



# **ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

## **FACULTAD DE CIENCIAS**

### **CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

# **MODELO DE PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE CLOROFORMO DURANTE EL PROCESO DE DESTILACIÓN DE UNA MEZCLA METANOL-CLOROFORMO**

## **Trabajo de titulación**

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

## **INGENIERO QUÍMICO**

**AUTOR:** BRAYAN DAVID ROSARIO ROSERO

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

Riobamba – Ecuador

2020

© 2020, **Brayan David Rosario Rosero.**

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, Brayan David Rosario Rosero, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor 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, 17 de julio de 2020

**Brayan David Rosario Rosero**  
**172983244-2**

**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. **MODELO DE PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE CLOROFORMO DURANTE EL PROCESO DE DESTILACIÓN DE UNA MEZCLA METANOL-CLOROFORMO**, realizado por el señor: **BRAYAN DAVID ROSARIO ROSERO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal 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. Carlos Ramiro Cepeda Godoy <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-07-17
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN</b>	_____	2020-07-17
Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-07-17

## **DEDICATORIA**

El presente trabajo lo dedico principalmente a Dios y a mi familia, sin dejar a un lado a todas aquellas personas que confiaron en mí, por el apoyo incondicional que me brindaron durante cada escalón de mi vida, y con el cual he podido culminar mi carrera profesional.

David

## **AGRADECIMIENTO**

Agradezco primeramente a Dios por brindarme la sabiduría necesaria para lograr una meta más. A mi madre Elisa Rosero por su amor y sacrificio, a mi hermana Kimberly Rosario por creer en mí, a mi tía Mirian Rosario por sus consejos y apoyo incondicional y a mi mamita Elvira Jimenez por sus oraciones, que han sido el pilar fundamental para alcanzar mis objetivos. De igual manera un agradecimiento especial a Wendy Dávila por su apoyo, impulsándome a mejorar y continuar.

Por otra parte, agradezco a mi director de tesis, destacado profesional, docente y amigo, el Ing. Daniel Chuquín, por su ayuda y acertada dirección para iniciar en la simulación, programación e inteligencia artificial aplicada en la ingeniería química con el presente trabajo.

Finalmente, agradezco a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo y en especial al Grupo de Investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, “GISAI” por permitir el desarrollo del proyecto; y a su vez a la Facultad de Ciencias, por su gran y noble labor educativa, formado ingenieros químicos por más de 19 años.

David

## TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	xi
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xiii
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xv
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xvi
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xvii
RESUMEN.....	xix
SUMMARY.....	xx

### CAPÍTULO I

<b>1</b>	<b>INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>1.1</b>	<b>Antecedentes.....</b>	<b>1</b>
<b>1.2</b>	<b>Planteamiento del problema.....</b>	<b>2</b>
<b>1.3</b>	<b>Objetivos.....</b>	<b>3</b>
<b>1.3.1</b>	<i>Objetivo General.....</i>	<i>3</i>
<b>1.3.2</b>	<i>Objetivos Específicos.....</i>	<i>3</i>
<b>1.4</b>	<b>Justificación del proyecto.....</b>	<b>4</b>
<b>1.5</b>	<b>Alcance.....</b>	<b>5</b>

### CAPÍTULO II

<b>2</b>	<b>MARCO TEÓRICO.....</b>	<b>6</b>
<b>2.1</b>	<b>Estado del Arte.....</b>	<b>6</b>
<b>2.1.1</b>	<i>Antecedentes.....</i>	<i>6</i>
<b>2.2</b>	<b>Bases Teóricas.....</b>	<b>10</b>
<b>2.2.1</b>	<i>Destilación.....</i>	<i>10</i>
<b>2.2.1.1</b>	<i>Presión de vapor.....</i>	<i>10</i>

2.2.1.2	<i>Volatilidad relativa</i> .....	11
2.2.1.3	<i>Diagramas de punto de ebullición (Txy) y diagrama de equilibrio(xy)</i> .....	11
2.2.1.4	<i>Esquema de una columna de destilación</i> .....	14
2.2.2	<b><i>Separación de mezclas azeotrópicas</i></b> .....	15
2.2.2.1	<i>Azeótropo</i> .....	15
2.2.2.2	<i>Fenómeno azeotrópico</i> .....	15
2.2.2.3	<i>Clasificación de azeótropos</i> .....	16
2.2.2.4	<i>Destilación de mezclas azeotrópicas</i> .....	18
2.2.2.5	<i>Separación de metanol-cloroformo</i> .....	22
2.2.3	<b><i>DWSIM - Simulador de procesos químicos</i></b> .....	23
2.2.3.1	<i>Características</i> .....	24
2.2.3.2	<i>Interfaz de plataforma DWSIM</i> .....	25
2.2.3.3	<i>Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos</i> .....	25
2.2.4	<b><i>Inteligencia Artificial (IA)</i></b> .....	27
2.2.4.1	<i>Neurona artificial</i> .....	27
2.2.4.2	<i>Redes neuronales artificiales</i> .....	29
2.2.4.3	<i>Arquitectura de una red neuronal</i> .....	29
2.2.4.4	<i>Clasificación de las redes neuronales artificiales</i> .....	30
2.2.4.5	<i>Selección de un modelo de red neuronal</i> .....	32
2.2.4.6	<i>Selección de un algoritmo de entrenamiento para la red neuronal</i> .....	33
2.2.4.7	<i>Redes neuronales en Matlab</i> .....	34
2.3	<b>Marco Legal</b> .....	35
2.3.1	<b><i>Licencia del simulador de procesos químicos DWSIM</i></b> .....	37

### CAPÍTULO III

3	<b>METODOLOGÍA</b> .....	38
3.1	<b>Establecimiento de parámetros</b> .....	39
3.1.1	<b><i>Operacionalización de variables</i></b> .....	40



3.1.1.1	<i>Selección de variables</i> .....	40
3.1.1.2	<i>Operación de variables</i> .....	40
3.2	<b>Simulación DWSIM</b> .....	41
3.2.1	<i>Validación de la simulación</i> .....	43
3.3	<b>Pre-procesamiento de la base de datos</b> .....	43
3.4	<b>Diseño de la red neuronal artificial</b> .....	44
3.4.1	<i>Normalización y acondicionamiento de entradas y salidas</i> .....	44
3.4.2	<i>Desarrollo de la red neuronal</i> .....	45
3.4.3	<i>Arquitectura de la red neuronal</i> .....	46
3.5	<b>Entrenamiento de la red neuronal</b> .....	48
3.5.1	<i>Selección del algoritmo de entrenamiento</i> .....	48
3.6	<b>Validación de la red neuronal</b> .....	51
3.7	<b>Análisis estadístico</b> .....	51
3.7.1	<i>Análisis ANOVA</i> .....	51
3.8	<b>Interfaz gráfica de usuario (GUI)</b> .....	52

## CAPÍTULO IV

4	<b>GESTIÓN DEL PROYECTO</b> .....	53
4.1	<b>Cronograma</b> .....	53
4.2	<b>Presupuesto</b> .....	54
4.3	<b>Recursos materiales</b> .....	54
4.4	<b>Resultados</b> .....	54
4.4.1	<i>Sistema de destilación</i> .....	54
4.4.1.1	<i>Balance de masa del sistema de destilación</i> .....	57
4.4.2	<i>Análisis de los datos generados en DWSIM</i> .....	60
4.4.3	<i>Programación de la red neuronal artificial</i> .....	65
4.4.3.1	<i>Normalización de los datos</i> .....	65
4.4.3.2	<i>Código de la red neuronal artificial</i> .....	65

<b>4.4.4</b>	<b><i>Programación de la interfaz gráfica de usuario</i></b> .....	66
<b>4.4.4.1</b>	<b><i>Código de la interfaz gráfica de usuario</i></b> .....	67
<b>4.4.5</b>	<b><i>Determinación de la idoneidad de la RNA</i></b> .....	67
<b>4.4.5.1</b>	<b><i>Análisis ANOVA</i></b> .....	67
<b>4.4.6</b>	<b><i>Predicción de valores con la red neuronal artificial</i></b> .....	72
<b>CONCLUSIONES</b> .....		74
<b>RECOMENDACIONES</b> .....		75
<b>GLOSARIO</b>		
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>		
<b>ANEXOS</b>		

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2.</b> Características de DWSIM.....	24
<b>Tabla 2-2.</b> Funciones de activación .....	28
<b>Tabla 3-2.</b> Clasificación de los modelos de redes neuronales .....	32
<b>Tabla 4-2.</b> Marco legal referentes al uso de software establecidos en el código orgánico de la economía social de los conocimientos, creatividad e innovación. ....	36
<b>Tabla 1-3.</b> Parámetros de diseño óptimos para la destilación por oscilación de presión de una mezcla binaria metanol-cloroformo. ....	39
<b>Tabla 2-3.</b> Variables de operación establecidas en el sistema de destilación. ....	40
<b>Tabla 3-3.</b> Condiciones de la corriente de alimentación. ....	42
<b>Tabla 4-3.</b> Especificaciones para las columnas de baja presión y alta presión.....	42
<b>Tabla 5-3.</b> Rango de especificaciones de la corriente de alimentación. ....	43
<b>Tabla 6-3.</b> Variables de entrada y salida establecidas en el modelo de predicción .....	44
<b>Tabla 7-3.</b> Ensayos de entrenamiento seleccionados. ....	47
<b>Tabla 8-3.</b> Tabla ANOVA para el análisis de la varianza .....	51
<b>Tabla 1-4.</b> Cronograma del proyecto .....	53
<b>Tabla 2-4.</b> Presupuesto del proyecto.....	54
<b>Tabla 3-4.</b> Corriente de destilado (D1) en la columna de baja presión (C1) .....	55
<b>Tabla 4-4.</b> Corriente de residuo (W1) en la columna de baja presión (C1).....	55
<b>Tabla 5-4.</b> Corriente de destilado (D2) en la columna de alta presión (C2).....	55
<b>Tabla 6-4.</b> Corriente de residuo (W2) en la columna de alta presión (C2).....	56
<b>Tabla 7-4.</b> Validación de la simulación .....	56
<b>Tabla 8-4.</b> Datos de concentración de cloroformo en la alimentación, destilados y residuos ....	57

<b>Tabla 9-4.</b> Resumen de resultados del balance de masa del sistema de destilación .....	60
<b>Tabla 10-4.</b> Base de datos de entrenamiento generada en DWSIM para separar metanol-cloroformo en la destilación por oscilación de presión.....	61
<b>Tabla 11-4.</b> Base de datos de validación generada en DWSIM para separar metanol-cloroformo en la destilación por oscilación de presión. ....	64
<b>Tabla 12-4.</b> Tabla ANOVA para el flujo molar de destilado en la columna de baja presión. ....	68
<b>Tabla 13-4.</b> Resumen de Tabla ANOVA para flujos y fracciones molares de cloroformo en la columna de baja y alta presión .....	71
<b>Tabla 14-4.</b> Comparación de los resultados del sistema de destilación por oscilación de presión para separar metanol-cloroformo. ....	73

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2.</b> Diagrama de puntos de ebullición para benceno (A)-tolueno (B) a 101.325 kPa....	12
<b>Figura 2-2.</b> Diagrama de equilibrio para el sistema benceno (A)-tolueno (B) a 101.32 kPa.....	13
<b>Figura 3-2.</b> Concentración de vapor ( $y_1$ ) y líquido ( $x_1$ ) en función de la volatilidad relativa ( $\alpha$ ). .....	13
<b>Figura 4-2.</b> Representación esquemática de una columna de destilación. ....	14
<b>Figura 5-2.</b> Diagramas de equilibrio del punto de ebullición: (a) azeótropo de ebullición máxima. (b) azeótropo de ebullición mínima. ....	17
<b>Figura 6-2.</b> Diagrama de fase binaria a una presión fija: (a) azeótropo homogéneo; (b) azeótropo heterogéneo. ....	17
<b>Figura 7-2.</b> Comparación de las curvas de equilibrio para una mezcla azeotrópica homogénea y heterogénea. ....	18
<b>Figura 8-2.</b> Planta de destilación extractiva. ....	19
<b>Figura 9-2.</b> Planta de destilación azeotrópica. ....	19
<b>Figura 10-2.</b> Diagrama T-x, y de la mezcla acetonitrilo-agua a diferentes presiones (sensibilidad a la presión del punto azeotrópico). ....	20
<b>Figura 11-2.</b> Diagrama de flujo del esquema convencional de destilación por oscilación de presión. ....	21
<b>Figura 12-2.</b> Diagrama esquemático para la destilación continua por oscilación de presión: (a) azeótropo sensible a la presión, de ebullición mínima y (b) secuencia de columna. ....	21
<b>Figura 13-2.</b> Curva de Txy para la mezcla de metanol-cloroformo a (A) 1 atm, (B) 10 atm. ....	22
<b>Figura 14-2.</b> Diagrama de flujo de la destilación por oscilación de presión de metanol-cloroformo .....	23
<b>Figura 15-2.</b> Interfaz DWSIM .....	25
<b>Figura 16-2.</b> Paquetes de propiedades. ....	26

<b>Figura 17-2.</b> Operaciones de la unidad.....	27
<b>Figura 18-2.</b> Estructura de la neurona artificial. ....	27
<b>Figura 19-2.</b> Esquema de una red de tres capas totalmente interconectadas.....	30
<b>Figura 20-2.</b> Interfaz gráfica de usuario. ....	34
<b>Figura 1-3.</b> Fases de la metodología de trabajo .....	38
<b>Figura 2-3.</b> Estructura de control básica para la destilación por oscilación de presión. ....	39
<b>Figura 3-3.</b> Esquema de destilación por oscilación de presión en DWSIM. ....	41
<b>Figura 4-3.</b> Herramienta neural network fitting.....	45
<b>Figura 5-3.</b> Selección de datos normalizados de entrada y salida. ....	45
<b>Figura 6-3.</b> Topología de la red neuronal artificial. ....	48
<b>Figura 7-3.</b> Entrenamiento de la red neuronal artificial. ....	50
<b>Figura 8-3.</b> Ventana guía de inicio rápido para crear la interfaz gráfica de usuario.....	52
<b>Figura 9-3.</b> Diseño de la interfaz gráfica de usuario para la RNA. ....	52
<b>Figura 1-4.</b> Condiciones de la destilación por oscilación de presión de metanol – cloroformo .	57
<b>Figura 2-4.</b> Interfaz gráfica de usuario para el manejo del modelo de predicción. ....	67

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-4.</b> Correlación de entrenamiento de la red neuronal artificial.....	66
<b>Gráfico 2-4.</b> Flujo molar de destilado en la columna de baja presión .....	68
<b>Gráfico 3-4.</b> Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de baja presión .....	69
<b>Gráfico 4-4.</b> Flujo molar de residuo en la columna de baja presión.....	69
<b>Gráfico 5-4.</b> Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de baja presión .....	69
<b>Gráfico 6-4.</b> Flujo molar de destilado en la columna de alta presión .....	70
<b>Gráfico 7-4.</b> Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de alta presión .....	70
<b>Gráfico 8-4.</b> Flujo molar de residuo en la columna de alta presión .....	70
<b>Gráfico 9-4.</b> Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de alta presión.....	71

## **ÍNDICE DE ANEXOS**

**ANEXO A.** Variables utilizadas en la codificación de la red neuronal artificial

**ANEXO B.** Principales variables utilizadas en la codificación de la GUI

**ANEXO C.** Normalización de los datos de entrenamiento de la red neuronal

**ANEXO D.** Normalización de los datos de validación de la red neuronal

**ANEXO E.** Código de la red neuronal artificial y entrenamiento de la red

**ANEXO F.** Código de la red neuronal artificial en la validación

**ANEXO G.** Código de la interfaz gráfica de usuario



## ÍNDICE DE ABREVIATURAS

PSD	Destilación por oscilación de presión
RNA	Red neuronal artificial
MSE	Error cuadrático medio
R	Coefficiente de correlación de Pearson
$F$	Razón en análisis ANOVA
K	Kelvin
atm	Atmosferas
h	Hora
Kg	Kilogramo
Kmol	Kilomol
Kg/h	Kilogramo/hora
Kmol/h	Kilomol por hora
m <sup>3</sup> /h	Metro cubico por hora
F	Corriente de Flujo
X <sub>C</sub>	Fracción molar de cloroformo
RR	Relación de Reflujo
T <sub>R</sub>	Temperatura del calderín (Reboiler)
D	Flujo molar en el destilado de la columna
W	Flujo molar en el residuo de la columna
VLE	Equilibrio vapor-líquido
$P$	Presión total
$p_i$	Presión parcial del componente puro $i$
$p_i^0$	Presión de vapor del componente puro $i$
$x_i$	Fracción molar del componente $i$ en el líquido
$y_i$	Fracción molar del componente $i$ en el vapor
$K$	Constante de equilibrio de fase
$\alpha_{ij}$	Volatilidad relativa del componente $i$ con respecto al componente $j$
$\Phi_i^v$	Coefficiente de fugacidad del vapor
$f_i^{0L}$	Fugacidad del líquido en el estado estándar
$\gamma_i^L$	Coefficiente de actividad
MLP	Perceptrón multicapa
BP	Retropropagación
BR	Regularización bayesiana

BRANN	Redes neuronales con regularización bayesiana
GUI	Interfaz gráfica de usuario
$x_n$	Entradas de la neurona artificial
$w_n$	Pesos sinápticos
$E$	Potencial de la neurona
$\theta$	Valor umbral propio de la neurona
$S$	Salida de la neurona artificial
$f$	Función de activación
$X_{\text{Norm}}$	Valor normalizado
$X$	Valor que se desea normalizar
$X_{\text{max}}$	Valor máximo
$X_{\text{min}}$	Valor mínimo
$F(\omega)$	Pesos de la red en la función de entrenamiento
$E_\omega$	Suma de los pesos de la red al cuadrado
$E_D$	Suma de los errores de la red
$\alpha, \beta$	Parámetros de la función objetivo (entre 0 y 1)

## RESUMEN

El objetivo de este trabajo consiste en modelar el sistema de destilación por oscilación de presión para separar la mezcla metanol-cloroformo y predecir por inteligencia artificial la concentración de cloroformo. La mezcla de metanol-cloroformo genera un azeótropo de ebullición mínima con aproximadamente 64% en moles de cloroformo a 327 K bajo presión atmosférica. Las simulaciones del sistema de destilación se llevan a cabo con el software DWSIM. Los datos experimentales relacionados de la literatura se han utilizado para construir el modelo. El modelo de predicción utiliza una capa oculta y 100 neuronas en la capa oculta. La temperatura y la fracción molar de cloroformo en la alimentación, la relación de reflujo y temperatura de reboiler en la columna de baja y alta presión se han seleccionado como variables de entrada y la fracción molar de cloroformo y velocidad de flujo en el destilado y residuo de las columnas como variables de salida. El coeficiente de correlación de Pearson de 0,99919 y error cuadrático medio de  $1,52 \times 10^{-14}$  para un conjunto con 100 datos de entrenamiento y prueba de la red; y un valor p estadístico mayor que 0,05 en la validación de la red con un nuevo conjunto de 25 datos, confirman que existe una conformidad razonable entre los valores predichos y los datos reales. Los resultados indican que el modelo de red neuronal artificial demostró ser eficiente para predecir la concentración de cloroformo obtenida al destilar una mezcla de metanol-cloroformo con una alimentación constante de 100 kmol/h en un sistema de destilación por oscilación de presión que opera con dos columnas mantenidas a 1 y 10 atm. Se recomienda usar el modelo de predicción para calcular la composición de los productos obtenidos al destilar por oscilación de presión otras mezclas binarias o multicomponentes que exhiban azeótropos de ebullición mínima.

**Palabras clave:** <INGENIERÍA Y TECNOLOGIA QUÍMICA>, <CONTROL DE PROCESOS>, <CONTROL AUTOMÁTICO>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <DESTILACIÓN POR OSCILACIÓN DE PRESIÓN (PSD)>, <AZEÓTROPO>, <METANOL>, <CLOROFORMO>



06-07-2020

0099-DBRAI-UPT-2020

## SUMMARY

The goal of this work is to model the pressure swing distillation system to separate the methanol-chloroform mixture and predict the concentration of chloroform by artificial intelligence. The methanol-chloroform mixture generates a minimum boiling azeotrope with approximately 64 mol% chloroform at 327 K under atmospheric pressure. The simulations of the distillation system are carried out with the DWSIM software. Related experimental data from the literature have been used to construct the model. The prediction model uses one hidden layer and 100 neurons in the hidden layer. The temperature and the molar fraction of chloroform in the feed, the reflux ratio, and reboiler temperature in the low and high-pressure column have been selected as input variables and the molar fraction of chloroform and flow rate in the distillate and residue of the columns as output variables. Pearson's correlation coefficient of 0.99999 and mean squared error of  $1.52 \times 10^{-14}$  for a set with 100 training and test data from the network; and a statistical p-value greater than 0.05 in the network validation with a new set of 25 data, confirm that there is reasonable compliance between the predicted values and the actual data. The results indicate that the artificial neural network model proved to be efficient in predicting the chloroform concentration obtained by distilling a methanol-chloroform mixture with a constant feed of 100 kmol / h in a pressure swing distillation system that operates with two columns maintained at 1 and 10 atm. It is recommended to use the prediction model to calculate the composition of the products obtained distilling by pressure oscillation other binary or multi-component mixtures that exhibit minimum boiling azeotropes.

**Keywords:** <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY>, <PROCESS CONTROL>, <AUTOMATIC CONTROL>, <ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS (ANN)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <PRESSURE SWING DISTILLATION (PSD)>, <AZEOTROPE>, <METHANOL>, <CHLOROFORM>

# CAPÍTULO I

## 1 INTRODUCCIÓN

### 1.1 Antecedentes

En la industria de procesos químicos, la pureza deseada del producto se obtiene mediante procesos de separación, siendo la destilación uno de los procesos más utilizados al consumir aproximadamente un 95% de la energía total utilizada en la industria de separación química (Mahdi et al., 2015, p.308). La destilación se basa en diferencias de las composiciones entre las fases líquida y vapor. Así, los procesos de destilación convencionales se utilizan para mezclas ideales o con un comportamiento de equilibrio vapor-líquido casi ideal. Si la mezcla tiene un comportamiento de equilibrio vapor-líquido no ideal, puede formar un azeótropo, que es una mezcla de componentes químicos con composiciones idénticas de fases líquidas y de vapor en equilibrio (Hosgor et al., 2014, p.166). Para superar esta dificultad, se han aplicado algunos procesos especiales de destilación, como la destilación por oscilación de presión (PSD), la destilación extractiva (DE) y la destilación azeotrópica (AD) (Chen et al., 2018, p.237).

La destilación por oscilación de presión se ha convertido en un método eficiente para separar mezclas azeotrópicas sensibles a la presión, cuya composición azeotrópica cambia claramente a medida que cambia la presión del sistema. Este método es utilizado por varios investigadores, ya que presenta ventajas al no introducir un tercer componente (agente de arrastre). Además protege el medio ambiente y ahorra energía mediante la integración de calor (Lladosa et al., 2011, p.1267).

Sin embargo, los experimentos de laboratorio en destilación por oscilación de presión o destilación extractiva demanda tiempo y son costosos debido a la gran cantidad de parámetros involucrados. Por lo tanto, resulta conveniente predecir datos experimentales con la ayuda de programas de simulación disponibles (Lladosa et al., 2011, p.1266).

En la actualidad, el uso de simuladores para el modelado y diseño de procesos se convierte en una herramienta eficaz para el desarrollo y optimización de procesos en la industria química y petroquímica. En este sentido, este tipo de tecnología contribuye a la I+D+i en diferentes plantas de producción (Lladosa et al., 2011, p.1267).

## **1.2 Planteamiento del problema**

Si se analiza superficialmente la destilación, una operación de transferencia de masa, su cálculo requiere datos de equilibrio de mezclas binarias, ternarias o múltiples. Obtener estos datos resulta tedioso y demora el proceso; en este sentido la inteligencia artificial se ha convertido en una herramienta de apoyo en el estudio y predicción de procesos (Quintana, 2015, p.13). Dentro de las técnicas de la inteligencia artificial se encuentran las redes neuronales artificiales, esta técnica emplea modelos computacionales que semejan de cierta manera el funcionamiento del cerebro humano y han ganado una gran popularidad en el ámbito del aprendizaje automático y el análisis de datos. (Quintana, 2015, p.13).

Uno de los desafíos que limita el uso del modelado y diseño de procesos es la falta de modelos y bancos de datos verificados para estimar las propiedades termofísicas. Sin embargo, en este caso, se utilizan datos experimentales reportados en bibliografía, para simular el proceso de destilación por oscilación de presión; y así obtener un conjunto de datos confiable y consistente que permita diseñar el modelo de predicción.

De acuerdo con el problema descrito, en este trabajo se hace énfasis en el desarrollo de una red neuronal artificial para obtener un modelo de predicción de la concentración de cloroformo, al relacionar un conjunto de variables de salida con un conjunto de variables de entrada utilizando el Toolbox de Matlab. También se utiliza el software para procesos químicos de código abierto DWSIM para simular el proceso de destilación por oscilación de presión de la mezcla azeotrópica metanol-cloroformo.

## **1.3 Objetivos**

### ***1.3.1 Objetivo General***

Modelar un sistema de destilación por oscilación de presión para la predicción de la concentración de cloroformo presente en una mezcla azeotrópica metanol-cloroformo mediante inteligencia artificial.

### ***1.3.2 Objetivos Específicos***

- Diseñar una red neuronal artificial para la predicción de la concentración de cloroformo en una mezcla azeotrópica de metanol-cloroformo.
- Validar las composiciones obtenidas por la red neuronal artificial con valores reales indicados en bibliografía.
- Desarrollar una interfaz gráfica de usuario efectiva e intuitiva para el manejo de la red neuronal artificial.

#### **1.4 Justificación del proyecto**

Utilizar herramientas tecnológicas es una de las habilidades de un Ingeniero Químico, quien mediante la simulación usando software especializados es capaz de desarrollar cálculos termodinámicos complejos, permitiéndole así controlar y simular procesos químicos de manera eficaz. Por ello, las herramientas tecnológicas cumplen un papel fundamental en el diseño y optimización de procesos industriales.

Una red neuronal artificial puede considerarse desde un punto de vista de ingeniería, como un modelo empírico no lineal que representa datos de entrada-salida, hace predicciones en el tiempo, clasifica datos y reconoce patrones. Las redes neuronales pueden ser altamente no lineales, pueden aprender fácilmente, requieren poco o ningún conocimiento a priori de la estructura, son tolerantes a fallas y pueden manejar problemas complejos que no pueden ser manejados satisfactoriamente por los métodos tradicionales.

Por lo tanto, diseñar una red neuronal artificial para las estimaciones de datos y cálculos presentes en la destilación por oscilación de presión de mezclas azeotrópicas es una forma de aportar al desarrollo tecnológico para la industria y educación. En efecto, éste es un campo de desempeño de un Ingeniero Químico de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, el cual está capacitado para diseñar, controlar y evaluar procesos industriales en general, mediante la aplicación de simuladores computacionales.



## **1.5 Alcance**

Este proyecto está vinculado a la línea de investigación de procesos tecnológicos, artesanales e industriales de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo y en específico con el grupo de investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería “GISAI”, el cual tiene como propósito el desarrollo de proyectos de investigación científica y tecnológica, en el ámbito del desarrollo sostenible; garantizando el fortalecimiento académico, y el mejoramiento de la calidad de vida de la sociedad.

De acuerdo con los aspectos técnico-económicos, esta investigación es factible para su desarrollo. Se cuentan con los conocimientos necesarios en las disciplinas pertinentes al tema seleccionado y en cuanto a los recursos es importante mencionar, que la universidad ha permitido el uso de las herramientas tecnológicas suficientes para el correcto desarrollo investigativo. La investigación pretende ampliar la disponibilidad de recursos como herramientas tecnológicas para el desarrollo educativo de los estudiantes de pregrado de ingeniería química y carreras afines, quienes serán los principales beneficiarios del uso del simulador de código abierto DWSIM, así como también del futuro desarrollo de proyectos a través del diseño de redes neuronales artificiales (RNA).

## CAPÍTULO II

### 2 MARCO TEÓRICO

#### 2.1 Estado del Arte

##### 2.1.1 Antecedentes

La investigación moderna sobre destilación se concentra principalmente en la separación de mezclas no ideales con enfoque en la separación azeotrópica (Widagdo y Seider, 1996, p.96). Métodos especiales de destilación, incluida la destilación azeotrópica (Honghai et al., 2015; Li et al., 2015b; Yu et al., 2015; citados en Liang et al., 2017, p.319), destilación extractiva (An et al., 2015; Luyben, 2015; You et al., 2015; citados en Liang et al., 2017, p.319), y la destilación por oscilación de presión (PSD) (Luyben, 2013a; Muñoz et al., 2006; Mulia-Soto y Flores-Tlacuahuac, 2011; Qasim et al., 2015; citados en Liang et al., 2017, p.319), son formas comunes de separación de azeótropos.

La destilación por oscilación de presión (PSD) se basa en el hecho de que una mezcla de componentes puede mostrar sensibilidad a la presión, lo que significa que un simple cambio de presión puede alterar la composición del azeótropo (Hosgor et al., 2014, p.166). La sensibilidad a la presión de los azeótropos se conoce desde la década de 1860 (Roscoe, 1860, 1862; Roscoe y Dittmar, 1860; citados en Liang et al., 2017, p.319). Lewis en 1928, fue el primero, que propuso destilar las mezclas azeotrópicas por PSD (Liang et al., 2017, p.319). Desde entonces, el efecto de la presión sobre las mezclas azeotrópicas ha sido explorado en muchos artículos de estudios teóricos y experimentales (Abildskov y O'Connell, 2015; Horsley, 1947; Knapp, 1991; Wasylkiewicz et al., 2003; citados en Liang et al., 2017, p.319).

El diseño, modelado y optimización de los procesos de destilación por oscilación de presión se estudian en varios artículos (Hamad y Dunn, 2002; Lee et al., 2011; Luyben, 2012; Kim et al., 2013; citados en Hosgor et al., 2014, p.166). La capacidad de control dinámico de los procesos de destilación por oscilación de presión se considera en la literatura abierta para diferentes mezclas azeotrópicas binarias (Repke et al., 2005; Luyben, 2008a; Mulia Sotoa y Flores-Tlacuahuac, 2011; Wei et al., 2013; citados en Hosgor et al., 2014, p.166).

Por otra parte, las actividades de investigación en redes neuronales artificiales (RNA) han demostrado que las RNA tienen potentes capacidades de clasificación y reconocimiento de patrones. Inspirados en los sistemas biológicos, particularmente en la investigación del cerebro

humano, las RNA pueden aprender de la experiencia y generalizarla. Desde hace algunos años, las RNA se están utilizando para una amplia variedad de tareas en muchos campos diferentes de negocios, industria y ciencia (Widrow et al., 1994; citado en Zhang, Patuwo y Hu 1998, p.35).

En 1957 Frank Rosenblatt comenzó el desarrollo del perceptrón, la red neuronal artificial más antigua; utilizada para aplicación como identificador de patrones. Posteriormente, en 1986, David Rumelhart/G. Hinton, redescubrieron el algoritmo de aprendizaje de propagación hacia atrás (backpropagation), planteando un panorama alentador con respecto a las futuras investigaciones y desarrollo de las redes neuronales (Matich, 2001, p.6). Una de las principales áreas de aplicación de las RNA es el pronóstico (Sharda, 1994; citado en Zhang, Patuwo y Hu 1998, p.35). Las RNA proporcionan una herramienta alternativa atractiva tanto para los investigadores de predicción como para los profesionales.

En los últimos años, el modelado de redes neuronales artificiales se utiliza con frecuencia en varias aplicaciones tecnológicas y de separación, principalmente debido a su poder para resolver problemas de convergencia presentados en modelos rigurosos y simplificados, manejando un número menor de variables y realizando cálculos en menos tiempo (Ochoa, Jobson y Smith, 2012, p.983). La capacidad de RNA para mapear relaciones no lineales entre las entradas y salidas de un sistema o proceso ha extendido el campo de aplicaciones de esta herramienta de modelado (Khayet y Cojocar, 2013, p.102). La mayoría de las aplicaciones de redes neuronales para sistemas de destilación tienen como objetivo modelar la especificación del producto en la salida del modelo. Una medición precisa de la composición de los componentes separados es necesaria para estimar la pureza de los productos (Ochoa, Jobson y Smith, 2013, p.179). Las redes neuronales artificiales se han aplicado a los casos simples de sistemas binarios (Singh, Tyagi y Kumar, 2013) y, a veces, se dirige al control de composición inferencial (Osman y Ramasamy, 2010) y al control predictivo para el modelado de una columna (Fernandez de Cañete et al., 2010). En algunos trabajos relacionados, se presentan aplicaciones para el control de sistemas de múltiples componentes para la columna convencional (Bahar et al., 2004) y para la columna de pared divisoria (Ge et al., 2014). Una mayor rentabilidad económica es a menudo el principal objetivo en la optimización de los procesos de destilación (Amit, Barjeev y Vishal; citados en Osuolale y Zhang, 2016, p.563)(Singh, Tyagi y Kumar 2013). En este sentido, Porrazzo et al. (2013) desarrolla un sistema de control de optimización basado en redes neuronales para la unidad de destilación de membrana con desalinización de agua de mar alimentada por energía solar. Jalee y Aparna (2016) utilizan estimadores de sensores suaves neuro-difusos para predecir por RNA las composiciones en la destilación de benceno - tolueno. Sun et al. (2016) desarrollan un sensor suave basado en redes neuronales para estimar, monitorear y controlar en tiempo real las propiedades del producto obtenido en la unidad de destilación de crudo. Muhsin y Zhang (2017) utilizan redes neuronales para modelar y optimizar el proceso de destilación con hidrotatamiento de petróleo crudo (HDT). Dantas et al. (2020) optimizan el

proceso de destilación molecular del aceite de pachulí para obtener fracciones ricas en pachulol utilizando la metodología de superficie de respuesta (RSM) y la red neuronal artificial. Dudchenko y Mauter (2020) utiliza RNA para estimar parámetros físicos en la destilación de membrana.

En Ecuador, el uso de redes neuronales artificiales se ha desarrollado con rapidez especialmente en áreas de la medicina, las finanzas y la industria que se encuentra en constante automatización. Entre algunas investigaciones referentes a la industria podemos mencionar a Sánchez (2000) en su trabajo “Identificación, control y simulación de un sistema usando redes neurales” estudia las redes neurales de alimentación directa, concretamente al perceptrón, a la red ADALINE y a la red de propagación inversa; proponiendo un método de control alternativo con redes neurales usando técnicas de control adaptivo para controlar el problema de la bola suspendida en motores DC. La simulación como el diseño y creación de las redes neurales se realiza con el programa Matlab 5.3 y su Toolbox de redes neuronales artificiales. Suquillo (2012), hace uso de las RNA para desarrollar controladores de temperatura de flujo de aire utilizando arquitecturas de: controlador con modelo de referencia, controlador con red neuronal inversa, controlador con identificación de un controlador ya existente. Las mencionadas arquitecturas fueron desarrolladas en Matlab, a partir del cual se obtienen los patrones de entrenamiento; el aprendizaje y entrenamiento de las redes neuronales se realiza en el software NeuroSystems V5.0 de Siemens proporcionando el módulo neuronal de control; siendo factible su implementación a escala industrial. Ávila (2013), en su proyecto de investigación “Modelos basados en inteligencia artificial para el diseño de estructuras no convencionales de hormigón armado”, propone esquemas para la predicción de la capacidad última de un nuevo tipo de vigas, el ancho máximo de grietas superficiales, y también propone una metodología para el diseño de estos elementos. Seleccionado una arquitectura de perceptrón, con una capa intermedia que le permite, con gran nivel de aproximación predecir el comportamiento de elementos estructurales, cuya respuesta mecánica responde a procesos altamente no lineales. Garcés y León (2015), describen la aplicación de métodos alternativos de control inteligente, para el monitoreo y control de una planta de nivel. Los métodos implementados, se basan en la teoría de la lógica difusa (Fuzzy Logic) y redes neuronales (Neuronal Networks). Constante y Gordón (2015), presentan técnicas de visión artificial aplicadas a la detección de características en frutas destinadas a la industria alimenticia; para ello se utiliza un sistema de visión por computador basado en redes neuronales artificiales organizadas en una arquitectura profunda. El algoritmo de programación utiliza librerías de OpenCV, las cuales son montadas sobre Visual C++ Express versión 2010, un software libre. Aldaz y Flor (2016), desarrollan un sistema de control inteligente basado en redes neuronales para el proceso de pasteurización de leche en la planta de lácteos ESPOCH; utilizando el programa de ingeniería Matlab 2014 y mediante pruebas de funcionamiento determinaron que el sistema de control

inteligente basado en redes neuronales con la red de tipo feedforward backpropagation con algoritmo Levenberg Marquardt y función de regularización (MSE) puede ser utilizado en procesos de tipo industrial en donde se utiliza gran cantidad de datos. Sinaluisa (2017), propone un modelo basado en la red neuronal artificial Feedforward Backpropagation capaz de predecir la demanda de energía eléctrica en la empresa eléctrica Riobamba S.A con un porcentaje de error absoluto inferior al generado por la metodología utilizada en la distribuidora. El modelo de predicción no solo contribuye con la planificación de operación y mantenimiento de las centrales eléctricas, también sirve de modelo para otras instituciones con similares características. Carpio (2017), realiza el diseño y simulación de un sistema para detección de fallas utilizando el filtro de Kalman como estimador de parámetros para un tanque de mezcla de fluidos. El resultado de la estimación es comparado con parámetros de la planta libre de error para generar residuos que son procesados con una red neuronal del tipo feedforward para clasificar a las fallas de acuerdo al elemento en que se originaron, un sensor o un actuador. Pruna y Vásquez (2018), proponen implementar un sistema de clasificación y empaquetado de helados mediante redes neuronales y visión artificial con aprendizaje supervisado en una micro empresa. El sistema consta de cuatro partes: parte mecánica, control, sistema inteligente de clasificación y una interface con el usuario. Arroba y Rocha (2019), diseñan y simulan un controlador regulador descentralizado en un sistema reactor-separador-reciclador (RSR) y el desarrollo de estimadores de concentración basado en redes neuronales para estimar la concentración del glicol propileno a la salida del Reactor CSTR (Reactor de Tanque Agitado Continuo) en el sistema RSR. La variable estimada se somete a pruebas de perturbación de temperatura y concentración inicial en el punto de mezcla para comparar el tiempo de establecimiento y el índice de rendimiento ISE de los controladores identificados en una interfaz gráfica desarrollada en Matlab. Castillo y Mora (2019), realizan un análisis, estudio y modelamiento matemático para la caracterización energética de las gasolinas comerciales: Súper, Extra y Ecopaís en función de los parámetros de calidad referentes a la norma ASTM. Los modelos matemáticos que relacionan los parámetros energéticos y de calidad de las gasolinas se obtienen a través de redes neuronales artificiales (RNA), utilizando un conjunto de datos proporcionados por la Agencia de Regulación y Control Hidrocarburífera (ARCH) del Ecuador y datos obtenidos en los laboratorios de la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, para la validación.

## 2.2 Bases Teóricas

### 2.2.1 Destilación

La destilación se define como una operación unitaria en la que una mezcla líquida o de vapor de dos o más sustancias se separa en sus fracciones componentes con la pureza deseada, mediante la aplicación y eliminación de calor (Cheremisinoff, 2000, p.163). La base para la separación consiste en que la fase de vapor es más rica en los componentes más volátiles o de menor punto de ebullición que el líquido. Este enriquecimiento está determinado por el equilibrio de la fase vapor-líquido. En consecuencia, las separaciones factibles en las columnas de destilación y los parámetros operativos requeridos para estas separaciones dependen del equilibrio vapor-líquido de la mezcla a separar (Kiva et al., 2003, p.1904).

#### 2.2.1.1 Presión de vapor

Una propiedad física clave en la teoría de la destilación es la presión de vapor. Cada componente puro tiene una presión de vapor característica a una temperatura particular, y la presión de vapor aumenta con la temperatura y generalmente con una reducción en el peso molecular. La presión de vapor se define como la presión a la que un líquido y su vapor pueden coexistir en equilibrio a una determinada temperatura (Resetarits y Lockett, 2003, p.551).

La presión de vapor de una mezcla líquida viene dada por la suma de las presiones parciales de sus componentes. Así, la ley de Raoult es:

$$p_i = p_i^{\circ} x_i \quad \text{Ec. 1-2}$$

Donde  $p_i$  es la presión parcial del componente  $i$ ,  $p_i^{\circ}$  la presión de vapor del componente puro  $i$ , y  $x_i$  la fracción molar del componente  $i$  en el líquido. Para una mezcla de vapor, la ley de Dalton es

$$p_i = y_i P \quad \text{Ec. 2-2}$$

Donde  $y_i$  es la fracción molar del componente  $i$  en el vapor, y  $P$  es la presión total. Combinando las leyes de Raoult y Dalton,

$$y_i = \left( \frac{p_i^{\circ}}{P} \right) x_i \quad \text{Ec. 3-2}$$

La Ec. 3-2, relaciona la composición de un líquido con la composición de su vapor de equilibrio a cualquier presión y temperatura (ya que  $p_i^{\circ}$  depende de la temperatura). La Ec. 3-2 a menudo se escribe:

$$y_i = K_i x_i \quad \text{Ec. 4-2}$$

Donde el valor de equilibrio  $K$ ,

$$K_i = \frac{p_i^o}{P} \quad \text{Ec. 5-2}$$

Mezclas que obedecen la Ec. 5-2, se denominan mezclas ideales.

### 2.2.1.2 Volatilidad relativa

Para conocer cuan fácil o difícil puede resultar una separación se calculan las volatilidades relativas de la mezcla a separar. La volatilidad es la medida de la diferencia de las volatilidades entre dos componentes, y por tanto de sus puntos de ebullición. La volatilidad relativa ( $\alpha$ ) del componente  $i$  con respecto al componente  $j$  está definido como:

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} = \frac{p_i^o}{p_j^o} = \frac{\left(\frac{y_i}{x_i}\right)}{\left(\frac{y_j}{x_j}\right)} \quad \text{Ec. 6-2}$$

Donde  $y_i$  es la fracción molar del componente  $i$  en el vapor y  $x_i$  la fracción molar del componente  $i$  en el líquido (Resetarits y Lockett, 2003, p.552).

Para una mezcla binaria,

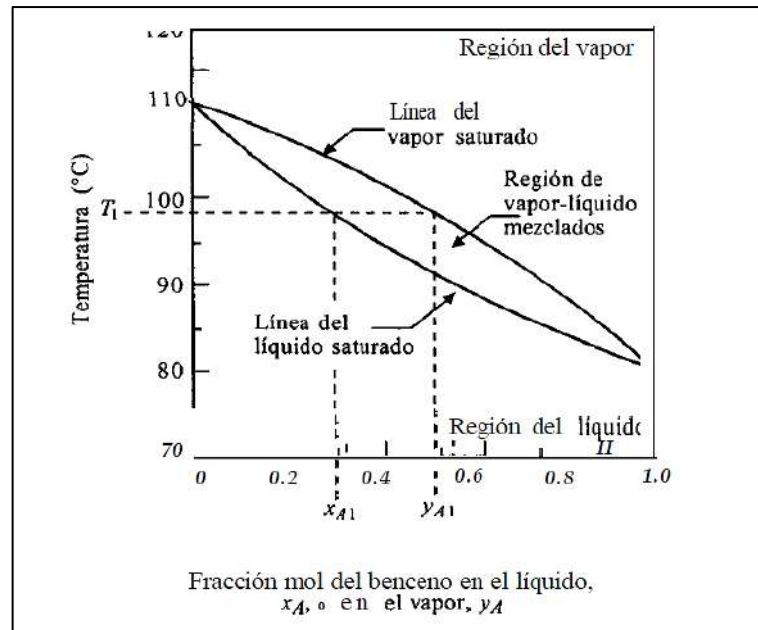
$$x_i + x_j = 1 \quad \text{y} \quad y_i + y_j = 1 \quad \text{Ec. 7-2}$$

Si la volatilidad relativa entre dos componentes es muy cercana a uno ( $\alpha_{i,j} \rightarrow 1$ ), significa que tienen características muy similares de presión de vapor y de puntos de ebullición, por lo tanto, será relativamente difícil separar los dos componentes mediante destilación simple (Cheremisinoff, 2000, p.172).

### 2.2.1.3 Diagramas de punto de ebullición ( $Txy$ ) y diagrama de equilibrio( $xy$ )

En el diagrama del punto de ebullición se puede observar como varían las composiciones de equilibrio de los componentes de una mezcla líquida con la temperatura a una presión determinada. Con frecuencia las relaciones de equilibrio vapor-líquido de una mezcla binaria de A y B se expresan en forma de un diagrama de punto de ebullición, como el que se muestra en la Figura 1-2 para el sistema de benceno (A)-tolueno (B). La línea superior es del vapor saturado (línea de punto de rocío) y la línea inferior es del líquido saturado (línea de punto de burbuja). La región de dos fases está localizada en la zona situada entre estas dos líneas (Geankoplis, 1998, p.712).

La curva de vapor saturado o punto de rocío se determina al encontrar la temperatura a la que el líquido comienza a condensarse a partir de una mezcla de vapor. Del mismo modo, el líquido saturado o la curva de punto de burbuja corresponde a la temperatura a la que una mezcla líquida comienza a hervir (Resetarits y Lockett, 2003, p. 552).



**Figura 1-2.** Diagrama de puntos de ebullición para benceno (A)-tolueno (B) a 101.325 kPa.

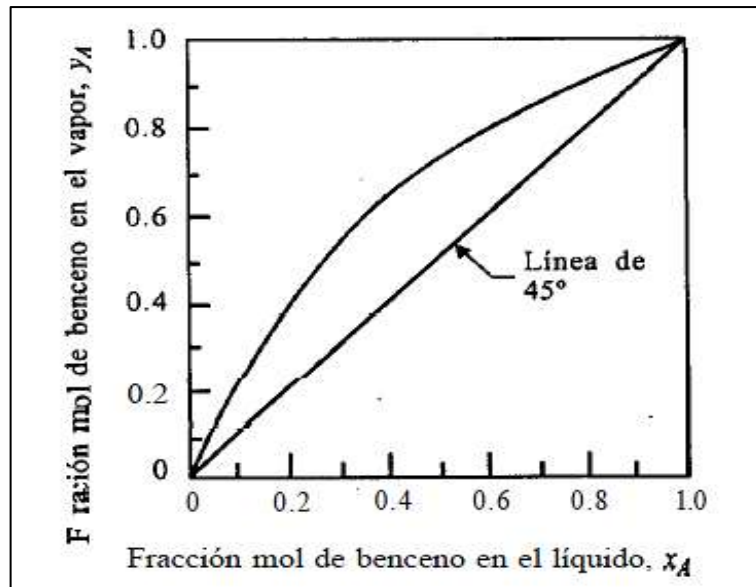
Fuente: Geankoplis, 1998, p.713.

En la Figura 1-2, se observa que, calentando una muestra de líquido frío de  $x_{A1} = 0.3$ , la ebullición inicia a 98 °C y la composición del primer vapor en equilibrio es  $y_{A1} = 0.5$ . A medida que continúa la ebullición, la composición  $x_A$  se desplazará hacia la izquierda, puesto que  $y_A$  es más rico en A (Geankoplis, 1998, p.713).

El sistema benceno-tolueno es un sistema ideal que sigue la ley de Raoult, por lo que el diagrama de puntos de ebullición se puede determinar a partir de los datos de presión del vapor puro junto con la Ec. 3-2.

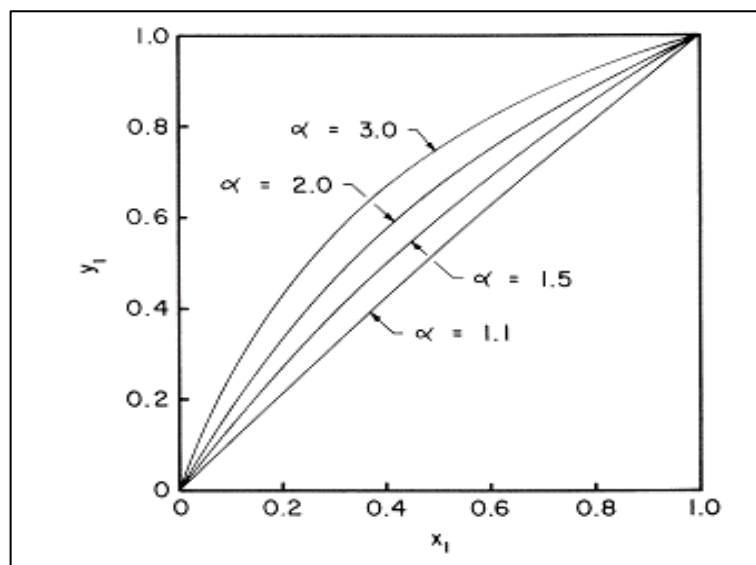
En la Figura 2-2, se observa un método muy común para graficar los datos de equilibrio, conocido como diagrama VLE (Equilibrio Vapor- Líquido) donde se traza una curva con  $y_A$  en función de  $x_A$  para el sistema benceno (A)- tolueno (B). Se incluye la línea de 45° para diferenciar como  $y_A$  es más rico en el componente A que  $x_A$ .





**Figura 2-2.** Diagrama de equilibrio para el sistema benceno (A)-tolueno (B) a 101.32 kPa.

Fuente: Geankoplis, 1998, p.714.



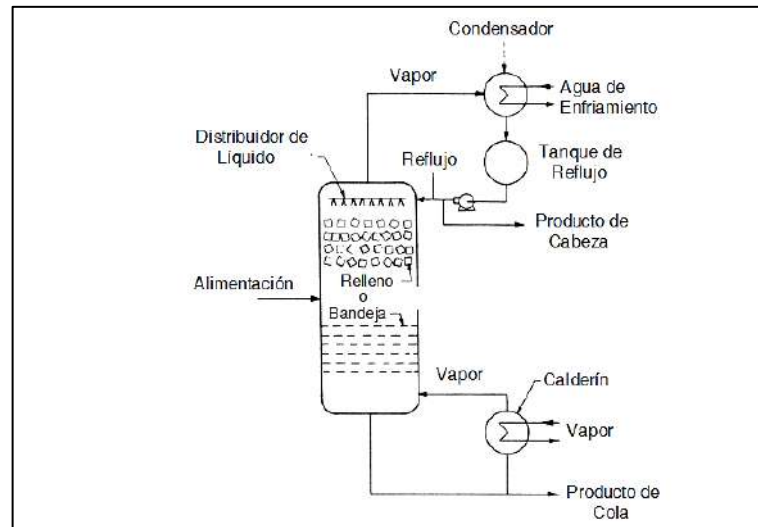
**Figura 3-2.** Concentración de vapor ( $y_1$ ) y líquido ( $x_1$ ) en función de la volatilidad relativa ( $\alpha$ ).

Fuente: Resetarits y Lockett, 2003, p.553.

La Figura 3-2, indica la gráfica de equilibrio líquido-vapor en la cual se muestra la relación entre  $y_1$  y  $x_1$  para diferentes valores de volatilidad relativa ( $\alpha$ ). Cuando dos componentes tienen puntos de ebullición cercanos, pueden formar azeótropos que implican presiones de vapor similares, de modo que  $\alpha$  está cerca de la unidad.

#### 2.2.1.4 Esquema de una columna de destilación

La destilación es el proceso de separación dominante en las industrias petrolera y química. Se lleva a cabo de forma continua o por lotes en columnas (o torres), La Figura 4-2 muestra una representación esquemática simple de una columna de destilación.



**Figura 4-2.** Representación esquemática de una columna de destilación.

**Fuente:** Resetarits y Lockett, 2003, p. 549.

El proceso de destilación comienza con una corriente de alimentación que, por lo general, es separada en dos fracciones: una fracción de bajo punto de ebullición (el producto ligero) y una fracción de alto punto de ebullición (el producto pesado). La alimentación puede estar en estado de vapor o líquido o una mezcla de ambos. Suponiendo que la alimentación en la Figura 4-2 es un líquido, después de ingresar a la columna, fluye hacia abajo a través de una serie de bandejas o una pila de empaque. El líquido que sale del fondo de la columna se divide en un producto de fondo y una fracción que está disponible para hervir. El producto de los fondos, que es rico en componentes de baja volatilidad, a veces se llama colas o fondos. Se utiliza un intercambiador de calor (el calderín) para hervir la porción del líquido del fondo que no se extrae como producto. El vapor producido fluye hacia arriba a través de la columna (a través de las bandejas o el empaque) y entra en contacto íntimo con el líquido que fluye hacia abajo. Después de que el vapor alcanza y sale de la parte superior de la columna, se encuentra otro intercambiador de calor (el condensador) donde se elimina el calor del vapor para condensarlo. El líquido condensado que sale del condensador pasa a un tambor de reflujo y desde allí se divide en dos corrientes. Uno es el producto superior, que es rico en componentes de alta volatilidad y generalmente se llama destilado. La otra corriente de líquido se llama reflujo y se devuelve a la parte superior de la columna. A medida que el líquido de reflujo fluye por la columna, entra en contacto íntimo con el vapor ascendente. Aproximadamente a la mitad de la columna, la corriente de reflujo se

encuentra con la corriente de alimentación de líquido y ambas avanzan por la columna. El reflujo mejora la separación que se logra en la mayoría de las columnas de destilación. Sin embargo, cualquier aumento en la tasa de reflujo requiere un aumento en la tasa de producción de vapor en la parte inferior de la columna y, por lo tanto, un aumento en el consumo de energía (Resetarits y Lockett, 2003, p.549).

## **2.2.2 Separación de mezclas azeotrópicas**

Para mezclas ideales y casi ideales, los componentes pueden clasificarse en orden de su volatilidad ( $\alpha$ ), o, de manera equivalente, en orden de los puntos de ebullición de los componentes puros, siendo posible identificar fácilmente todas las secuencias de separación factibles. Sin embargo, en la práctica a menudo hay que lidiar con mezclas no ideales como los azeótropos donde el espacio de composición se divide en regiones con diferente orden de volatilidad de los componentes, y la identificación de secuencias de separación factibles es mucho más difícil (Kiva et al., 2003, p. 1904).

### **2.2.2.1 Azeótropo**

Azeótropo, una antigua palabra griega que se traduce como "hervir sin cambios", significa que el vapor emitido tiene la misma composición que el líquido a una presión y temperatura determinada (Swietoslawski, 1963; citado en Widagdo y Seider, 1996, p.97). Más específicamente, el vapor tiene la misma composición que el líquido y la mezcla hierve a una temperatura diferente a la de los puntos de ebullición de los componentes puros (Hilmen, 2000, p.10).

Los azeótropos a veces se han confundido con componentes individuales porque hierven a una temperatura constante. Sin embargo, para un azeótropo, una variación en la presión cambia no solo la temperatura de ebullición, sino también la composición de la mezcla, y esto la distingue fácilmente de un componente puro. El término azeotropía fue introducido por Wade y Merriman en 1911 para designar mezclas caracterizadas por un mínimo o un máximo en la presión de vapor en condiciones isotérmicas, o, de manera equivalente, con un punto extremo en la temperatura de ebullición a presión constante (Swietoslawski, 1963; Malesinkski, 1965; citado en Hilmen, 2000, p.10). Desde entonces, el término se ha utilizado para sistemas líquidos que forman uno o varios azeótropos.

### **2.2.2.2 Fenómeno azeotrópico**

El fenómeno azeotrópico está presente en una gran cantidad de sistemas químicos y ocurre debido a comportamientos no ideales (Luyben, 2013, p.1). Para Kiva et al. (2003 p.1904), el fenómeno azeotrópico a menudo se encuentra donde en algún punto en el espacio de composición, las composiciones de mezcla de vapor y líquido de equilibrio son iguales para una presión y

temperatura dadas. Estos puntos se denominan azeótropos y las mezclas con este fenómeno se denominan mezclas azeotrópicas.

La constante de equilibrio de fase  $K_i$  (componente  $i$ ) es una propiedad crítica en el diseño y la optimización del proceso de destilación, y se puede definir como:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{f_i^{0L} y_i^L}{P \Phi_i^v} \quad \text{Ec. 8-2}$$

Donde  $P$  es la presión,  $\Phi_i^v$  es el coeficiente de fugacidad del vapor,  $f_i^{0L}$  es la fugacidad del líquido en el estado estándar,  $y_i^L$  es el coeficiente de actividad. El coeficiente de actividad  $y_i^L$  es una caracterización del grado de no idealidad. Cuando la presión es baja,  $\Phi_i^v$  es igual a 1, y  $f_i^{0L}$  es igual a la presión de vapor a la temperatura del sistema (Liang et al., 2017, p.322).

En el punto azeotrópico,  $K_i$  y la volatilidad relativa  $\alpha_{ij}$  (la relación de la constante de equilibrio de fase  $K$  para los componentes  $i$  y  $j$ ) muestran un valor de 1, y el sistema no puede separarse por destilación simple (Gmehling et al., 2012, p.243).

### 2.2.2.3 Clasificación de azeótropos

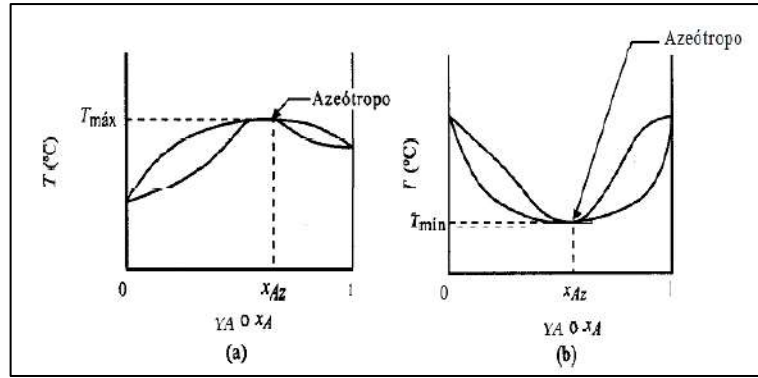
Los azeótropos se pueden clasificar por sus desviaciones de la ley de Raoult según el coeficiente de actividad  $y_i^L$  que caracteriza el grado de no idealidad (Walas, 1985, citado en Liang et al., 2017, p.322).

#### 2.2.2.3.1 Azeótropos de ebullición mínimos

Si los componentes químicos son diferentes y las fuerzas de repulsión son fuertes, es decir que las desviaciones de la ley de Raoult son positivas ( $y_i^L > 1$ ), es posible la formación un azeótropo de punto de ebullición mínimo, es decir, el punto de ebullición del azeótropo es menor que el punto de ebullición de cualquiera de los componentes; lo que sugiere un punto más bajo de la curva  $T - x$ , para el fenómeno azeotrópico donde la composición de vapor es igual a la composición líquida, como se muestra en la Figura 5-2b (Liang et al., 2017, p.323). La mayoría de los azeótropos descubiertos son azeótropos de ebullición mínimos (Luyben, 2013, p.1).

#### 2.2.2.3.2 Azeótropos de ebullición máximos

Para azeótropos de ebullición máxima, los componentes químicos se atraen entre sí y las desviaciones de la ley de Raoult son negativas ( $y_i^L < 1$ ), por lo que se pueden formar azeótropos de punto de ebullición máximo, es decir, el punto de ebullición del azeótropo es mayor que el punto de ebullición de cualquiera de los componentes, lo que sugiere un pico de la curva  $T - x$ , para el fenómeno azeotrópico donde la composición de vapor es igual a la composición líquida, como se muestra en la Figura 5-2a (Liang et al., 2017, p.323).



**Figura 5-2.** Diagramas de equilibrio del punto de ebullición: (a) azeótropo de ebullición máxima. (b) azeótropo de ebullición mínima.

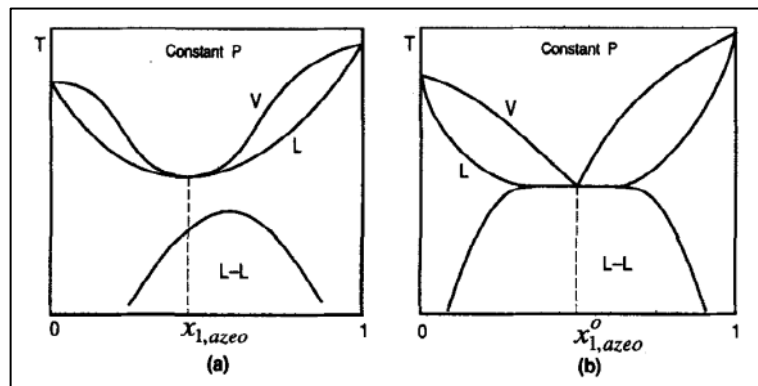
Fuente: Geankoplis, 1998, p.715.

Los azeótropos también se clasifican en términos de la cantidad de fases (azeótropos homogéneos y heterogéneos) y en términos de la cantidad de componentes (azeótropo binario y multicomponente) (Liang et al., 2017, p.319).

### 2.2.2.3.3 Azeótropos homogéneos y heterogéneos

Para un azeótropo homogéneo, cuando  $x_1 = x_{1,Azeo} = y_1$ , la mezcla ebulle en esta composición, como se muestra en la Figura 6-2a. Mientras que, para un azeótropo heterogéneo, cuando la composición líquida global,  $x_1 = x_{1,Azeo}^o = y_1$ , la mezcla ebulle en esta composición, como se ilustra en la Figura 6-2b, pero las tres fases coexistentes tienen composiciones distintas (Widagdo y Seider, 1996, p.97).

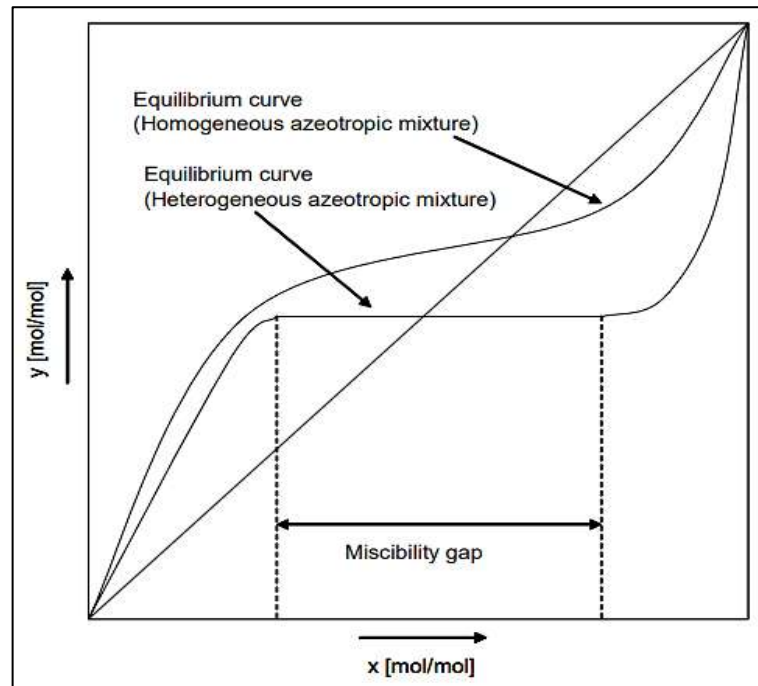
Si las desviaciones de la ley de Raoult son lo suficientemente grandes ( $y_i^L \gg 1$ ), se produce un azeótropo heterogéneo con separación de fases, es decir, con una fase de vapor en equilibrio con dos fases líquidas. Un azeótropo heterogéneo ocurre cuando la envoltura líquido-vapor se superpone con la envoltura líquido-líquido (Widagdo y Seider, 1996, p.97).



**Figura 6-2.** Diagrama de fase binaria a una presión fija: (a) azeótropo homogéneo; (b) azeótropo heterogéneo.

Fuente: Widagdo y Seider, 1996, p.97.

Los azeótropos homogéneos tienen una fase líquida, los azeótropos heterogéneos se separan en dos fases líquidas en el punto azeotrópico. Estas mezclas tienen una brecha de miscibilidad (Figura 7-2) (Klein, 2008, p.7).



**Figura 7-2.** Comparación de las curvas de equilibrio para una mezcla azeotrópica homogénea y heterogénea.

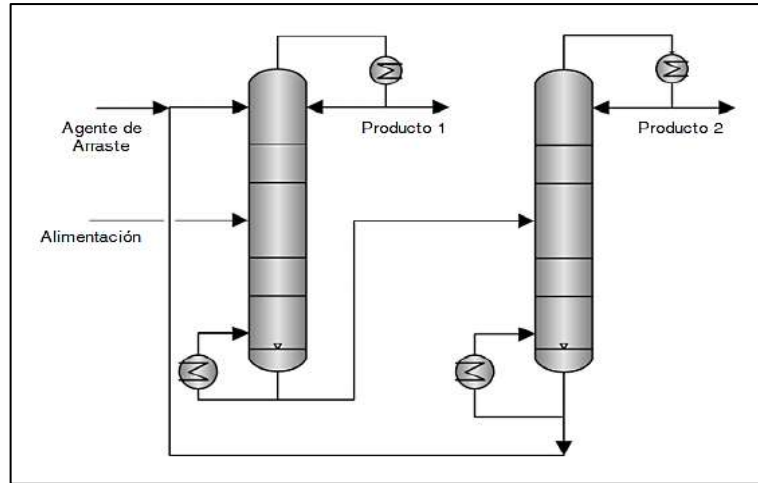
Fuente: Klein, 2008, p.7.

#### 2.2.2.4 Destilación de mezclas azeotrópicas.

Para separar mezclas de ebullición cercanas, es necesario de un número creciente de etapas en la columna de destilación y una relación de reflujo creciente, si la volatilidad relativa  $\alpha_{i,j}$  converge a uno ( $\alpha_{i,j} \rightarrow 1$ ) entonces, la separación en el punto azeotrópico no es posible.

##### 2.2.2.4.1 Destilación extractiva (DE)

Para la separación de mezclas homogéneas azeotrópicas, es común utilizar destilación extractiva. Se agrega un líquido de baja volatilidad a la mezcla como agente de arrastre, para aumentar la volatilidad en toda la región de concentración al disminuir la presión parcial o la volatilidad de un componente. El principal problema del proceso es la elección del agente adecuado, además de presentar importantes características como: un punto de ebullición mucho más alto que los otros componentes, ser térmicamente estable, barato y no tóxico (Düssel y Warter, 1998, citados en Klein, 2008, p.7). En general, es difícil y costoso usar un agente de arrastre debido al proceso de reciclaje adicional. Esto significa costos adicionales de inversión y operación con una automatización más compleja.



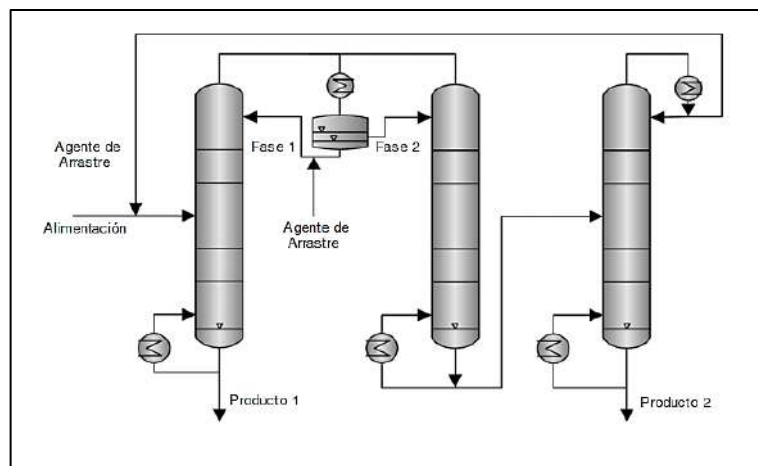
**Figura 8-2.** Planta de destilación extractiva.

Fuente: Klein, 2008, p.8.

#### 2.2.2.4.2 Destilación azeotrópica (AD)

En contraste con la destilación extractiva, la destilación azeotrópica utiliza un agente de arrastre para crear un azeótropo heterogéneo de bajo punto de ebullición con uno de los componentes de la mezcla (Knapp y Doherty, 1992, Lei et al., 2005, citados en Klein, 2008, p.8). En este caso, es necesario separar las fases del vapor condensado mediante un decantador en la parte superior de la columna. Ambas fases líquidas tienen diferentes concentraciones del agente de arrastre, la fase ligera (Fase 2) tiene más agente de arrastre con líquido de bajo punto de ebullición. Cada fase se separa en una columna diferente para obtener productos puros y a su vez reciclar el agente de arrastre (Klein, 2008, p.8).

La principal desventaja de la destilación azeotrópica frente a la destilación extractiva es la mayor demanda de energía debido a la vaporización del agente (Hoffmann, 1964, Onken, 1975, Doherty y Caldarola 1985, Lei et al., 2005, citados en Klein, 2008, p.8).

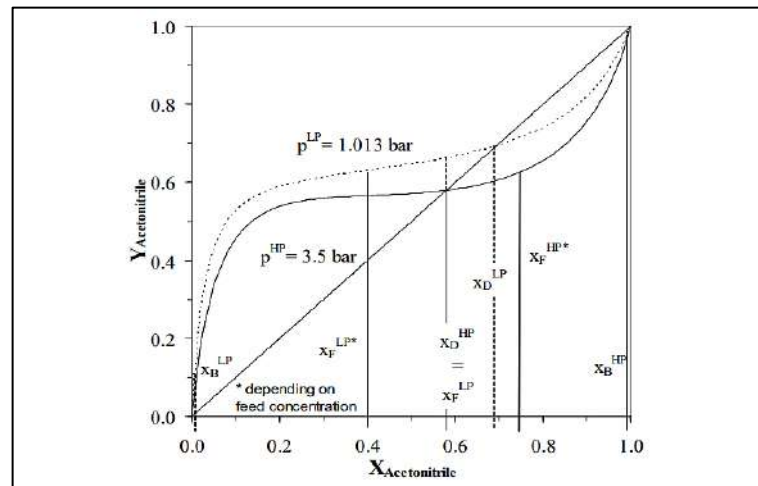


**Figura 9-2.** Planta de destilación azeotrópica.

Fuente: Klein, 2008, p.8.

### 2.2.2.4.3 Destilación por oscilación de presión (PSD).

El proceso de destilación por oscilación de presión se basa en la sensibilidad a la presión del punto azeotrópico (Sattler y Feindt, 1995, Lei et al., 2005, citados en Klein, 2008, p.10). Si aumenta la presión, el punto azeotrópico cambia a concentraciones más bajas del componente de bajo punto de ebullición. Por lo tanto, es posible una separación de la mezcla azeotrópica a diferentes presiones, como se observa en la Figura 10-2, con un ejemplo de una mezcla azeotrópica homogénea de bajo punto de ebullición, acetonitrilo – agua.



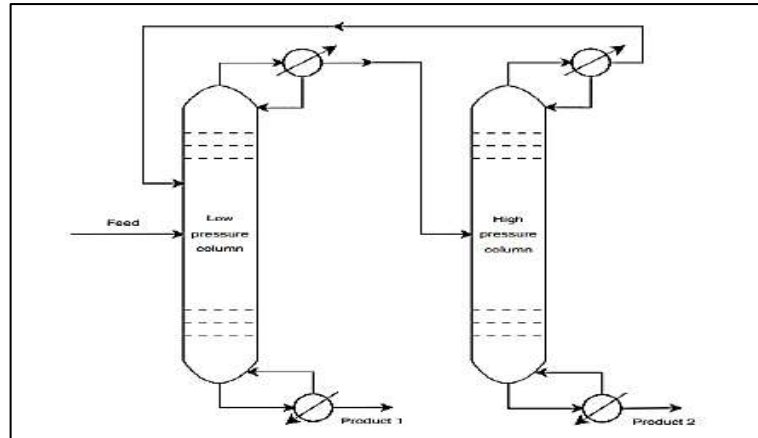
**Figura 10-2.** Diagrama T-x, y de la mezcla acetonitrilo-agua a diferentes presiones (sensibilidad a la presión del punto azeotrópico).

Fuente: Klein, 2008, p.10.

El PSD se puede dividir en tres tipos según el modo de funcionamiento: PSD continuo, destilación por lotes de oscilación de presión (PSBD) y PSD semi-continuo. La PSD continua se usa ampliamente para separar azeótropos binarios, y el diagrama de flujo generalmente incluye dos columnas que operan a diferentes presiones, la columna de alta presión (HP) y la columna de baja presión (LP) (Soto y Flores, 2011, citados en Liang et al., 2017, p. 319).

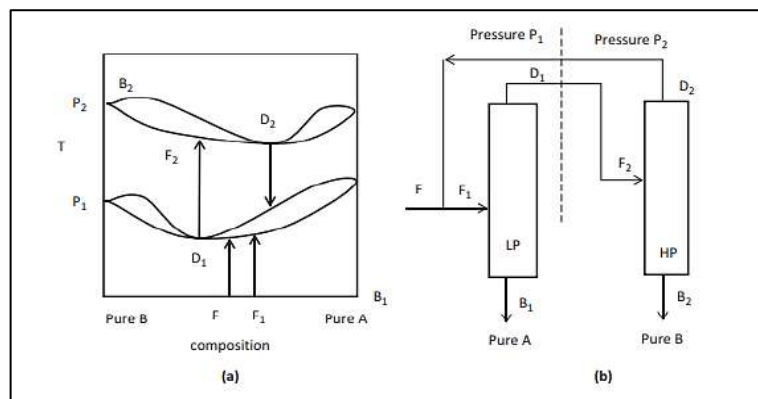
Por lo que se puede decir de forma general que la destilación por oscilación de presión se basa en el hecho de que con un simple cambio de presión puede alterar la composición del azeótropo, y dos columnas que operan a diferentes presiones pueden lograr la separación (Hosgor et al., 2014, p.166). Para el caso de una mezcla con azeótropo T<sub>min</sub>, una mayor cantidad del componente más volátil se obtiene en la parte superior de la primera columna y el menos volátil en la segunda columna. El resultado opuesto ocurre para la mezcla con un azeótropo T<sub>max</sub> (Shen, Benyounes y Song, 2016, p.35).





**Figura 11-2.** Diagrama de flujo del esquema convencional de destilación por oscilación de presión.

**Fuente:** Mulia y Flores, 2011, p. 1534.



**Figura 12-2.** Diagrama esquemático para la destilación continua por oscilación de presión: (a) azeótropo sensible a la presión, de ebullición mínima y (b) secuencia de columna.

**Fuente:** Knapp y Doherty, 1992; citados en Mahdi et al., 2015, p.316.

La Figura 12-2, ilustra la separación de una mezcla binaria con un azeótropo homogéneo de ebullición mínima en una PSD continua. Debido a que la corriente de alimentación  $F_1$ , que es una combinación de la alimentación fresca  $F$  con la corriente de recuperación  $D_2$ , tiene una fracción molar de componente ligero  $A$  mayor que el punto azeotrópico,  $F_1$  se alimenta a la columna de baja presión (LP). El objetivo de esta columna es concentrar el componente  $B$  cerca de un punto azeotrópico de la mezcla y eliminar el componente puro  $A$  en la corriente inferior de la columna. La mezcla azeotrópica  $D_1$  que sale de la parte superior de la columna sirve como la corriente de alimentación  $F_2$  a la segunda columna de alta presión (HP) para producir el componente pesado puro  $B$  en la corriente inferior. Los productos restantes se reciclan desde la parte superior para mezclarlos con el alimento fresco  $F$  hasta la primera columna. Ambas columnas operan a diferentes presiones que se ajustan al requisito de separación previsto (Mahdi et al., 2015, p.316).

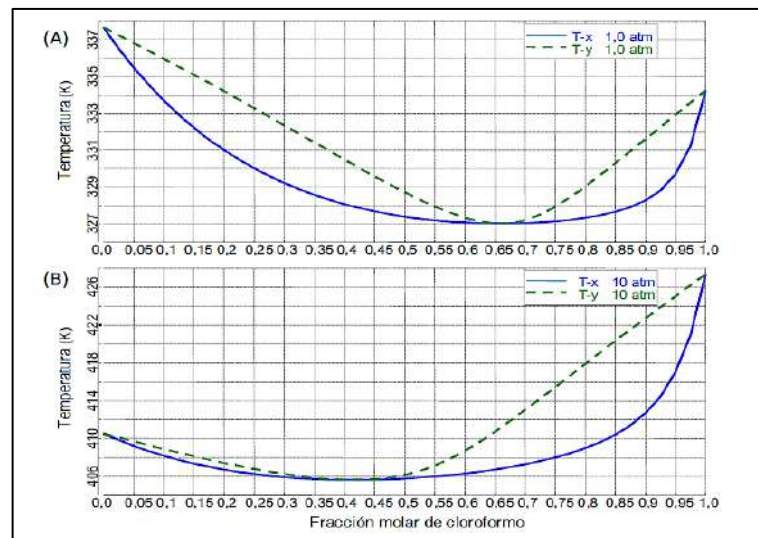
### 2.2.2.5 Separación de metanol-cloroformo

La mezcla binaria de metanol-cloroformo es orgánica y usualmente un residuo de la industria farmacéutica y biotecnológica; ya que es ampliamente utilizado como solvente efectivo para la extracción de sustancias bioactivas de fuentes biológicas (Van Kaam et al., 2008, p.79).

Esta mezcla binaria genera un azeótropo de ebullición mínima con aproximadamente 64% en moles de cloroformo a 327 K bajo presión atmosférica. Por lo tanto, es necesario inducir a la mezcla a una destilación extractiva para separar tanto el metanol como el cloroformo. Sin embargo, hoy en día, la destilación por oscilación de presión es una de las nuevas técnicas de separación a utilizar, al ser más económico que los demás métodos de separación de azeótropos ya que no se requiere solvente adicional para lograr la separación (Hosgor et al., 2014, p. 167).

#### 2.2.2.5.1 Proceso de destilación por oscilación de presión para separar metanol – cloroformo

La Figura 13-2, proporciona curvas Txy para una mezcla de metanol - cloroformo a 1 atm y 10 atm. La presión en la columna de baja presión debe ser elegida de tal manera que el agua de enfriamiento se pueda usar en el condensador. A una presión de 1 atm, la composición del material en el condensador de baja presión se selecciona para que sea aproximadamente un 2% en moles menor que la composición azeotrópica, y tiene una temperatura de alrededor de 327 K. Esta es una temperatura de reflujo lo suficientemente alta como para permitir el uso de agua de enfriamiento (Hosgor et al., 2014, p.169).

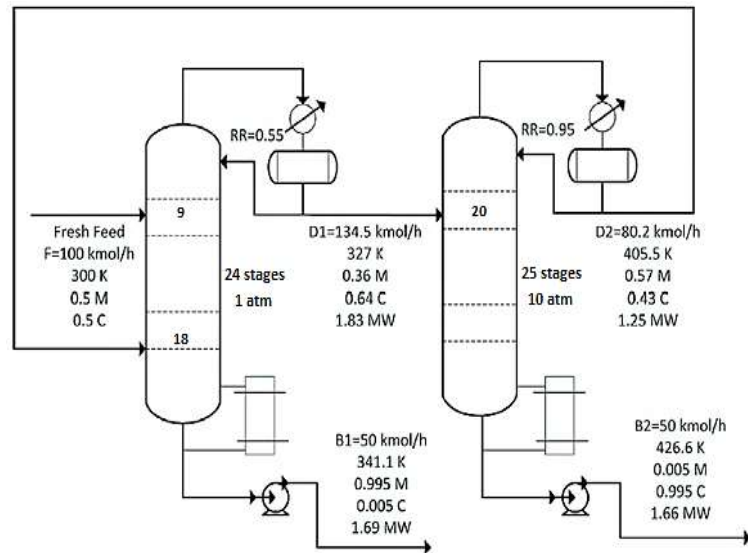


**Figura 13-2.** Curva de Txy para la mezcla de metanol-cloroformo a (A) 1 atm, (B) 10 atm.

**Fuente:** Hosgor et al., 2014, p.169.

La presión en la columna de alta presión debe seleccionarse de modo que la presión de funcionamiento garantice un cambio del 5% o más en la composición de azeótropo en un rango

moderado de presiones (Luyben, 2013, citado en Hosgor et al., 2014, p.169). El cambio en la composición de 66 a 41.5% en moles de cloroformo indica que una columna de alta presión que opera a 10 atm es razonable. El diagrama de flujo de estado estacionario del proceso de destilación de oscilación de presión para la mezcla azeotrópica metanol-cloroformo que incluye una columna de baja y una columna de alta presión se muestra en la siguiente figura (Hosgor et al., 2014, p.169).



**Figura 14-2.** Diagrama de flujo de la destilación por oscilación de presión de metanol-cloroformo

Fuente: Hosgor et al., 2014, p. 169.

En este proceso, primero se envía la corriente de alimentación que contiene 0,5 moles de fracción de metanol y 0,5 moles de fracción de cloroformo a una columna de destilación que tiene 24 etapas. La alimentación se envía a la etapa número 9 mientras que la alimentación reciclada se envía a la etapa número 18. La velocidad de flujo de la alimentación es de alrededor de 100 kmol/h, 300 K y la relación de reflujo de la torre de baja presión es de 0,55. La primera columna de destilación produce residuos con 0,005 moles de fracción de cloroformo. Los destilados de la primera columna se envían a una segunda columna de destilación (de alta presión). La segunda columna de destilación tiene una relación de reflujo de 0,95 y produce destilados que se reciclan nuevamente a la primera columna de destilación y el producto del fondo tiene una composición de cloroformo de 0,995 moles. La primera columna de destilación es una columna de destilación de baja presión mantenida a una presión de 1 atm mientras que la segunda columna de destilación es una columna de destilación de alta presión mantenida a una presión de 10 atm (Hosgor et al., 2014, p.168).

### 2.2.3 DWSIM - Simulador de procesos químicos

Como punto de partida para el desarrollo del trabajo se utiliza el software libre DWSIM, el cual es un simulador de procesos químicos cuya interfaz permite a los usuarios comprender el

comportamiento de sistemas químicos mediante el uso de rigurosos modelos de operaciones unitarias y termodinámicos sin costo alguno. DWSIM, permite simular el proceso de destilación por oscilación de presión y establecer un conjunto de datos necesarios para el diseño de la red neuronal artificial (Medeiros, 2020).

### 2.2.3.1 Características

DWSIM tiene una interfaz gráfica fácil de usar con características (Tabla 1-2) que en un principio sólo estaban disponibles en simuladores comerciales:

**Tabla 1-2.** Características de DWSIM

<p style="text-align: center;"><b>Modelos termodinámicos</b></p>	Peng – Robinson Peng – Robinson – Stryjek – Vera 2 Soave – Redlich – Kwong Lee – Kesler Lee – Kesler – Plöcker UNIFAC (-LL) UNIFAC modificado (Dortmund) UNIQUAC NRTL COSMO – SAC Chao – Seader Grayson – Streed LIQUAC Extended UNIQUAC Raoult's Law IAPWS – 97 Steam Tables IAPWS – 08 Seawater Black – Oil Sour Water
<p style="text-align: center;"><b>Operaciones de la unidad</b></p>	Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores (conversión, PFR, CSTR, equilibrio y Gibbs), columna de destilación, Absorbentes simples, refluídos y rebobinados, separador de componentes, placa de orificio, separador de sólidos, filtro de torta continuo; Operaciones de la Unidad Excel, Script y Flowsheet.
<p style="text-align: center;"><b>Utilidades</b></p>	Envolvente de fase, hidratos de gas natural, propiedades de componentes puros, punto crítico verdadero, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de vasos, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.

<b>Herramientas</b>	Creador compuesto, Bulk C7 + / Curvas de destilación Caracterización de petróleo, Gerente de análisis de petróleo, Gerente de reacciones.
<b>Análisis y optimización de procesos</b>	Utilidad de análisis de sensibilidad, optimizador multivariante con restricciones limitadas.
<b>Extras</b>	Regresión de datos binarios VLE / LLE / SLE, soporte para scripts de tiempo de ejecución, complementos y objetos de monitoreo de hoja de flujo CAPE-OPEN.

Fuente: Medeiros, 2020

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

### 2.2.3.2 Interfaz de plataforma DWSIM

Al ejecutar DWSIM en Windows se observan dos interfaces gráficas de usuario (GUD): clásica y multiplataforma, esta última también conocida como IU "Nueva" interfaz. La interfaz de usuario clásica es la basada en Windows Forms, con todas las funciones (Medeiros, 2020).

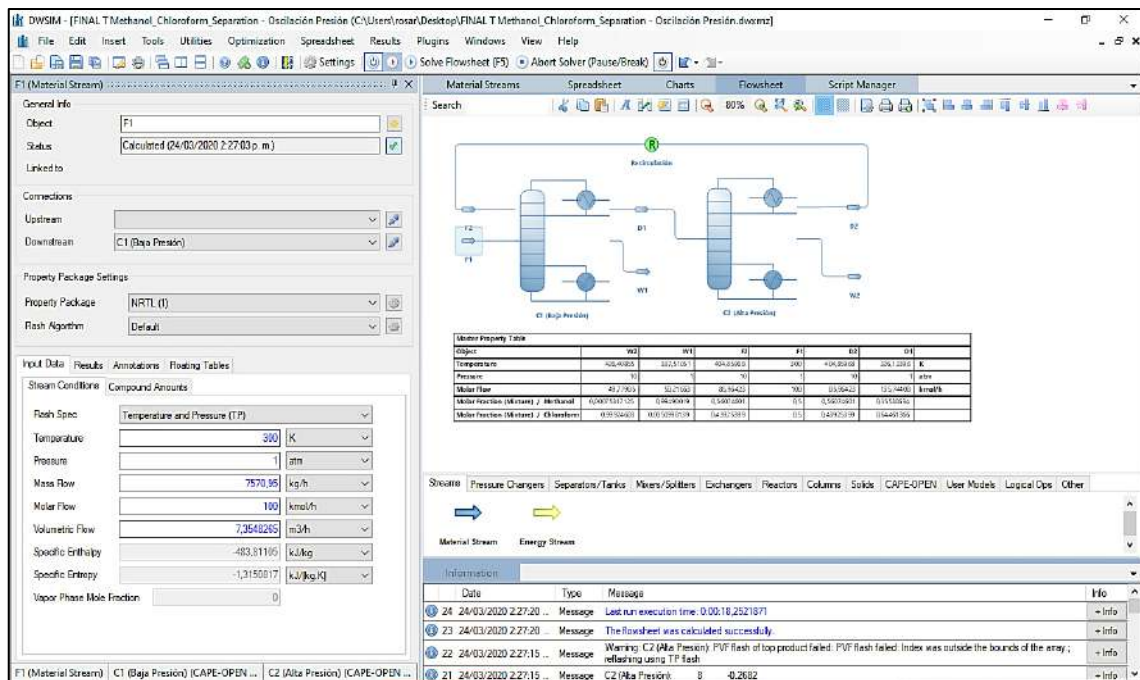


Figura 15-2. Interfaz DWSIM

Fuente: Medeiros, 2020.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020.

### 2.2.3.3 Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos

El modelado y la simulación de procesos químicos pueden usarse como una herramienta de diseño en el desarrollo de plantas químicas, y se utilizan como un medio para evaluar diferentes opciones de diseño. Los estándares de interfaz CAPE-OPEN (Computer Aided Process Engineering

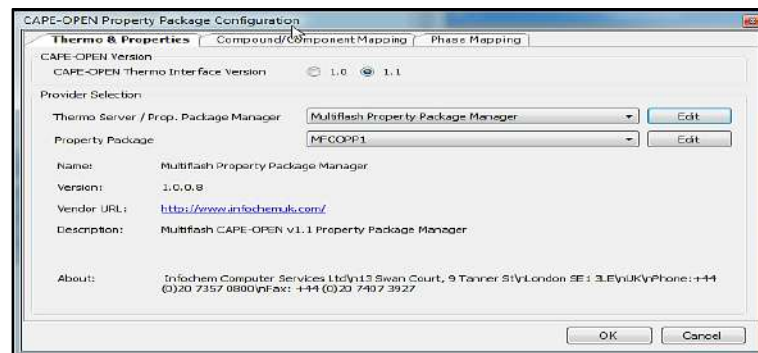
OPEN) se desarrollaron para permitir la implementación y utilización de componentes de modelado de procesos en cualquier entorno de modelado de procesos compatible (Leino, 2016, p.8).

Los estándares CAPE-OPEN son estándares uniformes para la interfaz de componentes de software de modelado de procesos desarrollados específicamente para el diseño y operación de procesos químicos. Los estándares CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y están disponibles de forma gratuita. Se describen en un conjunto de documentación formal (Medeiros, 2019a).

DWSIM admite una serie de características CAPE-OPEN, que incluyen:

*a) Paquetes de propiedades (Thermo Specs 1.0 y 1.1)*

Puede utilizar el equilibrio termodinámico externo CAPE-OPEN y las calculadoras de propiedades como paquetes de propiedades en DWSIM. Solo se tiene que asignar los componentes y las fases del paquete de propiedades externas a los de las bases de datos internas de DWSIM (Medeiros, 2019a).

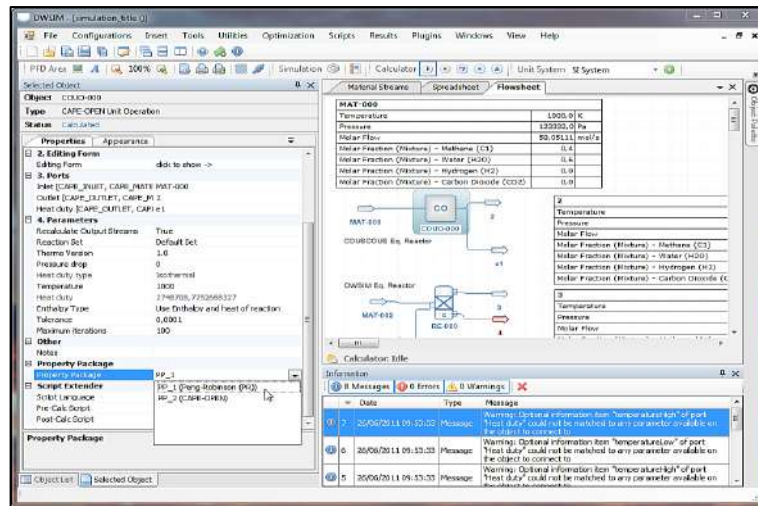


**Figura 16-2.** Paquetes de propiedades.

Fuente: Medeiros, 2019a.

*b) Operaciones de la unidad*

Las operaciones de la unidad CAPE-OPEN se pueden agregar a los diagramas de flujo DWSIM y conectarse a las corrientes de energía y material al igual que las operaciones normales de la unidad DWSIM. El software DWSIM también implementa las interfaces de reacción CAPE-OPEN para utilizar su modelo de reactor CAPE-OPEN junto con DWSIM y gestionar sus reacciones utilizando el administrador de reacciones como de costumbre (Medeiros, 2019a).



**Figura 17-2.** Operaciones de la unidad

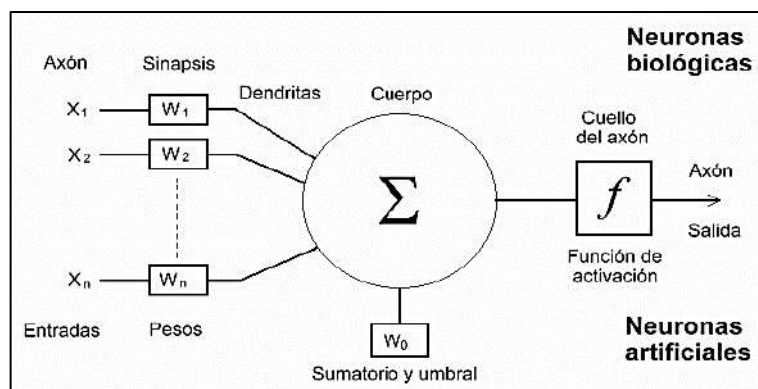
Fuente: Medeiros, 2019a.

### 2.2.4 Inteligencia Artificial (IA)

Cortina (2012, p.55) define la inteligencia artificial como un área del conocimiento compuesta por un conjunto de técnicas que se basan en imitar computacionalmente las distintas habilidades relacionadas con la inteligencia del ser humano, como, por ejemplo: el reconocimiento, diagnóstico y clasificación de patrones.

#### 2.2.4.1 Neurona artificial

La unidad de computación básica de una red neuronal artificial es la neurona. El primer modelo de neurona artificial conocido como perceptrón fue inspirado directamente por la neurona biológica, y expresado de la forma más simple por Mc Culloch y Pitts en 1943, como un pequeño sistema que combina la información que recibe ( $X_n$  entradas) en un valor llamado potencial ( $E$ ) y entrega un único valor de salida aplicando una función de activación ( $f$ ) a su potencial. Entonces, este valor de salida puede enviarse a otras neuronas a través de conexiones (Bougrain, 2004, p. 347). En la Figura 18-2, se observa la representación gráfica de la misma.



**Figura 18-2.** Estructura de la neurona artificial.



En la neurona de McCulloch-Pitts, el grupo de entradas  $x_1 \dots x_n$ , (sinapsis de una neurona biológica) son multiplicadas cada una por un peso al que está asociado  $w_{j1} \dots w_{jn}$ . El cuerpo de la neurona ( $\Sigma$ ) suma todas las entradas algebraicamente y como resultado se obtiene un potencial ( $E$ ) (Chafila, 2019, p.12).

$$E = w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_n \quad \text{Ec. 9-2}$$

A la señal ( $E$ ) se le resta un valor umbral propio de la neurona ( $\theta$ ), lo que genera la activación de la neurona; finalmente esta señal de activación se procesa mediante una función de activación, también conocida como función de transferencia, que da lugar a la salida de la neurona  $S$ . De acuerdo con la función de activación existirán distintos modelos de neuronas (Chafila, 2019, p.12).

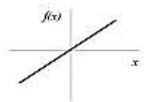
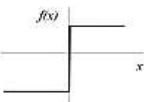
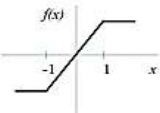
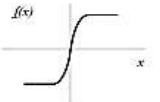
$$S = f(E - \theta) \quad \text{Ec. 10-2}$$

$$S = f(w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_n - \theta) \quad \text{Ec. 11-2}$$

La función de activación calcula el estado de actividad de una neurona; ya que una neurona puede estar activa (excitada) o inactiva (no excitada), transformando la entrada global en un valor de activación generalmente en un rango  $[0, 1]$  o  $[-1, 1]$ , es decir, una neurona puede estar inactiva (0 o -1) o activa (1) (Quintanilla, 2015, p.137). Las funciones de activación más usuales son:

- Identidad
- Escalón
- Lineal a tramos
- Sigmoidea

**Tabla 2-2.** Funciones de activación

	Función	Rango	Gráfica
Identidad	$y = x$	$[-\infty, +\infty]$	
Escalón	$y = \text{sing}(x)$ $y = H(x)$	$[-1, +1]$ $[0, +1]$	
Lineal a tramos	$-1, \text{si } x < -1$ $x, \text{si } -1 \leq x \leq 1$ $+1, \text{si } x > 1$	$[-1, +1]$	
Sigmoidea	$y = \frac{1}{1 + e^x}$ $y = \text{tgh}(x)$	$[0, +1]$ $[-1, +1]$	

Fuente: Chafila, 2019, p.13.



#### 2.2.4.2 *Redes neuronales artificiales*

Las redes neuronales artificiales utilizan un gran conjunto de unidades computacionales elementales, llamadas neuronas (artificiales) para aprender tareas y resolver problemas. La capacidad que tienen para aprender por medio de algoritmos de entrenamiento, ha permitido su uso y aplicación en todas las ciencias (Isasi y Galvan, 2014; citados en Chafla, 2019, p.13).

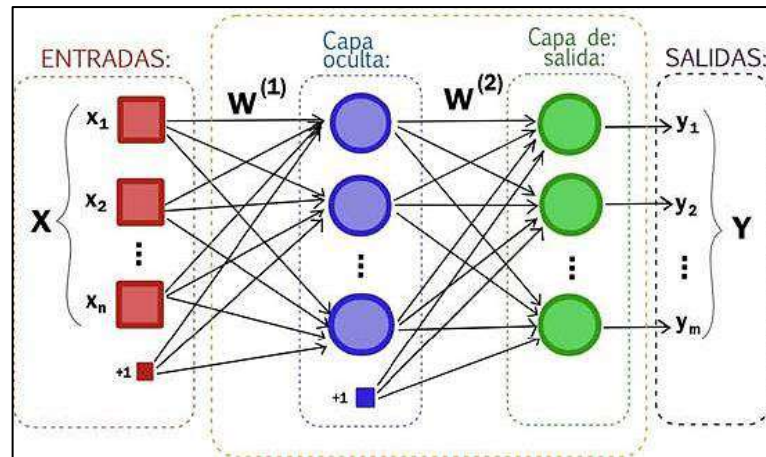
Las redes neuronales son sistemas dinámicos autoadaptativos; adaptables debido a la capacidad de autoajustarse de los elementos procesales (neuronas) que componen el sistema; y dinámicos, pues son capaces de estar constantemente cambiando para adaptarse a las nuevas condiciones (Hilera y Martínez, 1995, p.12).

#### 2.2.4.3 *Arquitectura de una red neuronal*

Según López, Velo y Maseda (2007, p.1085), 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. Dentro del esquema de red, se distinguen tres tipos de capas:

1. *Capa 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, 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.
2. *Capas intermedias u ocultas:* 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 y generalización; es decir, transforma los vectores de entrada en vectores intermedios, que caracterizan los patrones de entrenamiento.
3. *Capa de salida:* 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.1085).

La capa de entrada contiene variables independientes que están conectadas a la capa oculta para su procesamiento. La capa oculta contiene funciones de activación y calcula los pesos de las variables para explorar los efectos de los predictores sobre las variables objetivo (dependientes). En la capa de salida, el proceso de predicción o clasificación finaliza y los resultados se presentan con un pequeño error de estimación (Kayri, 2016, p.1).



**Figura 19-2.** Esquema de una red de tres capas totalmente interconectadas

La información (valores numéricos) producida por cada neurona viaja a través de las conexiones, son evaluados por los pesos respectivos, se ajustan en la etapa de aprendizaje y como resultado de esto disponemos de una red de neuronas artificial. El funcionamiento de la RNA presentada en la Figura 19-2, se describe a continuación:

$$\bar{S} = F \left( F \left( \sum ((\bar{X} W_1) - \theta) W_2 \right) \right) \quad \text{Ec. 2-12}$$

Donde:

$W_1$  y  $W_2$ , son los pesos del primer y segundo nivel.

$\theta$ , umbral o magnitud de compensación para activar las neuronas.

$F$ , función de activación en todas las neuronas.

$\bar{X}$ , vector de entrada a la red.

$\bar{S}$ , vector de salida de la red.

#### 2.2.4.4 Clasificación de las redes neuronales artificiales

Se pueden destacar dos clasificaciones de las redes neuronales en función de sus características más notables:

- *Redes neuronales artificiales por topología.*
- *Redes neuronales artificiales según el tipo de aprendizaje.*

##### 2.2.4.4.1 Redes neuronales artificiales por topología.

Consiste en la organización y disposición de las neuronas en la red formando capas o agrupaciones de neuronas más o menos alejadas de la entrada y salida de la red. En este sentido, los parámetros fundamentales de la red son: el número de capas, el número de neuronas por capa, el grado de conectividad y el tipo de conexiones entre neuronas (Hilera y Martínez, 1995, p.69).

Cuando se realiza una clasificación de las redes en términos topológicos, se suele distinguir entre:

- a) *Redes monocapa constituidas por una única capa o nivel de neuronas*
- b) *Redes multicapa*

Las redes multicapa tienen la habilidad de caracterizar los patrones de entrenamiento generando su propio modelo de representación. Este tipo de redes multicapa sólo necesita una única capa intermedia para modelar una proyección no lineal entre los espacios de entrada y de salida, pues el aumento del número de neuronas en la red conlleva un aumento en la variación. Según Haykin, S, 1999 citado en López, Velo y Maseda (2007, p. 1086), una red con una única capa intermedia tiene menos variación y proporciona mayor capacidad de generalización.

De acuerdo al flujo de datos entre las distintas capas se puede distinguir:

1. *Redes unidireccionales*, en las cuáles la información circula en un sólo sentido, desde la capa de entrada a la de salida.
2. *Redes recurrentes o realimentadas*, en las que la información puede circular entre capas en cualquier sentido, incluido el de salida a entrada.

#### 2.2.4.4.2 *Redes neuronales artificiales según el tipo de aprendizaje*

El aprendizaje en las redes neuronales se basa en la ley que Donald Hebb introdujo en 1949 sin formulación matemática: “*si habitualmente la activación de la neurona  $i$  tiene lugar cuando la neurona  $j$ , cuya salida es una entrada de  $i$ , está activada, en posteriores ocasiones, la activación de la neurona  $j$  facilitará la activación de la neurona  $i$* ” (López, Velo y Maseda, 2007, p.1087)

Se pueden distinguir los siguientes tipos de aprendizaje según Molina y Zadeh, 2006; citados en López, Velo y Maseda (2007, p.1087):

- a. *Aprendizaje supervisado*: La red aprende a partir de ejemplos de entrenamiento, es decir, la red 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.
- b. *Aprendizaje no supervisado*: El conjunto de entrenamiento está constituido sólo por la entrada, sin la salida esperada para estos elementos. El aprendizaje se realiza a 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.
- c. *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

d. *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.

#### 2.2.4.5 Selección de un modelo de red neuronal

En la Tabla 3-2, se presenta una clasificación de los modelos neuronales más utilizados de acuerdo al tipo de aprendizaje (supervisado, no supervisado e híbrido) y la arquitectura de la red (unidireccional y recurrentes).

**Tabla 3-2.** Clasificación de los modelos de redes neuronales

SUPERVISADO	UNIDIRECCIONALES	Perceptrón	Rosenblatt	1958
		Adaline	Widrow y Hoff	1960
		Perceptrón Multicapa Backpropagation	Rumelhart, Hinton y Willians	1986
		Correlación en cascada	Fahlman y Lebiere	1990
		Máquina de Bolzman	Ackley, Hinton y Sejnowski	1985
		Learning Vector Quantization	Kohonen	1988
		General Regresión Neural Network	Specht	1991
	RECURRENTES	Recurrent backpropagation	Pineda	1989
		Brain State in a Box	Anderson, Silverstein, Ritz y Jones	1977
Jordan		Jordan	1986	
NO SUPERVISADO	UNIDIRECCIONALES	Neocognitrón	Fukushima, Miyake e Ito; Fukushima	1983; 1988
		Principal Component Analysis	Oja; Hertz	1982; 1991
		Mapa autoorganizado	Kohonen	1982; 1995
	RECURRENTES	Red de Hopfield	Holfield	1982
		Resonancia Adaptativa (ART)	Carpenter, Grossberg y Rosen	1987; 1990; 1991
		Bidirectional Associative Memory	Kosko	1992
HIBRIDO	Radial Basis Funtion	Broomhead y Love; Moody y Darken	1988; 1989	
	Contrapropagación	Hetch-Nielsen	1990	

Fuente: López, Velo y Maseda, 2007, p.1088.

##### 2.2.4.5.1 Modelos supervisados unidireccionales

Es el grupo más numeroso y el perceptrón multicapa (MLP) con aprendizaje de retropropagación (BP) es el más importante por su interés histórico, generalidad y por ser el modelo más empleado en las aplicaciones prácticas. El perceptrón multicapa (MLP), está constituido por una capa de neuronas de entrada, una o más capas de neuronas ocultas y una capa de neuronas de salida. La información se propaga en la red hacia delante, es decir, hacia la salida y constituye una generalización del perceptrón simple. Los MLP se emplean para resolver problemas diversos entrenados de forma supervisada realizándose el aprendizaje con el algoritmo de retropropagación de error (Back Propagation o BP), el cual está basado en la regla de aprendizaje por corrección de error (López, Velo y Maseda, 2007, p.1088).

El algoritmo de retropropagación básicamente consiste en dos etapas a través de las diferentes capas de la red:

1. *Paso hacia delante:* el vector input se aplica a las sinapsis de la red y su efecto se propaga capa a capa, produciendo un output como respuesta actual a la red. En esta etapa los pesos de la red son todos fijos.
2. *Paso hacia atrás:* los pesos sinápticos son ajustados de acuerdo a la corrección de errores, la respuesta de la red es sustraída de la respuesta deseada para producir la señal error. Esta señal es propagada hacia atrás a través de la red y los pesos son ajustados para hacer que la respuesta de la red se acerque a la deseada (López, Velo y Maseda, 2007, p.1089).

El perceptrón multicapa tiene tres características distintivas:

- El modelo de cada neurona en la red incluye una función de activación no lineal, diferenciable, a diferencia de la usada en el perceptrón
- La red tiene una o más capas ocultas que no forman parte del input ni del output que son capaces de extraer las características del problema.
- La red tiene alto grado de conectividad, determinada por las sinapsis. Un cambio en la conectividad requiere un cambio en los pesos.

En la combinación de estas tres características junto con la habilidad de aprender de ejemplos a través del entrenamiento, reside su potencia de cálculo (López, Velo y Maseda, 2007, p.1089).

#### 2.2.4.6 Selección de un algoritmo de entrenamiento para la red neuronal

Un algoritmo de entrenamiento de una red neuronal artificial modifica el valor de los pesos. Los algoritmos de entrenamiento más utilizados son: Levenberg-Marquardt backpropagation, Bayesian Regularization backpropagation, Conjugate Gradient backpropagation; Gradient Descent backpropagation; Quasi-Newton. En este proyecto se enfatizó en el Bayesian Regularization backpropagation (Quintana, 2015, p.22).

En general, un algoritmo de retropropagación entrena una red de retroalimentación. En el proceso de entrenamiento, el algoritmo de retropropagación aprende asociaciones entre un conjunto específico de pares de entrada-salida. El algoritmo de entrenamiento de retropropagación actúa de la siguiente manera: primero, propaga los valores de entrada hacia adelante a una capa oculta, y luego, propaga las sensibilidades hacia atrás para reducir el error; y al final del proceso, actualiza los pesos (Kayri, 2016, p.1).

#### 2.2.4.6.1 Bayesian regularization backpropagation

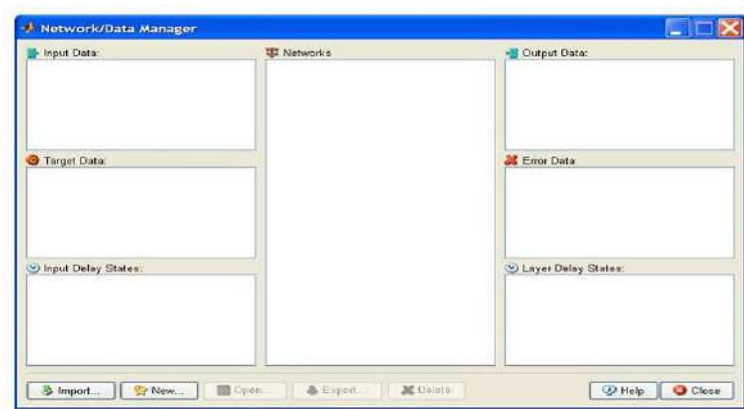
En muchos estudios, el algoritmo de entrenamiento BR ha dado un rendimiento moderado o el mejor en términos de comparación con otros algoritmos de entrenamiento. Las BRANN tienen algunas ventajas importantes, como la elección y la solidez del modelo, la elección del conjunto de entrenamiento, el tamaño del esfuerzo de entrenamiento y la optimización de la arquitectura de red. Los métodos bayesianos pueden resolver el problema del sobreajuste de manera efectiva y los modelos complejos son penalizados en el enfoque bayesiano. A diferencia del entrenamiento de red convencional, donde se elige un conjunto óptimo de pesos minimizando una función de error, el enfoque bayesiano implica una distribución de probabilidad de pesos de red (Kayri, 2016, p.9).

#### 2.2.4.7 Redes neuronales en Matlab

Para implementar en Matlab una Red Neuronal Artificial se lo puede realizar a través de tres funciones (Quintana, 2015, p.25).

- 1) Mediante código desde la línea de comandos o desde el espacio de trabajo de Matlab (Workspace).
- 2) Utilizando el conjunto de bloques incluidos en el Toolbox de Control Systems de Neural Networks Blockset en Simulink.
- 3) Empleando la Interfaz Gráfica de Usuario (GUI por sus siglas en inglés) de Redes Neuronales Artificiales, la cual se puede desplegar empleando el comando *nntool* (Neural Network Toolbox).

Por ejemplo, al digitar el comando *nntool* en el espacio de trabajo de Matlab se abre la ventana Administradora de redes neuronales artificiales. Por lo tanto, cuando se utiliza la GUI, es posible exportar los resultados al espacio de trabajo. Del mismo modo, es posible importar resultados del área de trabajo para la GUI (Quintana, 2015, p.25).



**Figura 20-2.** Interfaz gráfica de usuario.

Fuente: Quintana, 2015, p.25.

Una vez que la ventana Network/Data Manager está en funcionamiento se puede crear una red, entrenarla, simularla y exportar los resultados al Workspace (Quintana, 2015, p.26).

#### *2.2.4.7.1 Flujo de trabajo típico para diseñar redes neuronales*

Cada aplicación de red neuronal es única, pero el desarrollo de la red suele implicar los pasos siguientes:

1. Acceder a los datos y prepararlos
2. Crear la red neuronal
3. Configurar las entradas y salidas de la red
4. Ajustar los parámetros de la red (las ponderaciones y tendencias) para optimizar el rendimiento
5. Entrenar la red
6. Validar los resultados de la red
7. Integrar la red en un sistema de producción (MathWorks, 2020a).

#### *2.2.4.7.2 Clasificación y clustering de redes superficiales*

Matlab y Deep Learning Toolbox facilitan el desarrollo de redes neuronales para tareas como la clasificación, la regresión y el clustering. Tras crear las redes con estas herramientas, es posible generar automáticamente código de Matlab para capturar el trabajo y automatizar las tareas (MathWorks, 2020a).

## **2.3 Marco Legal**

Una continua adopción de tecnologías en todos los ámbitos de la economía ha hecho que la industria de software registre un notable crecimiento e importancia en actividades que requieren sus productos o servicios como plataforma sobre la cual tecnificar sus operaciones y aumentar su productividad. El consumidor final incorpora cada vez más en sus actividades y estilos de vida el uso de tecnologías que operan a partir de software (ESPAE, 2017, p.1).

En Ecuador, el marco legal relevante para las actividades de software comprende:

- Código Orgánico de la Economía Social de los Conocimientos, Creatividad e Innovación (denominado Código Ingenios), que incluye disposiciones sobre propiedad intelectual de software, uso por actores públicos y privados, y beneficios aplicables a aspectos de tecnología e innovación.
- Ley de Comercio Electrónico, Firmas Electrónicas y Mensajes de Datos
- Ley de Propiedad Intelectual y demás normativa (de aplicación transitoria en lo que no se encuentre normado en el Código Ingenios, mientras se expiden los reglamentos respectivos)

- Decreto 1014 de abril 10 de 2008, que establece como política pública para las entidades de la administración pública central; la utilización de software libre en sus sistemas y equipamientos informáticos (ESPAE, 2017, p.21).

El Instituto Ecuatoriano de la Propiedad Intelectual (IEPI) es el organismo encargado de proteger, fomentar, divulgar y conducir el buen uso de la Propiedad Intelectual desde el enfoque de tres áreas distintas: la Propiedad Industrial, Derecho de Autor y las Obtenciones Vegetales.

Sobre el Código Ingenios, publicado en el Registro Oficial No. 899 del 9 de diciembre de 2016, son de particular relevancia las disposiciones relativas a propiedad intelectual de software, su utilización por parte de actores públicos y privados, así como los incentivos relacionados, resumidos en la Tabla 4-2.

**Tabla 4-2.** Marco legal referentes al uso de software establecidos en el código orgánico de la economía social de los conocimientos, creatividad e innovación.

<b>Artículo 102.-</b> De los derechos de autor.	Los derechos de autor nacen y se protegen por el solo hecho de la creación de la obra.
<b>Artículo 104.-</b> Obras susceptibles de protección	Incluye, entre otras, al software como una obra susceptible de protección.
<b>Artículo 131.-</b> Protección de software.	El software se protege como obra literaria, ya sea como código fuente; es decir, en forma legible por el ser humano; o como código objeto; es decir, en forma legible por máquina.
<b>Artículo 132.-</b> Adaptaciones necesarias para la utilización de software.	El propietario u otro usuario legítimo de un ejemplar del software (bajo licencia), podrá realizar las adaptaciones necesarias para la utilización del mismo, de acuerdo con sus necesidades, siempre que ello no implique su utilización con fines comerciales.
<b>Art. 133.-</b> Titulares de derechos	Señala que el titular de los derechos sobre un software es el productor, esto es, la persona natural o jurídica que toma la iniciativa y responsabilidad de la realización de la obra.
<b>Art.142.-</b> Tecnologías libres	Indica que el Estado en la adquisición de bienes o servicios incluidos los de consultoría de tecnologías digitales, preferirá la adquisición de tecnologías digitales libres.
<b>Artículo 144.-</b> Uso de tecnologías digitales libres en los sistemas de educación	Las instituciones del Sistema de Educación Superior no estarán obligadas a usar exclusivamente tecnologías digitales libres en el ejercicio de la libertad de cátedra y de investigación, pero deberá garantizarse una enseñanza holística de soluciones informáticas independientemente de su tipo de licenciamiento.

**Fuente:** Asamblea Nacional del Ecuador, 2016.

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020



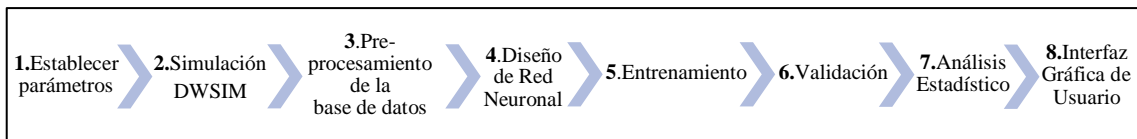
### ***2.3.1 Licencia del simulador de procesos químicos DWSIM***

DWSIM para Windows, Linux y macOS tiene licencia de GNU General Public License v3 (GPLv3), al igual que su biblioteca de termodinámica autónoma (DTL), tiene licencia de GNU Lesser General Public License v3 (LGPLv3) (Medeiros, 2019b). La Licencia Pública General de GNU es una licencia libre copyleft para software y otros tipos de obras. Las licencias para la mayoría de software y otros trabajos prácticos están diseñadas para quitarle la libertad de compartir y modificar los trabajos. Por el contrario, la Licencia Pública General de GNU está destinada a garantizar la libertad de compartir y modificar todas las versiones del programa DWSIM y asegurarse de que siga siendo un software libre y de código abierto para todos los usuarios (Free Software Foundation, 2016).

## CAPÍTULO III

### 3 METODOLOGÍA

El propósito de este capítulo es detallar mediante fases, la metodología utilizada en el desarrollo del modelo de predicción basado en redes neuronales de retropropagación para conocer la composición de cloroformo separado por PSD de una mezcla azeotrópica binaria metanol-cloroformo (Figura 1-3).



**Figura 1-3.** Fases de la metodología de trabajo

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020.

El enfoque en el que se orienta este trabajo es el cuantitativo debido a que, para modelar la red neuronal artificial se utilizan los datos obtenidos por simulación del proceso en DWSIM como medidas numéricas para alimentar la red neuronal y así; obtener datos predichos de la composición en los productos de la destilación por oscilación de presión.

Así también, será necesario el análisis estadístico como técnica para analizar, interpretar y validar los datos cuantitativos predichos por la RNA con los resultados obtenidos en la simulación por DWSIM.

Finalmente, se desarrolla una interfaz gráfica de usuario (GUI), para facilitar la interacción con el modelo de predicción.

Las principales fuentes bibliográficas que se utilizaron en este documento son:

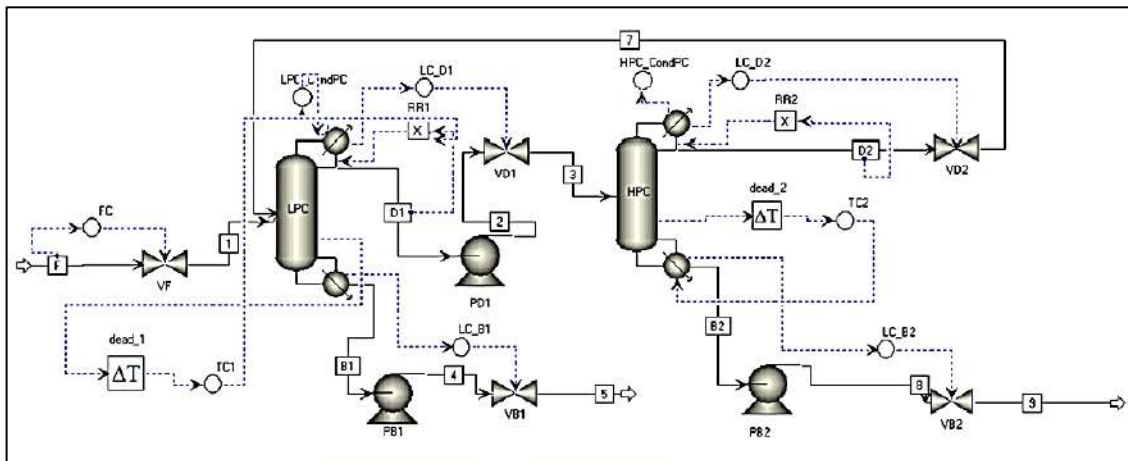
*Primaria:* información y datos obtenidos por el autor del escrito mediante trabajo experimental con simulación.

*Secundaria:* artículos publicados en revistas científicas electrónicas indexadas y no indexadas, tesis de posgrados publicadas a nivel nacional e internacional, páginas de internet oficiales de los programas computacionales utilizados en la investigación, libros electrónicos afines al tema.

### 3.1 Establecimiento de parámetros

En este caso de estudio, la información utilizada como referencia proviene del artículo científico de nombre “Design and control of distillation processes for methanol–chloroform separation” propuesto por Eda Hosgor, Tugba Kucuk, Ilayda N. Oksal y Devrim B. Kaymak del departamento de Ingeniería Química de la Universidad Técnica de Estambul, Turquía.

En dicho trabajo se lleva a cabo la destilación por oscilación de presión para la separación de la mezcla azeotrópica de metanol-cloroformo mediante simulaciones dinámicas y de estado estable en Aspen Plus y Aspen Dynamics (Figura 2-3); por tanto, los parámetros iniciales de operación, ordenados en la Tabla 1-3, se tomaron como base para simular la destilación por oscilación de presión en el software DWSIM y así obtener una base de datos confiable para el entrenamiento de la red neuronal artificial.



**Figura 2-3.** Estructura de control básica para la destilación por oscilación de presión.

Fuente: Hosgor et al., 2014, p.173.

**Tabla 1-3.** Parámetros de diseño óptimos para la destilación por oscilación de presión de una mezcla binaria metanol-cloroformo.

Parámetros	Columna de Baja Presión (LP)	Columna de Alta Presión (HP)	Unidades
Presión	1	10	atm
Platos totales	24	25	adimensional
Plato de alimentación	9	20	adimensional
Plato de Recirculación	18	–	adimensional
Relación de Reflujo	0,55	0,95	adimensional
Calor en condensador	1,83	1,25	MW
Calor en calderín	1,69	1,66	MW
Temperatura del condensador	327,0	405,5	K
Temperatura del calderín	341,1	426,6	K

Fuente: Hosgor et al., 2014, p. 170.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

### 3.1.1 Operacionalización de variables

#### 3.1.1.1 Selección de variables

##### 3.1.1.1.1 Variables Independientes

- Presión en cada columna
- Temperatura de alimentación
- Velocidad de flujo de la alimentación
- Fracción molar de cloroformo en la alimentación
- Relación de Reflujo en cada columna
- Temperatura del calderín en cada columna

##### 3.1.1.1.2 Variables Dependientes

- Flujo molar en el destilado de la primera columna
- Fracción molar de cloroformo en el destilado de la primera columna
- Flujo molar en el residuo de la primera columna
- Fracción molar de cloroformo en el residuo de la primera columna
- Flujo molar en el destilado de la segunda columna
- Fracción molar de cloroformo en el destilado de la segunda columna
- Flujo molar en el residuo de la segunda columna
- Fracción molar de cloroformo en el residuo de la segunda columna

#### 3.1.1.2 Operación de variables

**Tabla 2-3.** Variables de operación establecidas en el sistema de destilación.

	Variable		Unidad de medida
	<b>Independiente</b>	Presión	P
Temperatura de alimentación		$T_F$	K
Flujo de alimentación		F	kmol/h
Fracción molar de cloroformo en la alimentación		$X_{C,F}$	adimensional
Relación de Reflujo		RR	adimensional
Temperatura del calderín (Reboiler)		$T_R$	K
<b>Dependiente</b>		Flujo molar en el destilado de la columna de baja presión	$D_1$
	Fracción molar de cloroformo en el destilado de la columna de baja presión	$X_{C,D1}$	adimensional
	Flujo molar en el residuo de la columna de baja presión	$W_1$	kmol/h
	Fracción molar de cloroformo en el residuo de la columna de baja presión	$X_{C,w1}$	adimensional

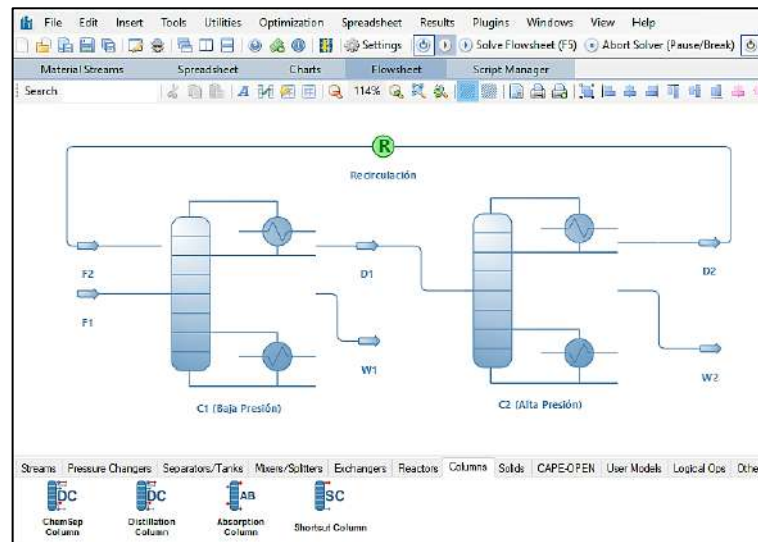
	Flujo molar en el destilado de la columna de alta presión	$D_2$	kmol/h (Kilomol/hora)
	Fracción molar de cloroformo en el destilado de la columna de alta presión	$X_{C,D2}$	adimensional
	Flujo molar en el residuo de la columna de alta presión	$W_2$	kmol/h (Kilomol/hora)
	Fracción molar de cloroformo en el residuo de la columna de alta presión	$X_{C,w2}$	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

### 3.2 Simulación DWSIM

En este apartado se analizan los datos propuestos en el artículo científico base del diseño y control de procesos de destilación para separación metanol-cloroformo (Tabla 1-3); parámetros de partida para llevar a cabo la simulación de la destilación por oscilación de presión en el software DWSIM.

En el simulador DWSIM, se selecciona la herramienta ChemSep Rigorous separation Column (CAPE-OPEN), esta ChemSep Column nos permite interconectar las columnas con las corrientes de alimentación y las corrientes de salida del destilado y del residuo (Figura 3-3).



**Figura 3-3.** Esquema de destilación por oscilación de presión en DWSIM.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

En este proceso, primero se envía la corriente de alimentación (F1) que contiene una mezcla equimolar de metanol y cloroformo a una columna de destilación (C1) que tiene 24 etapas. La alimentación se envía a la etapa número 9 mientras que la corriente de alimentación reciclada (F2) se envía a la etapa número 18. La velocidad de flujo de la alimentación es de 100 kmol / h, 300 K y la relación de reflujo de la torre de baja presión (C1) es de 0,55. Los destilados de la primera columna (D1) se envían a una segunda columna de destilación de alta presión (C2). La

segunda columna de destilación tiene una relación de reflujo de 0,95 y produce destilados (D2) que se reciclan nuevamente a la primera columna de destilación. La primera columna de destilación es una columna de destilación de baja presión mantenida a una presión de 1 atm mientras que la segunda columna de destilación es una columna de destilación de alta presión mantenida a una presión de 10 atm. Las condiciones de las corrientes de alimentación y columnas de separación se detallan a continuación.

**Tabla 3-3.** Condiciones de la corriente de alimentación.

Parámetro	Valor	Unidad
Paquete de propiedades termodinámicas	NRTL	adimensional
Algoritmo flash termodinámico	Nested Loops (VLE)	adimensional
Temperatura	300	K
Presión	1	atm
Flujo másico	7570,95	kg/h
Flujo molar	100	kmol/h
Flujo volumétrico	7,3548265	m <sup>3</sup> /h
Fracción molar de metanol en la alimentación	0,5	adimensional
Fracción molar de cloroformo en la alimentación	0,5	adimensional
Entalpía específica	-483,81105	kJ/kg
Entropía específica	-1,3150817	kJ/kgK

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

Así también, el paquete de propiedades termodinámicas utilizado en las columnas para la simulación es el DECHEMA; por otro lado, las especificaciones generales de la columna de destilación están definidas por el modelo termodinámico NRTL. Las especificaciones en ambas columnas se presentan a continuación:

**Tabla 4-3.** Especificaciones para las columnas de baja presión y alta presión

Parámetro	Columna 1	Columna 2	Unidad
Valor K	DECHEMA	DECHEMA	adimensional
Coefficiente de actividad	NRTL	NRTL	adimensional
Presión de vapor	Antoine	Antoine	adimensional
Presión	1	10	atm
Número de platos	24	25	adimensional
Plato de alimentación	9	20	adimensional
Plato de recirculación	18	-	adimensional
Relación de reflujo	0,55	0,95	adimensional
Temperatura del calderín	337	426	K
Temperatura del condensador	326,12394	404,85968	K

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

### 3.2.1 Validación de la simulación

Con el propósito de analizar y optimizar los resultados, surge la necesidad de validar el modelo de simulación desarrollado en DWSIM con los resultados existentes en bibliografía para este tipo de modelos. El estudio que se toma en cuenta para la validación de la simulación, es el trabajo expuesto por Hosgor et al., (2014).

Una vez realizada y optimizada la simulación del proceso de destilación para separación metanol-cloroformo, se ejecuta el programa 125 veces, para obtener un conjunto de datos de la fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de ambas columnas. Para obtener esta base de datos se ha mantenido un flujo de alimentación de 100 kmol/h, una presión de 1 atm en la columna de baja presión y 10 atm en la columna de alta presión. Para las demás especificaciones en la corriente de alimentación se han establecido rangos como se indica a continuación.

**Tabla 5-3.** Rango de especificaciones de la corriente de alimentación.

Parámetro	Rango	Unidad
Temperatura	290 – 310	K
Fracción molar de cloroformo	0,12 - 0,90	adimensional
Relación de reflujo en columna de baja presión (C1)	0,12 - 0,98	adimensional
Relación de reflujo en columna de alta presión (C2)	0,51 - 1,50	adimensional
Temperatura del calderín en columna de baja presión (C1)	329 - 337	K
Temperatura del calderín en columna de alta presión (C2)	415 - 426	K

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

### 3.3 Pre-procesamiento de la base de datos

Los datos fueron generados a partir de la simulación DWSIM a través de la generación de números aleatorios en los rangos establecidos en la Tabla 5-3. Cabe mencionar que se generaron 125 pares de datos, de los cuales se han destinado 100 pares de datos para entrenar la red neuronal y 25 pares para su validación.

Por lo tanto, en esta sección se analiza el conjunto de datos obtenidos en la simulación para ser usados posteriormente como datos de entrada en el desarrollo de la red neuronal, así también, se verifica la posible existencia de datos atípicos a través de métodos estadísticos como la prueba de Grubbs, que identifica que tan separado está el valor atípico del resto de los valores al representar el valor absoluto de la diferencia de la media y el valor atípico, dividido por la desviación estándar utilizando la herramienta Microsoft Excel. De igual manera, en base a recomendaciones bibliográficas se aplica un suavizado y discretización a la base de datos para un correcto entrenamiento de la red neuronal.

### 3.4 Diseño de la red neuronal artificial

Como se ha descrito en apartados anteriores, para diseñar la red neuronal primero se determinan los parámetros de entrada y salida de la RNA; para este caso de estudio se establecen 6 variables de entrada con 8 variables de salidas (Tabla 6-3), para entrenar el modelo de predicción.

**Tabla 6-3.** Variables de entrada y salida establecidas en el modelo de predicción

	Variables			Unidad
Entrada	1	Temperatura de alimentación	T	K
	2	Fracción molar de cloroformo en la alimentación	$X_c$	adimensional
	3	Relación de reflujo en la columna de baja presión	$RR_1$	adimensional
	4	Temperatura del calderín (Reboiler) en la columna de baja presión	$TR_1$	K
	5	Relación de reflujo en la columna de alta presión	$RR_2$	adimensional
	6	Temperatura del calderín (Reboiler) en la columna de alta presión	$TR_2$	K
Salida	1	Flujo molar en el destilado de la columna de baja presión	$D_1$	kmol/h
	2	Fracción molar de cloroformo en el destilado de la columna de baja presión	$X_{C,D1}$	adimensional
	3	Flujo molar en el residuo de la columna de baja presión	$W_1$	kmol/h
	4	Fracción molar de cloroformo en el residuo de la columna de baja presión	$X_{C,W1}$	adimensional
	5	Flujo molar en el destilado de la columna de alta presión	$D_2$	kmol/h
	6	Fracción molar de cloroformo en el destilado de la columna de alta presión	$X_{C,D2}$	adimensional
	7	Flujo molar en el residuo de la columna de alta presión	$W_2$	kmol/h
	8	Fracción molar de cloroformo en el residuo de la columna de alta presión	$X_{C,W2}$	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

No obstante, cabe destacar que tanto en el destilado como en el residuo se encuentra la fracción molar de metanol, misma que se calcula por diferencia.

#### 3.4.1 Normalización y acondicionamiento de entradas y salidas

Para el desarrollo del modelo de predicción y con el objetivo de reducir la redundancia de datos, es necesario acondicionar los datos de entrada y los datos de salida mediante la normalización que consiste en representar estos valores en otra escala, que está comprendida en el intervalo 0 y 1, este procedimiento es indispensable para mejorar el proceso de entrenamiento de la red neuronal artificial. La ecuación utilizada en este caso es la siguiente:

$$X_{\text{Norm}} = \frac{X - X_{\text{min}}}{X_{\text{max}} - X_{\text{min}}} \quad \text{Ec. 1-3}$$

Donde:

$X_{\text{Norm}}$  = valor normalizado

$X$  = valor que se desea normalizar

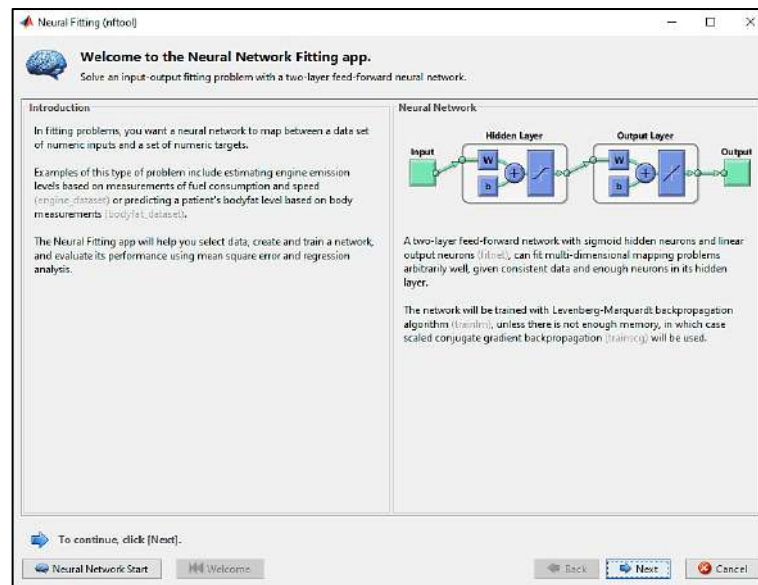
$X_{\text{max}}$  = valor máximo

$X_{\text{min}}$  = valor mínimo



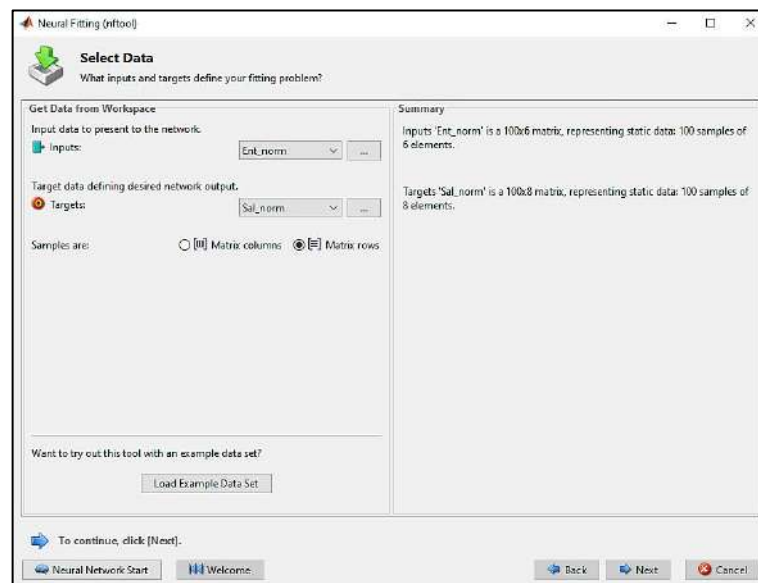
### 3.4.2 Desarrollo de la red neuronal

Una vez normalizado el conjunto de datos, se utiliza la herramienta Neural Net Fitting (nftool) del toolbox de Matlab. Esta herramienta permite resolver problemas de ajuste utilizando redes de dos capas, feed-forward networks (nftool) (Figura 4-3). Luego, se identifica y seleccionan las variables con los datos normalizados de entrada y de salida planteadas en la codificación del software (Figura 5-3).



**Figura 4-3.** Herramienta neural network fitting.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Figura 5-3.** Selección de datos normalizados de entrada y salida.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

De la Figura 5-3, la variable de los datos de entrada para el diseño de la red neuronal artificial tiene el nombre de Ent\_norm, mientras que los datos de salida u objetivos están definidos con la variable Sal\_norm. Para continuar, es importante que los datos de entrada y salida estén definidos como una Matrix rows y en efecto las dos variables vinculadas con la base de datos en Microsoft Excel, deben tener el mismo número de filas y columnas.

### 3.4.3 *Arquitectura de la red neuronal*

En la arquitectura de la red neuronal artificial se debe definir la estructura, las funciones de transferencia y el número de neuronas del modelo de predicción (Beale et al., 2011; citados en Ochoa, Jobson y Smith, 2013, p.179). Para determinar el número de capas y neuronas, algunos autores sugieren el uso de reglas heurísticas (Beale et al., 2011; Heaton, 2005; Sarle, 1995; Wang, Van y Vrijling, 2005; citados en Ochoa, Jobson y Smith, 2013, p.179) o la aplicación de metodologías sistemáticas como poda y crecimiento (Heaton, 2005; Narasimha et al., 2008; Sarle, 1995; citados en Ochoa, Jobson y Smith, 2013, p.179) y enfoques basados en algoritmos genéticos (Nolfi y Parisi, 2002; Stanley y Miikkulainen, 2002; citados en Ochoa, Jobson y Smith 2013, p.179).

Sin embargo, por simplicidad, el número de capas y neuronas se eligió siguiendo el método de generación dinámica de la topología recomendado por Branch y Valencia, 2006; citados en Sinaluisa (2017, p.69) que proponen complementar la técnica propuestas por Ash y Hirose que consiste en la búsqueda dinámica y forzada de los mejores mínimos locales, es decir si el valor está por debajo del valor esperado una nueva neurona es incorporada, pero si el error es cero o muy cercano a cero una neurona será retirada con el fin que no memorice; garantizando así un buen rendimiento en el pronóstico y minimizando el error de predicción.

Adicional a ello, se realizaron distintos ensayos y se seleccionó la mejor topología de red mediante indicadores de desempeño como el error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de correlación de Pearson (R), cuyas ecuaciones son:

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n (y'y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y'^2]}}}$$
Ec. 2-3

Donde:

R = coeficiente de correlación de Pearson.

y = resultados reales (salidas de la simulación en DWSIM)

y' = resultados predichos (salidas de la red neuronal)

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2 \quad \text{Ec. 3-3}$$

Donde:

$n$  = número de observaciones.

$y_t$  = resultados reales (salidas de la simulación en DWSIM)

$y'_t$  = resultados predichos (salidas de la red neuronal)

En la Tabla 7-3, se resumen algunos de los ensayos seleccionados con los valores correspondientes de correlación lineal (R) y de error cuadrático medio (MSE) para varias topologías de red. Para cada prueba, los valores del coeficiente de determinación, R, y el error de la media al cuadrado, MSE, se obtuvieron a partir de los gráficos generados por el software durante el entrenamiento de la RNA.

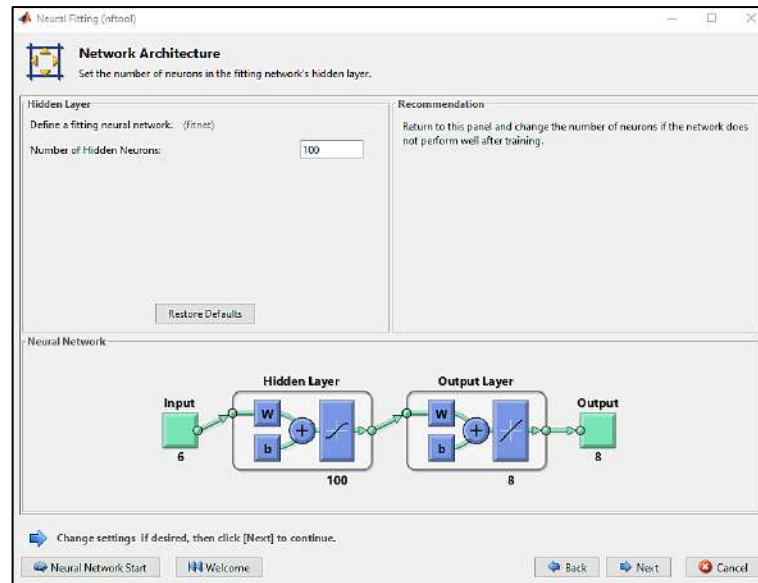
**Tabla 7-3.** Ensayos de entrenamiento seleccionados.

N	Topología de Red	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization	
		R	MSE	R	MSE
1	I-100-O	0,81260	1,56E-01	0,99919	1,52E-14
2	I-75-O	0,89762	8,13E-02	0,99907	2,03E-14
3	I-150-O	0,69731	3,20E-01	0,99902	8,80E-15
4	I-120-O	0,75569	2,17E-01	0,99899	2,04E-14
5	I-20-O	0,99684	1,78E-03	0,99886	1,71E-05
6	I-10-O	0,99310	5,56E-04	0,99825	1,70E-04
7	I-80-O	0,89481	7,40E-02	0,99808	1,68E-14
8	I-95-O	0,83966	8,57E-02	0,99807	3,00E-14
9	I-40-O	0,98362	1,12E-02	0,99612	7,33E-10
10	I-50-O	0,96259	2,65E-02	0,99494	1,49E-14

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

De manera que, aplicando el método de generación dinámica y en función de los valores más altos de R, la mejor topología de la red neuronal consta de los siguientes elementos:

- 6 entradas como variables predictoras.
- 1 capa oculta con 100 neuronas propuestas para experimentación.
- 8 salidas correspondientes a corrientes de flujo y fracciones molares de cloroformo predichas.



**Figura 6-3.** Topología de la red neuronal artificial.

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

En adición, esta red neuronal artificial cuenta con las siguientes consideraciones:

- Función de transferencia en la capa oculta: Hyperbolic tangent sigmoid (tansig).
- Función de transferencia para la capa de salida: Función lineal (purelin)

### 3.5 Entrenamiento de la red neuronal

#### 3.5.1 Selección del algoritmo de entrenamiento

Una buena generalización es una necesidad clave para un buen sistema de red neuronal y un problema importante que enfrentan las redes neuronales es el problema de sobreajuste. Por lo tanto, para diseñar el sistema de destilación propuesto basado en una red neuronal, se utiliza el algoritmo de regularización bayesiana para evitar el problema de sobreajuste y lograr resultados de estimación precisos (Balam, Lian y Sebastian, 2019, p.4).

Los ensayos realizados y presentados en la Tabla 7-3, no sólo permiten identificar la mejor topología de red, también es posible determinar que, las pruebas con el algoritmo de regularización bayesiana presentan mejor correlación (R) y menor error (MSE) que el algoritmo Levenberg-Marquardt.

El algoritmo de Bayesian Regularization (BR) actualiza los pesos y los valores de sesgo de acuerdo con la optimización de Levenberg-Marquardt (LM) (Foresee y Hagan, 1997; MacKay, 1992; citados en Baghirli, 2015, p.12). Minimiza una combinación de errores al cuadrado y pesos, y luego determina la combinación correcta para producir una red que generalice bien (Pan, Lee y Zhang, 2013; citados en Baghirli, 2015, p.12).

Para la regularización bayesiana, no se utilizan datos de validación, sino solo los subconjuntos de datos de entrenamiento y de prueba. Eliminar la necesidad de una submuestra de datos de validación deja más datos de entrenamiento, lo cual es una ventaja adicional sobre el enfoque de validación cruzada si el conjunto de datos de aprendizaje disponible es limitado (Schmidt, Creason y Law, 2018, p.15).

BR introduce los pesos de la red en la función del objetivo de entrenamiento que se denota como  $F(\omega)$  en (Ec. 4-3):

$$F(\omega) = \alpha E_{\omega} + \beta E_D \quad \text{Ec. 4-3}$$

Donde:

$E_{\omega}$  = suma de los pesos de la red al cuadrado

$E_D$  = suma de los errores de la red

$\alpha, \beta$  = parámetros de la función objetivo (entre 0 y 1)

Esto permite que la red ajuste las entradas a los objetivos de entrenamiento haciendo que la respuesta de la red a las entradas presentadas sea más fluida y la red sea menos propensa al sobreajuste. Por lo tanto, mejorará su capacidad de generalización cuando se enfrente a nuevos datos durante la aplicación de la red más adelante (Schmidt, Creason y Law, 2018, p.16).

En el marco de BR, los pesos de la red se ven como variables aleatorias, y luego la distribución de los pesos de la red y el conjunto de entrenamiento se consideran distribución gaussiana. Los factores  $\alpha$  y  $\beta$  se definen utilizando el teorema de Bayes. El teorema de Bayes relaciona dos variables (o eventos), A y B, en función de sus probabilidades anteriores (o marginales) y probabilidades posteriores (o condicionales), así:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)} \quad \text{Ec. 5-3}$$

Donde:

$P(A|B)$ = la probabilidad posterior de A condicional en B

$P(B|A)$ = la anterior de B condicional en A

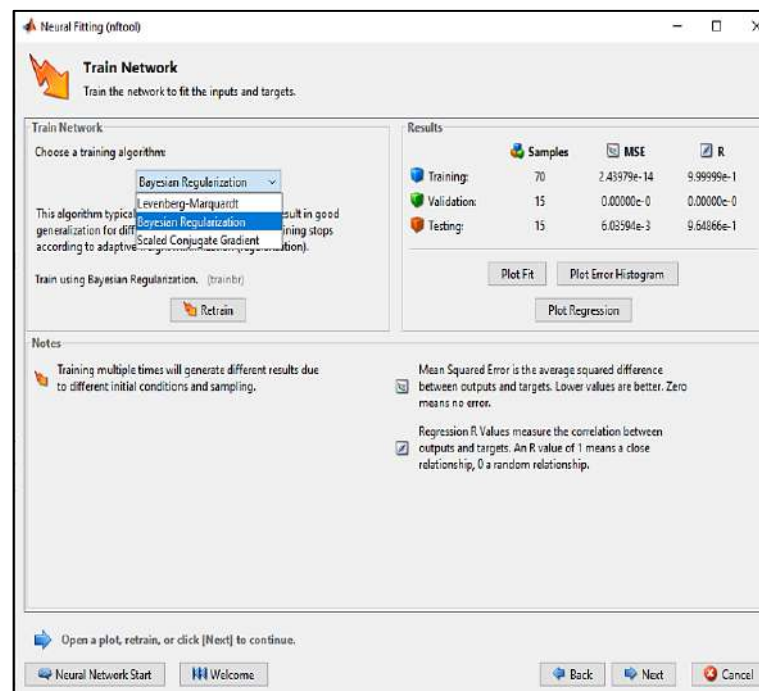
$P(B)$ = la probabilidad previa distinta de cero del evento B, que funciona como un constante de normalización

Para encontrar el espacio de peso óptimo, la función objetivo (Ec. 4-3) necesita ser minimizada, que es el equivalente a maximizar la función de probabilidad posterior dada como en (Ec. 6-3):

$$P(\alpha, \beta|DM) = \frac{P(D|\alpha, \beta, M)P(\alpha, \beta|M)}{P(D|M)} \quad \text{Ec. 6-3}$$

Donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los factores necesarios para optimizar,  $D$  es la distribución del peso,  $M$  es la arquitectura particular de la red neuronal,  $P(DM)$  es el factor de normalización,  $P(\alpha, \beta|M)$  es la densidad previa uniforme para los parámetros de regularización y  $P(D|\alpha, \beta, M)$  es la función de probabilidad de  $D$  para  $\alpha, \beta, M$  dados. Maximizar la función posterior  $P(\alpha, \beta|DM)$  es equivalente a maximizar la función de probabilidad  $P(D|\alpha, \beta, M)$ . Como resultado de este proceso, se encuentran valores óptimos para  $\alpha$  y  $\beta$  para un espacio de peso dado. Posteriormente, el algoritmo pasa a la fase LM donde se realizan los cálculos de la matriz de Hesse y actualiza el espacio de peso para minimizar la función objetivo. Luego, si no se cumple la convergencia, el algoritmo estima nuevos valores para  $\alpha$  y  $\beta$  de modo que todo el procedimiento se repite hasta que se alcanza la convergencia (Baghirli, 2015, p.13).

El software en su codificación, identifica el algoritmo Bayesian Regularization con el comando “trainbr”, como se identifica en la Figura 7-3.



**Figura 7-3.** Entrenamiento de la red neuronal artificial.

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

Cabe mencionar que existen otros dos algoritmos de entrenamiento dentro de una Neural Fitting como son el algoritmo Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient, pero se utiliza el algoritmo de Bayesian Regularization puesto que en el proceso de regularización bayesiana se actualizan los valores de peso y sesgo según la optimización de Levenberg-Marquardt, minimizando una combinación de errores al cuadrado y pesos, y luego determina la combinación correcta para obtener una red que generalice bien (MathWorks, 2020b).

### 3.6 Validación de la red neuronal

Para determinar la exactitud del modelo de predicción, se comparan los resultados obtenidos al ejecutar la red neuronal artificial con los resultados obtenidos por simulación en DWSIM; empleando un nuevo conjunto con 25 pares de datos y evaluando la predicción mediante un análisis estadístico.

### 3.7 Análisis estadístico

Para el análisis estadístico se utilizan los datos de salida correspondientes a las simulaciones en DWSIM y se comparan con las salidas predichas por la red neuronal artificial. De manera que, se evalúan los resultados a través de un programa estadístico, mismo que permite comparar varias muestras en función del análisis de varianzas mediante la tabla ANOVA.

#### 3.7.1 Análisis ANOVA

El primer paso cuando se comparan varias muestras es habitualmente ejecutar un análisis de la varianza simple (ANOVA). El análisis ANOVA se utiliza para contrastar la hipótesis de igualdad de medias poblacionales eligiendo entre dos hipótesis:

Hipótesis nula:  $\mu_A = \mu_B$

Hipótesis alternativa: las medias no son iguales

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

**Tabla 8-3.** Tabla ANOVA para el análisis de la varianza

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>Gl</i>	<i>Cuadrado Medio</i>	<i>Razón-F</i>	<i>Valor-P</i>
Entre grupos	513,901	1	513,901	0,14	0,7104
Intra grupos	176784,	48	3682,99		
Total (Corr.)	177298,	49			

**Fuente:** Statgraphics Centurion XVI.

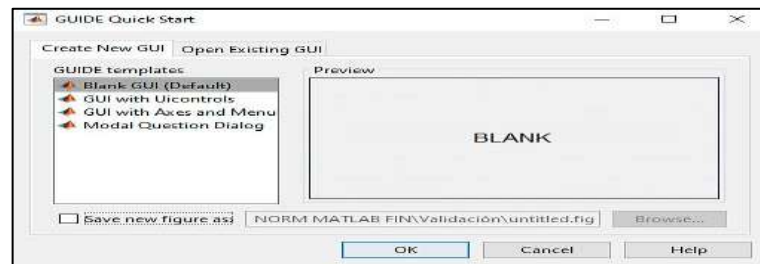
**Realizado por:** Brayan, Rosario, 2020

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos observados en dos componentes: una componente entre grupos, que cuantifica las diferencias entre los datos reales, y una componente dentro de grupos, que cuantifica las diferencias de los datos predichos por la red neuronal. Si se estima la variabilidad entre grupos y es significativamente mayor que la variabilidad dentro de grupos, es evidente que las medias de los grupos no son similares. La razón-F, es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos (StatPoint Technologies, 2010, p.193).

El valor clave en la Tabla 8-3 es el P-valor. P-valores pequeños (menores que 0,05 operando al 5% de nivel de significación) llevan al rechazo de la hipótesis de igualdad de medias. En este caso, puesto que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0,05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables analizadas con un nivel del 95,0% de confianza (StatPoint Technologies, 2010, p.193).

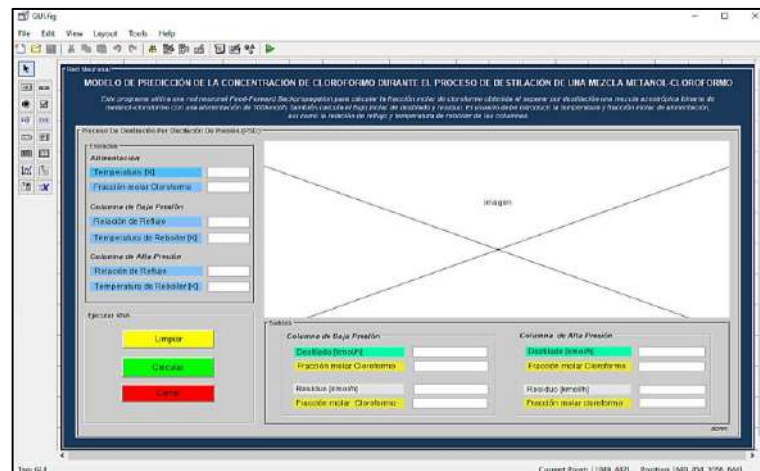
### 3.8 Interfaz gráfica de usuario (GUI)

Al introducir el comando “guide” en el espacio de trabajo del software, se abre la ventana guía de inicio rápido para crear una interfaz gráfica de usuario (Figura 8-3), una vez seleccionada la opción Blank GUI (Default) es posible empezar a desarrollar el panel que permitirá al usuario interactuar con la red neuronal (Figura 9-3).



**Figura 8-3.** Ventana guía de inicio rápido para crear la interfaz gráfica de usuario.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Figura 9-3.** Diseño de la interfaz gráfica de usuario para la RNA.

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

A su vez, esta ventana crea su propia área de trabajo, dependiente de la línea de comandos donde es posible interconectar la interfaz con la red neuronal. De modo que, al ejecutar la GUI, se pueden exportar los resultados al espacio de trabajo (de línea de comandos). Del mismo modo, es posible importar resultados del área de trabajo para la GUI.



## CAPÍTULO IV

### 4 GESTIÓN DEL PROYECTO

#### 4.1 Cronograma

**Tabla 1-4.** Cronograma del proyecto

ACTIVIDAD	MESES																									
	PRIMERO				SEGUNDO				TERCERO				CUARTO				QUINTO				SEXTO					
	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 proceso en DWSIM			■	■	■	■	■	■																		
Obtención de datos experimentales					■	■	■	■	■	■	■	■														
Diseño de la red neuronal							■	■	■	■	■	■	■	■	■	■										
Estudio técnico y económico									■	■	■	■	■	■	■	■										
Redacción del trabajo final			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■		
Análisis de costos			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■										
Revisión del documento final					■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■		
Defensa de los resultados																							■	■	■	■

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

## 4.2 Presupuesto

En la Tabla 2-4, se detallan los costos para cada actividad.

**Tabla 2-4.** Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación y aprendizaje (Internet)	\$60	X	
Cursos online para simulación de la destilación en el software DWSIM	\$40	X	
Cursos online para el diseño de redes neuronales artificiales	\$40	X	
Copias e impresiones adicionales	\$10		
Empastados	\$50		
TOTAL	\$200		

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

## 4.3 Recursos materiales

El software utilizado durante el desarrollo de las etapas planteadas en este trabajo es DWSIM versión 5.8 Update 11(64-bit) de la cual se utilizan algunas herramientas como el ChemSep Rigorous separation Column (CAPE-OPEN). A su vez, todas las simulaciones se realizaron en un ordenador con procesador Intel® Core™ i3-6006U CPU a 2.00 GHz con 6 GB de memoria RAM y un sistema operativo Microsoft® Windows 10.

## 4.4 Resultados

A lo largo de este trabajo se han presentado, de manera parcial, algunos de los resultados en las etapas del modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo. Finalmente, en esta sección, se muestran todos los resultados obtenidos durante la simulación del sistema y el diseño de la red neuronal artificial.

### 4.4.1 Sistema de destilación

El sistema de destilación por oscilación de presión que se simula en este proyecto, se basa en el artículo científico que titula “Design and control of distillation processes for methanol–chloroform separation” propuesto por Eda Hosgor, Tugba Kucuk, Ilayda N. Oksal y Devrim B. Kaymak del departamento de Ingeniería Química de la Universidad Técnica de Estambul, Turquía. Por lo tanto, tomando en cuenta los parámetros del sistema indicados en el capítulo 3

(Tabla 1-3) y llevando a cabo la simulación en el software DWSIM, se obtienen los siguientes resultados:

**Tabla 3-4.** Corriente de destilado (D1) en la columna de baja presión (C1)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	326,12394	K
Presión	1	atm
Flujo másico	11802,605	kg/h
Flujo molar	133,59618	kmol/h
Entalpía molar	-32084,852	kJ/kmol
Entropía molar	-83,967759	kJ/ [kmol. K]
Capacidad calorífica (Cp)	1,3778329	kJ/ [kg. K]
Fracción molar de metanol	0,35531717	adimensional
Fracción molar de cloroformo	0,64468283	adimensional
Fase de la mezcla	Líquido	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 4-4.** Corriente de residuo (W1) en la columna de baja presión (C1)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	337,01999	K
Presión	1	atm
Flujo másico	1685,2736	kg/h
Flujo molar	50,445885	kmol/h
Entalpía molar	-35887,513	kJ/kmol
Entropía molar	-105,43792	kJ/ [kmol. K]
Capacidad calorífica (Cp)	3,8713788	kJ/ [kg. K]
Fracción molar de metanol	0,9843642	adimensional
Fracción molar de cloroformo	0,0156358	adimensional
Fase de la mezcla	Líquido	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 5-4.** Corriente de destilado (D2) en la columna de alta presión (C2)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	404,85968	K
Presión	10	atm
Flujo másico	5955,3452	kg/h
Flujo molar	84,587719	kmol/h
Entalpía molar	4193,7985	kJ/kmol
Entropía molar	2,5654372	kJ/ [kmol. K]
Capacidad calorífica (Cp)	0,98229069	kJ/ [kg. K]
Fracción molar de metanol	0,56074459	adimensional
Fracción molar de cloroformo	0,43925541	adimensional
Fase de la mezcla	Vapor	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 6-4.** Corriente de residuo (W2) en la columna de alta presión (C2)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	426,40855	K
Presión	10	atm
Flujo másico	5847,2599	kg/h
Flujo molar	49,008465	kmol/h
Entalpía molar	-16435,325	kJ/kmol
Entropía molar	-52,217646	kJ/ [kmol. K]
Capacidad calorífica (Cp)	1,0626181	kJ/ [kg. K]
Fracción molar de metanol	0,00075317	adimensional
Fracción molar de cloroformo	0,99924683	adimensional
Fase de la mezcla	Líquido	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 7-4.** Validación de la simulación

Corriente de Flujo	Parámetro	ASPEN (Hosgor et al., 2014)	DWSIM	Error (%)
Destilado de la columna de baja presión.	Temperatura	327	326,1239	0,27
	Flujo molar	134,5	133,5962	0,67
	Fracción molar de metanol	0,36	0,3553	1,31
	Fracción molar de cloroformo	0,64	0,6446	0,72
Residuo de la columna de baja presión.	Temperatura	341,1	337,0199	1,20
	Flujo molar	50	50,4458	-0,89
	Fracción molar de metanol	0,995	0,9844	1,07
Destilado de la columna de alta presión.	Temperatura	405,5	404,8597	0,16
	Flujo molar	80,2	84,5877	-5,47
	Fracción molar de metanol	0,57	0,5607	1,63
	Fracción molar de cloroformo	0,43	0,4393	-2,16
Residuo de la columna de alta presión.	Temperatura	426,6	426,4086	0,04
	Flujo molar	50	49,0084	1,98
	Fracción molar de cloroformo	0,995	0,9992	-0,42

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

De los resultados presentados en la Tabla 7-4, en promedio, el error porcentual en la validación de la simulación es de 1,29%.

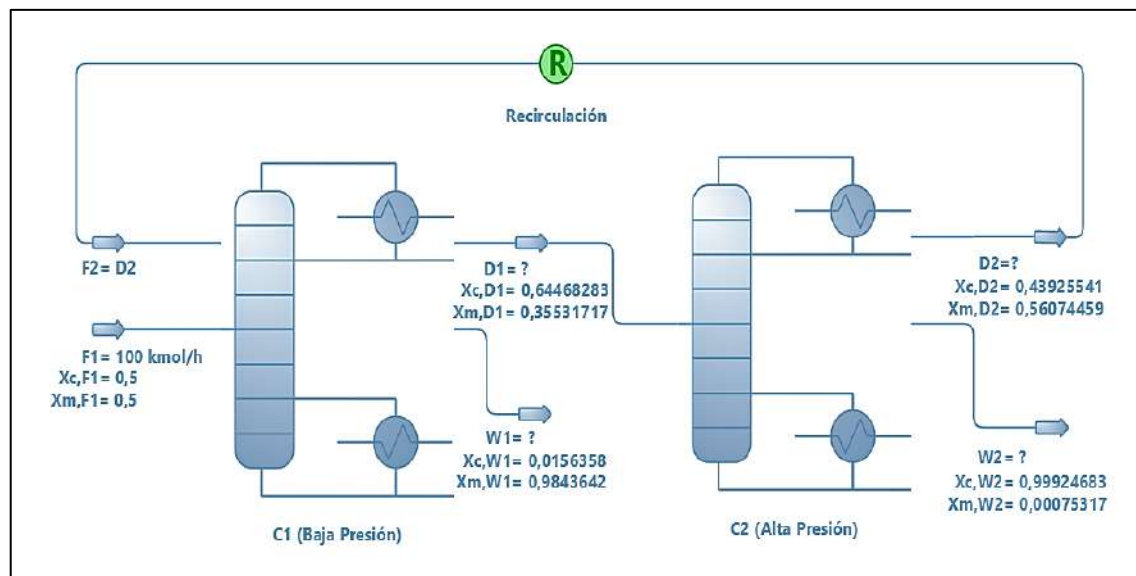
#### 4.4.1.1 Balance de masa del sistema de destilación

De manera que, el diseño del sistema de destilación por oscilación de presión se basa en la tabla de condiciones de concentración en la alimentación, destilados y residuos propuesta a continuación.

**Tabla 8-4.** Datos de concentración de cloroformo en la alimentación, destilados y residuos

Parámetros		Valor	Unidad
Flujo molar de alimentación	F	100	kmol/h
Fracción molar de cloroformo en la alimentación	$X_{C,F}$	0,5	adimensional
Fracción molar de cloroformo en el destilado de la primera columna	$X_{C,D1}$	0,64468283	adimensional
Fracción molar de cloroformo en el residuo de la primera columna	$X_{C,W1}$	0,0156358	adimensional
Fracción molar de cloroformo en el destilado de la segunda columna	$X_{C,D2}$	0,43925541	adimensional
Fracción molar de cloroformo en el residuo de la segunda columna	$X_{C,W2}$	0,99924683	adimensional

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Figura 1-4.** Condiciones de la destilación por oscilación de presión de metanol – cloroformo

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

#### 4.4.1.1.1 Flujo molar de alimentación

$$F1 = 100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

#### 4.4.1.1.2 Flujo másico de alimentación

$$\dot{F}1 = F1[X_{C,F1}(PM_c) + X_{m,F1}(PM_m)] \quad \text{Ec. 1-4}$$

Donde:

$\dot{F}1$  = Flujo másico de alimentación

F1 = Flujo molar de alimentación

$X_c, F_1$  = Fracción molar de cloroformo en la alimentación

$PM_c$  = Peso molecular del cloroformo

$X_m, F_1$  = Fracción molar de metanol en la alimentación

$PM_m$  = Peso molecular del metanol

$$F_1 = 100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \left[ 0,5 \left( 119,38 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right) + 0,5 \left( 32,04 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right) \right]$$
$$F_1 = 7571 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

#### 4.4.1.1.3 Balance global de materia

$$F_1 = W_1 + W_2 \quad \text{Ec. 2-4}$$

$$W_1 = 100 - W_2 \quad \text{Ec. 3-4}$$

Donde:

$F_1$  = Flujo molar de alimentación

$W_1$  = Flujo molar de residuo de la columna de baja presión

$W_2$  = Flujo molar de residuo de la columna de alta presión

#### 4.4.1.1.4 Balance de materia en la columna de baja presión C1

$$F_1 + F_2 = D_1 + W_1 \quad \text{Ec. 4-4}$$

Donde:

$F_1$  = Flujo molar de alimentación

$F_2$  = Flujo molar de recirculación

$D_1$  = Flujo molar de destilado de la columna de baja presión

$W_1$  = Flujo molar de residuo de la columna de baja presión

#### 4.4.1.1.5 Balance de materia en la columna de alta presión C2

$$D_1 = D_2 + W_2 \quad \text{Ec. 5-4}$$

Donde:

$D_1$  = Flujo molar de destilado de la columna de baja presión

$D_2$  = Flujo molar de destilado de la columna de alta presión

$W_2$  = Flujo molar de residuo de la columna de alta presión

Como la corriente de recirculación  $F_2$  que alimenta a la columna de baja presión es la corriente de destilado  $D_2$  de la columna de alta presión, entonces:

$$F_2 = D_2 \quad \text{Ec. 6-4}$$

Por lo tanto, es posible calcular los flujos en  $W_1$  y  $W_2$  por igualación de ecuaciones, así:

4.4.1.1.6 Balance de cloroformo en la columna de baja presión C1

$$F1 * X_{CF1} + F2 * X_{CF2} = D1 * X_{CD1} + W1 * X_{CW1} \quad \text{Ec. 7-4}$$

$$100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} (0,5) + F2(0,43925541) = D1(0,64468283) + W1(0,0156358)$$

$$F2 = \frac{D1(0,64468283) + W1(0,0156358) - 50\text{kmol/h}}{0,43925541} \quad \text{Ec. 8-4}$$

4.4.1.1.7 Balance de cloroformo en la columna de alta presión C2

$$D1 * X_{CD1} = D2 * X_{CD2} + W2 * X_{CW2} \quad \text{Ec. 9-4}$$

$$D1(0,64468283) = D2(0,43925541) + W2(0,99924683)$$

$$D2 = \frac{D1(0,64468283) - W2(0,99924683)}{0,43925541} \quad \text{Ec. 10-4}$$

Como  $F2 = D2$ , se iguala Ec. 8-4 con Ec. 10-4

$$\frac{D1(0,64468283) + W1(0,0156358) - 50\text{kmol/h}}{0,43925541} = \frac{D1(0,64468283) - W2(0,99924683)}{0,43925541} \quad \text{Ec. 11-4}$$

$$W1(0,0156358) + W2(0,99924683) = 50\text{kmol/h} \quad \text{Ec. 12-4}$$

Reemplazando Ec. 3-4 en Ec. 12-4, se tiene:

$$(100 - W2)(0,0156358) + W2(0,99924683) = 50\text{kmol/h}$$

$$1,56358 - W2(0,0156358) + W2(0,99924683) = 50\text{kmol/h}$$

$$W2(0,99924683) - W2(0,0156358) = 48,43642\text{kmol/h}$$

$$W2(0,98361103) = 48,43642\text{kmol/h}$$

$$W2 = \frac{48,43642\text{kmol/h}}{0,98361103}$$

Flujo molar en el residuo de la columna de alta presión:

$$W2 = 49,24346975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Aplicando Ec. 1-4, se obtiene el flujo másico en el residuo de la columna de alta presión:

$$\dot{W}2 = 5875,446091 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Reemplazando  $W2$  en Ec. 3-4, se obtiene el flujo molar en el residuo de la columna de baja presión:

$$W1 = 100 - 49,24346975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$W1 = 50,756530 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

El flujo másico en el residuo de la columna de baja presión, será:

$$\dot{W}1 = 1695,553909 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Del balance de cloroformo en columna de baja presión (Ec. 7-4) y reemplazando la Ec. 5-4 del balance de materia en la columna de alta presión, se tiene:

$$F1 * X_{CF1} + F2 * X_{CF2} = (D2 + W2) * X_{CD1} + W1 * X_{CW1} \quad \text{Ec. 13-4}$$

Como  $F2 = D2$  entonces  $F2 * X_{CF2} = D2 * X_{CD2}$ , modificando la ecuación Ec. 13-4, así:

$$F1 * X_{CF1} + D2 * X_{CD2} = (D2 + W2) * X_{CD1} + W1 * X_{CW1} \quad \text{Ec. 14-4}$$

Reemplazando valores:

$$100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} (0,5) + D2(0,43925541) = \left( D2 + 49,24346975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) (0,64468283) + 50,756530 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} (0,0156358)$$

El flujo molar en el destilado de la columna de alta presión, será:

$$D2 = 84,99333541 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

y el flujo másico en el destilado de la columna de alta presión:

$$\dot{D}2 = 5983,919021 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Finalmente, de la Ec. 5-4, se obtiene el flujo molar en el destilado de la columna de baja presión:

$$D1 = 84,99333541 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 49,24346975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$D1 = 134,2368052 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

y el flujo másico en el destilado de la columna de baja presión, será:

$$\dot{D}1 = 11859,36511 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

**Tabla 9-4.** Resumen de resultados del balance de masa del sistema de destilación

Parámetro	Columna 1 (Baja Presión)				Columna 2 (Alta Presión)		Unidad
	F1	F2	D1	W1	D2	W2	
Flujo molar	100	84,99	134,24	50,76	84,99	49,24	kmol/h
Flujo másico	7571	5983,91	11859,37	1695,55	5983,92	5875,45	kg/h

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

#### 4.4.2 Análisis de los datos generados en DWSIM

Una vez ejecutados y analizados los resultados generados en DWSIM, se recopila el conjunto de datos de entrada del sistema de destilación, manteniendo constante el flujo de alimentación, y las presiones en el sistema; obteniendo corrientes de flujo y composición de cloroformo en destilados y residuos como datos de salida. Los datos presentados en la Tabla 10-4, son utilizados como datos de entrenamiento en la red neuronal artificial y los resultados presentados en la Tabla 11-4 son utilizados como datos de validación de la red neuronal artificial.



**Tabla 10-4.** Base de datos de entrenamiento generada en DWSIM para separar metanol-cloroformo en la destilación por oscilación de presión.

N°	Entrada						Salida							
	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	7	8
	Alimentación		C1 (Baja Presión)		C2 (Alta Presión)		Destilado en C1		Residuo en C1		Destilado en C2		Residuo en C2	
T [K]	Xc	RR1	TR1 [K]	RR2	TR2 [K]	D1 [kmol/h]	Xc (D1)	W1 [kmol/h]	Xc (W1)	D2 [kmol/h]	Xc (D2)	W2 [kmol/h]	Xc (W2)	
1	296	0,71	0,36	332	0,78	426	173,752340	0,651102	33,659981	0,150494	108,047630	0,439392	65,704712	0,999247
2	303	0,69	0,34	334	1,40	425	169,945830	0,650502	33,326269	0,088552	103,836480	0,430913	66,109354	0,995407
3	297	0,81	0,67	337	0,84	421	211,665900	0,649262	16,975995	0,015636	129,351090	0,440697	82,314815	0,977006
4	309	0,74	0,19	336	0,87	424	184,553900	0,660862	26,760589	0,037934	110,620290	0,440013	73,933606	0,991299
5	308	0,75	0,19	333	0,97	419	175,343690	0,662490	25,961413	0,117765	100,415200	0,436511	74,928496	0,965335
6	300	0,44	0,81	336	1,17	415	105,513140	0,646826	55,389348	0,037934	60,414879	0,432656	45,098259	0,933735
7	307	0,67	0,48	332	0,97	417	156,539360	0,648751	34,588233	0,150494	91,958975	0,436315	64,580388	0,951247
8	301	0,12	0,92	334	0,80	422	75,233791	0,464169	96,818211	0,088552	71,493004	0,437067	3,740787	0,982141
9	309	0,12	0,94	335	1,47	425	80,967934	0,472152	93,525507	0,062114	74,942973	0,430086	6,024961	0,995407
10	300	0,50	0,30	337	1,13	426	142,674670	0,628525	50,479441	0,015636	93,636559	0,434375	49,038110	0,999247
11	297	0,30	0,52	331	1,30	416	51,582090	0,577725	85,004104	0,187862	36,801566	0,431018	14,780524	0,943005
12	304	0,38	0,88	335	0,83	420	90,064265	0,646178	64,871266	0,062114	55,226611	0,441007	34,837654	0,971427
13	298	0,42	0,24	333	0,93	419	117,526720	0,595838	63,879882	0,117765	82,145771	0,436692	35,380949	0,965335
14	306	0,54	0,86	336	0,86	418	135,500240	0,647930	45,250003	0,037934	81,140173	0,439767	54,360064	0,958645
15	310	0,49	0,56	337	0,55	419	136,636950	0,644476	49,784256	0,015636	86,923718	0,460971	49,713228	0,965335
16	292	0,37	0,96	333	1,27	423	75,158967	0,646611	71,103224	0,117765	46,066620	0,431716	29,092347	0,986890
17	290	0,86	0,26	335	1,14	424	191,062140	0,683044	13,543248	0,062114	105,583560	0,433486	85,478586	0,991299
18	303	0,90	0,27	330	0,88	425	188,311790	0,698733	12,783984	0,231724	100,695870	0,440596	87,615920	0,995407
19	306	0,71	0,61	337	0,60	418	190,863520	0,648823	25,855921	0,015636	117,678840	0,456144	73,184682	0,958645
20	292	0,47	0,45	335	1,45	422	118,957170	0,636682	55,860868	0,062114	74,492831	0,430480	44,464343	0,982141
21	306	0,42	0,87	334	0,94	416	93,838376	0,646914	61,396082	0,088552	54,918997	0,437084	38,919379	0,943005
22	308	0,43	0,87	331	0,58	419	83,141764	0,646993	68,519236	0,187862	52,176829	0,458070	30,964935	0,965335
23	301	0,25	0,54	335	0,85	425	111,767530	0,537915	79,451463	0,062114	91,918606	0,439124	19,848926	0,995407
24	295	0,27	0,76	335	1,42	424	75,809796	0,596971	77,817128	0,062114	53,311974	0,430563	22,497821	0,991299
25	307	0,30	0,93	337	1,07	425	79,634405	0,639755	71,131223	0,015636	50,495301	0,434521	29,139104	0,995407
26	301	0,62	0,76	330	1,46	423	131,107010	0,648172	48,242242	0,231724	79,813137	0,430486	51,293876	0,986890
27	293	0,26	0,74	332	1,48	424	47,333057	0,585546	87,130069	0,150494	34,232323	0,430264	13,100734	0,991299
28	296	0,40	0,95	333	1,03	419	82,806922	0,647085	66,400217	0,117765	49,687328	0,434953	33,119594	0,965335
29	298	0,26	0,34	335	0,59	420	178,648290	0,509120	77,379509	0,062114	157,516120	0,447097	21,132163	0,971427
30	293	0,56	0,40	331	1,22	422	121,175220	0,643782	52,640032	0,187862	74,548458	0,432153	46,626762	0,982141

31	295	0,76	0,72	336	0,81	426	206,494050	0,648797	25,216111	0,037934	131,137760	0,447417	75,356290	0,999247
32	290	0,64	0,25	331	0,72	421	151,759330	0,647442	42,950910	0,187862	94,344545	0,446881	57,414781	0,977006
33	302	0,69	0,14	332	0,72	420	165,043460	0,655347	33,999506	0,150494	99,484173	0,447052	65,559287	0,971427
34	301	0,44	0,81	333	0,52	418	104,353150	0,646821	61,968279	0,117765	65,828990	0,464338	38,524156	0,958645
35	291	0,73	0,49	331	1,46	416	168,201970	0,649799	28,615673	0,187862	96,215890	0,430431	71,986085	0,943005
36	293	0,79	0,37	331	0,87	421	189,807700	0,655208	23,365390	0,187862	113,660470	0,439619	76,147231	0,977006
37	298	0,61	0,41	334	0,93	421	152,026270	0,646825	41,765073	0,088552	93,039224	0,437490	58,987047	0,977006
38	297	0,45	0,97	330	0,80	417	75,396588	0,647589	69,852106	0,231724	44,982520	0,442276	30,414068	0,951247
39	290	0,32	0,39	332	1,40	419	80,446525	0,567754	78,911361	0,150494	59,794020	0,430431	20,652505	0,965335
40	307	0,76	0,21	334	0,71	417	181,877150	0,662657	21,870827	0,088552	104,258210	0,447806	77,618947	0,951247
41	305	0,55	0,80	330	1,08	415	106,095950	0,647834	54,817777	0,231724	60,695235	0,433976	45,400715	0,933735
42	294	0,27	0,53	332	0,76	418	66,523490	0,555562	84,998468	0,150494	51,856326	0,441553	14,667164	0,958645
43	307	0,66	0,52	334	0,78	420	167,169660	0,648489	35,579584	0,088552	102,238560	0,443393	64,931099	0,971427
44	301	0,36	0,93	332	0,82	422	66,866913	0,645925	74,969554	0,150494	41,588401	0,441564	25,278511	0,982141
45	294	0,41	0,18	335	1,11	424	148,420200	0,572322	61,904297	0,062114	111,415300	0,433166	37,004903	0,991299
46	307	0,60	0,57	337	1,07	426	158,558960	0,647658	40,880344	0,015636	98,932332	0,435755	59,626629	0,999247
47	306	0,51	0,17	333	0,83	420	135,455970	0,619262	53,501667	0,117765	89,843412	0,440471	45,612558	0,971427
48	307	0,58	0,17	331	0,83	422	137,188660	0,636382	50,996673	0,187862	87,646791	0,440944	49,541867	0,982141
49	294	0,53	0,59	335	0,98	425	134,029440	0,646459	50,172105	0,062114	83,692279	0,436582	50,337164	0,995407
50	295	0,77	0,38	336	1,03	415	187,405290	0,653386	18,712607	0,037934	105,337390	0,434968	82,067901	0,933735
51	307	0,18	0,67	333	0,54	424	87,382577	0,496737	93,261323	0,117765	80,013846	0,451191	7,368731	0,991299
52	310	0,26	0,92	335	0,56	417	68,132222	0,617826	77,565133	0,062114	46,019509	0,457614	22,112713	0,951247
53	294	0,40	0,21	329	1,25	425	60,198087	0,583331	84,119901	0,285549	44,011928	0,431783	16,186159	0,995407
54	307	0,75	0,24	333	0,88	425	181,911980	0,659085	27,497375	0,117765	110,143580	0,439941	71,768400	0,995407
55	302	0,72	0,82	330	1,25	419	164,064830	0,648518	33,650700	0,231724	97,428711	0,431832	66,636123	0,965335
56	297	0,44	0,15	334	0,97	417	137,093700	0,589723	59,630826	0,088552	96,107437	0,435547	40,986261	0,951247
57	296	0,42	0,41	331	0,58	423	94,873828	0,620235	71,252954	0,187862	65,666056	0,457150	29,207772	0,986890
58	308	0,21	0,72	333	1,29	420	60,143716	0,529259	89,443307	0,117765	49,195426	0,430856	10,948290	0,971427
59	308	0,55	0,81	334	1,43	426	132,401080	0,647885	49,067314	0,088552	81,889667	0,431157	50,511409	0,999247
60	304	0,36	0,37	336	1,40	416	117,972590	0,583887	63,917077	0,037934	82,660179	0,430472	35,312411	0,943005
61	306	0,24	0,19	335	1,00	425	314,943250	0,466205	79,302329	0,062114	296,968880	0,434175	17,974377	0,995407
62	309	0,51	0,87	333	0,61	426	137,931060	0,647813	56,004966	0,117765	93,085845	0,478506	44,845213	0,999247
63	298	0,59	0,54	334	1,31	420	142,660230	0,647314	43,600564	0,088552	85,610582	0,431330	57,049651	0,971427
64	302	0,22	0,12	335	0,91	421	514,155390	0,450226	80,079091	0,062114	498,722870	0,433925	15,432524	0,977006
65	290	0,36	0,50	331	0,66	418	71,346328	0,609798	77,976239	0,187862	48,854933	0,449199	22,491395	0,958645
66	297	0,50	0,46	334	1,43	419	118,461990	0,641206	52,658746	0,088552	71,799890	0,430558	46,662102	0,965335

67	294	0,21	0,76	331	1,22	423	15,030049	0,534968	97,294019	0,187862	12,231127	0,431552	2,798922	0,986890
68	294	0,36	0,52	335	1,22	421	97,718274	0,612245	67,091877	0,062114	65,394929	0,431952	32,323345	0,977006
69	298	0,26	0,77	337	0,69	420	98,627751	0,581087	74,139013	0,015636	73,301703	0,446223	25,326048	0,971427
70	295	0,85	0,18	335	0,78	419	184,501880	0,689928	12,409499	0,062114	97,534867	0,444360	86,967015	0,965335
71	305	0,62	0,23	332	0,88	426	152,938270	0,644895	44,596593	0,150494	97,321691	0,442393	55,616583	0,999247
72	296	0,69	0,37	330	1,28	424	154,923620	0,650098	40,034096	0,231724	94,459155	0,431691	60,464469	0,991299
73	295	0,86	0,15	330	0,67	424	181,473670	0,698039	16,729302	0,231724	98,988065	0,453669	82,485604	0,991299
74	310	0,27	0,62	337	1,50	419	116,766050	0,554355	73,659317	0,015636	89,640118	0,429989	27,125936	0,965335
75	298	0,27	0,34	330	1,46	422	31,501959	0,520313	95,036725	0,231724	26,352008	0,430059	5,149951	0,982141
76	290	0,19	0,38	336	0,78	419	214,529980	0,476041	82,680450	0,037934	198,835380	0,437420	15,694599	0,965335
77	296	0,66	0,93	334	1,27	420	161,677700	0,648327	35,546108	0,088552	96,778982	0,431661	64,898719	0,971427
78	307	0,79	0,98	335	1,07	426	204,441300	0,648504	21,595550	0,062114	127,255670	0,435764	77,185637	0,999247
79	298	0,56	0,75	336	1,07	417	139,124000	0,647819	43,259561	0,037934	81,639435	0,434167	57,484570	0,951247
80	309	0,19	0,63	337	0,73	416	155,538840	0,502407	81,772840	0,015636	136,246340	0,440018	19,292499	0,943005
81	295	0,72	0,60	335	0,59	416	188,383410	0,648943	24,978379	0,062114	113,973310	0,456958	74,410096	0,943005
82	301	0,46	0,89	332	0,64	417	99,087142	0,647475	61,498004	0,150494	60,344590	0,452446	38,742552	0,951247
83	298	0,42	0,33	333	0,51	421	122,879930	0,608755	64,521306	0,117765	87,908274	0,462257	34,971655	0,977006
84	302	0,77	0,60	336	1,19	417	191,100940	0,649391	19,525273	0,037934	111,189160	0,432446	79,911776	0,951247
85	291	0,46	0,77	335	0,94	422	113,054680	0,646850	57,103184	0,062114	69,566232	0,437248	43,488446	0,982141
86	304	0,29	0,60	332	1,46	421	60,144006	0,584723	83,341208	0,150494	43,152517	0,430260	16,991489	0,977006
87	302	0,29	0,42	332	1,26	418	75,203879	0,551398	82,511014	0,150494	58,062106	0,431165	17,141773	0,958645
88	300	0,47	0,34	337	0,76	416	133,707900	0,625438	50,629935	0,015636	85,034153	0,443662	48,673750	0,943005
89	299	0,48	0,78	332	0,67	417	105,225450	0,647163	59,238538	0,150494	63,844016	0,450066	41,381438	0,951247
90	310	0,53	0,14	332	0,81	421	135,469480	0,622394	53,816621	0,150494	89,697789	0,441440	45,771686	0,977006
91	309	0,74	0,50	330	1,07	423	172,022970	0,649871	32,133997	0,231724	104,921600	0,434334	67,101372	0,986890
92	294	0,54	0,46	334	1,42	421	130,284720	0,644308	49,408259	0,088552	79,333515	0,430637	50,951201	0,977006
93	302	0,17	0,94	332	0,55	422	21,993596	0,508235	97,770156	0,150494	19,583088	0,449902	2,410509	0,982141
94	308	0,63	0,34	336	1,01	415	156,136290	0,647217	34,263752	0,037934	89,757966	0,435329	66,378324	0,933735
95	304	0,58	0,25	333	0,95	421	143,074010	0,640064	46,683952	0,117765	89,244866	0,436833	53,829149	0,977006
96	298	0,47	0,64	334	1,22	422	110,393360	0,645383	57,490660	0,088552	67,595051	0,432162	42,798309	0,982141
97	293	0,65	0,29	331	0,80	415	147,315990	0,648432	37,733232	0,187862	85,515747	0,442251	61,800245	0,933735
98	306	0,24	0,51	330	0,67	416	7,403581	0,523212	98,872285	0,231724	6,224863	0,443721	1,178718	0,943005
99	294	0,39	0,61	335	0,87	424	98,857878	0,635507	64,442148	0,062114	63,755377	0,439615	35,102501	0,991299
100	297	0,43	0,43	336	1,28	421	116,822510	0,625479	57,963771	0,037934	75,278365	0,431480	41,544146	0,977006

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 11-4.** Base de datos de validación generada en DWSIM para separar metanol-cloroformo en la destilación por oscilación de presión.

N°	Entradas						Salidas							
	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	7	8
	Alimentación		C1 (Baja Presión)		C2 (Alta Presión)		Destilado en C1		Residuo en C1		Destilado en C2		Residuo en C2	
T [K]	Xc	RR1	TR1 [K]	RR2	TR2 [K]	D1 [kmol/h]	Xc (D1)	W1 [kmol/h]	Xc (W1)	D2 [kmol/h]	Xc (D2)	W2 [kmol/h]	Xc (W2)	
1	309	0,26	0,25	332	1,00	416	124,284710	0,491195	86,777246	0,150494	110,137840	0,433161	14,146876	0,943005
2	292	0,40	0,92	330	0,85	420	58,615991	0,646706	77,345547	0,231724	35,829706	0,440197	22,786285	0,971427
3	301	0,90	0,82	331	1,34	425	227,764330	0,649059	11,202519	0,187862	139,842840	0,431304	87,921491	0,995407
4	290	0,38	0,16	331	1,38	423	99,079670	0,564547	75,517030	0,187862	75,223700	0,430608	23,855970	0,986890
5	300	0,27	0,84	330	0,56	420	17,356495	0,611049	94,851662	0,231724	12,170507	0,457488	5,185988	0,971427
6	298	0,64	0,86	332	1,34	417	145,934910	0,648280	38,504517	0,150494	85,001045	0,431096	60,933865	0,951247
7	306	0,23	0,71	336	0,71	423	103,283880	0,551372	79,929966	0,037934	82,933115	0,444501	20,350767	0,986890
8	301	0,39	0,84	333	0,91	415	79,924325	0,645824	66,864962	0,117765	46,413503	0,437950	33,510822	0,933735
9	290	0,60	0,53	333	0,70	418	146,241750	0,647458	42,303024	0,117765	89,118010	0,447990	57,123738	0,958645
10	298	0,65	0,22	337	1,40	426	168,192750	0,648460	35,241027	0,015636	103,893760	0,431360	64,298988	0,999247
11	306	0,57	1,00	331	1,17	424	123,879870	0,648154	52,885985	0,187862	76,120053	0,432855	47,759821	0,991299
12	294	0,36	0,13	333	1,37	415	139,679660	0,535937	69,679199	0,117765	110,386080	0,430372	29,293583	0,933735
13	305	0,36	0,34	334	1,04	416	110,711670	0,581482	68,686477	0,088552	78,634420	0,434006	32,077249	0,943005
14	293	0,23	0,20	334	0,62	422	285,895490	0,471014	82,602557	0,088552	271,101860	0,443123	14,793630	0,982141
15	293	0,24	0,71	331	0,82	418	29,214400	0,560495	93,340184	0,187862	22,399563	0,439363	6,814837	0,958645
16	294	0,61	0,58	332	0,74	422	145,893730	0,647828	44,218738	0,150494	90,932290	0,445763	54,961438	0,982141
17	304	0,68	0,59	331	1,42	423	157,354630	0,648625	38,556820	0,187862	95,697553	0,430685	61,657073	0,986890
18	303	0,40	0,35	335	0,54	425	137,192930	0,601782	63,435928	0,062114	101,257860	0,462090	35,935077	0,995407
19	290	0,81	0,94	335	0,77	421	211,937280	0,648567	17,694798	0,062114	130,592130	0,443984	81,345146	0,977006
20	291	0,35	0,79	336	0,57	426	106,360530	0,642008	67,748713	0,037934	73,714911	0,483800	32,645616	0,999247
21	294	0,35	0,34	335	1,23	423	122,061190	0,572243	68,523032	0,062114	91,161360	0,431695	30,899828	0,986890
22	296	0,56	0,63	336	1,03	422	143,304160	0,647367	45,155025	0,037934	87,688644	0,435040	55,615516	0,982141
23	300	0,36	0,51	335	0,80	425	105,766130	0,610280	68,330286	0,062114	73,677833	0,442549	32,088297	0,995407
24	302	0,41	0,65	337	0,96	422	108,843530	0,641787	59,366215	0,015636	67,909752	0,436632	40,933777	0,982141
25	305	0,48	0,70	336	0,97	423	121,236500	0,646584	52,991250	0,037934	74,959337	0,436492	46,277167	0,986890

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

#### **4.4.3 Programación de la red neuronal artificial**

Para desarrollar la red neuronal artificial, es necesario utilizar variables que representan los datos de entrada, desarrollo y salida. Así como también es preciso implementar argumentos matemáticos extras para que la red sea codificada de mejor manera, en especial el uso de la normalización.

La tabla presentada en el ANEXO A, evidencia las variables utilizadas en la codificación de la red neuronal artificial y la descripción de cada una para una mejor comprensión de las líneas de código a analizar.

##### *4.4.3.1 Normalización de los datos*

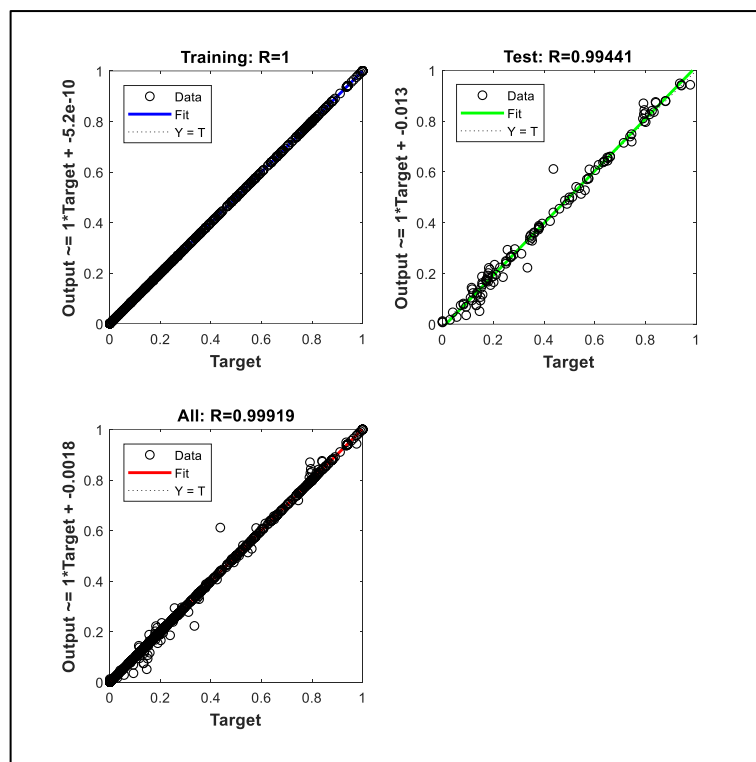
En el apartado del diseño de la red neuronal artificial del capítulo 3 se dio a conocer la ecuación (Ec. 1-3) que rige la normalización de los datos de entrada. Sin embargo, dentro del software se pueden normalizar los datos tanto para las variables independientes (entradas) como las dependientes (salidas) de la RNA. La normalización de los datos de entrenamiento se presenta en el script del ANEXO C y la normalización de los datos de validación está codificada en el script del ANEXO D.

##### *4.4.3.2 Código de la red neuronal artificial*

Con los datos ya normalizados, se desarrolla el script de la red neuronal artificial que genera los valores de las corrientes de flujo y las fracciones molares de cloroformo obtenidas en el entrenamiento y la validación.

##### *4.4.3.2.1 Código de la red neuronal artificial y entrenamiento de la red*

Dentro del código se tiene la variable “hiddenLayerSize”, fundamental para establecer el número de neuronas en la capa oculta de la RNA. Por lo tanto, en base a la técnica propuesta por Ash y Hirose, descrita en el capítulo 3 (ver Arquitectura de la red neuronal), al obtener los mejores mínimos cuadrados y a su vez en base al mejor coeficiente de correlación R en la regresión lineal (Gráfico 1-4), se determinó que una topología de red con 100 neuronas en la capa oculta es ideal para la codificación de la red neuronal artificial; misma que se presenta en el script del ANEXO E.



**Gráfico 1-4.** Correlación de entrenamiento de la red neuronal artificial

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

El Gráfico 1-4, evidencia la evolución del aprendizaje de la red neuronal artificial en función del coeficiente de correlación general para el entrenamiento,  $R = 0,99919$ , por lo tanto, existe una buena correlación entre los datos reales y los valores predichos.

#### 4.4.3.2.2 Código de la red neuronal artificial en la validación

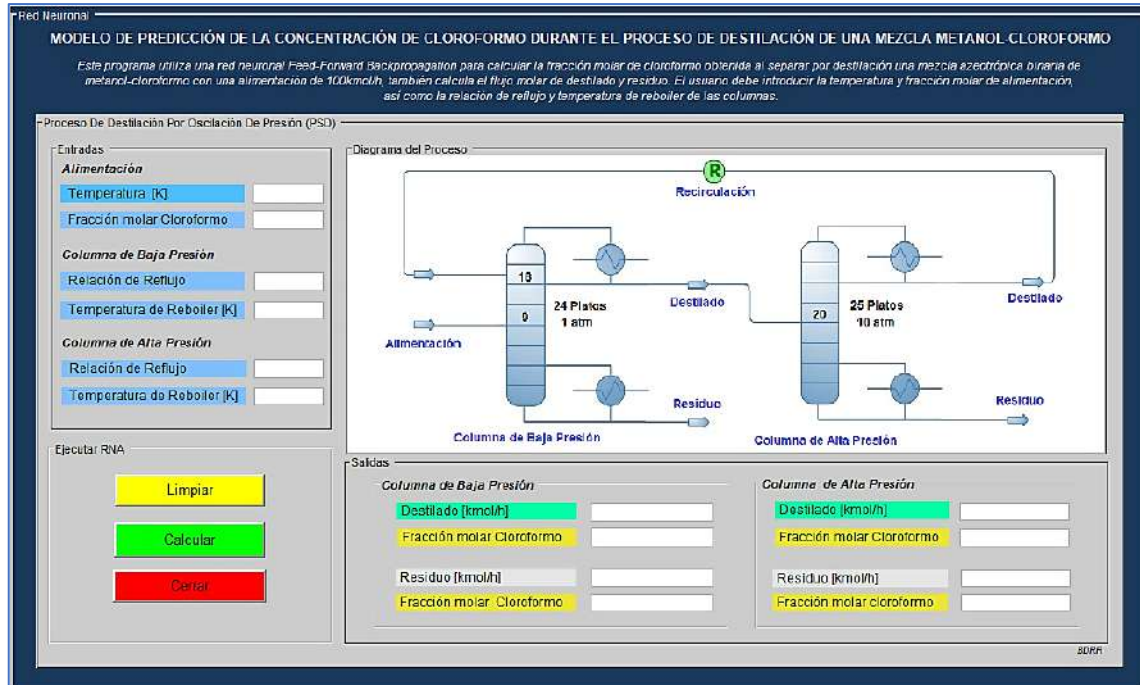
Empleado el conjunto de datos de validación (Tabla 11-4) como entrada, se realiza un nuevo script para validar la red neuronal y predecir los flujos y las fracciones molares de cloroformo en función de los parámetros aprendidos por la red neuronal en el entrenamiento. Cabe resaltar que la variable “net” obtenida al desarrollar la red neuronal y entrenarla, es el comando que contiene las principales propiedades de predicción de la red neuronal, como se observa en el script del ANEXO F.

#### 4.4.4 Programación de la interfaz gráfica de usuario

Al igual que en el desarrollo de la red neuronal artificial; para el desarrollo de la interfaz gráfica que permite al usuario interactuar con el modelo de predicción, es necesario utilizar variables que representen los datos de entrada, desarrollo y salida, por lo tanto, la tabla del ANEXO B, evidencia las variables utilizadas en la codificación de la interfaz gráfica con su respectiva descripción para una mejor comprensión de las líneas de código.

#### 4.4.4.1 Código de la interfaz gráfica de usuario

Una vez que se crea el panel de control con el comando “guide”, automáticamente el software crea un archivo con las correspondientes líneas de código en donde será posible interconectar la interfaz gráfica con la red neuronal. Las líneas de código se pueden observar en el script del ANEXO G.



**Figura 2-4.** Interfaz gráfica de usuario para el manejo del modelo de predicción.

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

#### 4.4.5 Determinación de la idoneidad de la RNA

Para determinar la idoneidad de la red neuronal artificial se lleva a cabo un análisis estadístico en SPSS tomando en cuenta los datos reales y predichos para las corrientes de flujo y fracciones molares de cloroformo.

##### 4.4.5.1 Análisis ANOVA

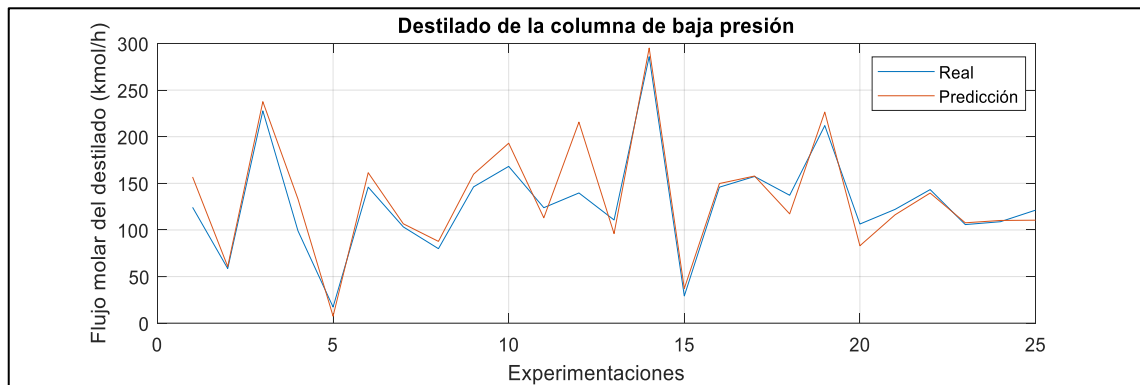
En vista de que el análisis ANOVA se utiliza para contrastar la hipótesis de igualdad de medias, es decir que, la media de los datos predichos por la red neuronal no presentará una diferencia estadísticamente significativa con la media de los resultados reales basados en la simulación DWSIM. El nivel de significancia tomada para esta investigación es de 5% (o un nivel de confianza del 95%), es decir 0,05 en decimales. Para el análisis se han planteado las hipótesis nula y alternativa siguientes:

$H_0$ : La media de los datos predichos por la red neuronal ( $\mu_1$ ) es igual a la media de los datos reales (simulados) ( $\mu_2$ )

$$H_0: \mu_1 = \mu_2$$

$H_1$ : La media de los datos predichos por la red neuronal ( $\mu_1$ ) no es igual a la media de los datos reales (simulados) ( $\mu_2$ )

$$H_1: \mu_1 \neq \mu_2$$



**Gráfico 2-4.** Flujo molar de destilado en la columna de baja presión

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 12-4.** Tabla ANOVA para el flujo molar de destilado en la columna de baja presión.

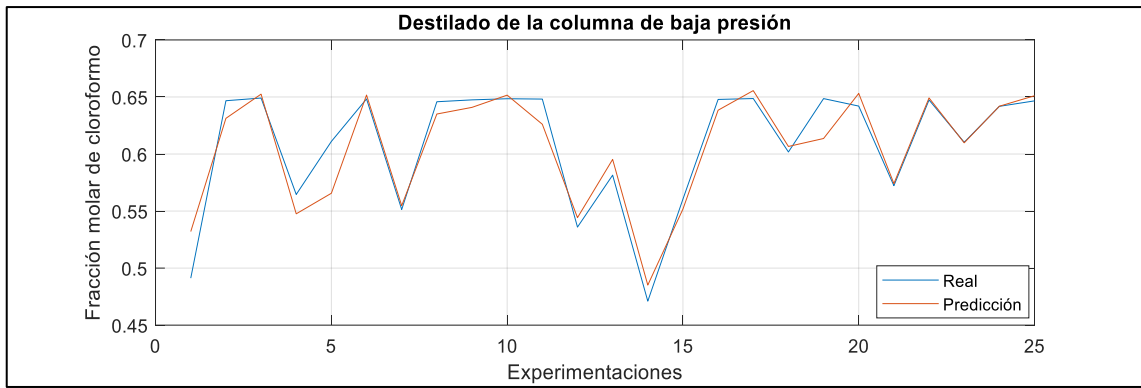
Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	513,901	1	513,901	0,14	0,7104
Intra grupos	176784,	48	3682,99		
Total (Corr.)	177298,	49			

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

En el análisis ANOVA se observa la razón-F, para este caso es igual a 0,139534, como cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos. Puesto que el valor-P es mayor que 0,05 (se acepta la hipótesis nula), no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos por la red neuronal para el flujo de destilado en la columna de baja presión; con un nivel del 95,0% de confianza.

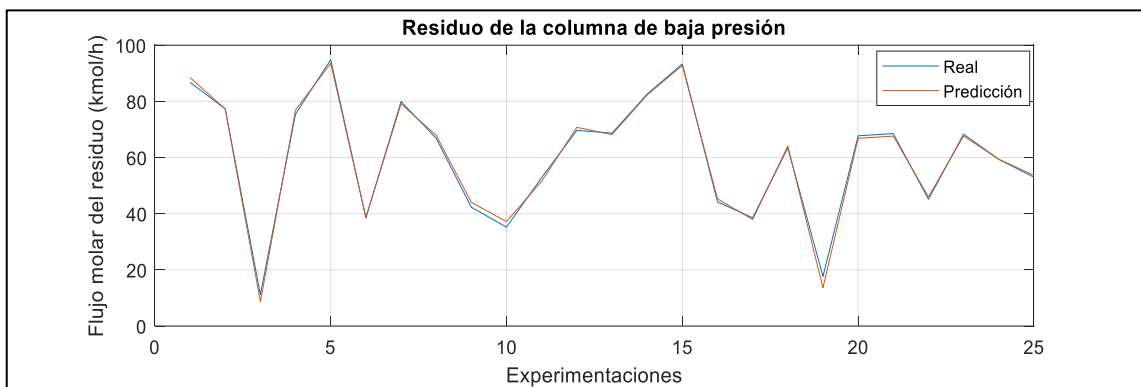
De igual manera para los otros datos de salida se realiza el mismo análisis obteniendo los resultados que se detallan en la Tabla 13-4.





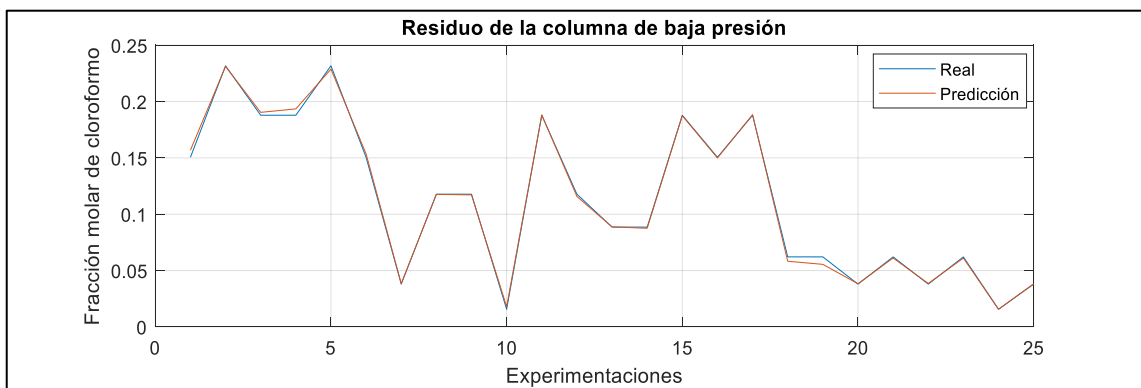
**Gráfico 3-4.** Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de baja presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



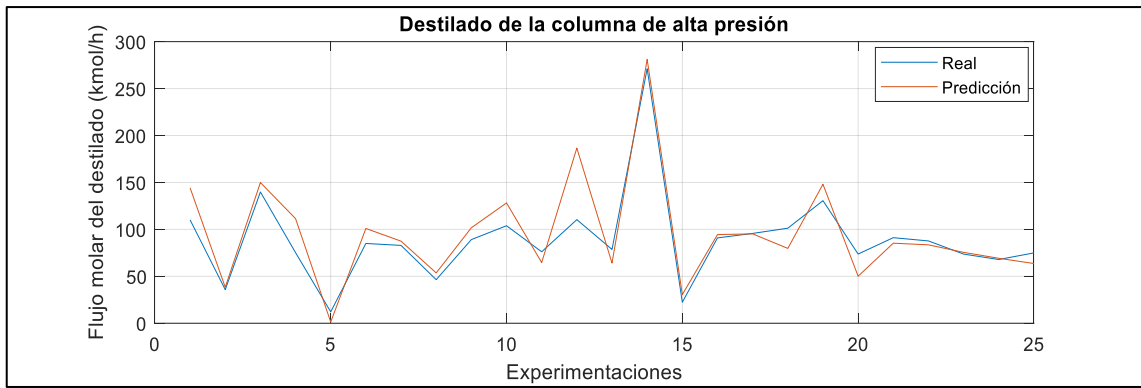
**Gráfico 4-4.** Flujo molar de residuo en la columna de baja presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Gráfico 5-4.** Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de baja presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Gráfico 6-4.** Flujo molar de destilado en la columna de alta presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



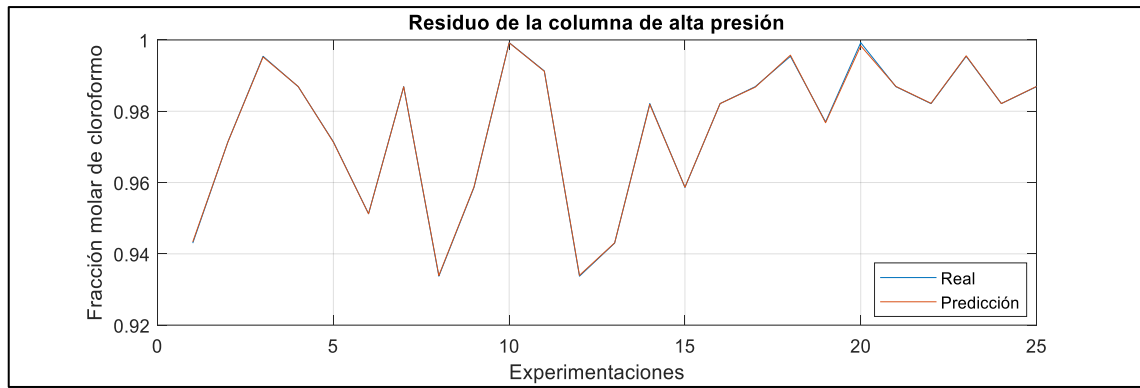
**Gráfico 7-4.** Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de alta presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Gráfico 8-4.** Flujo molar de residuo en la columna de alta presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020



**Gráfico 9-4.** Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de alta presión

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Tabla 13-4.** Resumen de Tabla ANOVA para flujos y fracciones molares de cloroformo en la columna de baja y alta presión

Variables comparadas (Real y Predicha)		Media	Razón-F	Valor-P
Flujo molar de destilado en la columna de baja presión	D1_Real	128,8004	0,139534	0,7104
	D1_Predicho	135,2123		
Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de baja presión	Xc (D1)_Real	0,6083	0,018751	0,8917
	Xc (D1)_Predicho	0,6064		
Flujo molar de residuo en la columna de baja presión	W1_Real	60,0701	0,000184	0,9892
	W1_Predicho	59,9853		
Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de baja presión	Xc (W1)_Real	0,1126	0,000012	0,9972
	Xc (W1)_Predicho	0,1127		
Flujo molar de destilado en la columna de alta presión	D2_Real	89,0719	0,190947	0,6641
	D2_Predicho	95,5631		
Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de alta presión	Xc (D2)_Real	0,4406	0,095789	0,7583
	Xc (D2)_Predicho	0,4396		
Flujo molar de residuo en la columna de alta presión	W2_Real	39,7285	0,000165	0,9898
	W2_Predicho	39,6492		
Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de alta presión	Xc (W2)_Real	0,9752	0,000002	0,9987
	Xc (W2)_Predicho	0,9752		

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

**Condición:**

$P < 0,05$ , rechazo  $H_0$ , con un 95% de confianza

$P > 0,05$ , acepto  $H_0$ , con un 95% de confianza

Puesto que el valor-P es mayor que 0,05 en todas las variables comparadas; se acepta la hipótesis nula. No existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos por la red neuronal artificial con un 95% de confianza.

#### ***4.4.6 Predicción de valores con la red neuronal artificial***

Para culminar con la idoneidad de la red neuronal y a su vez validar la interfaz gráfica de usuario se ha propuesto generar una tabla de resultados donde se reflejan 25 datos de entrada dentro del rango establecido anteriormente y así, poder comparar los resultados experimentales (valores reales) obtenidos en la simulación mediante DWSIM con los datos predichos por la RNA obtenidos mediante la ejecución de la GUI para todos los criterios concretos.

Cabe destacar que al conocer el valor de la fracción molar de cloroformo en el destilado y en el residuo de ambas columnas, se puede determinar el valor de la fracción molar de metanol en el destilado y en el residuo por diferencia.

**Tabla 14-4.** Comparación de los resultados del sistema de destilación por oscilación de presión para separar metanol-cloroformo.

No	ENTRADAS						SALIDAS (Fracción molar de cloroformo)											
	Alimentación		C1 (Baja Presión)		C2 (Alta Presión)		Fracción molar en destilado de la columna de baja presión			Fracción molar en residuo de la columna de baja presión			Fracción molar en destilado de la columna de alta presión			Fracción molar en residuo de la columna de alta presión		
	T [K]	Xc	RR1	TR1 [K]	RR2	TR2 [K]	Xc (D1)_Real	Xc (D1)_Predicho	Error (%)	Xc (W1)_Real	Xc (W1)_Predicho	Error (%)	Xc (D2)_Real	Xc (D2)_Predicho	Error (%)	Xc (W2)_Real	Xc (W2)_Predicho	Error (%)
1	309	0,26	0,25	332	1	416	0,4912	0,5320	-8,31	0,1505	0,1568	-4,19	0,4332	0,4335	-0,07	0,9430	0,9434	-0,04
2	292	0,4	0,92	330	0,85	420	0,6467	0,6313	2,38	0,2317	0,2312	0,22	0,4402	0,4399	0,07	0,9714	0,9714	0,00
3	301	0,9	0,82	331	1,34	425	0,6491	0,6525	-0,52	0,1879	0,1904	-1,33	0,4313	0,4312	0,02	0,9954	0,9952	0,02
4	290	0,38	0,16	331	1,38	423	0,5645	0,5476	2,99	0,1879	0,1935	-2,98	0,4306	0,4296	0,23	0,9869	0,9869	0,00
5	300	0,27	0,84	330	0,56	420	0,6110	0,5656	7,43	0,2317	0,2288	1,25	0,4575	0,4530	0,98	0,9714	0,9713	0,01
6	298	0,64	0,86	332	1,34	417	0,6483	0,6517	-0,52	0,1505	0,1535	-1,99	0,4311	0,4310	0,02	0,9512	0,9512	0,00
7	306	0,23	0,71	336	0,71	423	0,5514	0,5547	-0,60	0,0379	0,0384	-1,32	0,4445	0,4454	-0,20	0,9869	0,9869	0,00
8	301	0,39	0,84	333	0,91	415	0,6458	0,6351	1,66	0,1178	0,1176	0,17	0,4380	0,4371	0,21	0,9337	0,9339	-0,02
9	290	0,6	0,53	333	0,7	418	0,6475	0,6409	1,02	0,1178	0,1171	0,59	0,4480	0,4477	0,07	0,9586	0,9588	-0,02
10	298	0,65	0,22	337	1,4	426	0,6485	0,6516	-0,48	0,0156	0,0180	-15,38	0,4314	0,4303	0,25	0,9992	0,9992	0,00
11	306	0,57	1	331	1,17	424	0,6482	0,6261	3,41	0,1879	0,1882	-0,16	0,4329	0,4348	-0,44	0,9913	0,9912	0,01
12	294	0,36	0,13	333	1,37	415	0,5359	0,5442	-1,55	0,1178	0,1158	1,70	0,4304	0,4236	1,58	0,9337	0,9340	-0,03
13	305	0,36	0,34	334	1,04	416	0,5815	0,5953	-2,37	0,0886	0,0888	-0,23	0,4340	0,4343	-0,07	0,9430	0,9431	-0,01
14	293	0,23	0,2	334	0,62	422	0,4710	0,4851	-2,99	0,0886	0,0875	1,24	0,4431	0,4432	-0,02	0,9821	0,9819	0,02
15	293	0,24	0,71	331	0,82	418	0,5605	0,5518	1,55	0,1879	0,1874	0,27	0,4394	0,4398	-0,09	0,9586	0,9587	-0,01
16	294	0,61	0,58	332	0,74	422	0,6478	0,6384	1,45	0,1505	0,1499	0,40	0,4458	0,4449	0,20	0,9821	0,9821	0,00
17	304	0,68	0,59	331	1,42	423	0,6486	0,6556	-1,08	0,1879	0,1884	-0,27	0,4307	0,4305	0,05	0,9869	0,9868	0,01
18	303	0,4	0,35	335	0,54	425	0,6018	0,6066	-0,80	0,0621	0,0582	6,28	0,4621	0,4637	-0,35	0,9954	0,9957	-0,03
19	290	0,81	0,94	335	0,77	421	0,6486	0,6136	5,40	0,0621	0,0555	10,63	0,4440	0,4464	-0,54	0,9770	0,9768	0,02
20	291	0,35	0,79	336	0,57	426	0,6420	0,6531	-1,73	0,0379	0,0383	-1,06	0,4838	0,4652	3,84	0,9992	0,9983	0,09
21	294	0,35	0,34	335	1,23	423	0,5722	0,5741	-0,33	0,0621	0,0611	1,61	0,4317	0,4305	0,28	0,9869	0,9870	-0,01
22	296	0,56	0,63	336	1,03	422	0,6474	0,6491	-0,26	0,0379	0,0385	-1,58	0,4350	0,4360	-0,23	0,9821	0,9822	-0,01
23	300	0,36	0,51	335	0,8	425	0,6103	0,6098	0,08	0,0621	0,0611	1,61	0,4425	0,4441	-0,36	0,9954	0,9955	-0,01
24	302	0,41	0,65	337	0,96	422	0,6418	0,6419	-0,02	0,0156	0,0156	0,00	0,4366	0,4363	0,07	0,9821	0,9822	-0,01
25	305	0,48	0,7	336	0,97	423	0,6466	0,6511	-0,70	0,0379	0,0382	-0,79	0,4365	0,4376	-0,25	0,9869	0,9870	-0,01

Realizado por: Rosario, Brayan, 2020

## CONCLUSIONES

- El modelo de predicción se basa en la simulación del proceso de destilación por oscilación de presión para separar la mezcla azeotrópica de metanol-cloroformo y luego, mediante una red neuronal artificial de retropropagación predice 8 salidas: la fracción molar de cloroformo y velocidad de flujo presentes en destilado y residuo de las columnas; en función de 6 entradas que corresponden a la temperatura y la fracción molar de cloroformo en la alimentación, la relación de reflujo y temperatura de reboiler en la columna de baja y alta presión.
- La red neuronal artificial se diseñó con una topología de 6 entradas como variables predictoras, una capa oculta con 100 neuronas y 8 salidas correspondientes a las corrientes de flujo y fracciones molares de cloroformo predichas; también se basa en un esquema de aprendizaje de retropropagación de errores y el algoritmo de regularización bayesiana para el ajuste de los pesos de conexión; obteniendo el mejor entrenamiento y prueba de la red con un coeficiente de correlación de 0,99919 y error cuadrático medio de 1,52 E-14.
- Para validar los resultados obtenidos por la red neuronal, primero se emplearon los datos presentados en el artículo científico de nombre “Design and control of distillation processes for methanol–chloroform separation” propuesto por Eda Hosgor, entre otros autores y publicado por la editorial Elsevier; el artículo permitió establecer los parámetros iniciales óptimos para simular en DWSIM el sistema de destilación de metanol-cloroformo por PSD, obteniendo de esta manera una base de datos confiable (valores reales), luego, dicha base de datos se empleó para validar las variables obtenidas por la red neuronal artificial mediante un análisis estadístico comparativo entre los valores reales y los valores predichos del flujo y fracción molar de cloroformo en el destilado y en el residuo de las columnas; un valor P mayor que 0,05 en todas las variables comparadas, demuestra que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre los datos reales y los datos predichos por la red neuronal.
- La interfaz gráfica desarrollada permite al usuario calcular la fracción molar de cloroformo obtenida al separar por destilación PSD una mezcla azeotrópica binaria de metanol-cloroformo con una alimentación de 100 kmol/h, también calcula el flujo molar de destilado y residuo. El usuario solo debe introducir en el modelo de predicción la temperatura y fracción molar de alimentación, así como la relación de reflujo y temperatura de reboiler de las columnas.

## RECOMENDACIONES

- En cuanto a la simulación del sistema de destilación por oscilación de presión en DWSIM se recomienda comparar dichos resultados con los datos obtenidos por otro software de simulación de procesos químicos y diferentes métodos termodinámicos como UNIQUAC, WILSON y UNIFAC recomendados en bibliografía.
- El trabajo fue desarrollado con parámetros exclusivos para la codificación de la RNA, por tanto, sería importante comparar estos resultados con otro tipo de red neuronal artificial y a su vez con otro algoritmo de entrenamiento como el algoritmo Levenberg-Marquardt.
- Es recomendable evaluar otros parámetros que influyen en el rendimiento RNA, como la función de activación, número de capas ocultas, número de iteraciones, tasa de aprendizaje, y otros no abarcados por esta tesis.
- Se recomienda usar el modelo de predicción para calcular la composición de los productos obtenidos al separar por PSD otras mezclas binarias o multicomponentes que exhiban homoazeótropos de ebullición mínima.
- Finalmente se recomienda utilizar el código fuente de la interfaz gráfica para desarrollar aplicaciones fáciles de usar basadas en GUI que permite a los usuarios concentrarse en los resultados en lugar de tener que lidiar con los aspectos técnicos.

## GLOSARIO

Esta sección contiene una lista alfabética con definiciones de términos centrales tal como se utilizan en este texto.

**Azeótropo:** El término azeótropo significa "hervir sin cambios" y denota una mezcla cuyas composiciones de vapor y líquido en equilibrio son iguales a la temperatura y presión del sistema dado (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947). Matemáticamente: una singularidad en la variedad VLE que no corresponde a un componente puro, por lo tanto, ya no es posible una separación por destilación simple (Doherty, M. et al, 2004; Hilmen, 2000; citados en Garanhão, 2015, p.3). Mezcla de ebullición constante que no cambia de composición por destilación simple, y generalmente tiene un punto de ebullición más alto o más bajo que cualquiera de sus constituyentes puros (Lei, 2017, p.1).

**Azeótropo heterogéneo:** también conocido como heteroazeótropo, es el azeótropo donde la fase de vapor coexiste con dos o más fases líquidas (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Azeótropos homogéneos:** también conocido como homoazeótropo, es el azeótropo donde la fase de vapor coexiste con una fase líquida (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Destilación:** proceso de separación de una mezcla líquida por evaporación y condensación sucesivas (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Destilación azeotrópica:** destilación que involucra mezclas azeotrópicas. Tenga en cuenta que esta es una definición mucho más amplia que la utilizada tradicionalmente en la literatura de destilación, donde el término se usa con frecuencia como una abreviatura de destilación heteroazeotrópica (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Destilación por oscilación de presión:** también conocida como destilación sensible a la presión, se considera una de las técnicas más utilizada para separar mezclas azeotrópicas homogéneas sensibles a la presión (es decir, la composición cambia con la presión). Esta técnica utiliza dos o más columnas de destilación que funcionan a diferentes presiones junto con estrategias de reciclaje apropiadas para lograr la separación deseada (Lladosa, Montón y Burguet, 2011, p. 1267).

**Destilación simple:** evaporación de una fase líquida donde el vapor formado se elimina continuamente. También se conoce como destilación de Rayleigh (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1948).



**Diagrama VLE:** presentación gráfica de las funciones de equilibrio vapor-líquido de una mezcla, como mapas de isotermas, mapas de curvas de residuos y mapas de líneas de destilación (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1949).

**Fenómeno azeotrópico:** El fenómeno azeotrópico se define como un estado en el cual la transferencia de masa ocurre entre fases mientras la composición de cada fase permanece constante. (Liang et al., 2017, p.321).

**GUI:** también conocidas como interfaces gráficas de usuario, incluye la funcionalidad necesaria para permitir que el usuario final interactúe gráficamente con un sistema a través de una aplicación (Johnsson y Magnusson, 2020, p.673). Las GUI permiten un control sencillo de las aplicaciones de software, lo cual elimina la necesidad de aprender un lenguaje y escribir comandos a fin de ejecutar una aplicación (MathWorks, 2020c).

**Mezcla azeotrópica:** Mezcla que forma uno o varios azeótropos (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Mezcla ideal:** mezcla que obedece la ley de Raoult (o la ley de Henry), es decir, los coeficientes de actividad para todos los componentes del líquido son iguales a la unidad (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Mezcla no ideal:** mezcla que muestra desviaciones de la ley de Raoult (o la ley de Henry). Las mezclas no ideales son azeotrópicas (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947).

**Perceptrón:** es una red neuronal artificial simple, que puede estar compuesta por una sola neurona o varias neuronas dispuestas en una sola capa (Vanneschi y Castelli, 2018, 612).

**Perceptrón multicapa:** en una red neuronal artificial que incluye en su arquitectura una o varias capas intermedias, llamadas capas ocultas. Esta arquitectura suele entrenarse mediante el algoritmo de retropropagación de errores o BackPropagation (Cortina, 2012, p.66).

**Presión de vapor:** es la presión a la que un líquido y su vapor están en equilibrio de fase, a una temperatura dada (Lei, 2017, p.1).

**Punto azeotrópico:** Se produce un punto azeotrópico cuando en un punto en el espacio de composición de la mezcla azeotrópica, las composiciones de las fases líquidas y de vapor coexistentes son las mismas (Lei, 2017, p.1); es decir, en los puntos azeotrópicos, la fase líquida y su fase de vapor de equilibrio tienen la misma composición  $x = y$  (Hilmen, 2000, p.11). Por tanto, en el punto azeotrópico, las constantes de equilibrio para todas las especies son la unidad (Widagdo y Seider, 1996, p.97).

**Red neuronal artificial:** Las redes neuronales artificiales son técnicas computacionales que pertenecen al campo del aprendizaje automático (Mitchell, 1997; Kelleher et al., 2015; Gabriel, 2016; citados

en Vanneschi y Castelli, 2018, p.612). Las RNA utilizan un gran conjunto de unidades computacionales elementales, llamadas neuronas (artificiales) para aprender tareas y resolver problemas de tal manera que imitan el comportamiento del cerebro humano (Vanneschi y Castelli, 2018, p.613).

**Regularización:** es un proceso importante para reducir los problemas de sobreajuste y, por lo tanto, lograr un sistema de red neuronal artificial eficiente (Srivastava et al., 2014; citados en Balam, Lian y Sebastian, 2019, p.4).

**Regularización bayesiana:** algoritmo utilizado para entrenar redes neuronales artificiales, ayuda a reducir una combinación lineal de pesos de red y errores al cuadrado de la red neuronal (Balam, Lian y Sebastian, 2019, p.4). El objetivo de la regulación bayesiana es obtener una red neuronal con el mejor rendimiento y los parámetros mínimos para que el problema del sobreajuste pueda controlarse de manera efectiva (Lau et al., 2009, p.243).

**Algoritmo de retropropagación:** propaga el error de la capa de salida a la capa de entrada y mejora la precisión al cambiar los pesos y los sesgos. Los pesos generalmente se ajustan después de cada época de entrenamiento para minimizar el error entre el objetivo y el resultado previsto (Bhavsar et al., 2017, p.297).

**Software de código abierto:** Se entiende al software en cuya licencia el titular garantiza al usuario el acceso al código fuente y lo faculta a usar dicho software con cualquier propósito (Asamblea Nacional del Ecuador, 2016, p.30).

**Valor K:** relación de fracciones molares en vapor y fase líquida para la especie dada. Comúnmente conocido como relación de equilibrio vapor-líquido (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1947). Relación entre la concentración de un componente dado en la fase de vapor y su concentración en la fase líquida cuando las fases V – L están en equilibrio (Lei, 2017, p.1).

**Volatilidad relativa:** Definido como la relación de los valores K de dos componentes, es una medida de la facilidad con que los dos componentes se pueden separar por destilación (Lei, 2017, p.1).

## BIBLIOGRAFÍA

**ALDAZ VARGAS, Adrian Alejandro, & FLOR JIRÓN, Dennis Ramiro.** Desarrollo de un sistema de control inteligente basado en redes neuronales para el proceso de pasteurización de leche en la Planta de Lácteos ESPOCH [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2016. [Consulta: 04 Mayo 2020]. Disponible en: <http://dspace.esPOCH.edu.ec/bitstream/123456789/6033/1/108T0168.pdf>

**ARROBA BUENAÑO, Jorge Roberto, & ROCHA ULCUANGO, Karina Beatriz.** Diseño y simulación de un control regulatorio descentralizado y estimadores de concentración usando un observador de estados y redes neuronales aplicados a un sistema reactor-separador-reciclador [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador. 2019. [Consulta: 04 Mayo 2020]. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/20321/1/CD 9787.pdf>

**ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR.** *Código orgánico de la economía social de los conocimientos, creatividad e innovación* [en línea]. Quito-Ecuador: Editora Nacional, 2016. [Consulta: 18 Mayo 2020]. Disponible en: <http://www.wipo.int/edocs/lexdocs/laws/es/ec/ec075es.pdf>

**ÁVILA VEGA, Carlos Fabián.** Modelos basados en inteligencia artificial para el diseño de estructuras no convencionales de hormigón armado [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador, 2013. [Consulta: 04 Mayo 2020]. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/6756/1/CD-5131.pdf>

**BAGHIRLI, Orkhan.** Comparison of Lavenberg-Marquardt, Scaled Conjugate Gradient And Bayesian Regularization Backpropagation Algorithms for Multistep Ahead Wind Speed Forecasting Using Multilayer Perceptron Feedforward Neural Network [en línea] (Trabajo de titulación) (Maestría). Uppsala University, Gotland, Suecia. 2015. [Consulta: 18 mayo 2020]. Disponible en: <http://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:828170/FULLTEXT01.pdf>

**BAHAR, Almila; et al.** “Artificial neural network estimator design for the inferential model predictive control of an industrial distillation column”. *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2004, (United State of America) 43(19), pp. 6102-6111. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 08885885. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie030585g>

**BALRAM, Deepak, LIAN, Kuang-Yow, & NEETHU, Sebastian.** “Air quality warning system based on a localized PM2.5 soft sensor using a novel approach of Bayesian regularized neural network via forward feature selection”. *Ecotoxicology and Environmental Safety* [en línea], 2019,

(United State of America) 182(109386). [Consulta: 27 mayo 2020]. ISSN 10902414. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2019.109386>

**BHAVSAR, Parth; et al.** “Machine Learning in Transportation Data Analytics”. *Data Analytics for Intelligent Transportation Systems* [en línea], 2017, (United State of America), pp. 283-307. [Consulta: 27 mayo 2020]. ISBN 9780128098516. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-809715-1.00012-2>

**BOUGRAIN, Laurent.** “Practical introduction to artificial neural networks”. *IFAC Proceedings Volumes* [en línea], 2004, (United State of America) 37(15), pp. 347-352. [Consulta: 18 mayo 2020]. ISSN 14746670. Disponible en: [http://dx.doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)31048-0](http://dx.doi.org/10.1016/S1474-6670(17)31048-0)

**CARPIO MONTEROS, Guillermo Antonio.** Diseño y simulación de un sistema para detección de fallas utilizando el filtro de Kalman como estimador de parámetros para un tanque de mezcla de fluidos en dos configuraciones [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador. 2017. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/18979/1/CD-8375.pdf>

**CASTILLO RIVERA, Edgar Oswaldo, & MORA DÍAZ, Luis Bryan.** Análisis, estudio y modelamiento matemático para la caracterización energética de las gasolinas comerciales en función de los parámetros de calidad referentes a la norma ASTM [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad de las Fuerzas Armadas, Sangolquí, Ecuador. 2019. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <http://repositorio.espe.edu.ec/bitstream/21000/20575/1/AA-ESPE-039657.pdf>

**CORTINA JANUCHS, María Guadalupe.** Aplicación de Técnica de Inteligencia Artificial a la Predicción de Contaminantes Atmosférico [en línea] (Trabajo de titulación) (Doctoral). Universidad Politécnica de Madrid, España. 2012. [Consulta: 11 mayo 2020]. Disponible en: [http://oa.upm.es/11206/1/MARIA\\_GUADALUPE\\_CORTINA\\_JANUCHS.pdf](http://oa.upm.es/11206/1/MARIA_GUADALUPE_CORTINA_JANUCHS.pdf)

**CHAFLA YAMBAY, Edison Xaxier.** Análisis del rendimiento de algoritmos de entrenamiento de redes neuronales artificiales, aplicadas al modelamiento dinámico de represas hidroeléctricas, mediante el error de predicción del nivel de embalse de agua [en línea] (Trabajo de titulación) (Maestría). Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2019. [Consulta: 11 mayo 2020]. Disponible en: <http://dspace.espech.edu.ec/bitstream/123456789/9697/1/20T01148.pdf>

**CHEN, Yixuan, LIU, Cheng, & GENG, Zhongfeng.** “Design and control of fully heat-integrated pressure swing distillation with a side withdrawal for separating the methanol/methyl acetate/acetaldehyde ternary mixture”. *Chemical Engineering and Processing - Process*

*Intensification* [en línea], 2018, (United State of America) 123, pp. 233-248. [Consulta: 23 abril 2020]. ISSN 02552701. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2017.11.013>

**CHEREMISINOFF, N.** *Handbook of Chemical Processing Equipment* [en línea]. United State of America: Elsevier Science, 2000. [Consulta: 5 mayo 2020]. ISBN 9780080523828. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=tWe45KxAIEMC>

**CONSTANTE PRÓCEL, Patricia Nataly, & GORDÓN GARCÉS, Andrés Marcelo.** Diseño e implementación de un sistema de visión artificial para clasificación de al menos tres tipos de frutas [en línea] (Trabajo de titulación) (Maestría). Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador. 2015. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/11368/1/CD-6457.pdf>

**DANTAS, Tereza; et al.** “Enrichment of patchouli oil extracted from patchouli (*Pogostemon cablin*) oil by molecular distillation using response surface and artificial neural network models”. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* [en línea], 2020, (United State of America) 81, pp. 219-227. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 22345957. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.09.011>

**DUDCHENKO, Alexander, & MAUTER, Meagan.** “Neural networks for estimating physical parameters in membrane distillation”. *Journal of Membrane Science* [en línea], 2020, (United State of America) 610 (118285). [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 18733123. DOI 10.1016/j.memsci.2020.118285. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118285>

**ESPAE.** *Industria de Software. Estudios Industriales, orientación estratégica para la toma de decisiones* [en línea], Guayaquil-Ecuador: ESPOL, 2017. [Consulta: 18 mayo 2020]. Disponible en: <http://www.espae.espol.edu.ec/wp-content/uploads/2016/12/industriasoftware.pdf>

**FERNANDEZ DE CAÑETE, Javier; et al.** “A harmonic balance approach to robust neural control of MIMO nonlinear processes applied to a distillation column”. *Journal of Process Control* [en línea], 2010, (United State of America) 20(10), pp. 1270-1277. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 09591524. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jprocont.2010.09.006>

**FREE SOFTWARE FOUNDATION.** *GNU General Public License*. [blog]. 2016. [Consulta: 18 mayo 2020]. Disponible en: <http://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html>

**GARANHÃO, Estelle.** Development of a systematic methodology for the separation of binary azeotropic mixtures [en línea] (Trabajo de titulación). Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal. 2015. [Consulta: 26 mayo 2020]. Disponible en: [https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/281870113702756/Resumo Alargado\\_Estelle.pdf](https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/281870113702756/Resumo Alargado_Estelle.pdf)

**GARCÉS PICO, José Carlos & LEÓN CALDERÓN, Juan Pablo.** Diseño e implementación de una planta de nivel, controlada mediante redes neuronales y lógica difusa, destinada al laboratorio de control industrial de la Universidad de la Fuerzas Armadas ESPE [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad de las Fuerzas Armadas, Latacunga, Ecuador. 2015. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <http://repositorio.espe.edu.ec/bitstream/21000/9931/1/T-ESPEL-EMI-0282.pdf>

**GE, Xiaolong; et al.** “Simulation based approach to optimal design of dividing wall column using random search method. *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2014, (United State of America) 68, pp. 38-46. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.05.001>

**GEANKOPLIS, C.** *Procesos de Transporte y Operaciones Unitarias* [en línea]. 3a Ed. México: CECSA, 1998. [Consulta: 7 mayo 2020]. ISBN 9789682603006. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=Krl6OgAACAAJ>

**GMEHLING, Jürgen; et al.** *Chemical Thermodynamics for Process Simulation* [en línea]. Weinheim-Germany: Wiley-VCH, 2012. [Consulta: 7 mayo 2020]. ISBN 9783527343256. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=QpaNDwAAQBAJ>

**HILERA, José. y MARTÍNEZ, Victor.** *Redes neuronales artificiales. Fundamentos, modelos y aplicaciones*. Wilmington-Estados Unidos: RA-MA, 1995. ISBN 020187895X.

**HILMEN, Eva Katrine.** Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation [en línea] (Trabajo de titulación) (Doctoral). University of Science and Technology, Trondheim , Ålesund , Gjøvik, Norwegian. 2000. [Consulta: 27 mayo 2020]. Disponible en: [http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/publications/thesis/2000\\_hilmen/Thesis\\_Hilmen.pdf](http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/publications/thesis/2000_hilmen/Thesis_Hilmen.pdf)

**HOSGOR, Eda; et al.** “Design and control of distillation processes for methanol-chloroform separation”. *Computers & Chemical Engineering* [en línea], 2014, (United State of America) 67, pp. 166-177. [Consulta: 20 abril 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.03.026>

**ISASI, Pedro, & GALVAN, Inés.** *Redes de Neuronas Artificiales: Un Enfoque Practico* [en línea]. México: Pearson Educación, 2014. [Consulta: 11 mayo 2020]. ISBN 9788420540252. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=W9J9ngEACAAJ>

**JALEE, E, & APARNA, K.** “Neuro-fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column”. *Procedia Technology* [en línea], 2016, (United State of America) 25, pp.

92-99. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 22120173. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.protecy.2016.08.085>

**JOHNSON, Björn, & MAGNUSSON, Boris.** “Towards end-user development of graphical user interfaces for internet of things”. *Future Generation Computer Systems* [en línea], 2020, (United State of America) 107, pp. 670-680. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 0167739X. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.future.2017.09.068>

**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, (United State of America) 21(2), p. 20. [Consulta: 23 mayo 2020]. ISSN 22978747. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/mca21020020>

**KHAYET, M, & COJOCARU, C.** “Artificial neural network model for desalination by sweeping gas membrane distillation”. *Desalination* [en línea], 2013, (United State of America) 308, pp. 102-110. [Consulta: 20 mayo 2020]. ISSN 00119164. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2012.06.023>

**KIVA, Valerii, HILMEN, Katrine, & SKOGESTAD, Sigurd.** “Azeotropic phase equilibrium diagrams: a survey”. *Chemical Engineering Science* [en línea], 2003, (United State of America) 58(10), pp. 1903-1953. [Consulta: 18 mayo 2020]. ISSN 00092509. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(03\)00018-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(03)00018-6)

**KLEIN, Andreas.** Azeotropic Pressure Swing Distillation [en línea] (Trabajo de titulación) (Doctoral). Technischen Universität Berlin, Berlín, Alemania. 2008. [Consulta: 7 mayo 2020]. Disponible en: [https://www.depositonce.tu-berlin.de/bitstream/11303/2292/2/Dokument\\_50.pdf](https://www.depositonce.tu-berlin.de/bitstream/11303/2292/2/Dokument_50.pdf)

**LAU, King-Tong; et al.** “Non-linear carbon dioxide determination using infrared gas sensors and neural networks with Bayesian regularization”. *Sensors and Actuators, B: Chemical* [en línea], 2009, (United State of America) 136(1), pp. 242-247. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 09254005. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.snb.2008.11.030>

**LEI, Z.** “Azeotropic Distillation”. *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering* [en línea], 2017, (United State of America), pp.1-8. [Consulta: 27 mayo 2020]. ISBN 9780124095472. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.06018-2>

**LEINO, Marko.** Process Simulation Unit Operation Models – Review of Open And Hsc Chemistry I / O Interfaces [en línea] (Trabajo de titulación). (Maestría) Tampere University of

Technology, Tampere, Finlandia. 2016. p.76. [Consulta: 11 mayo 2020]. Disponible en: <https://trepo.tuni.fi/handle/123456789/23943>

**LIANG, Shisheng; et al.** “Insight into pressure-swing distillation from azeotropic phenomenon to dynamic control”. *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2017, (United State of America) 117, pp. 318-335. [Consulta: 1 mayo 2020]. ISSN 02638762. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2016.10.040>

**LLADOSA, Estela, MONTÓN, Juan, & BURGNET, Mariá.** “Separation of di-n-propyl ether and n-propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization”. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2011, (United State of America) 50(11-12), pp. 1266-1274. [Consulta: 23 abril 2020]. ISSN 02552701. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.07.010>

**LÓPEZ ÁLVAREZ, P, VELO SABÍN, R, & MASEDA EIMIL, F.** “Estimación de la velocidad del viento mediante redes neuronales”. *XI Congreso Internacional de Ingeniería de Proyectos* [en línea], 2007, (Universidad de Santiago de Compostela, España), pp. 1083-1092. [Consulta: 11 mayo 2020]. 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.** “Comparison of extractive distillation and pressure-swing distillation for acetone/chloroform separation”. *Computers & Chemical Engineering* [en línea], 2013, (United State of America) 50, pp. 1-7. [Consulta: 6 mayo 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.10.014>

**MAHDI, Taha; et al.** “State-of-the-art technologies for separation of azeotropic mixtures”. *Separation and Purification Reviews* [en línea], 2015, (United Kingdom) 44 (4), pp. 308-330. [Consulta: 23 abril 2020]. ISSN 15422127. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1080/15422119.2014.963607>

**MATHWORKS.** *Bayesian regularization backpropagation*. [blog]. 2020a. [Consulta: 19 mayo 2020]. Disponible en: <https://la.mathworks.com/help/deeplearning/ref/trainbr.html>

**MATHWORKS.** *Interfaz Gráfica de Usuario (GUI)*. [blog]. 2020b. [Consulta: 28 mayo 2020]. Disponible en: <https://la.mathworks.com/discovery/matlab-gui.html>

**MATHWORKS.** *Redes Neuronales*. [blog]. 2020c [Consulta: 24 febrero 2020]. Disponible en: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html>

**MATICH, Damián.** *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones. Historia* [en línea]. Rosario-Argentina: Universidad Tecnológica Nacional, 2001. [Consulta: 1 mayo 2020].



Disponible en: <ftp://decsai.ugr.es/pub/usuarios/castro/Material-Redes-Neuronales/Libros/matich-redesneuronales.pdf>

**MEDEIROS, Daniel.** *CAPE-OPEN*. [blog]. 2019a. [Consulta: 20 febrero 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=CAPE-OPEN>

**MEDEIROS, Daniel.** *Licensing DWSIM*. [en línea]. 2019b. [Consulta: 18 mayo 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Licensing>

**MEDEIROS, Daniel.** *DWSIM - Chemical Process simulator*. [blog]. 2020. [Consulta: 20 febrero 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>

**MUHSIN, Wissam, & ZHANG, Jie.** “Modelling and Optimal Operation of a Crude Oil Hydrotreating Process with Atmospheric Distillation Unit Utilising Stacked Neural Networks”. *Proceedings of the 27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. [en línea]. 2017, (Barcelona, Spain) [Consulta: 28 mayo 2020]. ISBN 9780444639653. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63965-3.50415-3>

**MULIA SOTO, Jorge, & FLORES TLACUAHUAC, Antonio.** “Modeling, simulation and control of an internally heat integrated pressure-swing distillation process for bioethanol separation”. *Computers & Chemical Engineering* [en línea], 2011, (United State of America) 35(8), pp. 1532-1546. [Consulta: 9 mayo 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.03.011>

**OCHOA, Lluvia, JOBSON, Megan, & SMITH, Robin.** “Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks”. *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2012, (United State of America) 30, pp. 982-986. [Consulta: 20 mayo 2020]. ISSN 15707946. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-59520-1.50055-5>

**OCHOA, Lluvia, JOBSON, Megan, & SMITH, Robin.** “Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks”. *Computers & Chemical Engineering* [en línea], 2013, (United State of America) 59, pp. 178-185. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.05.030>

**OSMAN, M, & RAMASAMY, M.** “Neural network based soft sensor for inferential control of a binary distillation column”. *Journal of Applied Sciences* [en línea], 2010, (United State of America) 10(21), pp. 2558-2564. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 18125662. Disponible en: <https://scialert.net/abstract/?doi=jas.2010.2558.2564>

**OSUOLALE, Funmilayo, & ZHANG, Jie.** “Energy efficiency optimisation for distillation column using artificial neural network models”. *Energy* [en línea], 2016, (United State of

America) 106, pp. 562-578. ISSN 03605442. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.03.051>

**PORRAZZO, Rosario; et al.** “A neural network-based optimizing control system for a seawater-desalination solar-powered membrane distillation unit”. *Computers & Chemical Engineering* [en línea], 2013, (United State of America) 54, pp. 79-96. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.03.015>

**PRUNA JÁCOME, Edison Geovanny, & VÁSQUEZ SOLÍS Jairo Israel.** Diseño e implementación de un sistema de clasificación y empaquetado automático de helados para una micro empresa mediante inteligencia artificial [en línea] (Trabajo de titulación). Universidad de las Fuerzas Armadas, Latacunga, Ecuador. 2018. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <http://repositorio.espe.edu.ec/bitstream/21000/14031/1/T-ESPEL-MEC-0129.pdf>

**QUINTANA BLANCO, 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, Cartagena de Indias, Colombia. 2015. [Consulta: 24 abril 2020]. 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 de un sistema de redes_Asnaldo Quintana_USBCTG_2015.pdf)

**QUINTANILLA DOMÍNGUEZ, Joel.** Aplicación de técnicas de inteligencia artificial para contribuir en la detección de microcalcificaciones en mamografía digitalizada [en línea] (Trabajo de titulación) (Doctoral). Universidad Politécnica de Madrid, España. 2015. [Consulta: 18 mayo 2020]. Disponible en: [http://oa.upm.es/35038/1/JOEL\\_QUINTANILLA\\_DOMINGUEZ.pdf](http://oa.upm.es/35038/1/JOEL_QUINTANILLA_DOMINGUEZ.pdf)

**RESETARITS, M, & LOCKETT, M.** “Distillation”. *Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition)* [en línea], 2003, (United State of America), pp. 547-559. [Consulta: 6 mayo 2020]. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B0122274105001824>

**SÁNCHEZ TERÁN, José Oswaldo.** Identificación, control y simulación de un sistema usando redes neurales [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador. 2000. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/5439/1/T1612.pdf>

**SCHMIDT, Andres, CREASON, Whitney, & LAW, Beverly.** “Estimating regional effects of climate change and altered land use on biosphere carbon fluxes using distributed time delay neural networks with Bayesian regularized learning”. *Neural Networks* [en línea], 2018, (United State of America) 108, pp. 97-113. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 18792782. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2018.08.004>

**SHEN, W, BENYOUNES, H, & SONG, J.** “A review of ternary azeotropic mixtures advanced separation strategies”. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering* [en línea], 2016, (United State of America) 50(1), pp. 28-40. [Consulta: 27 mayo 2020]. ISSN 00405795. Disponible en: <https://doi.org/10.1134/S0040579516010140>

**SINALUISA LOZANO, Iván Fernando.** Aplicación de La Red Neuronal Artificial Feedforward Backpropagation para la predicción de demanda de energía eléctrica en la Empresa Eléctrica Riobamba S.A. [en línea] (Trabajo de titulación) (Maestría). Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2017. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <http://dspace.espech.edu.ec/bitstream/123456789/7606/1/20T00925.PDF>

**SINGH, Amit, TYAGI, Barjeev, & KUMAR, Vishal.** “Application of neural network based control strategies to binary distillation column”. *Control Engineering and Applied Informatics* [en línea], 2013, (United State of America) 15(4), pp. 47-57. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 14548658. Disponible en: <http://www.ceai.srait.ro/index.php?journal=ceai&page=article&op=view&path%5B%5D=1666&path%5B%5D=0>

**STATPOINT TECHNOLOGIES.** *Statgraphics Centurion XVI. Manual de usuario* [en línea]. Estados Unidos de América: StatPoint Technologies, Inc, 2010. [Consulta: 20 mayo 2020]. ISBN 0026-4784. Disponible en: <https://statgraphics.net/manual-de-usuario/>

**SUN, Kai, HUANG, Shao-hsuan, JANG, Shi-Shang, & WONG, David.** “Development of soft sensor with neural network and nonlinear variable selection for crude distillation unit process”. *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2016, (United State of America) 38, pp. 337-342. [Consulta: 28 mayo 2020]. ISSN 15707946. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63428-3.50061-8>

**SUQUILLO QUIÑA Patricio.** Diseño e implementación de sistemas de control neuronal de temperatura utilizando el software Neurosystems de Siemens. [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Politécnica Del Ejército, Sangolquí, Ecuador. 2012. [Consulta: 4 mayo 2020]. Disponible en: <http://repositorio.espe.edu.ec/bitstream/21000/5179/3/T-ESPE-033168-A.pdf>

**VAN KAAM, Romuald, RODRÍGUEZ DONIS, Ivonne, & GERBAUD, Vincent.** “Heterogeneous extractive batch distillation of chloroform-methanol-water: Feasibility and experiments”. *Chemical Engineering Science* [en línea], 2008, (United State of America) 63(1), pp. 78-94. [Consulta: 4 mayo 2020]. ISSN 00092509. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.09.005>

**VANNESCHI, Leonardo, & CASTELLI, Mauro.** “Multilayer perceptrons”. *Encyclopedia of Bioinformatics and Computational Biology: ABC of Bioinformatics* [en línea], 2018, (United

State of America) 1-3, pp. 612-620. [Consulta: 4 mayo 2020]. ISBN 9780128114322. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809633-8.20339-7>

**WIDAGDO, Soemantri, & SEIDER, Warren.** “Azeotropic Distillation”. *AIChE Journal* [en línea], 1996, (United State of America) 42(1), pp. 96-130. [Consulta: 1 mayo 2020]. ISSN 0001-1541. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/aic.690420110>

**ZHANG, Guoqiang, PATUWO, Eddy, & HU, Michael.**“Forecasting with artificial neural networks: The state of the art”. *International Journal of Forecasting* [en línea], 1998, (United State of America) 14(1), pp. 35-62. [Consulta: 1 mayo 2020]. ISSN 01692070. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0169-2070\(97\)00044-7](https://doi.org/10.1016/S0169-2070(97)00044-7)

## ANEXOS

### ANEXO A. Variables utilizadas en la codificación de la red neuronal artificial

Variable	Descripción
Datos	Vincula Matlab con la base de datos de entradas en Excel destinadas para el entrenamiento
entradas	Recopila los datos de las entradas para el entrenamiento, sin normalizar
T_max	Temperatura máxima de alimentación
T_min	Temperatura mínima de alimentación
T_norm	Temperaturas de alimentación normalizadas
Xc_max	Fracción molar máxima de cloroformo en la alimentación
Xc_min	Fracción molar mínima de cloroformo en la alimentación
Xc_norm	Fracciones molares de cloroformo en la alimentación normalizadas
RR1_max	Relación de reflujo máxima en la columna de baja presión
RR1_min	Relación de reflujo mínima en la columna de baja presión
RR1_norm	Relaciones de reflujo en la columna de baja presión normalizadas
TR1_max	Temperatura de reboiler máxima en la columna de baja presión
TR1_min	Temperatura de reboiler mínima en la columna de baja presión
TR1_norm	Temperaturas de reboiler en la columna de baja presión normalizadas
RR2_max	Relación de reflujo máxima en la columna de alta presión
RR2_min	Relación de reflujo mínima en la columna de alta presión
RR2_norm	Relaciones de reflujo en la columna de alta presión normalizadas
TR2_max	Temperatura de reboiler máxima en la columna de alta presión
TR2_min	Temperatura de reboiler mínima en la columna de alta presión
TR2_norm	Temperaturas de reboiler en la columna de alta presión normalizadas
Ent_norm	Variable de entrada que recopila todas las entradas normalizadas
salidas	Recopila los Datos de las salidas sin normalizar
D1_max	Flujo molar máximo de destilado en la columna de baja presión
D1_min	Flujo molar mínimo de destilado en la columna de baja presión
D1_norm	Flujos molares de destilado en la columna de baja presión normalizados
XcD1_max	Fracción molar máxima de cloroformo en destilado de la columna de baja presión
XcD1_min	Fracción molar mínima de cloroformo en destilado de la columna de baja presión
XcD1_norm	Fracciones molares de cloroformo en destilado de la columna de baja presión normalizadas
W1_max	Flujo molar máximo de residuo en la columna de baja presión
W1_min	Flujo molar mínimo de residuo en la columna de baja presión
W1_norm	Flujos molares de residuo en la columna de baja presión normalizados
XcW1_max	Fracción molar máxima de cloroformo en residuo de la columna de baja presión
XcW1_min	Fracción molar mínima de cloroformo en residuo de la columna de baja presión
XcW1_norm	Fracciones molares de cloroformo en residuo de la columna de baja presión normalizadas
D2_max	Flujo molar máximo de destilado en la columna de alta presión
D2_min	Flujo molar mínimo de destilado en la columna de alta presión
D2_norm	Flujos molares de destilado en la columna de alta presión normalizados
XcD2_max	Fracción molar máxima de cloroformo en destilado de la columna de alta presión
XcD2_min	Fracción molar mínima de cloroformo en destilado de la columna de alta presión
XcD2_norm	Fracciones molares de cloroformo en destilado de la columna de alta presión normalizadas
W2_max	Flujo molar máximo de residuo en la columna de alta presión
W2_min	Flujo molar mínimo de residuo en la columna de alta presión
W2_norm	Flujos molares de residuo en la columna de alta presión normalizados
XcW2_max	Fracción molar máxima de cloroformo en residuo de la columna de alta presión
XcW2_min	Fracción molar mínima de cloroformo en residuo de la columna de alta presión
XcW2_norm	Fracciones molares de cloroformo en residuo de la columna de alta presión normalizadas
Sal_norm	Variable de salida que recopila todas las salidas normalizadas
PropPred	Variable que contiene todos los resultados predichos por la red neuronal, normalizados
Prop_Reales	Variable que contiene "Sal_norm" o propiedades reales normalizadas
net	Variable que contiene el modelo de predicción diseñado (red neuronal)
D1_pred	Flujos molares predichos de destilado en la columna de baja presión
XcD1_pred	Fracciones molares predichas de cloroformo en destilado de la columna de baja presión.
W1_pred	Flujos molares predichos de residuo en la columna de baja presión
XcW1_pred	Fracciones molares predichas de cloroformo en residuo de la columna de baja presión.
D2_pred	Flujos molares predichos de destilado en la columna de alta presión

XcD2_pred	Fracciones molares predichas de cloroformo en destilado de la columna de alta presión.
W2_pred	Flujos molares predichos de residuo en la columna de alta presión
XcW2_pred	Fracciones molares predichas de cloroformo en residuo de la columna de alta presión.
Valor_Real	Variable que contiene los resultados predichos por la red neuronal
Datosv	Vincula Matlab con la base de datos de entradas en Excel destinadas para la validación
entradasv	Recopila los datos de las entradas para la validación, sin normalizar
T_normv	Temperaturas de alimentación para la validación, normalizadas
Xc_normv	Fracciones molares de cloroformo en la alimentación para la validación, normalizadas
RR1_normv	Relaciones de reflujo en la columna de baja presión para validación, normalizadas
TR1_normv	Temperaturas de reboiler en la columna de baja presión para validación, normalizadas
RR2_normv	Relaciones de reflujo en la columna de alta presión para validación, normalizadas
TR2_normv	Temperaturas de reboiler en la columna de alta presión para validación, normalizadas
Ent_normval	Variable de entrada que recopila todas las entradas normalizadas para la validación
PropPred_val	Variable que contiene todos los resultados predichos por la red neuronal en la validación, normalizados
D1_predv	Flujos molares predichos de destilado en la columna de baja presión durante la validación
XcD1_predv	Fracciones molares predichas de cloroformo en destilado de la columna de baja presión durante la validación
W1_predv	Flujos molares predichos de residuo en la columna de baja presión durante la validación
XcW1_predv	Fracciones molares predichas de cloroformo en residuo de la columna de baja presión durante la validación
D2_predv	Flujos molares predichos de destilado en la columna de alta presión durante la validación
XcD2_predv	Fracciones molares predichas de cloroformo en destilado de la columna de alta presión durante la validación
W2_predv	Flujos molares predichos de residuo en la columna de alta presión durante la validación
XcW2_predv	Fracciones molares predichas de cloroformo en residuo de la columna de alta presión durante la validación
Valor_Predval	Variable que contiene los resultados predichos por la red neuronal en su validación.

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

## ANEXO B. Principales variables utilizadas en la codificación de la GUI.

Variable	Descripción
T_in	Guarda el valor de la temperatura de alimentación ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
Xc_in	Guarda el valor de la fracción molar de cloroformo en la alimentación ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
RR1_in	Guarda el valor de la relación de reflujo en la columna de baja presión ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
TR1_in	Guarda el valor de la temperatura de reboiler en la columna de baja presión ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
RR2_in	Guarda el valor de la relación de reflujo en la columna de alta presión ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
TR2_in	Guarda el valor de la temperatura de reboiler en la columna de alta presión ingresada por el usuario en la interfaz gráfica
EntRNA	Variable que contiene las entradas normalizadas
Variables_Red	Carga el modelo de predicción guardado en el archivo "Red Neuronal.mat"
RedNeuronal	Obtiene la red neuronal (net) guardada en "Variables_Red"
SalidasN_RN	Obtiene las salidas normalizadas aprendidas por la red neuronal
PropPred_RNA	Variable que contiene los resultados predichos por la red neuronal normalizados
Valor_RealRN	Variable que contiene los resultados reales predichos por la red neuronal

**Realizado por:** Rosario, Brayan, 2020

## ANEXO C. Normalización de los datos de entrenamiento de la red neuronal

```
%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Extraer=readtable('Datos.xlsx','Sheet','Data');
%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Datos = table2array(Extraer);

%_____NORMALIZACIÓN DE ENTRADAS_____
%Parámetros de Entrada
entradas=Datos(1:6,:);

%-----TEMPERATURA-----
T_max=max(entradas(1,:));
T_min=min(entradas(1,:));
T_norm =[(entradas(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR-----
Xc_max=max(entradas(2,:));
Xc_min=min(entradas(2,:));
Xc_norm =[(entradas(2,1:end)-Xc_min)/(Xc_max-Xc_min)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 1-----
RR1_max=max(entradas(3,:));
RR1_min=min(entradas(3,:));
RR1_norm =[(entradas(3,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 1-----
TR1_max=max(entradas(4,:));
TR1_min=min(entradas(4,:));
TR1_norm =[(entradas(4,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 2-----
RR2_max=max(entradas(5,:));
RR2_min=min(entradas(5,:));
RR2_norm =[(entradas(5,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 2-----
TR2_max=max(entradas(6,:));
TR2_min=min(entradas(6,:));
TR2_norm =[(entradas(6,1:end)-TR2_min)/(TR2_max-TR2_min)];

%-----ENTRADAS NORMALIZADAS -----
Ent_norm=[T_norm;Xc_norm;RR1_norm;TR1_norm;RR2_norm;TR2_norm]';
```

```

% _____NORMALIZACIÓN DE SALIDAS_____
%Parámetros de Salida
salidas=Datos(7:14,:);

%-----DESTILADO DE COLUMNA 1-----
D1_max=max(salidas(1,:));
D1_min=min(salidas(1,:));
D1_norm =[(salidas(1,1:end)-D1_min)/(D1_max-D1_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 1-----
XcD1_max=max(salidas(2,:));
XcD1_min=min(salidas(2,:));
XcD1_norm =[(salidas(2,1:end)-XcD1_min)/(XcD1_max-XcD1_min)];
%-----RESIDUO DE COLUMNA 1-----
W1_max=max(salidas(3,:));
W1_min=min(salidas(3,:));
W1_norm =[(salidas(3,1:end)-W1_min)/(W1_max-W1_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 1-----
XcW1_max=max(salidas(4,:));
XcW1_min=min(salidas(4,:));
XcW1_norm =[(salidas(4,1:end)-XcW1_min)/(XcW1_max-XcW1_min)];

%-----DESTILADO DE COLUMNA 2-----
D2_max=max(salidas(5,:));
D2_min=min(salidas(5,:));
D2_norm =[(salidas(5,1:end)-D2_min)/(D2_max-D2_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 2-----
XcD2_max=max(salidas(6,:));
XcD2_min=min(salidas(6,:));
XcD2_norm =[(salidas(6,1:end)-XcD2_min)/(XcD2_max-XcD2_min)];
%-----RESIDUO DE COLUMNA 2-----
W2_max=max(salidas(7,:));
W2_min=min(salidas(7,:));
W2_norm =[(salidas(7,1:end)-W2_min)/(W2_max-W2_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 2-----
XcW2_max=max(salidas(8,:));
XcW2_min=min(salidas(8,:));
XcW2_norm =[(salidas(8,1:end)-XcW2_min)/(XcW2_max-XcW2_min)];

%-----SALIDAS NORMALIZADAS -----
Sal_norm=[D1_norm;XcD1_norm;W1_norm;XcW1_norm;D2_norm;XcD2_norm;W2_norm;XcW2_
norm]';

```



## ANEXO D. Normalización de los datos de validación de la red neuronal

```
%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Extraer=readtable('Datos.xlsx','Sheet','Dataval');
%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Datosv = table2array(Extraer);
%Cargar archivo net y parámetros máximos y mínimos de la Salida de la red neuronal
load('RedNeuronal.mat');

%Normalización de Parámetros de Entrada
entradasv=Datosv(1:6,:);
%-----TEMPERATURA-----
T_normv =[(entradasv(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
%-----FRACCIÓN MOLAR-----
Xc_normv =[(entradasv(2,1:end)-Xc_min)/(Xc_max-Xc_min)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 1-----
RR1_normv =[(entradasv(3,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 1-----
TR1_normv =[(entradasv(4,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 2-----
RR2_normv =[(entradasv(5,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 2-----
TR2_normv =[(entradasv(6,1:end)-TR2_min)/(TR2_max-TR2_min)];

%-----ENTRADAS NORMALIZADAS -----
Ent_normval=[T_normv;Xc_normv;RR1_normv;TR1_normv;RR2_normv;TR2_normv];
```

## ANEXO E. Código de la red neuronal artificial y entrenamiento de la red

```
% _____ RED NEURONAL _____  
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network  
% Script generated by Neural Fitting app  
% Created 24-Mar-2020 08:00:35  
% 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 = 100;  
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);  
% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions  
% For a list of all processing functions type: help nnprocess  
net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};  
net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};  
% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing  
% For a list of all data division functions type: help nndivision  
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 Functi  
% For a list of all performance functions type: help nnperformance  
net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error  
% Choose Plot Functions  
% For a list of all plot functions type: help nnplot  
net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...  
    'plotregression', 'plotfit'};  
% Train the Network  
[net,tr] = train(net,x,t);
```

```

% Test the Network
y = net(x);
e = gsubtract(t,y);
performance = perform(net,t,y)
% Recalculate Training, Validation and Test Performance
trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
valTargets = t .* tr.valMask{1};
testTargets = t .* tr.testMask{1};
trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
valPerformance = perform(net,valTargets,y)
testPerformance = perform(net,testTargets,y)
% View the Network
view(net)
% Plots
% Uncomment these lines to enable various plots.
%figure, plotperform(tr)
%figure, plottrainstate(tr)
%figure, ploterrhist(e)
%figure, plotregression(t,y)
%figure, plotfit(net,x,t)
% Deployment
% Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
% See the help for each generation function for more information.
if (false)
    % Generate MATLAB function for neural network for application
    % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
    % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
    % network performs.
    genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
    % generation with MATLAB Coder tools.
    genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end

```

```

if (false)
    % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
    % Simulink Coder tools.
    gensim(net);
end

%-----
PropPred = net(Ent_norm(1:end,:))
Prop_Reales= Sal_norm';

% VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR
%-----DESTILADO DE COLUMNA 1-----
D1_pred = PropPred(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 1-----
XcD1_pred = PropPred(2,:).*(XcD1_max-XcD1_min)+XcD1_min;
%-----RESIDUO DE COLUMNA 1-----
W1_pred = PropPred(3,:).*(W1_max-W1_min)+W1_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 1-----
XcW1_pred = PropPred(4,:).*(XcW1_max-XcW1_min)+XcW1_min;
%-----DESTILADO DE COLUMNA 2-----
D2_pred = PropPred(5,:).*(D2_max-D2_min)+D2_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 2-----
XcD2_pred = PropPred(6,:).*(XcD2_max-XcD2_min)+XcD2_min;
%-----RESIDUO DE COLUMNA 2-----
W2_pred = PropPred(7,:).*(W2_max-W2_min)+W2_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 2-----
XcW2_pred = PropPred(8,:).*(XcW2_max-XcW2_min)+XcW2_min;

% _____ RESULTADOS _____
Valor_Real=[D1_pred;XcD1_pred;W1_pred;XcW1_pred;D2_pred;XcD2_pred;W2_pred;XcW2_pred]'

```

## ANEXO F. Código de la red neuronal artificial en la validación

```
%Validación de la red neuronal
PropPred_val = net(Ent_normval(1:end,:));

%VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR

%-----DESTILADO DE COLUMNA 1-----
D1_predv = PropPred_val(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 1-----
XcD1_predv = PropPred_val(2,:).*(XcD1_max-XcD1_min)+XcD1_min;
%-----RESIDUO DE COLUMNA 1-----
W1_predv = PropPred_val(3,:).*(W1_max-W1_min)+W1_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 1-----
XcW1_predv = PropPred_val(4,:).*(XcW1_max-XcW1_min)+XcW1_min;

%-----DESTILADO DE COLUMNA 2-----
D2_predv = PropPred_val(5,:).*(D2_max-D2_min)+D2_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 2-----
XcD2_predv = PropPred_val(6,:).*(XcD2_max-XcD2_min)+XcD2_min;
%-----RESIDUO DE COLUMNA 2-----
W2_predv = PropPred_val(7,:).*(W2_max-W2_min)+W2_min;
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 2-----
XcW2_predv = PropPred_val(8,:).*(XcW2_max-XcW2_min)+XcW2_min;

%-----RESULTADOS-----
Valor_Realval=[D1_predv;XcD1_predv;W1_predv;XcW1_predv;D2_predv;XcD2_predv;W2_predv;
XcW2_predv]'
```

## ANEXO G. Código de la interfaz gráfica de usuario

```
function varargout = GUI(varargin)
% See also: GUIDE, GUIDATA, GUIHANDLES
% Last Modified by GUIDE v2.5 22-May-2020 08:47:15
% Begin initialization code - DO NOT EDIT
gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
                  'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
                  'gui_OpeningFcn', @GUI_OpeningFcn, ...
                  'gui_OutputFcn', @GUI_OutputFcn, ...
                  'gui_LayoutFcn', [], ...
                  'gui_Callback', []);
if nargin yy ischar(varargin{1})
    gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end
if nargout
    [varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
    gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% End initialization code - DO NOT EDIT
% --- Executes just before GUI is made visible.
function GUI_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
handles.output = hObject;
% Update handles structure
guidata(hObject, handles);
%Agregar imagen del proceso de destilación
axes(handles.imagen);
bkgrnd=imread('PSD.png');
imshow(bkgrnd);
% --- Outputs from this function are returned to the command line.
function varargout = GUI_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)
% varargout cell array for returning output args (see VARARGOUT);
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Get default command line output from handles structure
varargout{1} = handles.output;
% End initialization code - DO NOT EDIT
```

```

% _____DESARROLLO_GUI_____

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function PanelRNA_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object deletion, before destroying properties.
function PanelRNA_DeleteFcn(hObject, eventdata, handles)

% _____CERRAR_____

% --- Executes on button press in Cerrar.
function Cerrar_Callback(hObject, eventdata, handles)
close(gcf)

% _____CALCULAR_____

% --- Executes on button press in Calcular.
function Calcular_Callback(hObject, eventdata, handles)

% Guardar datos de entrada
T_in=str2double(get(handles.valT,'String'));
Xc_in=str2double(get(handles.valXc,'String'));
RR1_in=str2double(get(handles.valRR1,'String'));
TR1_in=str2double(get(handles.valTR1,'String'));
RR2_in=str2double(get(handles.valRR2,'String'));
TR2_in=str2double(get(handles.valTR2,'String'));

% Normalizar Entradas
%-----TEMPERATURA-----
Tin_normv =[(T_in-290)/(310-290)];
%-----FRACCIÓN MOLAR-----
Xcin_normv =[(Xc_in-0.12)/(0.9-0.12)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 1-----
RR1in_normv =[(RR1_in-0.12)/(0.98-0.12)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 1-----
TR1in_normv =[(TR1_in-329)/(337-329)];
%-----RELACIÓN DE REFLUJO COLUMNA 2-----
RR2in_normv =[(RR2_in-0.51)/(1.5-0.51)];
%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 2-----
TR2in_normv =[(TR2_in-415)/(426-415)];

% Variable con las entradas normalizadas
EntRNA=[Tin_normv;Xcin_normv;RR1in_normv;TR1in_normv;RR2in_normv;TR2in_normv];
assignin('base','EntRNA',EntRNA)

```

**%cargar salidas aprendidas%**

```
D1max = getfield (Variables_Red, 'D1_max');
D1min = getfield (Variables_Red, 'D1_min');
XcD1max = getfield (Variables_Red, 'XcD1_max');
XcD1min = getfield (Variables_Red, 'XcD1_min');
W1max = getfield (Variables_Red, 'W1_max');
W1min = getfield (Variables_Red, 'W1_min');
XcW1max = getfield (Variables_Red, 'XcW1_max');
XcW1min = getfield (Variables_Red, 'XcW1_min');
```

```
D2max = getfield (Variables_Red, 'D2_max');
D2min = getfield (Variables_Red, 'D2_min');
XcD2max = getfield (Variables_Red, 'XcD2_max');
XcD2min = getfield (Variables_Red, 'XcD2_min');
W2max = getfield (Variables_Red, 'W2_max');
W2min = getfield (Variables_Red, 'W2_min');
XcW2max = getfield (Variables_Red, 'XcW2_max');
XcW2min = getfield (Variables_Red, 'XcW2_min');
```

SalidasN\_RN=

```
[D1max;D1min;XcD1max;XcD1min;W1max;W1min;XcW1max;XcW1min;D2max;D2min;XcD2max;
XcD2min;W2max;W2min;XcW2max;XcW2min];
assignin('base','SalidasN_RN',SalidasN_RN)
```

**%Calculos de la red neuronal**

```
PropPred_RNA = RedNeuronal(EntRNA);
assignin('base','PropPred_RNA',PropPred_RNA)
```

**%VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR**

**%-----DESTILADO DE COLUMNA 1-----**

```
D1_predRN = PropPred_RNA(1,:).*(D1max-D1min)+D1min
```

**%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 1-----**

```
XcD1_predRN = PropPred_RNA(2,:).*(XcD1max-XcD1min)+XcD1min
```

**%-----RESIDUO DE COLUMNA 1-----**

```
W1_predRN = PropPred_RNA(3,:).*(W1max-W1min)+W1min
```

**%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 1-----**

```
XcW1_predRN = PropPred_RNA(4,:).*(XcW1max-XcW1min)+XcW1min
```



```

%-----DESTILADO DE COLUMNA 2-----
D2_predRN = PropPred_RNA(5,:).*(D2max-D2min)+D2min
%-----FRACCIÓN MOLAR EN DESTILADO DE COLUMNA 2-----
XcD2_predRN = PropPred_RNA(6,:).*(XcD2max-XcD2min)+XcD2min
%-----RESIDUO DE COLUMNA 2-----
W2_predRN = PropPred_RNA(7,:).*(W2max-W2min)+W2min
%-----FRACCIÓN MOLAR EN RESIDUO DE COLUMNA 2-----
XcW2_predRN = PropPred_RNA(8,:).*(XcW2max-XcW2min)+XcW2min
%-----RESULTADOS-----
Valor_RealRN=[D1_predRN;XcD1_predRN;W1_predRN;XcW1_predRN;D2_predRN;XcD2_predR
N;W2_predRN;XcW2_predRN];
assignin('base','Valor_RealRN',Valor_RealRN)

%Mostrar Resultados en Interfaz
set(handles.ResD1,'String',D1_predRN);
set(handles.ResXcD1,'String',XcD1_predRN);
set(handles.ResW1,'String',W1_predRN);
set(handles.ResXcW1,'String',XcW1_predRN);
set(handles.ResD2,'String',D2_predRN);
set(handles.ResXcD2,'String',XcD2_predRN);
set(handles.ResW2,'String',W2_predRN);
set(handles.ResXcW2,'String',XcW2_predRN);

% _____ LIMPIAR _____
% --- Executes on button press in Limpiar.
function Limpiar_Callback(hObject, eventdata, handles)
%Limpiar Entradas
set(handles.valT,'String','');
set(handles.valXc,'String','');
set(handles.valRR1,'String','');
set(handles.valTR1,'String','');
set(handles.valRR2,'String','');
set(handles.valTR2,'String','');
%Limpiar Salidas
set(handles.ResD1,'String','');
set(handles.ResXcD1,'String','');
set(handles.ResW1,'String','');
set(handles.ResXcW1,'String','');
set(handles.ResD2,'String','');
set(handles.ResXcD2,'String','');
set(handles.ResW2,'String','');
set(handles.ResXcW2,'String','');

```

```

% _____ DISEÑO DEL PANEL _____

%-----TEMPERATURA DE REBOILER COLUMNA 2-----

function valTR2_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 415
    msgbox('El valor deber estar entre 415 - 426 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 426
    msgbox('El valor deber estar entre 415 - 426 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 415 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 426
    TR2_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','TR2_in',TR2_in)
end
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function valTR2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

%-----RELACIÓN DE REFLUJO EN COLUMNA 2-----

function valRR2_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 0.51
    msgbox('El valor deber estar entre 0.51 - 1.5','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 1.5
    msgbox('El valor deber estar entre 0.51 - 1.5','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0.51 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 1.5
    RR2_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','RR2_in',RR2_in)
end
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function valRR2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

```

%-----TEMPERATURA DE REBOILER EN COLUMNA 1-----

function valTR1_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 329
    msgbox('El valor deber estar entre 329 - 337 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 337
    msgbox('El valor deber estar entre 329 - 337 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 329 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 337
    TR1_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','TR1_in',TR1_in)
end
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function valTR1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

%-----RELACIÓN DE REFLUJO EN COLUMNA 1-----

function valRR1_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 0.12
    msgbox('El valor deber estar entre 0.12 - 0.98','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 0.98
    msgbox('El valor deber estar entre 0.12 - 0.98','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0.12 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 0.98
    RR1_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','RR1_in',RR1_in)
end
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function valRR1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

%-----FRACCIÓN MOLAR DE CLOROFORMO EN ALIMENTACIÓN-----

```
function valXc_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 0.12
    msgbox('El valor deber estar entre 0.12 - 0.90','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 0.90
    msgbox('El valor deber estar entre 0.12 - 0.90','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0.12 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 0.90
    Xc_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','Xc_in',Xc_in)
end
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

% --- Executes during object creation, after setting all properties.

```
function TextoXc_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
```

% --- Executes during object creation, after setting all properties.

```
function TextoT_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
```

```
function TextoT_ButtonDownFcn(hObject, eventdata, handles)
```

%-----TEMPERATURA DE ALIMENTACIÓN-----

```
function valT_Callback(hObject, eventdata, handles)
if str2double(get(hObject,'String')) >= 0 yy str2double(get(hObject,'String')) < 290
    msgbox('El valor deber estar entre 290 - 310 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) > 310
    msgbox('El valor deber estar entre 290 - 310 K','Nota')
end
if str2double(get(hObject,'String')) >= 290 yy str2double(get(hObject,'String')) <= 310
    T_in=str2double(get(hObject,'String'))
    assignin('base','T_in',T_in)
end
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function valT_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResXcW2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResXcW2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResW2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResW2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResXcD2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResXcD2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResD2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResD2_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResXcW1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResXcW1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

```
function ResW1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResW1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
```

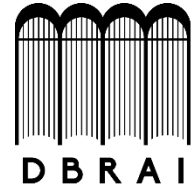
```
function ResXcD1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResXcD1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function ResD1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function ResD1_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
if ispc yy isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

% -----
function Untitled_1_Callback(hObject, eventdata, handles)
```



**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:** 06 / 07 / 2020

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> • Brayan David Rosario Rosero
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> Facultad de Ciencias
<b>Carrera:</b> Ingeniería Química
<b>Título a optar:</b> Ingeniero Químico
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.



06-07-2020

0099-DBRAI-UPT-2020