



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN SISTEMA DE  
DESTILACIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE AZEÓTROPOS DE  
CO<sub>2</sub>-ETANO EN PROCESOS MEJORADOS DE RECUPERACIÓN  
DE PETRÓLEO**

**Trabajo de titulación**

TIPO: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

**INGENIERA QUÍMICA**

**AUTORA: WENDY ESTEFANÍA DÁVILA ARTEAGA**

**DIRECTOR: Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO**

Riobamba – Ecuador

2020

© 2020, Wendy Estefanía Dávila Arteaga

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, Wendy Estefanía Dávila Arteaga, 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 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, 21 de julio de 2020

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Wendy Estefanía Dávila Arteaga', with a large, stylized flourish at the end.

**131081782-8**

**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, **SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN SISTEMA DE DESTILACIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE AZEÓTROPAS DE CO<sub>2</sub>-ETANO EN PROCESOS MEJORADOS DE RECUPERACIÓN DE PETRÓLEO**, realizado por la señorita: **WENDY ESTEFANÍA DÁVILA ARTEAGA**, 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.

	<b>FIRMA</b>	<b>FECHA</b>
Ing. Mabel Mariela Parada Rivera <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-07-21
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN</b>	_____	2020-07-21
Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-07-21

## **DEDICATORIA**

Con mucho regocijo, dedico este logro a mis padres, Eduardo y Martha, por haberme forjado con responsabilidad y disciplina, porque todo lo que he conseguido hasta hoy ha sido gracias a su dedicación, apoyo, esfuerzo y guía. Sin duda alguna, ellos son y serán mi ejemplo y motivación para jamás rendirme.

Wendy.

## AGRADECIMIENTO

Agradezco en primer lugar a Dios, por otorgarme el regalo de la vida y por todas las oportunidades que ha puesto en mi camino para convertirme en una mejor persona y llegar a ser una profesional, por bendecirme con salud y un hogar estable.

Gracias a mis padres por su entrega incondicional, confianza, tiempo y soporte no solo económico, sino también moral y emocional. Ellos me enseñaron que la mejor herencia que un padre puede dejarle a sus hijos es la educación, y que cualquier trabajo u objetivo que se me presente en la vida debo poner mi máximo empeño para hacerlo bien, sin conformismos ni excusas, con honestidad y humildad.

De igual manera, agradezco al Ing. Daniel Chuquín por la confianza y oportunidad que me brindó para desarrollar el presente proyecto de titulación, por su guía, motivación y enseñanzas, que sin duda alguna, lo convirtieron en alguien a quien admiro.

Una inmensa gratitud a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, en especial a la Facultad de Ciencias, por abrirme sus puertas y formarme profesionalmente, pero además, porque allí conocí, aprendí y compartí con mis docentes, amigos y compañeros como una familia. Así también, al Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería, “GISAP”, por permitir la ejecución de esta investigación.

Finalmente, agradezco a todas aquellas personas que formaron parte de este arduo trayecto, quienes me brindaron sonrisas, lecciones, cooperamos como equipo y los que creyeron en mí.

Wendy.

## TABLA DE CONTENIDO

INDICE DE TABLAS.....	ix
INDICE DE FIGURAS.....	x
INDICE DE GRÁFICOS.....	xii
INDICE DE ANEXOS.....	xiii
SIGLAS / ABREVIACIONES .....	xiv
RESUMEN .....	xvi
ABSTRACT.....	xvii
<b>1 INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>18</b>
<b>1.1 Antecedentes. ....</b>	<b>18</b>
<b>1.2 Planteamiento del problema. ....</b>	<b>19</b>
<b>1.3 Justificación del proyecto.....</b>	<b>20</b>
<b>1.4 Objetivos. ....</b>	<b>21</b>
<b>1.4.1 Objetivo General.....</b>	<b>21</b>
<b>1.4.2 Objetivos Específicos .....</b>	<b>21</b>
<b>1.5 Alcance. ....</b>	<b>22</b>
<b>2 MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>23</b>
<b>2.1 Estado del Arte. ....</b>	<b>23</b>
<b>2.1.1 Gas natural.....</b>	<b>23</b>
<b>2.1.2 Tratamiento del gas natural y azeótropos de CO<sub>2</sub>-Etano.....</b>	<b>24</b>
<b>2.1.3 Red neuronal artificial (RNA).....</b>	<b>28</b>
<b>2.1.3.1 RNA en procesos de destilación: .....</b>	<b>28</b>
<b>2.2 Bases Teóricas.....</b>	<b>31</b>
<b>2.2.1 Destilación .....</b>	<b>31</b>
<b>2.2.1.1 Destilación extractiva.....</b>	<b>31</b>
<b>2.2.2 Azeótropo .....</b>	<b>32</b>
<b>2.2.2.1 Métodos de separación de azeótropos .....</b>	<b>33</b>

2.2.3	<b>Red neuronal artificial (RNA)</b> .....	34
2.2.3.1	<i>Características de una RNA</i> .....	35
2.2.3.2	<i>Entrenamiento, aprendizaje y ejecución</i> .....	36
2.2.3.3	<i>Selección de un modelo de RNA</i> .....	37
2.2.3.4	<i>Ventajas de las RNA</i> .....	38
2.2.4	<b>DWSIM</b> .....	39
2.2.4.1	<i>Características</i> .....	39
2.2.5	<b>ChemSep</b> .....	42
2.3	<b>Marco Legal</b> .....	43
2.3.1	<i>Software Libre en Ecuador</i> .....	43
2.3.2	<i>Licencia del simulador DWSIM</i> .....	44
3	<b>METODOLOGÍA</b> .....	45
3.1	<b>Etapas de la metodología.</b> .....	45
3.2	<b>Establecimiento de parámetros de funcionamiento.</b> .....	46
3.2.1	<i>Generalidades del proceso</i> .....	46
3.2.2	<i>Secuencia directa convencional</i> .....	48
3.2.3	<i>Proceso alternativo</i> .....	49
3.2.3.1	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna de extracción</i> .....	51
3.2.3.2	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna de recuperación de solvente</i> ...51	
3.2.3.3	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna concentradora</i> .....	52
3.3	<b>Simulación en DWSIM</b> .....	53
3.4	<b>Validación de resultados de la simulación.</b> .....	62
3.5	<b>Procesamiento de datos.</b> .....	63
3.6	<b>Diseño de la red neuronal artificial.</b> .....	68
3.7	<b>Entrenamiento de datos.</b> .....	69
3.8	<b>Validación de resultados de la RNA</b> .....	72
3.9	<b>Análisis Estadístico</b> .....	74
4	<b>GESTIÓN DEL PROYECTO</b> .....	75
4.1	<b>Presupuesto</b> .....	75



<b>4.2</b>	<b>Recursos y Materiales.</b>	<b>75</b>
<b>4.3</b>	<b>Cronograma.</b>	<b>76</b>
<b>4.4</b>	<b>Discusión y análisis de resultados.</b>	<b>77</b>
<b>4.4.1</b>	<i>Informe de resultados de la simulación en DWSIM.</i>	<b>77</b>
<b>4.5</b>	<b>Validación de los resultados provenientes de DWSIM</b>	<b>80</b>
<b>4.6</b>	<b>Balance de masa del sistema.</b>	<b>81</b>
<b>4.6.1</b>	<i>Balance de masa general para la torre de extracción</i>	<b>82</b>
<b>4.6.2</b>	<i>Balance de masa general para la torre de recuperación del solvente</i>	<b>85</b>
<b>4.6.3</b>	<i>Balance de masa general para la torre concentradora</i>	<b>87</b>
<b>4.7</b>	<b>Eficiencia del sistema alternativo frente al método convencional.</b>	<b>89</b>
<b>4.8</b>	<b>Reporte de resultados de la red neuronal artificial (RNA).</b>	<b>89</b>
<b>4.8.1</b>	<i>Error cuadrático medio (MSE)</i>	<b>90</b>
<b>4.8.2</b>	<i>Gráficos sobre el comportamiento de la RNA</i>	<b>90</b>
<b>4.8.3</b>	<i>Código de la RNA en MATLAB</i>	<b>92</b>
<b>4.8.4</b>	<i>Gráficas de comparación entre las salidas predichas y las deseadas.</i>	<b>93</b>
<b>4.8.4.1</b>	<i>Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA</i>	<b>93</b>
<b>4.8.4.2</b>	<i>Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la RNA.</i>	<b>100</b>
<b>4.9</b>	<b>Resultados del análisis estadístico en SPSS.</b>	<b>105</b>
	<b>CONCLUSIONES.</b>	<b>110</b>
	<b>RECOMENDACIONES.</b>	<b>111</b>
	<b>GLOSARIO</b>	<b>112</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA.</b>	
	<b>ANEXOS.</b>	

## INDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2.</b> Características generales y de funcionamiento de DWSIM.....	39
<b>Tabla 2-2.</b> Herramientas disponibles en DWSIM.....	40
<b>Tabla 3-2.</b> Detalles adicionales de DWSIM .....	42
<b>Tabla 4-2.</b> Marco legal del software libre en Ecuador .....	43
<b>Tabla 1-3.</b> Condiciones operativas iniciales para el sistema de estudio.....	47
<b>Tabla 2-3.</b> Condiciones operativas de la columna de extracción .....	51
<b>Tabla 3-3.</b> Condiciones operativas de la columna de recuperación de solvente.....	51
<b>Tabla 4-3.</b> Condiciones operativas de la columna concentradora .....	52
<b>Tabla 5-3.</b> Parámetros operativos utilizados durante la simulación en DWSIM.....	54
<b>Tabla 6-3.</b> Parámetros de entrada de la RNA .....	63
<b>Tabla 7-3.</b> Parámetros de salida de la RNA.....	63
<b>Tabla 8-3.</b> Restricciones para las entradas de la RNA .....	64
<b>Tabla 9-3.</b> Base de datos generados para la RNA.....	65
<b>Tabla 1-4.</b> Presupuesto del proyecto de titulación .....	75
<b>Tabla 2-4.</b> Cronograma del proyecto de titulación. ....	76
<b>Tabla 3-4.</b> Resultados de la columna de extracción en DWSIM.....	78
<b>Tabla 4-4.</b> Resultados de la columna recuperadora de solvente en DWSIM .....	79
<b>Tabla 5-4.</b> Resultados de la columna concentradora en DWSIM .....	79
<b>Tabla 6-4.</b> Comparación de las fracciones molares obtenidas en DWSIM .....	80
<b>Tabla 7-4.</b> Comparación de las temperaturas obtenidas en DWSIM .....	81
<b>Tabla 8-4.</b> Error cuadrático medio de cada fase de diseño de la RNA.....	90
<b>Tabla 9-4.</b> Valores reales vs predichos en la columna de extracción (C1).....	93
<b>Tabla 10-4.</b> Valores reales vs predichos en la columna C1 para la validación de la RNA.....	100
<b>Tabla 11-4.</b> Valores reales vs predichos en la columna C2 para la validación de la RNA.....	102
<b>Tabla 12-4.</b> Valores reales vs predichos en la columna C3 para la validación de la RNA.....	103
<b>Tabla 13-4.</b> ANOVA.....	105
<b>Tabla 14-4.</b> Medias con intervalos de confianza del 95,0%.....	106
<b>Tabla 15-4.</b> Prueba de Kruskal-Wallis.....	107
<b>Tabla 16-4.</b> Resumen Estadístico (CO2 - columna 1).....	107
<b>Tabla 17-4.</b> Resumen Estadístico (Etano - columna 1).....	108
<b>Tabla 18-4.</b> Resumen Estadístico (Etano - columna 2).....	108
<b>Tabla 19-4.</b> Resumen Estadístico (Propano - columna 2).....	108
<b>Tabla 20-4.</b> Resumen Estadístico (Etano Dist - columna 3) .....	109
<b>Tabla 21-4.</b> Resumen Estadístico (Etano Bott - columna 3) .....	109

## INDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2.</b> Consumo mundial de gas natural (2018) .....	24
<b>Figura 2-2.</b> Diagrama de flujo simplificado de un proceso de destilación extractiva .....	32
<b>Figura 3-2.</b> Configuración típica del sistema de extracción para separar azeótropos de CO <sub>2</sub> -etano .....	34
<b>Figura 4-2.</b> Representación de una neurona biológica y una artificial .....	35
<b>Figura 5-2.</b> Modelo de neurona artificial.....	38
<b>Figura 6-2.</b> Interfaz de DWSIM para la simulación de procesos. ....	40
<b>Figura 7-2.</b> Diferentes operaciones unitarias disponibles en DWSIM .....	41
<b>Figura 1-3.</b> Esquema de la secuencia de destilación extractiva de CO <sub>2</sub> -etano .....	47
<b>Figura 2-3.</b> Separación de CO <sub>2</sub> -etano con solvente C <sub>3+</sub> en el sistema de destilación extractiva convencional .....	48
<b>Figura 3-3.</b> Diagrama de flujo para la separación propuesta de azeótropo de CO <sub>2</sub> -etano .....	50
<b>Figura 4-3.</b> Flowsheet de la simulación en DWSIM .....	53
<b>Figura 5-3.</b> Panel de selección de componentes en DWSIM .....	55
<b>Figura 6-3.</b> Panel de selección de unidades de medida en DWSIM.....	55
<b>Figura 7-3.</b> Panel de ChemSep para la especificación de presiones .....	56
<b>Figura 8-3.</b> Panel de ChemSep para la selección del modelo termodinámico (DECHEMA) ....	56
<b>Figura 9-3.</b> Panel de ChemSep para la selección del modelo termodinámico (EOS) .....	57
<b>Figura 10-3.</b> Panel de condiciones para el flujo de alimentación.....	57
<b>Figura 11-3.</b> Configuración operativa de la columna de extracción .....	58
<b>Figura 12-3.</b> Especificación de condiciones para la columna de extracción .....	58
<b>Figura 13-3.</b> Configuración operativa de la columna de recuperación de solvente.....	59
<b>Figura 14-3.</b> Especificación de condiciones para la columna de recuperación de solvente .....	59
<b>Figura 15-3.</b> Configuración operativa de la columna concentradora .....	60
<b>Figura 16-3.</b> Especificación de condiciones para la columna concentradora.....	60
<b>Figura 17-3.</b> Especificación de condiciones del divisor .....	61
<b>Figura 18-3.</b> Opciones numéricas de solución.....	61
<b>Figura 19-3.</b> Panel de configuración de la tabla de resultados en DWSIM .....	62
<b>Figura 20-3.</b> Interfaz de la simulación en DWSIM con sus resultados .....	63
<b>Figura 21-3.</b> Disposición de los datos en la matriz de Excel .....	69
<b>Figura 22-3.</b> Algoritmo de entrenamiento para la RNA .....	70
<b>Figura 23-3.</b> Entrenamiento de la RNA.....	71
<b>Figura 24-3.</b> Panel de evaluación de la RNA .....	72

<b>Figura 1-4.</b> Simulación completa del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO <sub>2</sub> -etano en DWSIM .....	77
<b>Figura 2-4.</b> Resultados en DWSIM .....	78
<b>Figura 3-4.</b> Balance de masa general de la torre de extracción.....	82
<b>Figura 4-4.</b> Balance de masa general de la torre de recuperación del solvente .....	85
<b>Figura 5-4.</b> Balance de masa general de la torre concentradora .....	87
<b>Figura 6-4.</b> Esquema de la RNA diseñada en MATLAB .....	90

## INDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-3.</b> Metodología del trabajo de titulación.....	45
<b>Gráfico 1-4.</b> Regresión del entrenamiento y prueba de la RNA .....	91
<b>Gráfico 2-4.</b> Rendimiento del entrenamiento de la RNA.....	92
<b>Gráfico 3-4.</b> Fracción molar de CO <sub>2</sub> real vs el predicho en la columna de extracción.....	97
<b>Gráfico 4-4.</b> Fracción molar de etano real vs el predicho en la columna de extracción .....	97
<b>Gráfico 5-4.</b> Fracción molar de etano real vs el predicho en la columna de recuperación .....	98
<b>Gráfico 6-4.</b> Fracción molar de propano real vs el predicho en la columna de recuperación .....	98
<b>Gráfico 7-4.</b> Fracción molar de etano (destilado) real vs el predicho en la columna concentradora .....	99
<b>Gráfico 8-4.</b> Fracción molar de etano (residuo) real vs el predicho en la columna concentradora .....	99
<b>Gráfico 9-4.</b> Fracción molar de CO <sub>2</sub> de la columna de extracción en la validación .....	101
<b>Gráfico 10-4.</b> Fracción molar de etano de la columna de extracción en la validación .....	101
<b>Gráfico 11-4.</b> Fracción molar de etano de la columna de recuperación en la validación .....	102
<b>Gráfico 12-4.</b> Fracción molar de propano de la columna de recuperación en la validación .....	103
<b>Gráfico 13-4.</b> Fracción molar de etano (destilado) de la columna concentradora en la validación .....	104
<b>Gráfico 14-4.</b> Fracción molar de etano (residuo) de la columna concentradora en la validación .....	104

## **INDICE DE ANEXOS**

<b>ANEXO A.</b> Nombres de las variables utilizadas para el diseño y entrenamiento de la RNA .....	
<b>ANEXO B.</b> Nombres de las variables utilizadas para la validación de la RNA .....	
<b>ANEXO C.</b> Script para el diseño y entrenamiento de la RNA.....	
<b>ANEXO D.</b> Script para la validación de la RNA .....	
<b>ANEXO E.</b> Valores reales vs predichos en la columna de recuperación de solvente (C2) .....	
<b>ANEXO F.</b> Valores reales vs predichos en la columna concentradora (C3) .....	

## SIGLAS / ABREVIACIONES

<b>BR</b>	Algoritmo de regularización Bayesiano
<b>BRRNA</b>	Redes neuronales artificiales regularizadas bayesianas (en inglés, BRANN)
<b>EOS</b>	Ecuaciones de estado
<b>GN</b>	Gas natural
<b>IA</b>	Inteligencia Artificial
<b>LGN</b>	Líquidos del gas natural
<b>LM</b>	Algoritmo de Levenberg-Marquardt
<b>LSD</b>	Test estadístico de comparaciones múltiples o conocido también como método de la diferencia menos significativa de Fisher (least significant difference)
<b>MSE</b>	Error cuadrático medio
<b>PR</b>	Peng-Robinson
<b>QSAR</b>	Relaciones cuantitativas estructura-actividad (en inglés, quantitative structure-activity relationship)
<b>RNA</b>	Red Neuronal Artificial (en inglés ANN, artificial neural network)
<b>*R</b>	Regresión
<b>°C</b>	Unidad de temperatura, grados centígrados
<b>Atm</b>	Unidad de presión, atmósfera
<b>Kmol/s</b>	Unidad de flujo molar, kilomol por segundo
<b>MW</b>	Unidad de potencia, megawatt o megavatio
<b>RR</b>	Radio de reflujo
<b>P</b>	Presión (en atm)

<b>R</b>	Relación solvente/alimentación (adimensional)
<b>T</b>	Temperatura (en °C)
<b>C1</b>	Columna de destilación 1 (extracción)
<b>C2</b>	Columna de destilación 2 (recuperación)
<b>C3</b>	Columna de destilación 3 (concentración)
<b>CO<sub>2</sub></b>	Dióxido de carbono
<b>C<sub>2</sub></b>	Etano
<b>C<sub>3</sub></b>	Propano
<b>i-C<sub>4</sub></b>	Isobutano
<b>n-C<sub>4</sub></b>	Butano
<b>i-C<sub>5</sub></b>	Isopentano
<b>nC<sub>5</sub></b>	Pentano
<b>CO<sub>2</sub></b>	Fracción molar del CO <sub>2</sub> (destilado columna 1)
<b>ETC1</b>	Fracción molar del etano (residuo columna 1)
<b>ETC2</b>	Fracción molar del etano (destilado columna 2)
<b>PROP</b>	Fracción molar del propano (residuo columna 2)
<b>ETC3DIS</b>	Fracción molar del etano (destilado columna 3)
<b>ETC3BOT</b>	Fracción molar del etano (residuo columna 3)



## RESUMEN

El propósito de la presente investigación fue simular y validar un sistema alternativo de destilación extractiva para separar azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano durante el tratamiento de gas natural, mismo que sirve de base para el diseño de una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir las fracciones molares de los principales productos obtenidos. Para el desarrollo de la RNA se generó una base de datos a partir de la simulación en el software libre DWSIM. La muestra consta de 130 datos con tres entradas: presión, temperatura y relación solvente/alimentación, y sus correspondientes seis salidas: fracción molar del CO<sub>2</sub> destilado y del etano residual en la columna de extracción, fracción molar del etano destilado y del propano residual en la columna de recuperación de solvente y fracción molar del etano tanto destilado como residual en la columna concentradora. La red se diseñó en MATLAB empleando 80 neuronas ocultas en su arquitectura y el algoritmo de regularización Bayesiana para el entrenamiento. Se obtuvo un valor de MSE de 0,0036 y un coeficiente de regresión total de 0,95546. La red se validó mediante un análisis estadístico comparativo obteniéndose un 95% de confiabilidad. La simulación permitió remover el 95,6% de CO<sub>2</sub> presentes en el gas natural y se recuperó un 91,56% de etano. A su vez, parte de los LGN de la columna de recuperación, fueron utilizados como solvente sin necesidad de recurrir a uno externo. Esta propuesta demostró ser más eficiente que el modelo convencional, reduciendo un 10% de los costos anuales totales y operativos sin comprometer la purificación deseada y reduciendo el consumo energético. Se recomienda ampliar el grado de aprendizaje de la RNA con nuevos parámetros de entrada y salida para que se convierta en una herramienta computacional más didáctica, completa, y sirva para el estudio de diversos procesos químicos y/o industriales.

**Palabras clave:** <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA> <AZEÓTROPO> <DESTILACIÓN EXTRACTIVA> <GAS NATURAL> <DWSIM (SOFTWARE)> <DIÓXIDO DE CARBONO> <MATLAB (SOFTWARE)> <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>



02-07-2020

0100-DBRAI-UPT-2020

## **ABSTRACT**

The purpose of this research was to replicate and validate an alternative extractive distillation system for CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope separation during the natural gas treatment process, which provides a vital basis for the design of an artificial neural network (ANN) which can predict the mole fractions of the main products obtained. For the development of the ANN, a database was generated from a simulation in the free software DWSIM. The sample consists of 130 data with three inputs: pressure, temperature, and solvent/feed ratio, and their corresponding six outputs: the molar fraction of distilled CO<sub>2</sub> and residual ethane in the extraction column, the molar fraction of distilled ethane and residual propane in the solvent recovery column, and the molar fraction of distilled ethane and residual ethane in the concentrator column. The network was designed in MATLAB using 80 hidden neurons in its architecture and the Bayesian regularization algorithm for training. A mean squared error (MSE) value of 0.0036 and a total regression coefficient of 0.95546 were obtained. The network was validated employing a comparative statistical analysis obtaining 95% reliability. The simulation allowed the removal of 95.6% of CO<sub>2</sub> present in natural gas and 91.56% of ethane was recovered. Moreover, part of the Natural Gas Liquids (LGN) from the recovery column was used as a solvent without the need to resort to an external one. This proposal proved to be more efficient than the conventional model reducing 10% of total annual and operating costs without compromising the desired purification and reducing energy consumption. It is recommended to extend the ANN learning degree with new input and output parameters so that it becomes a more didactic complete computational tool and serves as a case study of various chemical and/or industrial processes.

**Keywords:** <CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <AZEOTROPE>  
<EXTRACTIVE DISTILLATION> <NATURAL GAS> <DWSIM (SOFTWARE)>  
<CARBON DIOXIDE> <MATLAB (SOFTWARE)> <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS (RNN)>

# CAPÍTULO I

## 1 INTRODUCCIÓN

### 1.1 Antecedentes.

Durante décadas el petróleo se ha constituido como la base de la estructura energética a nivel mundial; por su alto grado de consumo (aprox. 90% sólo en transporte) y amplio desarrollo (sinnúmero de productos derivados) se ha convertido en el motor principal tanto de los países desarrollados como en vías de desarrollo (Lapuerta, 2008, p.8).

No obstante, a pesar de la prevalencia del petróleo como principal fuente de energía, en la actualidad el gas natural está transformando y cambiando esa tendencia. En este contexto, los países latinoamericanos presentan en general un superávit de crudo y gas, pero estos recursos se encuentran concentrados en unos pocos y su aprovechamiento no ha sido el más apropiado (Lapuerta, 2008, p.9).

El gas natural (GN) es una mezcla de hidrocarburos gaseosos que se encuentra frecuentemente en yacimientos fósiles de diversas formas, ya sea no asociado (solo), disuelto o asociado (acompañando al petróleo) o en depósitos de carbón (Gómez, 2008, p.4). Y constituye la tercera fuente energética a nivel mundial, después del petróleo y el carbón.

La composición del gas natural puede variar de acuerdo al tipo de yacimiento del cual proviene, su profundidad, ubicación y condiciones geológicas. Sin embargo, para que el gas se pueda usar a nivel comercial o industrial, debe someterse a un tratamiento previo de acondicionamiento, que se basa principalmente en la remoción del contenido de agua y gases ácidos que posee (Gutiérrez et al., 2013, p.3).

Inicialmente, al gas natural se lo conoce como gas amargo debido a la presencia de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y ácido sulfhídrico ( $\text{H}_2\text{S}$ ) en su composición. Estas sustancias son indeseables porque pueden acarrear problemas vinculados con la corrosión de los lugares de confinamiento o de las líneas de transporte (gasoductos). Una vez liberado de sus contaminantes se denomina gas dulce (Perry, Green y Maloney, 1997; citado en Gutiérrez et al., 2013, p.3).

La práctica del tratamiento con gas natural implica cuatro pasos: eliminación de gas ácido (endulzamiento o edulcorante), eliminación de agua (deshidratación), eliminación de aceite y condensado, y separación de líquidos de gas natural (licuefacción) (Elliot et al., 2005, pp.1944).

A su vez, existen varios métodos para endulzar el gas natural, los que incluyen absorción química con aminas, absorción física, permeación de membrana y destilación a baja temperatura (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.39).

Por otro lado, actualmente nos situamos en la llamada “Era Tecnológica”, la cual es más exigente y demanda profesionales, operarios y empresarios capacitados y/o habilitados para dar respuestas rápidas y a bajo costo frente a interrogantes de la investigación, industria, empresas o proyectos. Es así que, el modelamiento y/o simulación de procesos se impone como una alternativa clave para encontrar respuestas y evaluar procesos de forma inmediata y principalmente económica.

La simulación o modelamiento se basa principalmente en el estudio matemático de un problema real que posibilite su posterior análisis y predicción. Los avances tecnológicos especialmente en el campo de softwares computacionales han hecho de esta herramienta no solo un medio viable, confiable y fácil de emplear, sino que la han convertido en un requerimiento más para la evaluación y control de procesos industriales y de producción de diversa índole.

Cabe enfatizar que la simulación de procesos químicos está naturalmente vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente cantidad de movimiento; de un proceso cuya estructura, y los datos preliminares de los equipos que lo componen, son conocidos (Scenna et al., 1999, p.191).

## **1.2 Planteamiento del problema.**

En la actualidad la demanda de gas natural ha aumentado considerablemente más que cualquier otro combustible fósil, por lo que algunas estimaciones indican que el suministro de energía de gas natural superará a la del petróleo y del carbón dentro de aproximadamente 15 años. De ello resulta, que los procesos de tratamiento de gas natural desempeñen importantes funciones actuales y futuras.

Los métodos de endulzamiento del gas natural incluyen absorción química con aminas, absorción física, permeabilidad de membrana y destilación a baja temperatura. De estas prácticas el proceso de destilación extractiva a baja temperatura que separa el CO<sub>2</sub> de los hidrocarburos mediante una secuencia convencional de dos columnas de destilación, tiene el potencial de superar las desventajas de los otros métodos. No obstante, presenta dos desafíos importantes: (1) sublimación

de CO<sub>2</sub> en el desmetanizador, y (2) un azeótropo de ebullición mínima entre CO<sub>2</sub> y etano (C<sub>2</sub>) (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40).

Entre sus múltiples ventajas se encuentra principalmente el reciclar parte del producto de líquidos de gas natural (LGN) de la columna de recuperación como solvente, evitando el uso de uno externo, y consecuentemente mostrando mayor eficiencia al trabajar con una alimentación de alto contenido de CO<sub>2</sub> (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40).

A pesar de su uso industrial generalizado y sus principales beneficios, su alta demanda de energía comúnmente representa más del 50% de los costos operativos de la planta.

Para simplificar estos costos y optimizar el proceso, el presente proyecto de titulación propone inicialmente la simulación y validación de un sistema alternativo de destilación extractiva para la separación de CO<sub>2</sub>-etano basado en una configuración de tres columnas empleando la multiplataforma para procesos químicos DWSIM, cuyos resultados se compararán tanto con el sistema de extracción convencional de dos columnas, así como los valores de la modelación del sistema en mención provenientes de artículos de alto impacto.

Posteriormente se generará una base de datos que sirvan para el desarrollo de una Red Neuronal Artificial (RNA) empleando el sistema de cómputo numérico MATLAB, misma que es capaz de predecir las fracciones molares de los principales componentes obtenidos tanto en el destilado como en los residuos de cada columna ingresando las condiciones de presión, temperatura y relación solvente/alimentación que se desea en el proceso.

### **1.3 Justificación del proyecto.**

El proceso de destilación extractiva a baja temperatura que permite separar el CO<sub>2</sub> de los hidrocarburos a través de dos columnas de destilación, presenta múltiples ventajas frente a otros métodos de tratamiento de gas natural. Sin embargo, debido a su alta demanda energética y consecuentemente elevados costos, resulta imperativo el desarrollo de alternativas más económicas y eficientes.

Por ese motivo, se opta por simular y validar un sistema alternativo de destilación extractiva para la separación de los azeótropos CO<sub>2</sub>-etano empleando tres columnas mediante el software DWSIM, que permita corroborar su eficiencia frente al sistema convencional y comparar los resultados con los valores determinados en bibliografía.

Por otro lado, los resultados permiten el diseño de una red neuronal artificial utilizando el Toolbox de MATLAB, como una herramienta didáctica, confiable y rápida que permita predecir la fracción molar de los principales componentes del sistema de estudio a partir de tres condiciones de

entrada: presión, temperatura y relación solvente/alimentación. De esta manera se puede analizar, controlar y/o estudiar el comportamiento del proceso mediante la variación de sus condiciones de forma directa y simplificada.

La simulación no sólo se presenta como una alternativa clave para reproducir virtualmente los procesos industriales y estudiar su comportamiento, sino también para el diseño, desarrollo, predicción, análisis y optimización técnica de los procesos. El Ingeniero Químico en este sentido se encuentra capacitado para manipular softwares especializados y generar modelos inteligentes que permitan simular y estudiar las variables que intervienen en los procesos químicos, donde puede efectuar mejoras en la eficiencia del proceso, minimizando los costos de producción.

Dado que la multiplataforma para procesos químicos DWSIM empleada para la simulación es de código abierto, se pretende que la información sea de acceso para todas las personas que deseen utilizar este trabajo como guía para el desarrollo de futuros proyectos.

Finalmente, el presente proyecto de titulación se enmarca en la línea de investigación de Procesos, Tecnológico e Industrial de la carrera de Ingeniería Química y del Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, "GISAI".

## **1.4 Objetivos.**

### **1.4.1 *Objetivo General***

Simular y validar un sistema de destilación alternativo para la separación de azeótropos de CO<sub>2</sub>-Etano en procesos mejorados de recuperación de petróleo.

### **1.4.2 *Objetivos Específicos***

- Simular el sistema mediante la multiplataforma de procesos químicos de código abierto DWSIM y comparar su eficiencia frente al sistema convencional.
- Validar el proceso alternativo de destilación extractiva para separar azeótropos CO<sub>2</sub>-etano mediante la comparación de los resultados obtenidos en el simulador con los valores provistos en bibliografía.
- Cuantificar la cantidad de CO<sub>2</sub> removido y la cantidad de etano recuperado por el sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos CO<sub>2</sub>-etano.
- Diseñar una Red Neuronal Artificial que permita predecir la fracción molar de los principales componentes extraídos en el sistema de destilación propuesto a partir de las condiciones de funcionamiento: presión, temperatura y relación solvente/alimentación.

## **1.5 Alcance.**

En el presente trabajo se simula y valida un proceso alternativo para el endulzamiento de gas natural de composición típica, a través de una destilación extractiva a baja temperatura, que separa el CO<sub>2</sub> de los hidrocarburos en una secuencia directa de tres columnas de destilación, que a su vez resuelve el problema de separación de los azeótropos CO<sub>2</sub>-etano que se forman en el proceso convencional, y permite reciclar parte del producto de líquidos de gas natural (LGN) de la columna de recuperación como solvente.

La simulación se desarrolla empleando la multiplataforma para procesos químicos DWSIM. Posteriormente, partiendo de la validación de la simulación se genera una base de datos para el diseño de una red neuronal artificial (RNA) en MATLAB que permita predecir las fracciones molares de los principales componentes que salen de cada una de las columnas, ingresando y variando los valores de presión, temperatura y la relación solvente/alimentación que se requieran sin necesidad de simular nuevamente todo el proceso.

## CAPÍTULO II

### 2 MARCO TEÓRICO

#### 2.1 Estado del Arte.

##### 2.1.1 *Gas natural*

El consumo de gas natural a nivel mundial ha experimentado una aceleración desde el año 2018, impulsado principalmente por Estados Unidos y China, que concentraran alrededor de las dos terceras partes del consumo adicional (Enerdata, 2019).

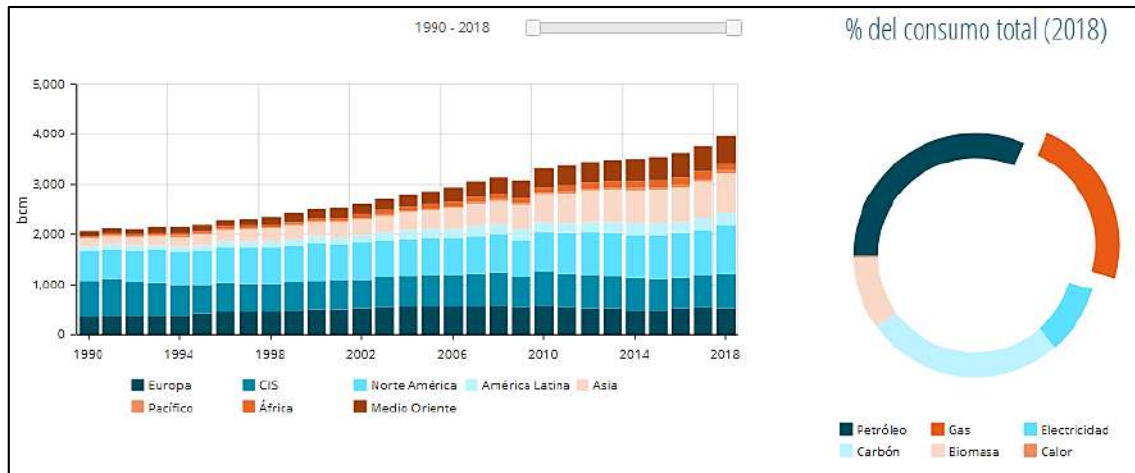
Según el Anuario Estadístico Mundial de Energía (2019), en EEUU, la demanda de gas aumentó en un 10% en 2018, lo que supone el mayor crecimiento registrado en los últimos 30 años, impulsado por el sector eléctrico (+15 GW de las nuevas centrales eléctricas con alimentación de gas) y los edificios.

El consumo de gas también experimentó una aceleración en China (+18 %), como consecuencia de su política de sustitución del carbón por gas en los sectores de la electricidad y la calefacción. Asimismo, se registró un incremento en la India y Corea del Sur gracias a su continuo crecimiento económico (Enerdata, 2019).

Por su parte, en Rusia siguió creciendo de forma constante (a un ritmo más lento que en 2017) y se aceleró en Canadá, Irán y Argelia. Sin embargo, el consumo disminuyó en Japón debido a que la rehabilitación de reactores nucleares redujo la necesidad de generar electricidad a partir de gas (Enerdata, 2019).

Por otro lado, a pesar del crecimiento económico, el consumo de gas disminuyó en Europa – especialmente en Turquía, Francia, Alemania e Italia– debido al aumento de las temperaturas, a la mayor disponibilidad de energía nuclear e hidroeléctrica y al aumento de la generación de electricidad a partir de energías renovables (Enerdata, 2019).





**Figura 1-2.** Consumo mundial de gas natural (2018)

**Fuente:** (Enerdata, 2019)

Algunas estimaciones indican que el suministro de energía primaria de gas natural superará al del petróleo crudo y al carbón, colocándolo en el segundo lugar, antes del carbón, para 2035, en el suministro de energía doméstica general. Por ello, los procesos de tratamiento de gas natural desempeñan importantes funciones actuales y futuras en esta fuente de energía (Zoelle et al., 2015; citado en Ebrahimzadeh et al., 2016, p.39).

### 2.1.2 Tratamiento del gas natural y azeótropos de CO<sub>2</sub>-Etano

El tratamiento del gas natural implica generalmente cuatro pasos: *eliminación de gas ácido* (edulcorante), *eliminación de agua* (deshidratación), *eliminación de aceite y condensado*, y *separación de líquidos de gas natural* (licuefacción) (Elliot et al., 2005, p.1944). El proceso de endulzamiento elimina los gases ácidos (CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S). La separación de estos gases es crucial para prevenir la solidificación del CO<sub>2</sub> durante los pasos criogénicos (Safdarnejad et al., 2015, p.5016).

Los métodos para endulzar gas natural incluyen absorción química con aminas, absorción física, permeación de membrana y destilación a baja temperatura. De estas prácticas, la absorción con alcanolaminas (aminoalcoholes) es la más utilizada. Sin embargo, este proceso requiere una cantidad significativa de solvente para materia prima de alta concentración de CO<sub>2</sub> y presenta importantes problemas operativos y de seguridad. Además, este proceso genera un producto de CO<sub>2</sub> gaseoso a baja presión que debe comprimirse o licuarse para un posible secuestro geológico. Del mismo modo, el sistema de eliminación de CO<sub>2</sub> por membrana genera un producto de CO<sub>2</sub> a baja presión y también sufre una alta caída de presión (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.39).

Por otro lado, como alternativa a los solventes químicos y físicos, las tecnologías de membrana y la PSA permiten la eliminación de CO<sub>2</sub> del gas natural mediante una destilación a baja

temperatura. No obstante, se requiere un consumo adicional de energía para una refrigeración auxiliar y los requisitos de vapor (Berstad, Nekså y Anantharaman, 2012, pp.41-42).

El proceso de destilación extractiva a baja temperatura, que separa el CO<sub>2</sub> de los hidrocarburos en una secuencia directa convencional de dos columnas de destilación, tiene el potencial de superar algunas de las desventajas mencionadas anteriormente (ZareNezhad y Hosseinpour, 2009, pp.1491-1495). Este proceso presenta dos desafíos importantes: (1) sublimación de CO<sub>2</sub> en el desmetanizador, y (2) un azeótropo de ebullición mínima entre CO<sub>2</sub> y etano (C<sub>2</sub>). Reciclar parte del producto de líquidos de gas natural (LGN) de la columna de recuperación de solvente como solvente supera algunos de estos desafíos (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40).

El solvente es una mezcla de los componentes C<sub>3</sub> y más pesados de la alimentación de gas original y arrastra parte del CO<sub>2</sub> por la columna, reduciendo así la temperatura de congelación del CO<sub>2</sub> y evitando la formación de CO<sub>2</sub> sólido. También ayuda a romper el azeótropo de CO<sub>2</sub>-etano en el proceso de destilación extractiva (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40).

En comparación con el proceso de amina, esta alternativa tiene varias ventajas:

- El sistema es eficiente para un alto contenido de alimentación de CO<sub>2</sub>.
- El solvente es el subproducto del suministro de gas natural, que evita el uso de un solvente externo para el proceso.
- El comportamiento no corrosivo del solvente evita el uso de tamices de acero inoxidable en la columna.
- El comportamiento anhidro del solvente evita la necesidad de una unidad de deshidratación en el proceso.
- La destilación es una de las tecnologías de separación térmica más comunes.  
(Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40)

A pesar de su uso industrial generalizado y sus principales beneficios, su alta demanda de energía comúnmente representa más del 50% de los costos operativos de la planta (Li y Bai, 2012; Kiss y Ignat, 2012a; citados en Ebrahimzadeh et al., 2016, p.40). La separación con una menor demanda de energía se puede lograr si los diversos componentes tienen una volatilidad relativa más alta.

Las últimas décadas han dado lugar a varias soluciones de destilación energéticamente eficientes basadas en técnicas de integración e intensificación de procesos, tales como: destilación cíclica, una columna de destilación integrada con calor, destilación reactiva y columnas acopladas térmicamente (Soave y Feliu, 2002, pp.889-891; Huang et al., 2008, p.863).

Hong y Kobayashi (1986, p.736) proporcionaron datos de equilibrio vapor-líquido para la separación de CO<sub>2</sub>-etano usando n-pentano como un elemento de arrastre pesado en un sistema de destilación extractiva.

Por otro lado, Torres et al. (2013, p.55) investigaron una configuración alternativa de secuencia acoplada térmicamente (CEDSR) basada en una columna de destilación extractiva a baja temperatura para incrementar la eliminación de dióxido de carbono con un costo anual total (TAC) más bajo. Además, investigaron el efecto de diferentes fracciones de hidrocarburos licuados como un agente de arrastre, las propiedades de control teórico, la eficiencia termodinámica y la generación de gases de efecto invernadero del sistema propuesto, y concluyen que la alternativa propuesta tiene mejores rendimientos generalizados que el sistema de absorción química convencional.

Lastari et al. (2012, p.155) estudiaron los efectos de la composición del disolvente, la relación disolvente/alimentación y las ubicaciones de las bandejas de alimentación en el requerimiento de energía de la destilación extractiva para una separación del azeótropo de CO<sub>2</sub>-etano.

Tavan et al. (2014a, p.1) exploraron la aplicación tecnológica de una columna de pared divisoria (DWC) para la separación azeotrópica de CO<sub>2</sub> y etano a temperaturas criogénicas y comparan los aspectos económicos y ambientales del proceso DWC con el sistema convencional.

Tavan et al. (2014b, p.47) analizaron la destilación extractiva para la separación azeotrópica de CO<sub>2</sub> y etano, y la relación alimentación/demanda de energía, observando que su esquema propuesto tiene un rendimiento superior en términos de demanda total de energía y respecto a los problemas ambientales en comparación con el proceso convencional.

Tavan et al. (2014, p.590) estudiaron dos posibles disposiciones de columna extractiva de pared divisoria (DWC) para encontrar los beneficios potenciales derivados de las destilaciones acopladas térmicamente en la separación de una mezcla que incluye el azeótropo CO<sub>2</sub>-etano con un bajo punto de ebullición. En el trabajo se evidencia que el proceso que incluye el pre-faccionador en el diseño DWC en su estado optimizado conduce a una reducción del 51,6% en las tareas totales en comparación con el proceso convencional. Además, comparan las columnas convencionales de destilación extractiva y el nuevo proceso DWC en términos de estimación de costos, eficiencia de eliminación de CO<sub>2</sub> y reducción de emisiones de CO<sub>2</sub>. Notablemente, los resultados muestran que el proceso DWC es interesante/factible y una novedosa alternativa que reduce los requisitos de vapor y los costos del equipo.

Tavan et al. (2013, p.407; 2014, p.24) investigaron la aplicación de absorción reactiva (RA) para romper el azeótropo de CO<sub>2</sub>-etano con bajo requerimiento de energía y comparan sus resultados

con el proceso de destilación extractiva convencional. Optimizaron el caudal de dietanolamina (DEA), la temperatura de entrada de DEA y la ubicación de entrada de alimentación con respecto a la demanda de energía del proceso.

En otra investigación, Tavan (2014, p.275) analizó la mezcla azeotrópica de CO<sub>2</sub>-etano como la alimentación de un proceso de reforma para convertir CO<sub>2</sub> y etano en gas de síntesis (H<sub>2</sub> y CO). Sugiere un catalizador de tipo Mg y una relación mínima de vapor/HC de 1,5 para evitar la formación de coque durante el reformado.

No obstante, todos estos métodos o estudios mencionados tienen altos requisitos de energía y/o costos de equipo, así como largos períodos de recuperación (Kiss y Ignat, 2012b, pp.295-296).

Para reducir estos costos, Ebrahimzadeh et al. (2016, pp.42-44) proponen un novedoso sistema de destilación extractiva para la separación de CO<sub>2</sub>-etano basado en una configuración de tres columnas y los resultados del modelo se comparan con el sistema de extracción convencional de dos columnas. Esta nueva unidad cumple con la purificación deseada con menos inversión de capital y requisitos de energía.

A diferencia del proceso convencional de dos columnas, esta configuración produce CO<sub>2</sub> en forma de un producto líquido. Además, el proceso descrito se puede adaptar a una planta existente agregando una columna concentradora secuencialmente a las columnas de extracción y de recuperación de solvente. En este trabajo Ebrahimzadeh et al. (2016, pp.40-42) realizan la simulación y optimización del proceso en el software APEN PLUS, y para establecer una comparación justa, todos los diseños analizados utilizaron el método de optimización de programación cuadrática secuencial (SQP).

Kravanja et al. (2018, p.190) plantearon una investigación exhaustiva sobre el rendimiento de transferencia de calor del CO<sub>2</sub>, el etano y su mezcla azeotrópica en condiciones supercríticas. Desarrollaron y configuraron un intercambiador de calor de doble tubería para estudiar los efectos de diferentes parámetros de funcionamiento en el rendimiento de transferencia de calor en un amplio rango de temperaturas (25° - 90° C) y presiones (5 MPa - 30 MPa). Por primera vez, se investigó el etano y la mezcla azeotrópica como un nuevo fluido de transferencia de calor y se comparó con CO<sub>2</sub> puro. Descubrieron que la mezcla azeotrópica absorbe una cantidad satisfactoria de calor en el intercambiador de calor y se comporta de manera similar a los compuestos puros.

Es importante destacar que, Brown et al. (1988, p.169-182) estudiaron el equilibrio vapor-líquido del sistema binario de dióxido de carbono-etano en un amplio rango de temperatura (207 – 270 K). Los datos se modelaron con tres ecuaciones de estado: Peng-Robinson, Soave-Redlich-

Kwong y la modificación Fuller de Soave-Redlich-Kwong. Según los resultados encontrados concluyeron que son capaces de modelar los datos experimentales en todo el rango de temperatura, con una precisión suficiente para la mayoría de los cálculos de ingeniería si el parámetro de interacción binaria puede variar con la temperatura.

### **2.1.3 Red neuronal artificial (RNA)**

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) son concebidas como el paradigma de la programación que imita el comportamiento de aprendizaje y procesamiento en forma automática de una neurona humana. Según Varela y Campbells (2011, p.19) permite solucionar problemas con un alto nivel de complejidad.

#### **2.1.3.1 RNA en procesos de destilación:**

Las redes neuronales artificiales pueden proporcionar modelos óptimos para procesos no lineales complejos, mismos que son útiles para muchos propósitos, incluido el control de procesos (Macmurray y Himmelblau, 1995, pp.1077-1078).

Montague et al. (1992, p.243) proponen un controlador predictivo multi-variable no lineal para columnas de destilación, donde el modelo utilizado para la síntesis es una red neuronal artificial. El controlador utiliza una rutina de optimización en línea que determina las entradas futuras que minimizarán las desviaciones entre las salidas de proceso deseadas y previstas.

Posteriormente, Macmurray y Himmelblau (1995, p.1077) proponen el modelado y control de una columna de destilación empaquetada utilizando una RNA.

Zamproga et al. (2001, p.689) desarrollaron un sensor virtual que estima las composiciones del producto en una columna de destilación por lotes de recipientes intermedios. El sensor se basa en una red neuronal artificial recurrente y utiliza información disponible de mediciones secundarias (como temperaturas y tasas de flujo). En su trabajo demostraron que las composiciones estimadas están en buen acuerdo con los valores reales.

Li et al. (2002, p.1573) sugieren un método eficaz con redes neuronales artificiales (RNA) y un algoritmo genético (GA) para modelar el sistema de destilación azeotrópica de la mezcla isopropanol y agua con mecanismos desconocidos o complejos, y optimizar sus parámetros operativos para ahorrar energía. La simulación del proceso fue llevada a cabo en APEN PLUS.

Liau et al. (2004, p.247) desarrollaron un sistema experto de unidad de destilación de crudo (CDU) para llevar a cabo la optimización del proceso y maximizar la tasa de producción de petróleo bajo las cualidades requeridas del producto. Constituyeron un modelo de RNA que puede

predecir las cualidades del producto petrolero con respecto a las variables de entrada del sistema (es decir, propiedades del crudo).

Pasadakis et al. (2006, p.1131) estudiaron los puntos de la curva de destilación y ciertas propiedades de frío de las fracciones de combustible diésel mediante espectroscopia infrarroja media (IR) y redes neuronales artificiales (RNA). Los algoritmos de predicción desarrollados se probaron en datos no vistos y mostraron un alto nivel de precisión, comparable al de los métodos de laboratorio estándar, por lo que pueden ser usados como una herramienta rápida y confiable en aplicaciones de control de calidad de las diversas fracciones involucradas en la producción de combustible diésel.

Fernandez et al. (2008, p.64) desarrollaron redes neuronales artificiales para la identificación y control de una columna de destilación a escala de laboratorio utilizando LABVIEW. Esta plataforma proporciona un poderoso conjunto de herramientas para la identificación de procesos y el control de sistemas no lineales basados en redes neuronales artificiales.

Motlaghi et al. (2008, p.1540) diseñaron un sistema experto basado en un modelo de RNA de una columna de destilación de petróleo crudo para predecir los valores desconocidos del flujo de producto requerido y la temperatura en las características requeridas de la alimentación de entrada, siendo capaz también de optimizar el proceso de destilación minimizando el error de salida y maximizando la tasa de producción de petróleo.

Por otra parte, Vafae et al. (2009, p.997) demostraron que la destilación de vapor mejora los procesos de recuperación de aceites con una inyección de vapor hasta en un 50%, y gracias a su inmenso efecto en la recuperación de petróleo, se han realizado varios intentos para simular este proceso de manera experimental y teórica.

Dado que los datos detallados del petróleo crudo rara vez están disponibles, se debe presentar un modelo para predecir la tasa de destilado con parámetros mínimos de entrada. Para este propósito, Vafaei et al (2009, p.997) utilizaron una red de Perceptrón Multicapa (MLP) como un método nuevo y efectivo para simular las recuperaciones de 16 conjuntos de datos de petróleo crudo obtenidos de la literatura, empleando los valores de API, viscosidad, factor de caracterización y factor de destilación de vapor como parámetros de entrada de la red, mientras que el rendimiento del destilado es el resultado del modelo.

Ochoa et al. (2013, p.178) propusieron una nueva metodología para optimizar los sistemas de destilación de petróleo crudo integrados con calor, que considera un modelo de redes neuronales artificiales (RNA) para representar la columna de destilación. Los modelos de la columna de destilación y la red de intercambiador de calor asociada existente se incorporan en un marco de

optimización para determinar sistemáticamente las condiciones de funcionamiento que mejoran la economía general del proceso.

Es innegable que se necesitan técnicas cada vez más simples y rápidas para satisfacer la creciente necesidad de detección de gas en la industria del gas natural no convencional. La técnica de Terahercios (THz), es un método espectral desarrollado recientemente para la identificación y determinación de los principales componentes del gas destilado del *esquistos bituminoso*<sup>1</sup>, incluido el metano (CH<sub>4</sub>), el etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), el monóxido de carbono (CO) y el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>). Leng et al. (2015, p.84) utilizaron una red neuronal artificial de propagación inversa para caracterizar cuantitativamente el contenido de los componentes y la presión total del sistema. Sus resultados indicaron que la técnica THz combinada con el método matemático es una herramienta efectiva para la detección de gas y puede popularizarse industrialmente.

Osuolale y Zhang (2016, p.562) presentaron una estrategia basada en redes neuronales para el modelado y la optimización de la eficiencia energética en columnas de destilación que incorporan la segunda ley de la termodinámica. El tiempo de cálculo en la evaluación de este modelo de red neuronal es muy corto, haciéndolo ideal para la optimización en tiempo real. Utilizaron ASPEN HYSYS para la simulación de los sistemas de destilación, mientras que los modelos de red neuronal para la eficiencia de la exergía y composiciones de los productos se desarrollaron a partir de datos de operación del proceso simulado. Las RNA se aplicaron a sistemas binarios de separación de metanol-agua, benceno-tolueno y en columnas de separación de múltiples componentes con efectividad.

Se puede evidenciar a partir de la recopilación bibliográfica presentada que los trabajos realizados y publicados cada año respecto a investigaciones y desarrollo de redes neuronales artificiales son muy numerosos, que van desde nuevas aplicaciones principalmente en el área de control, hasta empresas que lanzan al mercado nuevos productos, tanto hardware como software (sobre todo para simulación). No obstante, los procesos alternativos de destilación extractiva y separación de azeótropos no han sido explotados dentro del área de RNA, lo cual justifica el desarrollo del presente trabajo de investigación.

En el Ecuador, el desarrollo de redes neuronales artificiales se encuentra todavía en una fase inexperta de experimentación y consolidación. Sin embargo, en los últimos años ha existido un creciente interés por parte de la comunidad académica de pre y post grado en el diseño de RNA

---

<sup>1</sup> Depósito de rocas con abundante material orgánico o hidrocarburos en forma sólida, del que se extrae gas, petróleo y otras sustancias químicas mediante procesos como pirólisis, hidrogenación, disolución térmica o destilación.

en diversos campos de estudio, no sólo en el computacional y de sistemas, sino también en el empresarial, biológico y de ingeniería.

## **2.2 Bases Teóricas.**

### **2.2.1 Destilación**

En toda la industria química, la demanda de productos más puros, junto con la búsqueda incesante de una mayor eficiencia, ha requerido de una investigación continua en las técnicas de destilación. La destilación es uno de los procesos de separación más antiguos e importantes utilizados en las industrias química y petroquímica, y es el más específico cuando se aborda el problema del consumo de energía. La base de este proceso es la diferencia en la volatilidad de los componentes que deben separarse (Tavan y Hosseini, 2013, p.407).

El diseño de los procesos de destilación en la práctica industrial todavía se realiza mediante simulaciones heurísticas que requieren una especificación detallada de los parámetros de diseño. El aumento de los precios de la energía y los requisitos más estrictos para la prevención de la contaminación imponen la necesidad de actualizar continuamente las condiciones de procesamiento, las opciones de diseño y las políticas de control de las columnas (Tavan y Hosseini, 2013, p.407).

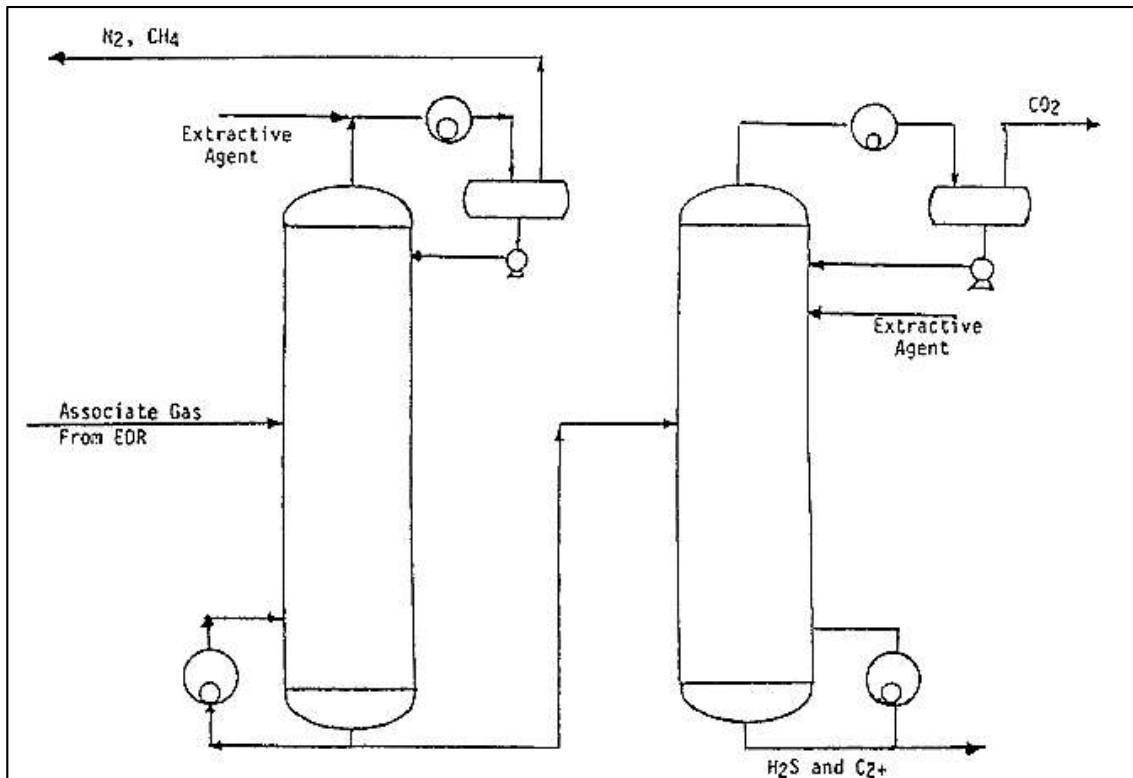
Para abordar el requerimiento de energía, varias técnicas de destilación tales como destilación simple, destilación parcial, destilación instantánea (destilación de equilibrio), rectificación, destilación azeotrópica, destilación por extracción con solvente y procesos de separación reactiva (RSP) han sido estudiados (Tavan y Hosseini, 2013, p.407).

#### **2.2.1.1 Destilación extractiva**

La destilación extractiva es una técnica utilizada para separar mezclas binarias azeotrópicas, en la que se adiciona un agente de separación o solvente, cuya característica principal es que no presenta la formación de azeótropos con ninguno de los componentes de la mezcla a separar (Uyazán et al., 2006, p.46).

El solvente altera de manera conveniente las volatilidades relativas de los componentes de la mezcla, por tal razón debe tener baja volatilidad, para asegurar su permanencia en la fase líquida, además, para garantizar el contacto con la mezcla a lo largo de toda la columna debe tener un punto de ebullición superior al de los componentes a separar y se debe adicionar en una de las etapas cercanas al condensador por encima de la etapa de mezcla azeotrópica (Uyazán et al., 2006, p.46).





**Figura 2-2.** Diagrama de flujo simplificado de un proceso de destilación extractiva

Fuente: (Hong y Kobayashi, 1986, p.738)

### 2.2.2 Azeótropo

Muchas mezclas de componentes químicos forman azeótropos. Una mezcla azeotrópica tiene fases de vapor y líquido de composiciones idénticas. La aparición de este fenómeno azeotrópico indica que no se puede utilizar la destilación simple para lograr una separación completa, ya que este proceso depende de las diferencias en las composiciones entre las fases líquida y de vapor (Luyben y Chien, 2011, p.XV).

Los azeótropos se producen debido al equilibrio de fase no ideal resultante de la interacción molecular (ya sea repulsión o atracción) de componentes químicos diferentes. Si los componentes contienen moléculas y estructuras elementales similares, la interacción molecular es muy leve y no se producen azeótropos (Luyben y Chien, 2011, p.XV).

La industria del petróleo rara vez encuentra azeótropos porque los componentes de hidrocarburos tienen estructuras moleculares similares. La industria química, por otro lado, con frecuencia trata con componentes de diferentes tipos, que a menudo producen azeótropos. Ejemplos comunes son la producción de acetato de metilo, tetrahidrofurano, terc-amil metil éter, isopropanol, acetato de vinilo y muchos otros (Luyben y Chien, 2011, p.XV).

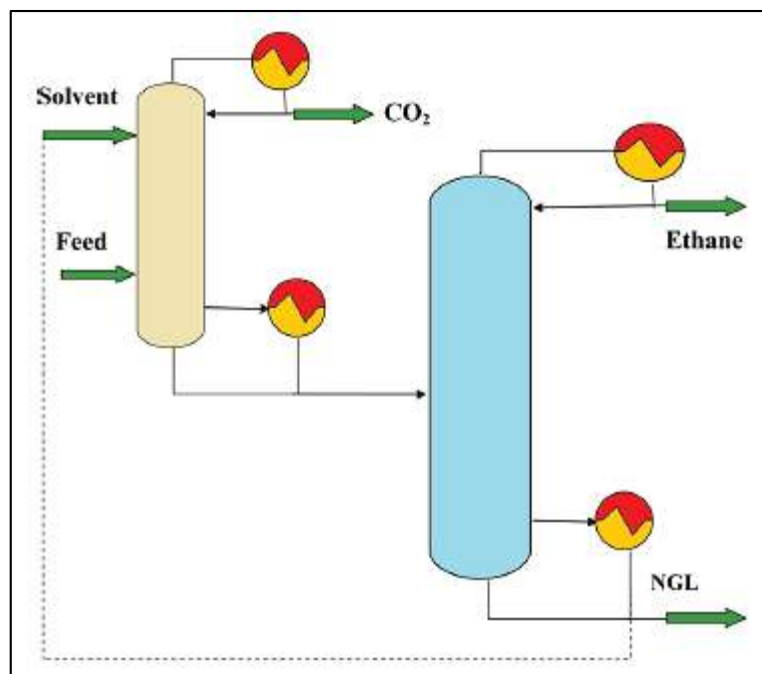
Los procesos emergentes de biocombustibles suelen tener productos de fermentación que forman azeótropos con el agua, que está presente en gran exceso en el fermentador. El ejemplo más importante es el etanol, que forma un azeótropo binario homogéneo de ebullición mínima con agua. El butanol es otro ejemplo de biocombustible que forma un azeótropo con (Luyben y Chien, 2011, p.XV).

Si las moléculas exhiben fuerzas repulsivas, el azeótropo tendrá una ebullición mínima y puede ser homogéneo o heterogéneo. Si las moléculas exhiben fuerzas atractivas, el azeótropo será de ebullición máxima. Dado que hay muchos tipos de azeótropos con una variedad de propiedades físicas, habrá muchas formas de lograr la separación (Luyben y Chien, 2011, p.XV).

#### 2.2.2.1 *Métodos de separación de azeótropos*

Los azeótropos binarios homogéneos se pueden separar usando varios métodos.

1. **Destilación por oscilación de presión:** dos columnas que operan a dos presiones diferentes pueden lograr una separación si las variaciones en la presión cambian significativamente la composición azeotrópica (Luyben y Chien, 2011, p.XV).
2. **Destilación azeotrópica:** un componente de arrastre ligero modifica las volatilidades relativas, o rompe el azeótropo, con al menos dos componentes recogidos como destilado. Con frecuencia, estos componentes son inmiscibles en la fase líquida y un decantador los separa. Una fase, comúnmente orgánica, refluye a la primera columna, mientras que la segunda fase, comúnmente acuosa más el solvente, alimenta otra columna para regenerar el solvente, que se recicla a la primera columna (Luyben y Chien, 2011, p.XV).
3. **Destilación extractiva:** un tercer componente, generalmente pesado, ingresa cerca de la parte superior de la primera columna de extracción para romper el azeótropo y, preferentemente, lleva uno de los componentes de alimentación livianos al fondo de la columna. El otro componente ligero forma una corriente de destilado de alta pureza. La corriente de fondo alimenta una segunda columna para producir un producto de fondo solvente y un producto destilado ligero de alta pureza. El solvente regenerado se recicla nuevamente a la primera columna (Luyben y Chien, 2011, p.XV).



**Figura 3-2.** Configuración típica del sistema de extracción para separar azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano

Fuente: (Tavan y Tavan, 2014, p.25)

### 2.2.3 Red neuronal artificial (RNA)

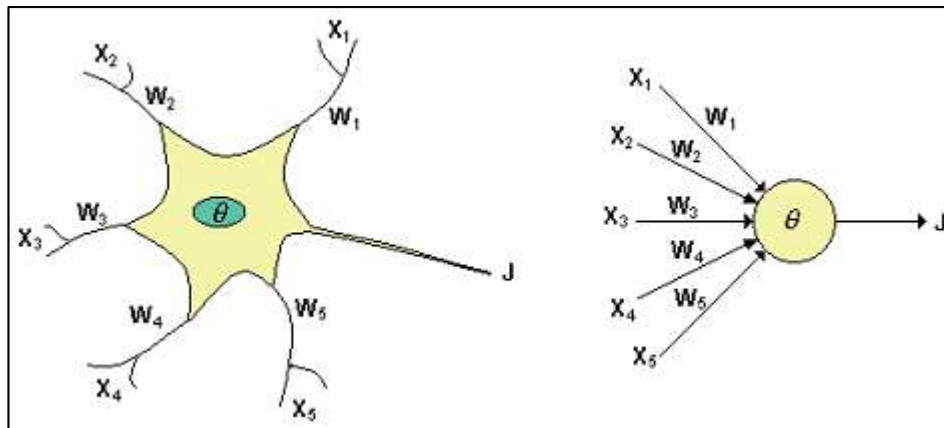
Las técnicas de Inteligencia Artificial denominadas Redes Neuronales Artificiales (RNA) están adquiriendo cada día mayor relevancia por su desempeño eficiente y la diversidad de sus aplicaciones en los sectores de la industria y servicios (Sánchez y Maguiña, 2003, p.17).

Entre las aplicaciones se incluyen: minería de datos, reconocimiento de patrones, predicción de series temporales, simulación, control, procesamiento de señales, etc., también puede aplicarse para resolver problemas de ingeniería cuyas soluciones analíticas no se pueden obtener o su costo computacional es demasiado alto (Sánchez y Maguiña, 2003, p.17).

Las redes neuronales artificiales están formadas por capas altamente interconectadas de nodos simples "neuronales". Las neuronas actúan como elementos de procesamiento no lineales dentro de la red (Willis et al., 1991, p.256).

Una propiedad atractiva de las redes neuronales artificiales es que, dada la topología de red apropiada, son capaces de caracterizar relaciones funcionales no lineales. Además, la estructura del modelo de proceso basado en la red neuronal resultante puede considerarse genérica, en el sentido de que se requiere poco conocimiento previo del proceso para su determinación. Por lo tanto, proporciona una técnica de modelado de procesos rentable y confiable (Willis et al., 1991, p.256).

Las redes neuronales artificiales tratan de imitar la funcionabilidad de un cerebro biológico, aunque evidentemente el sistema artificial no alcanza la complejidad del mismo (Andrade, 2013, p.4).



**Figura 4-2.** Representación de una neurona biológica y una artificial

Fuente: (Andrade, 2013, p.4)

#### 2.2.3.1 Características de una RNA

Una RNA está compuesta por un conjunto de neuronas artificiales, las cuales son dispositivos simples de cálculo que a partir de un vector de entrada, ya sea del mundo exterior o bien a partir de estímulos recibidos de otras neuronas generan una respuesta única (Andrade, 2013, p.15).

La arquitectura de la red neuronal es la interconexión entre las distintas neuronas. Estas se agrupan en capas, cada una de ellas con un conjunto de neuronas de número variable y comportamiento similar. Cada capa está conectada a la inmediata posterior total o parcialmente, excepto la última capa que constituye la salida de la red (López, Velo y Maseda, 2007, p.1085).

Se puede distinguir tres tipos de capas o neuronas, las cuales son:

**Neuronas de entrada:** el número y tipo de neuronas de esta capa depende de los datos del problema que se esté abordando. Esta capa recibe los datos o señales procedentes del entorno u otras partes como sensores, recibe los vectores de entrada y los redistribuye a las neuronas de la capa intermedia sin realizar ningún tipo de procesamiento sobre los datos, es sólo una receptora de información (López, Velo y Maseda, 2007, p.1085).

**Neuronas ocultas:** reciben estímulos y emiten salidas dentro del sistema, es decir, no tienen ningún contacto con el exterior; son las encargadas de realizar el procesamiento de la información (Flórez y Fernández, 2008; citado en Andrade, 2013, p.15).

Pueden ser más de una dependiendo del problema, estas capas no tienen conexión directa con el entorno y mediante el tratamiento adecuado de estas capas se consigue la extracción de características, adaptabilidad, generalización, etc., es decir, esta capa proporciona a la red grados de libertad adicionales que le permitirán encontrar representaciones internas de determinados rasgos del entorno. Transforma los vectores de entrada en vectores intermedios, que caracterizan los patrones de entrenamiento (López, Velo y Maseda, 2007, pp.1085-1086).

**Neuronas de salida:** emiten una salida fuera del sistema una vez que ha finalizado el tratamiento de la información (López, Velo y Maseda, 2007, p.1086).

El número de neuronas de esta capa depende de las salidas de la red, es decir, sus neuronas proporcionan la respuesta de la red neuronal a partir de un estímulo de la capa intermedia (López, Velo y Maseda, 2007, p.1086).

Las redes neuronales artificiales se caracterizan de acuerdo a 4 aspectos principales: topología, mecanismo de aprendizaje, tipo de asociación realizada entre la información de entrada y salida, y la forma de representación de esta información (Andrade, 2013, p.21).

#### 2.2.3.2 *Entrenamiento, aprendizaje y ejecución*

Las redes neuronales artificiales son capaces de realizar un cálculo a partir de un conjunto de patrones de entrenamiento o ejemplos, siendo esta capacidad de aprendizaje una de sus principales características, que permite que la red modifique su propia estructura, es decir, que cambie sus pesos, adaptándolos hasta conseguir la respuesta deseada (López, Velo y Maseda, 2007, p.1086).

El **entrenamiento** es el procedimiento mediante el cual una red aprende, y el **aprendizaje** es el resultado final de este proceso. El aprendizaje se realiza a partir de todo el conjunto más que por la aportación individual de cada elemento (López, Velo y Maseda, 2007, p.1087).

Para que la red neuronal resulte operativa es necesario entrenarla, es decir, modificar los pesos, que inicialmente son aleatorios, siguiendo una cierta regla de aprendizaje, partiendo normalmente de la optimización de la función error, que mide la eficacia de la operación de la red (López, Velo y Maseda, 2007, p.1087).

El proceso de entrenamiento es normalmente iterativo, actualizándose los pesos una y otra vez hasta que se alcanza el objetivo deseado. Una vez que la red ha sido entrenada se pasa al modo de **ejecución** o recuerdo, que consiste en mantener fijos los pesos de la red y procesar datos, es decir, la red es capaz de responder ante entradas no vistas con anterioridad (López, Velo y Maseda, 2007, p.1087).

Según Martín del Brío y Sanz Molina (2001; citado en López, Velo y Maseda, 2007, p.1087) se pueden distinguir los siguientes tipos de aprendizaje:

- **Aprendizaje supervisado:** la RNA aprende partiendo de ejemplos de entrenamiento, es decir, es entrenada a partir de la entrada y la salida, aprendiendo la relación entre ellos sin necesidad de disponer de una forma funcional de partida, ajustando los pesos a partir de la información del error que se comete en cada paso.
- **Aprendizaje no supervisado:** el conjunto de entrenamiento está constituido sólo por la entrada, sin la salida esperada para estos elementos. El aprendizaje se realiza través de la asociación de la información recibida con la almacenada y como consecuencia reconociendo regularidades en el conjunto de datos, es decir, la red es capaz de extraer las características, estableciendo una clasificación o categorización.
- **Aprendizaje híbrido:** Es una mezcla de los anteriores tomando la regla de aprendizaje supervisado para casos maestros, conocidos y generales. Normalmente el aprendizaje supervisado y no supervisado tienen lugar en capas distintas.
- **Aprendizaje reforzado:** está a medio camino entre el supervisado y no supervisado, la información del error es sólo global (bien, mal) y no se suministra la salida deseada.

Es importante distinguir entre los niveles de error alcanzados al final de las distintas fases:

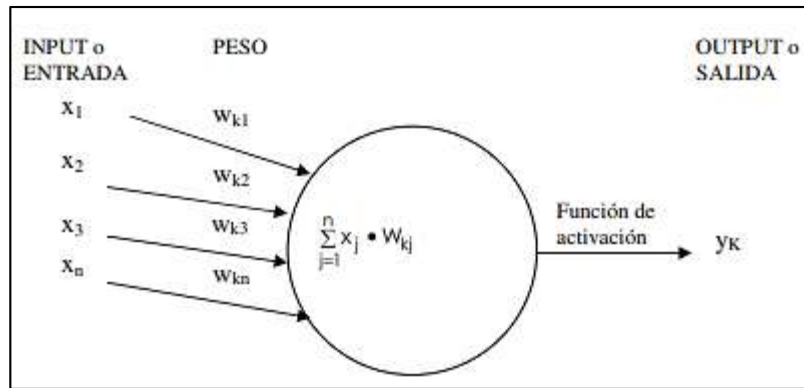
- **Fase de entrenamiento:** es el error de los patrones de entrenamiento.
- **Fase de ejecución:** es el error cometido por los patrones no vistos con anterioridad, lo cual mide su capacidad de generalización.

Resulta mejor una buena generalización que un error pequeño en la fase de entrenamiento pues esto indica que la red no está sobreajustada (Haykin, 2009; citado en López, Velo y Maseda, 2007, p.1087).

### 2.2.3.3 Selección de un modelo de RNA

Quintana (2015, p.20) explica que “aunque hay un debate permanente sobre las estrategias de selección de modelos, es evidente que la aplicación exitosa de redes neuronales artificiales en problemas de modelado de ingeniería se ve muy afectada por cuatro factores principales.”

- Tipo de red (recurrentes, backpropagation, feedforward, wavelets, de base radial, etc.).
- Estructura de la red (número de capas ocultas, número de neuronas por capa oculta).
- Funciones de activación o función de transferencia.
- Algoritmos de entrenamiento.



**Figura 5-2.** Modelo de neurona artificial

Fuente: (López, Velo y Maseda, 2007, p.1085)

#### 2.2.3.4 Ventajas de las RNA

Tanto Varela y Campbells (2011, pp.22-24) como Andrade (2013, p.45), Rivas y Mazón (2018, p.16) mencionan que las principales ventajas de las RNA son:

**Aprendizaje adaptativo:** realizan su proceso de aprendizaje a partir de una base de datos, permitiéndoles llevar a cabo ciertas tareas y diferenciar patrones mediante ejemplos, experiencia inicial o entrenamientos.

**Auto organización:** crea su propia representación de la información que reciben durante el aprendizaje u operación.

**Operación en tiempo real:** la respuesta de una red puede darse en tiempo real, debido a que su estructura es en paralelo. Cuando se implementa en dispositivos electrónicos como en una computadora las respuestas pueden ser inmediatas.

**Inclusión flexible en la tecnología vigente:** se pueden obtener chips especializados para redes neuronales que mejoran su capacidad en ciertas tareas.

**Se autoajustan a los elementos procesales:** es decir que son dinámicas, pues tiene la capacidad de estar constantemente cambiando para adaptarse a las nuevas condiciones.

#### **Tolerancia a fallos:**

- a) Las RNA son flexibles, ya que pueden aprender a reconocer y manejar adecuadamente patrones con ruido, distorsionados o incompletos. Esta es una tolerancia a fallos respecto a los datos.

- b) Las RNA son robustas, ya que pueden seguir realizando su función (con cierta degradación) aunque se destruya parte de la red. Esto es debido a la redundancia de la información almacenada.

Finalmente, la función del diseñador es únicamente la obtención de la arquitectura apropiada. Siendo necesario que desarrolle un buen algoritmo de aprendizaje que le proporcione a la red la capacidad de discriminar, mediante un entrenamiento con patrones (Varela y Campbells, 2011, p.24).

## 2.2.4 DWSIM

DWSIM es un simulador de procesos químicos de código abierto, compatible con CAPE-OPEN para sistemas Windows, Linux y macOS. Escrito en VB.NET y C#, DWSIM presenta un conjunto integral de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas de reacción, herramientas de caracterización del petróleo y una interfaz gráfica con todas las funciones. Este simulador permite tanto a los estudiantes de ingeniería química como a los ingenieros químicos comprender mejor el comportamiento de sistemas o procesos químicos mediante el uso de rigurosos modelos termodinámicos y de operaciones unitarias sin costo alguno (Medeiros, 2020).

### 2.2.4.1 Características

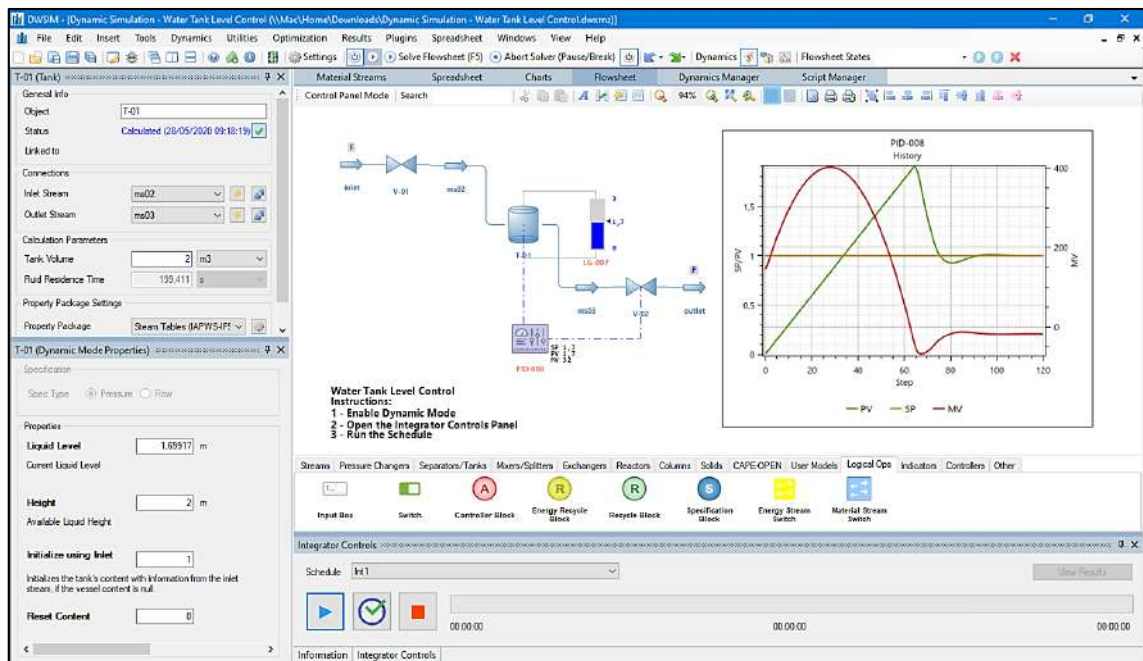
**Tabla 1-2.** Características generales y de funcionamiento de DWSIM

<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Se ejecuta en Windows XP de 32/64 bits, Linux de 64 bits, macOS y Raspberry Pi 2 o más reciente.</li> <li>▪ Interfaz de usuario (IU) de aspecto y sensación nativa en todas las plataformas compatibles.</li> <li>▪ Motor de cálculo paralelo de CPU y GPU multinúcleo.</li> <li>▪ Cálculos VLE, VLLE y SLE utilizando la ecuación de estado, el coeficiente de actividad y modelos Chao-Seader.</li> <li>▪ Admite operaciones de unidad CAPE-OPEN y paquetes de propiedades Thermo 1.0/1.1.</li> <li>▪ Proporciona paquetes de Equilibrio termodinámico y el calculador de propiedades.</li> <li>▪ Incluye la operación Python Script CAPE-OPEN Unit.</li> <li>▪ Admite la base de datos de componentes y el modelo de columna de ChemSep.</li> <li>▪ Interfaz de diagrama de flujo (PFD).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Modelos rigurosos de columna de destilación/absorción.</li> <li>▪ Soporte para reacciones químicas y reactores.</li> <li>▪ Caracterización de fracciones de petróleo utilizando propiedades de volumen y/o curvas de destilación ASTM/TBP, y creación de componentes hipotéticos utilizando grupos UNIFAC.</li> <li>▪ Utilidad de análisis de sensibilidad y optimización multivariante.</li> <li>▪ Función extensible a través de scripts y complementos de Python.</li> <li>▪ Utilidad binaria de regresión de datos VLE/LLE/SLE.</li> <li>▪ Interfaz de Excel para cálculos termodinámicos (solo Windows).</li> <li>▪ Biblioteca independiente de termodinámica.</li> <li>▪ Herramienta para la creación o definición de componentes por el usuario.</li> </ul>
---	---

Fuente: (Medeiros, 2008)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020





**Figura 6-2.** Interfaz de DWSIM para la simulación de procesos.

Fuente: (Medeiros, 2020)

DWSIM es capaz de simular procesos en equilibrio, en estado estacionario y dinámico, con los siguientes modelos termodinámicos y operaciones unitarias:

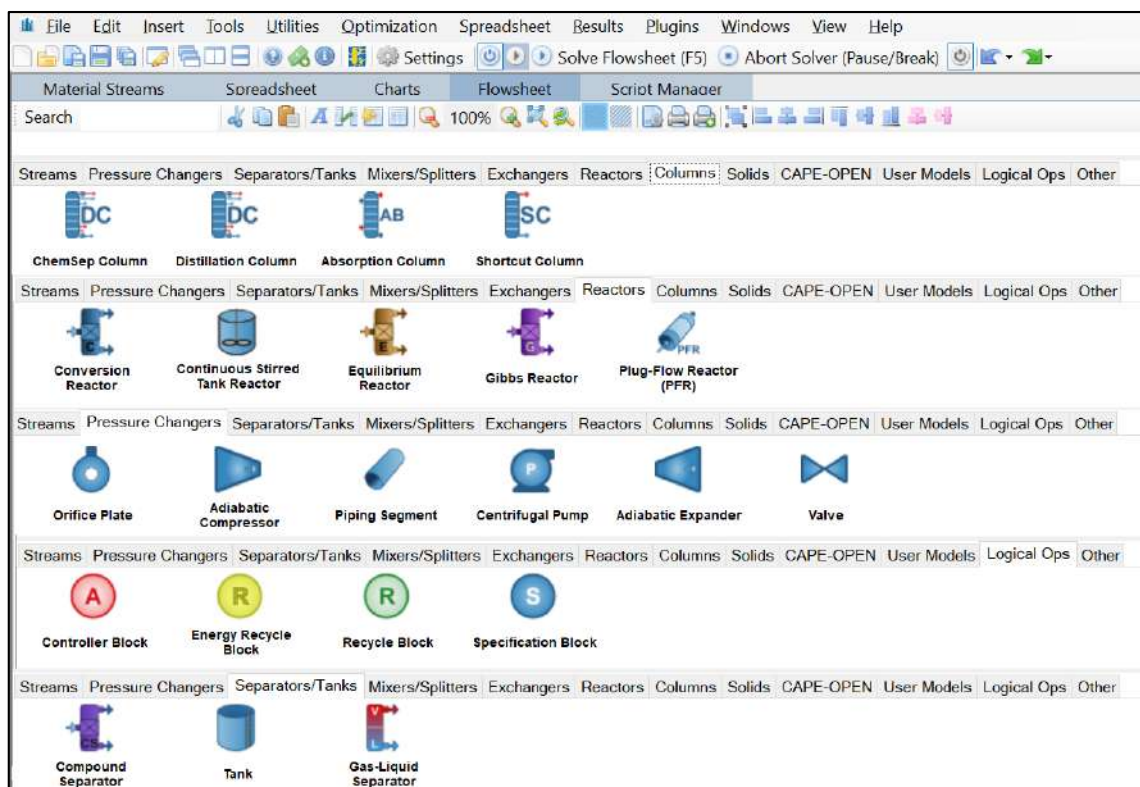
**Tabla 2-2.** Herramientas disponibles en DWSIM

CARACTERÍSTICA	OBSERVACIÓN
<b>Modelos termodinámicos</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ CoolProp</li> <li>▪ Peng-Robinson</li> <li>▪ Soave-Redlich-Kwong</li> <li>▪ Lee-Kesler</li> <li>▪ Lee-Kesler-Plöcker</li> <li>▪ UNIFAC</li> <li>▪ UNIFAC modificado (Dortmund)</li> <li>▪ UNIQUAC</li> <li>▪ NRTL</li> <li>▪ UNIQUAC extendido</li> <li>▪ Chao-Seader</li> <li>▪ Grayson-Streed</li> <li>▪ Raoult's Law</li> <li>▪ IAPWS-IF97 (tablas de vapor)</li> <li>▪ IAPWS-08 (agua de mar)</li> <li>▪ Black-Oil (petróleo)</li> <li>▪ Sour Water (agua agria)</li> </ul>
<b>Modelado Dinámico y Simulación</b>	Controlador PID, programador de eventos, variables monitoreadas, integrador configurable, matrices de causa y efecto, modo de panel

	de control (tiempo real), indicadores, medidores analógicos y digitales, campos de entrada e interruptores;
<b>Operaciones unitarias (estado estable)</b>	Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores, separador de componentes, placa de orificio, columnas de destilación/absorción, separador de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo, Python Script y Diagrama de Flujo de operaciones unitarias.
<b>Operaciones unitarias (dinámico)</b>	Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, hoja de cálculo y Python Script.
<b>Utilidades</b>	Fase envolvente, cálculos de hidrato, propiedades de componentes puros, punto crítico, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de vasos, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.
<b>Herramientas</b>	Controlador PID, regresión de datos binarios, creador de compuestos, Bulk C7 + y curvas de destilación, caracterización del petróleo y administrador de reacciones.
<b>Análisis y optimización</b>	Utilidad de análisis de sensibilidad, optimizador multivariante con restricciones limitadas.
<b>Extras</b>	Sistema para la secuencia de comandos e interfaz de complementos.

Fuente: (Medeiros, 2020)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020



**Figura 7-2.** Diferentes operaciones unitarias disponibles en DWSIM

Fuente: (FOSSEE, 2020)

**Tabla 3-2.** Detalles adicionales de DWSIM

DETALLE	OBSERVACIÓN
Idiomas	Inglés, portugués brasileño
Público objetivo	Ciencia, Investigación, Educación, Ingeniería
Interfaz de usuario	.NET/Mono, OpenGL, Cocoa (MacOS X), GTK +
Lenguaje de programación	C#, Python, Visual Basic .NET
Entorno de base de datos	XML, Flat-file
Registro	2008-07-09

Fuente: (Medeiros, 2008)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

### 2.2.5 ChemSep

ChemSep es un programa para simular columnas de destilación, absorción y extracción, así como otros procesos de separación similares, con un modelo de columna de vanguardia, sin equilibrio (basado en la velocidad) que incluye modelos de rendimiento de bandejas y empaques validados disponibles comercialmente (Kooijman y Taylor, 2020).

Los modelos de columna ChemSep se pueden insertar en cualquier paquete de hoja de flujo compatible con CAPE-OPEN (como COCO y DWSIM), por lo tanto, se puede cambiar fácilmente entre resolver un problema de separación específico y simular una planta química completa (Kooijman y Taylor, 2020).

## 2.3 Marco Legal.

### 2.3.1 Software Libre en Ecuador

**Tabla 4-2.** Marco legal del software libre en Ecuador

NORMATIVA	OBSERVACIÓN
<p><b>Decreto No. 1014</b> (abril del 2008)</p>	<p>Se basa en los siguientes ejes centrales:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li><b>Cumplimiento de recomendaciones Internacionales:</b> “La Carta Iberoamericana de Gobierno Electrónico recomienda el uso de estándares abiertos y software libre como herramientas informáticas”.</li> <li><b>Con los objetivos fundamentales de:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Alcanzar la soberanía y autonomía tecnológica.</li> <li>Alcanzar un ahorro significativo de recursos públicos.</li> </ul> </li> </ol> <p>Se decretó establecer como política pública la utilización de software libre en los sistemas y equipamientos informáticos de las Entidades de la Administración Pública Central.</p>
<p><b>Código Orgánico de Economía Social de los Conocimientos, Creatividad e Innovación</b> (2016)</p>	<p><b>Apartado Segundo</b> <b>De las tecnologías libres y formatos abiertos.</b> <b>Artículo 142.-Tecnologías libres:</b> Se entiende por tecnologías libres al software de código abierto, los estándares abiertos, los contenidos libres y el hardware libre... Especialmente otorga a los usuarios, entre otras, las siguientes libertades esenciales:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>La libertad de ejecutar el software para cualquier propósito;</li> <li>La libertad de estudiar cómo funciona el software, y modificarlo para adaptarlo a cualquier necesidad. El acceso al código fuente es una condición imprescindible para ello;</li> <li>La libertad de redistribuir copias; y,</li> <li>La libertad de distribuir copias de sus versiones modificadas a terceros.</li> </ul> <p><b>Artículo 151.- Libre elección de software:</b> Los usuarios tienen derecho a la libre elección del software en dispositivos que admitan más de un sistema operativo.</p>
<p><b>Constitución de la República</b> (2008)</p>	<p>En la Constitución se garantiza la soberanía nacional, y se definen los sectores estratégicos entre los cuales están las tecnologías como hardware y software. Además se garantiza el acceso a las tecnologías, la capacitación, su desarrollo y la integración regional.</p>
<p><b>Plan Nacional de Seguridad Integral</b></p>	<p>En el capítulo 4 “<b>La Seguridad Integral desde el Buen Vivir</b>”, se aclara y extiende el concepto de Soberanía Tecnológica y Ciencia en distintos ámbitos.</p>
<p><b>Plan Nacional del Buen Vivir (PNBV)</b></p>	<p>Como parte de la <b>Planificación Nacional</b>, el PNBV contempla las “Tecnologías, innovación y conocimiento” como parte de sus estrategias, y además plantea 12 objetivos con sus políticas que sirven de guía.</p> <p>El <b>Objetivo 10</b>, se refiere a “Impulsar la transformación de la matriz productiva” y su política 10.3 reviste especial importancia que puede aplicarse en la generación de una industria local de software libre, con ayuda de inversión pública.</p>

<p align="center"><b>Plan Nacional de Gobierno electrónico (PNGE)</b></p>	<p>Basado en la Carta Iberoamericana de Gobierno electrónico del año 2007, formula 12 principios que precautelan el derecho de los ciudadanos a relacionarse con el Estado electrónicamente.</p> <p><b>Principio 7 “Adecuación tecnológica”</b> recomienda el uso de estándares abiertos y de software libre en razón de la seguridad, sostenibilidad a largo plazo y la socialización del conocimiento.</p>
---	--

**Fuente:** (Silva, 2015; Asamblea Nacional del Ecuador, 2016, pp.31-32; Ministerio de Telecomunicaciones y de la Sociedad de la Información, 2020)

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020

### **2.3.2 Licencia del simulador DWSIM**

De acuerdo a la página web oficial de DWSIM (2020) se detalla la información legal acerca del software en mención:

DWSIM es un simulador de procesos químicos multiplataforma, compatible con CAPE-OPEN para Windows, Linux, Android, macOS e iOS, el cual posee la *General Public License v3* del Sistema Operativo GNU.

La Licencia Pública General del GNU está destinada a garantizar la libertad para compartir y cambiar todas las versiones de un programa, asegurándose de que siga siendo un software libre para todos sus usuarios (GNU, 2007).

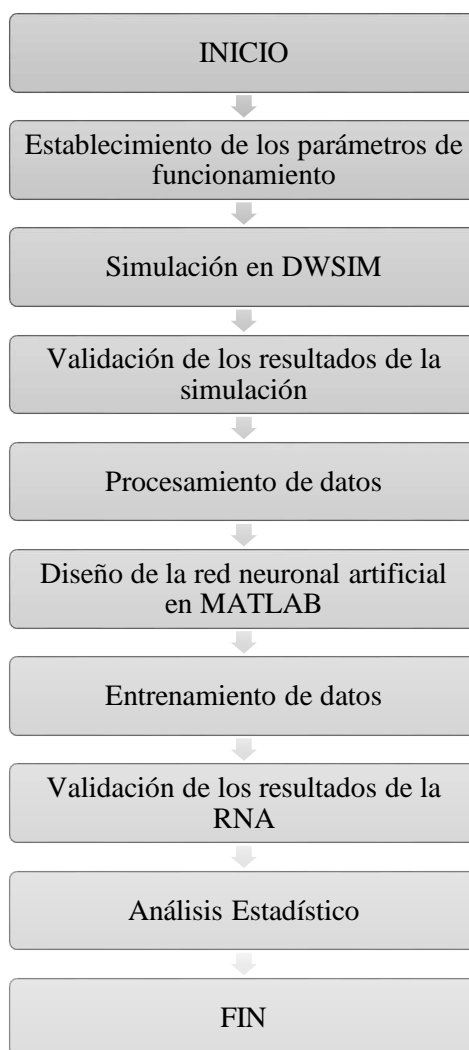
El potente motor de termodinámica de DWSIM también está disponible como una biblioteca de enlace dinámico (DLL) independiente que se puede vincular con aplicaciones propietarias (FOSSEE, 2020).

## CAPÍTULO III

### 3 METODOLOGÍA

#### 3.1 Etapas de la metodología.

Partiendo de la exhaustiva revisión bibliográfica realizada en el capítulo anterior, la metodología propuesta para el presente trabajo de titulación se divide en las siguientes etapas:



**Gráfico 1-3.** Metodología del trabajo de titulación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

Este trabajo de titulación como propuesta tecnológica, incluye la simulación de un proceso alternativo de destilación extractiva para separar azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano durante el tratamiento de gas natural, y posteriormente, el modelado de una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir las composiciones de los principales compuestos obtenidos durante el proceso, por lo tanto, la investigación posee un enfoque cuantitativo ya que emplea como punto de partida una base de datos numéricos provenientes de la simulación en DWSIM, de manera que pueda alimentar a la red para su entrenamiento y aprendizaje.

Adicionalmente, se lleva a cabo el análisis estadístico correspondiente para los resultados obtenidos como técnica de interpretación y validación, proporcionando una comparación entre los valores provenientes de la simulación y los predichos por la RNA, determinado a su vez su grado de error y confiabilidad.

Toda la información recopilada para la literatura y desarrollo del presente proyecto proviene de:

**Fuente Primaria:**

Conocimientos y valores experimentales obtenidos por el autor a partir de simulaciones en DWSIM y procesamiento de datos empleando Excel y MATLAB.

**Fuente Secundaria:**

- ✓ Artículos científicos relevantes, principalmente de grado Q1 y Q2 publicados en revistas científicas indexadas en Scopus.
- ✓ Libros digitales afines al tema.
- ✓ Bibliotecas digitales asociadas a la ESPOCH.
- ✓ Sitios web oficiales de los softwares utilizados en la investigación.

### **3.2 Establecimiento de parámetros de funcionamiento.**

La información base para llevar a cabo la simulación en DWSIM proviene del artículo científico titulado como: *Alternative extractive distillation system for CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope separation in enhanced oil recovery processes*, mismo que fue propuesto por Edris Ebrahimzadeh, Jacob Matagi, Farhad Fazlollahi y Larry Baxter (2016) del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Brigham Young, Provo, UT, EE.UU.

#### **3.2.1 Generalidades del proceso**

Una alimentación de composición típica que ingresa a la columna de recuperación de CO<sub>2</sub> es el producto libre de metano proveniente de un desmetanizador de gas natural, y contiene: CO<sub>2</sub>, etano

e hidrocarburos de mayor peso molecular (Tavan y Hosseini, 2013, pp.408-409; Luyben, 2013, pp.10780-10782.).

Para el caso base (secuencia de dos columnas) y la nueva alternativa (esquema de tres columnas), tenemos:

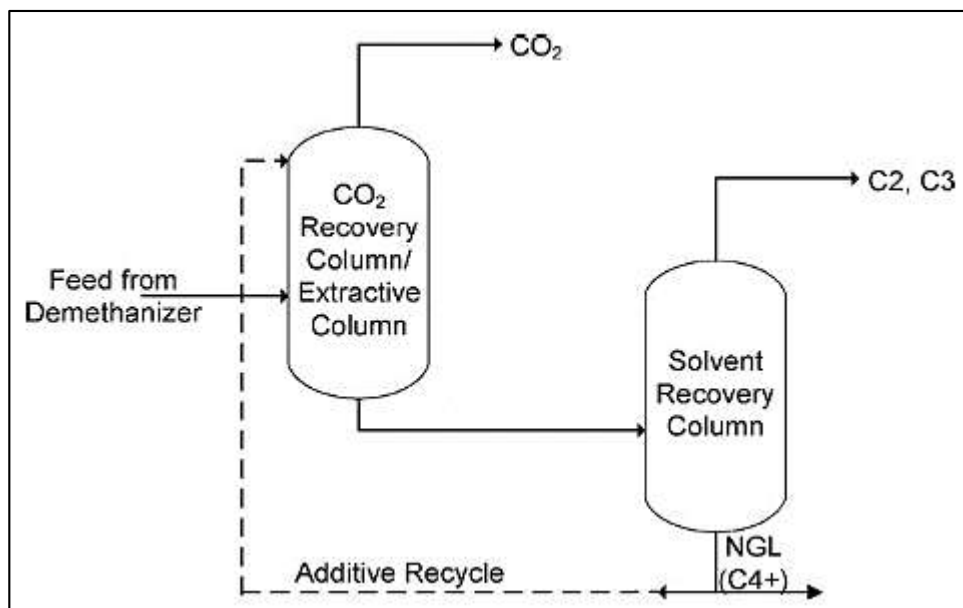
**Tabla 1-3.** Condiciones operativas iniciales para el sistema de estudio

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	24	atm
Temperatura	47	°C
Base de alimentación (flujo molar)	4	Kmol/s
Composición inicial de dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	32,25	%
Composición inicial de etano (C <sub>2</sub> )	46,23	%
Composición inicial de propano (C <sub>3</sub> )	7,53	%
Composición inicial de isobutano (i-C <sub>4</sub> )	7,53	%
Composición inicial de butano (n-C <sub>4</sub> )	3,23	%
Composición inicial de isopentano (i-C <sub>5</sub> )	2,15	%
Composición inicial de pentano (n-C <sub>5</sub> )	1,08	%

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.44)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Las purzas deseadas del producto son 95,6% en moles de CO<sub>2</sub> y 99,7% en moles de etano en las columnas de extracción y recuperación, respectivamente.



**Figura 1-3.** Esquema de la secuencia de destilación extractiva de CO<sub>2</sub>-etano

Fuente: (Lastari et al., 2012, p.156)

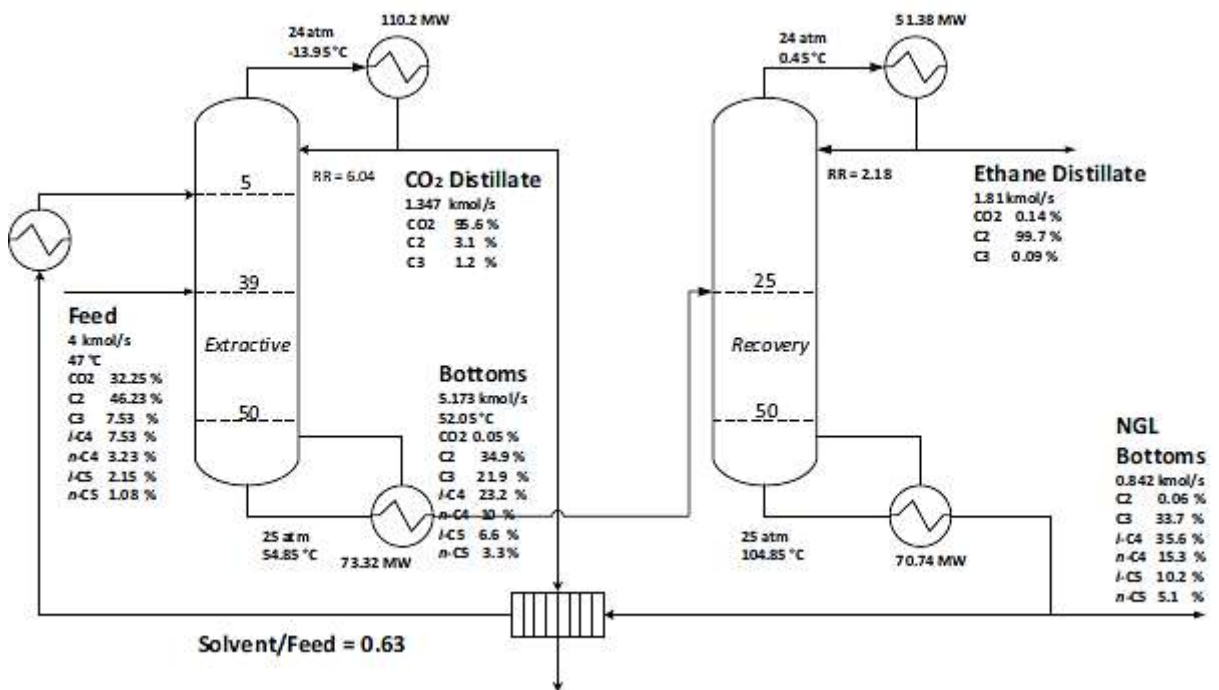


### 3.2.2 Secuencia directa convencional

En la Figura 2-3. se muestra una secuencia directa de columnas de destilación extractiva (esquema convencional) utilizada para separar CO<sub>2</sub> del etano, y se basa en la información proporcionada por Tavan y Hosseini (2013, p.411), y Luyben (2013, p.10781).

El CO<sub>2</sub> se acumula como el destilado principal de la primera columna de destilación (columna de extracción), mientras que el producto inferior, que consta de etano e hidrocarburos más pesados (C<sub>3</sub>+), alimenta la segunda columna de destilación (columna de recuperación de solvente). Se obtiene etano de alta pureza como producto destilado e hidrocarburos más pesados (LGN) como producto de fondo de la columna de recuperación de solvente.

Los LGN recuperado se divide en dos partes, una de las cuales se bombea nuevamente a la primera columna para romper el azeótropo, y la segunda parte se dirige a una secuencia de columna de destilación para su separación en flujos de productos C<sub>3</sub>, i-C<sub>4</sub>, n-C<sub>4</sub>, i-C<sub>5</sub> y n-C<sub>5</sub>.



**Figura 2-3.** Separación de CO<sub>2</sub>-etano con solvente C<sub>3</sub>+ en el sistema de destilación extractiva convencional

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.42)

### 3.2.3 *Proceso alternativo*

La Figura 3-3., muestra el diagrama de flujo del sistema alternativo de destilación propuesto, involucra tres columnas: la columna de recuperación o extracción de CO<sub>2</sub>, la columna de recuperación de solvente y la columna concentradora.

En este proceso, no todo el CO<sub>2</sub> sale de la parte superior de la columna de extracción. El producto inferior de la columna de extracción contiene 10% en moles de CO<sub>2</sub> junto con etano e hidrocarburos más pesados. La segunda columna recupera solvente de alta pureza. El destilado de la columna de recuperación alimenta una tercera columna o concentradora, que produce etano como producto y una corriente de reciclaje de mezcla azeotrópica.

Ebrahimzadeh et al. (2016, p.42) desarrollaron este sistema empleando el software ASPEN PLUS con la ecuación de estado de Peng-Robinson.

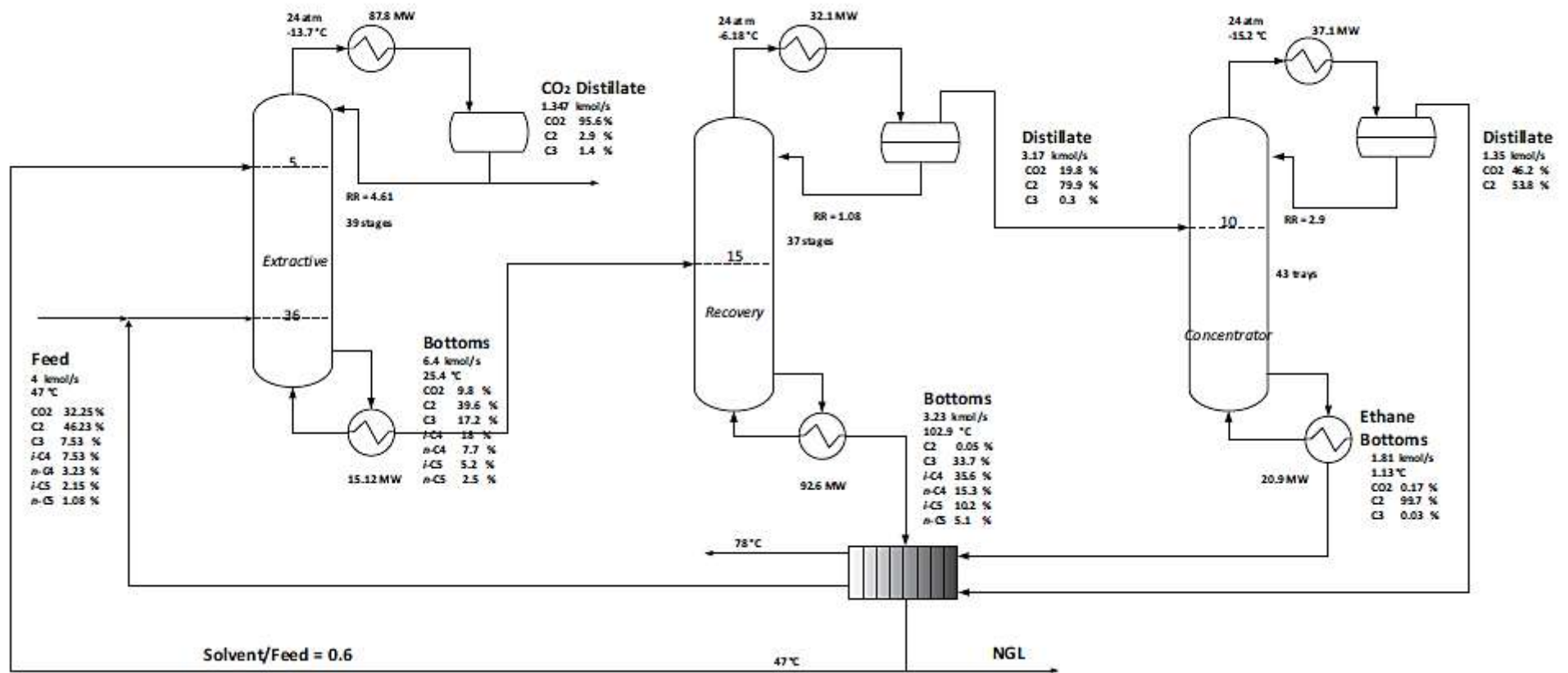


Figura 3-3. Diagrama de flujo para la separación propuesta de azeótropo de CO<sub>2</sub>-etano

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016)

### 3.2.3.1 Parámetros de funcionamiento de la columna de extracción

**Tabla 2-3.** Condiciones operativas de la columna de extracción

PARÁMETROS	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	24	atm
# de Platos de la columna	39	-
# Plato de entrada de la alimentación	36	-
# Plato de entrada del solvente	5	-
Relación solvente/alimentación	0,6	-
Relación de reflujo (RR)	4,61	-
Flujo del solvente	2,4	Kmol/s
Producción de CO <sub>2</sub> (destilado)	95,6	%
Producción de etano (destilado)	2,9	%
Producción de propano (destilado)	1,4	%
Flujo molar del destilado	1,347	Kmol/s
Flujo molar del fondo	6,4	Kmol/s
Carga térmica en el condensador	87,86	MW
Carga térmica en el reboiler o calentador	15,12	MW

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.44)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

La calefacción utilizada para todos los intercambiadores de calor en este estudio es vapor a 100 psi y se cree que proviene de una unidad de generación de vapor ya existente en la planta.

Por otro lado, el destilado de la columna extractiva en este diseño permanece líquido. Sin embargo, el destilado del diseño convencional enfría el LGN reciclado, que lo convierte en una corriente de vapor.

### 3.2.3.2 Parámetros de funcionamiento de la columna de recuperación de solvente

**Tabla 3-3.** Condiciones operativas de la columna de recuperación de solvente

PARÁMETROS	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	24	atm
# de Platos de la columna	37	-
# Plato de entrada de la alimentación	15	-
Relación de reflujo (RR)	1,08	-
Producción de CO <sub>2</sub> (destilado)	20	%
Producción de etano (destilado)	80	%
Producción de propano (destilado)	0,3	%
Producción de etano (fondo)	0,05	%
Flujo molar del destilado	3,17	Kmol/s
Flujo molar del fondo	3,23	Kmol/s
Carga térmica en el condensador	32,1	MW

<b>Carga térmica en el reboiler o calentador</b>	92,6	MW
--	------	----

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.44)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

A diferencia del diseño convencional que usa un condensador total, esta columna en el diseño propuesto tiene un condensador parcial.

Los hidrocarburos pesados salen con el producto del fondo y se dividen en el producto LGN (0,834 Kmol/s) y el solvente, que se recicla nuevamente a la columna extractiva.

La corriente de LGN pasará posteriormente a través de una secuencia de columnas de destilación tradicionales para las recuperaciones de propano, butano y pentano, que no están incluidas en ninguna de estas simulaciones.

### 3.2.3.3 Parámetros de funcionamiento de la columna concentradora

**Tabla 4-3.** Condiciones operativas de la columna concentradora

PARÁMETROS	CANTIDAD	UNIDAD
<b>Presión</b>	24	atm
<b># de Platos de la columna</b>	43	-
<b># Plato de entrada de la alimentación</b>	10	-
<b>Relación de reflujo (RR)</b>	2,9	-
<b>Producción de CO<sub>2</sub> (destilado)</b>	46,2	%
<b>Producción de etano (fondo)</b>	99,7	%
<b>Flujo molar del destilado</b>	1,35	Kmol/s
<b>Flujo molar del fondo</b>	1,81	Kmol/s
<b>Carga térmica en el condensador</b>	37,1	MW
<b>Carga térmica en el reboiler o calentador</b>	20,9	MW

Fuente: (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.44)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Esta columna también posee un condensador parcial. Como se observa en la Figura 3-3, el etano con alta pureza (99,7 % en moles) forma el producto del fondo después de la recuperación de calor, mientras que la mezcla de CO<sub>2</sub>-etano pasa por la parte superior con un flujo molar de 1,35 Kmol/s con el CO<sub>2</sub> concentrado hasta 46,2 % en moles. Después de la recuperación de calor, esto se recicla nuevamente a la columna de extracción como parte de la alimentación.

### 3.3 Simulación en DWSIM.

Para esta sección se emplean las condiciones de funcionamiento especificadas y que se resumen en las Tablas 2-3, 3-3 y 4-3 como base para la simulación del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano en el software de libre DWSIM.

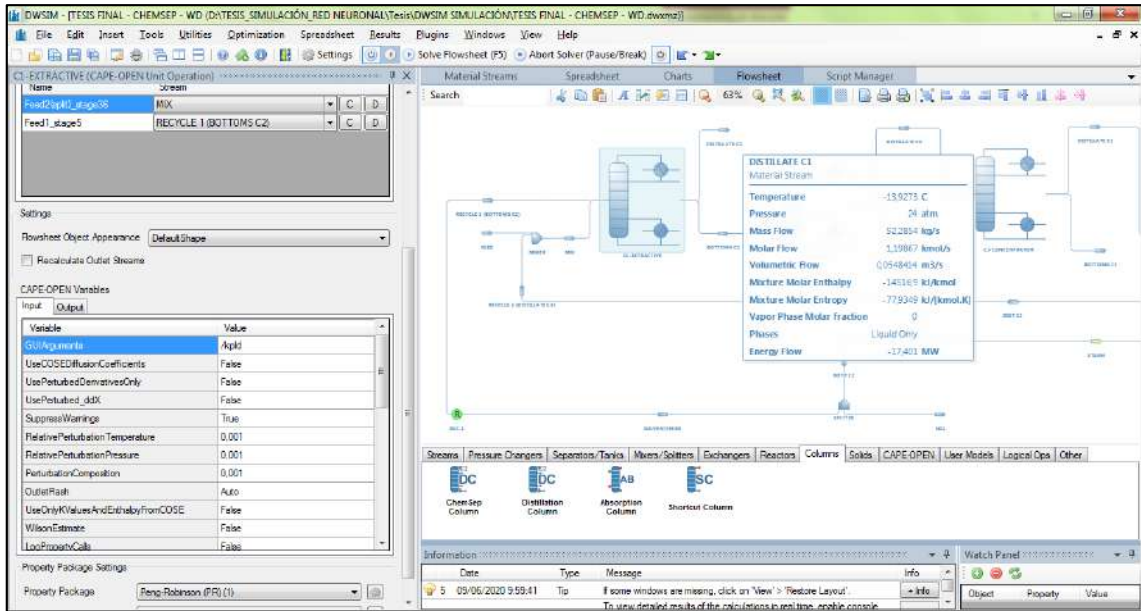


Figura 4-3. Flowsheet de la simulación en DWSIM

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Las torres de destilación empleadas corresponden al modelo de “ChemSep Column”. A su vez se ha empleado una combinación de paquetes termodinámicos durante la ejecución de la simulación para conseguir una mejor aproximación de los resultados.

Todas las líneas de flujo operan con el paquete de propiedades de Peng-Robinson (PR). Mientras que las torres de destilación se ejecutan por duplicado, primero empleando el modelo termodinámico DECHEMA / NRTL / T correlation, y luego con el modelo de EOS<sup>2</sup> / Predictive PR 78.

<sup>2</sup> Ecuaciones de estado.

**Tabla 5-3.** Parámetros operativos utilizados durante la simulación en DWSIM

PARÁMETROS	ENTRADA	COLUMNA 1	COLUMNA 2	COLUMNA 3	RECIRC. 1 (fondos 2)	RECIRC. 2 (destilad 3)
Presión (atm)	24	24	24	24	24	24
Temperatura (°C)	47	-	-	-	47	47
# de Platos	-	39	37	43	-	-
# Plato de alimentación	-	36	15	10	-	-
Relación de reflujo (RR)	-	4,61	1,08		-	-
% CO <sub>2</sub>	32,25	-	-	-	-	46,2
% C <sub>2</sub>	46,23	-	-	-	0,05	53,8
% C <sub>3</sub>	7,53	-	-	-	33,7	-
% i-C <sub>4</sub>	7,53	-	-	-	35,6	-
% n-C <sub>4</sub>	3,23	-	-	-	15,3	-
% i-C <sub>5</sub>	2,15	-	-	-	10,2	-
% n-C <sub>5</sub>	1,08	-	-	-	5,1	-
Flujo molar de la corriente (Kmol/s)	4	-	-	-	2,4	1,34
Flujo molar del destilado (Kmol/s)	-	-	-	1,35	-	-
Flujo molar del fondo (Kmol/s)	-	-	3,23	-	-	-
Carga térmica en el reboiler o calentador (MW)	-	15,12	-	20,9	-	-

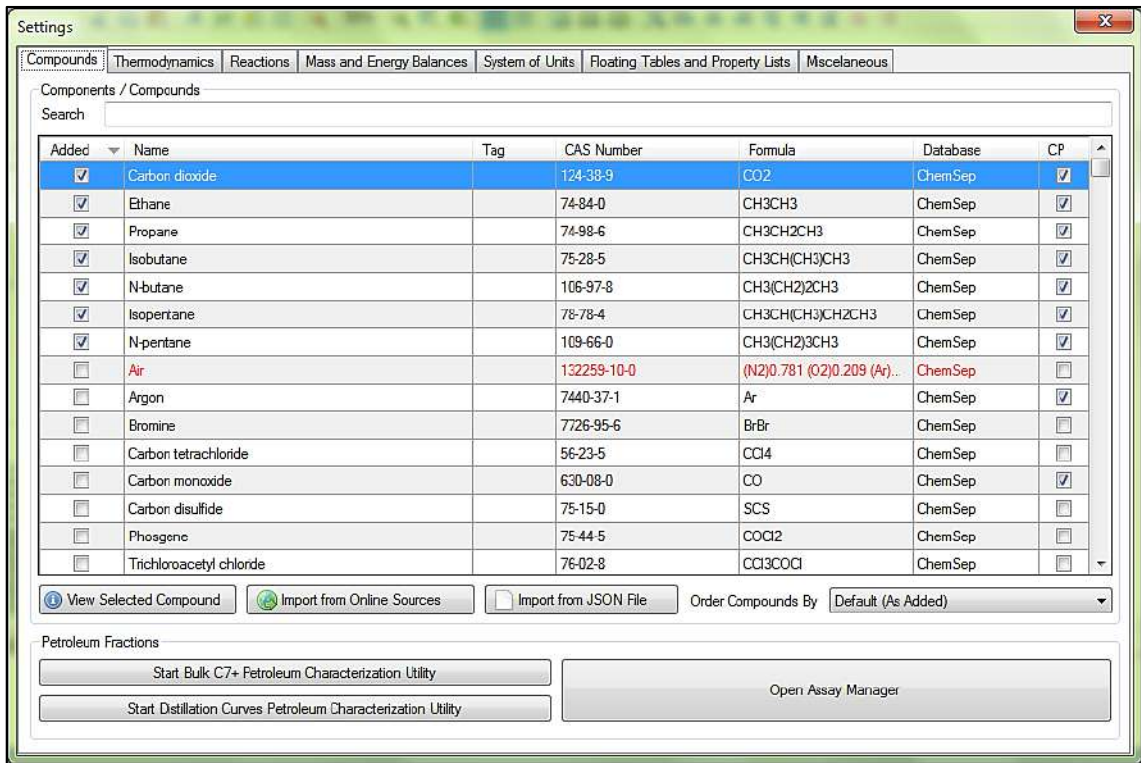
**Nota:** Los espacios que se encuentra vacíos corresponden o bien a parámetros calculados por defecto por el simulador, o que no se aplican para esa sección.

**Fuente:** (Ebrahimzadeh et al., 2016, p.44)

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

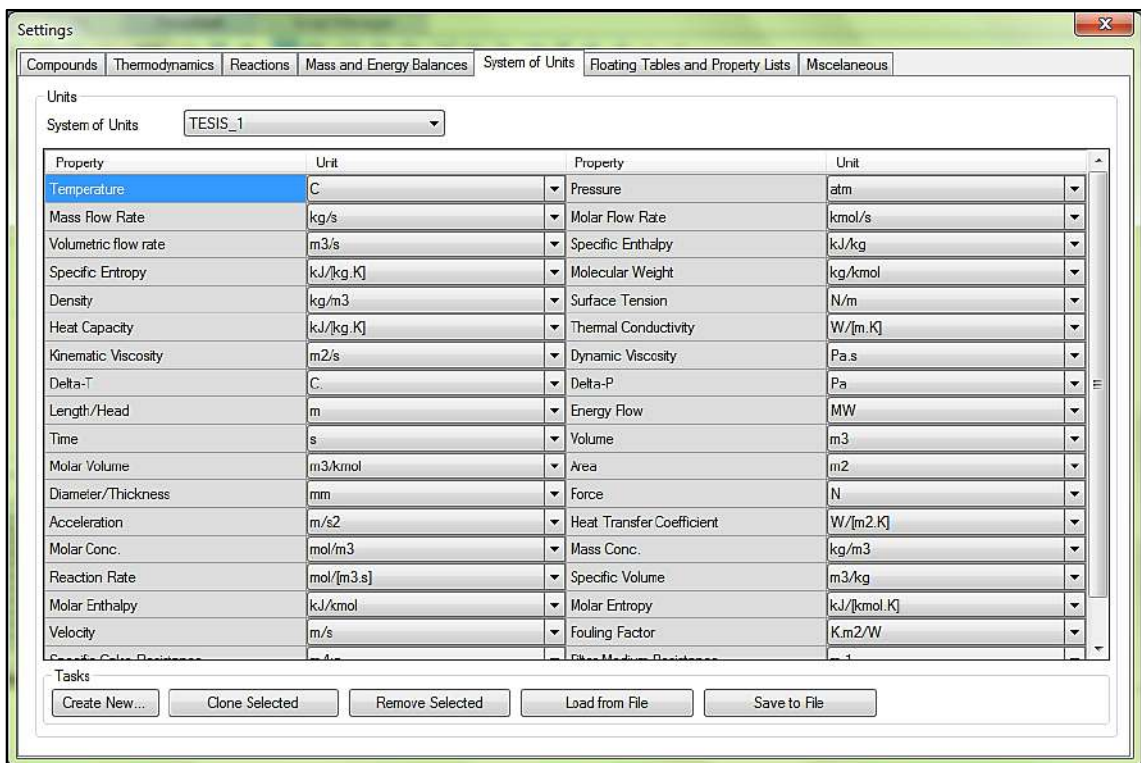
Las condiciones señaladas en la Tabla 5-3 corresponden a los valores ingresados en el simulador para que se ejecute el proceso. Cabe destacar que las columnas de ChempSep requieren la especificación solo de dos parámetros de funcionamiento adicionales al valor de presión.

Es aquí donde el autor del presente proyecto de titulación prueba y determina cuales condiciones son las más óptimas de funcionamiento.



**Figura 5-3.** Panel de selección de componentes en DWSIM

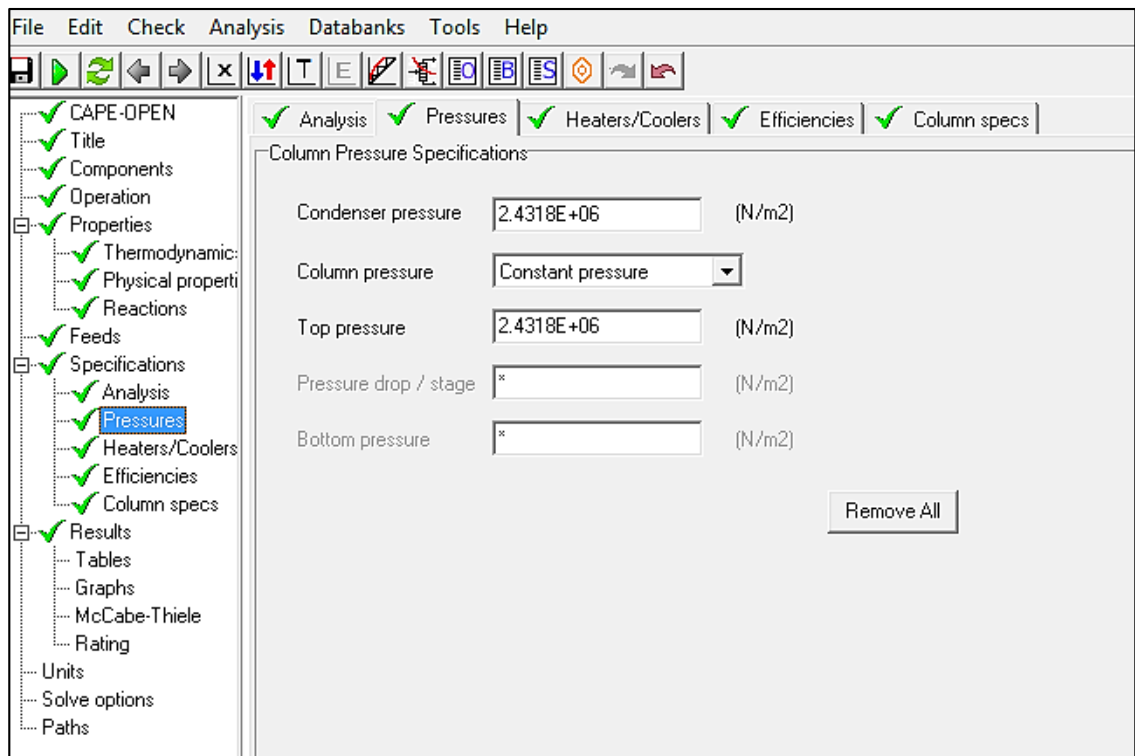
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 6-3.** Panel de selección de unidades de medida en DWSIM

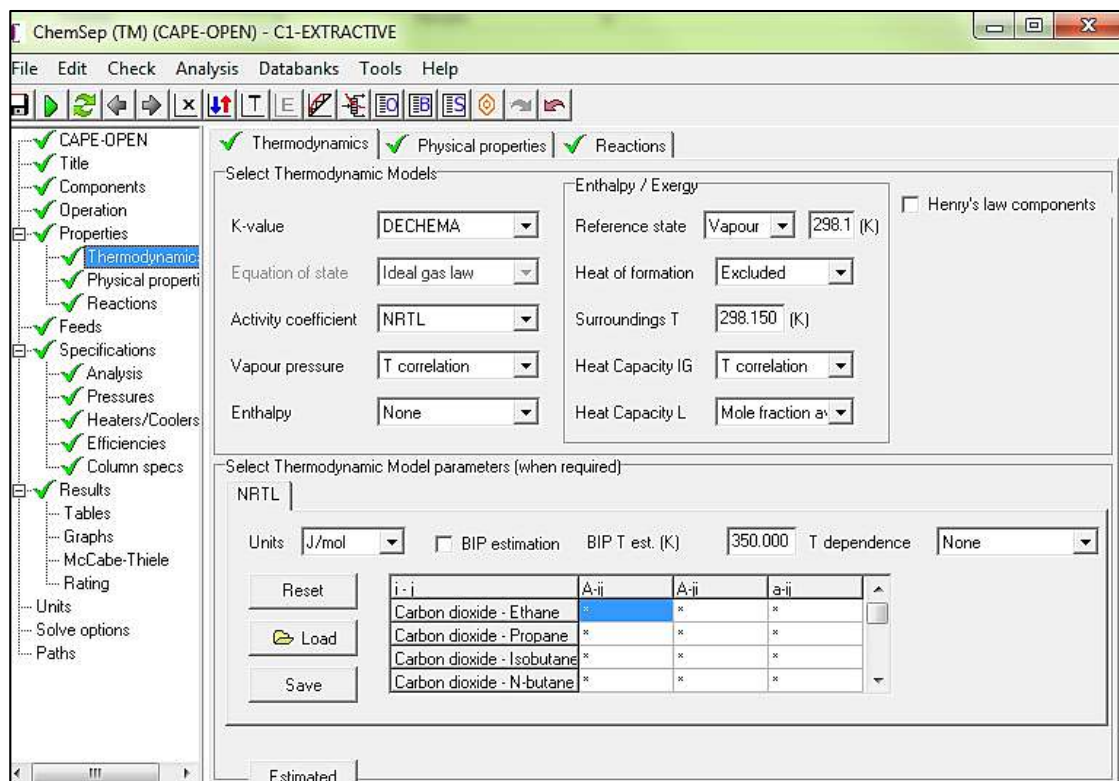
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.





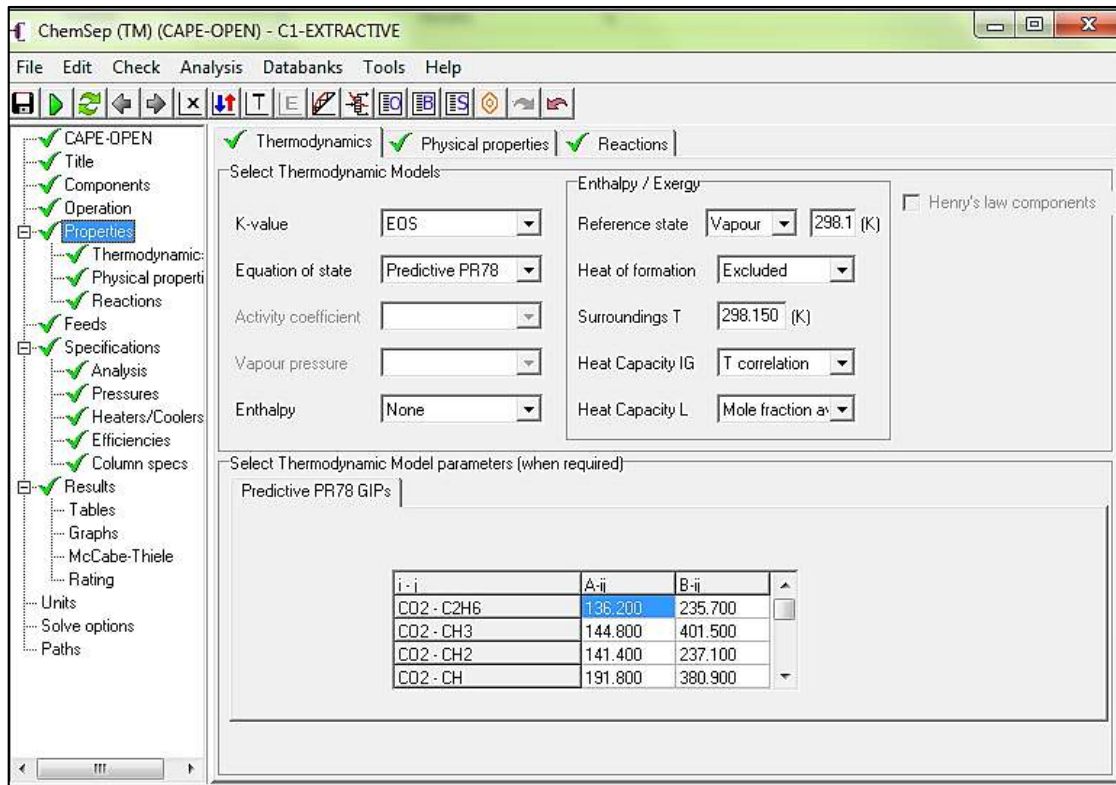
**Figura 7-3.** Panel de ChemSep para la especificación de presiones

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



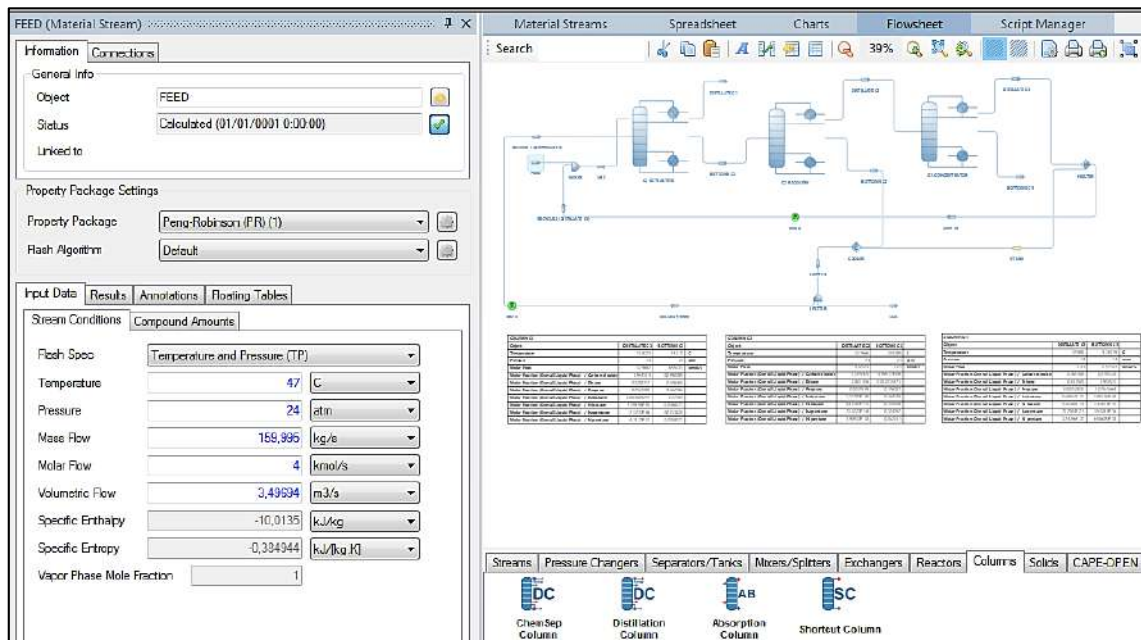
**Figura 8-3.** Panel de ChemSep para la selección del modelo termodinámico (DECHEMA)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



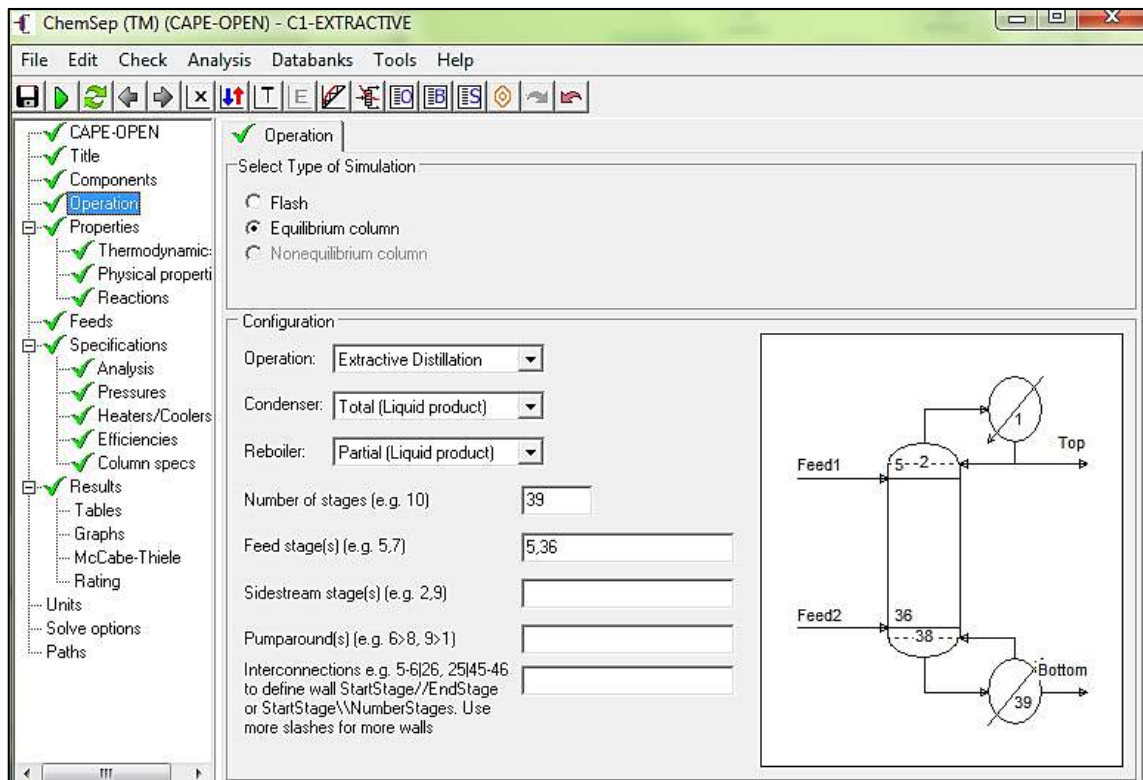
**Figura 9-3.** Panel de ChemSep para la selección del modelo termodinámico (EOS)

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



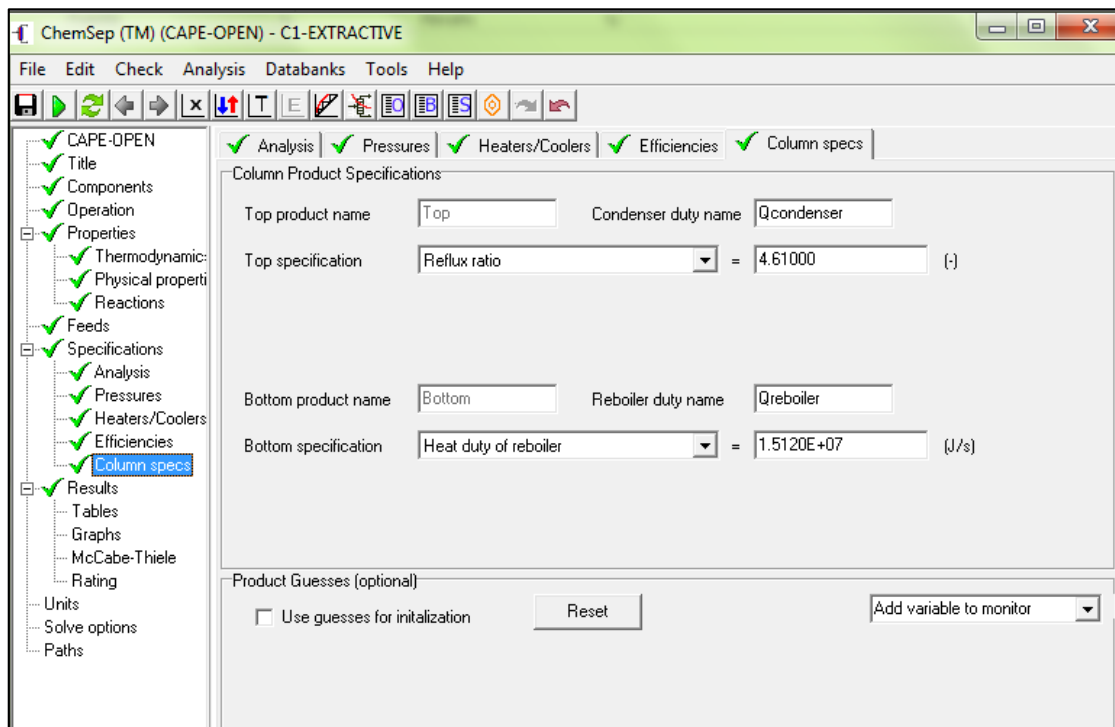
**Figura 10-3.** Panel de condiciones para el flujo de alimentación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



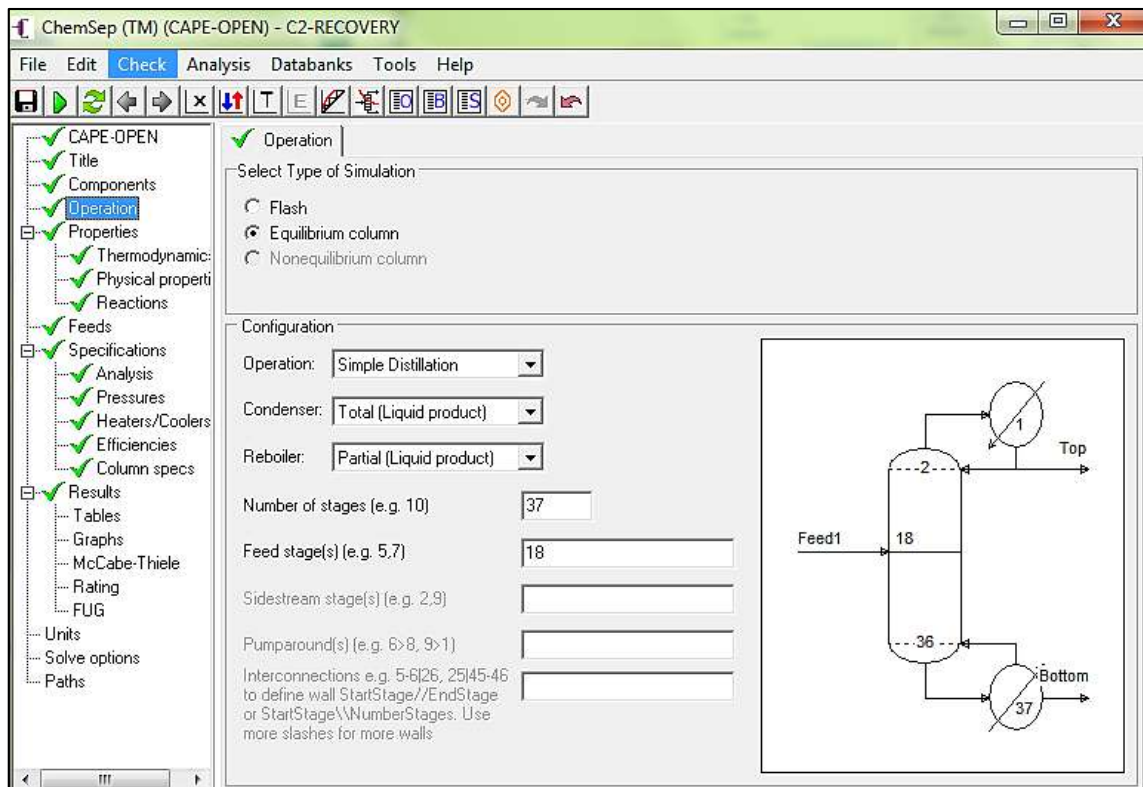
**Figura 11-3.** Configuración operativa de la columna de extracción

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



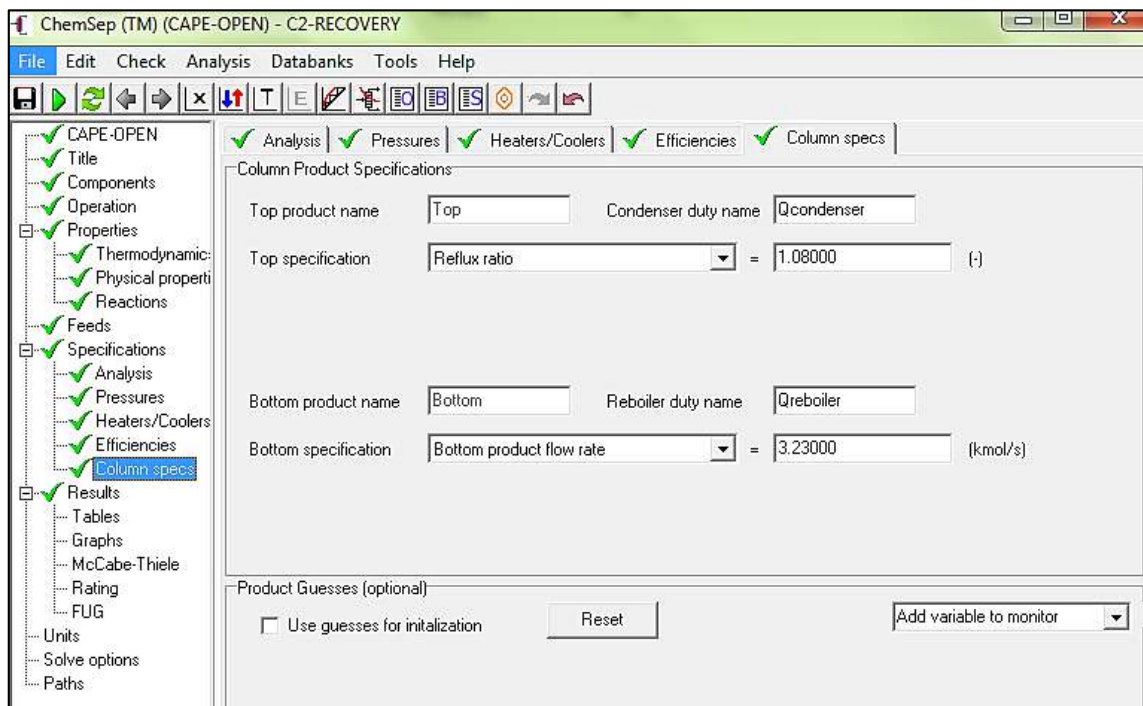
**Figura 12-3.** Especificación de condiciones para la columna de extracción

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 13-3.** Configuración operativa de la columna de recuperación de solvente

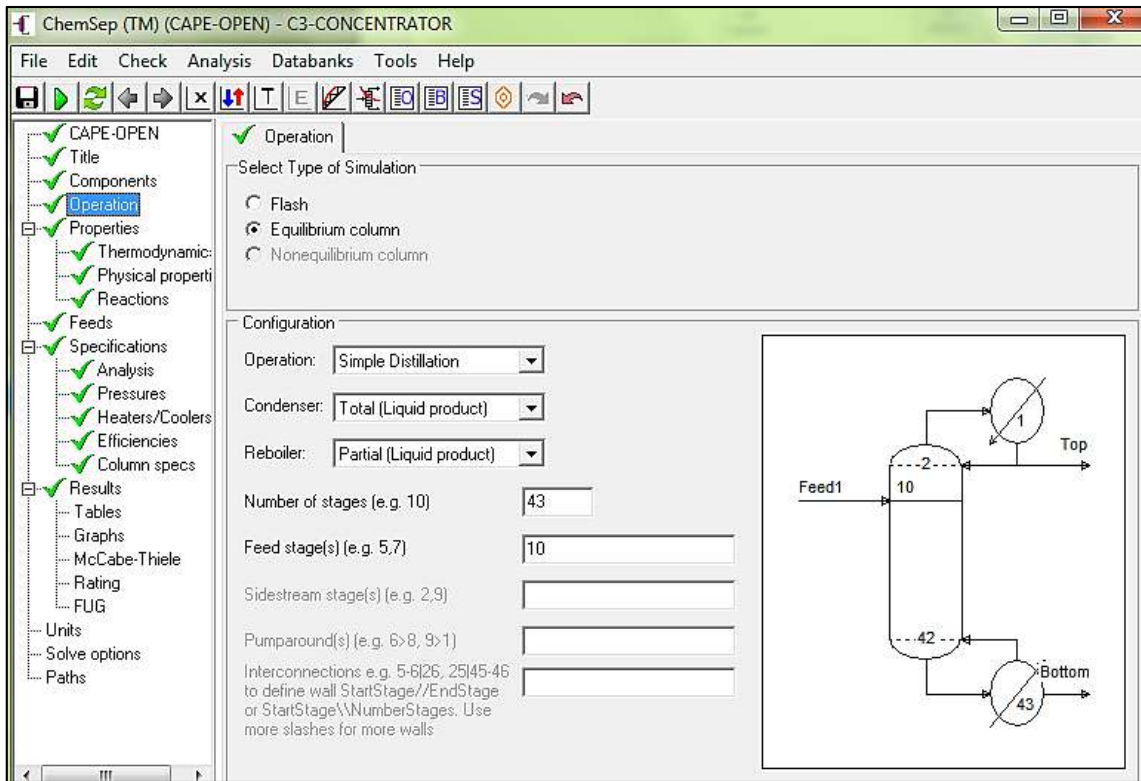
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 14-3.** Especificación de condiciones para la columna de recuperación de solvente

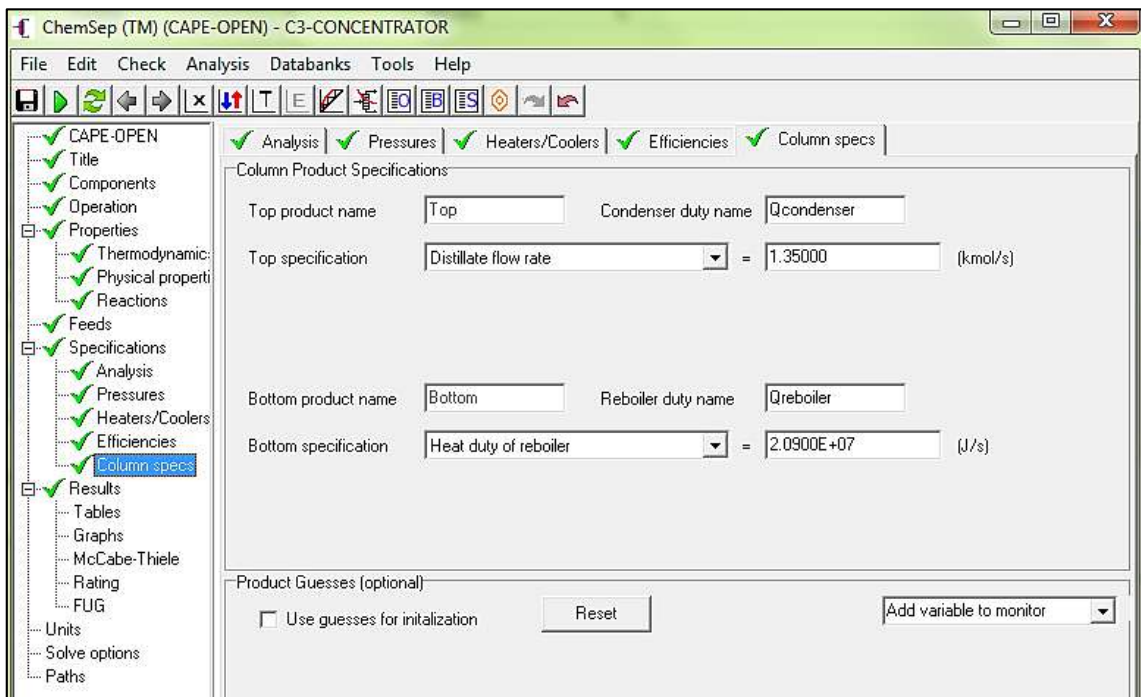
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.





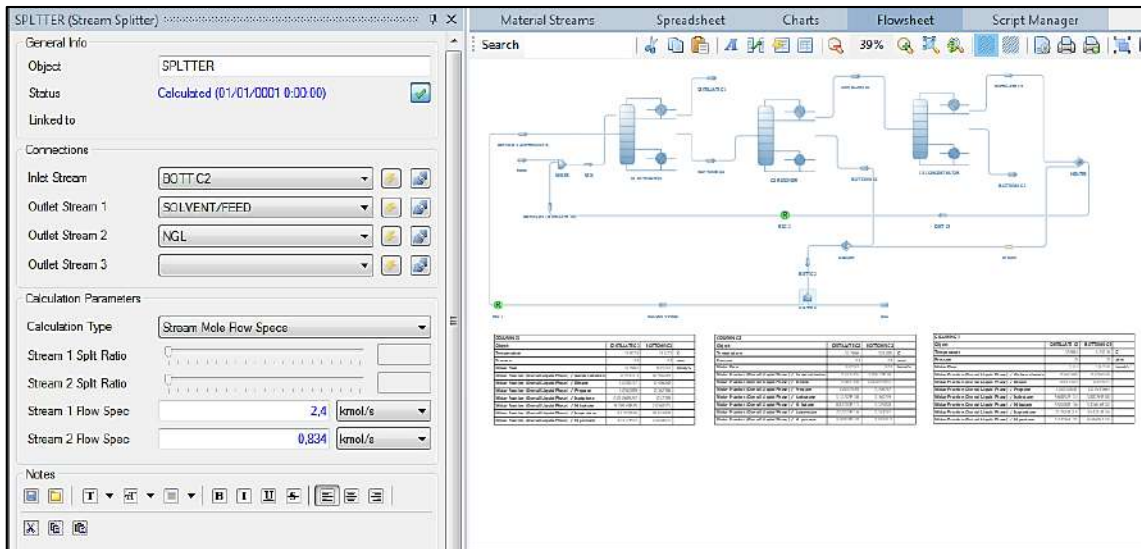
**Figura 15-3.** Configuración operativa de la columna concentradora

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



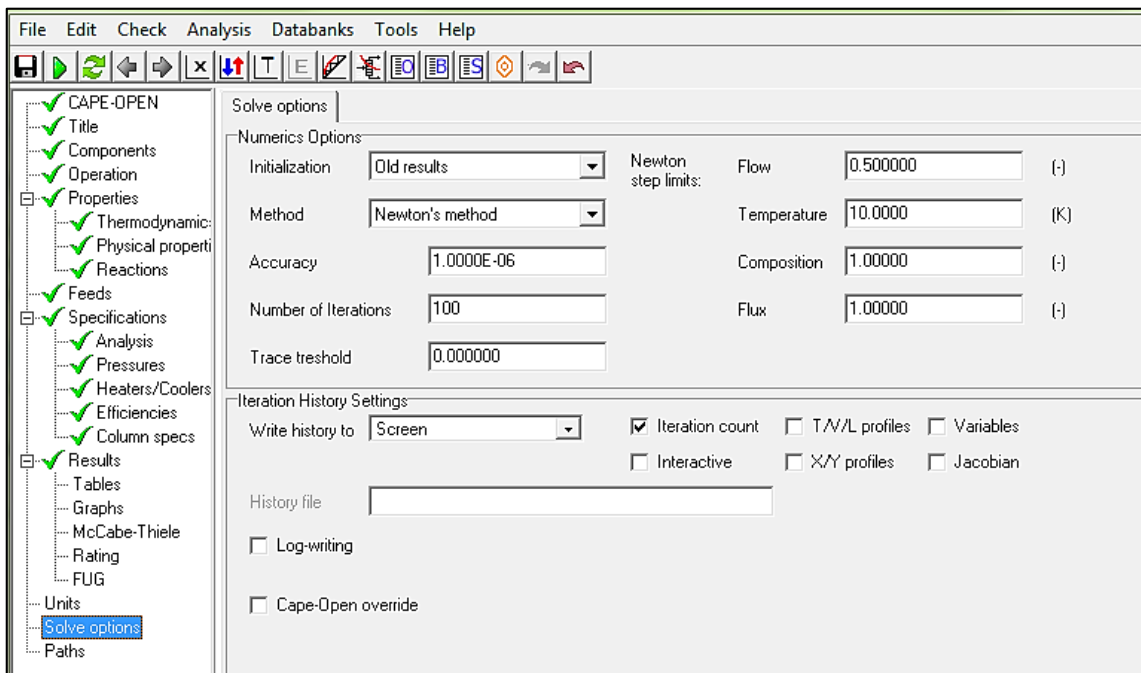
**Figura 16-3.** Especificación de condiciones para la columna concentradora

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 17-3.** Especificación de condiciones del divisor

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 18-3.** Opciones numéricas de solución

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

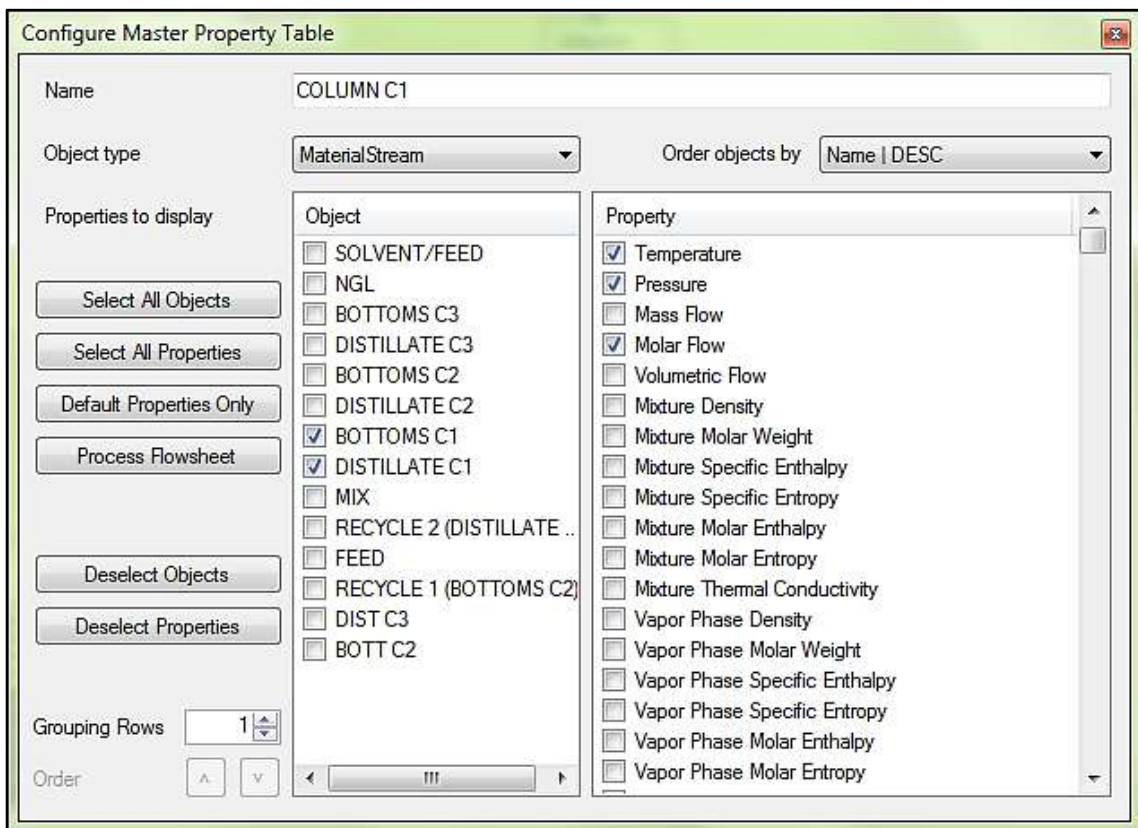
Como se puede observar en la Figura 18-3, el método matemático empleado por el simulador en este proceso corresponde al Método de Newton, y el número de iteraciones puede ser modificado según el funcionamiento del sistema, por consiguiente, se estableció 100 iteraciones para el trabajo óptimo de las tres torres de destilación.

Asimismo, en el panel de las recirculaciones el número de iteraciones es modificable según lo demanda el proceso, empleándose en este trabajo un número de 50 para la recirculación 1 y 30 para la recirculación 2.

### 3.4 Validación de resultados de la simulación.

Los resultados provenientes de la simulación en DWSIM como: fracciones molares de los componentes, flujos, temperaturas, presiones, cargas térmicas, etc., se comparan con los valores definidos en bibliografía, a fin de validar el sistema alternativo propuesto y asegurar su confiabilidad (*Véase las Tablas 6-4 y 7-4 en la sección de resultados*).

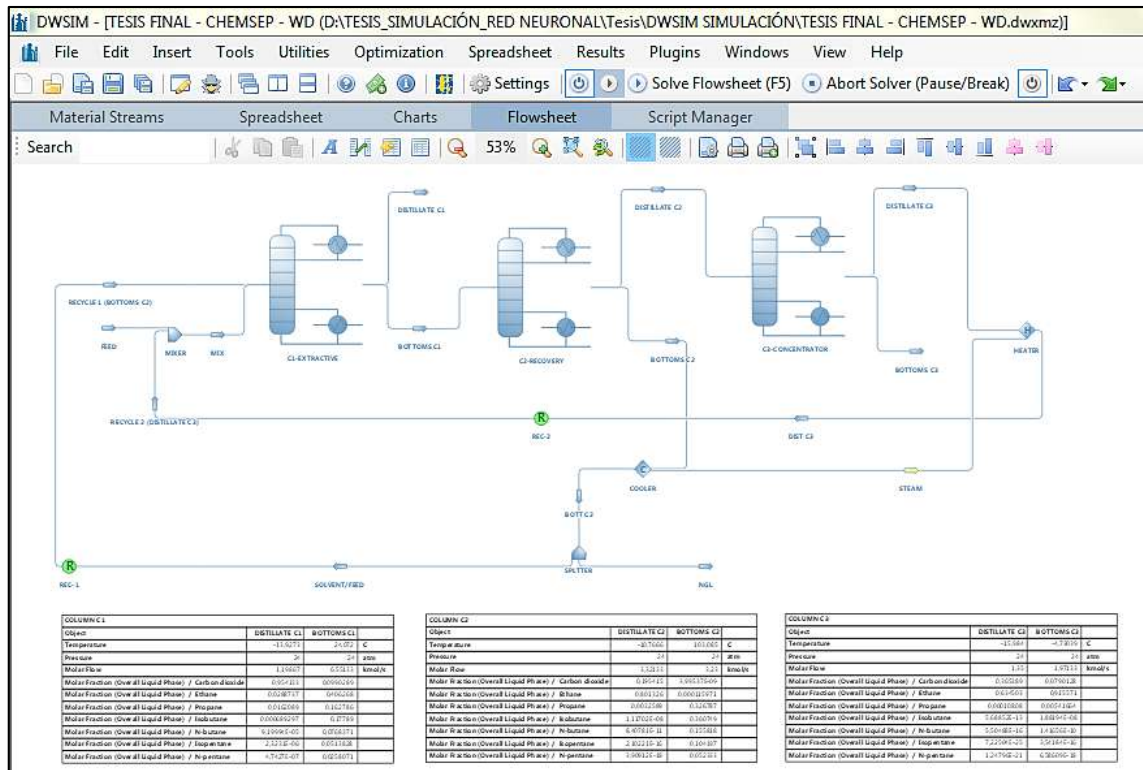
Como se puede observar en la Figura 19-3, DWSIM permite insertar tablas con las propiedades de interés para cada sección del proceso (corrientes y equipos), ya sean de funcionamiento o las calculadas durante la ejecución de la simulación.



**Figura 19-3.** Panel de configuración de la tabla de resultados en DWSIM

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

De esta manera se genera una tabla para cada torre de destilación que especifique primordialmente las fracciones molares de los compuestos obtenidos tanto en las corrientes de los destilados como en los residuos o fondos.



**Figura 20-3.** Interfaz de la simulación en DWSIM con sus resultados

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

### 3.5 Procesamiento de datos.

Una vez completado y validado el proceso en DWSIM, la generación de la base de datos para el diseño de la red neuronal se lleva a cabo con la ejecución de la simulación en el programa mediante su repetición (150 veces) incluyendo una variación aleatoria de los parámetros que constituyen las entradas de nuestra RNA.

**Tabla 6-3.** Parámetros de entrada de la RNA

ENTRADAS			
<b>Parámetro</b>	Presión	Temperatura	Relación Solvent/Feed
<b>Detalles</b>	atm [en las 3 torres]	°C [todas las corrientes]	adimensional [regulado en el divisor]
<b>Identificación</b>	P	T	R

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

**Tabla 7-3.** Parámetros de salida de la RNA

SALIDAS						
Ubicación	COLUMN C1		COLUMN C2		COLUMN C3	
	DIST	BOTT	DIST	BOTT	DIST	BOTT
<b>Fracciones molares</b>	CO <sub>2</sub>	Ethane	Ethane	Propane	Ethane	Ethane
<b>Identificación</b>	CO <sub>2</sub>	ETC1	ETC2	PROP	ETC3DIS	ETC3BOT

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



En esta sección se analiza y genera un conjunto de datos obtenidos a partir de la secuencia repetitiva del proceso simulado con valores aleatorios, mismos que serán utilizados para el entrenamiento y aprendizaje de la red neuronal artificial.

**Durante la ejecución del programa se consideró los siguientes detalles:**

FEED (alimentación base) = 4 Kmol/s

BOTTOMS C2 (fondos de la columna de recuperación) = 3,23 Kmol/s

- Como las corrientes del solvente y de LGN provienen de Bottoms C2, se debe considerar entonces, que el valor del solvente puede alcanzar máximo el 80% de la alimentación.
- Entonces, el rango empleado en la relación solvent/feed para el funcionamiento del proceso se encuentra entre 0,15-0,8.
- Los rangos de temperatura se encuentran entre 20-100 °C, apelando a valores lógicos de operación en las torres del proceso.
- Los rangos de presión para el funcionamiento del proceso fluctúan entre 5-35 atm.
- La variación de la temperatura debe ser constante en todas las corrientes: alimentación y las dos recirculaciones, es decir, que cada vez que se ejecuta el programa el valor de temperatura modificado debe ser igual en los tres flujos e intercambiadores.
- La variación de la presión debe ser constante en las tres torres, es decir, que cada vez que se ejecuta el programa el valor de presión modificado debe ser igual en los tres equipos.
- La variación de la relación solvent/feed debe ingresarse en valores de flujo molar para el solvente y los LGN, mismos que son establecidos en las especificaciones del divisor.

**Tabla 8-3.** Restricciones para las entradas de la RNA

<b>RESTRICCIONES</b>			
<b>Parámetro</b>	Presión	Temperatura	Relación solvent/feed
<b>Detalles</b>	atm [en las 3 torres]	°C [todas las corrientes]	adimensional [regulado en el divisor]
<b>Rango</b>	5-35	20-100	0,15-0,8

**Nota:** Menor o mayor a los rangos establecidos, la simulación no se ejecuta.

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 9-3.** Base de datos generados para la RNA

<b>P</b> <b>(atm)</b>	<b>T</b> <b>(°C)</b>	<b>R</b> <b>S/F</b>	<b>CO2</b>	<b>ETC1</b>	<b>ETC2</b>	<b>PROP</b>	<b>ETC3DIS</b>	<b>ETC3BOT</b>
5	100	0,15	0,594777	0,467132	0,409423	0,114396	0,409424	0,410056
5	100	0,5	0,672564	0,455069	0,682982	0,24011	0,433546	0,960311
10	90	0,2	0,632188	0,475792	0,375411	0,123124	0,375515	0,374837
15	80	0,3	0,655529	0,490058	0,354773	0,143127	0,353305	0,359965
20	70	0,4	0,665799	0,496197	0,483092	0,172419	0,385185	0,632269
25	60	0,45	0,658071	0,493067	0,513215	0,181774	0,402427	0,642507
30	50	0,5	0,762628	0,437331	0,642037	0,258791	0,495218	0,768282
35	40	0,55	0,243434	0,442601	0,405903	0,164257	0,356116	0,441764
10	20	0,8	0,996861	0,346886	0,618751	8,84E-06	0,499048	0,677064
15	40	0,65	0,976171	0,37811	0,724937	0,27488	0,545657	0,836404
20	60	0,7	0,979222	0,335383	0,626484	0,219254	0,363448	0,776337
21	44	0,5	0,695442	0,482108	0,656114	0,221088	0,582749	0,719146
25	80	0,75	0,955525	0,35976	0,655988	0,192723	0,594065	0,688499
30	80	0,15	0,569928	0,473896	0,408383	0,101682	0,380203	0,999643
35	20	0,8	0,0829807	0,38499	0,56396	0,296322	0,451843	0,611253
5	100	0,8	0,730859	0,388364	0,741629	4,12E-07	0,933092	0,624189
10	90	0,78	0,826545	0,388844	0,730893	4,90E-06	0,822426	0,677672
15	80	0,7	0,976914	0,391637	0,73297	0,20574	0,611606	0,802511
20	70	0,65	0,700103	0,45312	0,706045	0,277681	0,512777	0,845505
25	60	0,6	0,657976	0,482636	0,62464	0,227436	0,467606	0,745949
30	50	0,3	0,385262	0,449338	0,349322	0,108407	0,328511	0,395062
35	40	0,25	0,505309	0,451681	0,372147	0,115911	0,338148	0,443216
10	20	0,15	0,630489	0,468784	0,3754	0,113673	0,375513	0,373544
15	40	0,8	0,997175	0,353065	0,629772	0,000111761	0,557159	0,665145
20	60	0,75	0,995935	0,327366	0,597017	0,00104904	0,370563	0,715995
25	80	0,25	0,681538	0,488012	0,466236	0,134182	0,379936	0,760245
30	100	0,25	0,507527	0,469582	0,408657	0,108183	0,3561	0,589238
35	20	0,4	0,278926	0,441979	0,374119	0,142815	0,337813	0,404922
5	20	0,15	0,594712	0,474305	0,409423	0,1137	0,409424	0,41006
10	22	0,2	0,631719	0,476555	0,375414	0,123302	0,375515	0,374875
10	24	0,7	0,971858	0,356367	0,665683	0,222132	0,483378	0,769476
15	25	0,33	0,655458	0,478422	0,394482	0,158398	0,362671	0,447724
20	30	0,42	0,703877	0,448563	0,532685	0,215584	0,405357	0,666813
22	45	0,6	0,704827	0,449148	0,688253	0,259828	0,569584	0,769522
25	35	0,48	0,706827	0,45915	0,58627	0,227777	0,442259	0,712792
30	40	0,5	0,24009	0,448822	0,351673	0,132498	0,329595	0,371935
35	50	0,55	0,268517	0,443224	0,407747	0,163814	0,357113	0,44626
10	100	0,15	0,631832	0,469811	0,375402	0,114242	0,375513	0,373081
15	80	0,8	0,997366	0,35375	0,630993	8,01E-05	0,559142	0,665994
20	20	0,75	0,99733	0,320651	0,573586	0,000697738	0,360569	0,678474

25	40	0,4	0,687658	0,464971	0,578574	0,159255	0,437744	0,739845
30	20	0,65	0,223298	0,452291	0,474361	0,187848	0,388397	0,521639
35	85	0,55	0,289623	0,453348	0,386681	0,141695	0,344543	0,427948
8	100	0,15	0,620792	0,468117	0,387244	0,117848	0,387295	0,386243
8	50	0,55	0,828177	0,433492	0,766107	0,191636	0,508318	0,974227
12	90	0,2	0,644027	0,478096	0,36548	0,121911	0,365606	0,364732
16	80	0,5	0,661778	0,490987	0,565464	0,194694	0,414082	0,733722
18	40	0,6	0,900353	0,402812	0,719396	0,0840042	0,542613	0,840461
24	70	0,4	0,626417	0,470392	0,48277	0,176725	0,387224	0,61115
24	47	0,6	0,953704	0,406301	0,801391	0,328275	0,634573	0,91563
28	60	0,45	0,658569	0,462014	0,539668	0,175648	0,421062	0,656434
32	50	0,4	0,576584	0,472273	0,411923	0,159486	0,358126	0,475741
34	40	0,55	0,702735	0,396268	0,579174	0,206094	0,361502	0,736829
8	100	0,8	0,738701	0,376931	0,719797	5,13E-06	0,877033	0,623352
12	90	0,75	0,882833	0,38678	0,723329	5,15E-05	0,704482	0,734101
16	80	0,8	0,997037	0,355362	0,633869	0,000135078	0,571073	0,66446
18	85	0,3	0,679487	0,481937	0,508377	0,144212	0,393666	0,786231
24	70	0,7	0,491301	0,455536	0,597888	0,222652	0,447034	0,699206
28	60	0,65	0,580026	0,448557	0,610624	0,22091	0,465801	0,701894
32	50	0,7	0,571456	0,43497	0,637168	0,26251	0,498573	0,716541
34	40	0,75	0,809617	0,348059	0,62596	0,138565	0,54649	0,666219
8	20	0,15	0,61938	0,469021	0,387245	0,116495	0,387295	0,386318
12	22	0,75	0,99611	0,391304	0,713622	3,12E-05	0,63374	0,75556
16	25	0,8	0,99734	0,355348	0,632522	9,47E-05	0,567203	0,664116
18	50	0,7	0,765776	0,38884	0,657248	0,268533	0,488672	0,753223
23	47	0,5	0,723917	0,47684	0,687108	0,230943	0,612053	0,751591
24	30	0,5	0,680135	0,445387	0,57544	0,219084	0,433667	0,691766
28	35	0,2	0,643472	0,469057	0,363785	0,119972	0,338052	0,457285
32	20	0,6	0,625897	0,407499	0,609285	0,267399	0,476233	0,687088
34	25	0,6	0,78908	0,360993	0,628892	0,216186	0,388255	0,772229
5	95	0,22	0,59638	0,469431	0,409423	0,124296	0,409424	0,410077
10	85	0,2	0,635179	0,474935	0,37541	0,124961	0,375515	0,374675
15	75	0,33	0,660563	0,488745	0,400134	0,157525	0,364032	0,474795
20	65	0,4	0,694636	0,464281	0,51516	0,199069	0,397874	0,674854
25	55	0,45	0,708584	0,457303	0,561641	0,219501	0,427864	0,693593
30	45	0,5	0,22769	0,450131	0,353434	0,133639	0,330431	0,375311
35	38	0,15	0,587665	0,456986	0,37333	0,104664	0,338787	0,550594
10	36	0,6	0,642972	0,484116	0,624423	0,224751	0,427101	0,789365
15	32	0,65	0,992867	0,386993	0,741969	0,0404728	0,572845	0,84712
20	28	0,7	0,979293	0,330634	0,610309	0,229486	0,359851	0,747469
25	26	0,4	0,631452	0,460266	0,451691	0,176267	0,374255	0,532587
26	50	0,5	0,716616	0,475755	0,685646	0,23058	0,612968	0,748088
30	24	0,8	0,169027	0,438246	0,534898	0,236035	0,421962	0,585812

35	85	0,35	0,426672	0,452168	0,384739	0,114101	0,320791	0,504399
5	95	0,8	0,7392	0,38825	0,741411	5,43E-07	0,932161	0,624409
10	85	0,75	0,766989	0,388214	0,753135	2,76743E-05	0,837679	0,698424
15	75	0,62	0,684951	0,466849	0,690602	0,255887	0,481337	0,866164
20	65	0,68	0,976918	0,374498	0,70669	0,267157	0,576299	0,783514
25	55	0,6	0,69449	0,450957	0,632767	0,255605	0,472823	0,744139
30	45	0,75	0,151131	0,422214	0,494452	0,213683	0,398797	0,544304
35	38	0,5	0,262841	0,441124	0,393717	0,159542	0,349602	0,428839
10	36	0,45	0,658886	0,450316	0,546366	0,217669	0,401985	0,711601
15	32	0,2	0,653199	0,475538	0,353806	0,122451	0,353156	0,357724
20	28	0,3	0,675107	0,465058	0,421537	0,151711	0,354527	0,529465
25	20	0,2	0,663389	0,465762	0,35679	0,126212	0,330891	0,403768
30	24	0,6	0,246499	0,421732	0,496164	0,220674	0,399759	0,555253
35	35	0,35	0,431859	0,446211	0,377548	0,118797	0,316225	0,454014
5	24	0,15	0,594714	0,4744	0,409423	0,113699	0,409424	0,410059
10	26	0,15	0,630033	0,477522	0,375423	0,113676	0,375517	0,373779
15	28	0,25	0,653515	0,479204	0,354178	0,138306	0,353038	0,357837
20	32	0,18	0,666636	0,474476	0,347155	0,121315	0,341268	0,391941
25	36	0,55	0,73138	0,43258	0,635095	0,266277	0,474477	0,755022
30	38	0,35	0,406173	0,445242	0,357176	0,133469	0,332661	0,389833
35	70	0,15	0,597207	0,461782	0,37942	0,10299	0,349706	0,998158
10	55	0,65	0,668563	0,448566	0,677487	0,267127	0,453298	0,854732
15	65	0,75	0,976886	0,360692	0,657795	0,198461	0,547647	0,715625
20	75	0,7	0,98058	0,335951	0,627541	0,189133	0,363847	0,777773
25	85	0,6	0,527894	0,446136	0,562377	0,22537	0,428279	0,679679
27	45	0,6	0,732883	0,443182	0,725274	0,272548	0,657563	0,771645
30	95	0,6	0,228213	0,454823	0,380789	0,164615	0,342982	0,41385
35	45	0,25	0,496559	0,449627	0,382547	0,109387	0,341657	0,482157
8	90	0,25	0,625449	0,476588	0,387245	0,136142	0,387295	0,387073
12	85	0,4	0,666998	0,468221	0,501937	0,172435	0,390987	0,671075
16	75	0,3	0,661706	0,488107	0,357305	0,14496	0,350921	0,372376
18	20	0,15	0,661355	0,467362	0,346054	0,115331	0,342498	0,369653
24	65	0,4	0,626242	0,467507	0,47124	0,175197	0,382089	0,587765
24	40	0,8	0,899442	0,354469	0,631933	0,00350482	0,577975	0,65817
28	55	0,45	0,573101	0,470507	0,465725	0,174855	0,382266	0,553926
32	80	0,3	0,595168	0,474992	0,403736	0,137784	0,354031	0,519606
34	20	0,3	0,579854	0,456316	0,388055	0,138113	0,345598	0,437444
8	95	0,4	0,630531	0,487459	0,474079	0,175663	0,394737	0,597082
12	85	0,7	0,788724	0,391425	0,782645	0,149809	0,78725	0,77934
16	75	0,7	0,979196	0,374524	0,6996	0,19478	0,566393	0,775436
18	65	0,25	0,664312	0,482414	0,349735	0,132725	0,34361	0,369025
24	65	0,8	0,903666	0,356856	0,636534	0,00247046	0,585798	0,661249
28	55	0,75	0,84854	0,362615	0,661142	0,186754	0,574176	0,706801

32	30	0,25	0,628838	0,46784	0,381379	0,130911	0,342992	0,450494
34	100	0,45	0,516943	0,465674	0,433575	0,157709	0,401978	0,474196
8	24	0,15	0,619535	0,469567	0,387246	0,115104	0,387295	0,386285
8	24	0,25	0,623059	0,477936	0,387246	0,135199	0,387295	0,387083
12	26	0,3	0,642923	0,48414	0,36558	0,147898	0,365622	0,36549
18	100	0,7	0,634886	0,420221	0,773942	0,316432	0,571013	0,920269
16	28	0,35	0,661138	0,47509	0,422485	0,164915	0,367786	0,505026
24	32	0,25	0,632394	0,472205	0,362787	0,128045	0,340818	0,418668
28	55	0,15	0,648642	0,478034	0,375239	0,110526	0,341292	0,906585
32	40	0,8	0,839886	0,346254	0,612309	0,0310418	0,567006	0,633789
34	47	0,6	0,56417	0,46152	0,603926	0,217157	0,54869	0,64128
5	90	0,45	0,61165	0,461395	0,518638	0,199936	0,411548	0,657635
5	50	0,5	0,614917	0,456463	0,559598	0,21616	0,412596	0,724227
12	60	0,6	0,669435	0,470012	0,663064	0,242777	0,452351	0,847414
12	75	0,75	0,996938	0,370152	0,675046	3,43E-05	0,559132	0,735904
15	30	0,2	0,653339	0,475318	0,35378	0,124736	0,35315	0,357533
18	35	0,3	0,659026	0,486517	0,351668	0,145816	0,344698	0,366184
20	20	0,15	0,666873	0,468307	0,344712	0,11366	0,352669	0,304872
25	43	0,6	0,744233	0,419815	0,666541	0,289751	0,49809	0,781908
25	65	0,6	0,259962	0,466589	0,471868	0,179547	0,471569	0,472
25	70	0,3	0,633907	0,47443	0,374306	0,149775	0,342739	0,44805
28	50	0,7	0,633664	0,452565	0,716995	0,274166	0,6575	0,750866
30	75	0,7	0,190591	0,455515	0,436471	0,179403	0,369425	0,482207
35	45	0,65	0,221425	0,447714	0,483883	0,189719	0,441909	0,509371

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Del presente conjunto de datos, los 130 primeros son seleccionados para el entrenamiento y aprendizaje de la RNA en MATLAB, mientras que los 20 últimos que se encuentran resaltados, no se incluirán en el diseño interno de la red, sino que se utilizan para realizar una validación externa que permita corroborar el funcionamiento de la RNA.

### 3.6 Diseño de la red neuronal artificial.

El diseño de la presente red neuronal artificial (RNA) se basa en tres parámetros de entrada: presión, temperatura y relación solvente/alimentación. Mientras que los parámetros de salida corresponden a las fracciones molares del CO<sub>2</sub>, etano y propano provenientes de las tres torres de destilación según se especifica en las Tablas 6-3 y 7-3.

**Nota:** Para un mejor procesamiento de datos resulta útil aplicar la función normalizar tanto para los valores de entrada como de salida. Misma que puede realizarse directamente en MATLAB empleado el comando que le corresponde, o manualmente en Excel con la Ec 1-3:

$$x' = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (\text{Ec 1-3})$$

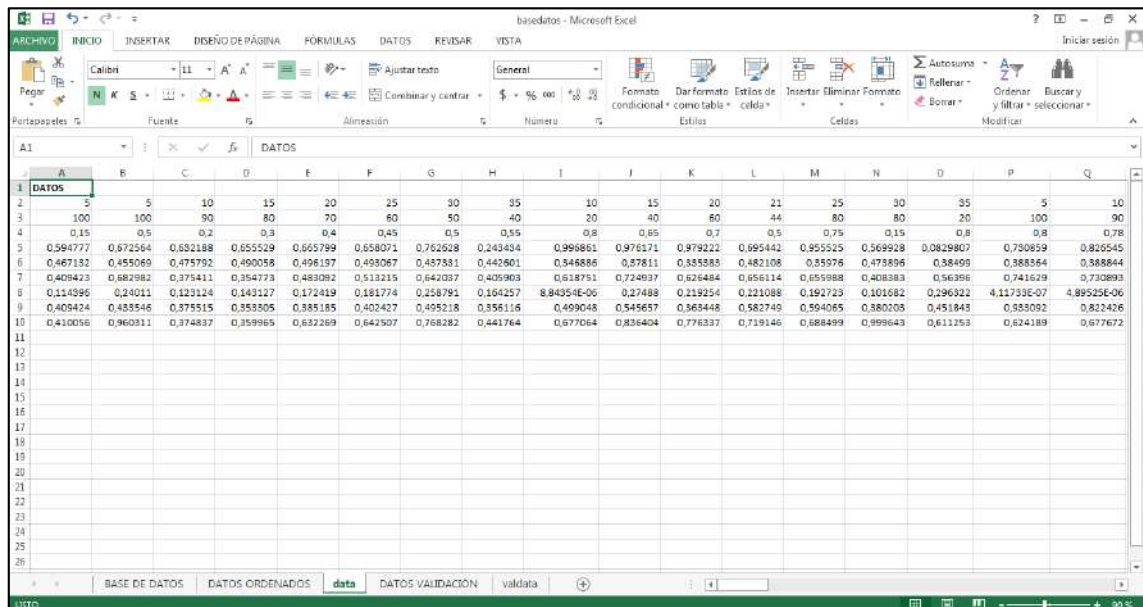
Donde:

$x'$  = valor normalizado

$x$  = valor que se desea normalizar

$x_{\max}$  = valor máximo

$x_{\min}$  = valor mínimo



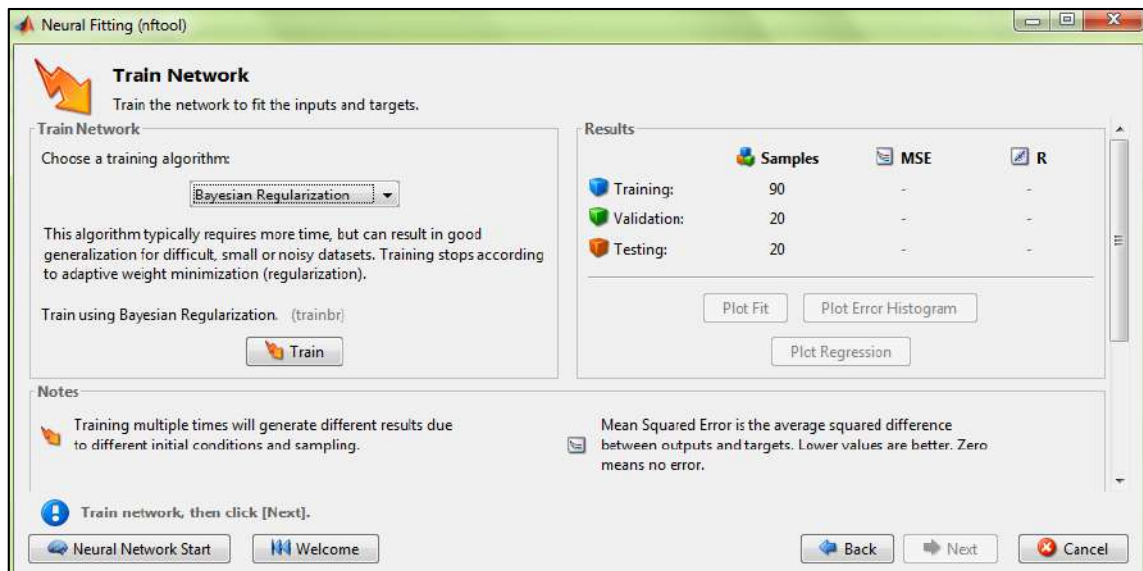
**Figura 21-3.** Disposición de los datos en la matriz de Excel

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

### 3.7 Entrenamiento de datos.

MATLAB proporciona tres algoritmos para el entrenamiento de una red neuronal: Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient. La presente RNA diseñada emplea 80 neuronas ocultas y se entrena con el algoritmo de regularización Bayesian.

Este algoritmo generalmente requiere más tiempo, pero puede resultar en una buena generalización para conjuntos de datos difíciles, pequeños o ruidosos. El entrenamiento se detiene según la minimización de peso adaptativa (regularización).



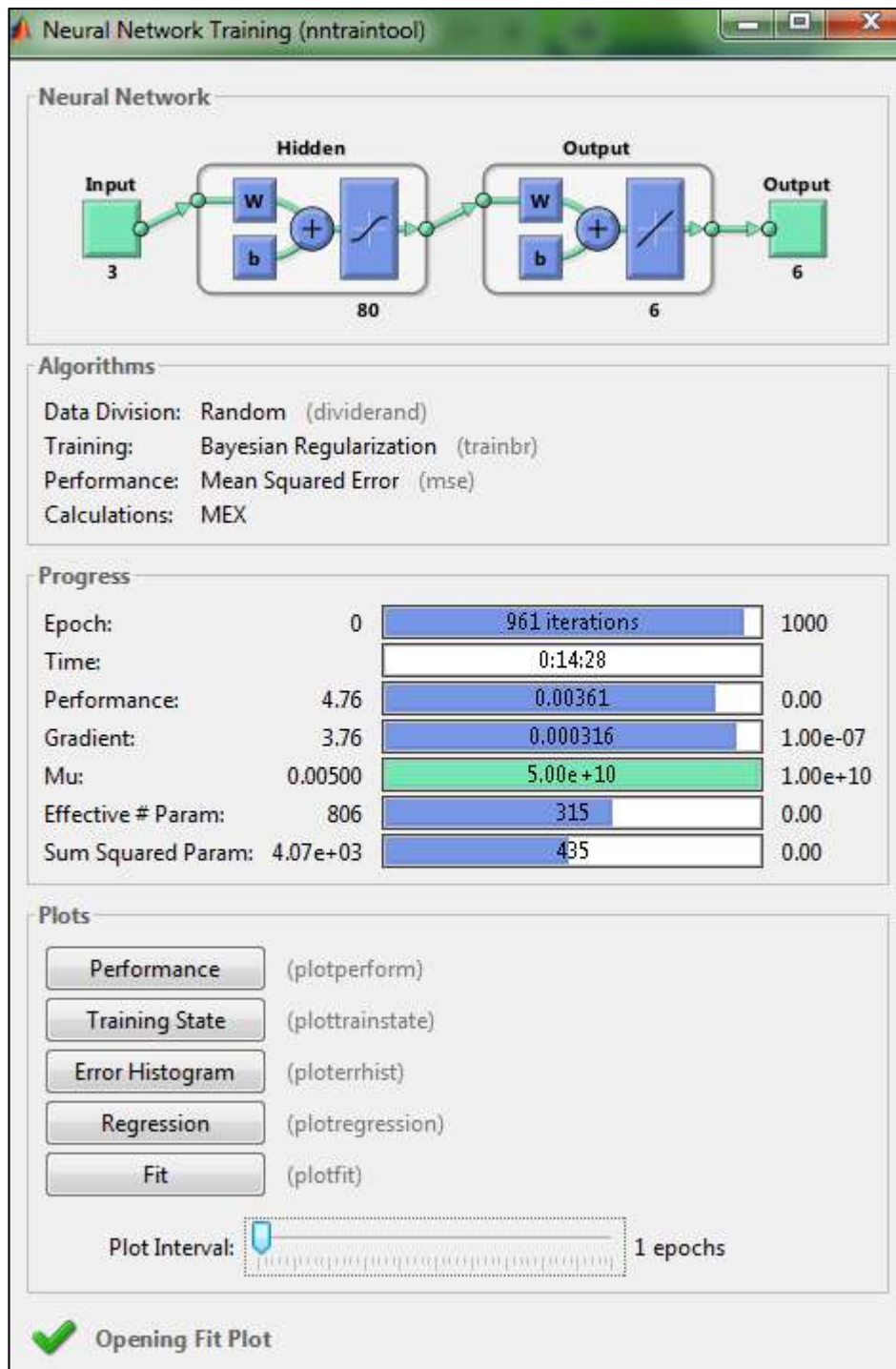
**Figura 22-3.** Algoritmo de entrenamiento para la RNA

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

Cabe señalar, que una de las más recientes representaciones de conocimiento bajo incertidumbre son las redes Bayesianas cuyo mayor atractivo es la propiedad de poder obtener dicha representación a partir de una gran cantidad de datos, su facilidad de interpretación y diversos métodos de inferencia y aprendizaje (Cardozo y Arguello, 2011, pp.33-34; Hernández, 2011, pp.1-2).

El algoritmo de entrenamiento de regularización bayesiano (BR) muestra un mejor desempeño que el algoritmo Levenberg-Marquardt (LM) en términos de capacidad predictiva. La ventaja de una red neuronal artificial de regularización bayesiana es su capacidad para revelar relaciones potencialmente complejas, lo que significa que puede usarse en estudios cuantitativos para proporcionar un modelo robusto (Kayri, 2016, p.1).

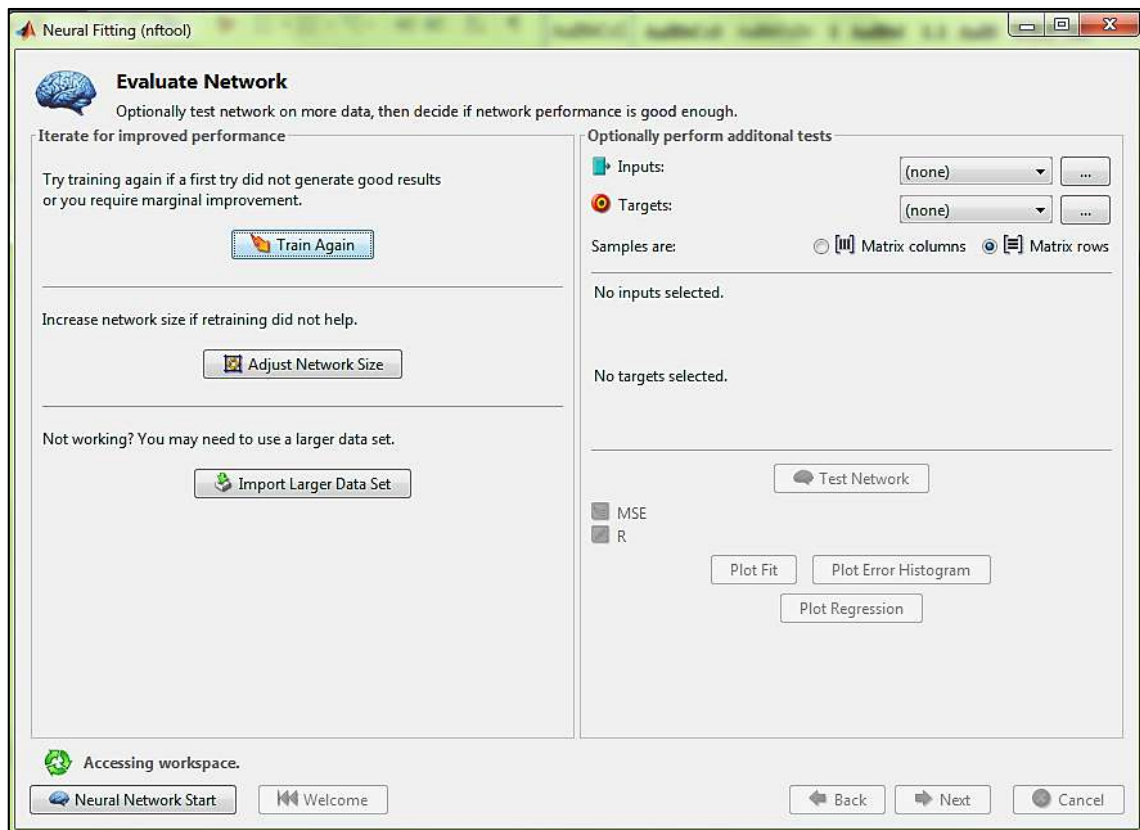
Experimentalmente se comprobó que el tiempo de ejecución durante el entrenamiento de la red con el algoritmo de regularización Bayesian es mucho más prolongado en relación con los otros dos algoritmos mencionados anteriormente. El entrenamiento para esta RNA duró alrededor de 15 minutos.



**Figura 23-3.** Entrenamiento de la RNA

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.





**Figura 24-3.** Panel de evaluación de la RNA

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

### 3.8 Validación de resultados de la RNA.

Para validar la red neuronal artificial y demostrar la confiabilidad del modelo para la predicción de las fracciones molares en el sistema alternativo de destilación extractiva para la separación de azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano, se utilizará inicialmente los indicadores de desempeño generados en MATLAB: error cuadrático medio (MSE) y regresión (\*R<sup>3</sup>). En la sección de análisis estadístico se profundizará y ampliará su estudio mediante el programa SPSS y Excel.

- El error cuadrático medio (MSE) es la diferencia cuadrática promedio entre salidas y objetivos. Los valores más bajos son mejores. Cero significa que no hay error.
- Los valores de regresión (\*R) miden la correlación entre productos y objetivos. Un valor (\*R) de 1 significa una relación cercana, 0 una relación aleatoria.

Este fundamento matemático corresponde a una fase del diseño de la RNA, en la cual se puede manipular el porcentaje de los datos de entrada para el entrenamiento, prueba y validación.

<sup>3</sup> Se denotará la regresión con un asterisco (\*) para que no exista confusión con la R designada para la relación solvent/feed en las entradas de la red neuronal artificial.

En teoría, según el panel de diseño para la red neuronal artificial en MATLAB y el número total de datos elegidos, el entrenamiento ocuparía un 70% (90 datos) como base para el aprendizaje de la red, la comprobación o prueba emplearía un 15% (20 datos) permitiéndonos medir la generalización de la red, y la validación utilizaría el 15% restante (20 datos), los cuales no tienen ninguna influencia sobre el entrenamiento pero proporcionan una medida independiente sobre el rendimiento de la red después del entrenamiento.

**No obstante, se debe atender a lo siguiente:**

Las redes neuronales artificiales regularizadas bayesianas (BRRNA) son más robustas que las redes de retropropagación estándar y pueden reducir o eliminar la necesidad de una validación cruzada prolongada. La regularización bayesiana es un proceso matemático que convierte una regresión no lineal en un problema estadístico "bien planteado" a la manera de una regresión de cresta (Burden y Winkler, 2008, p.25).

La ventaja de las BRRNA es que los modelos son robustos y el proceso de validación, que se escala en los métodos de regresión normales, como la propagación inversa, es innecesario. Estas redes proporcionan soluciones a una serie de problemas que surgen en el modelado QSAR<sup>4</sup>, como la elección del modelo, la solidez del modelo, la elección del conjunto de validación, el tamaño del esfuerzo de validación y la optimización de la arquitectura de red (Burden y Winkler, 2008, p.25).

Son difíciles de sobreentrenar, ya que los procedimientos de evidencia proporcionan un criterio bayesiano objetivo para detener el entrenamiento. También son difíciles de sobreajustar, porque calcula y entrena en una serie de parámetros o pesos de red efectivos, desactivando aquellos que no son relevantes (Burden y Winkler, 2008, p.25).

De esta premisa, se debe resaltar que el porcentaje de datos destinados para la validación son usados por la RNA durante su entrenamiento y aprendizaje, hecho que se evidenciará en el Capítulo V durante el análisis de resultados.

Por otra parte, debido a que MATLAB no realiza una validación interna a partir de la base de datos ingresada (130 datos), se realizará una validación externa ingresando 20 entradas adicionales y diferentes de presión, temperatura y relación solvente/alimentación, que permita

---

<sup>4</sup> Modelado de relación cuantitativa estructura-actividad (en inglés, quantitative structure-activity relationship), modelado matemático por el cual una estructura química se correlaciona cuantitativamente con un proceso bien definido, como la actividad biológica. Puede emplearse para predecir las propiedades fisicoquímicas, biológicas y ambientales de los compuestos a partir del conocimiento de su estructura química.

comprobar el funcionamiento de la red a través de la comparación de los valores de salida predichos por la RNA y los resultados de DWSIM.

### 3.9 Análisis Estadístico.

El análisis estadístico del presente proyecto de titulación consiste en la comparación de los valores de fracción molar de los compuestos considerados para el estudio (CO<sub>2</sub>, etano y propano) obtenidos a partir de las simulaciones en DWSIM y las predichas por la red neuronal artificial en MATLAB. La evaluación de los resultados se llevará a cabo mediante el programa estadístico SPSS. Se tomarán en cuenta las siguientes pruebas:

- **ANOVA:** cuando se comparan varias muestras, habitualmente el primer paso consiste en ejecutar un análisis de la varianza simple (ANOVA). Este análisis se utiliza para contrastar la hipótesis de igualdad de medias poblacionales eligiendo entre las dos hipótesis siguientes:
  - Hipótesis nula:  $\mu_A = \mu_B = \mu_C = \mu_D$
  - Hipótesis alternativa: Las medias no son iguales.

Donde  $\mu_j$  representa la media de la población de la cual hemos tomado la muestra j-ésima. El rechazo de la hipótesis nula indicará que las muestras provienen de poblaciones con medias diferentes (StatPoint Technologies, 2010, p.192).

El análisis de la varianza descompone la variabilidad de los datos observados en dos componentes: una componente entre grupos y una componente dentro de grupos. La tabla ANOVA contiene P-valores que pueden ser utilizados para contrastar la significación estadística de cada efecto (StatPoint Technologies, 2010, p.193).

- **Tabla de medias:** muestra las medias de cada columna de datos a comparar, tanto de las fracciones generadas en DWSIM como las predichas en la red neuronal artificial, con su respectivo error estándar.
- **Prueba de Kruskal-Wallis:** cuando existen valores atípicos, deben utilizarse procedimientos no paramétricos como una alternativa a los análisis estándar de la varianza seleccionando los test de Kruskal-Wallis y Friedman (StatPoint Technologies, 2010, p.196). Estos test comparan las medianas de las muestras en lugar de las medias:
  - Hipótesis nula: las medianas son todas iguales.
  - Hipótesis alternativa: las medianas no son todas iguales.

## CAPÍTULO IV

### 4 GESTIÓN DEL PROYECTO

#### 4.1 Presupuesto.

Tabla 1-4. Presupuesto del proyecto de titulación

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación y aprendizaje (internet)	\$60	X	
Cursos online de MATLAB	\$30		
Impresión del documento final	\$30	X	
Copias e impresiones adicionales	\$20	X	
Empastados	\$60	X	
<b>TOTAL</b>			\$200

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

#### 4.2 Recursos y Materiales.

El presente proyecto de titulación se desarrolla mediante el uso de los siguientes softwares:

- *Software libre DWSIM (versión 5.8, update 11)*: simulación del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano.
- *Software CAPE-OPEN / ChemSep*: complementos para la simulación en DWSIM.
- *MATLAB (versión R2019a)*: diseño la red neuronal artificial (RNA).
- *SPSS*: análisis estadístico de los resultados obtenidos en DWSIM y MATLAB.

A su vez, todos los procedimientos mencionados se realizaron en un ordenador con procesador Intel® Core™ i7-1065G7 CPU @ 1.30GHz 1.50 GHz, con 16,0 GB de memoria RAM, sistema operativo de 64 bits y Windows 10 Home Single Language.

### 4.3 Cronograma.

**Tabla 2-4.** Cronograma del proyecto de titulación.

ACTIVIDAD	MESES																											
	FEBRERO				MARZO				ABRIL				MAYO				JUNIO				JULIO							
	SEMANAS																											
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4				
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																
Elaboración del anteproyecto	■	■	■	■																								
Determinación de variables					■	■																						
Simulación del sistema alternativo de destilación extractiva							■	■																				
Obtención de datos experimentales									■	■																		
Diseño de la red neuronal									■	■	■	■																
Validación del método y análisis estadístico										■	■	■	■	■														
Estudio técnico y económico										■	■	■																
Redacción del trabajo final	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■												
Análisis de costos													■	■														
Revisión y corrección del documento final																	■	■										
Presentación de documentos y requisitos para la defensa																			■	■	■	■	■	■				
Defensa de los resultados																									■	■		

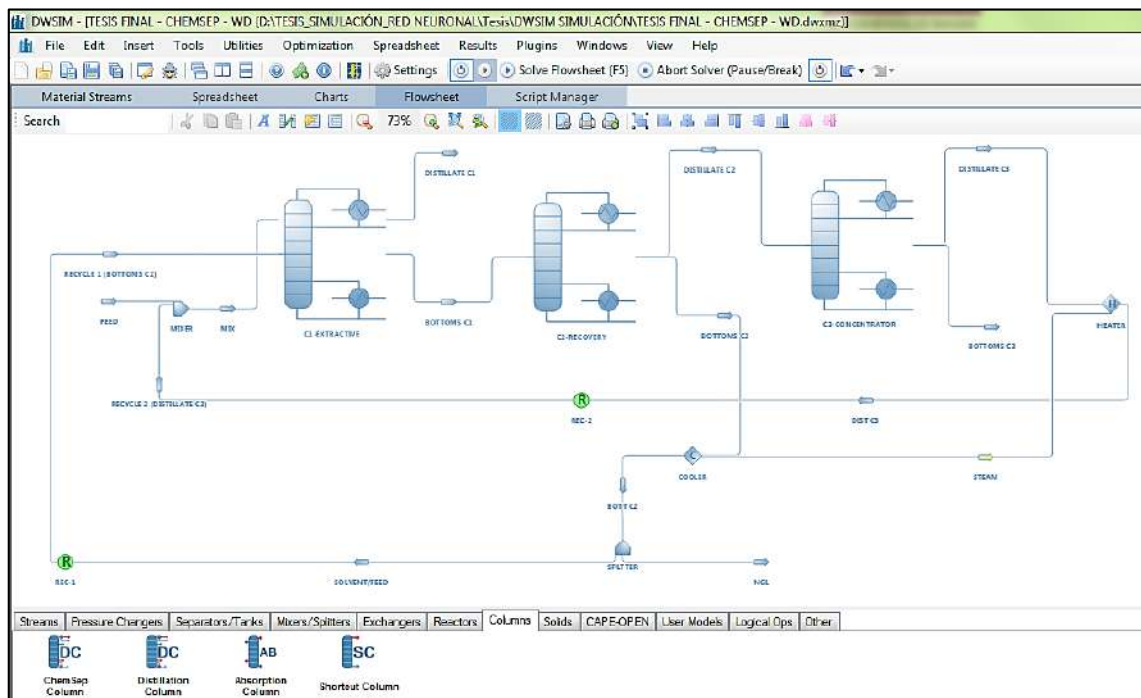
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

#### 4.4 Discusión y análisis de resultados.

##### 4.4.1 Informe de resultados de la simulación en DWSIM.

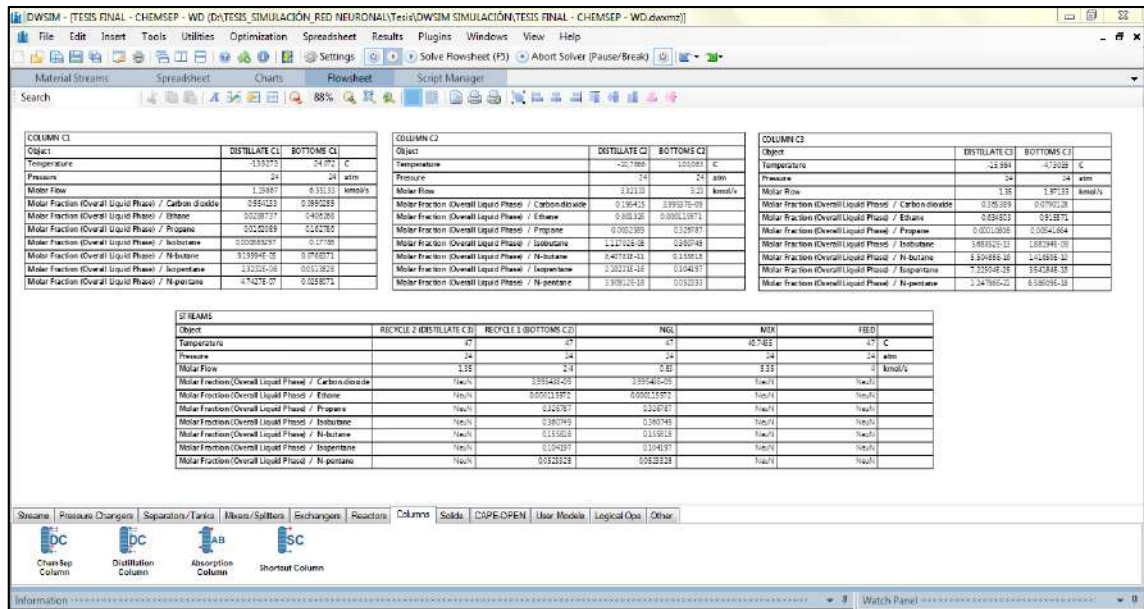
La Figura 1-4 esquematiza la simulación completa del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano durante el tratamiento de gas natural, realizada en el software libre DWSIM.

Se pueden observar ligeras modificaciones respecto al modelo de referencia, como la adición de un mezclador para las corrientes de alimentación y recirculación 2, y la utilización de un enfriador y un calentador por separado en vez de un intercambiador de calor común para los flujos de salida de las torres que lo demandan. Sin embargo, DWSIM permite conectar estos equipos por medio del flujo de energía para aprovechar la fuente calor.



**Figura 1-4.** Simulación completa del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano en DWSIM

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Figura 2-4.** Resultados en DWSIM

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Los resultados obtenidos a partir de la simulación del sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano en DWSIM, objetos de interés del presente estudio son los siguientes:

**Tabla 3-4.** Resultados de la columna de extracción en DWSIM

COLUMN C1			
Object	DISTILLATE C1	BOTTOMS C1	UNITS
Temperature	-13,9428	24,059	°C
Pressure	24	24	atm
Molar Flow	1,19867	6,55133	Kmol/s
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Carbon dioxide	0,953704	0,0990031	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Ethane	0,029262	0,406301	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Propane	0,0162524	0,163513	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isobutane	0,000687602	0,17814	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-butane	9,10682E-05	0,0765015	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopentane	2,28571E-06	0,0509483	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-pentane	4,6672E-07	0,025593	

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 4-4.** Resultados de la columna recuperadora de solvente en DWSIM

COLUMN C2			
Object	DISTILLATE C2	BOTTOMS C2	UNITS
Temperature	-10,765	102,946	°C
Pressure	24	24	atm
Molar Flow	3,32133	3,23	Kmol/s
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Carbon dioxide	0,195364	4,03049E-09	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Ethane	0,801391	0,00011752	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Propane	0,00324568	0,328275	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isobutane	1,11031E-08	0,361254	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-butane	8,31095E-11	0,155138	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopentane	2,06802E-16	0,103316	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-pentane	3,84613E-18	0,0518989	

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 5-4.** Resultados de la columna concentradora en DWSIM

COLUMN C3			
Object	DISTILLATE C3	BOTTOMS C3	UNITS
Temperature	-15,9825	-4,72894	°C
Pressure	24	24	atm
Molar Flow	1,35	1,97133	Kmol/s
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Carbon dioxide	0,365319	0,0789752	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Ethane	0,634573	0,91563	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Propane	0,000107665	0,00539465	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isobutane	5,65714E-13	1,87064E-08	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-butane	5,44442E-16	1,40024E-10	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopentane	1,02237E-24	3,48424E-16	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / N-pentane	3,83332E-21	6,47517E-18	

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



#### 4.5 Validación de los resultados provenientes de DWSIM

Previo al análisis y procesamiento de la base de datos, surge la necesidad de validar el modelo simulado con los resultados existentes en bibliografía. El estudio que se toma en cuenta para la validación, es el trabajo expuesto por Ebrahimzadeh et al. (2016).

Una particularidad que se puede evidenciar comparando los resultados entre las simulaciones realizadas en DWSIM y los valores del referente, es que en DWSIM todos los compuestos salen tanto en el destilado como en los fondos de cada torre. No obstante, los componentes menos significativos poseen trazas muy pequeñas que pueden considerarse despreciables.

Para el cálculo del error porcentual se emplea la fórmula:

$$E(\%) = \frac{V_{\text{deseado}} - V_{\text{experimental}}}{V_{\text{deseado}}} \quad (\text{Ec 1-4})$$

**Tabla 6-4.** Comparación de las fracciones molares obtenidas en DWSIM

RESULTADOS	COLUMNA 1		COLUMNA 2		COLUMNA 3	
	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
<b>CO<sub>2</sub></b> <b>DWSIM</b>	0,953704	0,0990031	0,195364	4,0305E-09	0,365319	0,0789752
<b>CO<sub>2</sub></b> <b>(deseado)</b>	0,956	0,098	0,198	0	0,462	0,0017
<b>ERROR (%)</b>	0,24	1,024	1,331	-	20,927	4545,6
<b>Etano</b> <b>DWSIM</b>	0,029262	0,406301	0,801391	0,00011752	0,634573	0,91563
<b>Etano</b> <b>(deseado)</b>	0,029	0,396	0,799	0,0005	0,538	0,997
<b>ERROR (%)</b>	0,903	2,601	0,299	76,496	17,95	8,161
<b>Propano</b> <b>DWSIM</b>	0,0162524	0,163513	0,00324568	0,328275	0,000107665	0,00539465
<b>Propano</b> <b>(deseado)</b>	0,014	0,172	0,003	0,337	0	0,0003
<b>ERROR (%)</b>	16,089	4,934	8,189	2,589	-	1698,217

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Se puede observar en la Tabla 6-4 que existen errores porcentuales excesivamente grandes, esto se justifica por lo mencionado anteriormente sobre la presencia de trazas de todos los compuestos en los destilados y fondos de las columnas de destilación. No obstante, las fracciones molares de interés en el estudio en sus respectivas torres (señalados con color) no exceden el 18%, por tanto la diferencia no es significativa.

**Tabla 7-4.** Comparación de las temperaturas obtenidas en DWSIM

RESULTADOS	COLUMNA 1		COLUMNA 2		COLUMNA 3	
	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
Temperatura °C DWSIM	-13,9428	24,0509	-10,765	102,946	-15,9825	-4,72894
Temperatura °C (deseada)	-13,7	25,4	-6,18	102,9	-15,2	1,13

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

De la misma manera, pese a que se realiza una comparación de las temperaturas obtenidas en las corrientes de destilado y fondo de cada columna, no son influyentes ni necesarias para el caso de estudio.

Las condiciones de operación y los modelos termodinámicos seleccionados permitieron simular satisfactoriamente el sistema alternativo de destilación extractiva para separar los azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano en los procesos mejorados de recuperación del petróleo, con lo que se valida su funcionamiento respecto al diseño original (referente) y para la generación de la base de datos que sirve de alimentación para la red neuronal artificial.

#### **4.6 Balance de masa del sistema.**

Como un método de comprobación manual, se procedió a realizar un balance de masa global para cada torre de destilación, a fin de demostrar la validez del sistema mediante cálculos matemáticos sin necesidad del software. Evidentemente, se lo realizará de manera parcial y simplificada, es decir, que no se comprobarán todos los resultados ya que resultaría muy extenso y redundante, en este caso solo se calculará los flujos molares.

#### 4.6.1 Balance de masa general para la torre de extracción

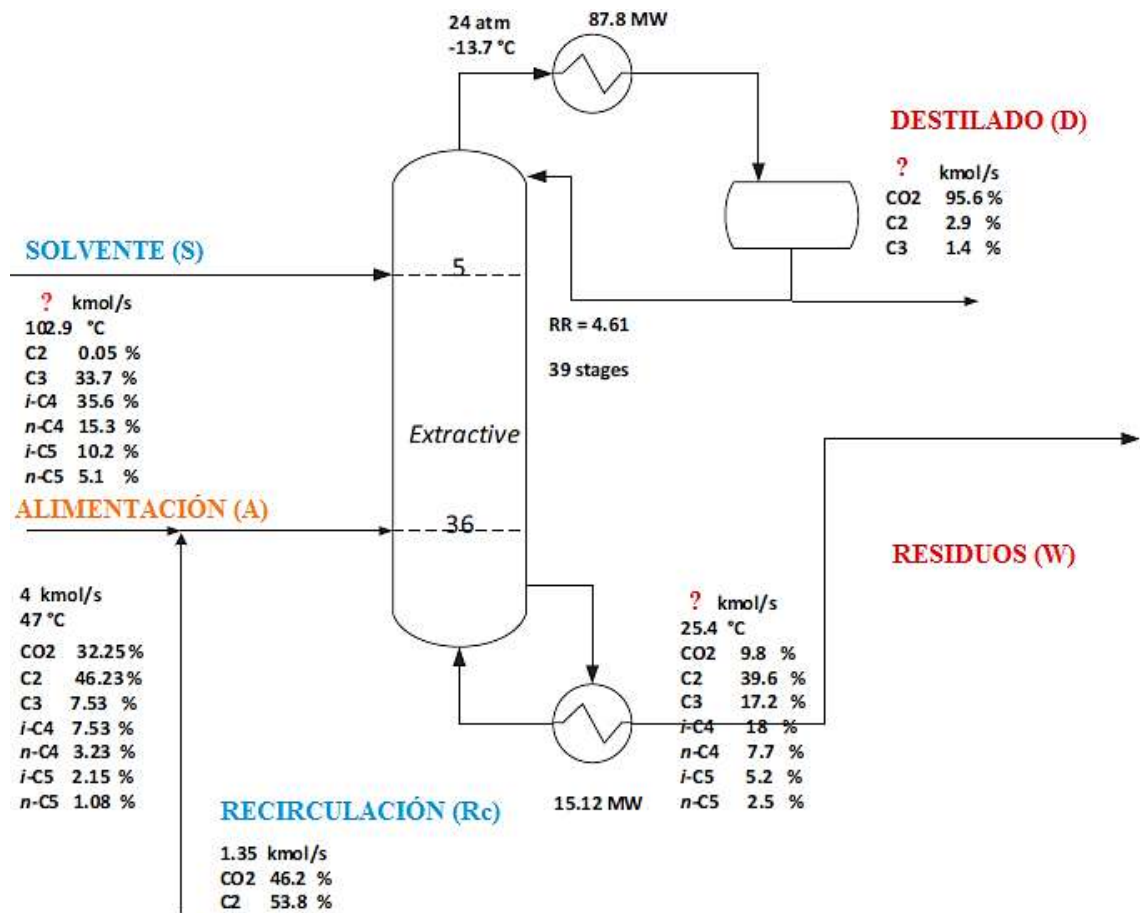


Figura 3-4. Balance de masa general de la torre de extracción

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

#### Balance global de materia:

$$M + S = D + W \quad (\text{Ec 2-4})$$

$$M = A + R_c \quad (\text{Ec 3-4})$$

Donde:

M= Flujo molar de la mezcla entre A y Rc

A = Flujo molar de la alimentación

Rc = Flujo molar de la recirculación

S = Flujo molar del solvente

D = Flujo molar del destilado 1

W = Flujo molar del residuo 1

*Flujos de entrada:*

$$A = 4 \text{ Kmol/s}$$

$$R_c = 1,35 \text{ Kmol/s}$$

*Relación solvente/alimentación (R):*

$$R = \frac{\text{solvente}}{\text{alimentación}} = \frac{S}{A} = 0,6$$

(Ec 4-4)

$$S = 0,6 * (4\text{Kmol/s})$$

$$\mathbf{S = 2,4 \text{ Kmol/s}}$$

*Balance de masa en el mezclador (punto de unión entre A y Rc):*

$$M = A + R_c$$

$$M = (4 + 1,35)\text{Kmol/s}$$

$$\mathbf{M = 5,35 \text{ Kmol/s}}$$

Por tanto,

$$M + S = D + W$$

$$5,35 \text{ Kmol/s} + 2,4 \text{ Kmol/s} = D + W$$

$$7,75 \text{ Kmol/s} = D + W$$

(Ec 5-4)

$$W = 7,75 \text{ Kmol/s} - D$$

*Balance de masa por componente (CO<sub>2</sub>):*

$$A * X_{\text{CO}_2\text{-A}} + R_c * X_{\text{CO}_2\text{-Rc}} = M * X_{\text{CO}_2\text{-M}}$$

(Ec 6-4)

$$M * X_{CO_2-M} + S * X_{CO_2-S} = D * X_{CO_2-D} + W * X_{CO_2-W} \quad (\text{Ec 7-4})$$

Donde:

$X_{CO_2-A}$  = Fracción molar del  $CO_2$  en la alimentación

$X_{CO_2-Rc}$  = Fracción molar del  $CO_2$  en la recirculación

$X_{CO_2-S}$  = Fracción molar del  $CO_2$  en el solvente

$X_{CO_2-D}$  = Fracción molar del  $CO_2$  en el destilado 1

$X_{CO_2-W}$  = Fracción molar del  $CO_2$  en el residuo 1

$$X_{CO_2-M} = \frac{(A * X_{CO_2-A} + Rc * X_{CO_2-Rc})}{M}$$

$$X_{CO_2-M} = \frac{4\text{Kmol/s}(0,3225) + 1,35\text{Kmol/s}(0,462)}{5,35 \text{Kmol/s}}$$

$$X_{CO_2-M} = 0,3577$$

Entonces,

$$5,35(0,3577) + 2,4(0) = D(0,956) + W(0,098)$$

$$5,35(0,3577) = D(0,956) + (7,75 - D)(0,098)$$

$$5,35(0,3577) = D(0,956) + (7,75 * 0,098) - D(0,098)$$

$$5,35(0,3577) - (7,75 * 0,098) = D(0,858)$$

$$D = \frac{[5,35(0,3577) - (7,75 * 0,098)]}{0,858}$$

$$D = 1,34 \text{Kmol/s}$$

Finalmente,

$$W = 7,75 \text{Kmol/s} - 1,34 \text{Kmol/s}$$

$$W = 6,4 \text{Kmol/s}$$

#### 4.6.2 Balance de masa general para la torre de recuperación del solvente

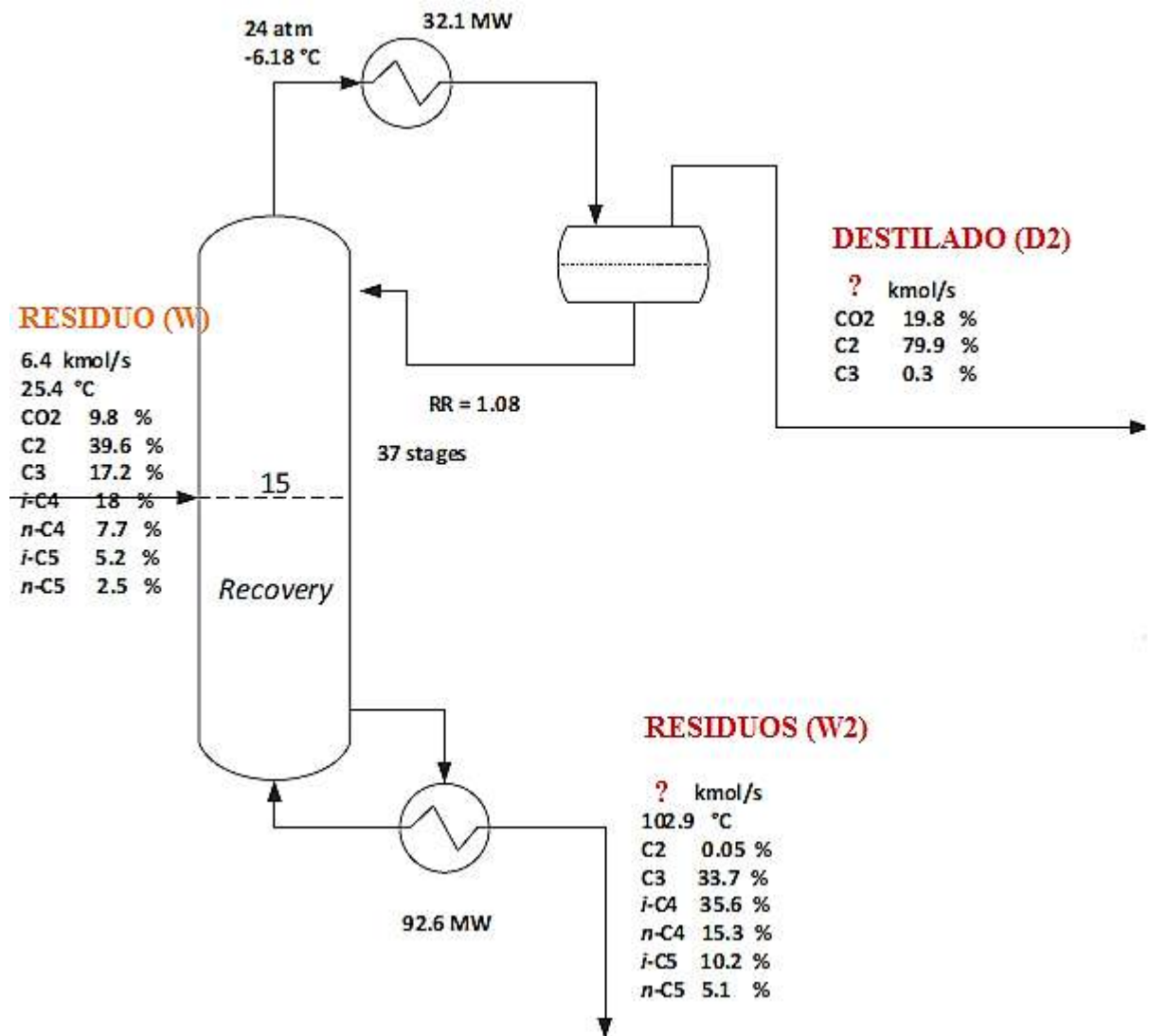


Figura 4-4. Balance de masa general de la torre de recuperación del solvente

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

#### Balance global de materia:

$$W = D2 + W2$$

(Ec 8-4)

Donde:

W= Flujo molar del residuo 1

D2 = Flujo molar del destilado 2

W2 = Flujo molar del residuo 2

*Flujo de entrada:*

$$W = 6,4 \text{ Kmol/s}$$

*Balance de masa por componente (CO<sub>2</sub>):*

$$W * X_{\text{CO}_2\text{-W}} = D2 * X_{\text{CO}_2\text{-D2}} + W2 * X_{\text{CO}_2\text{-W2}} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Donde:

$X_{\text{CO}_2\text{-W}}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el residuo 1

$X_{\text{CO}_2\text{-D2}}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado 2

$X_{\text{CO}_2\text{-W2}}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el residuo 2

Despejando de la ecuación 5-7,

$$6,4 \text{ Kmol/s} = D2 + W2$$

$$D2 = 6,4 \text{ Kmol/s} - W2$$

Tenemos,

$$6,4(0,098) = D2(0,198) + W2(0)$$

$$6,4(0,098) = (6,4 - W2)(0,198)$$

$$6,4(0,098) = (6,4 * 0,198) - W2(0,198)$$

$$W2 = - \frac{[6,4(0,098) - (6,4 * 0,198)]}{0,198}$$

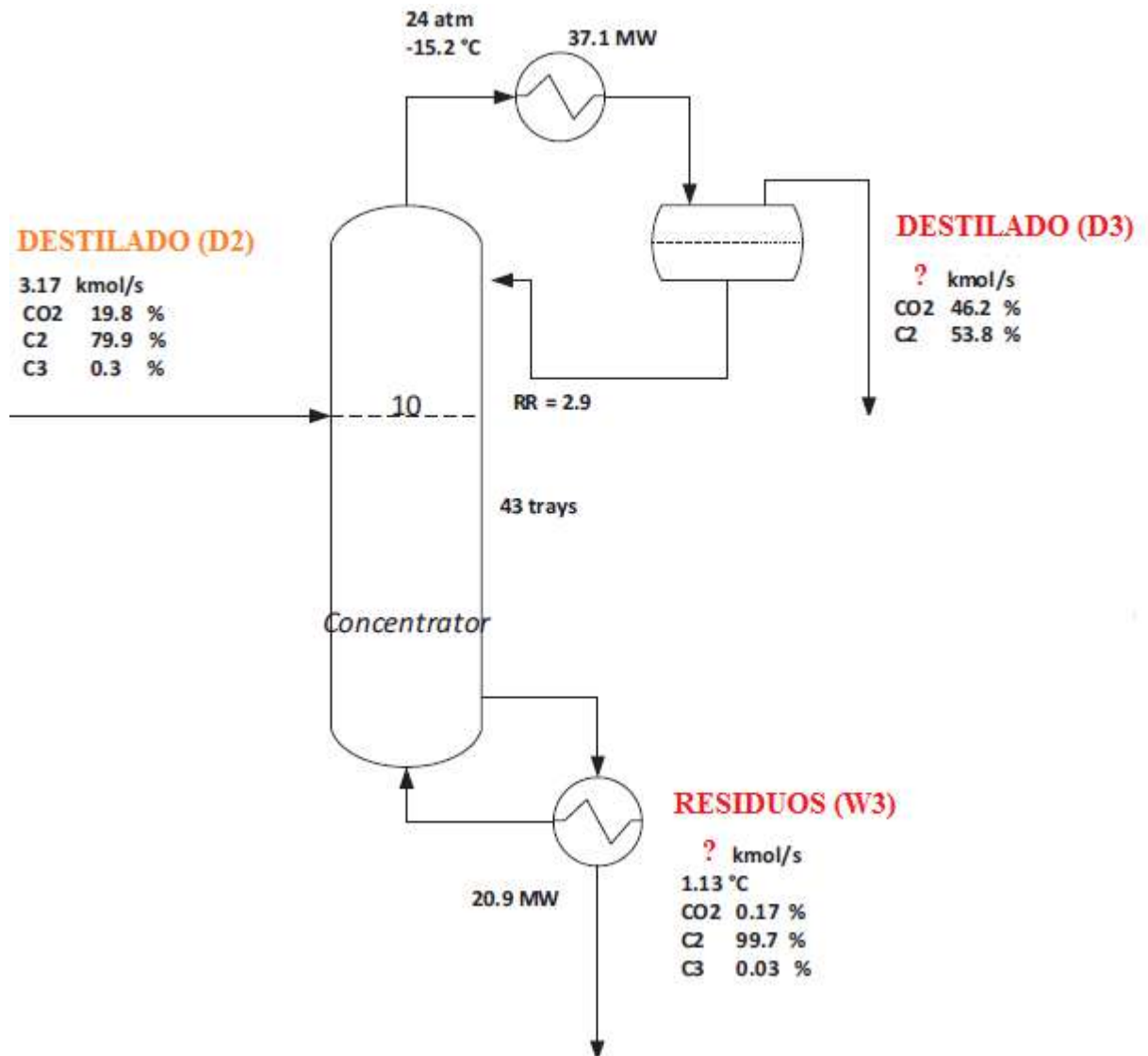
$$\mathbf{W2 = 3,23 \text{ Kmol/s}}$$

Entonces,

$$D2 = 6,4 \text{ Kmol/s} - 3,23 \text{ Kmol/s}$$

$$\mathbf{D2 = 3,17 \text{ Kmol/s}}$$

#### 4.6.3 Balance de masa general para la torre concentradora



**Figura 5-4.** Balance de masa general de la torre concentradora

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Balance global de materia:**

$$D2 = D3 + W3 \quad (\text{Ec 10-4})$$

Donde:

D2 = Flujo molar del destilado 2

D3 = Flujo molar del destilado 3

W3 = Flujo molar del residuo 3



*Flujo de entrada:*

$$D2 = 3,17 \text{ Kmol/s}$$

*Balance de masa por componente (CO<sub>2</sub>):*

$$D2 * X_{\text{CO}_2\text{-D}_2} = D3 * X_{\text{CO}_2\text{-D}_3} + W3 * X_{\text{CO}_2\text{-W}_3} \quad (\text{Ec 11-4})$$

Donde:

$X_{\text{CO}_2\text{-D}_2}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado 2

$X_{\text{CO}_2\text{-D}_3}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado 3

$X_{\text{CO}_2\text{-W}_3}$  = Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el residuo 3

Despejando de la ecuación 5-9,

$$3,17 \text{ Kmol/s} = D3 + W3$$

$$D3 = 3,17 \text{ Kmol/s} - W3$$

Tenemos,

$$3,17(0,198) = D3(0,462) + W3(0,0017)$$

$$3,17(0,198) = (3,17 - W3)(0,462) + W3(0,0017)$$

$$3,17(0,198) - (3,17 * 0,462) = -W3(0,462) + W3(0,0017)$$

$$W3 = - \frac{[3,17(0,198) - (3,17 * 0,462)]}{0,0017 - 0,462}$$

$$\mathbf{W3 = ,81 \text{ Kmol/s}}$$

Entonces,

$$D3 = 3,17 \text{ Kmol/s} - W3$$

$$\mathbf{D3 = 1,36 \text{ Kmol/s}}$$

#### **4.7 Eficiencia del sistema alternativo frente al método convencional.**

Para la evaluación de la eficiencia del proceso alternativo simulado en DWSIM frente al modelo convencional, se toma como referencia a Ebrahimzadeh et al. (2016, p.46).

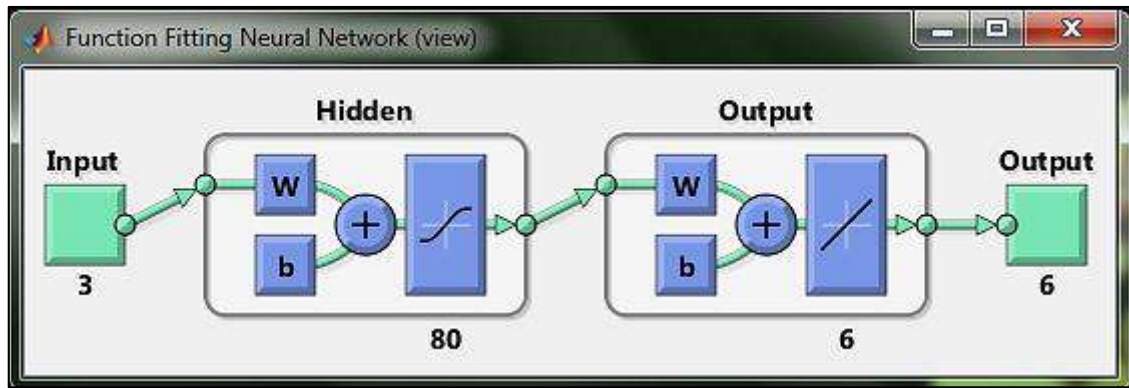
- Esta estrategia demuestra una reducción de aproximadamente el 14% en la demanda total de energía, la mayor parte de la cual era para vapor.
- A su vez, realizaron análisis de economía de procesos en Aspen Plus, indicando una reducción de aprox. un 5% en el capital y una reducción del 10% en los costos operativos al comparar versiones optimizadas de procesos convencionales y nuevos.
- El nuevo proceso reduce los costos anuales totales (TAC) en un 10%, sin comprometer la purificación deseada. Es decir, que en ambos se consigue remover el 95,6% de CO<sub>2</sub> y concentrar más del 90% de etano.
- El nuevo proceso también es más fácil de operar porque no es necesario extraer CO<sub>2</sub> por completo en la columna extractiva.
- El nuevo esquema de separación representa una opción de actualización para las unidades existentes.
- Además, la nueva estrategia de operación produce CO<sub>2</sub> como producto líquido, lo que evita la cantidad significativa de energía requerida para la licuefacción.

De lo mencionado anteriormente, se puede deducir y afirmar que el sistema alternativo es mucho más eficiente que el convencional, hecho que también se puede generalizar independientemente del software empleado para la simulación.

Cabe resaltar que el objetivo principal de este proyecto es emplear un proceso validado para desarrollar una RNA, más no profundizar en los costos operativos reales en ambos métodos.

#### **4.8 Reporte de resultados de la red neuronal artificial (RNA).**

La presente RNA diseñada en MATLAB posee 80 neuronas ocultas y se entrenó con una base de 130 datos con 3 entradas y 6 salidas mediante el algoritmo de regularización Bayesian, con un tiempo de ejecución de 14:28 minutos.



**Figura 6-4.** Esquema de la RNA diseñada en MATLAB

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

#### 4.8.1 Error cuadrático medio (MSE)

**Tabla 8-4.** Error cuadrático medio de cada fase de diseño de la RNA

FASE	MSE
trainPerfomance (entrenamiento)	0,0036
testPerfomance (prueba)	0,0222
valPerfomance (validación)	NaN

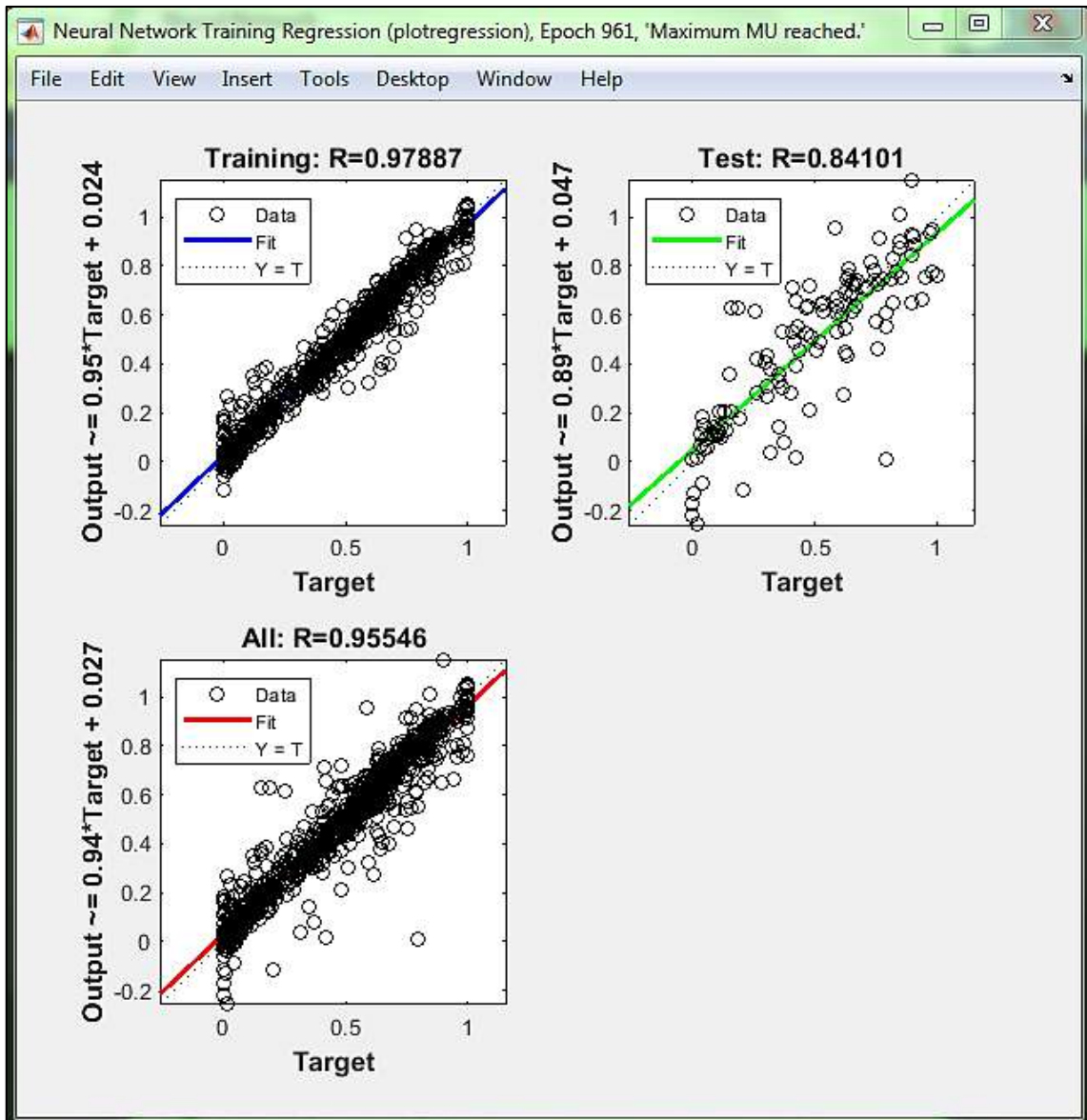
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Se puede observar en la Tabla 8-4 los valores de error cuadrático medio (MSE) tanto para la fase de entrenamiento como la fase de prueba de la RNA, mientras que la fase de validación no posee valor alguno, esto se justifica por lo anteriormente mencionado en la *sección 3.8 Validación de resultados de la RNA*, donde se explica que las redes neuronales artificiales que emplean el algoritmo de regularización Bayesiano (BR) son modelos más robustos que pueden reducir o eliminar la necesidad de una validación, aprovechando esos datos durante el entrenamiento y aprendizaje de la misma.

Además, se considera que mientras más bajos sean los valores del MSE resultan mejores, es decir, mientras más se acerque a cero significa que el error disminuye. Los valores de 0,0036 y 0,0222 son pequeños y aceptables para el correcto funcionamiento de la RNA.

#### 4.8.2 Gráficos sobre el comportamiento de la RNA

En el Gráfico 1-4 se detalla el valor del coeficiente de regresión para el entrenamiento y prueba de la RNA en MATLAB:

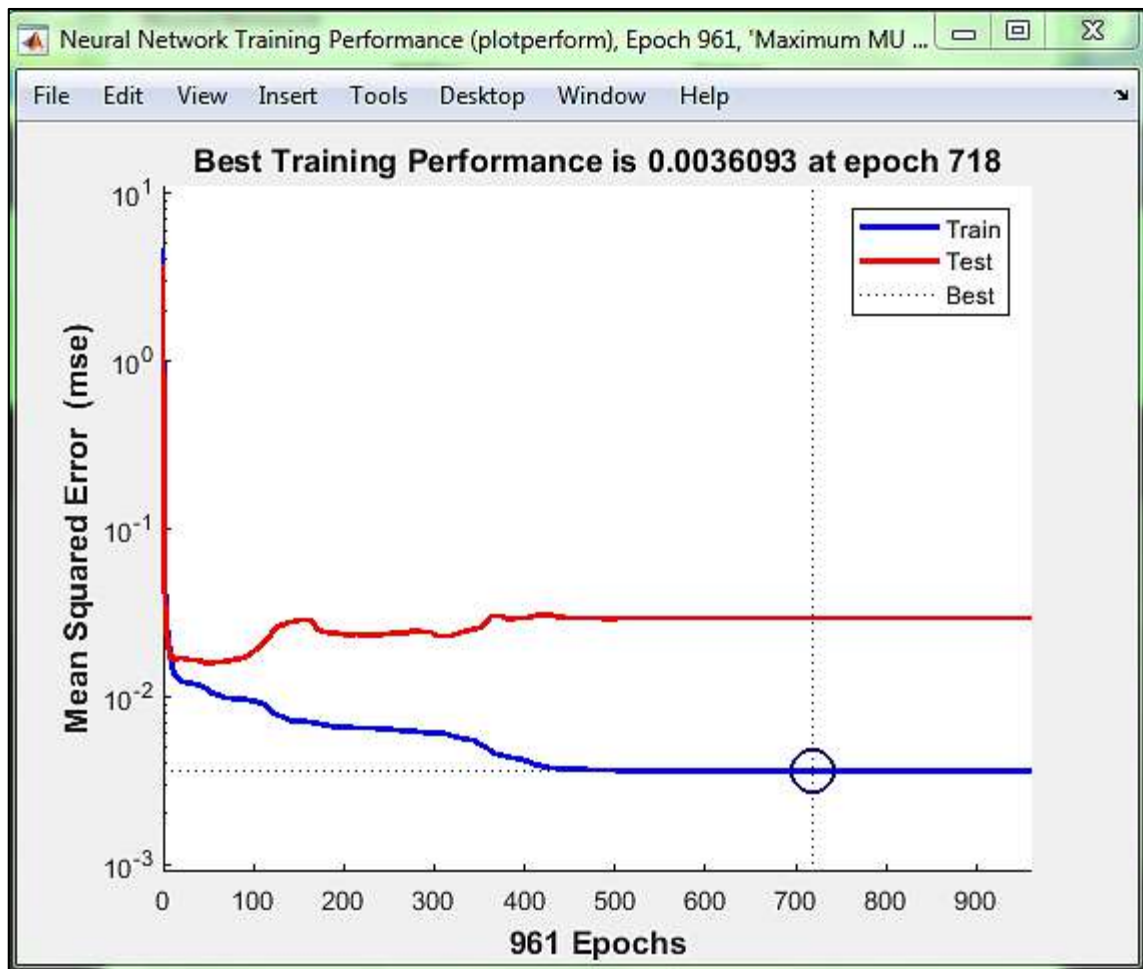


**Gráfico 1-4.** Regresión del entrenamiento y prueba de la RNA

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Se conoce que los valores de regresión (\*R) miden la correlación entre productos y objetivos. Donde, un valor de \*R=1 significa una relación cercana, mientras que \*R=0 corresponde una relación aleatoria.

Se puede observar que existe una dispersión moderada entre las salidas y objetivos de la RNA tanto en la fase de entrenamiento como en la fase de prueba. Sin embargo, MATLAB calcula los valores de \*R como 0,978887 y 0,84101 respectivamente, y un \*R general de 0,95546. Éstos indican que las salidas y los objetivos tienen una correlación cercana bastante aceptable.



**Gráfico 2-4.** Rendimiento del entrenamiento de la RNA

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

El Gráfico 2-4 muestra la evolución del error cuadrático medio durante la fase de entrenamiento, con un MSE final de 0,0036. La función de rendimiento MSE para los datos de prueba son inferiores a cero, lo cual es deseable. Mientras más cercanas sean las curvas del entrenamiento y prueba (azul y rojo respectivamente) mejor es la capacidad predictiva de la red.

#### 4.8.3 Código de la RNA en MATLAB

El script desarrollado en MATLAB tanto para el entrenamiento como para la validación de la RNA, así como los nombres de las variables utilizadas se presentan en los *Anexos A, B, C y D*, e incluye los comandos para:

- Ingresar base de datos
- Función normalizar
- Agrupar valores de entrada y salida
- Diseño de la red neuronal artificial
- Sacar valores máximos y mínimos de cada variable

- Conjunto de resultados predichos (normalizados)
- Conjunto de resultados predichos reales (sin normalizar)
- Gráficos de comparación.

#### 4.8.4 Gráficas de comparación entre las salidas predichas y las deseadas.

En esta sección se analiza dos grupos de datos: el primero corresponde al conjunto de 130 valores con sus 3 entradas y 6 salidas que fueron utilizados durante el entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial para corroborar su capacidad predictiva; mientras que el segundo conjunto contempla 20 valores externos diferentes, que no formaron parte diseño pero que permiten demostrar el aprendizaje, funcionalidad y la eficacia de la RNA al ingresar nuevos valores de entrada.

##### 4.8.4.1 Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA

La Tabla 9-4 muestra los resultados predichos por la RNA y los valores reales obtenidos en DWSIM para la columna de extracción, así como el error porcentual asociados a ellos.

**Tabla 9-4.** Valores reales vs predichos en la columna de extracción (C1)

# DATOS	VALOR REAL CO2	VALOR PREDICHO CO2	ERROR (%)	VALOR REAL ETC1	VALOR PREDICHO ETC1	ERROR (%)
1	0,594777	0,629752877	5,88	0,467132	0,46569936	0,31
2	0,672564	0,687619664	2,24	0,455069	0,460606388	1,22
3	0,632188	0,644569243	1,96	0,475792	0,471893517	0,82
4	0,655529	0,632879162	3,46	0,490058	0,484458306	1,14
5	0,665799	0,640530525	3,8	0,496197	0,503880136	1,55
6	0,658071	0,590748081	10,23	0,493067	0,49396275	0,18
7	0,762628	0,609831974	20,04	0,437331	0,442317436	1,14
8	0,243434	0,552977034	127,16	0,442601	0,409236411	7,54
9	0,996861	0,98681262	1,01	0,346886	0,35864673	3,39
10	0,976171	0,900658636	7,74	0,37811	0,403561986	6,73
11	0,979222	0,913936309	6,67	0,335383	0,365617614	9,01
12	0,695442	0,724389569	4,16	0,482108	0,485308038	0,66
13	0,955525	0,935287434	2,12	0,35976	0,370091073	2,87
14	0,569928	0,575831911	1,04	0,473896	0,481301738	1,56
15	0,0829807	0,151526572	82,6	0,38499	0,390864034	1,53
16	0,730859	0,721082727	1,34	0,388364	0,385150795	0,83
17	0,826545	0,831910078	0,65	0,388844	0,383254818	1,44
18	0,976914	0,923391422	5,48	0,391637	0,382425644	2,35

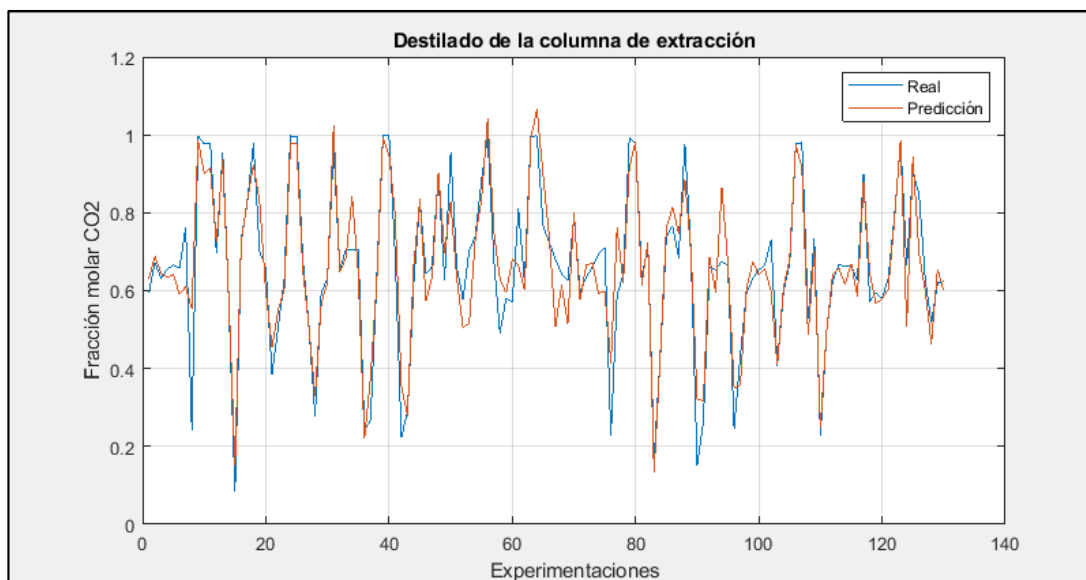
19	0,700103	0,826986862	18,12	0,45312	0,424407172	6,34
20	0,657976	0,59849148	9,04	0,482636	0,477188315	1,13
21	0,385262	0,454507153	17,97	0,449338	0,456328586	1,56
22	0,505309	0,548681894	8,58	0,451681	0,449584009	0,46
23	0,630489	0,605061478	4,03	0,468784	0,481367999	2,68
24	0,997175	0,979054327	1,82	0,353065	0,356725088	1,04
25	0,995935	0,976248936	1,98	0,327366	0,334798068	2,27
26	0,681538	0,656110627	3,73	0,488012	0,480553576	1,53
27	0,507527	0,504544221	0,59	0,469582	0,467490623	0,45
28	0,278926	0,330925802	18,64	0,441979	0,444053817	0,47
29	0,594712	0,567898224	4,51	0,474305	0,477135977	0,6
30	0,631719	0,621069085	1,69	0,476555	0,480729575	0,88
31	0,971858	1,023702584	5,33	0,356367	0,416218115	16,79
32	0,655458	0,649231599	0,95	0,478422	0,468809663	2,01
33	0,703877	0,682792685	3	0,448563	0,468062438	4,35
34	0,704827	0,842257228	19,5	0,449148	0,420512124	6,38
35	0,706827	0,646417568	8,55	0,45915	0,454958353	0,91
36	0,24009	0,221404638	7,78	0,448822	0,457141501	1,85
37	0,268517	0,376528502	40,23	0,443224	0,443254055	0,01
38	0,631832	0,62139976	1,65	0,469811	0,472631962	0,6
39	0,997366	0,991562681	0,58	0,35375	0,340962979	3,61
40	0,99733	0,948634505	4,88	0,320651	0,331439085	3,36
41	0,687658	0,792265828	15,21	0,464971	0,455836751	1,96
42	0,223298	0,353311826	58,22	0,452291	0,414127585	8,44
43	0,289623	0,279601856	3,46	0,453348	0,461380861	1,77
44	0,620792	0,664769784	7,08	0,468117	0,462237394	1,26
45	0,828177	0,832832436	0,56	0,433492	0,443364887	2,28
46	0,644027	0,574797478	10,75	0,478096	0,480572775	0,52
47	0,661778	0,635469198	3,98	0,490987	0,497311808	1,29
48	0,900353	0,902647808	0,25	0,402812	0,400213604	0,65
49	0,626417	0,697771702	11,39	0,470392	0,481913824	2,45
50	0,953704	0,827435716	13,24	0,406301	0,429751087	5,77
51	0,658569	0,628752999	4,53	0,462014	0,46914565	1,54
52	0,576584	0,50562987	12,31	0,472273	0,448312526	5,07
53	0,702735	0,515593374	26,63	0,396268	0,415094046	4,75
54	0,738701	0,734110718	0,62	0,376931	0,383702009	1,8
55	0,882833	0,834990181	5,42	0,38678	0,385899584	0,23
56	0,997037	1,042357104	4,55	0,355362	0,324990818	8,55
57	0,679487	0,753435235	10,88	0,481937	0,477783682	0,86
58	0,491301	0,628372668	27,9	0,455536	0,416045891	8,67
59	0,580026	0,594040181	2,42	0,448557	0,442486823	1,35
60	0,571456	0,680053852	19	0,43497	0,406440343	6,56
61	0,809617	0,665660191	17,78	0,348059	0,36631696	5,25

62	0,61938	0,601587756	2,87	0,469021	0,480815545	2,51
63	0,99611	0,991674727	0,45	0,391304	0,381855582	2,41
64	0,99734	1,064748888	6,76	0,355348	0,345912498	2,66
65	0,765776	0,896878241	17,12	0,38884	0,358230821	7,87
66	0,723917	0,738300046	1,99	0,47684	0,48237816	1,16
67	0,680135	0,506947447	25,46	0,445387	0,456064456	2,4
68	0,643472	0,613674481	4,63	0,469057	0,469251393	0,04
69	0,625897	0,516069123	17,55	0,407499	0,395023681	3,06
70	0,78908	0,799802928	1,36	0,360993	0,365911121	1,36
71	0,59638	0,575862422	3,44	0,469431	0,475166811	1,22
72	0,635179	0,666418328	4,92	0,474935	0,477228007	0,48
73	0,660563	0,669787709	1,4	0,488745	0,48786945	0,18
74	0,694636	0,593598611	14,55	0,464281	0,509583554	9,76
75	0,708584	0,597307514	15,7	0,457303	0,489626587	7,07
76	0,22769	0,414951982	82,24	0,450131	0,449468091	0,15
77	0,587665	0,761305653	29,55	0,456986	0,440438417	3,62
78	0,642972	0,621193653	3,39	0,484116	0,463024465	4,36
79	0,992867	0,917007073	7,64	0,386993	0,397142009	2,62
80	0,979293	0,983139325	0,39	0,330634	0,327695512	0,89
81	0,631452	0,614563893	2,67	0,460266	0,457301683	0,64
82	0,716616	0,724895354	1,16	0,475755	0,464607385	2,34
83	0,169027	0,13263442	21,53	0,438246	0,431903179	1,45
84	0,426672	0,431770986	1,2	0,452168	0,470313041	4,01
85	0,7392	0,760278351	2,85	0,38825	0,385468392	0,72
86	0,766989	0,814197974	6,16	0,388214	0,393776127	1,43
87	0,684951	0,747092729	9,07	0,466849	0,439556933	5,85
88	0,976918	0,884766763	9,43	0,374498	0,389235217	3,94
89	0,69449	0,698157275	0,53	0,450957	0,461787008	2,4
90	0,151131	0,320505704	112,07	0,422214	0,416235334	1,42
91	0,262841	0,317200667	20,68	0,441124	0,427937536	2,99
92	0,658886	0,684839291	3,94	0,450316	0,452058083	0,39
93	0,653199	0,595357817	8,86	0,475538	0,475340251	0,04
94	0,675107	0,86514954	28,15	0,465058	0,455453724	2,07
95	0,663389	0,666547863	0,48	0,465762	0,464639511	0,24
96	0,246499	0,350658399	42,26	0,421732	0,416269147	1,3
97	0,431859	0,358676513	16,95	0,446211	0,450918769	1,06
98	0,594714	0,604727392	1,68	0,4744	0,471391666	0,63
99	0,630033	0,673091015	6,83	0,477522	0,469218586	1,74
100	0,653515	0,640853915	1,94	0,479204	0,477235828	0,41
101	0,666636	0,654754689	1,78	0,474476	0,467457344	1,48
102	0,73138	0,598282627	18,2	0,43258	0,438610738	1,39
103	0,406173	0,409340403	0,78	0,445242	0,465558852	4,56
104	0,597207	0,605869907	1,45	0,461782	0,463073606	0,28



<b>105</b>	0,668563	0,68038387	1,77	0,448566	0,447665939	0,2
<b>106</b>	0,976886	0,973805269	0,32	0,360692	0,372553027	3,29
<b>107</b>	0,98058	0,915162568	6,67	0,335951	0,369805136	10,08
<b>108</b>	0,527894	0,48590753	7,95	0,446136	0,451880068	1,29
<b>109</b>	0,732883	0,702107976	4,2	0,443182	0,428331056	3,35
<b>110</b>	0,228213	0,251103869	10,03	0,454823	0,451868036	0,65
<b>111</b>	0,496559	0,494528947	0,41	0,449627	0,451000414	0,31
<b>112</b>	0,625449	0,642684178	2,76	0,476588	0,473210916	0,71
<b>113</b>	0,666998	0,657221334	1,47	0,468221	0,488567049	4,35
<b>114</b>	0,661706	0,615964018	6,91	0,488107	0,490412448	0,47
<b>115</b>	0,661355	0,669402308	1,22	0,467362	0,466797417	0,12
<b>116</b>	0,626242	0,584783574	6,62	0,467507	0,493475172	5,55
<b>117</b>	0,899442	0,877893076	2,4	0,354469	0,354134324	0,09
<b>118</b>	0,573101	0,644756011	12,5	0,470507	0,462836414	1,63
<b>119</b>	0,595168	0,566103788	4,88	0,474992	0,463462445	2,43
<b>120</b>	0,579854	0,579968813	0,02	0,456316	0,454402612	0,42
<b>121</b>	0,630531	0,602783737	4,4	0,487459	0,483174151	0,88
<b>122</b>	0,788724	0,780662188	1,02	0,391425	0,404217868	3,27
<b>123</b>	0,979196	0,985223392	0,62	0,374524	0,37275554	0,47
<b>124</b>	0,664312	0,509937308	23,24	0,482414	0,498552162	3,35
<b>125</b>	0,903666	0,94482691	4,55	0,356856	0,34237674	4,06
<b>126</b>	0,84854	0,696700081	17,89	0,362615	0,394188666	8,71
<b>127</b>	0,628838	0,602139234	4,25	0,46784	0,46371799	0,88
<b>128</b>	0,516943	0,46380564	10,28	0,465674	0,457380398	1,78
<b>129</b>	0,619535	0,654606907	5,66	0,469567	0,472476043	0,62
<b>130</b>	0,623059	0,600018214	3,7	0,477936	0,472578969	1,12
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>11,036</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>2,548</b>

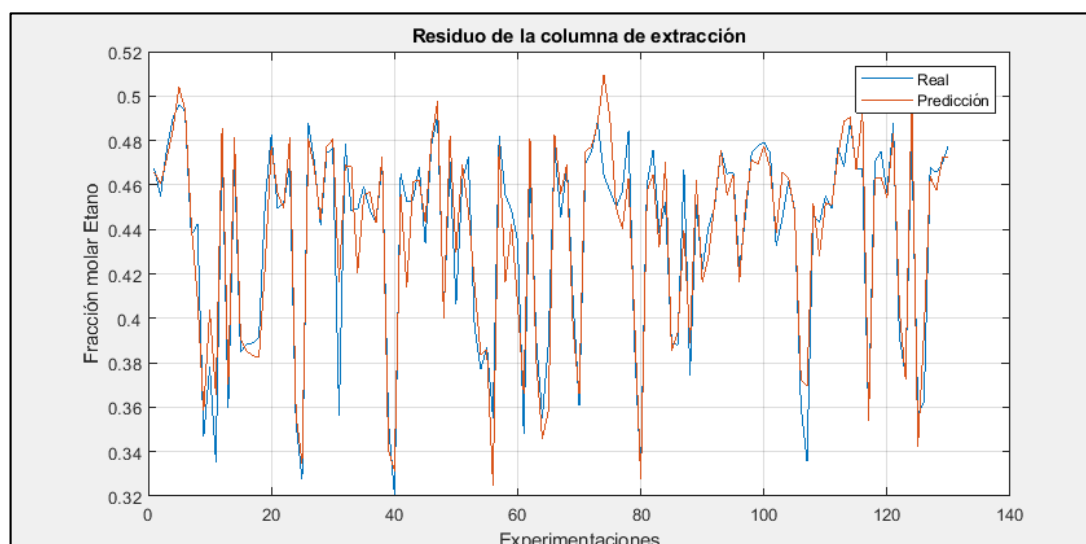
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Gráfico 3-4.** Fracción molar de CO<sub>2</sub> real vs el predicho en la columna de extracción

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

El error porcentual promedio para la fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado de la columna de extracción es de 11,036%.

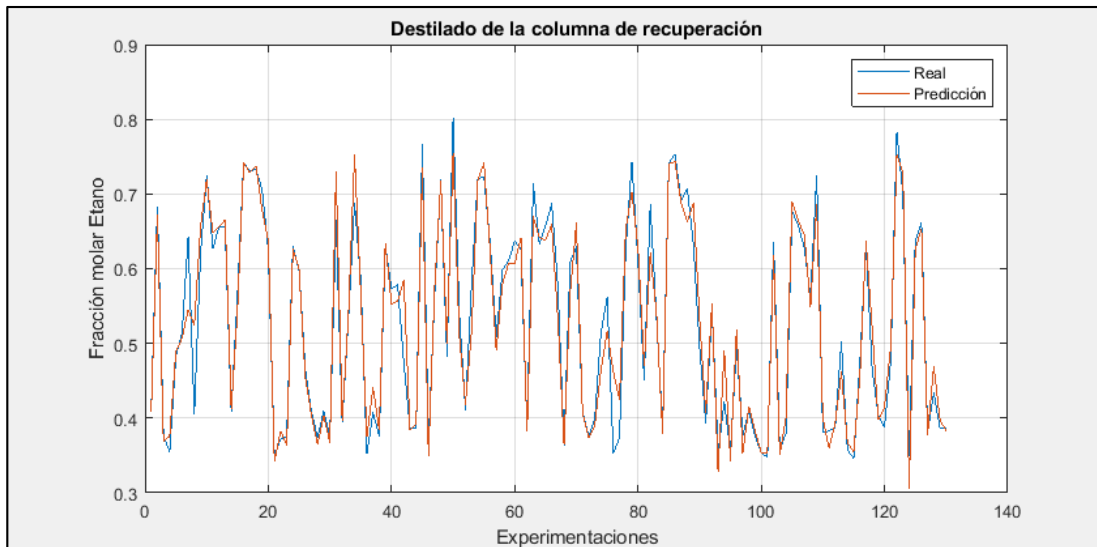


**Gráfico 4-4.** Fracción molar de etano real vs el predicho en la columna de extracción

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

El error porcentual promedio para la fracción molar del etano en el residuo de la columna de extracción es de 2,548%.

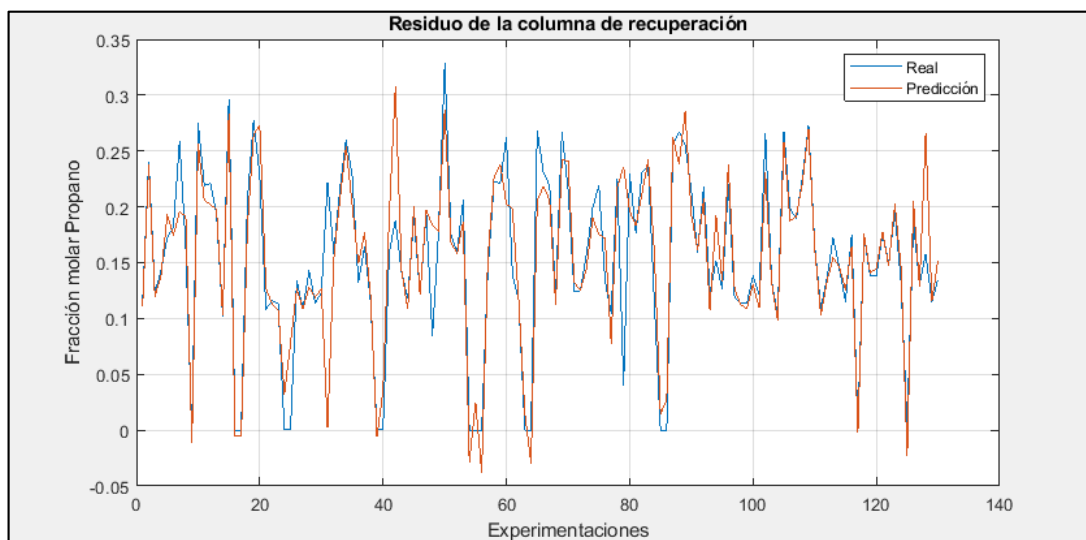
La tabla con los valores reales y predichos correspondiente a la columna de recuperación de solvente con los respectivos errores porcentuales se presenta en el *Anexo E*.



**Gráfico 5-4.** Fracción molar de etano real vs el predicho en la columna de recuperación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

El error porcentual promedio para la fracción molar del etano en el destilado de la columna de recuperación de solvente es de 4,186%.

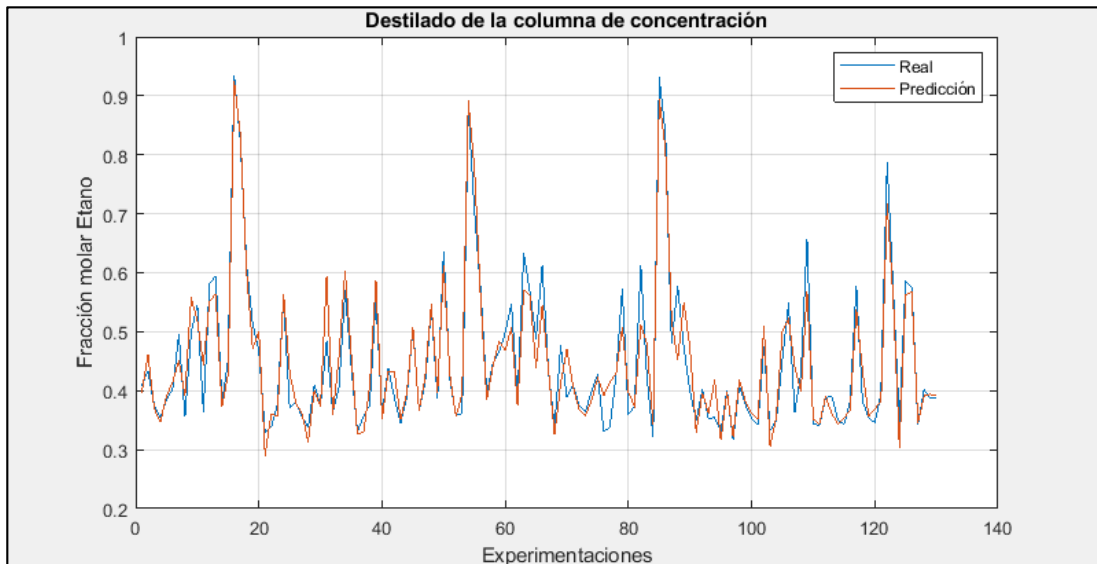


**Gráfico 6-4.** Fracción molar de propano real vs el predicho en la columna de recuperación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Los valores predichos para la fracción molar del propano en el residuo de la columna de recuperación de solvente son los que más variación presentan en comparación con los otros componentes analizados, y este hecho se evidencia por la presencia de 17 valores atípicos entre los que se incluyen números negativos, cuyos errores porcentuales individuales son desorbitadamente elevados. No obstante, el error porcentual promedio excluyendo dichos datos atípicos es de 10,514% (Véase el Anexo E).

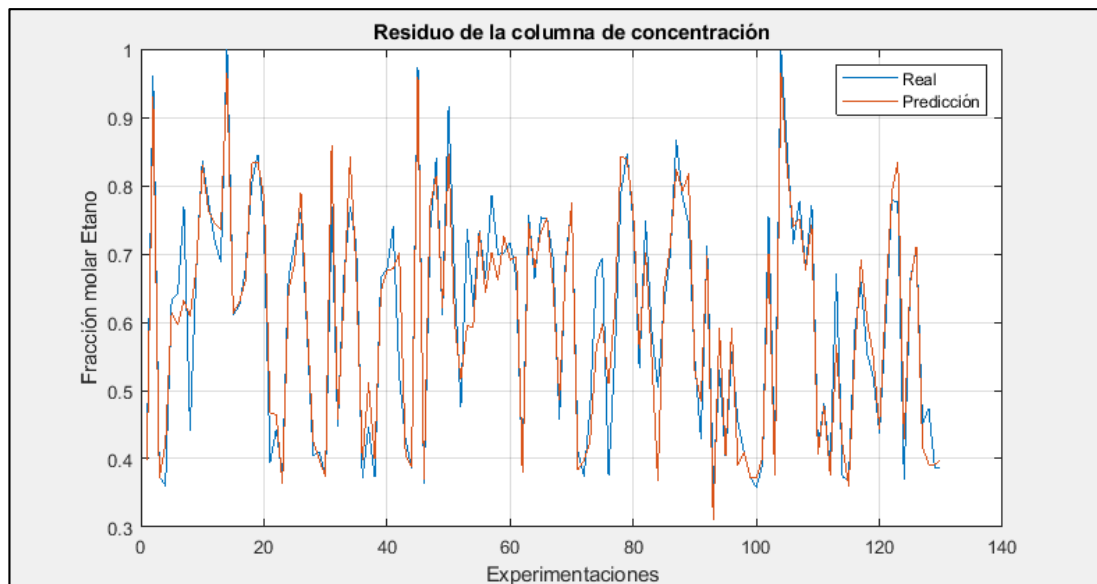
La tabla con los valores reales y predichos correspondiente a la columna concentradora con los respectivos errores porcentuales se presenta en el *Anexo F*.



**Gráfico 7-4.** Fracción molar de etano (destilado) real vs el predicho en la columna concentradora

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

El error porcentual promedio para la fracción molar del etano en el destilado de la columna concentradora es de 5,906%.



**Gráfico 8-4.** Fracción molar de etano (residuo) real vs el predicho en la columna concentradora

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

El error porcentual promedio para la fracción molar del etano en el residuo de la columna concentradora es de 6,092%.

Los gráficos de dispersión expuestos en esta sección evidencian un alto grado de compatibilidad entre los valores reales o fijos (curva azul) y los valores predichos por la red neuronal artificial (curva roja).

Al sobreponer ambas curvas es notable observar ligeros desfases entre los puntos, ya que no son exactamente iguales, lo cual se justifica con el MSE calculado de 0,0036. Esta diferencia entre los valores reales y los estimados, es cercanos a cero, demostrando así la viabilidad del proceso de aprendizaje.

#### 4.8.4.2 Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la RNA

Resulta imperativo validar el funcionamiento de la RNA para poder usarla como una herramienta de predicción confiable durante el estudio del sistema alternativo de destilación extractiva para separar azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano. Para ello, se ingresaron datos de entrada externos a la red que permitieron evaluar su aprendizaje y/o capacidad predictiva.

Se ha seleccionado un conjunto de 20 datos adicionales diferentes (con las 3 entradas: P, T y R) para obtener las fracciones molares de los productos de las tres torres de destilación como resultados predichos, y posteriormente compararlos con los valores reales calculados en DWSIM.

**Tabla 10-4.** Valores reales vs predichos en la columna C1 para la validación de la RNA

# DATOS	VALOR REAL CO2	VALOR PREDICHO CO2	ERROR (%)	VALOR REAL ETC1	VALOR PREDICHO ETC1	ERROR (%)
1	0,642923	0,625506974	2,71	0,48414	0,474475394	2
2	0,634886	1,057824743	66,62	0,420221	0,354653671	15,6
3	0,661138	0,645940591	2,3	0,47509	0,471142027	0,83
4	0,632394	0,89827417	42,04	0,472205	0,448904707	4,93
5	0,648642	0,210926683	67,48	0,478034	0,496465274	3,86
6	0,839886	0,141634423	83,14	0,346254	0,412309829	19,08
7	0,56417	0,647243186	14,72	0,46152	0,416210869	9,82
8	0,61165	0,575302272	5,94	0,461395	0,477933468	3,58
9	0,614917	0,904013257	47,01	0,456463	0,424282928	7,05
10	0,669435	0,6057324	9,52	0,470012	0,454430979	3,32
11	0,996938	0,904440974	9,28	0,370152	0,390126973	5,4
12	0,653339	0,589352514	9,79	0,475318	0,477218094	0,4
13	0,659026	0,668196313	1,39	0,486517	0,47829193	1,69
14	0,666873	0,765959248	14,86	0,468307	0,455964531	2,64

15	0,744233	0,806782631	8,4	0,419815	0,417429777	0,57
16	0,259962	0,516118305	98,54	0,466589	0,484115461	3,76
17	0,633907	0,453799365	28,41	0,47443	0,492550307	3,82
18	0,633664	0,693693915	9,47	0,452565	0,40727144	10,01
19	0,190591	0,725596888	280,71	0,455515	0,419574398	7,89
20	0,221425	0,916042508	313,7	0,447714	0,383090053	14,43
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>43,964*</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>6,034</b>

\*El valor resaltado corresponde a un dato atípico y no se incluye en el cálculo del error porcentual promedio.

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

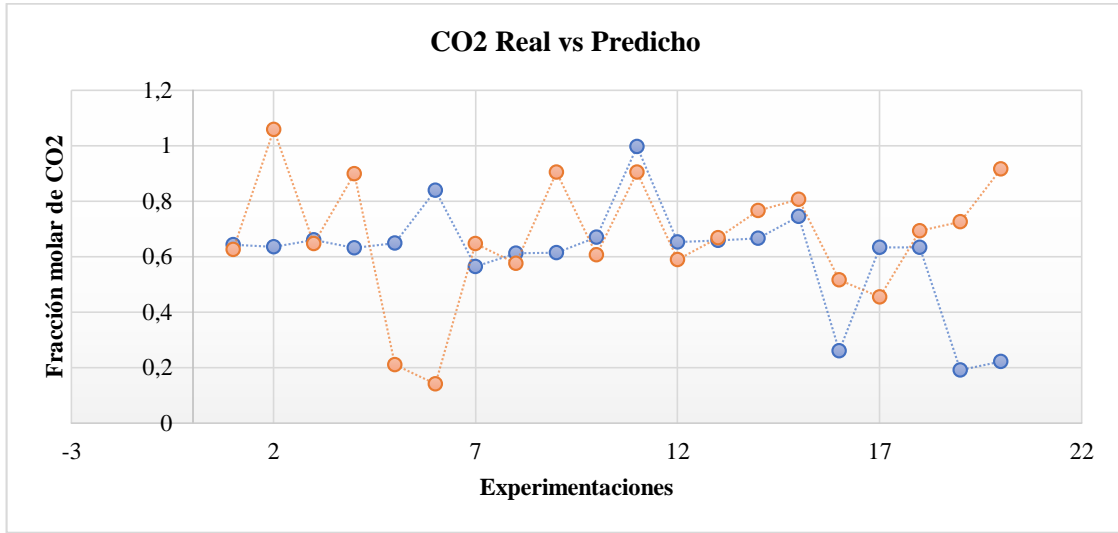


Gráfico 9-4. Fracción molar de CO2 de la columna de extracción en la validación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

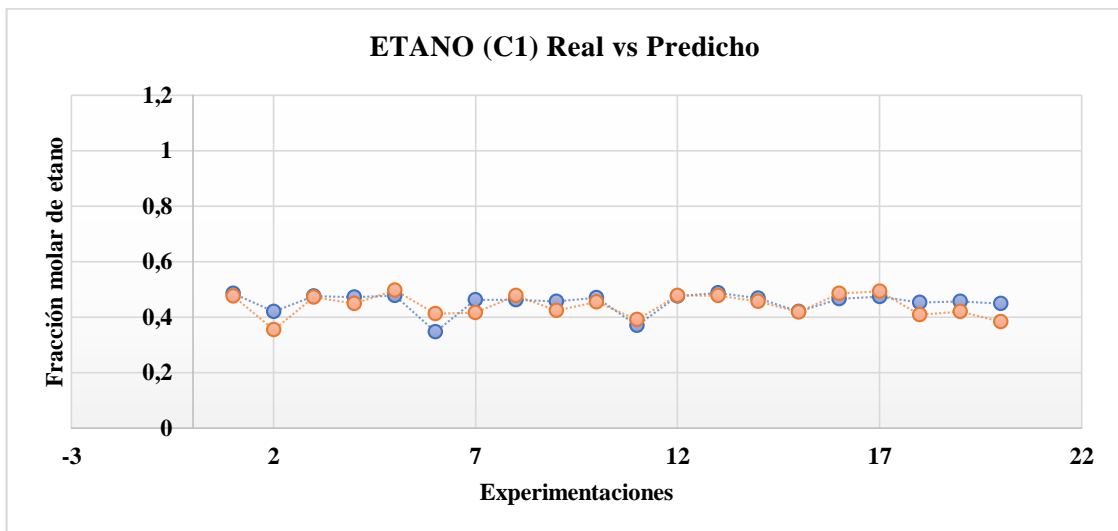


Gráfico 10-4. Fracción molar de etano de la columna de extracción en la validación

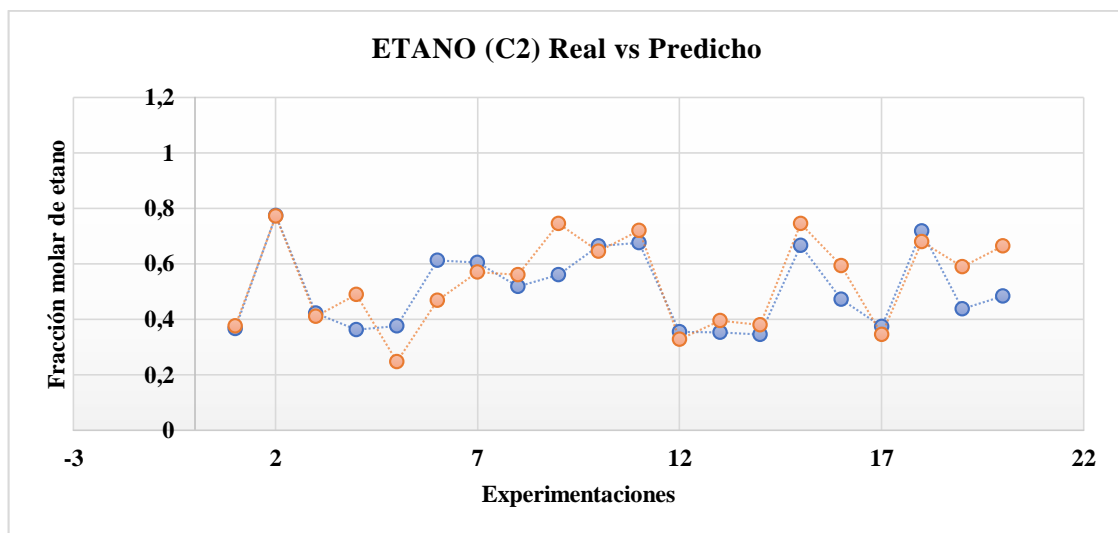
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 11-4.** Valores reales vs predichos en la columna C2 para la validación de la RNA

# DATOS	VALOR REAL ETC2	VALOR PREDICHO ETC2	ERROR (%)	VALOR REAL PROP	VALOR PREDICHO PROP	ERROR (%)
1	0,36558	0,374840321	2,53	0,147898	0,154371975	4,38
2	0,773942	0,771326299	0,34	0,316432	0,192369344	39,21
3	0,422485	0,41036419	2,87	0,164915	0,160452579	2,71
4	0,362787	0,48801786	34,52	0,128045	0,168402124	31,52
5	0,375239	0,247520386	34,04	0,110526	0,018138828	83,59
6	0,612309	0,467506383	23,65	0,0310418	0,166915431	437,71
7	0,603926	0,568748766	5,82	0,217157	0,194210936	10,57
8	0,518638	0,560109379	8	0,199936	0,118547761	40,71
9	0,559598	0,744161149	32,98	0,21616	0,102708652	52,48
10	0,663064	0,64446329	2,81	0,242777	0,271001615	11,63
11	0,675046	0,719449556	6,58	0,000034284	0,122962736	358559,25
12	0,35378	0,326852475	7,61	0,124736	0,108343417	13,14
13	0,351668	0,395519854	12,47	0,145816	0,157010889	7,68
14	0,344712	0,379729837	10,16	0,11366	0,140533763	23,64
15	0,666541	0,743900523	11,61	0,289751	0,284248142	1,9
16	0,471868	0,592435638	25,55	0,179547	0,257717561	43,54
17	0,374306	0,344791944	7,89	0,149775	0,128272253	14,36
18	0,716995	0,678567854	5,36	0,274166	0,255577678	6,78
19	0,436471	0,588963902	34,94	0,179403	0,179587491	0,1
20	0,483883	0,663730313	37,17	0,189719	0,209218419	10,28
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>15,345</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>22,123*</b>

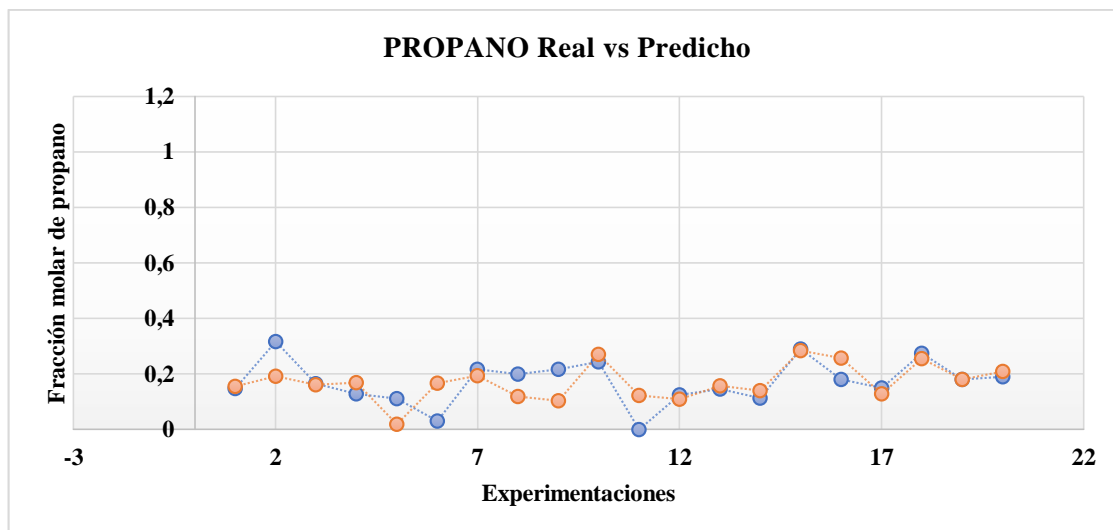
\*Los valores resaltados corresponden a un dato atípico y no se incluye en el cálculo del error porcentual promedio.

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Gráfico 11-4.** Fracción molar de etano de la columna de recuperación en la validación

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Gráfico 12-4.** Fracción molar de propano de la columna de recuperación en la validación

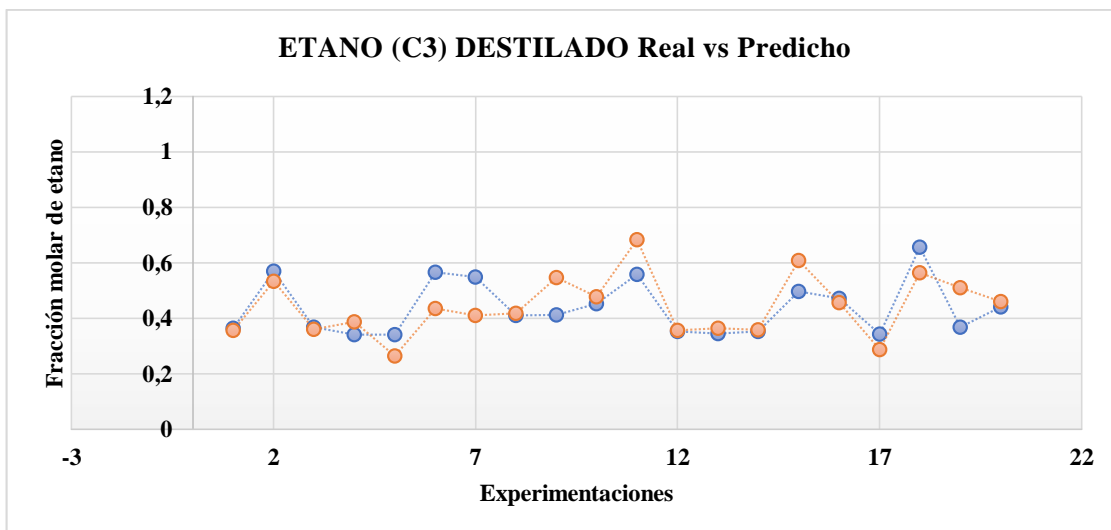
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 12-4.** Valores reales vs predichos en la columna C3 para la validación de la RNA

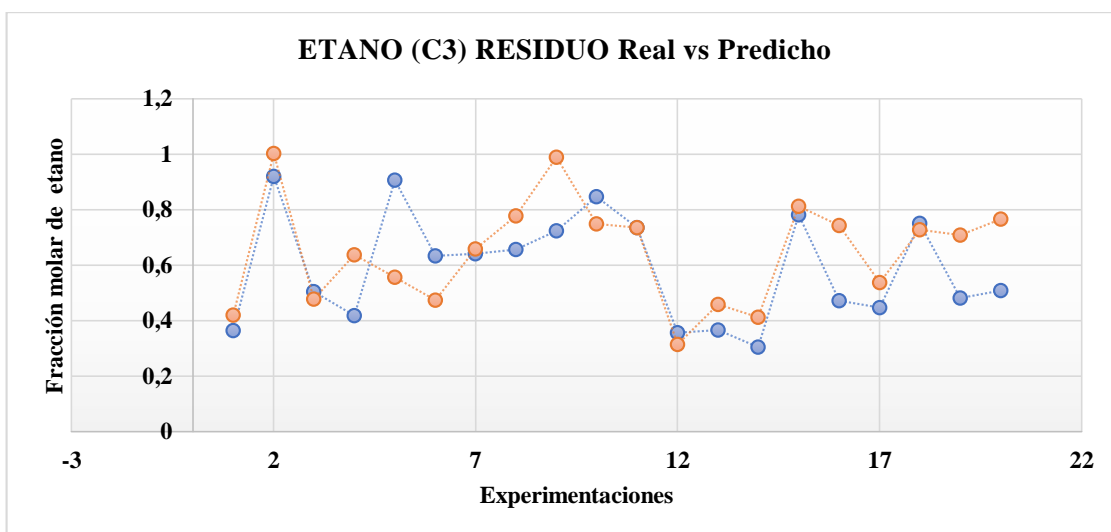
# DATOS	VALOR REAL ETC3DIS	VALOR PREDICHO ETC3DIS	ERROR (%)	VALOR REAL ETC3BOT	VALOR PREDICHO ETC3BOT	ERROR (%)
1	0,365622	0,356220715	2,57	0,36549	0,420426449	15,03
2	0,571013	0,53491015	6,32	0,920269	1,003751538	9,07
3	0,367786	0,361559992	1,69	0,505026	0,477419516	5,47
4	0,340818	0,38863204	14,03	0,418668	0,637207589	52,2
5	0,341292	0,265007795	22,35	0,906585	0,556277236	38,64
6	0,567006	0,436050917	23,1	0,633789	0,474290154	25,17
7	0,54869	0,410001432	25,28	0,64128	0,659151927	2,79
8	0,411548	0,41801376	1,57	0,657635	0,777278913	18,19
9	0,412596	0,546505219	32,46	0,724227	0,989261621	36,6
10	0,452351	0,478526309	5,79	0,847414	0,748899541	11,63
11	0,559132	0,684455581	22,41	0,735904	0,736613307	0,1
12	0,35315	0,35754506	1,24	0,357533	0,314382748	12,07
13	0,344698	0,365350151	5,99	0,366184	0,458833536	25,3
14	0,352669	0,359063485	1,81	0,304872	0,412487755	35,3
15	0,49809	0,608266623	22,12	0,781908	0,813310803	4,02
16	0,471569	0,457320278	3,02	0,472	0,743130885	57,44
17	0,342739	0,288527649	15,82	0,44805	0,536936191	19,84
18	0,6575	0,56537466	14,01	0,750866	0,728851395	2,93
19	0,369425	0,511346989	38,42	0,482207	0,708250068	46,88
20	0,441909	0,46169501	4,48	0,509371	0,766891705	50,56
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>13,224</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>23,462</b>

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.





**Gráfico 13-4.** Fracción molar de etano (destilado) de la columna concentradora en la validación  
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



**Gráfico 14-4.** Fracción molar de etano (residuo) de la columna concentradora en la validación  
Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

Los gráficos de dispersión expuestos en esta sección muestran un grado de compatibilidad moderado entre los valores reales o fijos (curva azul) y los valores predichos por la red neuronal artificial (curva anaranjada).

Al sobreponer ambas curvas se puede observar que existe menos concordancia entre los puntos e incluso se evidencian un par de valores atípicos. Por esta razón, aunque se considere aceptable el funcionamiento de la RNA con las nuevas entradas asignadas, se realiza en la sección siguiente el análisis estadístico correspondiente para determinar si la RNA diseñada es confiable y apta como herramienta de predicción. .

#### 4.9 Resultados del análisis estadístico en SPSS.

Si bien, los valores y las gráficas provenientes de la RNA suponen resultados satisfactorios, es necesario llevar a cabo un análisis estadístico comparativo de dichos resultados para determinar su nivel de confiabilidad en la predicción de las fracciones molares de CO<sub>2</sub>, etano y propano.

Para el presente estudio se utilizó el programa estadístico informático SPSS y como muestra el conjunto de datos empleados en la validación de la red.

**Tabla 13-4.** ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
<b>Fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado de la columna 1</b>					
Entre grupos	0,034362	1	0,034362	0,78	0,3832
Intra grupos	1,67787	38	0,0441544		
Total (Corr.)	1,71223	39			
<b>Fracción molar del etano en el residuo de la columna 1</b>					
Entre grupos	0,00105898	1	0,00105898	0,70	0,4071
Intra grupos	0,0572586	38	0,00150681		
Total (Corr.)	0,0583176	39			
<b>Fracción molar del etano en el destilado de la columna 2</b>					
Entre grupos	0,00835678	1	0,00835678	0,37	0,5490
Intra grupos	0,868442	38	0,0228537		
Total (Corr.)	0,876799	39			
<b>Fracción molar del propano en el residuo de la columna 2</b>					
Entre grupos	0,0000238756	1	0,0000238756	0,00	0,9464
Intra grupos	0,198313	38	0,00521876		
Total (Corr.)	0,198337	39			
<b>Fracción molar del etano en el destilado de la columna 3</b>					
Entre grupos	0,000179652	1	0,000179652	0,02	0,8971
Intra grupos	0,402706	38	0,0105975		
Total (Corr.)	0,402886	39			
<b>Fracción molar del etano en el residuo de la columna 3</b>					
Entre grupos	0,0321702	1	0,0321702	0,88	0,3533
Intra grupos	1,38431	38	0,0364292		
Total (Corr.)	1,41648	39			

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente entre-grupos y un componente dentro-de-grupos.

La razón-F es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos. Debido a que el valor-P de la razón-F es mayor que 0,05 en todos los casos, no existe una diferencia

estadísticamente significativa entre las medias de las 2 variables comparadas, con un nivel del 95,0% de confianza.

**Tabla 14-4.** Medias con intervalos de confianza del 95,0%

<b>Columna 1</b>					
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
CO2 Real	20	0,609	0,0469864	0,541741	0,676259
CO2 Predicho	20	0,667619	0,0469864	0,60036	0,734878
Total	40	0,63831			
Etano Real	20	0,452113	0,00867988	0,439688	0,464538
Etano Predicho	20	0,441822	0,00867988	0,429397	0,454247
Total	40	0,446967			
<b>Columna 2</b>					
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Etano Real	20	0,506642	0,0338036	0,458253	0,555031
Etano Predicho	20	0,53555	0,0338036	0,487161	0,583939
Total	40	0,521096			
Propano Real	20	0,171075	0,0161536	0,147951	0,194198
Propano Predicho	20	0,16953	0,0161536	0,146406	0,192653
Total	40	0,170302			
<b>Columna 3</b>					
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Etano Dist Real	20	0,43848	0,023019	0,405529	0,471431
Etano Dist Predicho	20	0,442719	0,023019	0,409768	0,47567
Total	40	0,440599			
Etano Bott Real	20	0,591464	0,0426785	0,530371	0,652557
Etano Bott Predicho	20	0,648183	0,0426785	0,58709	0,709276
Total	40	0,619823			

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

La Tabla 14-4 muestra la media para cada columna de datos, así como también el error estándar de cada media. El error estándar es una medida de la variabilidad de su muestreo que resulta de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel.

La tabla exhibe además 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.

**Tabla 15-4.** Prueba de Kruskal-Wallis

Columna 1		
	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
CO2 Real	20	19,05
CO2 Predicho	20	21,95
Estadístico = 0,615366 Valor-P = 0,432774		
Etano Real	20	21,75
Etano Predicho	20	19,25
Estadístico = 0,457317 Valor-P = 0,49888		
Columna 2		
	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
Etano Real	20	19,25
Etano Predicho	20	21,75
Estadístico = 0,457317 Valor-P = 0,49888		
Propano Real	20	20,85
Propano Predicho	20	20,15
Estadístico = 0,0358537 Valor-P = 0,849818		
Columna 3		
	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
Etano Dist Real	20	19,95
Etano Dist Predicho	20	21,05
Estadístico = 0,0885366 Valor-P = 0,766046		
Etano Bott Real	20	18,75
Etano Bott Predicho	20	22,25
Estadístico = 0,896341 Valor-P = 0,343763		

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

La prueba de Kruskal-Wallis ha sido empleada para evaluar la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las 2 columnas es la misma, debido a la preocupación de la presencia de valores atípicos.

Primero se combinan los datos de todas las columnas y se ordenan de menor a mayor. Después, se calcula el rango (rank) promedio para los datos de cada columna. Puesto que el valor-P es mayor que 0,05 en todos los casos, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel del 95,0% de confianza.

**Tabla 16-4.** Resumen Estadístico (CO2 - columna 1)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo	Máximo
CO2 Real	20	0,609	0,190651	31,3056%	0,190591	0,996938
CO2 Predicho	20	0,667619	0,227949	34,1436%	0,141634	1,05782
Total	40	0,63831	0,209531	32,8259%	0,141634	1,05782

	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada
CO2 Real	0,806347	-1,54051	1,45767
CO2 Predicho	0,91619	-1,24624	0,661418
Total	0,91619	-1,60721	0,968072

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 17-4.** Resumen Estadístico (Etano - columna 1)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo	Máximo
Etano Real	20	0,452113	0,0368855	8,15848%	0,346254	0,486517
Etano Predicho	20	0,441822	0,040658	9,20234%	0,354654	0,496465
Total	40	0,446967	0,0386694	8,65151%	0,346254	0,496465
	Rango		Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada		
Etano Real	0,140263		-3,51775	3,07274		
Etano Predicho	0,141812		-0,862978	-0,677577		
Total	0,150211		-2,75087	0,455687		

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

El sesgo estandarizado y la curtosis estandarizada se encuentran fuera del rango de -2 a +2 para la columna del Etano real. Esto indica algo de no normalidad significativa en los datos, lo cual viola el supuesto de que los datos provienen de distribuciones normales. Por esta razón, se empleó la prueba de Kruskal-Wallis para comparar las medianas en lugar de las medias, ya que al ser un método no paramétrico que sirve para probar si un grupo de datos proviene de la misma población, no asume normalidad en los datos, en oposición al tradicional ANOVA.

**Tabla 18-4.** Resumen Estadístico (Etano - columna 2)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo	Máximo
Etano Real	20	0,506642	0,141492	27,9275%	0,344712	0,773942
Etano Predicho	20	0,53555	0,160273	29,9268%	0,24752	0,771326
Total	40	0,521096	0,14994	28,774%	0,24752	0,773942
	Rango		Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada		
Etano Real	0,42923		0,770523	-1,14832		
Etano Predicho	0,523806		-0,228999	-1,14423		
Total	0,526422		0,336602	-1,6739		

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 19-4.** Resumen Estadístico (Propano - columna 2)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo
Propano Real	20	0,171075	0,0787909	46,0564%	0,000034284
Propano Predicho	20	0,16953	0,0650348	38,3619%	0,0181388
Total	40	0,170302	0,0713131	41,8745%	0,000034284

	Máximo	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada
Propano Real	0,316432	0,316398	-0,425745	0,306457
Propano Predicho	0,284248	0,266109	-0,141083	0,352474
Total	0,316432	0,316398	-0,427894	0,341434

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 20-4.** Resumen Estadístico (Etano Dist - columna 3)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo
Etano Dist Real	20	0,43848	0,0977829	22,3004%	0,340818
Etano Dist Predicho	20	0,442719	0,107859	24,3629%	0,265008
Total	40	0,440599	0,101639	23,0683%	0,265008
	Máximo	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada	
Etano Dist Real	0,6575	0,316682	1,4151		-0,503183
Etano Dist Predicho	0,684456	0,419448	0,889543		-0,105554
Total	0,684456	0,419448	1,53296		-0,502917

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

**Tabla 21-4.** Resumen Estadístico (Etano Bott - columna 3)

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo
Etano Bott Real	20	0,591464	0,193481	32,7122%	0,304872
Etano Bott Predicho	20	0,648183	0,188211	29,0368%	0,314383
Total	40	0,619823	0,190578	30,7471%	0,304872
	Máximo	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada	
Etano Bott Real	0,920269	0,615397	0,424206		-1,10091
Etano Bott Predicho	1,00375	0,689369	0,240077		-0,471521
Total	1,00375	0,69888	0,407932		-1,17757

**Realizado por:** Dávila, Wendy, 2020.

## CONCLUSIONES

- Se validó un sistema alternativo de destilación extractiva para la separación de azeótropos de CO<sub>2</sub>-etano en procesos mejorados de recuperación de petróleo, específicamente para el tratamiento del gas natural posterior a la desmetanización, mediante su simulación en el software libre DWSIM. El sistema alternativo fue propuesto por Ebrahimzadeh et al. (2016) y publicado en la revista Applied Thermal Engineering; mismo que sirvió de referente para establecer las bases de diseño, condiciones de operación y evaluación del funcionamiento.
- La simulación desarrollada en DWSIM presentó resultados casi idénticos a los valores del referente, demostrando a su vez que esta propuesta es mucho más eficiente que el modelo convencional, ya que el nuevo proceso reduce un 10% de los costos anuales totales y costos operativos sin comprometer la purificación deseada, es decir, remover más del 95% de CO<sub>2</sub> y concentrar más del 90% de etano. Además durante la operación se produce CO<sub>2</sub> como producto líquido, lo que evita una cantidad significativa de energía para la licuefacción, reduciendo consecuentemente, el consumo energético.
- La simulación en DWSIM permitió remover el 95,37% de CO<sub>2</sub> presentes en el gas natural (de composición típica) alimentado en la columna de extracción, y se recuperó un 91,56% de etano en la columna concentradora. A su vez parte de los LGN provenientes de la columna de recuperación, son utilizados como solvente sin necesidad de recurrir a uno externo.
- Mediante la utilización de la herramienta Neural Net Fitting del software matemático MATLAB y una base de datos provenientes de la simulación en DWSIM, se diseñó una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir satisfactoriamente las fracciones molares del CO<sub>2</sub>, etano y propano en el sistema alternativo de destilación extractiva. La RNA diseñada consta de 80 neuronas ocultas y fue entrada con el algoritmo de regularización Bayesian, con un MSE de 0,0036 y un coeficiente de regresión total de 0,95546.
- La RNA consta de tres variables de entrada: presión (P), temperatura (T) y relación solvente/alimentación (R), y es capaz de predecir como variables de salida la fracción molar del CO<sub>2</sub> en el destilado y del etano en el residuo de la columna de extracción (C1), la fracción molar del etano en el destilado y del propano en el residuo de la columna de recuperación de solvente (C2), y las fracciones molares del etano en el destilado y en el residuo de la columna concentradora (C3).
- Se validaron los resultados obtenidos de la red neuronal artificial (RNA) a través de un análisis estadístico comparativo entre los valores reales de las fracciones molares de CO<sub>2</sub>, etano y propano calculados en DWSIM y los valores predichos por la red, dando un valor de

confiabilidad general del 95%, demostrando que no existen diferencias significativas entre los datos analizados.

## **RECOMENDACIONES**

- Ampliar el nivel de aprendizaje de la RNA mediante la adición de nuevas variables de entrada y salida. En este caso la RNA diseñada se limita a calcular las fracciones molares de los tres componentes principales en el sistema de destilación partiendo de tres condiciones típicas de entrada (P, T y R), no obstante, resultaría novedoso que se completara la predicción para los demás compuestos o para el cálculo de nuevos parámetros (flujos másicos, molares, de calor etc.), así también se pueden condicionar nuevas entradas.
- Aplicar la codificación propuesta para diseñar y/o generar otras redes que permitan predecir los parámetros de funcionamiento en diferentes procesos químicos o industriales. El campo de las RNA actualmente se encuentra poco explorado en otros tipos de procesos que no sean destilación.
- Diseñar y evaluar el comportamiento de nuevas redes neuronales artificiales (RNA) empleando otros tipos de algoritmos de entrenamiento como Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient.
- La RNA propuesta puede ser la base para la creación de una aplicación o alguna herramienta computacional más didáctica, completa y novedosa que permita a los estudiantes y profesionales de Ingeniería Química estudiar y analizar procesos químicos diversos.
- Realizar un correcto procesamiento de datos para evitar que la base generada contenga valores atípicos o mal recolectados, puesto que pueden influir en el entrenamiento, aprendizaje y validación de la RNA, provocando el incremento del error cuadrático medio y mayor dispersión de datos durante la regresión.



## GLOSARIO

**Azeótropo:** mezcla de componentes químicos que tienen composiciones idénticas de la fase líquida y de vapor en equilibrio entre sí.

**Destilación:** operación unitaria que permite la separación de los componentes de una solución por diferencia de volatilidades o rangos de temperatura.

**Destilación extractiva:** técnica utilizada para separar mezclas binarias azeotrópicas, en la que se adiciona un agente de separación o solvente, cuya característica principal es que no presenta la formación de azeótropos con ninguno de los componentes de la mezcla a separar.

**Gas natural (GN):** mezcla de hidrocarburos gaseosos que se encuentra frecuentemente en yacimientos fósiles de diversas formas, ya sea no asociado (solo), disuelto o asociado (acompañando al petróleo) o en depósitos de carbón.

**Inteligencia Artificial (IA):** sistemas que permiten simular los procesos del pensamiento y las acciones del hombre, a

través de procedimientos lógicos que logran un adecuado comportamiento y una toma de decisiones de manera precisa e inmediata.

**Red Bayesiana:** modelo gráfico probabilístico, grafo acíclico dirigido que representa un conjunto de variables (nodos) y sus independencias condicionales probabilísticas (codificado en sus arcos).

**Regularización Bayesiana (BR):** proceso o algoritmo matemático que convierte una regresión no lineal en un problema estadístico bien planteado a la manera de una regresión de cresta.

**Red Neuronal Artificial (RNA):** rama de la inteligencia artificial, son técnicas de programación que imitan el funcionamiento de las neuronas biológicas, capaces de resolver funciones no lineales en un periodo de tiempo corto. Aprenden de una base de datos que resultan complejos de expresar matemáticamente, son herramientas poderosas para el análisis de señales y la modelación de sistemas.

## BIBLIOGRAFÍA

**ANDRADE, Eva.** Estudio de los principales tipos de redes neuronales y las herramientas para su aplicación [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad Politécnica Salesiana, Cuenca, Ecuador. 2013. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://dspace.ups.edu.ec/handle/123456789/4098>

**ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR.** Código Orgánico de La Economía Social de Los Conocimientos, Creatividad e Innovación [en línea]. Ecuador: 2016. [Consulta: 2020-06-03] Disponible en: <http://www.wipo.int/edocs/lexdocs/laws/es/ec/ec075es.pdf>

**BERSTAD, David, NEKSÁ, Petter y ANANTHARAMAN, Rahul.** "Low-temperature CO<sub>2</sub> removal from natural gas". *Energy Procedia* [en línea], 2012, 26(1876), pp. 41-48. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 18766102. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.06.008>

**BROWN, T.S., KIDNAY, A.J. y SLOAN, E.D.** "Vapor-liquid equilibria in the carbon dioxide-ethane system". *Fluid Phase Equilibria* [en línea], 1988, 40(1-2), pp. 169-184. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 03783812. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(88\)80028-1](https://doi.org/10.1016/0378-3812(88)80028-1)

**BURDEN, Frank y WINKLER, Dave.** "Bayesian regularization of neural networks". *Artificial Neural Networks* [en línea], 2008, 458, pp. 24-44. [Consulta: 2020-06-07]. ISSN 978-1-58829-718-1. Disponible en: [https://link.springer.com/protocol/10.1007/978-1-60327-101-1\\_3](https://link.springer.com/protocol/10.1007/978-1-60327-101-1_3)

**CARDOZO, Erwing y ARGUELLO, Henry.** "Aprendizaje estructural de redes bayesianas: Un enfoque basado en puntaje y búsqueda". *Ciencia e Ingeniería Neogranadina* [en línea], 2011, 21(1), pp. 29. [Consulta: 2020-06-07]. ISSN 0124-8170. Disponible en: <http://www.scielo.org.co/pdf/cein/v21n1/v21n1a03.pdf>

**EBRAHIMZADEH, Edris, MATAGI, Jacob, FAZLOLLAHI, Farhad y BAXTER, Larry.** "Alternative extractive distillation system for CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope separation in enhanced oil recovery processes". *Applied Thermal Engineering* [en línea], 2016, 96, pp. 39-47. [Consulta: 2020-05-23]. ISSN 13594311. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.11.082>

**ELLIOT, Doug; et al.** "Benefits of integrating NGL extraction and LNG liquefaction technology". *2005 AIChE Spring National Meeting, Conference Proceedings, 5th Topical Conference on Natural Gas Utilization* [en línea], 2005, (USA), pp. 1943-1958. [Consulta: 2020-05-23]. ISSN 0816909849. Disponible en: [http://static.conocophillips.com/files/resources/smld\\_016\\_aichelngnglintegrationpaper.pdf](http://static.conocophillips.com/files/resources/smld_016_aichelngnglintegrationpaper.pdf)

**ENERDATA.** *Anuario estadístico mundial de energía 2019 - Consumo nacional de gas natural* [blog]. 2019. [Consulta: 2020-05-24]. Disponible en: <https://datos.enerdata.net/gas-natural/consumo-mundial.html>

**FERNANDEZ, J., GONZALEZ, S. y DEL SAZ, P.** "Artificial Neural Networks for Identification and Control of a Lab-Scale Distillation Column using LABVIEW". *World Academy of Science, Engineering and Technology* [en línea], 2008, 47, pp. 64-69. [Consulta: 2020-05-28]. Disponible en:  
<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.192.9138&rep=rep1&type=pdf>

**FLÓREZ, Raquel y FERNÁNDEZ, José.** *Redes Neuronales Artificiales, Fundamentos Teóricos y aplicaciones prácticas* [en línea]. España: Netbiblo, 2008. [Consulta: 2020-06-01]. ISBN 978-84-9745-246-5. Disponible en:  
<https://books.google.com.ec/books?id=X0uLwi1Ap4QC&pg=PA56&lpg=PA56&dq=#v=onepage&q&f=false>

**FOSSEE.** *DWSIM Chemical Process Simulator* [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <https://dwsim.fossee.in/>

**GNU.** *General Public License* [blog]. 2007. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html>

**GÓMEZ, Jessica.** *Operación de plantas de procesamiento de gas natural* [blog]. Osinergmin, 2008. [Consulta: 2020-05-23]. Disponible en:  
[http://gasnatural.osinerg.gob.pe/contenidos/uploads/GFGN/Operacion\\_Plantas\\_Procesamiento\\_de\\_Gas\\_Natural.pdf](http://gasnatural.osinerg.gob.pe/contenidos/uploads/GFGN/Operacion_Plantas_Procesamiento_de_Gas_Natural.pdf)

**GUTIÉRREZ, J. P., SOSA, T.S., RUIZ, L.A., ZAPATA, A.R. y ERDMANN, E.** "Diseño del Proceso de Endulzamiento de Gas Natural. Simulación y Comparación". *CAIQ2013-VII Congreso Argentino de Ingeniería Química y 2das. Jornadas Argentinas de Seguridad de Procesos* [en línea], 2013. [Consulta: 2020-05-23]. Disponible en:  
[http://www.aaiq.org.ar/SCongresos/docs/04\\_025/papers/05f/05f\\_1423\\_589.pdf](http://www.aaiq.org.ar/SCongresos/docs/04_025/papers/05f/05f_1423_589.pdf)

**HAYKIN, Simon.** *Neural networks and learning machines* [en línea]. USA: Pearson Ed, 2009. [Consulta: 2020-06-03]. ISBN 978-0-13-147139-9. Disponible en:  
<http://dai.fmph.uniba.sk/courses/NN/haykin.neural-networks.3ed.2009.pdf>

**HERNÁNDEZ, Pablo.** Algoritmo de Aprendizaje para Redes Bayesianas de Nodos Temporales [en línea] (Trabajo de titulación). (Maestría) Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Puebla, México. 2011. [Consulta: 2020-06-07]. Disponible en: [http://ccc.inaoep.mx/~esucar/Clases-mgp/Proyectos/reporte\\_intervalos.pdf](http://ccc.inaoep.mx/~esucar/Clases-mgp/Proyectos/reporte_intervalos.pdf)

**HONG, Jane, KOBAYASHI, Riki.** "To break an azeotrope. The use of n-pentane to break the carbon dioxide-ethane azeotrope, for carbon dioxide EOR gas processing". *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* [en línea], 1986, 25(3), pp. 736-741. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 0196-4305. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i200034a024>

**HUANG, Kejin, SHAN, Lan, ZHU, Qunxiong y QIAN, Jixin.** "A totally heat-integrated distillation column (THIDiC) - the effect of feed pre-heating by distillate". *Applied Thermal Engineering* [en línea], 2008, 28(8-9), pp. 856-864. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 13594311. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2007.07.011>

**KAYRI, Murat.** "Predictive abilities of Bayesian regularization and levenberg-marquardt algorithms in artificial neural networks: A comparative empirical study on social data". *Mathematical and Computational Applications* [en línea], 2016, 21(2). [Consulta: 2020-06-07]. ISSN 22978747. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2297-8747/21/2/20/htm>

**KISS, Anton y IGNAT, Radu.** "Enhanced methanol recovery and glycerol separation in biodiesel production - DWC makes it happen". *Applied Energy* [en línea], 2012a, 99, pp. 146-153. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 03062619. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.04.019>

**KISS, Anton y IGNAT, Radu.** "Innovative single step bioethanol dehydration in an extractive dividing-wall column". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2012b, 98, pp. 290-297. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 13835866. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2012.06.029>

**KOOLJMAN, Harry y TAYLOR, Ross.** *ChemSep Modeling Separation Processes* [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://www.chemsep.com/program/index.html>

**KRAVANJA, Gregor; et al.** "Heat transfer performance of CO<sub>2</sub>, ethane and their azeotropic mixture under supercritical conditions". *Energy* [en línea], 2018, 152, pp. 190-201. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 03605442. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.03.146>

**LAPUERTA, Alfredo.** El Gas Natural : Una posibilidad de combustible limpio en el Mercado Automotriz del Ecuador [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad Andina Simón Bolívar, Ecuador. 2008. [Consulta: 2020-05-23]. Disponible en:

<http://repositorio.uasb.edu.ec/bitstream/10644/986/1/T678-MRI-Lapuerta-El%20gas%20natural.pdf>

**LASTARI, Fonny; et al.** "Extractive distillation for CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope separation". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2012, 52, pp. 155-161. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 02552701. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.10.001>

**LENG, Wenxiu; et al.** "Rapidly determining the principal components of natural gas distilled from shale with terahertz spectroscopy". *Fuel* [en línea], 2015, 159, pp. 84-88. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 00162361. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.06.072>

**LI, Guangzhong y BAI, Peng.** "New operation strategy for separation of ethanol-water by extractive distillation". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2012, 51(6), pp. 2723-2729. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 08885885. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/ie2026579>

**LI, Ying, WANG, Yao, WANG, Yan Min y YAO, Ping Jing.** "Heat integration of the azeotropic distillation system with ANN and GA". *Proceedings of the World Congress on Intelligent Control and Automation (WCICA)* [en línea], 2002, 2, pp. 1573-1577. [Consulta: 2020-05-28]. DOI 10.1109/wcica.2002.1020851. Disponible en: <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/1020851>

**LIAU, Leo, YANG, Thomas y TSAI, Ming.** "Expert system of a crude oil distillation unit for process optimization using neural networks". *Expert Systems with Applications* [en línea], 2004, 26(2), pp. 247-255. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 09574174. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0957-4174\(03\)00139-8](https://doi.org/10.1016/S0957-4174(03)00139-8)

**LÓPEZ, P., VELO, R. y MASEDA, F.** "Estimación de la velocidad del viento mediante redes neuronales". *XI Congreso Internacional De Ingeniería De Proyectos* [en línea], 2007, pp. 1083-1092. [Consulta: 2020-06-03]. Disponible en: [https://www.aepro.com/files/congresos/2007lugo/ciip07\\_1083\\_1092.501.pdf](https://www.aepro.com/files/congresos/2007lugo/ciip07_1083_1092.501.pdf)

**LUYBEN, William.** "Control of an extractive distillation system for the separation of CO<sub>2</sub> and ethane in enhanced oil recovery processes". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2013, 52(31), pp. 10780-10787. [Consulta: 2020-06-03]. ISSN 08885885. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie401602c>

**LUYBEN, William y CHIEN, I-Lung.** *Design and Control of Distillation Systems for Separating Azeotropes* [en línea]. USA: John Wiley & Sons, 2011. [Consulta: 2020-06-01]. ISBN 978-0-470-44862-5. Disponible en: [https://books.google.com.ec/books?hl=es&lr=&id=vR8BNxZy5WQC&oi=fnd&pg=PP15&ots=-NabFPxrd8&sig=gtU6\\_DwYx00bxVeqjXtiEuN2B8U&redir\\_esc=y#v=onepage&q&f=false](https://books.google.com.ec/books?hl=es&lr=&id=vR8BNxZy5WQC&oi=fnd&pg=PP15&ots=-NabFPxrd8&sig=gtU6_DwYx00bxVeqjXtiEuN2B8U&redir_esc=y#v=onepage&q&f=false).

**MACMURRAY, J.C. y HIMMELBLAU, D.M.** "Modeling and control of a packed distillation column using artificial neural networks". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 1995, 19(10), pp. 1077-1088. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 00981354. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(94\)00098-9](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00098-9)

**MARTÍN, B., SANZ, A., POLLÁN, T. y MEDRANO, N.** *Redes neuronales y sistemas borrosos* [en línea]. Madrid: RA-MA, 2001. [Consulta: 2020-06-03]. ISBN 84-7897-466-0. Disponible en: <http://taee.etsist.upm.es/actas/2002/papers/2002SP109.pdf>

**MEDEIROS, Daniel.** *DWSIM - Open Source Process Simulator* [blog]. 2008. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <https://sourceforge.net/projects/dwsim/>

**MEDEIROS, Daniel.** *DWSIM - Open Source Process Simulator Web Site* [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>

**MINISTERIO DE TELECOMUNICACIONES Y DE LA SOCIEDAD DE LA INFORMACIÓN.** *Software libre y Software Público* [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-03]. Disponible en: <https://www.gobiernoelectronico.gob.ec/software-libre-y-software-publico-2/>

**MONTAGUE, G.A., THAM, M.T., WILLIS, M.J. y MORRIS, A.J.** "Predictive Control of Distillation Columns Using Dynamic Neural Networks". *IFAC Proceedings Volumes* [en línea], 1992, 25(5), pp. 243-248. [Consulta: 2020-06-03]. ISSN 14746670. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)50999-4](https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)50999-4)

**MOTLAGHI, S., JALALI, F. y AHMADABADI, M.** "An expert system design for a crude oil distillation column with the neural networks model and the process optimization using genetic algorithm framework". *Expert Systems with Applications* [en línea], 2008, 35(4), pp. 1540-1545. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 09574174. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2007.08.105>

**OCHOA, Lluvia, JOBSON, Megan y SMITH, Robin.** "Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2013, 59, pp. 178-185. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 00981354. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.05.030>

**OSUOLALE, Funmilayo y ZHANG, Jie.** "Energy efficiency optimisation for distillation column using artificial neural network models". *Energy* [en línea], 2016, 106, pp. 562-578. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 03605442. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.03.051>

**PASADAKIS, N., SOURLIGAS, S. y FOTEINOPOULOS, Ch.** "Prediction of the distillation profile and cold properties of diesel fuels using mid-IR spectroscopy and neural networks". *Fuel* [en línea], 2006, 85(7-8), pp. 1131-1137. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 00162361. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.09.016>

**PERRY, Robert, GREEN, Don y MALONEY, James.** Perry's chemical engineers' handbook [en línea]. 7th ed. USA: McGraw-Hill, 1997. [Consulta: 2020-05-23]. ISBN 0070498415. Disponible en: <https://chembugs.files.wordpress.com/2015/12/perrys-chemical-engineering-handbook1.pdf>

**QUINTANA, Asnaldo.** Implementación de un sistema de redes neuronales en MATLAB para la predicción del equilibrio líquido – vapor de mezclas binarias selectas [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad de San Buenaventura Seccional Cartagena, Colombia. 2015. [Consulta: 2020-06-03]. Disponible en: [http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/bitstream/10819/2611/1/Implementación de un sistema de redes Asnaldo Quintana USBCTG 2015.pdf](http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/bitstream/10819/2611/1/Implementación%20de%20un%20sistema%20de%20redes%20neuronales%20en%20MATLAB%20para%20la%20predicci3n%20del%20equilibrio%20l3quido%20-%20vapor%20de%20mezclas%20binarias%20selectas.pdf)

**RIVAS, Wilmer y MAZÓN, Bertha.** *Redes Neuronales Artificiales Aplicadas al Reconocimiento de Patrones* [en línea]. 1ra ed. Ecuador: Universidad Técnica de Machala, 2018. [Consulta: 2020-06-01]. ISBN 9789942241009. Disponible en: [https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwiz76\\_C8ZjqAhWGVN8KHWRjAbUQFjACegQIBhAB&url=http%3A%2F%2Fre](https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwiz76_C8ZjqAhWGVN8KHWRjAbUQFjACegQIBhAB&url=http%3A%2F%2Fre)

[positorio.utmachala.edu.ec%2Fbitstream%2F48000%2F12499%2F1%2FRedesNeuronalesArtificialesAplicadasAlReconomientoDePatrones.pdf&usg=AOvVaw2A71RgG-KiCxksUEukLp9](http://positorio.utmachala.edu.ec%2Fbitstream%2F48000%2F12499%2F1%2FRedesNeuronalesArtificialesAplicadasAlReconomientoDePatrones.pdf&usg=AOvVaw2A71RgG-KiCxksUEukLp9)

**SAFDARNEJAD, Seyed, KENNINGTON, Lindsey, BAXTER, Larry y HEDENGREN, John.** "Investigating the impact of Cryogenic Carbon Capture on power plant performance". *Proceedings of the American Control Conference* [en línea], 2015, pp. 5016-5021. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 07431619. DOI 10.1109/ACC.2015.7172120. Disponible en: <https://scholarsarchive.byu.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=2713&context=facpub>

**SÁNCHEZ, David y MAGUIÑA, Rolando.** "Redes Neuronales Artificiales para la Caracterización Automática de Revestimientos Cerámicos". *Revista de Investigación de Sistemas e Informática* [en línea], 2003, 1, pp. 17-27. [Consulta: 2020-05-28]. Disponible en: [http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/risi/n1\\_2003/a02.pdf](http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/risi/n1_2003/a02.pdf)

**SCENNA, Nicolás; et al.** *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos* [en línea]. Argentina: Facultad Regional Rosario-Universidad Tecnológica Nacional, 1999. [Consulta: 2020-05-23]. ISBN 950-42-0022-2. Disponible en: <http://www.edutecne.utn.edu.ar/modelado-proc-quim/modelado-proc-quim.pdf>

**SILVA, Francisco.** *Marco Legal del Software Libre en Ecuador* [blog]. ASLE, 2015. [Consulta: 2020-06-03]. Disponible en: <https://www.asle.ec/marco-legal-del-softwarelibre-en-ecuador/>

**SOAVE, Giorgio y FELIU, Josep.** "Saving energy in distillation towers by feed splitting". *Applied Thermal Engineering* [en línea], 2002, 22(8), pp. 889-896. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 13594311. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S1359-4311\(02\)00006-6](https://doi.org/10.1016/S1359-4311(02)00006-6)

**STATPOINT TECHNOLOGIES.** *STATGRAPHICS Centurion XVI. Manual de usuario* [en línea]. 2010. [Consulta: 2020-06-07]. ISBN 0026-4784. Disponible en: <https://statgraphics.net/wp-content/uploads/2015/03/Centurion-XVI-Manual-Principal.pdf>

**TAVAN, Yadollah.** "A note on use of the CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope as new feed of reforming process using mathematical modeling". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* [en línea], 2014, 21, pp. 275-282. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 18755100. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2014.08.004>

**TAVAN, Yadollah y HOSSEINI, Seyed.** "A novel application of reactive absorption to break the CO<sub>2</sub>-ethane azeotrope with low energy requirement". *Energy Conversion and Management* [en línea], 2013, 75, pp. 407-417. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 01968904. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2013.06.015>



**TAVAN, Yadollah, RIAZI, Seied y NOZOHOURI, Mostafa.** "Energy optimization and comparative study of pre- and post-fractionator extractive dividing wall column for the CO<sub>2</sub>-ethane azeotropic process". *Energy Conversion and Management* [en línea], 2014, 79, pp. 590-598. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 01968904. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2013.12.029>

**TAVAN, Yadollah, SHAHHOSSEINI, Shahrokh y HOSSEINI, Seyyed.** "Design and simulation of ethane recovery process in an extractive dividing wall column". *Journal of Cleaner Production* [en línea], 2014a, 72, pp. 222-229. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 09596526. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2014.03.015>

**TAVAN, Yadollah, SHAHHOSSEINI, Shahrokh y HOSSEINI, Seyyed.** "Feed-splitting technique in the extractive distillation of CO<sub>2</sub>-ethane azeotropic process". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2014b, 122, pp. 47-53. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 13835866. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2013.10.041>

**TAVAN, Yadollah y TAVAN, Alireza.** "Performance of conventional gas sweetening process to remove CO<sub>2</sub> in presence of azeotrope". *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization* [en línea], 2014, 5, pp. 24-32. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 22129820. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2013.12.001>

**TORRES, Carlo; et al.** "Design, optimization and controllability of an alternative process based on extractive distillation for an ethane-carbon dioxide mixture". *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification* [en línea], 2013, 74, pp. 55-68. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 02552701. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2013.09.011>

**UYAZÁN, Ana, GIL, Iván, AGUILAR, Jaime, RODRÍGUEZ, Gerardo y CAICEDO, Luis.** "Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: simulación del proceso con glicerol". *Ingeniería e Investigación* [en línea], 2006, 26(1), pp. 45-50. [Consulta: 2020-06-01]. ISSN 0120-5609. Disponible en: <http://www.scielo.org.co/pdf/iei/v26n1/v26n1a06.pdf>

**VAF AEI, M., ESLAMLOUEYAN, R. y AYATOLLAHI, Sh.** "Simulation of steam distillation process using neural networks". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2009, 87(8), pp. 997-1002. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 02638762. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2009.02.006>

**VARELA, Ernesto y CAMPBELLS, Edwin.** "Redes Neuronales Artificiales: Una Revisión del Estado del Arte, Aplicaciones y Tendencias Futuras". *Investigación y Desarrollo en TIC* [en línea], 2011, 2(1), pp. 18-27. [Consulta: 2020-05-28]. Disponible en:

<http://publicaciones.unisimonbolivar.edu.co/rdigital/inovacioning/index.php/identific/article/view/File/21/29>

**WILLIS, M.J., MASSIMO, C.D, MONTAGUE, G.A., THAM, M.T. y MORRIS, A.J.** "Artificial neural networks in process engineering". *Control Theory and Applications, IEE Proceedings* [en línea], 1991, 138(3), pp. 256 – 266. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en:

[https://www.researchgate.net/publication/3360837\\_Artificial\\_neural\\_networks\\_in\\_process\\_engineering](https://www.researchgate.net/publication/3360837_Artificial_neural_networks_in_process_engineering)

**ZAMPROGNA, E., BAROLO, M. y SEBORG, D.E.** "Composition estimations in a middle-vessel batch distillation column using artificial neural networks". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2001, 79(6), pp. 689-696. [Consulta: 2020-05-28]. ISSN 02638762.

Disponible en: <https://doi.org/10.1205/026387601316971361>

**ZARENEZHAD, B. y HOSSEINPOUR, N.** "An extractive distillation technique for producing CO<sub>2</sub> enriched injection gas in enhanced oil recovery (EOR) fields". *Energy Conversion and Management* [en línea], 2009, 50(6), pp. 1491-1496. [Consulta: 2020-05-24]. ISSN 01968904.

Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2009.02.016>

**ZOELLE, Alexander; et al.** "Cost and Performance Baseline for Fossil Energy Plants". *Bituminous Coal (PC) and Natural Gas to Electricity* [en línea], 2015, 1a. [Consulta: 2020-05-24]. DOI 10.2172/1480987. Disponible en:

<https://www.osti.gov/biblio/1480987-cost-performance-baseline-fossil-energy-plants-volume-bituminous-coal-pc-natural-gas-electricity-revision>

## ANEXOS

### ANEXO A. Nombres de las variables utilizadas para el diseño y entrenamiento de la RNA

<b>DISEÑO Y ENTRENAMIENTO</b>	
<b>VARIABLE</b>	<b>DESCRIPCIÓN</b>
<b>basedatos</b>	Vincula MATLAB y el archivo de Excel con ese nombre.
<b>data</b>	Vincula MATLAB y la hoja específica del archivo de Excel que contiene los valores a ingresar.
<b>Datos</b>	Valores extraídos del Excel.
<b>entradas</b>	Valores de presión, temperatura y relación solvente/alimentación
<b>salidas</b>	Fracciones molares de los componentes CO <sub>2</sub> , etano y propano según corresponda en cada torre.
<b>P_Norm</b>	Presión normalizada.
<b>T_Norm</b>	Temperatura normalizada.
<b>R_Norm</b>	Relación solvente/alimentación normalizada.
<b>ent_Norm</b>	Entradas normalizada.
<b>eal_Norm</b>	Salidas normalizada.
<b>CO2_Norm</b>	Fracción molar del CO <sub>2</sub> normalizada (destilado columna 1).
<b>ETC1_Norm</b>	Fracción molar del etano normalizada (residuo columna 1).
<b>ETC2_Norm</b>	Fracción molar del etano normalizada (destilado columna 2).
<b>PROP_Norm</b>	Fracción molar del propano normalizada (residuo columna 2).
<b>ETC3DIS_Norm</b>	Fracción molar del etano normalizada (destilado columna 3).
<b>ETC3BOT_Norm</b>	Fracción molar del etano normalizada (residuo columna 3).
<b>CO2_pred</b>	Fracción molar del CO <sub>2</sub> predicho (destilado columna 1).
<b>ETC1_pred</b>	Fracción molar del etano predicho (residuo columna 1).
<b>ETC2_pred</b>	Fracción molar del etano predicho (destilado columna 2).
<b>PROP_pred</b>	Fracción molar del propano predicho (residuo columna 2).
<b>ETC3DIS_pred</b>	Fracción molar del etano predicho (destilado columna 3).
<b>ETC3BOT_pred</b>	Fracción molar del etano predicho (residuo columna 3).
<b>PropPred</b>	Valores predichos por la RNA (normalizados)
<b>Valor_Real</b>	Conjunto de todas las fracciones reales predichas por la RNA (sin normalizar).

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

## ANEXO B. Nombres de las variables utilizadas para la validación de la RNA

VALIDACIÓN	
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
<b>basedatos</b>	Vincula MATLAB y el archivo de Excel con ese nombre.
<b>valdata</b>	Vincula MATLAB y la hoja específica del archivo de Excel que contiene los valores a ingresar.
<b>Datosval</b>	Valores extraídos del Excel.
<b>entradasval</b>	Valores de presión, temperatura y relación solvente/alimentación diferentes a los seleccionados en el entrenamiento.
<b>salidasval</b>	Fracciones molares de los componentes CO <sub>2</sub> , etano y propano según corresponda en cada torre para la validación.
<b>P_Normval</b>	Presión normalizada para la validación.
<b>T_Normval</b>	Temperatura normalizada para la validación.
<b>R_Normval</b>	Relación solvente/alimentación normalizada para la validación.
<b>Ent_Normval</b>	Entradas normalizada para la validación.
<b>CO2_predval</b>	Fracción molar del CO <sub>2</sub> predicho (destilado columna 1) para la validación.
<b>ETC1_predval</b>	Fracción molar del etano predicho (residuo columna 1) para la validación.
<b>ETC2_predval</b>	Fracción molar del etano predicho (destilado columna 2) para la validación.
<b>PROP_predval</b>	Fracción molar del propano predicho (residuo columna 2) para la validación.
<b>ETC3DIS_predval</b>	Fracción molar del etano predicho (destilado columna 3) para la validación.
<b>ETC3BOT_predval</b>	Fracción molar del etano predicho (residuo columna 3) para la validación.
<b>Prop_Predval</b>	Valores predichos por la RNA (normalizados) para la validación.
<b>Valor_Realval</b>	Conjunto de todas las fracciones reales predichas por la RNA (sin normalizar) para la validación.

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.

## ANEXO C. Script para el diseño y entrenamiento de la RNA

**%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel**

```
Extraer=readtable('basedatos.xlsx','Sheet','data');
```

**%Convertir la tabla a Matriz Numérica**

```
Datos = table2array(Extraer);
```

**%Parámetros de Entrada del proceso (P, T, R)**

```
entradas=Datos(1:3,:);
```

```
P_Norm=normalize(entradas(1,1:end),'range');
```

```
T_Norm=normalize(entradas(2,1:end),'range');
```

```
R_Norm=normalize(entradas(3,1:end),'range');
```

```
%----- ENTRADAS -----
```

```
ent_Norm=[P_Norm;T_Norm;R_Norm]';
```

**%Parámetros de Salida del proceso(fracciones molares)**

```
salidas=Datos(4:9,:);
```

```
%----- COLUMNA 1 -----
```

```
CO2_Norm=normalize(salidas(1,1:end),'range');
```

```
CO2_max=max(salidas(1,:))
```

```
CO2_min=min(salidas(1,:))
```

```
ETC1_Norm=normalize(salidas(2,1:end),'range');
```

```
ETC1_max=max(salidas(2,:))
```

```
ETC1_min=min(salidas(2,:))
```

```
%----- COLUMNA 2 -----
```

```
ETC2_Norm=normalize(salidas(3,1:end),'range');
```

```
ETC2_max=max(salidas(3,:))
```

```
ETC2_min=min(salidas(3,:))
```

```
PROP_Norm=normalize(salidas(4,1:end),'range');
```

```
PROP_max=max(salidas(4,:))
```

```
PROP_min=min(salidas(4,:))
```

```

%-----COLUMNNA 3 -----
ETC3DIS_Norm=normalize(salidas(5,1:end),'range');
ETC3DIS_max=max(salidas(5,:))
ETC3DIS_min=min(salidas(5,:))

ETC3BOT_Norm=normalize(salidas(6,1:end),'range');
ETC3BOT_max=max(salidas(6,:))
ETC3BOT_min=min(salidas(6,:))

%-----SALIDAS NORMALIZADAS -----
sal_Norm=[CO2_Norm;ETC1_Norm;ETC2_Norm;PROP_Norm;
    ETC3DIS_Norm;ETC3BOT_Norm]';

%-----RED NEURONAL-----
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 19-May-2020 13:37:45
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% ent_Norm - input data.
% sal_Norm - target data.

x = ent_Norm';
t = sal_Norm';

% 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 = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 80;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

```

```

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
% For a list of all processing functions type: help nprocess
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 ndivision
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

% Choose a Performance Function
% For a list of all performance functions type: help nperformance
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
%-----

PropPred = net(ent_Norm(1:end,:))
%Prop_Reales= sal_Norm'

```



% VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR

%----- COLUMNA 1 -----

CO2\_pred = PropPred(1,:).\*(CO2\_max-CO2\_min)+CO2\_min;

ETC1\_pred = PropPred(2,:).\*(ETC1\_max-ETC1\_min)+ETC1\_min;

%-----COLUMNA 2 -----

ETC2\_pred = PropPred(3,:).\*(ETC2\_max-ETC2\_min)+ETC2\_min;

PROP\_pred = PropPred(4,:).\*(PROP\_max-PROP\_min)+PROP\_min;

%----- COLUMNA 3 -----

ETC3DIS\_pred = PropPred(5,:).\*(ETC3DIS\_max-ETC3DIS\_min)+ETC3DIS\_min;

ETC3BOT\_pred = PropPred(6,:).\*(ETC3BOT\_max-ETC3BOT\_min)+ETC3BOT\_min

%----- TABLA FINAL-----

Valor\_Real=[CO2\_pred;ETC1\_pred;ETC2\_pred;PROP\_pred;ETC3DIS\_pred;

ETC3BOT\_pred]';

%----- GRÁFICOS -----

%Parámetros de salida

salidas=Datos(4:9,:);

% Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la red neuronal

Real= salidas;

Prediccion= Valor\_Real';

%----- COLUMNA 1 -----

%FRACCION MOLAR CO2

figure;

plot(Real(1,:))

hold on

plot(Prediccion(1,:));grid;legend('Real','Predicción')

xlabel('Experimentaciones')

ylabel('Fracción molar CO2')

title('Destilado de la columna de extracción')

```
%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(2,:))
hold on
plot(Prediccion(2,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Residuo de la columna de extracción')
```

```
%----- COLUMNNA 2 -----
%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(3,:))
hold on
plot(Prediccion(3,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Destilado de la columna de recuperación')
```

```
%FRACCION MOLAR PROPANO
figure;
plot(Real(4,:))
hold on
plot(Prediccion(4,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Propano')
title('Residuo de la columna de recuperación')
```

```
%----- COLUMNNA 3 -----
%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(5,:))
hold on
plot(Prediccion(5,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Destilado de la columna de concentración')
```

```
%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(6,:))
hold on
plot(Prediccion(6,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Residuo de la columna de concentración')
```

## ANEXO D. Script para la validación de la RNA

%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel

```
Extraer=readtable('basedatos.xlsx','Sheet','valdata');
```

%Convertir la tabla a Matriz Numérica

```
Datosval = table2array(Extraer);
```

%Cargar archivo net y parámetros maximos y minimos de la Salida de la red neuronal

```
load('Workspace_Red_neuronal_destilación.mat');
```

%Parámetros de Entrada del proceso (P,T,R)

```
entradasval=Datosval(1:3,:);
```

```
P_Normval=[(entradasval(1,1:end)-5)/(35-5)];
```

```
T_Normval=[(entradasval(2,1:end)-20)/(100-20)];
```

```
R_Normval=[(entradasval(3,1:end)-0.15)/(0.8-0.15)];
```

%----- ENTRADAS -----

```
Ent_Normval=[P_Normval;T_Normval;R_Normval]';
```

%Validación de la red neuronal

```
Prop_Predval = net(Ent_Normval(1:end,:));
```

%VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR

%----- COLUMNA 1 -----

```
CO2_Predval = Prop_Predval(1,:).*(CO2_max-CO2_min)+CO2_min;
```

```
ETC1_Predval = Prop_Predval(2,:).*(ETC1_max-ETC1_min)+ETC1_min;
```

%----- COLUMNA 2 -----

```
ETC2_Predval = Prop_Predval(3,:).*(ETC2_max-ETC2_min)+ETC2_min;
```

```
PROP_Predval = Prop_Predval(4,:).*(PROP_max-PROP_min)+PROP_min;
```

%----- COLUMNA 3 -----

```
ETC3DIS_Predval = Prop_Predval(5,:).*(ETC3DIS_max-ETC3DIS_min)+ETC3DIS_min;
```

```
ETC3BOT_Predval = Prop_Predval(6,:).*(ETC3BOT_max-ETC3BOT_min)+ETC3BOT_min;
```

```

%----- RESULTADOS -----
Valor_Realval=[CO2_Predval;ETC1_Predval;ETC2_Predval;PROP_Predval;ETC3DIS_Predva
l;ETC3BOT_Predval]'

%----- GRÁFICOS -----
%Parámetros de salida
salidasval=Datosval(4:9,:);

% Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la red neuronal
Real= salidasval;
Prediccion= Valor_Realval';

%----- COLUMNA 1 -----
%FRACCION MOLAR CO2
figure;
plot(Real(1,:))
hold on
plot(Prediccion(1,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar CO2')
title('Destilado de la columna de extracción')

%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(2,:))
hold on
plot(Prediccion(2,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Residuo de la columna de extracción')

%----- COLUMNA 2 -----
%FRACCION MOLAR ETANO
figure;
plot(Real(3,:))
hold on
plot(Prediccion(3,:));grid;legend('Real','Predicción')

```

```
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Destilado de la columna de recuperación')
```

```
%FRACCION MOLAR PROPANO
```

```
figure;
plot(Real(4,:))
hold on
plot(Prediccion(4,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Propano')
title('Residuo de la columna de recuperación')
```

```
%----- COLUMNA 3 -----
```

```
%FRACCION MOLAR ETANO
```

```
figure;
plot(Real(5,:))
hold on
plot(Prediccion(5,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Destilado de la columna de concentración')
```

```
%FRACCION MOLAR ETANO
```

```
figure;
plot(Real(6,:))
hold on
plot(Prediccion(6,:));grid;legend('Real','Predicción')
xlabel('Experimentaciones')
ylabel('Fracción molar Etano')
title('Residuo de la columna de concentración')
```

**ANEXO E.** Valores reales vs predichos en la columna de recuperación de solvente (C2)

# DATOS	VALOR REAL ETC2	VALOR PREDICHO ETC2	ERROR (%)	VALOR REAL PROP	VALOR PREDICHO PROP	ERROR (%)
1	0,409423	0,40951939	0,02	0,114396	0,111110864	2,87
2	0,682982	0,671885267	1,62	0,24011	0,237498735	1,09
3	0,375411	0,368432202	1,86	0,123124	0,119703553	2,78
4	0,354773	0,375641787	5,88	0,143127	0,138640856	3,13
5	0,483092	0,489295633	1,28	0,172419	0,192875915	11,86
6	0,513215	0,506847327	1,24	0,181774	0,174548648	3,97
7	0,642037	0,545659159	15,01	0,258791	0,195353146	24,51
8	0,405903	0,523817061	29,05	0,164257	0,191862413	16,81
9	0,618751	0,655032716	5,86	8,84354E-06	-0,011500974	130149,44
10	0,724937	0,719169696	0,8	0,27488	0,256444139	6,71
11	0,626484	0,648373827	3,49	0,219254	0,205690871	6,19
12	0,656114	0,655776861	0,05	0,221088	0,202316498	8,49
13	0,655988	0,66569051	1,48	0,192723	0,197327493	2,39
14	0,408383	0,41152691	0,77	0,101682	0,103163717	1,46
15	0,56396	0,54417178	3,51	0,296322	0,282862132	4,54
16	0,741629	0,741803288	0,02	4,11733E-07	-0,005264804	1278793,63
17	0,730893	0,728382826	0,34	4,89525E-06	-0,005662886	115781,23
18	0,73297	0,738105872	0,7	0,20574	0,181548601	11,76
19	0,706045	0,678198468	3,94	0,277681	0,264271932	4,83
20	0,62464	0,636954983	1,97	0,227436	0,273195151	20,12
21	0,349322	0,342550693	1,94	0,108407	0,126808432	16,97
22	0,372147	0,382740656	2,85	0,115911	0,113220916	2,32
23	0,3754	0,363756673	3,1	0,113673	0,107358894	5,55
24	0,629772	0,626098839	0,58	0,000111761	0,032211161	28721,47
25	0,597017	0,599363789	0,39	0,00104904	0,07817057	7351,63
26	0,466236	0,454657937	2,48	0,134182	0,126315232	5,86
27	0,408657	0,404067349	1,12	0,108183	0,108577685	0,36
28	0,374119	0,364501386	2,57	0,142815	0,128218649	10,22
29	0,409423	0,403368066	1,48	0,1137	0,118935391	4,6
30	0,375414	0,367563088	2,09	0,123302	0,127109773	3,09
31	0,665683	0,730404382	9,72	0,222132	0,002187469	99,02
32	0,394482	0,396904472	0,61	0,158398	0,153099898	3,34
33	0,532685	0,537018988	0,81	0,215584	0,206952859	4
34	0,688253	0,752097762	9,28	0,259828	0,253865725	2,29
35	0,58627	0,569067727	2,93	0,227777	0,201464335	11,55
36	0,351673	0,375361942	6,74	0,132498	0,149351945	12,72
37	0,407747	0,440834906	8,11	0,163814	0,177343124	8,26

38	0,375402	0,384543619	2,44	0,114242	0,117986873	3,28
39	0,630993	0,633670592	0,42	8,00957E-05	-0,005875525	7435,63
40	0,573586	0,552861469	3,61	0,000697738	0,035290244	4957,81
41	0,578574	0,556334756	3,84	0,159255	0,192403897	20,81
42	0,474361	0,584469127	23,21	0,187848	0,307515081	63,7
43	0,386681	0,383252671	0,89	0,141695	0,143297418	1,13
44	0,387244	0,391787073	1,17	0,117848	0,108436422	7,99
45	0,766107	0,734939216	4,07	0,191636	0,199845842	4,28
46	0,36548	0,349656254	4,33	0,121911	0,121432341	0,39
47	0,565464	0,574894764	1,67	0,194694	0,196944765	1,16
48	0,719396	0,716969715	0,34	0,0840042	0,183803854	118,8
49	0,48277	0,500628255	3,7	0,176725	0,178414299	0,96
50	0,801391	0,754958324	5,79	0,328275	0,286662272	12,68
51	0,539668	0,509830908	5,53	0,175648	0,168303652	4,18
52	0,411923	0,418671819	1,64	0,159486	0,158311049	0,74
53	0,579174	0,516302666	10,86	0,206094	0,186081955	9,71
54	0,719797	0,718049314	0,24	5,13457E-06	-0,028765406	560330,08
55	0,723329	0,741224979	2,47	5,14974E-05	0,025041639	48527
56	0,633869	0,623683965	1,61	0,000135078	-0,037930349	28180,33
57	0,508377	0,490518812	3,51	0,144212	0,155191218	7,61
58	0,597888	0,579824618	3,02	0,222652	0,226097954	1,55
59	0,610624	0,607196103	0,56	0,22091	0,238166424	7,81
60	0,637168	0,606750749	4,77	0,26251	0,202857473	22,72
61	0,62596	0,641328003	2,46	0,138565	0,197701365	42,68
62	0,387245	0,381985951	1,36	0,116495	0,115304751	1,02
63	0,713622	0,669557918	6,17	3,12194E-05	0,015023037	48020,84
64	0,632522	0,641482243	1,42	9,47301E-05	-0,029772117	31528,36
65	0,657248	0,638265314	2,89	0,268533	0,205253596	23,56
66	0,687108	0,659050595	4,08	0,230943	0,218107025	5,56
67	0,57544	0,532844616	7,4	0,219084	0,206247815	5,86
68	0,363785	0,364319441	0,15	0,119972	0,1126385	6,11
69	0,609285	0,568692968	6,66	0,267399	0,242027995	9,49
70	0,628892	0,660550245	5,03	0,216186	0,241139154	11,54
71	0,409423	0,406557039	0,7	0,124296	0,132378262	6,5
72	0,37541	0,373584556	0,49	0,124961	0,124933409	0,02
73	0,400134	0,390647695	2,37	0,157525	0,145009575	7,95
74	0,51516	0,464810913	9,77	0,199069	0,190101925	4,5
75	0,561641	0,515898941	8,14	0,219501	0,175341126	20,12
76	0,353434	0,461424775	30,55	0,133639	0,171827676	28,58
77	0,37333	0,424668908	13,75	0,104664	0,077386008	26,06
78	0,624423	0,652218526	4,45	0,224751	0,218132265	2,94
79	0,741969	0,702430895	5,33	0,0404728	0,23572814	482,44
80	0,610309	0,628922178	3,05	0,229486	0,19625929	14,48



81	0,451691	0,47051004	4,17	0,176267	0,182921033	3,77
82	0,685646	0,62094234	9,44	0,23058	0,211964001	8,07
83	0,534898	0,539995905	0,95	0,236035	0,241938342	2,5
84	0,384739	0,378871292	1,53	0,114101	0,15887243	39,24
85	0,741411	0,740378075	0,14	5,42691E-07	0,014136298	2604752,15
86	0,753135	0,743421317	1,29	2,76743E-05	0,027676478	99907,87
87	0,690602	0,68741597	0,46	0,255887	0,262208338	2,47
88	0,70669	0,663309126	6,14	0,267157	0,238321519	10,79
89	0,632767	0,687575074	8,66	0,255605	0,285444922	11,67
90	0,494452	0,531234895	7,44	0,213683	0,192827453	9,76
91	0,393717	0,407676086	3,55	0,159542	0,161220684	1,05
92	0,546366	0,552374063	1,1	0,217669	0,206784093	5
93	0,353806	0,327392606	7,47	0,122451	0,107051948	12,58
94	0,421537	0,490224544	16,29	0,151711	0,192172659	26,67
95	0,35679	0,343392273	3,76	0,126212	0,13328794	5,61
96	0,496164	0,518602939	4,52	0,220674	0,237624692	7,68
97	0,377548	0,353316458	6,42	0,118797	0,126786058	6,72
98	0,409423	0,41574036	1,54	0,113699	0,112260528	1,27
99	0,375423	0,382932742	2	0,113676	0,108671119	4,4
100	0,354178	0,353828904	0,1	0,138306	0,130620418	5,56
101	0,347155	0,353900191	1,94	0,121315	0,109238737	9,95
102	0,635095	0,617642054	2,75	0,266277	0,230390741	13,48
103	0,357176	0,350491112	1,87	0,133469	0,132568693	0,67
104	0,37942	0,399222633	5,22	0,10299	0,098442162	4,42
105	0,677487	0,689545178	1,78	0,267127	0,258207359	3,34
106	0,657795	0,664276324	0,99	0,198461	0,187544928	5,5
107	0,627541	0,644973392	2,78	0,189133	0,191128986	1,06
108	0,562377	0,549276883	2,33	0,22537	0,221371238	1,77
109	0,725274	0,686198711	5,39	0,272548	0,269616224	1,08
110	0,380789	0,399778305	4,99	0,164615	0,162691741	1,17
111	0,382547	0,359962919	5,9	0,109387	0,103288373	5,58
112	0,387245	0,392844509	1,45	0,136142	0,133619061	1,85
113	0,501937	0,460969552	8,16	0,172435	0,154731667	10,27
114	0,357305	0,366922604	2,69	0,14496	0,145746979	0,54
115	0,346054	0,354505989	2,44	0,115331	0,125916287	9,18
116	0,47124	0,454203227	3,62	0,175197	0,164803577	5,93
117	0,631933	0,637014339	0,8	0,00350482	-0,001690646	148,24
118	0,465725	0,519938928	11,64	0,174855	0,175440568	0,33
119	0,403736	0,397739349	1,49	0,137784	0,140878118	2,25
120	0,388055	0,414843968	6,9	0,138113	0,144779643	4,83
121	0,474079	0,494077661	4,22	0,175663	0,177660979	1,14
122	0,782645	0,752330553	3,87	0,149809	0,146983387	1,89
123	0,6996	0,728419756	4,12	0,19478	0,202051444	3,73

124	0,349735	0,306168225	12,46	0,132725	0,145806003	9,86
125	0,636534	0,626007728	1,65	0,00247046	-0,02333894	1044,72
126	0,661142	0,653541988	1,15	0,186754	0,205217663	9,89
127	0,381379	0,378495808	0,76	0,130911	0,128733156	1,66
128	0,433575	0,469398096	8,26	0,157709	0,265937294	68,63
129	0,387246	0,398078331	2,8	0,115104	0,115453663	0,3
130	0,387246	0,382624517	1,19	0,135199	0,152568583	12,85
	<b>Error promedio (%)</b>		4,186	<b>Error promedio (%)</b>		10,514*

\*Este valor de error porcentual promedio excluye los 17 valores atípicos resaltados en la tabla.

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020

#### ANEXO F. Valores reales vs predichos en la columna concentradora (C3)

# DATOS	VALOR REAL ETC3DIS	VALOR PREDICHO ETC3DIS	ERROR (%)	VALOR REAL ETC3BOT	VALOR PREDICHO ETC3BOT	ERROR (%)
1	0,409424	0,397741376	2,85	0,410056	0,397863249	2,97
2	0,433546	0,461239578	6,39	0,960311	0,931233151	3,03
3	0,375515	0,370067145	1,45	0,374837	0,371447398	0,9
4	0,353305	0,346370755	1,96	0,359965	0,422050457	17,25
5	0,385185	0,391031433	1,52	0,632269	0,614255417	2,85
6	0,402427	0,414256723	2,94	0,642507	0,596703747	7,13
7	0,495218	0,451509119	8,83	0,768282	0,631597089	17,79
8	0,356116	0,391842262	10,03	0,441764	0,60866869	37,78
9	0,499048	0,557508658	11,71	0,677064	0,677928586	0,13
10	0,545657	0,519284453	4,83	0,836404	0,83036957	0,72
11	0,363448	0,444188797	22,22	0,776337	0,762487005	1,78
12	0,582749	0,552660324	5,16	0,719146	0,744497646	3,53
13	0,594065	0,56360793	5,13	0,688499	0,735207536	6,78
14	0,380203	0,37313101	1,86	0,999643	0,964511206	3,51
15	0,451843	0,426435644	5,62	0,611253	0,613848842	0,42
16	0,933092	0,923923238	0,98	0,624189	0,629367371	0,83
17	0,822426	0,833447267	1,34	0,677672	0,661152776	2,44
18	0,611606	0,60099189	1,74	0,802511	0,832123894	3,69
19	0,512777	0,471725429	8,01	0,845505	0,83473003	1,27
20	0,467606	0,500816795	7,1	0,745949	0,783059688	4,97
21	0,328511	0,29021572	11,66	0,395062	0,467442849	18,32
22	0,338148	0,360810615	6,7	0,443216	0,464839078	4,88
23	0,375513	0,355841241	5,24	0,373544	0,363081494	2,8
24	0,557159	0,563527779	1,14	0,665145	0,646598147	2,79
25	0,370563	0,430197803	16,09	0,715995	0,687193832	4,02
26	0,379936	0,378447786	0,39	0,760245	0,789515848	3,85

27	0,3561	0,361064972	1,39	0,589238	0,600747476	1,95
28	0,337813	0,313628345	7,16	0,404922	0,425148618	5
29	0,409424	0,39994512	2,32	0,41006	0,398370824	2,85
30	0,375515	0,373741012	0,47	0,374875	0,374026507	0,23
31	0,483378	0,593628478	22,81	0,769476	0,858730702	11,6
32	0,362671	0,359467918	0,88	0,447724	0,457846758	2,26
33	0,405357	0,457374058	12,83	0,666813	0,638183004	4,29
34	0,569584	0,603171897	5,9	0,769522	0,841985545	9,42
35	0,442259	0,461887642	4,44	0,712792	0,67515371	5,28
36	0,329595	0,326224006	1,02	0,371935	0,397876569	6,97
37	0,357113	0,33032873	7,5	0,44626	0,510787986	14,46
38	0,375513	0,407365341	8,48	0,373081	0,400068438	7,23
39	0,559142	0,587837331	5,13	0,665994	0,645887654	3,02
40	0,360569	0,351644503	2,48	0,678474	0,675157589	0,49
41	0,437744	0,432378604	1,23	0,739845	0,678123771	8,34
42	0,388397	0,432761987	11,42	0,521639	0,701262864	34,43
43	0,344543	0,351299927	1,96	0,427948	0,405766497	5,18
44	0,387295	0,394445151	1,85	0,386243	0,387983903	0,45
45	0,508318	0,50772028	0,12	0,974227	0,959520589	1,51
46	0,365606	0,366094321	0,13	0,364732	0,370487851	1,58
47	0,414082	0,423426071	2,26	0,733722	0,769007338	4,81
48	0,542613	0,547700977	0,94	0,840461	0,814112961	3,13
49	0,387224	0,397541602	2,66	0,61115	0,620711956	1,56
50	0,634573	0,611839662	3,58	0,91563	0,847449696	7,45
51	0,421062	0,427350748	1,49	0,656434	0,598304172	8,86
52	0,358126	0,355909482	0,62	0,475741	0,515894673	8,44
53	0,361502	0,394425785	9,11	0,736829	0,594527581	19,31
54	0,877033	0,892405699	1,75	0,623352	0,593149641	4,85
55	0,704482	0,777050015	10,3	0,734101	0,732644805	0,2
56	0,571073	0,557391279	2,4	0,66446	0,642723868	3,27
57	0,393666	0,384356656	2,36	0,786231	0,702171416	10,69
58	0,447034	0,442211682	1,08	0,699206	0,661211174	5,43
59	0,465801	0,483980535	3,9	0,701894	0,725751322	3,4
60	0,498573	0,467575262	6,22	0,716541	0,691112323	3,55
61	0,54649	0,507289713	7,17	0,666219	0,695845627	4,45
62	0,387295	0,374394243	3,33	0,386318	0,38018016	1,59
63	0,63374	0,570846461	9,92	0,75556	0,743610562	1,58
64	0,567203	0,56206072	0,91	0,664116	0,679645203	2,34
65	0,488672	0,439135472	10,14	0,753223	0,7327403	2,72
66	0,612053	0,544670946	11,01	0,751591	0,752086796	0,07
67	0,433667	0,436391478	0,63	0,691766	0,651838305	5,77
68	0,338052	0,324923826	3,88	0,457285	0,48612095	6,31
69	0,476233	0,412041505	13,48	0,687088	0,676764687	1,5

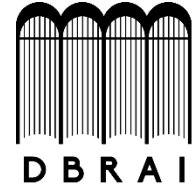
70	0,388255	0,470088561	21,08	0,772229	0,774571506	0,3
71	0,409424	0,407422461	0,49	0,410077	0,384339521	6,28
72	0,375515	0,367837007	2,04	0,374675	0,396895838	5,93
73	0,364032	0,35732017	1,84	0,474795	0,426483024	10,18
74	0,397874	0,383129836	3,71	0,674854	0,562494503	16,65
75	0,427864	0,421743692	1,43	0,693593	0,596344548	14,02
76	0,330431	0,391803714	18,57	0,375311	0,510614943	36,05
77	0,338787	0,413850707	22,16	0,550594	0,615303114	11,75
78	0,427101	0,429705565	0,61	0,789365	0,842880771	6,78
79	0,572845	0,50722352	11,46	0,84712	0,839069954	0,95
80	0,359851	0,39761633	10,49	0,747469	0,761514543	1,88
81	0,374255	0,372207609	0,55	0,532587	0,561107614	5,36
82	0,612968	0,511607536	16,54	0,748088	0,702114207	6,15
83	0,421962	0,479791425	13,7	0,585812	0,550027787	6,11
84	0,320791	0,342599945	6,8	0,504399	0,36917193	26,81
85	0,932161	0,89554521	3,93	0,624409	0,650520605	4,18
86	0,837679	0,811837245	3,08	0,698424	0,711368889	1,85
87	0,481337	0,518249287	7,67	0,866164	0,822959734	4,99
88	0,576299	0,452868794	21,42	0,783514	0,791804355	1,06
89	0,472823	0,549695036	16,26	0,744139	0,817219538	9,82
90	0,398797	0,471372619	18,2	0,544304	0,5292031	2,77
91	0,349602	0,329772368	5,67	0,428839	0,483599265	12,77
92	0,401985	0,395837479	1,53	0,711601	0,697937781	1,92
93	0,353156	0,362114162	2,54	0,357724	0,311432055	12,94
94	0,354527	0,417332632	17,72	0,529465	0,590107492	11,45
95	0,330891	0,316232059	4,43	0,403768	0,404784562	0,25
96	0,399759	0,396733859	0,76	0,555253	0,591491055	6,53
97	0,316225	0,322616811	2,02	0,454014	0,390468351	14
98	0,409424	0,418723	2,27	0,410059	0,408978693	0,26
99	0,375517	0,381036488	1,47	0,373779	0,372863899	0,24
100	0,35303	0,361025369	2,26	0,357837	0,371329286	3,77
101	0,341268	0,351949661	3,13	0,391941	0,402729036	2,75
102	0,474477	0,508557346	7,18	0,755022	0,699991127	7,29
103	0,332661	0,305119539	8,28	0,389833	0,377231935	3,23
104	0,349706	0,355862987	1,76	0,998158	0,965613111	3,26
105	0,453298	0,500273535	10,36	0,854732	0,824124021	3,58
106	0,547647	0,521938981	4,69	0,715625	0,740127212	3,42
107	0,363847	0,440648454	21,11	0,777773	0,751828891	3,34
108	0,428279	0,399060932	6,82	0,679679	0,676998305	0,39
109	0,657563	0,567708441	13,66	0,771645	0,741864611	3,86
110	0,342982	0,351032324	2,35	0,41385	0,406027653	1,89
111	0,341657	0,343766487	0,62	0,482157	0,47714481	1,04
112	0,387295	0,38982124	0,65	0,387073	0,376214775	2,81

<b>113</b>	0,390987	0,36144461	7,56	0,671075	0,566876365	15,53
<b>114</b>	0,350921	0,343911005	2	0,372376	0,418936703	12,5
<b>115</b>	0,342498	0,3536451	3,25	0,369653	0,361116353	2,31
<b>116</b>	0,382089	0,366916657	3,97	0,587765	0,554940107	5,58
<b>117</b>	0,577975	0,537205484	7,05	0,65817	0,691121766	5,01
<b>118</b>	0,382266	0,434719545	13,72	0,553926	0,601137996	8,52
<b>119</b>	0,354031	0,356391718	0,67	0,519606	0,54931389	5,72
<b>120</b>	0,345598	0,369418591	6,89	0,437444	0,444741902	1,67
<b>121</b>	0,394737	0,38111587	3,45	0,597082	0,625511565	4,76
<b>122</b>	0,78725	0,716755024	8,95	0,77934	0,789607613	1,32
<b>123</b>	0,566393	0,55350126	2,28	0,775436	0,834397141	7,6
<b>124</b>	0,34361	0,303337697	11,72	0,369025	0,428171468	16,03
<b>125</b>	0,585798	0,562011718	4,06	0,661249	0,657445794	0,58
<b>126</b>	0,574176	0,567160382	1,22	0,706801	0,710510421	0,52
<b>127</b>	0,342992	0,345135502	0,62	0,450494	0,41757262	7,31
<b>128</b>	0,401978	0,391064255	2,72	0,474196	0,391749975	17,39
<b>129</b>	0,387295	0,394126601	1,76	0,386285	0,391804594	1,43
<b>130</b>	0,387295	0,391180519	1	0,387083	0,398939978	3,06
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>5,906</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>6,092</b>

Realizado por: Dávila, Wendy, 2020.



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: 07 / 07 /2020

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> Wendy Estefanía Dávila Arteaga
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> Facultad de Ciencias
<b>Carrera:</b> Ingeniería Química
<b>Título a optar:</b> Ingeniera Química
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.



07-07-2020

0100-DBRAI-UPT-2020