vs Experimentos	36
Grafico 2-4: Arquitectura de Red con 500 neuronas	38
Grafico 3-4: Curvas de Aprendizaje de Red de 500 neuronas	38
Grafico 4-4: Graficas de Correlación de Red de 500 neuronas	39
Grafico 5-4: Comparacion de Datos Reales vs Predichos de Red de 500 neuronas.....	39
Grafico 6-4: Arquitectura de Red de 100 neuronas	40
Grafico 7-4: Curvas de Aprendizaje de Red de 100 neuronas	40
Grafico 8-4: Graficas de Correlación de Red de 100 neuronas	41
Grafico 9-4: Comparación de Datos Reales vs Predichos de Red de 100 neuronas.....	41
Grafico 10-4: Arquitectura de Red de 12 neuronas	42
Grafico 11-4: Curvas de Aprendizaje de Red de 12 neuronas	42
Grafico 12-4: Graficas de Correlación de Red de 12 neuronas	43
Grafico 13-4: Comparación de Datos Reales vs Predichos de Red de 12 neuronas.....	43
Grafico 14-4: Grafico ANOVA.....	45
Grafico 15-4: Grafico de Medias.....	46

INDICE DE ANEXOS

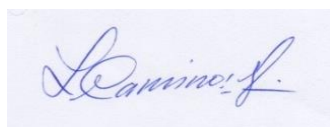
Anexo A: Código de la Red Neuronal

Anexo B: Código para predecir Flujo de Metanol

RESUMEN

El objetivo de este trabajo fue desarrollar una red neuronal artificial con la capacidad de predecir con una precisión razonable la producción de metanol que se obtendría de una planta de hidrogenación de CO₂. Para la construcción de la red primero se modeló a través del simulador de procesos químicos multiplataforma compatible con windows, DWSIM, una planta de hidrogenación de CO₂ basado en aquella desarrollada por Éverton Simões Van-Dal y Chakib Bouallou, una vez simulada la planta se obtienen a partir de esta 100 datos de simulación haciendo variar el flujo de los reactivos así como sus temperaturas y presiones mediante una combinación de números aleatorios, a estos 100 datos se les aplicó pruebas estadísticas para verificar la no existencia de datos atípicos. En el software Matlab se ingresan estos datos previamente normalizados y con ayuda de la herramienta *Neural Network Fitting* se procede a desarrollar la red neuronal y mediante un proceso de prueba y error se determina la arquitectura óptima de la red en base al mínimo error cuadrático medio. Finalmente se procedió a realizar una comparación estadística entre los datos arrojados por el simulador y los valores de salida de la red para determinar diferencias significativas como método de validación. Como resultado se obtuvo una red de 12 neuronas ocultas, 4 neuronas de entrada y 1 neurona de salida con un error cuadrático medio de 0.008506 cuyos valores predichos no difieren significativamente con los valores arrojados por el simulador. Se concluye que la red diseñada es capaz de predecir el flujo de metanol que se obtendría de una planta de hidrogenación con la misma exactitud con la que lo haría un simulador. Se recomienda añadir como parámetro de entrada la presión de separación en la zona de recirculación como una manera de obtener un resultado más ajustado a la realidad.

PALABRAS CLAVE: < INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA >, <INGENIERÍA DE PROCESOS>, <SIMULACIÓN>, <DWSIM (SOFTWARE)>, < MATLAB (SOFTWARE)>, <HIDROGENACIÓN DE DIOXIDO DE CARBONO>, <REDES NEURONALES>



22-06-2020

0079-DBRAI-UPT-2020

SUMMARY

The objective of this research work was to develop an artificial neural network with the ability to predict with reasonable precision the production of methanol that would be obtained from a CO₂ hydrogenation plant. For the construction of the network, it was first modeled through the multiplatform chemical process simulator compatible with windows, DWSIM, a CO₂ hydrogenation plant based on that developed by Éverton Simões Van-Dal and Chakib Bouallou, once the plant was simulated. From this 100 simulation data, varying the flow of the reagents as well as their temperatures and pressures through a combination of random numbers, statistical tests were applied to these 100 data to verify the non-existence of atypical data. In the Matlab software, these previously normalized data are entered and with the help of the Neural Network Fitting tool, the neural network is developed and, through a trial and error process, the optimal architecture of the network is determined based on the minimum mean square error. Finally, a statistical comparison was made between the data provided by the simulator and the network output values to determine significant differences as a validation method. As a result, a network of 12 hidden neurons, 4 input neurons and 1 output neuron was obtained with a mean square error of 0.008506 whose predicted values do not differ significantly with the values provided by the simulator. It is concluded that the designed network is capable of predicting the methanol flow that would be obtained from a hydrogenation plant with the same accuracy as a simulator would. It is recommended to add the separation pressure in the recirculation zone as an input parameter as a way to obtain a result that is closer to reality.

KEYWORDS:<CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <PROCESS ENGINEERING>, <SIMULATION>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <HYDROGENATION OF CARBON DIOXIDE>, <NEURAL NETWORKS>

CAPITULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

El ser humano ha intentado diseñar y construir componentes o máquinas que sirvan para mejorar su estilo de vida brindándole comodidad a la hora de realizar tareas engorrosas. Esto se ve reflejado en el uso de la maquinaria para evitar esfuerzos de carácter físico y en años más recientes aquel que es de carácter intelectual.

Los esfuerzos para desarrollar máquinas que sean capaces de seguir algoritmos simples para efectuar cálculos cuyo proceso resultaría engorroso de realizarlos en forma manual. Existieron varios intentos por la construcción de dichos artefactos, pero apenas en la segunda guerra mundial se cuenta con la tecnología necesaria para producirlas. Estas máquinas son perfectas para efectuar tareas concretas pre programadas, pero no son capaces de corregir fallos en caso de presentarlos o interactuar y aprender del entorno(Matich Damián 2001).

Tomando como base el anterior postulado, los estudios acerca del funcionamiento del cerebro humano y su capacidad para aprender del entorno, Frank Rosenblatt inicia el estudio y la programación del perceptron, la primera red neuronal, esta fue utilizada para procesos de clasificación y demostró tener la capacidad de generalizar es decir poder predecir el resultado correcto ante estímulos o patrones los cuales no fueron utilizados en su entrenamiento(Matich Damián 2001).

A partir de esto durante mucho tiempo el estudio de las redes neuronales se atascó hasta que David Rumelhart redescubre el algoritmo de *backpropagation* el cual permite que las redes neuronales efectúen operaciones más allá de las simples clasificación en patrones, este hecho fomentaría las bases para la utilización de redes neuronales en múltiples campos de la ciencia como en la ingeniería, simulación de procesos y medicina.

Dentro de uso para el análisis de procesos industriales se pueden destacar los siguientes trabajos:

El uso de una red del tipo perceptron multicapa para la predicción de la resistencia térmica de las incrustaciones en un enfriador de ácido sulfhídrico. La determinación de la resistencia térmica en el intercambio de calor es un factor determinante para decidir las condiciones de operación del

equipo. La resistencia térmica del intercambiador puede aumentar debido a incrustaciones y es necesario predecir el incremento de esta. Para la predicción se desarrolló dos metodologías la una consiste en una regresión multivariable donde se toma como variables independientes el flujo de agua, ácido sulfhídrico junto con sus respectivas temperaturas y la variable dependiente es la resistencia térmica, la segunda metodología consiste en el diseño de una red neuronal cuyas entradas son las variables independientes y su salida es la variable dependiente. Como resultado de esto se obtiene que ambos métodos tienen un coeficiente de correlación superior al 90% sin embargo la red neuronal logra coeficientes del orden de 99% (Zalazar-oliva 2018).

Otro trabajo importante es el desarrollado por Gorkal Sorrosal, en este se diseñó una red neuronal cuyo objetivo era el modelamiento del comportamiento de un reactor que transforma el biodiesel en olefinas. Para el desarrollo de este trabajo se planteó como variables de entrada la temperatura del reactor, el tiempo espacial y fracción másica del agua, mientras que como variable de salida se estudió a la fracción de olefina en el producto. Al final de la investigación tras realizar varios ajustes mediante el *toolbox* de Matlab se encontró que la red era capaz de predecir los resultados con un error del 5% con respecto a los datos originales esto traducido en la práctica es un error insignificante (Sorrosal et al. [sin fecha]).

Finalmente cabe mencionar el trabajo de Aldaz Adrian de la ESCUELA SUPERIOR POLITECNICA DE CHIMBORAZO, el cual empleo e implementó un sistema de control en el proceso de pasteurización de leche de la planta de la ESPOCH, este sistema fue diseñado en base a las redes neuronales donde dos de estas eran encargadas de controlar las temperaturas de calentamiento y enfriamiento en el proceso de pasteurización. Las redes implementadas eran del tipo *backpropagation*, entrenadas con el algoritmo de *levenberg marquardt* y se desarrolló en el software Matlab 2014 (Aldaz 2016).

1.2 Planteamiento del problema

El estudio de procesos industriales se lo ha realizado mayormente mediante la implementación de plantas piloto. Estas plantas conllevan el inconveniente de necesitar una gran inversión inicial y en ocasiones acarrea riesgos tales como presencia de sustancias tóxicas o la manipulación de sustancias explosivas.

Como una solución para evitar los problemas anteriormente descritos se han desarrollado varios paquetes de simulación equipadas con ecuaciones que describen con una precisión razonable el comportamiento real de los procesos de estudio. Estos paquetes han resultado de bastante utilidad

sin embargo no pueden aprender directamente de la experiencia y muchas veces requieren de información que resulta poco relevante en el caso que el ingeniero desea estudiar.

Los avances tecnológicos han permitido el desarrollo y programación de redes neuronales, las cuales han probado ser una potente herramienta en el análisis de problemas relacionados con la ingeniería. Al existir nuevos avances tecnológicos es necesario motivar a los estudiantes a utilizarlas y probar que estas pueden ser un complemento a los análisis arrojados por los simuladores comerciales y en ocasiones un sustituto de estos, ya que para estudiar un proceso en concreto el investigador puede prescindir del uso de información poco relevante en su tema de estudio o que a su vez no desea analizar. Lo anteriormente descrito conduce a la interrogante de ¿qué tipo de red es capaz de simular con exactitud el proceso de interés?

1.3 Justificación del proyecto

La simulación y análisis de procesos son disciplinas fundamentales para el ingeniero químico. Este último mediante el uso de softwares de simulación es capaz de modelar y recrear el entorno que se desarrollaría si estuviese manejando de forma experimental el proceso que estudia en cuestión, a través de las simulaciones puede realizar de estudios de sensibilidad y optimización de manera rápida y con una confiabilidad razonablemente práctica.

Es obvio que con los avances tecnológicos que existen es necesario conocerlos y adaptarse a utilizarlos en la vida diaria. En este caso esos avances se presentan en forma de inteligencia artificial o redes neuronales las mismas que han sido ya utilizadas en numerosas investigaciones dentro del ámbito industrial no solo como herramientas potentes de control si no de simulación. En base a lo anterior es claro que los futuros ingenieros requerirán conocer y comprender de manera básica como funcionan y se implementan las redes neuronales en el ámbito profesional.

Este proyecto pretende desarrollar una red neuronal en Matlab el cual ofrece un entorno sencillo para el desarrollo de redes neuronales y puede ser una excelente forma de tener un primer contacto con el desarrollo de redes neuronales. En este trabajo también se pretende mostrar cual es la forma de crear una red neuronal la cual pueda predecir el flujo de metanol en una planta de hidrogenación de CO₂.

Cabe recalcar que este trabajo va dirigido a estudiantes los cuales pueden encontrar una guía de cómo trabajar con redes neuronales dentro de este trabajo y también pueden sacarle provecho al uso de softwares de simulación gratuitos como DWSIM, mismo que es utilizado en gran parte de este proyecto

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Diseñar una red neuronal para la predicción de la producción de metanol en una planta de hidrogenación de CO₂.

1.4.2 Objetivos específicos

- Determinar los parámetros operación para la simulación de la planta de hidrogenación de CO₂
- Desarrollar una red neuronal capaz de predecir la tasa de producción de metanol en base a los parámetros seleccionados.
- Realizar la validación de los resultados arrojados por la red neuronal con base a simulaciones previas.

1.5 Alcance

En este trabajo se pretende diseñar una red neuronal cuya capacidad de predicción de flujo de metanol sea similar o cercano a los valores arrojados por un software especializado en la simulación de procesos químicos.

CAPITULO II

2 MARCO TEÓRICO REFERENCIAL

2.1 Estado del Arte

Como un primer intento por aplicar las redes neuronales al proceso de hidrogenación del CO_2 , Liu et al. (2001) proponen el uso de una red neuronal para realizar el diseño del catalizador apropiado para el proceso de hidrogenación del dióxido de carbono. Los datos de entrenamiento para la red los toman de varias literaturas y como parámetros de entrada considera al catalizador principal, el promotor A y B, material de soporte, la relación H_2/CO_2 , temperatura, presión y el tiempo espacial del gas. La red fue programada en el lenguaje C con una función de activación sigmoidal. Los parámetros de salida son la conversión del anhídrido carbónico, selectividad del catalizador con respecto a la producción de monóxido de carbono, metano, metanol y alcanos. Finalmente, la red empleada fue entrenada con 73 pares de datos y para que esta sea capaz de ser influenciada por el catalizador utilizado en los datos de entrada de catalizador especial incluyen la naturaleza química del catalizador.

Una vez realizado el entrenamiento de datos los autores concluyen que la red es capaz de predecir el producto principal de la hidrogenación de dióxido de carbono, el cual es un parámetro importante al instante de diseñar un catalizador. En la validación de datos se decide probar la respuesta de la red frente a la entrada de un metal (catalizador) con el que no fue entrenada la red y esta es capaz de predecir los resultados con bastante concordancia con los experimentales, esto debido a la naturaleza periódica de los elementos. Sin embargo, en ciertos puntos específicos los valores predichos por la red se desvían de manera considerable con respecto a los valores experimentales, esto puede deberse a que no se le proporciono muchos datos de entrenamiento a la red, así como el hecho de que durante el entrenamiento un algoritmo de aceleración fue utilizado. En base a esto se concluye que la red puede usarse como un complemento a los ensayos experimentales y no puede sustituirlos del todo (Liu et al. 2001).

Otro trabajo a destacar es el desarrollado por Zahedi et al. (2005), en este trabajo se emplea un modelo híbrido de un reactor de lecho empacado que produce metanol a partir de la hidrogenación del dióxido de carbono. En este trabajo como primera instancia se utiliza el modelo para simular un reactor que opera a nivel de laboratorio. Para la modelización se utilizó como

modelo primario principal un modelado matemático basado en balances de masa y energía, así como la ecuación de Ergun para el cálculo de la caída de presión del reactor (Kuechen y Hoffmann 1993). El modelo matemático tiene como objetivo el cálculo de la presión y la temperatura a la salida del reactor, mientras que la red se encarga de predecir la composición de la salida del reactor. La razón para realizar este modelo híbrido es debido a que implementar la ecuación de velocidad de reacción complicaría mucho el modelo matemático del reactor (Zahedi et al. 2005).

Los parámetros de entrada a la red fueron la presión, temperatura, tiempo espacial y composición de la corriente de alimentación mientras que sus salidas son la selectividad, conversión de CO_2 y actividad del efluente del reactor. El diseño de la red se llevó a cabo probando que tipo de red proporcionaba el error cuadrático medio más bajo entre un perceptron multicapa y una neurona de función de base radial. La red fue entrenaada con los 2/3 de los datos y 1/3 fue utilizada para la validación de la misma. Finalmente, luego de determinar que la red de función de base radial es la que menor error cuadrático medio arroja esta se implementó en conjunto con el modelo matemático para formar el modelo híbrido. El desempeño del modelo híbrido es comparado con un modelo puramente matemático y con un reactor industrial real.

Como resultado se obtiene que el modelo híbrido exige menos trabajo al procesador a la hora de modelar el reactor y que este predice con mayor precisión los datos de salida del reactor real. Los datos arrojados por el reactor industrial también presentan concordancia los datos arrojados por la red (Zahedi et al. 2005). Demostrando de esta forma que el uso de redes neuronales dentro de los procesos de simulación puede servir no solo para mejorar la precisión de la simulación si no que pueden reducir el trabajo que se le exige al computador para realizar cálculos.

El trabajo realizado por Sun et al. (2018) donde se utiliza una red neuronal junto con el algoritmo de respuesta de superficie para encontrar las condiciones en las que la se incrementa la selectividad de la hidrogenación de CO_2 a hidrocarburos, resulta bastante relevante puesto que en este la red neuronal utilizada para el proceso de optimización fue desarrollada con ayuda del software Matlab.

Para el desarrollo de este trabajo los datos que servirán como entrenamiento para la red se tomaron de un reactor de micro canales real donde se utilizó un catalizador a base de hierro (fabricado por los autores del trabajo), se realiza la corrida de experimentos en el reactor y así obtuvieron 17 pares de datos, luego estos fueron utilizados en el Matlab para el diseño de la red. La red neuronal fue desarrollada y esta contaba con 4 parámetros de entrada, 10 neuronas en la primera capa oculta y 5 en la segunda capa oculta, con la función sigmoidal como función de activación y de algoritmo de entrenamiento de Levenberg-Marquardt.

Una vez la red neuronal arroja sus predicciones se complementa a estas con la metodología de superficie de respuesta, esta estrategia se elige para evitar los errores que se producen cuando se llegan a puntos críticos de operación mismos que pueden generar cambios bruscos en el sistema difíciles de predecir. Con la aplicación de este algoritmo se encuentra el punto óptimo donde la selectividad crece en $T=573\text{k}$ y $P=3.3\text{ bar}$ (Sun et al. 2018).

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Proceso de Hidrogenación

En forma general la hidrogenación es un tipo de reacción redox, donde el resultado final es la adición de una molécula de hidrogeno molecular al sustrato de partida. Este sustrato de partida al final del proceso habrá experimentado una reducción química. Este tipo de reacción a pesar de ser termodinámicamente favorable en la mayoría de casos, presenta limitaciones del tipo cinético, es decir, los productos no se forman a una velocidad adecuada por lo que es necesario el uso de catalizadores solidos como el Pt, Pd y Ni (Glosarios@servidor-alicante.com 2015).

2.2.1.1 Proceso de Hidrogenación de CO₂ a Metanol

El dióxido de carbono es un gas poco reactivo por lo tanto se debe realizar un enorme aporte de energía para que este pueda reaccionar. El hidrogeno es un elemento el cual posee alta energía, misma que puede ser aportado al CO₂(Martínez 2018), razón por la cual el sistema CO₂/H₂ es tan atractivo como par reaccionante. El tratamiento químico del CO₂ es bastante prometedor e incluso es preferido frente a la propuesta global de captura y almacenamiento del gas y al tratamiento biológico con algas marinas (Ahmad y Upadhyayula 2019).

Los catalizadores heterogéneos solidos a base de metales de transición son los más utilizados dentro de este proceso. El catalizador se elegiría en base a los productos principales que se desean obtener pues cada uno presenta una distinta selectividad a cada producto. Los productos que pueden obtenerse son generalmente combustibles (C1-C5) y compuestos químicos como metanol, el dimetil éter y el ácido fórmico, de estos últimos el producto que ofrece una mayor eficiencia en cuanto a consumo energético es el metanol requiriendo menores rangos de temperatura.

(Leonzio, Zondervan y Ugo 2019). Este último puede obtenerse por vía directa o mediante dos pasos(Martínez 2018).

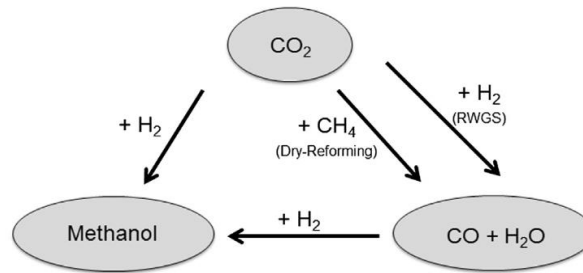


Figura 1-2: Vías de Hidrogenación del CO₂ para producir metanol.

Fuente:(Van-dal y Bouallou 2013)

Para conseguir transformar el dióxido de carbono a metanol se emplean catalizadores a base de cobre soportados en materiales como el ZnO y el Al₂O₃, de estos el más utilizado es el Cu/ZnO/Al₂O₃ con el cual se han conseguido conversiones de entre el 15 y el 20 % para el proceso de una etapa(Fang et al. 2019).

2.2.1.2 Cinética de la Hidrogenación de CO₂

En el caso Particular de la hidrogenación de CO₂ en catalizadores de Cu/ZnO/Al₂O₃ el modelo cinético propuesto por Bussche, Vanden &Froment, G. es aquel que ha logrado una mejor concordancia con los datos experimentales. El modelo cinético considera al CO₂ como la única y la principal fuente de carbono para la formación de metanol y este no tiene la capacidad de inhibir la reacción de hidrogenación. Así mismo este modelo sugiere que el agua formada la reacción de desplazamiento inversa es la que causa inhibición sobre el sistema de reacción(Bussche y Froment 1996),estas dos reacciones ocurren de forma paralela. El modelo cinético original presentado puede volverse más exacto realizando un ajuste a las energías de activación de cada reacción(Mignard et al. 2003), este ajuste realizado por Mignard et al también ayudo a expandir el rango de presiones a las cuales era válido el modelo cinético original. La ecuación cinética, así como sus parámetros se presentan en la sección 3-2.

2.2.2 *Dwsim*

El software utilizado como base para este trabajo es DWSIM, a través del cual se obtendrán todos los datos necesarios para realizar el entrenamiento de la red neuronal. Este es un simulador secuencial modular que opera bajo el estándar CAPE-OPEN (Jain et al. 2017), estándar de interfaz aplicado a todo programa destinado a cálculos con ayuda de un computador en ingeniería química. El simulador permite que tanto estudiantes de ingeniería química como ingenieros químicos puedan realizar cálculos y modelados de sistemas complejos (Medeiros 2019).

2.2.2.1 *Características del simulador Dwsim*

Dwsim en su versión para Windows presenta una interfaz gráfica bastante amigable e intuitiva con el usuario. Inmediatamente tras iniciar el programa este arroja el asistente de simulación, mismo que guiará al usuario durante la preprogramación de la simulación. Los iconos que representan los equipos de operaciones unitarias o reactores son similares a los utilizados por el software Aspen Plus y su modo de configuración individual es prácticamente la misma.

Entre los modelos termodinámicos y las operaciones disponibles dentro del simulador tenemos las siguientes:

- Modelos termodinámicos: Peng-Robinson, Peng-Robinson-Stryjek-Vera 2, Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler, Lee-Kesler-Plöcker, UNIFAC (-LL), UNIFAC modification (Dortmund), UNIQUAC, NRTL, COSMO-SAC, Chao-Seader, Grayson-Streed, LIQUAC, Extended UNIQUAC.
- Operaciones de la unidad: Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores (conversión, PFR, CSTR, equilibrio y Gibbs), columna de destilación.

Cabe mencionar que Dwsim incluye herramientas extras, como analizador de datos y generador de reportes que, las cuales no son necesario ahondar en este trabajo.

2.2.3 Redes Neuronales

Una red neuronal es un complejo sistema matemático computacional, cuyos elementos simples procesales están interconectados entre si capaces de procesar información como una respuesta a las entradas que se establecen al mismo. Los elementos de las redes neuronales están organizados de manera jerárquica(Marín Diazaraque 2007). La arquitectura de las redes neuronales tomaron su inspiración de la compleja red de neuronas que se extiende a lo largo del cerebro humano, esto le provee a la red neuronal la capacidad de adaptarse hacia los estímulos (entradas), extraer características relevantes, aprender de las experiencias representadas como datos de entrenamiento y lograr aplicar el aprendizaje a escenarios nuevos.

2.2.3.1 Componentes de una red Neuronal

Como se mencionó anteriormente una red neuronal es un sistema complejo y como tal está conformado por varios elementos los cuales son:

- Neurona
- Capa de entrada
- Capa Oculta
- Capa de Salida

Estos elementos en conjunto forman la arquitectura de la red, y es tarea del diseñador encontrar el número de cada elemento que necesita la red para funcionar correctamente(Matich Damián 2001).

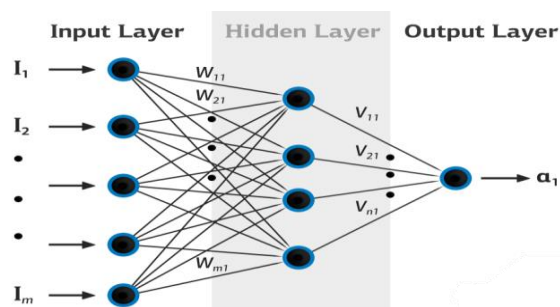


Figura 2-2: Estructura de una d Neuronal

Fuente:(NCYT 2020)

2.2.3.2 Entrenamiento de la Red

El proceso de entrenamiento de una red neuronal consiste en ajustar los valores de los pesos de cada señal de entrada para que las salidas de la red coincidan con las salidas objetivos. En este paso no es posible modificar ningún parámetro relacionada con la arquitectura de la red(Ledesma 2006). Este entrenamiento se lo hace presentándole a la red un conjunto de datos con sus respectivas salidas, estas serán las variables objetivo, la red automáticamente ajusta los pesos de las señales para producir las salidas deseadas(Larrañaga 2001) .

El algoritmo que se usa para ajustar los datos se conoce como algoritmo de aprendizaje, y este no es nada más que una función matemática que generalmente busca minimizar el error de la salida. Existen una gran variedad de algoritmos que se clasifican en dos principalmente:

- Supervisado

Existe un tipo de maestro (función) en la red el cual supervisa el proceso. Este tipo de aprendizaje se utiliza cuando se desea tener un modelo o una función que relacione las entradas y las salidas de la Red(Caparrini 2020) .

- No supervisado

Esta red no cuenta con datos que le permitan conocer si las salidas son correctas y no interactúa con datos objetivos(Matich 2001).Es utilizada cuando se desea hacer una correlación descriptiva entre los datos (Caparrini 2020) .

Este proceso puede ser desarrollado por el software Matlab a través de sus múltiples herramientas programadas incluidas en el programa como *nntool* o *nnfittig*

CAPITULO III

3 METODOLOGÍA

El presente trabajo adoptara un enfoque predictivo, pues se pretende predecir la producción de metanol en una planta industrial mediante el uso de una red neuronal. Los pasos a seguir se resumen en la Figura 1-3:

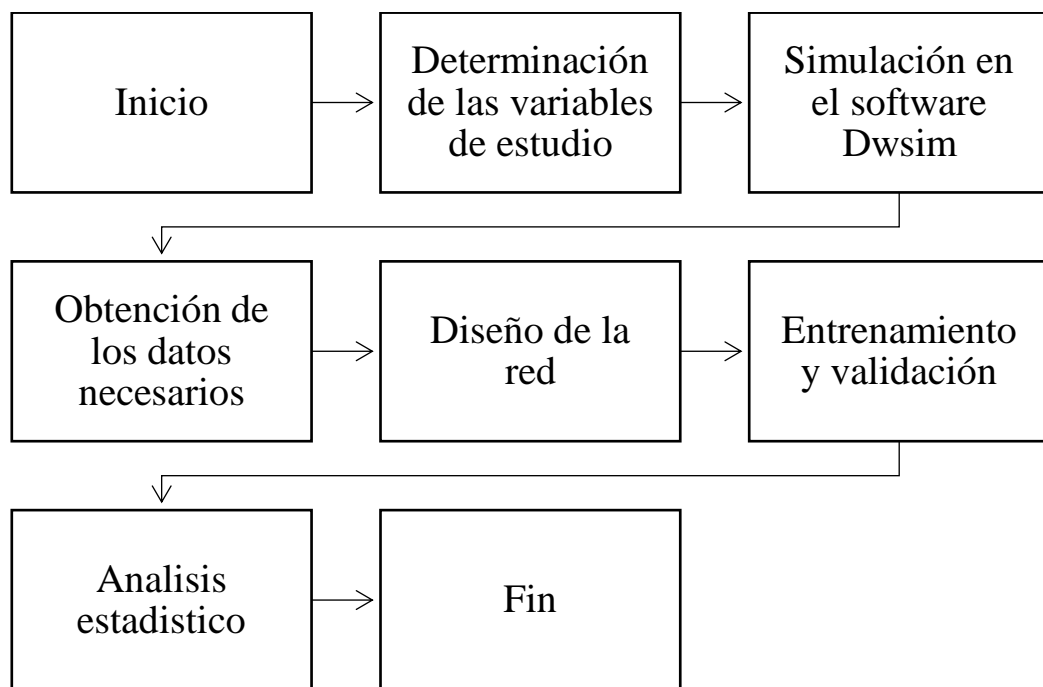


Figura 1-3: Metodología de desarrollo del Proyecto

Realizado por: Parra Francis 2020

El análisis estadístico a implementar en este trabajo es un complemento que permitirá analizar e interpretar los datos obtenidos de la predicción de la red, así mismo este servirá para estimar la varianza que se obtiene entre los datos predichos y los datos arrojados por la simulación.

Las fuentes de información a utilizar en este trabajo son:

- Primaria

Datos proporcionados por el autor del escrito obtenidos de la simulación realizada.

- Secundaria
- Artículos científicos publicados en revistas indexadas y no indexadas, con temática acorde a la tratada en este trabajo.
- Trabajos de titulación de temática similar a la desarrollada en este proyecto.
- Páginas de internet que traten ciertos temas expuestos en este trabajo, así como páginas web de los programas utilizados.
- Libros afines con este trabajo.

3.1 Determinación de las variables de estudio.

Como punto de partida para este trabajo se utiliza la información reportada por Éverton Simões Van-Dal&Chakib Bouallou en su artículo “Diseño y Simulación de una Planta de Producción de Metanol a partir de la Hidrogenación de CO₂”. De este escrito se extraerán los datos necesarios para efectuar la simulación de la planta de hidrogenación en el simulador DWSIM.

Como se mencionó anteriormente este trabajo se centrará únicamente en la sección de producción de metanol, se ha decidido omitir el análisis relacionado con la planta de energía de donde proviene el dióxido de carbono y de aquella que utiliza los gases no convertidos como fuente de energía. Esto debido a que este trabajo no pretende analizar el impacto en los costes energéticos relacionados con el proceso.

En el trabajo presentado por Van-Dal&Bouallou se desarrolla el modelado de la planta de producción de metanol en el software ASPEN PLUS cuyo diagrama de flujo se muestra en la Figura 2-3.

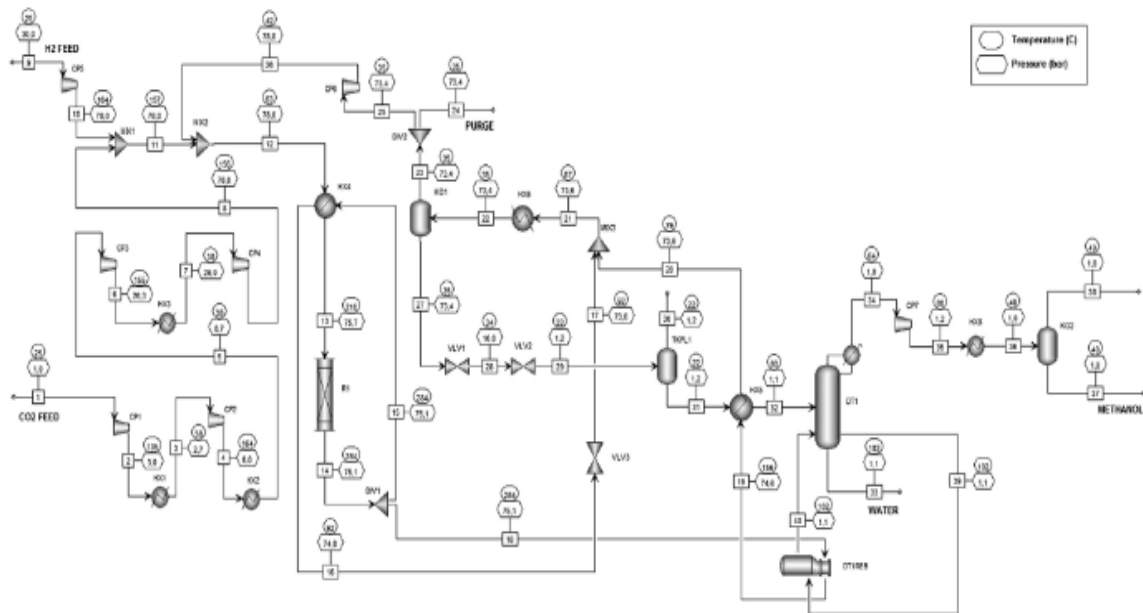


Figura 2-3: Diagrama de Flujo de la Planta de Hidrogenación

Fuente: (Van-dal y Bouallou 2013)

Las condiciones de operación se muestran en la figura 2-3, mientras que datos relacionados con el diseño individual de cada equipo (potencia de compresión, eficiencias, volumen de reactor, etc.) se han omitido completamente.

Por otra parte, la información que provee con respecto a esta sección son las entradas de los reactivos y condiciones de los mismos tal como se muestra en la Tabla 1-3;

Tabla 1-3: Condiciones de Entrada de Reactivos a la Sección de Hidrogenación

Reactivo	Temperatura (°C)	Presión (Bar)	Flujo Másico (Ton/h)
Dióxido de Carbono	25	1	88
Hidrogeno	25	30	12.1

Realizado por: Parra Francis 2020

Fuente: (Van-dal y Bouallou 2013)

3.1.1 Selección de variables de variables

- Independientes
 - Temperatura de Entrada de reactivos
 - Presión de entrada de Reactivos
 - Flujo másico

- Dependiente
 - Flujo de Metanol

3.1.2 Operación de Variables

Tabla 2-3: Operación de variables

Variables		Unidades
Independiente	Temperatura	°C (Celsius)
	Presión	Bar
	Flujo Másico (CO ₂ y H ₂)	Kg/h
Dependiente	Flujo de Metanol	Kg/h

Realizado Por: Parra Francis 2020

3.2 Simulación en el software Dwsim

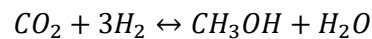
Dentro del simulador utilizado se desarrolló una planta de hidrogenación como se especifica en la Figura 2-3, al no considerarse un análisis de energía y como motivo de simplificar los cálculos que deben efectuarse, los intercambiadores se realizaron utilizando el método corto de diseño obteniéndose el diagrama mostrado en la figura 3-3.

En la simulación, las corrientes MSTR 000 y MSTR 022 son los flujos de CO₂ y metanol respectivamente. Como paquete termodinámico para el cálculo de las propiedades se utilizó el modelo SRK en las corrientes con presiones mayores a 10 Bar y NRTL para las corrientes menores a 10 Bar tal como lo especifica Van-dal y Bouallou(2013).

La torre de destilación se modeló utilizando una relación de reflujo de 1.2 y se ajustó de tal forma que en el destilado la fracción de agua sea 0.000113, esto se hizo utilizando el método simplificado de columnas, una vez más al no ser la torre objeto de estudio en este trabajo no es necesario pasar a un modelo más riguroso.

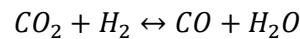
El reactor se configuró con una fracción hueca de lecho de 0.4 y con el modelo cinético propuesto por Bussche y Froment (1996). Para la configuración de las reacciones químicas dentro del simulador se utilizó las modificaciones hechas por Van-Dal&Bouallou. Estas se tratan de manipulaciones algebraicas realizadas a la ecuación original de tal forma que puedan ser ingresados a los softwares de simulación. Las ecuaciones cinéticas y estequiometrias son:

- Reacción de producción de Metanol



(Ec.1-3)

- Reacción de desplazamiento agua-gas inversa



(Ec.2-3)

- Cinética de Reacción de producción de metanol

$$r_{CH_3OH} = \frac{k_1 P_{CO_2} P_{H_2} - k_6 * \frac{P_{H_2O} * P_{CH_3OH}}{P_{H_2}^2}}{\left(1 + k_2 * \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}} + k_3 * P_{H_2}^{0.5} + k_4 * P_{H_2O}\right)^3}$$

(Ec.3-3)

- Cinética de Reacción de desplazamiento agua-gas inversa

$$r_{CH_3OH} = \frac{k_5 P_{CO_2} - k_7 * \frac{P_{H_2O} * P_{CO_2}}{P_{H_2}}}{1 + k_2 * \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}} + k_3 * P_{H_2}^{0.5} + k_4 * P_{H_2O}}$$

(Ec.4-3)

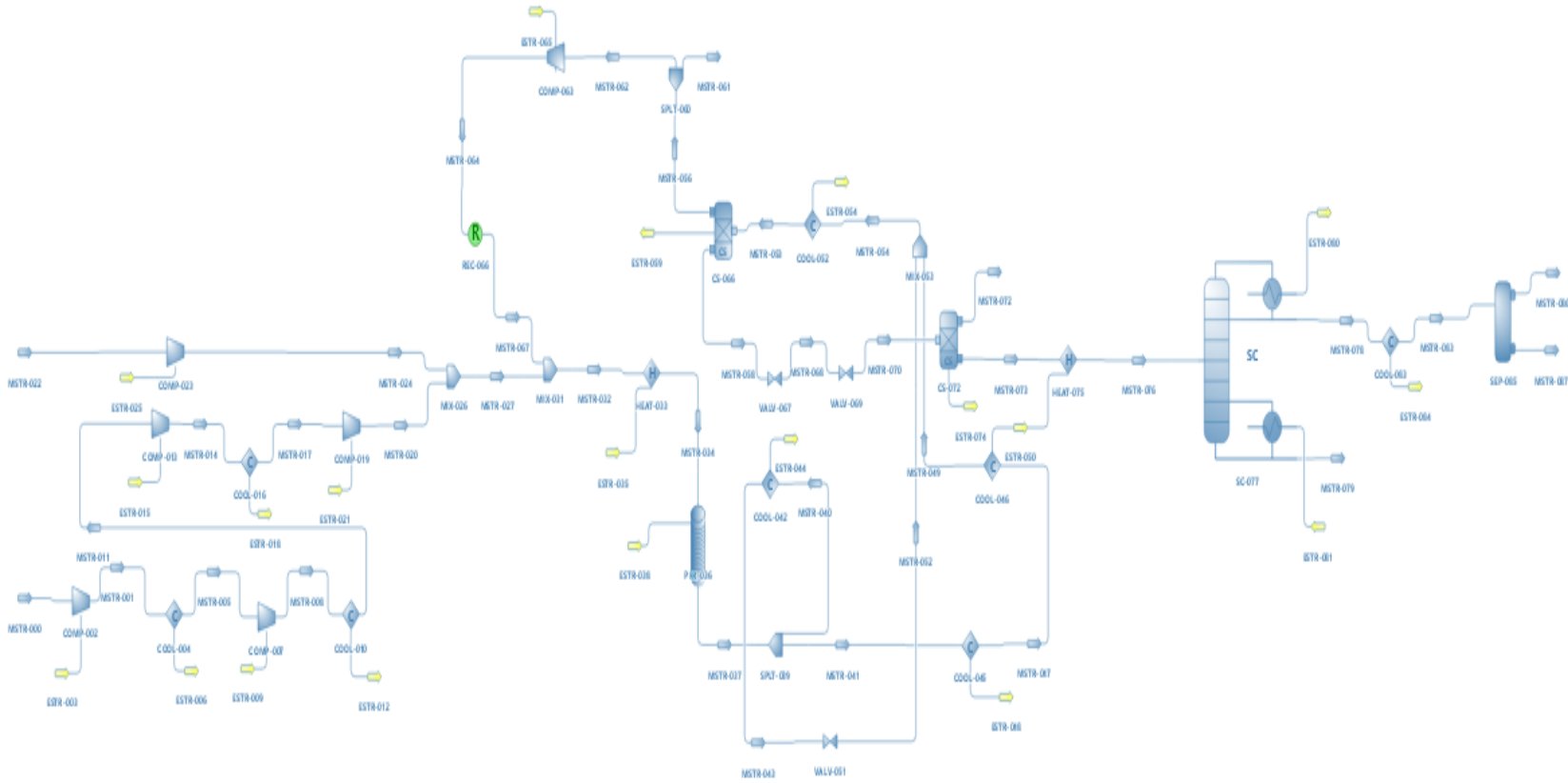


Figura 3-3: Planta de Hidrogenación en Dwsim

Realizado por: Parra Francis 2020

- Constantes Cinéticas:

$$\ln k_i = A_i + \frac{B_i}{T}$$

(Ec.5-3)

Tabla 3-3: Valores de Parámetros Cinéticos Reordenados

K ₁	A ₁	-29.87
	B ₁	4 811.2
K ₂	A ₂	8.147
	B ₂	0
K ₃	A ₃	-6.452
	B ₃	2 068.4
K ₄	A ₄	-34.95
	B ₄	14 928.9
K ₅	A ₅	4.804
	B ₅	-11 797.5
K ₆	A ₆	17.55
	B ₆	-2 249.8
K ₇	A ₇	0.1310
	B ₇	-7 023.5

Fuente:(Van-dal y Bouallou 2013)

Por otra parte, para realizar la simulación las corrientes de entrada se configuro como se muestra en la Tabla 4-3 y Tabla 5-3;

Tabla 4-3: Condiciones de entrada del flujo de CO₂

Temperatura	25	C
Presión	1	Bar
Flujo másico	88 000	Kg/h
Flujo molar	1999.57	Kmol/h
Flujo Volumétrico	48667.4	m ³ /h
Fraccion molar de CO ₂	1	
Fraccion molar de H ₂	0	

Fraccion molar de H ₂ O	0
Fraccion molar de CH ₃ OH	0

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 5-3: Condiciones de Entrada de H₂

Temperatura	25	C
Presión	30	Bar
Flujo másico	12 100	Kg/h
Flujo molar	6002.34	Kmol/h
Flujo Volumétrico	5038.15	m ³ /h
Fraccion molar de CO ₂	0	
Fraccion molar de H ₂	1	
Fraccion molar de H ₂ O	0	
Fraccion molar de CH ₃ OH	0	

Realizado por: Parra Francis 2020

Debido a la configuración del simulador, para que la temperatura y presión tengan influencia en la variable estudiada es más conveniente manipular estas variables a la corriente combinada que ingresa al reactor. Estas propiedades se pueden manipular configurando el intercambiador de calor 033 ubicado antes del reactor. Las condiciones de operación del intercambiador en la simulación propuesta por Van-Dal&Bouallou se muestran en la Tabla 6-3.

Tabla 6-3: Condiciones de operación del Intercambiador 033

Parametro	Valor	Unidad
Temperatura de Salida	210	C
Caida de Presión	2.3	Bar
Eficiencia	100	%

Realizado por: Parra Francis 2020

3.3 Validación de la simulación

Una vez desarrollada la simulación de la planta de producción de metanol en Dwsim, es necesario validar los resultados obtenidos de esta mediante una comparación con aquellos expuestos por

Van-Dal&Bouallou. Estos resultados se muestran en la Tabla 7-3 junto con los porcentajes de error asociados a estos.

Tabla 7-3: Validación de la Simulación Efectuada en DWSIM

Componente	Flujo Entrada (kg/h)	Flujo de Salida Van-Dal&Bouallou (Kg/h)	Flujo de Salida DWSIM(kg/h)	Error (%)
Metanol	0	59 300	58 297.9952	-1.69%
Agua	0	33 700	32 559.832	-3.38%
Dióxido de Carbono	88 000	5 820	5 710.5232	-1.88%
Monóxido de Carbono	0	510	524.535	2.85%
Hidrogeno	12 100	870	833.4674	-4.19%

Realizado por: Parra Francis 2020

3.4 Obtención de los datos necesarios

Los rangos usados para conseguir los datos de entrenamiento necesarios se muestran en la Tabla 8-3:

Tabla 8-3: Rangos de Operación de las Variables Independientes

Intercambiador 033: Temperatura de Salida	200-210	C
Intercambiador 033: Caída de Presión	0-20	Bar
Flujo de Dioxido de Carbono	88 000 -100 000	Kg/h
Flujo de Hidrogeno	12 000 - 20 000	Kg/h

Realizado por: Parra Francis 2020

Luego de generar una hoja de reporte con los pares de datos necesarios, estos son exportados hacia un software estadístico para realizar la prueba de Grubbs con el fin de descartar aquellos datos considerados como anómalos.

3.5 Diseño de la Red

Como preámbulo antes de poder realizar el diseño y construcción de la red neuronal es necesario importar los datos obtenidos al espacio de trabajo de Matlab. Los datos importados deben ser normalizados en base a su rango mediante la Ecuación 4-3:

$$Xi' = \frac{Xi - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}$$

(Ec 4-3)

Donde:

Xi' = valor normalizado

Xi = valor que se desea normalizar

X_{max} = valor máximo de la base de datos seleccionada

X_{min} = valor mínimo de la base de datos seleccionada

Cuando la base de datos ha sido normalizada se procede a acceder a la herramienta *fitting nntool*, una vez realizado esto el asistente de diseño de red se abrirá y mostrara una breve descripción sobre la herramienta y cuándo es conveniente utilizarla.

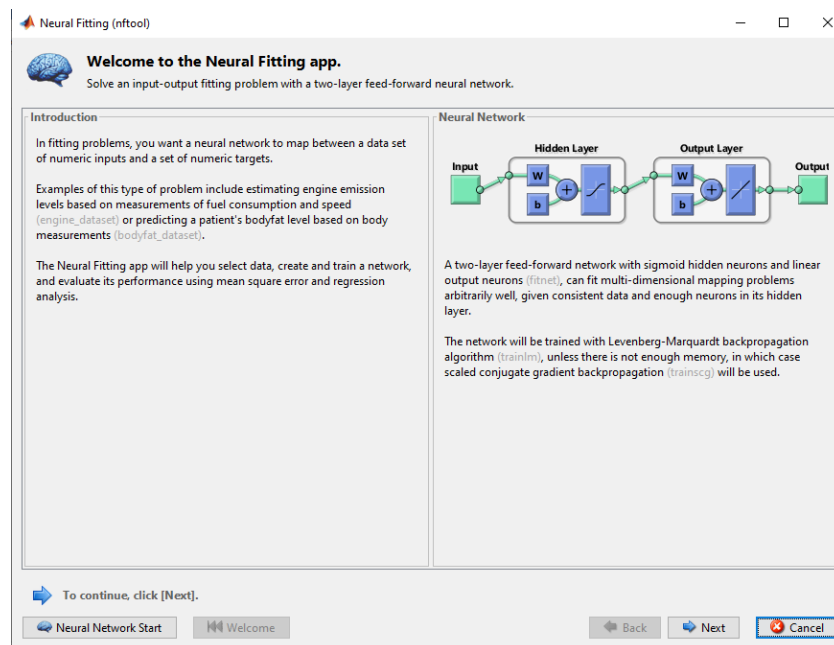


Figura 4-3: Asistente de Diseño de Red en Matlab

Realizado por: Parra Francis 2020

El siguiente paso es realizar la selección de los datos de entrada y los datos de salida de la red. Cabe recalcar que estos datos deben encontrarse normalizados y guardados dentro de una variable,

en este caso se denotó a las entradas normalizadas (Presión, Temperatura, Flujo de CO₂ y Flujo de H₂) como E y a la salida normalizada como S.

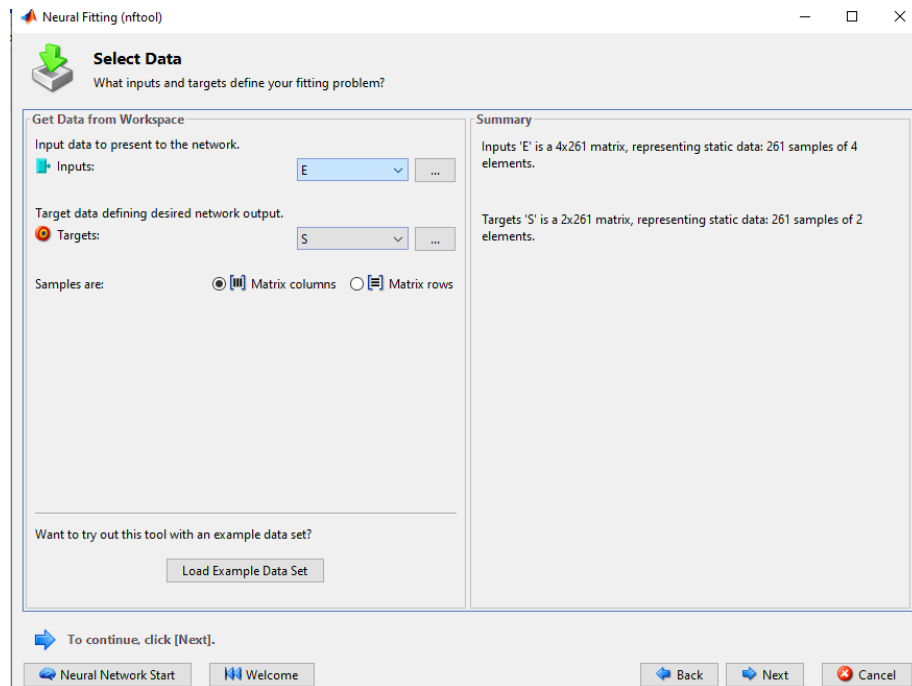


Figura 5-3: Interfaz de Selección de Datos

Realizado por: Parra Francis 2020

La selección de *matrix rows* o *columns* se lo hace en función de la forma en la que están distribuidos los datos, si estos se encuentran organizados en forma de filas se seleccionará *columns* caso contrario se seleccionará *rows*, cabe mencionar que en caso de existir error en este punto el programa no permite avanzar al siguiente paso.

El siguiente paso consiste en seleccionar el grupo de datos que serán utilizados para realizar el entrenamiento, validación y prueba de la red. Los detalles de estos serán discutidos en un apartado posterior, por ahora basta con aclarar que la herramienta selecciona al azar los datos que pertenecerán a cada grupo. El usuario en este punto únicamente selecciona el porcentaje de datos que desea utilizar en cada grupo.

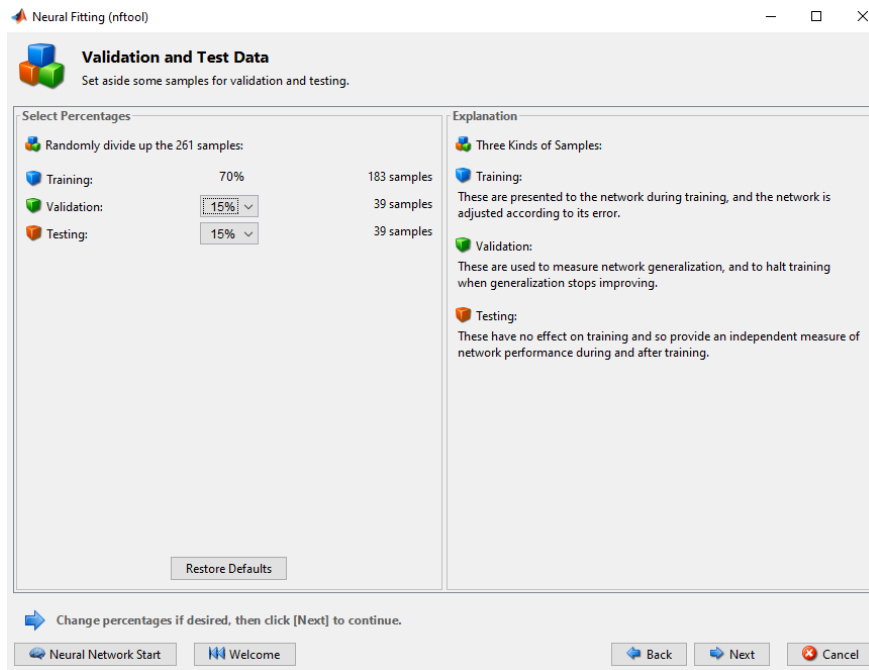


Figura 6-3: Selección de grupo de datos

Realizado por: Parra Francis 2020

Finalmente, antes de realizar el entrenamiento el usuario puede seleccionar el número de neuronas que desea utilizar en la red. El número óptimo de neuronas se determina por un ensayo prueba y error, como norma general en cierto rango el aumentar neuronas disminuye el error de predicción, sin embargo, pasado cierto número de neuronas el error tiende a crecer debido a un sobreajuste o se mantiene constante (Villada, Muñoz y García-Quintero 2016). Se decide variar el número de neuronas antes que el número de capas ocultas ya que se ha demostrado que para la mayor parte de casos una capa oculta basta para resolver los problemas de ajuste de datos (Raquel Flórez López 2008).

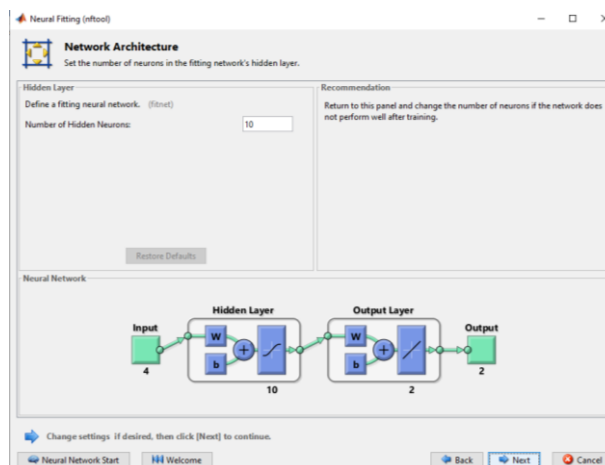


Figura 7-3: Selección del Numero de Neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

En este caso se comenzó con una red de:

- Una capa de entrada con 4 neuronas de entrada
- Una capa de oculta con 10 neuronas ocultas (este número de neuronas son las que el usuario modifica)
- Una capa de Salida con 1 neurona de salida

3.6 Entrenamiento y Validación de la red

Para realizar el entrenamiento de la red es necesario escoger el tamaño o porcentaje de datos que se utilizarán para entrenar la red de todo el conjunto seleccionado, es así que por defecto la herramienta trae asignado el valor de 70 es decir utilizara el 70 % de datos para entrenar la red tal como se muestra en la figura 6-3, esta elección es muy común y eficaz a la hora de diseñar redes neuronales. Durante este proceso la red utilizará estos datos para disminuir el error entre sus predicciones y los datos objetivos.

Por otra parte, es necesario especificar el algoritmo de aprendizaje para la red (Figura 8-3). En este caso se seleccionó el algoritmo de Levenberg Marquardt, el cual es un método de optimización de mínimos cuadrados. Este método intenta alcanzar un mínimo en el error cuadrático medio y se basa en el algoritmo de optimización de numérica de Newton-Gauss(Cornejo Zuniga y Rebolledo Vega 2016), este es el algoritmo que requiere menor tiempo de aprendizaje y que se ajusta a la mayoría de casos.

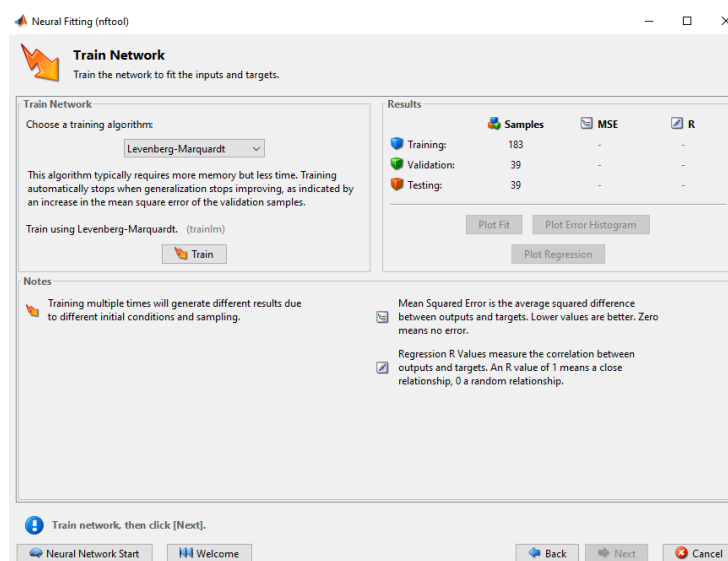


Figura 8-3: Selección del algoritmo de entrenamiento de red

Realizado por: Parra Francis 2020

Cabe recalcar que existen otros dos algoritmos de entrenamiento estos son: Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient, sin embargo, estos requieren un mayor tiempo de entrenamiento y en ocasiones no se ajustan de manera satisfactoria.

En cuanto a la validación de datos lo primero es seleccionar el porcentaje de datos que se utilizaran para realizar esto, tal como se muestra en la figura 6-3, en este caso se utilizó el 15% de los datos para realizar esta acción. La validación se utiliza como una medida de que tan exactas son las predicciones de la red y para detener el proceso de entrenamiento de la red cuando la exactitud deja de mejorar.

Como medida de la exactitud de la red y como función a minimizar en la red, la herramienta utiliza el error cuadrático medio de los resultados.

Finalmente, el porcentaje de datos que corresponden al *testing* son datos que no influyen en el entrenamiento de la red, sino que el usuario los utiliza para medir el desempeño de la red. El proceso de *testing*, equivale a generar datos nuevos y presentárselos a la red sin mostrarle las salidas deseadas y comparar que tan exactas son estas.

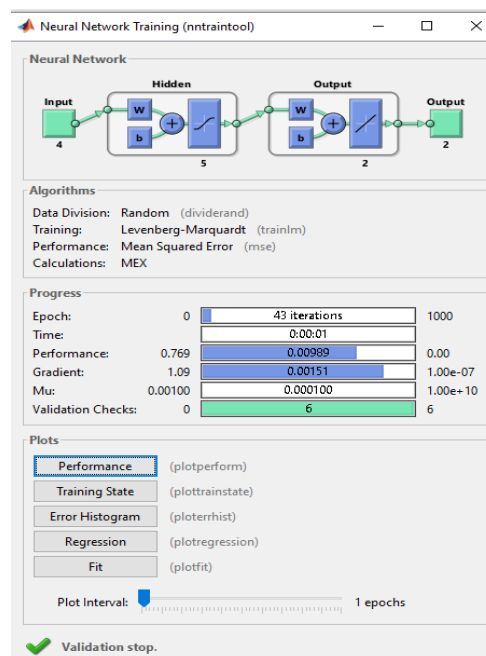


Figura 9-3: Proceso de Entrenamiento de la Red

Realizado por: Parra Francis 2020

Una vez finalizado este proceso la red nos da la opción de generar un script avanzado al cual podemos modificar para añadirle más funciones como imprimir una comparación entre la curva real y la curva de predicciones de la red.

3.7 Análisis Estadístico

Para comparar y confirmar la idoneidad de la red desarrollada se compararán las salidas predichas por la red con aquellas salidas obtenidas del simulador Dwsim. Ambas bases de datos serán analizadas mediante una comparación de muestras.

Las pruebas estadísticas que se aplicarán a las muestras son:

- Tabla ANOVA: analiza la varianza como un componente entre distintos grupos y otro dentro de los grupos.
- Tabla de medias: muestra las medias de las muestras con sus respectivas desviaciones estándar.

En complemento, se analizarán las gráficas siguientes:

- Gráfico ANOVA
- Gráfico de medias

CAPITULO IV

4 GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1 Cronograma

Tabla 1-4: Cronograma del Proyecto

Actividad	TIEMPO																											
	MES 1				MES 2				MES 3				MES 4				MES 5				MES 6							
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4				
Recolección de la información del modelo base	■	■	■	■																								
Desarrollo del modelo base en DWSim					■	■	■	■																				
Obtención de los pares de datos necesarios									■	■	■	■	■	■	■	■												
Diseño y entrenamiento de la red Neuronal																	■	■	■	■								
Validación de los resultados arrojados por la red																					■							
Obtención de información del proceso																									■	■	■	■
Redacción del trabajo final																									■	■	■	■

Realizado por: Parra Francis 2020

4.2 Recursos y Materiales: humanos, equipos y financiamiento

4.2.1 Presupuesto

Tabla 2-4: Presupuesto del Proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Curso DWSIM	\$200	X	
Curso MATLAB	\$250	X	
Papel de impresión	\$20	X	
Copias e Impresiones	\$100	X	
Empastados	\$60	X	
Imprevistos	\$20	X	
TOTAL	\$650		

Realizado por: Parra Francis 2020

4.2.2 Talento Humano

Tabla 3-4: Talento Humano del Proyecto

Nombre	Función que Desempeña
Francis Parra	Autor del Proyecto
Daniel Chuquín	Tutor Académico del Proyecto

Realizado por: Parra Francis 2020

4.2.3 Recursos Materiales

Tabla 4-4: Recursos Materiales del Proyecto

Materiales Necesarios en el Proyecto	Cantidad
Computador	1

Resma de Papel	2
Impresora	1
Cartón Para Empastar	3

Realizado por: Parra Francis 2020

4.3 Resultados Discusión y Análisis de Resultados

4.3.1 Simulación y Obtención de Datos en Dwsim

Los resultados más relevantes de la simulación base en el software Dwsim se obtienen utilizando la herramienta *Report Results*, estos se presentan a continuación:

Tabla 5-4: Resultados del Reactor de Lecho empacado

Object:	PFR-036	
Pressure Drop	0.453139	bar
Residence time	0.00754112	h
Length	10	m
Catalyst loading	1775	kg/m ³
Catalyst diameter	5.5	mm
Catalyst void fraction	0.4	
Temperature delta	62.9835	C.
Heat load	0	kW
Calculation Mode	G6	
Carbon dioxide Conversion	48.6398	%
Hydrogen Conversion	12.3077	%
Carbon monoxide Conversion	5.50313	%

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 6-4: Resultados Precalentador de Reactivos

Object:	HEAT-033	
Pressure Drop	2.3	bar
Efficiency	100	%
Outlet Temperature	210	C

Heat Added	61960.2	kW
Outlet molar vapour fraction	1	
Delta-T	149.99	C.

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 7-4: Resultados Compresor de Hidrogeno

Object:	COMP-023	
Pressure Increase	48	bar
Adiabatic Efficiency	68	%
Delta-T	139.042	C.
Power Required	6855.93	kW
Pressure	78	bar
PolytropicEfficiency	71.8894	%
AdiabaticCoefficient	1.44621	
PolytropicCoefficient	1.71998	
AdiabaticHead	3.45792E+06	m
PolytropicHead	3.27083E+06	m
RotationSpeed	1500	rpm

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 8-4: Resultados Corriente de Metanol Purificado

Object:	MSTR-087	
Temperature	15	C
Pressure	1	bar
Mass Flow	58340	kg/h
Molar Flow	1820.46	kmol/h
Volumetric Flow	73.1126	m ³ /h
Mixture Density	797.947	kg/m ³
Mixture Molar Weight	32.0468	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-1320.29	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-3.94143	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-42311.2	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-126.31	kJ/[kmol.K]
Mixture Molar Fraction	Methanol	0.99928

	Water	0.000119929
	Carbon dioxide	0.000586707
	Carbon monoxide	2.14732E-07
	Hydrogen	1.27932E-05

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 9-4: Condiciones de Alimentación de CO₂

Object:	MSTR-000	
Temperature	25	C
Pressure	1.01325	bar
Mass Flow	88000	kg/h
Molar Flow	1999.57	kmol/h
Volumetric Flow	48667.4	m ³ /h
Mixture Density	1.80819	kg/m ³
Mixture Molar Weight	44.0095	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-0.917441	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-0.00213187	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-40.3761	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-0.0938226	kJ/[kmol.K]
Mixture Molar Fraction	Methanol	0
	Water	0
	Carbon dioxide	1
	Carbon monoxide	0
	Hydrogen	0

Realizado por: Parra Francis 2020

Tabla 10-4: Condiciones de Alimentación de H₂

Object:	MSTR-022	
Temperature	25	C
Pressure	30	bar
Mass Flow	12100	kg/h
Molar Flow	6002.34	kmol/h
Volumetric Flow	5038.15	m ³ /h

Mixture Density	2.40167	kg/m ³
Mixture Molar Weight	2.01588	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	7.39648	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-14.0129	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	14.9104	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-28.2483	kJ/[kmol.K]
Mixture Molar Fraction	Methanol	0
	Water	0
	Carbon dioxide	0
	Carbon monoxide	0
	Hydrogen	1

Realizado por: Parra Francis 2020

Una vez la simulación ha alcanzado un valor cercano a los reportados por el autor, se procede a desarrollar 100 simulaciones variando las entradas de manera aleatoria, obteniéndose así los resultados que se muestran en la Tabla 11-4:

Tabla 11-4: Datos de Flujo de Metanol Obtenidos de Dwsim

Nº	Presión	Temperatura	Flujo de CO2	Flujo de H2	Flujo de Metanol
1	70	206	80000	15000	54818.13
2	73	207	80000	14000	54306.834
3	64	202	99000	20000	65955.004
4	58	201	86000	20000	60917.831
5	69	200	84000	18000	58214.682
6	64	205	97000	19000	65210.635
7	69	207	85000	16000	58501.249
8	64	206	80000	20000	57286.191
9	76	207	82000	14000	55822.289
10	76	200	88000	18000	55933.476
11	62	209	93000	19000	62239.84
12	73	210	96000	12000	61318.192
13	68	202	97000	11000	59312.994
14	76	202	90000	20000	64524.257
15	73	208	90000	19000	62168.109
16	67	201	94000	20000	64143.892

17	69	208	98000	15000	63860.389
18	63	210	89000	16000	59292.184
19	73	202	81000	14000	55453.922
20	63	203	93000	18000	61270.249
21	67	206	95000	13000	58168.933
22	67	210	80000	15000	57365.403
23	76	210	86000	15000	57218.998
24	64	207	94000	17000	59871.723
25	74	206	80000	13000	52971.683
26	68	209	88000	18000	58054.81
27	66	203	86000	17000	59343.996
28	58	207	98000	19000	64184.88
29	76	203	88000	12000	56712.306
30	66	207	97000	16000	64075.471
31	60	208	93000	16000	56731.035
32	69	208	96000	14000	59199.202
33	72	207	83000	20000	60326.537
34	70	201	92000	15000	59846.706
35	77	205	100000	16000	62508.845
36	66	205	84000	17000	58284.939
37	75	211	97000	15000	59998.568
38	67	205	99000	17000	62250.069
39	73	212	99000	17000	63738.793
40	75	209	80000	15000	54935.238
41	71	200	97000	16000	62250.176
42	76	210	84000	14000	55902.295
43	68	217	85000	18000	59506.605
44	77	208	88000	15000	59853.163
45	64	204	96000	18000	63438.525
46	73	208	92000	15000	61248.48
47	70	204	95000	15000	61024.301
48	75	203	93000	17000	63172.826
49	73	200	96000	17000	63690.938
50	67	201	80000	19000	57434.359
51	65	206	95000	20000	64834.242

52	73	200	99000	14000	65005.245
53	72	201	95000	15000	62684.671
54	78	203	100000	16000	64019.366
55	78	205	90000	20000	64567.554
56	64	203	88000	15000	58359.491
57	62	208	81000	17000	55712.328
58	74	203	82000	16000	57374.837
59	62	200	92000	20000	62843.42
60	68	202	95000	15000	63648.583
61	62	200	84000	15000	56916.567
62	60	202	95000	19000	63649.006
63	58	210	90000	17000	59574.023
64	66	204	85000	13000	55990.032
65	67	203	95000	18000	62743.253
66	66	209	86000	12000	55157.955
67	58	208	84000	18000	55857.07
68	77	210	94000	14000	61483.672
69	68	206	99000	17000	63337.133
70	78	206	83000	20000	60605.155
71	65	210	89000	20000	61165.224
72	60	202	84000	12000	54706.926
73	71	201	98000	17000	64432.931
74	76	210	99000	20000	66846.772
75	62	205	87000	12000	56210.187
76	67	202	91000	13000	57718.959
77	69	210	99000	18000	64050.437
78	65	209	95000	17000	59610.933
79	73	205	95000	16000	62484.268
80	78	204	93000	15000	61161.429
81	67	200	88000	20000	62917.821
82	66	202	85000	14000	57215.475
83	77	204	92000	19000	61966.337
84	62	207	89000	19000	60798.884
85	71	206	97000	20000	67877.245
86	64	201	85000	14000	57168.495

87	60	210	90000	20000	60872.24
88	74	210	95000	17000	64626.294
89	67	210	96000	15000	59422.898
90	59	205	84000	19000	59496.199
91	59	207	95000	19000	58915.078
92	59	200	98000	18000	63592.965
93	67	204	91000	14000	58811.498
94	58	207	91000	16000	57412.875
95	68	200	98000	15000	62763.562
96	74	203	100000	17000	63297.473
97	63	203	84000	16000	55407.908
98	73	200	85000	16000	58643.454
99	65	201	91000	14000	58852.259
100	62	201	80000	20000	53497.788

Realizado por: Parra Francis 2020

Estos datos generan el Gráfico 1-4:

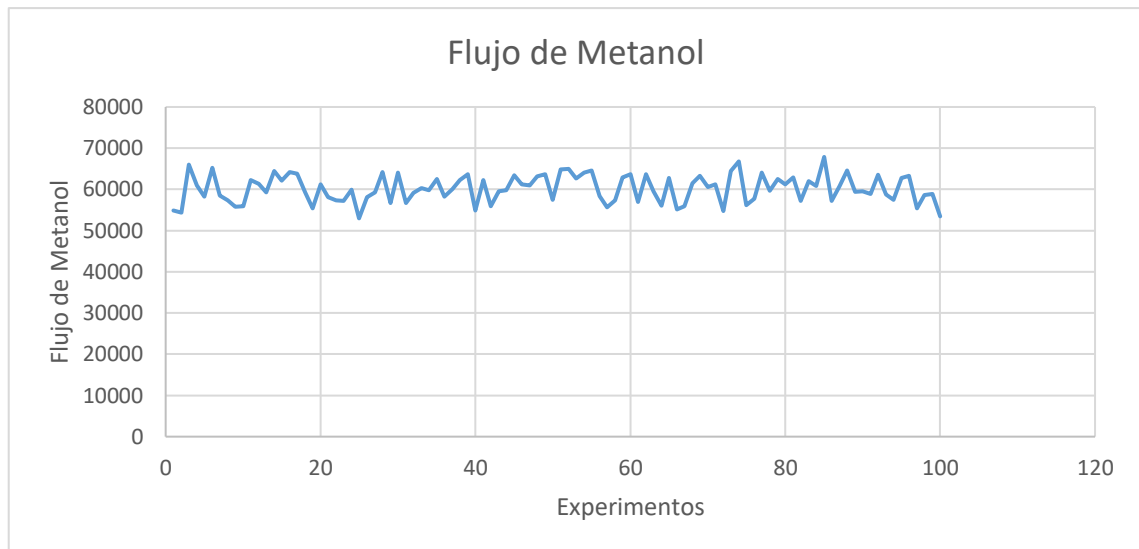


Grafico 1-4: Flujo de Metanol vs Experimentos

Realizado por: Parra Francis 2020

4.3.2 *Diseño y Programación de la Red Neuronal*

4.3.2.1 *Lectura y Normalización de Datos*

Como primer paso poder diseñar la red neuronal propuesta es necesario importar los datos generados al entorno de Matlab. Los datos una vez importados deben ser tratados como una tabla y adicionalmente como se mencionó en el capítulo 3, es de vital importancia aplicarles una normalización en base a su rango.

El proceso para desarrollar lo anteriormente mencionado requiere del uso de variables auxiliares así mismo es necesario definir variables que guardaran las salidas predichas por la red. Las variables utilizadas se resumen en la Tabla 12-4

Tabla 12-4: Variables Auxiliares

Variable	Significado
Extraer	Datos de Excel Importados
Datos	Datos importados convertidos a tabla
P	Matriz Presión
Pmax	Valor máximo de la Presión
Pmin	Valor mínimo de la Presión
Pnor	Matriz Presión Normalizada
T	Matriz Temperatura

Tmax	Valor máximo de la Temperatura
Tmin	Valor mínimo de la Temperatura
Tnor	Matriz Temperatura Normalizada
Fc	Matriz Flujo de CO2
Fcmax	Valor máximo del Flujo de CO2
Fcmin	Valor mínimo del Flujo de CO2
Fcnor	Matriz Flujo de CO2 normalizada
Fh	Matriz Flujo de H2
Fhmax	Valor máximo del Flujo de H2
Fhmin	Valor mínimo del Flujo de H2
Fhnor	Matriz Flujo de H2 normalizada
Fm	Matriz Flujo de Metanol
Fmmax	Valor máximo del Flujo de Metanol
Fmmin	Valor mínimo del Flujo de Metanol
Fmnor	Matriz Flujo de Metanol Normalizada
E	Une los valores de Entradas Normalizadas
S	Une el valor de las salidas Normalizadas
vnor	Salidas Predichas Normalizadas
Fmp	Flujo de Metanol Predicho
Sr	Salidas Reales a Escala
Sp	Salidas Predichas a Escala

Realizado por: Parra Francis 2020

Para poder agilizar los análisis y futuras simulaciones de este estilo se implementó un script cuyo código se muestra en el anexo A.

4.3.2.2 *Diseño de la Red Neuronal*

Una vez importado los datos se procede a usar la herramienta *Neural Net Fitting* tal como se indicó en el capítulo 3. Como base se probó con una red 500 neuronas ocultas obteniéndose los siguientes resultados:

- Resultados para una red de 500 neuronas ocultas

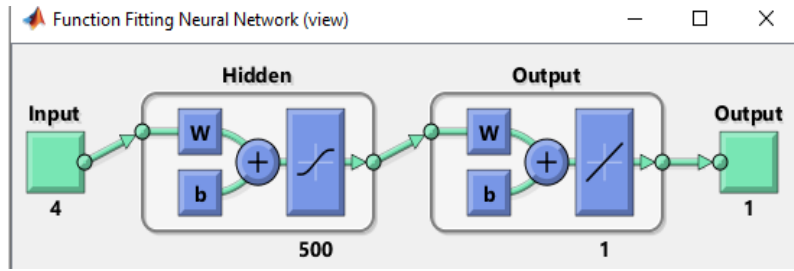


Grafico 2-4: Arquitectura de Red con 500 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

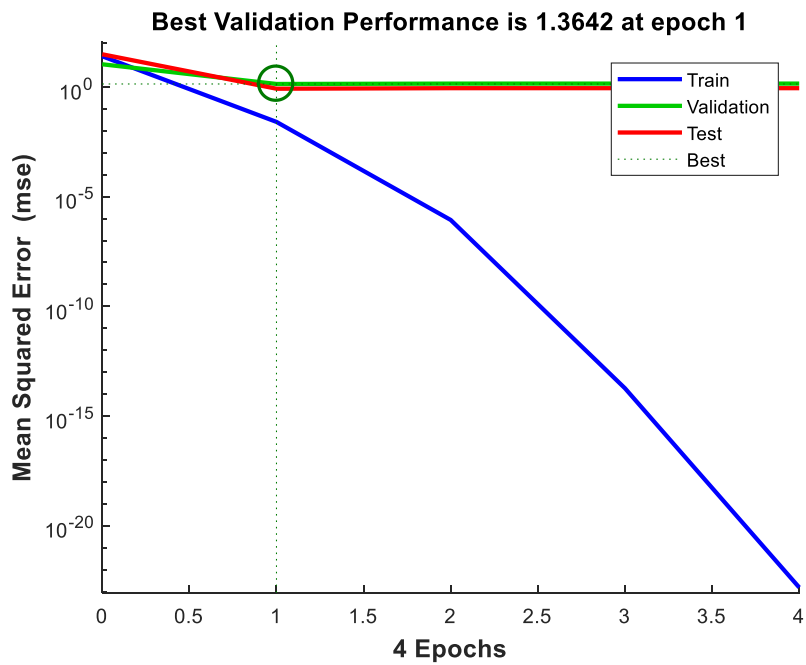


Grafico 3-4: Curvas de Aprendizaje de Red de 500 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

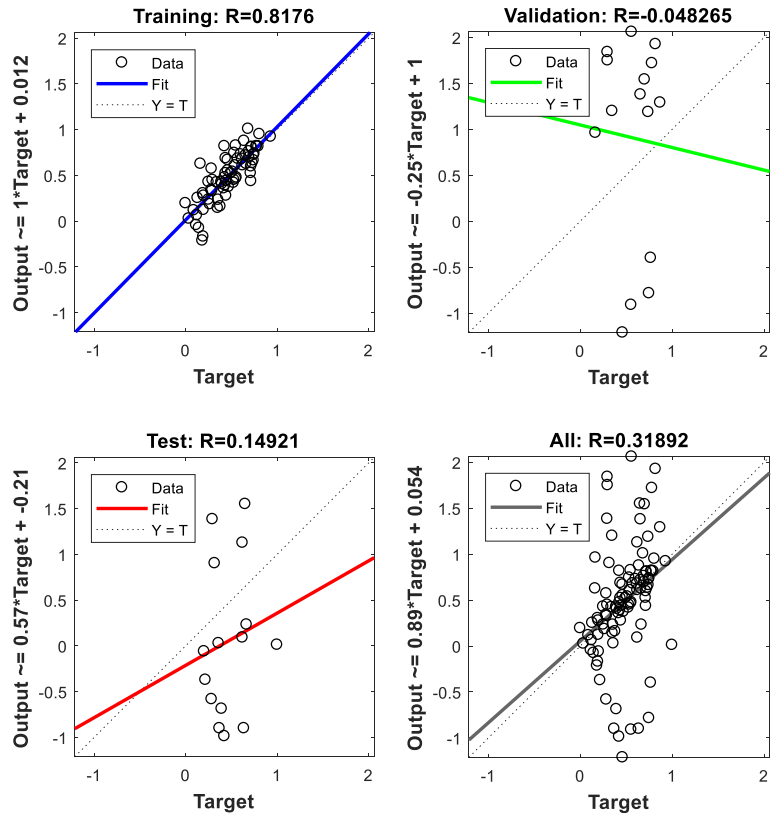


Grafico 4-4: Graficas de Correlación de Red de 500 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

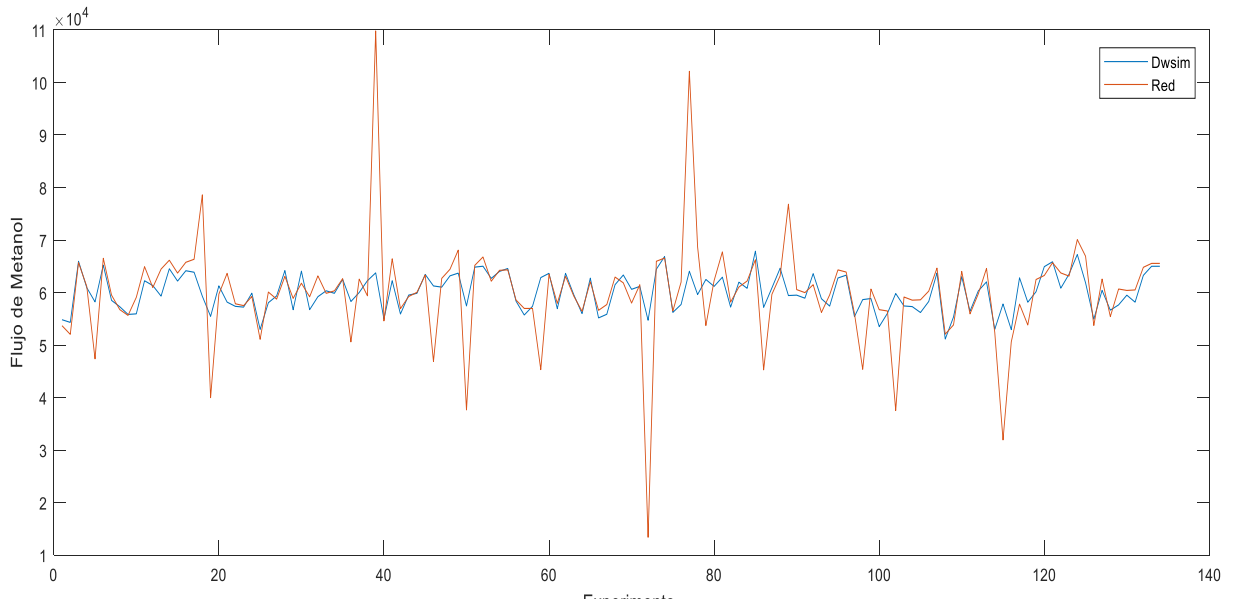


Grafico 5-4: Comparacion de Datos Reales vs Predichos de Red de 500 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

Al analizar estos gráficos se puede visualizar fácilmente que no es adecuado el uso de 500 neuronas ocultas pues el error cuadrático medio es bastante alto en comparación con resultados obtenidos en posteriores simulaciones para la curva de validación. Por otra parte, el grafico 5-3 muestra que los datos predichos no tienen mucha correlación con los datos objetivos (parte *testing*). Finalmente, en el grafico 5-4 se puede ver que los resultados arrojados por la red discrepan mucho de los datos objetivos.

- Resultados para una red de 100 neuronas ocultas

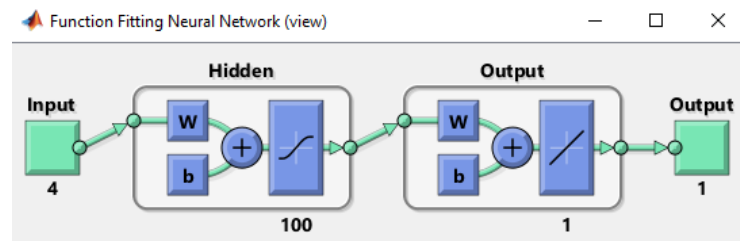


Grafico 6-4: Arquitectura de Red de 100 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

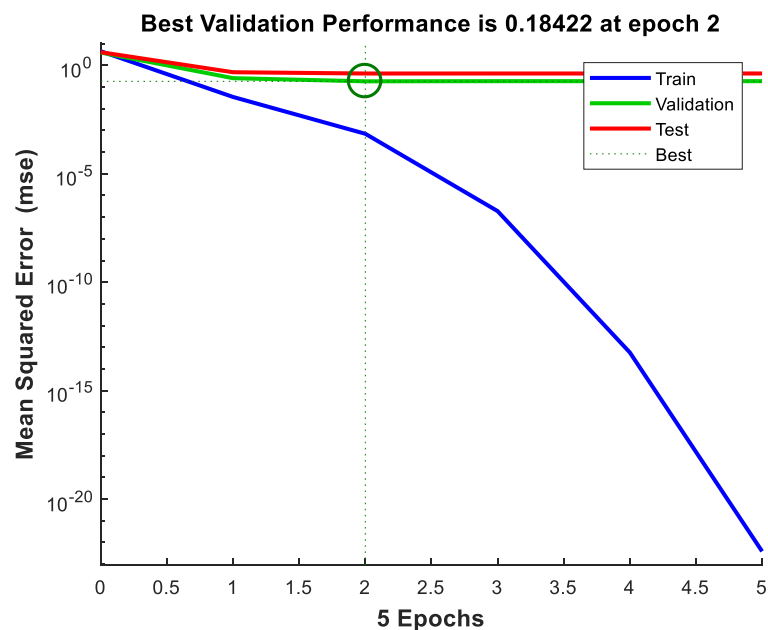


Grafico 7-4: Curvas de Aprendizaje de Red de 100 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

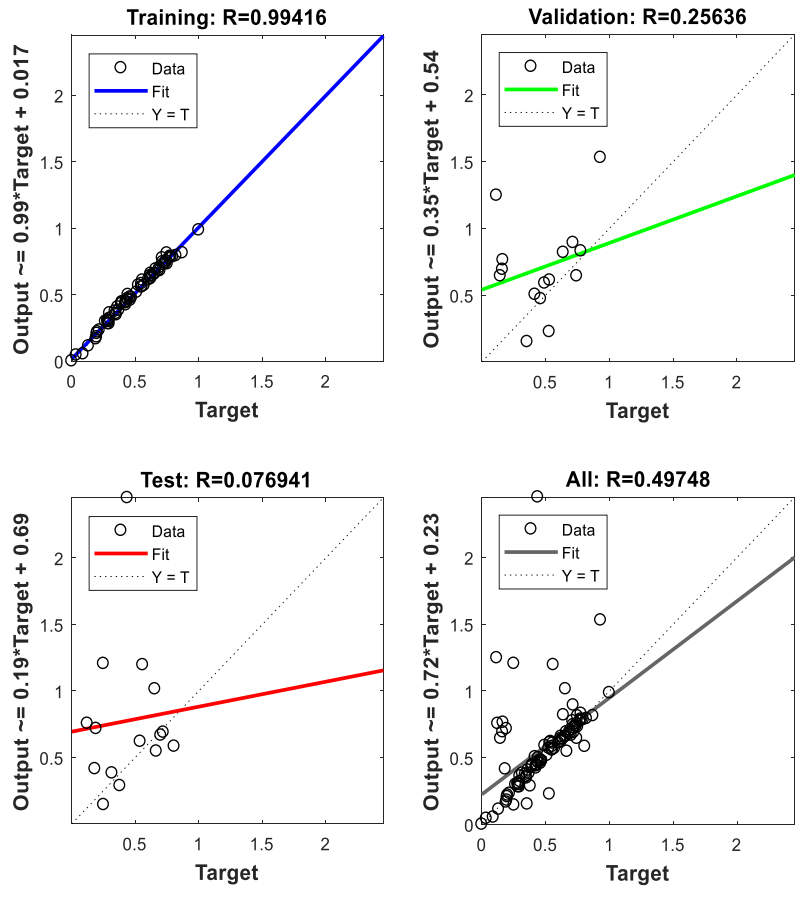


Grafico 8-4: Graficas de Correlación de Red de 100 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

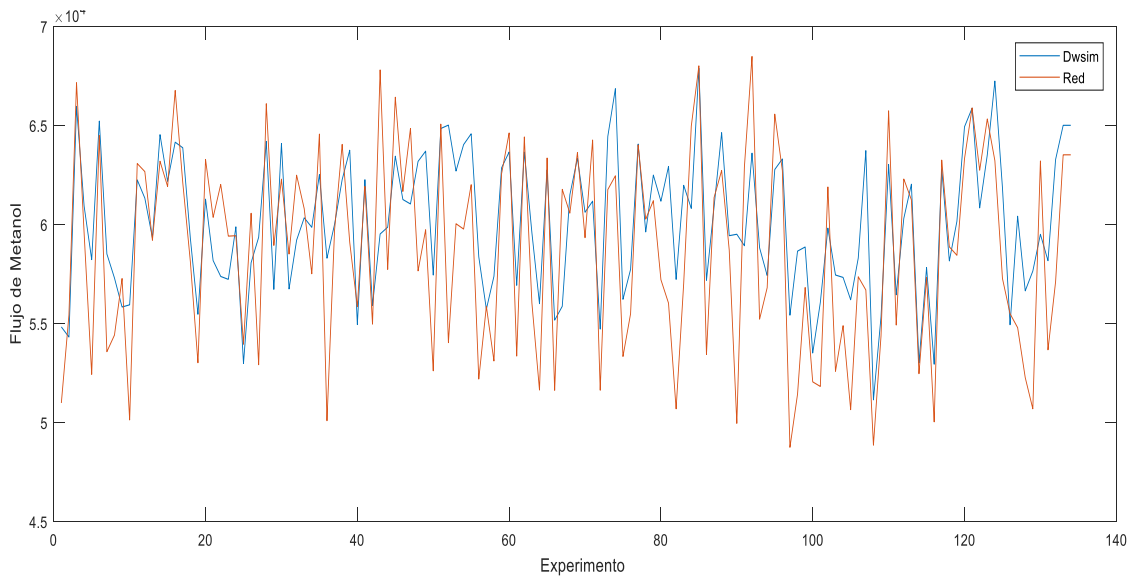


Grafico 9-4: Comparación de Datos Reales vs Predichos de Red de 100 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

Los resultados mostrados para esta red indican un caso particular, pues aquí se observa un ejemplo de sobreajuste. Esto se demuestra en los gráficos de correlación se observa que los datos de entrenamiento se ajustan a una recta perfecta, sin embargo, las correlaciones de la curva de *testing* y de validación no muestran un ajuste adecuado indicando que la red ha memorizado los datos. En la grafico 9-4 esto se evidencia en los sobre picos de color naranja que representa las predicciones de la red. Los errores asociados a estos picos superan el 10%

- Resultados para una Red de 12 neuronas ocultas

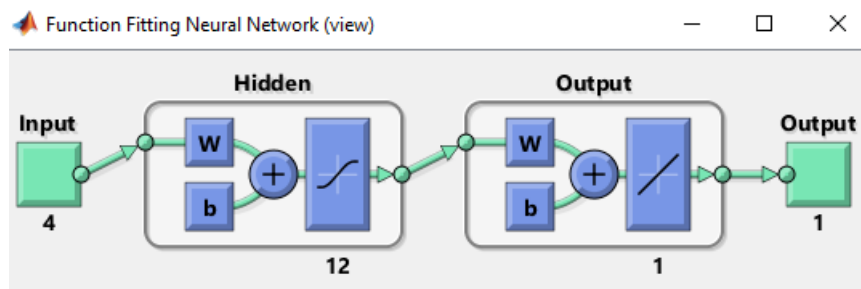


Grafico 10-4:Arquitectura de Red de 12 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

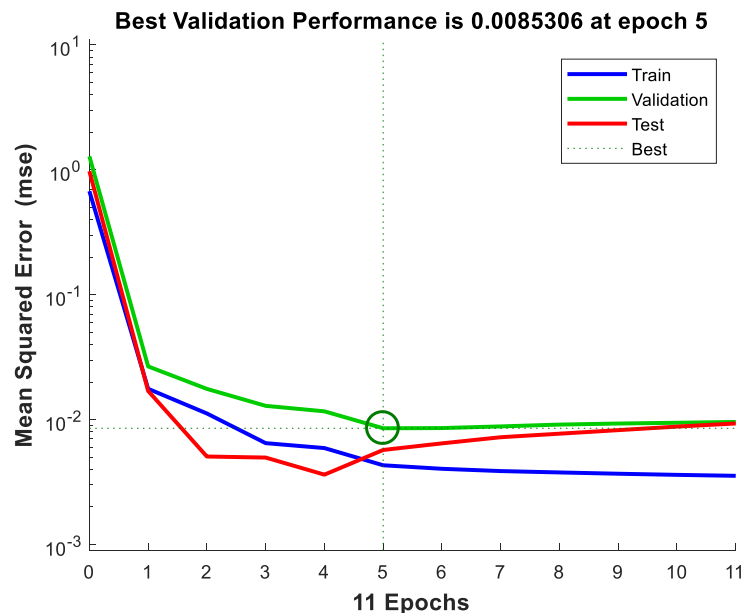


Grafico 11-4:Curvas de Aprendizaje de Red de 12 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

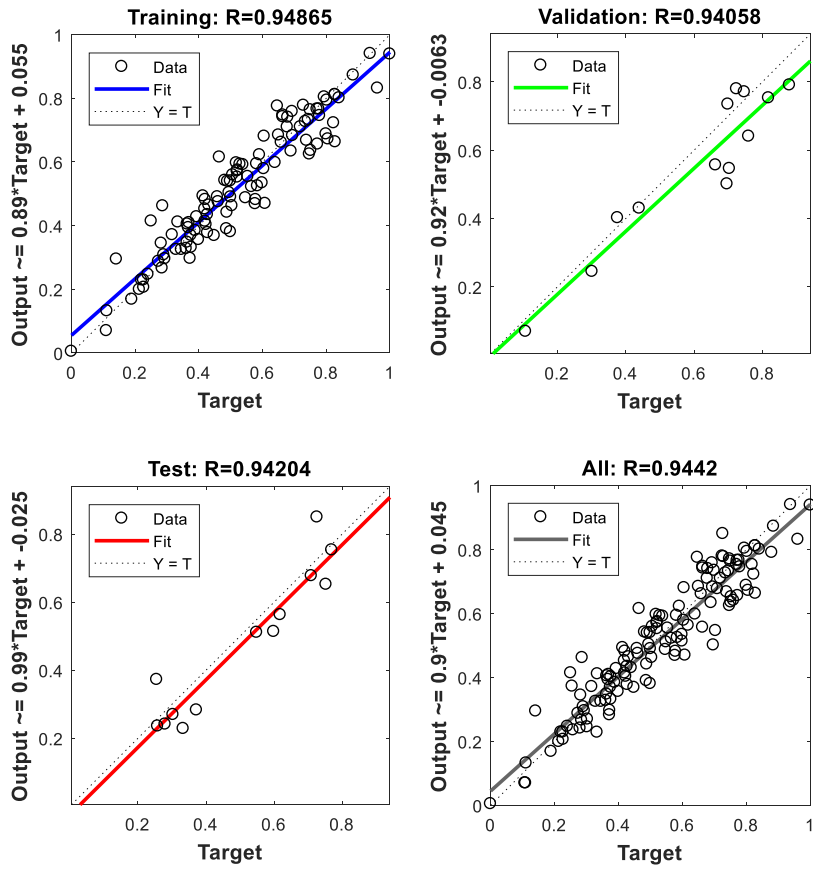


Grafico 12-4: Graficas de Correlación de Red de 12 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

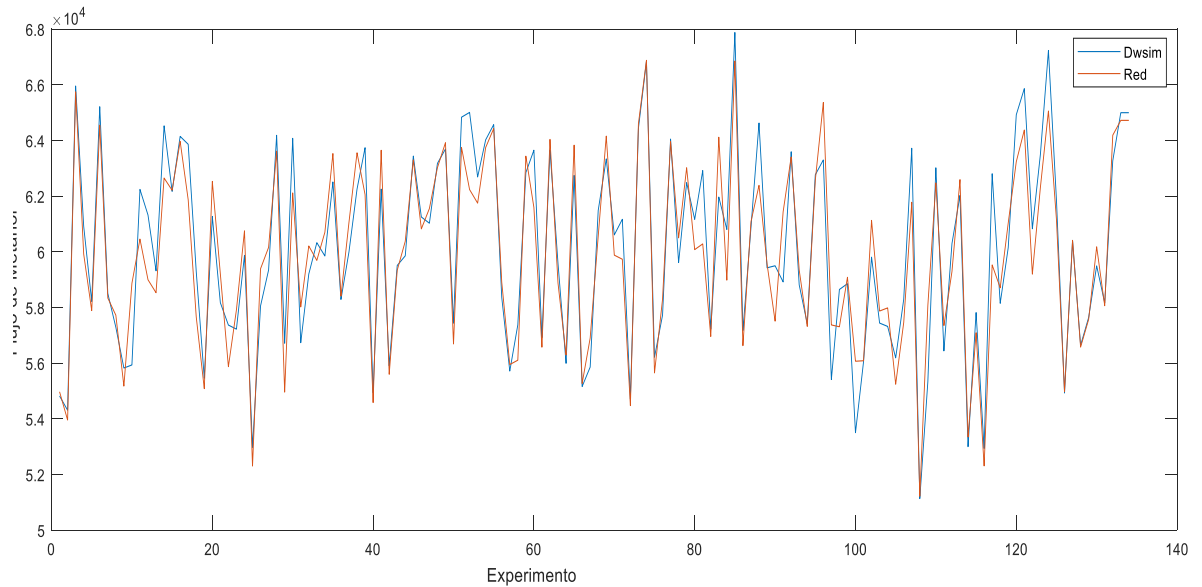


Grafico 13-4: Comparación de Datos Reales vs Predichos de Red de 12 neuronas

Realizado por: Parra Francis 2020

Se procedió a variar el número de neuronas ocultas en la red a prueba y error tal como se explicó en el capítulo 3. El número de neuronas se varió disminuyendo desde 100 hasta 1, disminuyendo 1 a la vez. Es así que tras realizar el procedimiento anteriormente descrito y comparar el error cuadrático medio de cada red se determina que una red de 12 neuronas es la ideal. Las gráficas de correlación muestran que los datos de entrenamiento, validación y *testing* presentan un coeficiente de correlación bastante aceptable. Por otra parte, el gráfico 13-4 presenta un mayor ajuste a los datos reales presentando siguiendo la tendencia de estas. Cabe aclarar que para llegar a este punto se utilizó un script avanzado para agilizar el proceso, este se muestra en el anexo A de este trabajo.

4.3.3 *Análisis Estadístico de los Datos Arrojadados por la Red*

Las predicciones hechas por la red se analizaron y contrastaron con los datos reales aportados por Dwsim.

4.3.3.1 *Análisis ANOVA*

Tabla 13-4: Análisis ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	1.99968E6	1	1.99968E6	0.17	0.6804
Intra grupos	3.12835E9	266	1.17607E7		
Total (Corr.)	3.13035E9	267			

Realizado por: Parra Francis 2020

La razón-F, es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos, en este caso es igual a 0.17003 sin embargo más fácil que el análisis de este factor resulta analizar el estadístico P asociado a este cociente. Puesto que el valor-P para este valor de razón F es mayor o igual que 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los valores predichos por la red para el flujo de metanol con aquellos arrojados por la simulación, con un nivel del 95.0% de confianza.

Estas observaciones se muestran en el Grafico 14-4 (ANOVA), donde se muestra que no existen diferencias significativas entre medias.

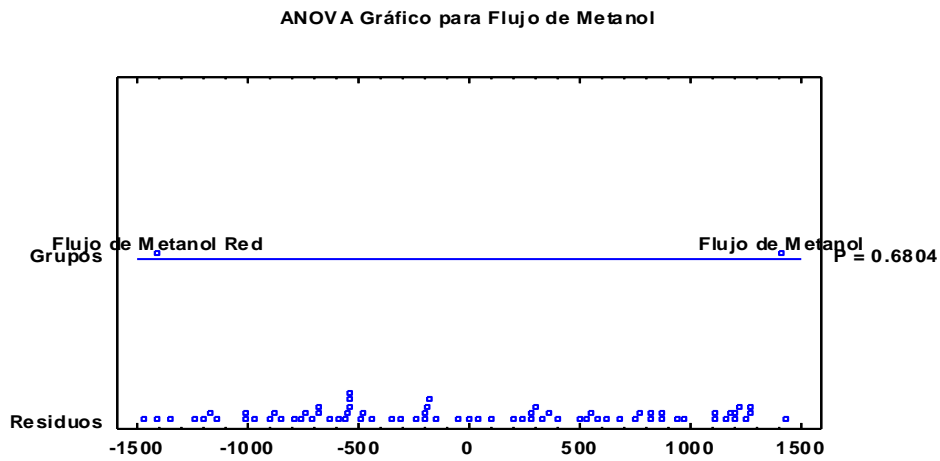


Grafico 14-4: Grafico ANOVA

Realizado por: Parra Francis 2020

4.3.3.2 Análisis de Medias

Tabla 14-4:Tabla de Medias

			Error Est.		
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Flujo de Metanol	134	60050.3	296.254	59637.8	60462.8
Flujo de Metanol Red	134	59877.5	296.254	59465.1	60290.0
Total	268	59963.9			

Realizado por: Parra Francis 2020

En la tabla 14-4 se muestra la media para cada columna de datos, y el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. También muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces. Esta última afirmación es más visible a través del Grafico 15-4.

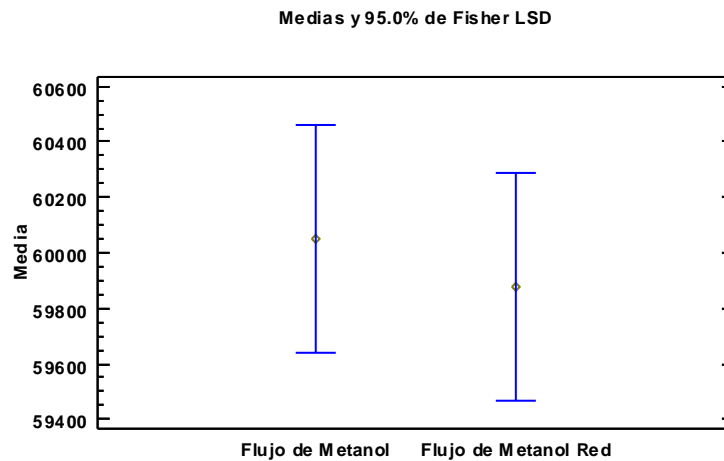


Grafico 15-4: Grafico de Medias

Realizado por: Parra Francis 2020

4.3.4 Prueba de la Red Neuronal

Para poner a prueba la viabilidad de la red se generó datos adicionales de simulación de la planta de hidrogenación de CO₂, estos fueron ingresados a la interfaz de Matlab y mediante el comando *net()*, que se genera luego de que la red ha sido entrenada, se obtienen las predicciones realizadas por la red a estos datos. La comparación entre los datos de Dwsim y la red neuronal se muestran en la Tabla 15-4:

Tabla 15-4: Resultados de prueba de la Red

Nº	Presión	Temperatura	Flujo de CO2	Flujo de H2	Flujo de Metanol DWSIM	Flujo de Metanol Red
1	67	206	92000	18000	61087.275	61678.3943
2	69	203	100000	20000	66943.528	66956.091
3	70	202	97000	15000	63806.521	63155.7471
4	73	210	80000	19000	57800.024	57333.6399
5	64	203	100000	18000	66143.669	65640.0416
6	71	206	87000	19000	61887.375	61187.574
7	59	200	86000	13000	56438.232	56022.7795
8	68	208	97000	20000	65456.968	65522.5895
9	69	210	100000	19000	65822.9	65831.8596

10	58	205	98000	16000	61069.529	60973.9397
----	----	-----	-------	-------	-----------	------------

Realizado por: Parra Francis 2020

Como se observa los valores predichos por la red son bastante cercanos a aquellos arrojados por el simulador. Esto indica que el desempeño de la red es bastante aceptable al realizar la comparación con los datos arrojados por el simulador Dwsim. Esto último se corrobora al aplicar un análisis ANOVA, mostrado en al Tabla 16-4, donde se observa un estadístico p mayor a 0.05 indicando que no existe diferencias estadísticamente significativas.

Tabla 16-4: Tabla ANOVA de Prueba de la Red

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	231849.	1	231849.	0.02	0.8968
Intra grupos	2.41261E8	18	1.34034E7		
Total (Corr.)	2.41493E8	19			

Realizado por: Parra Francis 2020

5 CONCLUSIONES

- Se desarrolló una red neuronal con la capacidad de predecir el flujo de metanol que se obtendrá en una planta de hidrogenación de CO₂ a través de la herramienta *fitting nntool* en el software Matlab cuyos resultados predichos son similares a los arrojados por un software de simulación de proceso químicos.
- Se encontró que los parámetros manipulables con más impacto dentro de la planta de producción de metanol fueron la temperatura, presión y flujos de las corrientes de los reactivos a la entrada del reactor.
- Se desarrolló una red neuronal en el software Matlab que opera con 12 neuronas ocultas, entrenada con el algoritmo de Levenberg-Marquardt, cuyos parámetros de entrada son temperatura y presión de entrada de los reactivos al reactor, así como sus respectivos flujos y produce un coeficiente de correlación de 0.9442 y error cuadrático medio de 0.0085.
- Se realizó la validación de los resultados arrojados por la red mediante un análisis estadístico, todas las pruebas efectuadas muestran que no existe diferencias significativas entre las predicciones del simulador y las de la red neuronal, adicionalmente los valores de prueba de la muestran una diferencia máxima de 1.71% que en aplicaciones de ingeniería resulta insignificante.

6 RECOMENDACIONES

- Realizar un análisis de datos atípicos a los valores predichos por la red neuronal.
- Reestructurar la red añadiendo el parámetro de presión de separación como una entrada más.
Debido a la configuración efectuada en el simulador este no pudo ser implementado.

GLOSARIO

Catalizador: Sustancia que acelera la velocidad de una reacción

PFR: Reactor flujo pistón

T: Temperatura de entrada al reactor

P: Presión de entrada al reactor

Tnor: Temperatura normalizada

Pnor: Presión normalizada

Fc: Flujo de dióxido de carbono

Fh: Flujo de Hidrogeno

Fcnor: Flujo de dióxido de carbono normalizado

Fhnor: Flujo de Hidrogeno

Kg/h: kilogramos por hora

Fm: Flujo de metanol

Fmnor: Flujo de metanol normalizado

MSE: Error cuadrático medio

Catalyst loading: Carga de catalizador al reactor en kilogramos por metro cubico

Catalyst diameter: Diámetro de partícula del catalizador

Catalyst void fraction: fracción hueca del catalizador

RotationSpeed: Velocidad de rotación

Neural Net Fitting: Red neuronal de arreglo de datos

E: matriz de entrada a la red

S: Matriz de valores de salida de la red

Sp: matriz de salida de valores predichos por la red

Algoritmo: Conjunto de pasos ordenados a seguir para llegar a un fin

BIBLIOGRAFÍA

AHMAD, K. y UPADHYAYULA, S., 2019. Kinetics of CO₂ hydrogenation to methanol over silica supported intermetallic Ga₃Ni₅ catalyst in a continuous differential fixed bed reactor. *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], no. xxxx, pp. 1-2. ISSN 0360-3199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2019.10.156. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.10.156>.

ALDAZ, A., 2016. *Desarrollo de un sistema de control inteligente basado en redes neuronales para el proceso de pasteurización de leche en la planta de lácteos ESPOCH*. S.l.: Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

BUSSCHE, K.M. Vanden y FROMENT, G.F., 1996. A steady-state kinetic model for methanol synthesis and the water gas shift reaction on a commercial Cu / ZnO / Al₂O₃ Catalyst. *Journal OF Catalysis*, vol. 10, no. 0156, pp. 1-10.

CAPARRINI, F., 2020. Aprendizaje supervisado y no supervisado. [en línea]. [Consulta: 6 abril 2020]. Disponible en: <http://www.cs.us.es/~fsancho/?e=77>.

CORNEJO ZUNIGA, O. y REBOLLEDO VEGA, R., 2016. Estimación de parámetros en modelos no lineales: algoritmos y aplicaciones. *Revista EIA* [en línea], vol. 13, no. 25, pp. 81-98. ISSN 17941237. DOI 10.14508/reia.2016.13.25.81-98. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.14508/reia.2016.13.25.81-98>.

FANG, X. et al., 2019. Moderate-pressure conversion of H₂ and CO₂ to methanol via adsorption enhanced hydrogenation. *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], vol. 44, no. 39, pp. 21913-21925. ISSN 0360-3199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2019.06.176. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.06.176>.

GLOSARIOS@SERVIDOR-ALICANTE.COM, 2015. Hidrogenación catalítica, reacción de [Catalytic hydrogenation] (Química). *glosarios@servidor-alicante.com*,

JAIN, R., MOUDGALYA, K.M., FRITZSON, P. y POP, A., 2017. Development of a thermodynamic engine in OpenModelica. *Proceedings of the 12th International Modelica Conference, Prague, Czech Republic, May 15-17, 2017*, vol. 132, pp. 89-99. DOI 10.3384/ecp1713289.

KUECHEN, C. y HOFFMANN, U., 1993. Investigation of simultaneous reaction of carbon monoxide and carbon dioxide with hydrogen on a commercial copper/zinc oxide catalyst. *Chemical Engineering Science*, vol. 48, no. 22, pp. 3767-3776. ISSN 00092509. DOI 10.1016/0009-2509(93)80219-G.

LARRAÑAGA, P., 2001. *Tema 8. Redes Neuronales*. S.l.: Universidad del País Vasco.

LEDESMA, S., 2006. Las Redes Neuronales implementación y consideraciones prácticas. *Fifth Mexican International Conference on Artificial Intelligence*, pp. 50.

LEONZIO, G., ZONDERVAN, E. y UGO, P., 2019. Methanol production by CO₂ hydrogenation: analysis and simulation of reactor performance. *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], vol. 44, no. 16, pp. 7915-7933. ISSN 0360-3199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2019.02.056. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.02.056>.

LIU, Yan, LIU, Yang, LIU, D., CAO, T., HAN, S. y XU, G., 2001. Design of CO₂ hydrogenation catalyst by an artificial neural network. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 25, no. 11-12, pp. 1711-1714. ISSN 00981354. DOI 10.1016/S0098-1354(01)00714-1.

LÓPEZ FLÓREZ, RAQUEL J.M.F.F., 2008. Las Redes Neuronales Artificiales. [en línea]. [Consulta: 13 abril 2020]. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=X0uLwi1Ap4QC&pg=PA83&lpg=PA83&dq=determinacion+del+numero+optimo+de+neuronas&source=bl&ots=gNPCmorm0k&sig=ACfU3U0IRL4eDsvOCVhV9c9DmCdz5IPzjw&hl=es&sa=X&ved=2ahUKEwivqq26iOf0AhWtmuAKHTYLA AQQ6AEwAHoECAwQKw#v=onepage&q=de>.

MARÍN DIAZARAQUE, J.M., 2007. Introducción a las redes neuronales aplicadas. *Manual Data Mining* [en línea], pp. 1-31. Disponible en: halweb.uc3m.es/esp/Personal/personas/jmmarin/esp/DM/tema3dm.pdf.

MARTINEZ, R., 2018. *Estudio en Planta Piloto de la Captura e Hidrogenacion a Combustibles de CO₂ promovidas electroquimicamente*. S.l.: Universidad Complutense de Madrid.

MATICH DAMIÁN, 2001. *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones*. S.l.: Universidad Tecnológica Nacional.

MEDEIROS, D., 2019. DWSIM - Chemical Process Simulator. [en línea]. [Consulta: 5 abril 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>.

MIGNARD, D. et al., 2003. Methanol synthesis from flue-gas CO₂ and renewable electricity: a feasibility study. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 28, no. 4, pp. 455-464. ISSN 03603199. DOI 10.1016/S0360-3199(02)00082-4.

NCYT, A., 2020. Proponen una nueva forma de usar redes neuronales para trabajar con datos ruidosos de grandes dimensiones | Noticias de la Ciencia y la Tecnología (Amazings® / NCYT®). [en línea]. [Consulta: 6 abril 2020]. Disponible en: <https://noticiadelaciencia.com/art/36797/proponen-una-nueva-forma-de-usar-redes-neuronales-para-trabajar-con-datos-ruidosos-de-grandes-dimensiones>.

SORROSAL, G. et al., [sin fecha]. Modelado del reactor químico del proceso BTO mediante

redes neuronales artificiales. ,

SUN, Y. et al., 2018. Artificial neural networks with response surface methodology for optimization of selective CO₂ hydrogenation using K-promoted iron catalyst in a microchannel reactor. *Journal of CO₂ Utilization* [en línea], vol. 24, no. November 2017, pp. 10-21. ISSN 22129820. DOI 10.1016/j.jcou.2017.11.013. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2017.11.013>.

VAN-DAL, É.S. y BOUALLOU, C., 2013. Design and simulation of a methanol production plant from CO₂ hydrogenation. *Journal of Cleaner Production* [en línea], vol. 57, pp. 38-45. ISSN 0959-6526. DOI 10.1016/j.jclepro.2013.06.008. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.06.008>.

VILLADA, F., MUÑOZ, N. y GARCÍA-QUINTERO, E., 2016. Redes neuronales artificiales aplicadas a la predicción del precio del oro. *Informacion Tecnologica*. S.l.: Centro de Informacion Tecnologica, pp. 143-150. DOI 10.4067/S0718-07642016000500016.

ZAHEDI, G. et al., 2005. Hybrid artificial neural network - First principle model formulation for the unsteady state simulation and analysis of a packed bed reactor for CO₂ hydrogenation to methanol. *Chemical Engineering Journal*, vol. 115, no. 1-2, pp. 113-120. ISSN 13858947. DOI 10.1016/j.cej.2005.08.018.

ZALAZAR-OLIVA, C., 2018. Predicción de la resistencia térmica de las incrustaciones en los enfriadores de ácido sulfhídrico on the sulphydric acid coolers. , pp. 345-359.

ANEXOS

Anexo A: Código de la Red Neuronal

```
Extraer=readtable('Resultados.xlsx','Sheet','Planta');
% Convertir datos a tabla
Datos=table2array(Extraer);
%Extraccion y normalizacion de las variables de entrada y salida
%Presion
P=Datos(1,:);
Pmax=max(P);
Pmin=min(P);
Pnor=(P-Pmin)./(Pmax-Pmin);
%Temperatura
T=Datos(2,:);
Tmax=max(T);
Tmin=min(T);
Tnor=(T-Tmin)./(Tmax-Tmin);
%Flujo de dióxido de carbono
Fc=Datos(3,:);
Fcmax=max(Fc);
Fcmin=min(Fc);
Fcnor=(Fc-Fcmin)./(Fcmax-Fcmin);
% Flujo de Hidrogeno
Fh=Datos(4,:);
Fhmax=max(Fh);
Fhmin=min(Fh);
Fhnor=(Fh-Fhmin)./(Fhmax-Fhmin);
% Matriz entrada
E=[Pnor;Tnor;Fcnor;Fhnor];
%Flujo metanol
Fm=Datos(5,:);
Fmmax=max(Fm);
Fmmin=min(Fm);
Fmnor=(Fm-Fmmin)./(Fmmax-Fmmin);
% Matriz salida
S=(Fmnor);

% Red Neuronal

% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 09-Apr-2020 19:33:52
%
% This script assumes these variables are defined:
%
%   E - input data.
%   S - target data.

x = E;
t = S;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help nntrain
% 'trainlm' is usually fastest.
% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
trainFcn = 'trainlm'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize =12;
```

```

net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
% For a list of all processing functions type: help nnprocess
net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% For a list of all data division functions type: help nndivide
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 80/100;
net.divideParam.valRatio = 10/100;
net.divideParam.testRatio = 10/100;

% Choose a Performance Function
% For a list of all performance functions type: help nnperformance
net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error

% Choose Plot Functions
% For a list of all plot functions type: help nnplot
net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
    'plotregression','plotfit'};

% Train the Network
[net,tr] = train(net,x,t);

% Test the Network
y = net(x);
e = gsubtract(t,y);
performance = perform(net,t,y)

% Recalculate Training, Validation and Test Performance
trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
valTargets = t .* tr.valMask{1};
testTargets = t .* tr.testMask{1};
trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
valPerformance = perform(net,valTargets,y)
testPerformance = perform(net,testTargets,y)

% View the Network
view(net)

% Plots
% Uncomment these lines to enable various plots.
%figure, plotperform(tr)
%figure, plottrainstate(tr)
%figure, ploterrhist(e)
%figure, plotregression(t,y)
%figure, plotfit(net,x,t)

% Deployment
% Change the (false) values to (true) to enable the following code
blocks.
% See the help for each generation function for more information.
if (false)
    % Generate MATLAB function for neural network for application
    % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
    % tools, or simply to examine the calculations your trained neural

```

```

    % network performs.
    genFunction(net, 'myNeuralNetworkFunction');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
    % generation with MATLAB Coder tools.
    genFunction(net, 'myNeuralNetworkFunction', 'MatrixOnly', 'yes');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
    % Simulink Coder tools.
    gensim(net);
end
%----- opcional-----
%Predecir un valor, cambiar E por cualquier matriz 4x1 normalizado
vnr=net(E(1:end,:));
% escalado de los valores
%Flujo de Metanol predicho
Fmp=(vnr(1,:)).*(Fmmax-Fmmin)+Fmmin;
% salidas predecidas
Sp=(Fmp)';
% Salidas Reales
Sr=(Fm)';
%Comparar datos de la red con los reales
[F,C]=size(Sr);
x=(1:1:F)';
error=((Sr-Sp)./Sr).*100;
plot(x,Sr(:,1))
hold on;
plot(x,Sp(:,1))

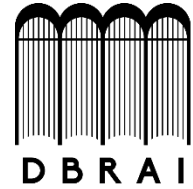
```

Anexo B: Código para predecir Flujo de Metanol

```
% Cargar la red neuronal Entrenada
load('Net 2.mat')
% ingresar los valores para predecir
prompt='Ingrese valor de Presion en bares'
p=input(prompt);
prompt='Ingrese valor de temperatura en Celsius'
t=input(prompt);
prompt='Ingrese valor de flujo de dióxido de carbono en kg/h'
fc=input(prompt);
prompt='Ingrese valor de flujo de hidrogeno en kg/h'
fh=input(prompt);
%Preparacion de la matriz de entrada
%Presion
pnor=(p-Pmin) ./ (Pmax-Pmin);
%Temperatura
tnor=(t-Tmin) ./ (Tmax-Tmin);
%Flujo de dióxido de carbono
fcnor=(fc-Fcmin) ./ (Fcmax-Fcmin);
% Flujo de Hidrogeno
fhnor=(fh-Fhmin) ./ (Fhmax-Fhmin);
% Matriz entrada
E=[pnor;tnor;fcnor;fhnor];
%Predecir red
vnor=net(E(1:end,:),);
fmp=(vnor(1,:)).*(Fmmax-Fmmin)+Fmmin
```



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS PARA EL
APRENDIZAJE Y LA INVESTIGACIÓN



UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS
REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 25 / 06 /2020

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Francis Anthony Parra Lara
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Facultad de Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
f. Analista de Biblioteca responsable: Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.



25-06-2020

0079-DBRAI-UPT-2020