



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

**PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE CARBONATO DE
DIMETILO MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES
A PARTIR DE LA SIMULACIÓN DE SU PROCESO DE
SÍNTESIS**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: YÓLIDA NARCISA IZA CORRALES

DIRECTOR: Ing. MAYRA PAOLA ZAMBRANO VINUEZA MSc

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Yólida Narcisa Iza Corrales

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, Yólida Narcisa Iza Corrales, 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, 14 de septiembre de 2021

YOLIDA
NARCISA IZA
CORRALES

A digital signature stamp with a pinkish-red scribble over it. The text inside the stamp reads: "Firmado digitalmente por YOLIDA NARCISA IZA CORRALES Fecha: 2021.10.12 22:11:32 -05'00'".

Firmado digitalmente por
YOLIDA NARCISA
IZA CORRALES
Fecha: 2021.10.12
22:11:32 -05'00'

Yólida Narcisa Iza Corrales

CI. 055011556-2

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular Tipo: Propuesta Tecnológica. **“PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE CARBONATO DE DIMETILO MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES A PARTIR DE LA SIMULACIÓN DE SU PROCESO DE SÍNTESIS”**, realizado por la señorita: **YÓLIDA NARCISA IZA CORRALES**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Raúl Leandro Dávalos Monteiro PhD. PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: RAUL LEANDRO DAVALOS MONTEIRO	2021-09-14
Ing. Mayra Paola Zambrano Vinueza MSc. DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	 Firmado electrónicamente por: MAYRA PAOLA ZAMBRANO VINUEZA	2021-09-14
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada MSc. MIEMBRO DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: DARIO FERNANDO GUAMAN LOZADA	2021-09-14

DEDICATORIA

Al alcanzar una meta, es el momento en el que todo ser humano se detiene a recordar el apoyo recibido durante el difícil trajín recorrido; es por eso que, el presente trabajo de Integración Curricular lo dedico a Dios, por ser mi fortaleza y mi guía.

A Brayan por el cariño y apoyo incondicional, a Mayra Valdiviezo, Brayan Vaca, Wendy Dávila y Brayan Rosario por su amistad incomparable durante esta travesía llamada Ingeniería Química.

A Marcia Serrano, María Alexandra Herrera y Yadira Romero por considerarme un miembro más de su familia y regalarme muchos momentos especiales durante mis estudios.

Y finalmente a mis padres Hugo Iza, Carmen Corrales, a mis hermanos Diana, Miguel, Hugo, Cristian y mis sobrinos Camilo, Miguel Ángel, Kaleth y Joaquín por ser mi apoyo incondicional en todo momento.

Yólida

AGRADECIMIENTO

Mi infinita gratitud va dirigida en primer lugar a Dios, que me bendice día a día y me fortalece para vencer las adversidades pues, con Cristo todo sin Cristo nada.

A mis padres Hugo Iza y Carmen Corrales por su dedicación y esfuerzo al darme una excelente vida, tanto personal como profesional.

A la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, por brindarme la oportunidad de adquirir nuevos conocimientos, por demostrarme que existe educación superior de calidad.

A mi director de Trabajo de titulación la Ing. Mayra Zambrano y tribunal evaluador, por su predisposición y valioso aporte en el desarrollo del presente trabajo.

Yólida

TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xiv
RESUMEN.....	xvi
ABSTRACT.....	xvii

CAPÍTULO I

1.	INTRODUCCIÓN	18
1.1.	Antecedentes.....	18
1.2.	Planteamiento del problema	19
1.3.	Objetivos	20
1.3.1.	<i>Objetivo General</i>	20
1.3.2.	<i>Objetivos Específicos</i>	20
1.4.	Justificación del proyecto	21
1.5.	Alcance	21

CAPÍTULO II

2.	MARCO TEÓRICO	22
2.1.	Estado del Arte	22
2.2.	Bases Teóricas	25
2.2.1.	<i>Compuestos químicos</i>	25
2.2.1.1.	<i>Carbonato de propileno (PC)</i>	25
2.2.1.2.	<i>Carbonato de dimetilo (DMC)</i>	25
2.2.1.3.	<i>Propilenglicol (PG)</i>	25
2.2.2.	<i>Azeótropo</i>	26
2.2.3.	<i>Destilación reactiva</i>	26
2.2.4.	<i>Destilación por oscilación de presión</i>	26
2.2.5.	<i>Descripción del proceso estudiado</i>	27
2.2.6.	<i>DWSIM – Chemical Process Simulator</i>	28
2.2.6.1.	<i>Características</i>	28
2.2.6.2.	<i>Interfaz plataforma DWSIM</i>	29

2.2.6.3.	<i>Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos</i>	29
2.2.7.	<i>Inteligencia Artificial</i>	31
2.2.7.1.	<i>Neurona Artificial</i>	31
2.2.8.	<i>Redes Neuronales Artificiales (RNAs)</i>	32
2.2.8.1.	<i>Arquitectura de las Redes Neuronales Artificiales</i>	32
2.2.8.2.	<i>Redes Neuronales Artificiales (RNAs) según el tipo de aprendizaje</i>	34
2.2.8.3.	<i>Flujo de trabajo típico para diseñar redes neuronales</i>	35

CAPÍTULO III

3.	METODOLOGÍA	36
3.1.	Diseño de la investigación	36
3.2.	Tipo de investigación	36
3.3.	Métodos y técnicas de investigación	36
3.4.	Técnicas e instrumentos de recolección de datos primarios y secundarios ...	37
3.4.1.	<i>Técnicas de recolección de datos</i>	37
3.4.2.	<i>Instrumentos de recolección de datos primarios y secundarios</i>	37
3.4.3.	<i>Identificación de variables</i>	37
3.4.3.1.	<i>Variables independientes</i>	37
3.4.3.2.	<i>Variables dependientes</i>	37
3.4.4.	<i>Operación de variables</i>	38
3.5.	Procedimiento de investigación	38
3.5.1.	<i>Establecimiento de parámetros de simulación</i>	38
3.5.2.	<i>Simulación del proceso de producción</i>	40
3.5.2.1.	<i>Reacción cinética</i>	40
3.5.2.2.	<i>Modelo termodinámico</i>	40
3.5.2.3.	<i>Proceso de destilación</i>	40
3.5.3.	<i>Validación de la simulación</i>	43
3.5.4.	<i>Procesamiento de la base de datos</i>	43
3.5.5.	<i>Diseño de la red neuronal artificial</i>	44
3.5.5.1.	<i>Normalización de la base de datos</i>	44
3.5.5.2.	<i>Entrenamiento de la red neuronal artificial</i>	46
3.5.6.	<i>Validación de la red neuronal artificial</i>	50
3.6.	Resultados	51
3.6.1.	<i>Base de datos para la red neuronal artificial</i>	51
3.6.2.	<i>Desarrollo de la red neuronal artificial</i>	51
3.6.2.1.	<i>Lectura y normalización de la base de datos</i>	51

3.6.2.2.	<i>Entrenamiento de la red neuronal artificial</i>	51
3.6.2.3.	<i>Validación de la red neuronal artificial</i>	54
3.6.3.	<i>Análisis estadístico de los datos predichos</i>	55
3.6.3.1.	<i>Flujo másico real y predicho de propilenglicol</i>	55
3.6.3.2.	<i>Flujo másico real y predicho de carbonato de dimetilo</i>	57

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	59
4.1.	Cronograma	59
4.2.	Presupuesto	60
4.3.	Recursos	60

CONCLUSIONES	61
---------------------------	----

RECOMENDACIONES	62
------------------------------	----

GLOSARIO

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2:	Evolución de la investigación.....	24
Tabla 2-2:	Especificaciones de columna para diseños originales y óptimos	28
Tabla 1-3:	Variables de la investigación.....	38
Tabla 2-3:	Condiciones en las corrientes de alimentación.....	41
Tabla 3-3:	Condiciones de operación en las columnas	41
Tabla 4-3:	Validación de la simulación del proceso de síntesis de carbonato de dimetilo	43
Tabla 5-3:	Rangos de operación de la base de datos.....	44
Tabla 6-3:	Ensayos de selección del número de neuronas y el algoritmo de entrenamiento.	47
Tabla 7-3:	Tabla ANOVA para el análisis de la varianza.....	50
Tabla 14-3:	Medias para el flujo másico de propilenglicol.....	56
Tabla 15-3:	ANOVA de la predicción del flujo másico de propilenglicol	56
Tabla 16-3:	Medias para el flujo másico de carbonato de dimetilo	57
Tabla 17-3:	ANOVA de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo	58
Tabla 1-4:	Cronograma del trabajo de titulación	59
Tabla 2-4:	Presupuesto del proyecto	60
Tabla 3-4:	Talento humano	60
Tabla 4-4:	Recursos materiales	60

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2:	Diagrama de flujo optimizado para la producción de DMC.....	27
Figura 2-2:	Interfaz DWSIM	29
Figura 3-2:	Paquetes de propiedades	30
Figura 4-2:	Operaciones de la unidad	31
Figura 5-2:	Neurona Artificial	32
Figura 6-2:	Analogía entre la neurona biológica y la neurona artificial	32
Figura 7-2:	Red monocapa, Red multicapa, Red recurrente	33
Figura 1-3:	Metodología de investigación	38
Figura 2-3:	Proceso de síntesis de carbonato de dimetilo en Aspen Plus	39
Figura 3-3:	Condiciones óptimas para la producción de carbonato de dimetilo.....	39
Figura 4-3:	Proceso de síntesis de carbonato de dimetilo en DWSIM	42
Figura 5-3:	Entradas y salidas de la red neuronal artificial.....	44
Figura 6-3:	Herramienta Neural Fitting de Matlab	45
Figura 7-3:	Asistente de diseño de red.....	45
Figura 8-3:	Selección de entradas y salidas normalizadas	46
Figura 9-3:	Arquitectura de la red neuronal artificial	48
Figura 10-3:	Selección del algoritmo de entrenamiento	49
Figura 11-3:	Proceso de entrenamiento de la red.....	49

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3: Arquitectura de red con 80 neuronas en capa oculta	52
Gráfico 2-3: Regresión lineal con 80 neuronas en capa oculta	53
Gráfico 3-3: Error cuadrático medio con 80 neuronas en capa oculta	53
Gráfico 4-3: Predicción del entrenamiento RNA con 80 neuronas en capa oculta	54
Gráfico 5-3: Predicción del flujo másico de propilenglicol	55
Gráfico 6-3: Gráfico de medias de la predicción del flujo másico de propilenglicol	56
Gráfico 7-3: Gráfico ANOVA de la predicción del flujo másico de propilenglicol	57
Gráfico 8-3: Predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo.....	57
Gráfico 9-3: Gráfico de medias de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo. .	58
Gráfico 10-3: Gráfico ANOVA de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo....	58

ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A:** CARACTERÍSTICAS DE DWSIM
- ANEXO B:** CORRIENTE DE DESTILADO EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA (D1)
- ANEXO C:** CORRIENTE DE RESIDUO EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA (B1)
- ANEXO D:** CORRIENTE DE DESTILADO EN LA COLUMNA PSD (D2)
- ANEXO E:** CORRIENTE DE RESIDUO EN LA COLUMNA PSD (B2)
- ANEXO F:** DATOS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO G:** DATOS DE VALIDACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO H:** LECTURA Y NORMALIZACIÓN DE LOS DATOS DE ENTRENAMIENTO
- ANEXO I:** LECTURA Y NORMALIZACIÓN DE LOS DATOS DE VALIDACIÓN
- ANEXO J:** CÓDIGO DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO K:** CÓDIGO DE VALIDACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO L:** ENSAYOS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO M:** RESULTADOS DEL ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
- ANEXO N:** RESULTADOS DE LA VALIDACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

ANOVA	Análisis de la varianza
atm	atmósferas
B₁	Flujo másico de residuo en la columna de destilación reactiva
B₂	Flujo másico de residuo en la columna de destilación PSD
BR	Regularización bayesiana
C₁	Columna de destilación reactiva
C₂	Columna de destilación por oscilación de presión
D₁	Flujo másico de destilado en la columna de destilación reactiva
D₂	Flujo másico de destilado en la columna de destilación PSD
DMC	Carbonato de dimetilo
DR	Destilación reactiva
PC	Carbonato de propileno
PG	Propilenglicol
K	Kelvin
kg/h	kilogramo por hora
kg/m³	kilogramo por metro cúbico
kg/kmol	kilogramo por kilomol
kJ/kg	kilojulio por kilogramo
kJ/[kg, K]	kilojulio por kilogramo kelvin
kJ/kmol	kilojulio por kilomol
kJ/[kmol, K]	kilojulio por kilomol Kelvin
kmol/h	kilomol por hora
kW	kiloWatts
LM	Levenberg Marquardt
MSE	Error cuadrático medio
MeOH	Metanol
m³/h	metro cúbico por hora
PSD	Destilación por oscilación de presión
R	Coefficiente de correlación de Pearson
RNA	Red Neuronal Artificial
RR₁	Relación de reflujo en la primera columna de destilación reactiva
RR₂	Relación de reflujo en la columna de destilación PSD
SCG	Scaled Conjugate Gradient
UNIQUAC	Cuasiquémico Universal
UNIFAC	Coefficientes de actividad de grupo funcional de UNIQUAC

VLE	Equilibrio Vapor - Líquido
W/[m. K]	Watt por metro Kelvin
X	valor que se desea normalizar
X_N	valor normalizado
X_{min}	valor mínimo
X_{max}	valor máximo

RESUMEN

El objetivo del trabajo fue predecir la composición de carbonato de dimetilo mediante redes neuronales artificiales (RNA) a partir de la simulación del proceso de destilación reactiva y destilación por oscilación de presión de metanol y carbonato de propileno en DWSIM. El diseño de la red se llevó a cabo en Matlab con cinco variables en la capa de entrada, 80 neuronas en la capa oculta, dos variables en la capa de salida y el algoritmo de entrenamiento de regularización bayesiana. Para entrenar y validar la red se utilizaron 120 datos de la simulación. La temperatura de alimentación, la relación de reflujo y presión en la columna de destilación reactiva, así como la relación de reflujo y presión en la columna de destilación por oscilación de presión se han seleccionado como variables de entrada; el flujo másico de propilenglicol y de carbonato de dimetilo variables de salida. Un coeficiente de correlación de 0,928 y un error cuadrático medio de 0,0056 evidencian el buen desempeño de la red durante su entrenamiento con 80 neuronas y el algoritmo de regularización bayesiana. Un valor-p mayor que 0,05 permite validar con un 95% de confianza el modelo de predicción, confirmando que no existe una diferencia estadística significativa entre los datos reales y predichos por la red neuronal artificial. Estos resultados indican que el modelo de predicción utilizando RNA es eficiente al predecir la síntesis de carbonato de dimetilo. Se recomienda evaluar otros parámetros que influyen en el rendimiento de la red neuronal artificial, como las funciones de activación y la cantidad de capas ocultas sobre la tasa de aprendizaje.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <CARBONATO DE DIMETILO>, <PROPILENGLICOL>, <DESTILACIÓN REACTIVA>, <DESTILACIÓN POR OSCILACIÓN DE PRESIÓN>, <MATLAB(SOFTWARE)>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>.

LEONARDO
FABIO MEDINA
NUSTE

Firmado digitalmente
por LEONARDO FABIO
MEDINA NUSTE
Fecha: 2021.10.20
08:59:27 -05'00'



1651-DBRA-UTP-2021

ABSTRACT

The work objective was to predict the composition of dimethyl carbonate using artificial neural networks (ANN) from the simulation of the reactive distillation and pressure oscillation distillation process of methanol and propylene carbonate in DWSIM. The network design was carried out in Matlab with five variables in the input layer, 80 neurons in the hidden layer, two variables in the output layer, and the Bayesian regularization testing algorithm. 120 simulation data were used to test and validate the network. The feed temperature, the reflux and pressure relationship in the reactive distillation column, as well as the reflux and pressure relationship in the distillation column by pressure oscillation have been selected as input variables; the mass flow of propylene glycol and dimethyl carbonate are the output variables. A correlation coefficient of 0.928 and a mean square error of 0.0056 show the good performance of the network during its testing with 80 neurons and the Bayesian regularization algorithm. A p-value greater than 0.05 allows to validate the prediction model with 95% confidence, confirming that there is no statistically significant difference between the real and predicted data by the artificial neural network. These results indicate that the prediction model using ANN is efficient in predicting the dimethyl carbonate synthesis. It is recommended to evaluate other parameters that influence the performance of the artificial neural network, such as the activation functions and the quantity of hidden layers on the learning rate.

Key words: <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <DIMETHYL CARBONATE>, <PROPYLENE GLYCOL>, <REACTIVE DISTILLATION>, <PRESSURE OSCILLATION DISTILLATION>, <MATLAB (SOFTWARE)>, < ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS (ANN)>.

ANA GABRIELA
REINOSO
ESPINOSA

Firmado digitalmente por
ANA GABRIELA REINOSO
ESPINOSA
Fecha: 2021.11.30 00:55:25
-05'00'

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

El carbonato de dimetilo (DMC) es un compuesto químico inocuo a partir del punto de vista ambiental y además es fácil de biodegradarse, tiene una reactividad química muy versátil, por lo cual lo convierte en un precursor de intermediarios en reacciones de metilación y carbonilación. Tiene una gran aplicación en la preparación de policarbonatos y carbamatos, también como aditivo de combustibles y electrolito en líquidos iónicos de baterías de litio (Capeletti & Sedran, 2012, p. 1).

En los últimos años, los carbonatos orgánicos y, en particular, el carbonato de dimetilo (DMC), han adquirido una importancia creciente debido a sus propiedades químicas versátiles y su bajo nivel de peligrosidad. Como resultado, la producción de carbonato de dimetilo (DMC) ha aumentado de 47 000 toneladas al año en 1997 a más de 70 000 toneladas al año. La síntesis del carbonato de dimetilo (DMC) por medio de la transesterificación de carbonato de propileno (PC), es un candidato prometedor particularmente interesante en el marco de “química verde” (Johannes; et al, 2013, p. 453).

La EPA de Estados Unidos lo reconoció como un solvente exento de COV. Debido a su alto contenido de oxígeno, el carbonato de dimetilo (DMC) es un gran aditivo de combustible oxigenado, el cual es capaz de reemplazar al aditivo de combustible carcinógeno metil terc-butil éter (MTBE). El carbonato de dimetilo (DMC) inicialmente se producía en su mayoría de la fosgenación de metanol, lo cual implica el uso de fosgeno tóxico. Sin embargo, se han logrado desarrollar rutas de síntesis libres de fosgeno como la carbonilación oxidativa de metanol y la transesterificación de carbonato de etileno con metanol. En todos estos procesos mencionados la separación de carbonato de dimetilo (DMC) con metanol como producto final es naturalmente crucial, sin embargo, aquello es difícil de realizarlo ya que el carbonato de dimetilo (DMC) forma un azeótropo con el metanol (Hu & Cheng, 2017, p. 195).

La destilación por oscilación de presión, la destilación azeotrópica y la destilación extractiva son técnicas que se aplican con la finalidad de separar mezclas azeotrópicas, las dos últimas necesitan de la introducción de un agente arrastrador de masa adicional (MSA). En la actualidad se utilizan algunos arrastradores orgánicos en la industria de procesamiento químico para la separación del azeótropo carbonato de dimetilo (DMC)-metanol por destilación extractiva, los cuales pueden ser fenol oxalato de dimetilo y anilina (Hu & Cheng, 2017, p. 195).

Existen tres métodos para la obtención de carbonato de dimetilo (DMC) a escala industrial los cuales son: proceso de metanol-fosgeno, producción a través de la reacción de transesterificación

de metanol y etilen carbonato en el cual se hacen uso de catalizadores ácidos o básicos, y la carbonilación oxidativa de metanol, se está estudiando la posibilidad de obtenerlo de la urea y metanol las cuales son materias primas de bajo costo (Capeletti y & Sedran, 2012. p. 1).

1.2. Planteamiento del problema

Dentro de la industria de procesos químicos, para la obtención de la pureza de un producto, se aplican procesos de separación y uno de los más utilizados es la destilación, misma que se basa en la diferenciación de las composiciones entre las fases líquida y vapor. Así, los procesos de destilación convencionales son utilizados para mezclas ideales o que posean un comportamiento de equilibrio vapor-líquido casi ideal, pero si la mezcla tiene un comportamiento de equilibrio vapor-líquido no ideal pueden llegar a formar azeótropos, que es una mezcla de dos o más componentes químicos con características idénticas de fases líquidas y de vapor en equilibrio. Considerando que existen algunos procesos especiales de destilación, incluyendo la destilación extractiva y la destilación por oscilación de presión, ambos procesos son eficaces para separar azeótropos.

El carbonato de dimetilo (DMC) es un producto químico ecológico y biodegradable, se utiliza ampliamente en la industria química como sustituto para reemplazar el sulfato de dimetilo (DMS) y los haluros de metilo en las reacciones de metilación, o como agente de carbonilación en las reacciones de este tipo. Existen varias maneras de preparar el carbonato de dimetilo (DMC), como la metanólisis de la urea y la síntesis directa del carbonato de dimetilo (DMC) a partir del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH). Sin embargo, la metanólisis de la urea para el carbonato de dimetilo (DMC) sufre de algunos problemas tales como: baja selectividad de producción y alta proporción molar de metanol (MeOH) a urea. Otra forma de obtención es la reacción de transesterificación donde, el carbonato de propileno (PC) forma un azeótropo homogéneo con el reactivo metanol (MeOH); por lo tanto, es necesario separar la mezcla del carbonato de dimetilo (DMC) y el azeótropo de metanol (MeOH); para ello se han propuesto técnicas y procesos como: la separación por adsorción, la destilación extractiva, la cristalización a baja temperatura, la destilación por oscilación de presión y la impregnación de membrana. Entre estos métodos, la destilación por oscilación de presión se considera como uno de los procesos más eficaz, económico y respetuoso con el medio ambiente.

Si analizamos de manera superficial el proceso de destilación y su método de cálculo, se determina que para el desarrollo del mismo se requieren de datos como: equilibrio de mezclas binarias, ternarias o múltiples, cuya obtención manual genera retardos considerables en el proceso; en tal virtud, se propone la utilización de herramientas interactivas de simulación y la aplicación de inteligencia artificial para predecir el comportamiento de los procesos industriales. El modelado de redes neuronales artificiales y la simulación de procesos es una forma actual de

comprender y mejorar los procesos para satisfacer las crecientes demandas de eficiencia, seguridad y medio ambiente. La simulación se ha convertido en una importante tecnología en la toma de decisiones, la ingeniería y las operaciones, que cubre toda la vida útil de un sistema de producción. En la actualidad, el uso de simuladores para el modelado y diseño de procesos es 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 investigación, desarrollo e innovación (I+D+i) en diferentes plantas de producción (Rosario, 2020, p.1). Entre las ventajas del modelado y simulación de procesos industriales se destaca la reducción del costo de capital mediante un diseño óptimo, la reducción del tiempo de diseño, puesta en servicio y puesta en marcha, reducción del costo, tamaño y complejidad de la planta piloto, mejora de la productividad y la eficiencia mediante la optimización de materiales y energía, mayor conocimiento del proceso y confianza en la toma de decisiones, ayuda en la capacitación del personal, permite analizar la vida útil de los equipos, mejora de la gestión ambiental y de seguridad, entre otros (ESSENCE, 2021, párr.2).

De acuerdo al problema y las ventajas que representa la simulación y diseño de redes neuronales artificiales, el presente proyecto de titulación propone predecir la composición de carbonato de dimetilo (DMC) mediante redes neuronales artificiales a partir de la simulación de su proceso de síntesis a través de un software libre para procesos químicos de código abierto DWSIM, los resultados que se obtengan de la modelación del sistema se compararán con los proporcionados en un referente bibliográfico de alto impacto, lo cual permitirá establecer la eficiencia del proceso.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Predecir la composición de carbonato de dimetilo mediante redes neuronales artificiales a partir de la simulación de su proceso de síntesis.

1.3.2. Objetivos Específicos

- Simular el proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) en el software de código abierto DWSIM.
- Validar el proceso simulado mediante la comparación de los resultados obtenidos con los proporcionados en un referente bibliográfico.
- Diseñar una red neuronal artificial capaz de predecir la composición del carbonato de dimetilo (DMC) en Matlab.
- Validar la red neuronal artificial mediante un análisis estadístico.

1.4. Justificación del proyecto

El proceso de destilación reactiva a partir del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH), permite obtener carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG). El primer producto carbonato de dimetilo (DMC) forma un azeótropo con el reactivo metanol (MeOH), por lo que, es necesario separar la mezcla azeotrópica mediante la destilación por oscilación de presión, lo que permitirá obtener carbonato de dimetilo (DMC) con un porcentaje aceptable de pureza y reducir energía en el proceso.

Por tal razón, la presente propuesta tiene como objetivo predecir la composición de carbonato de dimetilo (DMC) mediante redes neuronales artificiales a partir de la simulación de su proceso de síntesis y los resultados que se obtengan de la modelación del sistema se compararán con los proporcionados en un referente bibliográfico de alto impacto, lo cual permitirá establecer la eficiencia del proceso.

Con la simulación de procesos industriales, se dota tanto a los estudiantes como a los profesionales de la Ingeniería Química de herramientas tecnológicas que les permitirán tener una visión preliminar del comportamiento de procesos químicos lo cual les facilitará el análisis y posterior toma de decisiones. Al ser DWSIM una multiplataforma de código abierto, la información y resultados a obtener del presente proyecto de titulación, serán de fácil acceso para ser utilizados como guía en el desarrollo de futuras investigaciones.

1.5. Alcance

En el presente trabajo de titulación se predice la composición de carbonato de dimetilo (DMC) mediante redes neuronales artificiales a partir de la simulación de su proceso de síntesis, a través de una destilación reactiva (RD), la cual presenta una reacción entre el carbonato de propileno (PC) y metanol (MeOH), para producir carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG), cuyo destilado pasará a una columna de destilación por oscilación de presión para separar el azeótropo carbonato de dimetilo (DMC) y metanol (MeOH), donde este último será recirculado a la columna de destilación reactiva (RD).

La simulación se llevará a cabo mediante el uso del software de procesos químicos DWSIM, con lo cual se podrá validar el proceso químico mediante el error porcentual obtenido en los flujos representativos, se generará una base de datos mediante la manipulación de variables del proceso como la temperatura de alimentación, la relación de reflujo y presión en la columna de destilación reactiva, así como la relación de reflujo y presión en la columna de destilación por oscilación de presión, cuya base de datos es utilizada para el diseño de la red neuronal artificial en Matlab destinada a predecir el flujo másico de propilenglicol y de carbonato de dimetilo, con la finalidad de obtener resultados sin volver a simular en DWSIM.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del Arte

La detección temprana de anomalías ayuda a evitar pérdidas significativas en cuanto a la degradación del producto, daños en la maquina y problemas de salud humana que se pudieran presentar, Syed et al (2007) desarrollan una Red Neuronal Artificial con la finalidad de reconocer anomalías en la columna de destilación, por ello se plantea una columna de destilación etanol-agua, las fallas se generan por la variación de la velocidad y composición de la alimentación y el rendimiento del hervidor donde los efectos de estas fallas se verán reflejados en cambios de la composición y temperatura del destilado y la caída de presión, los cuales serán manejados como entradas y salidas respectivamente, la RNA utilizó el algoritmo Levenberg-Marquardt y 8 neuronas en la capa oculta obteniendo un error cuadrático medio de 0.04.

Luyben, (2012) realiza la destilación por oscilación de presión en mezclas azeotrópicas homogéneas de punto de ebullición mínimo y máximo. Con los sistemas de ebullición mínima, las corrientes de destilado se reciclan. Con sistemas de ebullición máxima, las corrientes de fondo se reciclan. Reciclar las corrientes de destilado consumiría más energía que reciclar las corrientes de fondo ya que un reciclado de destilado debe hervirse en la columna, mientras que una corriente de reciclaje de fondos no requiere hervir. Sin embargo, los resultados muestran que no existe una diferencia significativa entre los dos sistemas a lo que se refiere al efecto de la sensibilidad a la presión y el consumo de energía.

Qingtao et al, (2013) desarrollan un modelo de columna de destilación por deshidratación de solvente industrial (SDDC), la eficiencia de Murphree representa la capacidad de separación de una bandeja de destilación y el rendimiento del modelo SDDC el cual depende de la precisión del valor de la eficiencia de Murphree. Debido a que hay muchas condiciones de operación que tienen un efecto no lineal en la eficiencia de Murphree, es difícil determinar su valor por lo cual se propuso un nuevo modelo híbrido el cual combina un mecanismo de destilación con una red neuronal. En el modelo híbrido SDDC, la red neuronal se emplea para modelar la relación no lineal entre las condiciones de operación y la eficiencia de Murphree, que está incrustada en el modelo mecanicista SDDC. La RNA se desarrolló con el algoritmo matemático Levenberg-Marquardt, con dos neuronas en la capa oculta, teniendo como única salida la eficiencia del plato #21 mientras que las entradas son la temperatura de la bandeja #10 y la temperatura de la bandeja #57, el error cuadrático medio obtenido fue de 9×10^{-2} .

Johannes et al, (2013) simulan la transesterificación de carbonato de propileno (PC) con metanol (MeOH) para producir los dos valiosos productos, carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol

(PG) está asociada con un equilibrio químico desfavorable y un comportamiento termodinámico complejo, lo cual da como resultado un proceso desafiante y costoso que se utiliza actualmente para su producción, sin embargo, esto se ve solucionado por la implementación de una destilación reactiva con el paquete termodinámico UNIQUAC. El modelo de etapa de no equilibrio se lo validó con éxito y se lo aplicó en la realización de un análisis de proceso el cual indica las tendencias tanto de las conversiones de reactivos como de la pureza del producto. Los resultados de la simulación demostraron la opción de lograr altas conversiones de carbonato de propileno (PC) mientras se recupera una mezcla azeotrópica de carbonato de dimetilo (DMC) y metanol (MeOH) en el destilado.

Osuolale & Zhang, (2014) utilizan redes neuronales para el modelado y optimización de columnas de destilación que incorpora la segunda ley de la termodinámica por lo cual se estudia la columna de separación de metanol-agua y benceno-tolueno. El diseño de la RNA es de 17 neuronas y 15 neuronas en la capa oculta en cada mezcla binaria, con la finalidad de determinar la eficiencia energética de la columna sin la necesidad de calcular las entalpías y las entropías de la corriente, por lo cual se obtuvo un MSE de 0.0060 en la fase de entrenamiento para la mezcla etanol-agua y un 0.0031 para la mezcla de metanol-agua.

Sharma & Singh, (2014) analizan múltiples reacciones del sistema, hacen que la síntesis del proceso TAME por columnas de destilación reactiva sea más complicada, que exhibe un comportamiento altamente no lineal. Por lo cual es de interés manejar un problema de control tan difícil haciendo uso de las redes neuronales artificiales, cuya base de datos se encuentra conformada por 2001 muestras para el entrenamiento y 1001 muestras para la fase de prueba, donde se encuentra conformada solo por una entrada, una salida y 7 neuronas en la capa oculta. Cuya red neuronal artificial tiene un error cuadrático medio de 0.00060385 y una regresión lineal de $R^2 = 0.9994$ lo cual demuestra que la RNA se encuentra bien diseñada.

Iqbal & Ahmad (2016) simulan una columna de destilación con oscilación de presión para la purificación del etanol del sistema binario etanol agua, mediante el uso del programa Aspen plus y modelos de coeficientes de actividad disponibles como el modelo de Wilson-RK con parámetros binarios, con lo cual se logró tener resultados satisfactorios para una mezcla de etanol al 20% de composición molar a 1 atm y 90°C a partir de un caudal de 100 kmol/h. Los parámetros de ajuste incluyen la relación D/F y la relación de reflujo de las dos columnas para obtener una pureza del agua del 99,5% en moles del fondo de la columna de baja presión (LPC) y la pureza del etanol del 99,7% en moles del fondo de la columna de alta presión (HPC).

Gaurav et al, (2016) menciona que, para hacer frente a los estrictos estándares de emisión y calidad del producto, las industrias de procesos son estrictas para el mantenimiento de la calidad del producto y la emisión de residuos. Para las industrias de procesos, los analizadores de hardware en línea son una alternativa muy costosa para analizar la calidad del producto, por lo cual se opta por los sensores suaves en línea que son económicos y eficientes en su uso, entonces,

se ha desarrollado un sensor suave basado en una RNA para el proceso de esterificación del acetato de butilo donde se ha utilizado como entradas las temperaturas de las bandejas de la columna y concentración de acetato n-butilo en los hervidores mientras que la salida es la fracción molar de acetato de n-butilo, la red fue entrenada utilizando el algoritmo matemático Levenberg-Marquardt a partir de una base de datos de 55 conjuntos, la RNA tiene un MSE de $5.65 \cdot 10^{-6}$ y una regresión lineal de 0.963.

Hu & Cheng (2017) simulan la separación de carbonato de dimetilo (DMC) con el metanol (MeOH), es fundamentalmente difícil de llevarlo a cabo debido a que el carbonato de dimetilo (DMC) forma un azeótropo con el mismo. Por lo cual, es de interés desarrollar sistemas alternativos de separación de MeOH / DMC por destilación extractiva, para ello se lleva a cabo una selección preliminar de entrantes mediante modelos predictivos UNIFAC-DMD y COSMO-SA. Donde se eligieron doce candidatos potencialmente prometedores de 35 disolventes. Se permitió que estos agentes separadores de masas (MSA) midieran experimentalmente los coeficientes de actividad limitante del metanol (MeOH) y del carbonato de dimetilo (DMC). Con lo cual se identificaron dos disolventes: salicilato de metilo y benzoato de etilo. Los resultados de la simulación revelan que la eficacia del salicilato de metilo como MSA supera a todos los demás agentes de arrastre.

Tabla 1-2: Evolución de la investigación

Tema	Autor	Año
Red neuronal artificial para la detección de anomalías en la columna de destilación. Modelado, diseño y simulación de sistemas	Syed et al	2007
Destilación por oscilación de presión para azeótropos homogéneos de mínimo y máximo punto de ebullición	Luyben	2012
Simulación y análisis de columna de destilación por deshidratación basada en mecanismo de destilación integrado con red neuronal artificial	Qingtao et al	2013
Síntesis de carbonato de dimetilo y propilenglicol en una columna de destilación reactiva a escala piloto: investigación experimental, modelado y análisis de procesos	Johannes et al	2013
Control y optimización energéticamente eficiente de la columna de destilación utilizando una red neuronal artificial	Osuolale & Zhang,	2014
Red neuronal y control predictivo de la columna de destilación reactiva de terc-amil metil éter	Sharma & Singh	2014
Destilación por oscilación de presión de una mezcla azeotrópica: un estudio de simulación	Iqbal & Ahmad	2016
Modelo de sensor suave basado en redes neuronales artificiales para columna de destilación reactiva	Gaurav et al	2016
Desarrollo de sistemas alternativos de separación de metanol / carbonato de dimetilo mediante destilación extractiva: un enfoque holístico	Hu & Cheng	2017

Realizado por: Iza, Yolida, 2021.

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Compuestos químicos

2.2.1.1. Carbonato de propileno (PC)

El carbonato de propileno (PC) es un compuesto de gran interés en diferentes industrias como: química, farmacéutica, automotriz y electrónica. Es un solvente polar transparente excepto de COV, además tiene altos puntos de ebullición y de inflamación, un nivel de baja toxicidad y un suave olor parecido al del éter. Este compuesto químico es estable en la mayoría de las condiciones y no es higroscópico ni corrosivo, por lo general se lo usa en procesos donde se requiera un producto blanco como el agua o de una alta pureza, como pueden ser los cosméticos, electrónica y el reciclaje de material. Puede utilizarse como isocianato y solvente de limpieza de resina de poliéster insaturado, reductor de viscosidad en recubrimientos, extracción de CO_2 solvente, electrolito en baterías de litio, aditivo polar para gelificantes de arcilla, aglutinante de fundición catalizador y portador y limpiador de tintes textiles (Bährle, et al., 2011, pp. 1-2).

2.2.1.2. Carbonato de dimetilo (DMC)

El carbonato de dimetilo (DMC) es un carbonato lineal, el cual se lo ha estudiado como aditivo de combustibles ya que posee un elevado contenido de oxígeno (53%), una baja toxicidad y rápida biodegradabilidad, sin embargo, no se lo ha utilizado comercialmente, su aplicación como aditivo de gasolina es superior al metil ter-butyl éter (MTBE) debido a que es más eficaz en la disminución de las emisiones de CO, NOx e hidrocarburos y además proporciona un aumento en el índice de octano del 14.6%. El carbonato de dimetilo (DMC) también es utilizado como aditivo con la finalidad de reducir emisiones de hollín en los motores de diésel, con una adición de 10% de carbonato de dimetilo (DMC) conduce una reducción significativa de hollín de entre 35-50% (Polo, 2016, p. 4).

2.2.1.3. Propilenglicol (PG)

El propilenglicol (PG) es un compuesto líquido claro, muy higroscópico, incoloro, muy viscosos y que no se cristalizan con facilidad sin embargo se logran solidificar en masas vítreas al enfriarse además es miscible con agua y otros disolventes polares como alcoholes y acetona sin embargo es un grandioso solvente en varias sustancias químicas orgánicas polares como fenoles, alcoholes, colorantes, productos naturales y algunas resinas. El propilenglicol (PG) se encuentra en la lista de la FDA como una sustancia alimentaria, considerada segura para su consumo, el porcentaje

permitido va en el intervalo de 2% al 97%. Tiene diferentes usos como aceite de fragancias, lubricante íntimo, productos anticongelantes, productos de revestimiento, pintura de dedos, lubricantes y grasas. Además es utilizado como una alternativa al etilenglicol en sistemas anticongelantes ya que reduce el punto de congelación del agua (García, 2019, pp. 1- 4).

2.2.2. Azeótropo

Se considera como azeótropo a una mezcla líquida de dos o más compuestos químicos que presentan un similar punto de ebullición, cuando estos pasan al estado de vapor (gaseoso) su comportamiento es la de un compuesto puro, por lo tanto resulta imposible realizar la separación de estos compuestos mediante una destilación simple (Moreno Cárcamo, 2010, p.18).

2.2.3. Destilación reactiva

En 1920 surge la idea de combinar en un mismo equipo la destilación y la reacción química por parte de Backlaus mediante trabajos experimentales, quien pudo llevar a cabo la creación de varias patentes para la producción de esteres, debido a que sus reacciones son sencillas y ocurren en la fase líquida a una presión atmosférica (Daza; et al, 2006, pp. 129-130).

La destilación reactiva (RD) no es considerada como una alternativa, si no que su implementación representa atractiva por la disminución de consumo de energía, costos de equipos y la disminución del espacio físico requerido para los equipos del proceso, cuya magnitud depende del proceso químico que se esté tratando, sin embargo si presenta reacciones complejas y además se llevan a cabo en fase gaseosa o en condiciones de presión extrema no puede resultar conveniente la implementación de la destilación reactiva (Daza; et al, 2006, pp. 129-130).

2.2.4. Destilación por oscilación de presión

La destilación por oscilación de presión tiene su aplicación en la separación de mezclas azeotrópicas homogéneas mediante la implementación de dos columnas de destilación las cuales funcionan a diferentes presiones (Repke, Forner & Klein, 2005, p.1151). Este proceso de destilación funciona como una alternativa a la destilación azeotrópica y la destilación extractiva. Debido a que presentan varias ventajas frente a los antes mencionados procesos como: logra ahorrar una cantidad significativa de energía, reduce el costo anual total del proceso, no requiere compuestos químicos adicionales como solventes (Repke, Forner & Klein 2005, p.1151) y por último es considerado como uno de los procesos más amigables con el ambiente y eficaz (Huang et al., 2017, p.3).

2.2.5. Descripción del proceso estudiado

En el siguiente proceso, en la torre de baja presión (columna de destilación reactiva) se introduce en la parte superior 2508 kg/h de carbonato de propileno (PC) y 630 kg/h de metanol (MeOH) (corriente F1), en la parte inferior ingresa 1425 kg/h de metanol (MeOH) fresco (corriente F2) y, por último, un flujo reciclado con una concentración alta de metanol (MeOH) en la parte media de la columna. La corriente F1 se envía a la etapa número 5, la corriente F2 a la etapa número 45 y el flujo de recirculación ingresa a la etapa número 16. Trabaja a una presión de 1 atm y una relación de reflujo de 0.87. El producto superior de la columna de destilación reactiva es una mezcla de producto carbonato de dimetilo (DMC) y metanol (MeOH) y como residuo se generó propilenglicol (PG). El destilado de la columna de baja presión ingresa a la etapa número 33 de la columna de alta presión, la misma que trabaja a 11 bar y una relación de reflujo de 1.37, produciendo así, 2211.6 kg/h de carbonato de dimetilo (DMC) de alta pureza en los fondos y un flujo de destilado cuya composición es cercana a la del azeótropo. El destilado se recicla de nuevo a la columna de baja presión (Huang et al., 2017, p.5).

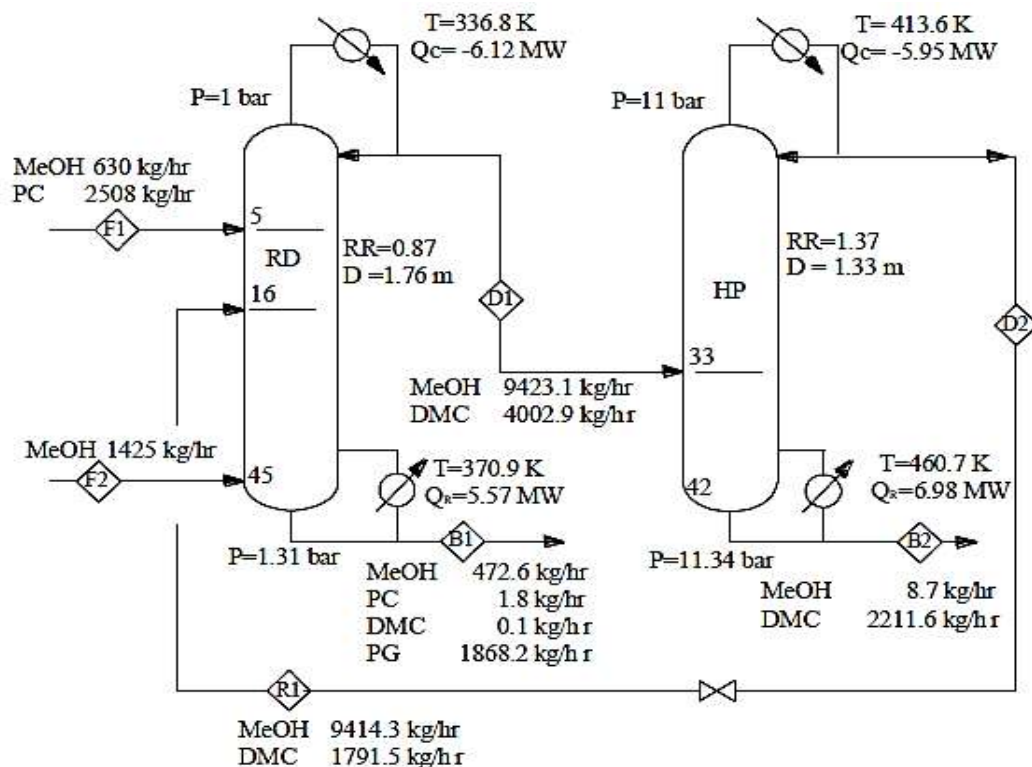


Figura 1-2: Diagrama de flujo optimizado para la producción de DMC.

Fuente: (Huang et al., 2017, p.6).

Tabla 2-2: Especificaciones de columna para diseños originales y óptimos

	Original design ^[21]		Optimized design ^(This work)	
	RD	HP	RD	HP
Total stage	35	23	45	42
Pressure (bar)	1	11	1	11
Feed stage	NF ₁ =10	NF=10	NF ₁ =5	NF=33
	NF ₂ =30		NF ₂ =45	
	NF _R =30		NF _R =16	
Reflux ratio	2.34	2.5	0.87	1.37
Condense duty (MW)	8.03	(5.99)	6.12	(5.57)+0.38
Reboiler duty (MW)	(5.99)+2.28	6.30	(5.57)	6.98

Fuente: (Huang et al., 2017, p.11).

2.2.6. DWSIM – Chemical Process Simulator

DWSIM es un simulador de procesos químicos de libre uso, que presenta una interfaz gráfica sencilla y fácil de usar e instalar, además posee diversas características que anteriormente se encontraban disponibles en simuladores comerciales cuyos costos para adquirirlos son elevados. Al considerar sus beneficios, se ha optado por desarrollar el presente trabajo de titulación en DWSIM siendo su finalidad el de obtener una simulación óptima del proceso de estudio. De esta manera, la multiplataforma se encargará de ayudar a los estudiantes de ingeniería química e ingenieros químicos a comprender mejor el comportamiento de los procesos químicos industriales mediante la aplicación de un sin número de rigurosos modelos termodinámicos y de operaciones unitarias (DWSIM, 2020, párr.3). Por lo cual, se podrá reproducir virtualmente el proceso de síntesis para la obtención de carbonato de dimetilo (DMC) y la adquisición de datos para la validación del proceso, y su determinación de la eficiencia y diseño de la red neuronal artificial.

2.2.6.1. Características

DWSIM tiene una lista completa de varias operaciones de la unidad (estado estable), operaciones unitarias (dinámica), utilidades, herramientas, modelos termodinámicos, extras y análisis de procesos (DWSIM, 2020, párr.5).

2.2.6.2. Interfaz plataforma DWSIM

Al utilizar Windows como base para la ejecución del software DWSIM, se presentan dos interfaces gráficas (GUI) que se pueden seleccionar las cuales son: Classic que se basa en Windows Forms y multiplataforma o IU “Nueva” (DWSIM, 2020, párr.7).

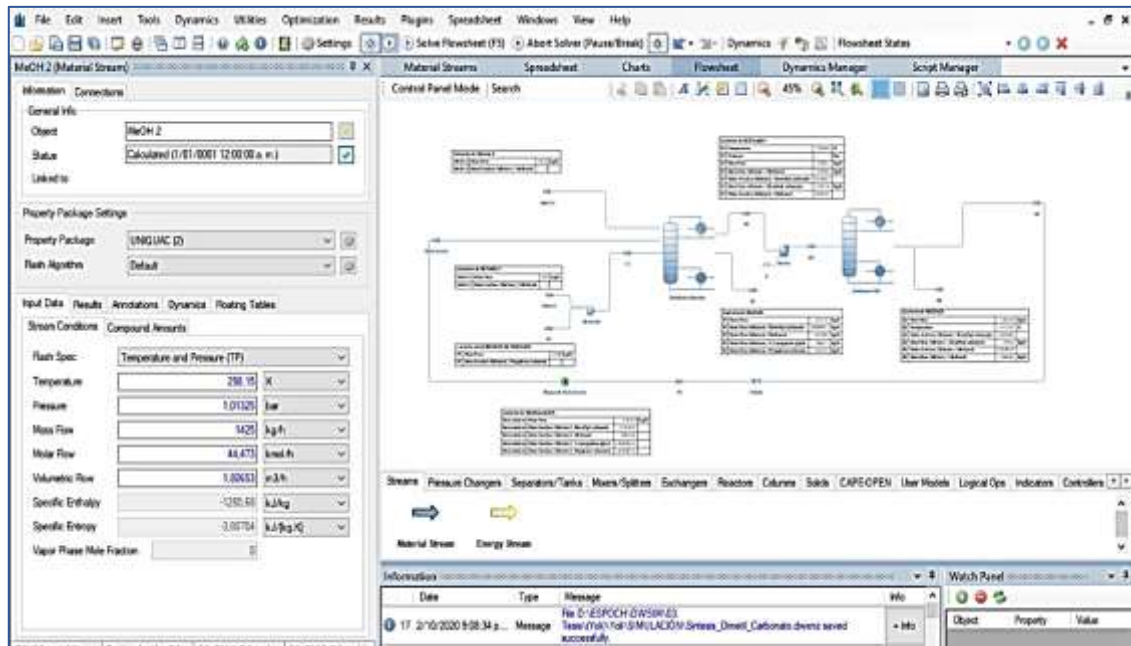


Figura 2-2: Interfaz DWSIM

Realizado por: Iza, Yólida. 2021.

2.2.6.3. Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos

El modelado y la simulación de procesos químicos es de gran utilización como una herramienta de diseño en el desarrollo de plantas químicas y además funciona como un método para evaluar diferentes opciones de diseño. Los estándares de interfaz CAPE-OPEN son ejecutados para permitir la implementación y utilización de componentes de modelado de procesos en varios entornos de modelado de procesos (Leino, 2016, p.1).

CAPE-OPEN son estándares uniformes que tienen como finalidad interconectar componentes del software de modelado de procesos ejecutados, en especial para el diseño y operación de procesos químicos, los estándares de CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y disponibles de forma gratuita (DWSIM, 2019).

DWSIM admite una gran cantidad de funciones CAPE-OPEN, las cuales son:

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

Puede hacer uso de calculadoras de propiedades y equilibrio termodinámico CAPE-OPEN externas como paquetes de propiedades en DWSIM. La implementación se la lleva a cabo de forma transparente, se asigna los componentes y las fases del paquete de propiedades externas, destinadas a la base de datos interna del programa DWSIM (DWSIM, 2019).

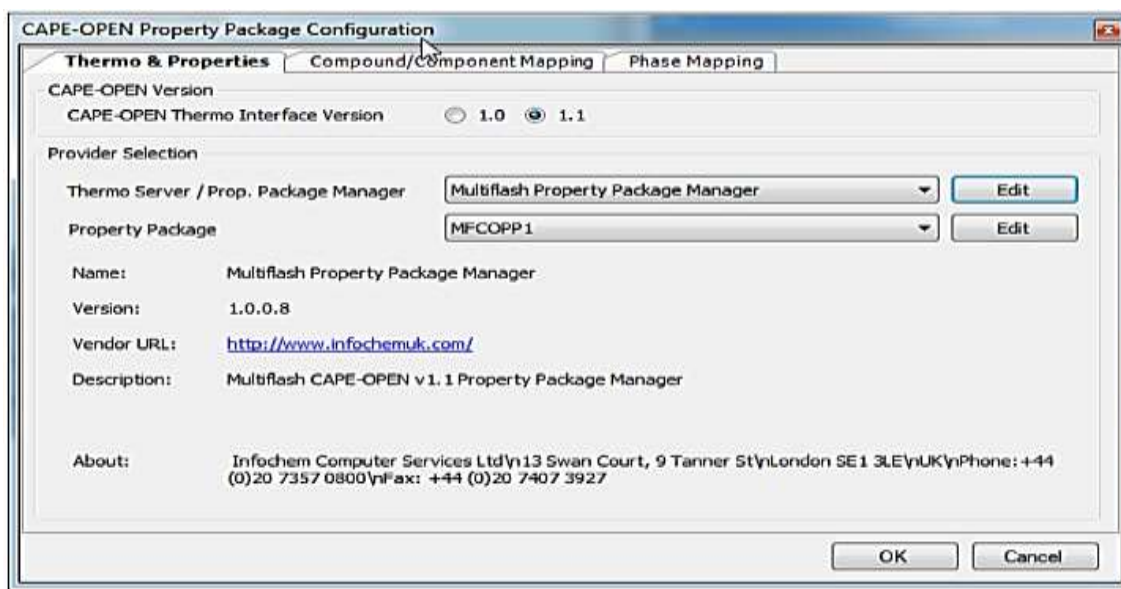


Figura 3-2: Paquetes de propiedades

Fuente: (DWSIM, 2019).

b. Operaciones de la unidad

Las operaciones de la unidad de CAPE-OPEN son capaces de ser agregadas a los diagramas de flujo DWSIM y además conectarse a las corrientes de energía y material (salida y entrada) de la misma manera que de las operaciones normales de la unidad DWSIM. Se puede hacer uso del reactor CAPE-OPEN a partir de las interfaces de reacción del mismo programa, encargándose de las reacciones mediante el administrador de reacciones (DWSIM, 2019).

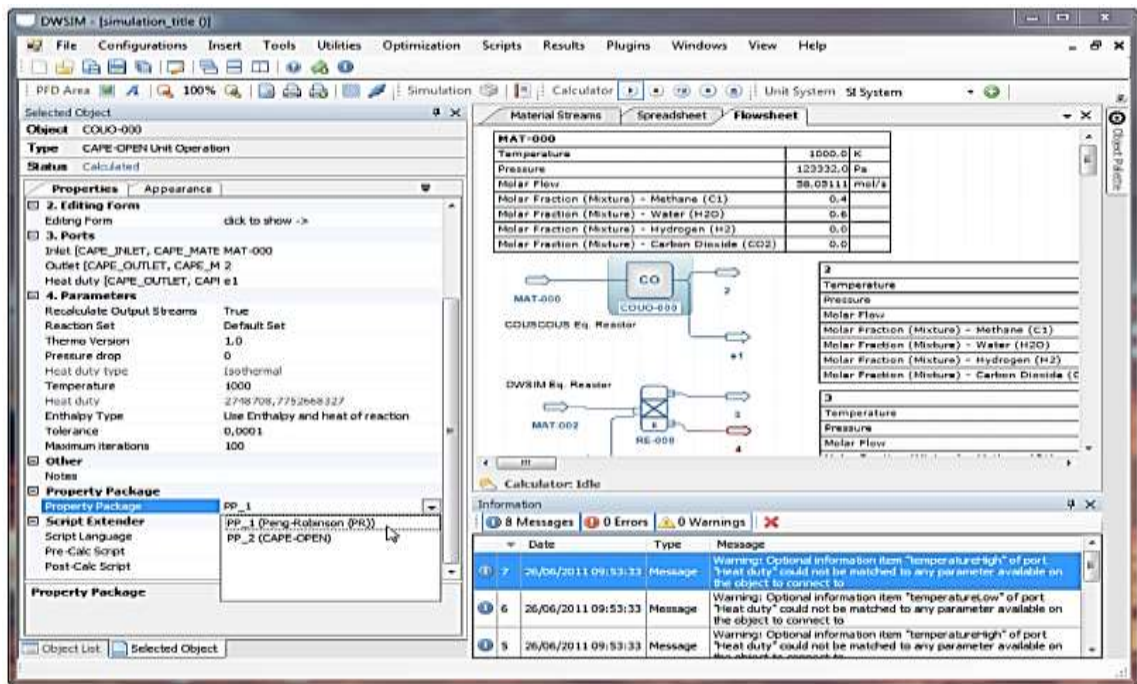


Figura 4-2: Operaciones de la unidad

Fuente: (DWSIM, 2019).

2.2.7. Inteligencia Artificial

La inteligencia artificial (IA) es considerada como una disciplina académica que se encuentra relacionada con los fundamentos de la computación con la finalidad de emular alguna facultad intelectual humana transformándolo en sistemas artificiales sin embargo estos requieren de una gran cantidad de secuencia de instrucciones para que se detallen las acciones que debe ejecutar la computadora con la finalidad de resolver el problema planteado, la secuencia de instrucciones constituye la estructura algorítmica de la IA (Raúl Benítez, Gerard Escudero & Samir Kanaan, 2013, p.3).

2.2.7.1. Neurona Artificial

La neurona artificial es un dispositivo procesador sencillo que funciona a partir de vectores de entrada, capas ocultas y salidas, los canales de entrada de la información son considerados como las dendritas de la neurona, el soma se encarga de integrar las señales de entrada para obtener una respuesta convirtiéndose en las salidas los cuales son obtenidos mediante funciones de transferencia no lineal, lo que significa a que es el órgano de computo encargado de los cálculos respectivos, el axón corresponde al canal de salida el cual envía la información a otras neuronas. La intensidad de la interacción entre dos neuronas es considerada como el peso sináptico que las relaciona. (Brío, 2015, p.156).

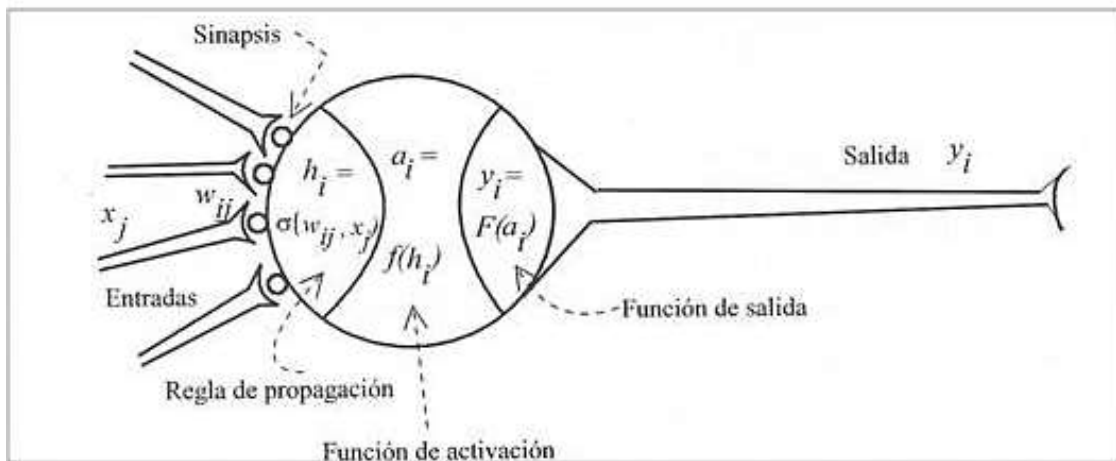


Figura 5-2: Neurona Artificial

Fuente: (Bertona, 2005, p.7).

Neurona biológica	Neurona artificial
- Señales que llegan a las sinapsis.	- Entradas a la neurona.
- Carácter excitador o inhibitorio de las sinapsis de entrada.	- Pesos de entrada.
- Estímulo total de la neurona.	- $Net_j = \sum_{i=0}^N w_{ij}(t) \cdot x_i(t)$.
- Activación o no de la neurona.	- Función de activación.
- Respuesta de la neurona	- Función de salida.

Figura 6-2: Analogía entre la neurona biológica y la neurona artificial

Fuente: (Raquel Flórez López, 2008, p.19).

2.2.8. Redes Neuronales Artificiales (RNA_s)

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA_s) son aquellos modelos matemáticos de cálculo que se encuentran muy caracterizados por el uso de algoritmos muy eficientes los cuales trabajan de forma masivamente paralela y además llevan a cabo la ejecución de tareas cognitivas tales como el aprendizaje de patrones, clasificación u optimización (Raquel Flórez López, 2008, p.17).

2.2.8.1. Arquitectura de las Redes Neuronales Artificiales

La arquitectura de las Redes Neuronales Artificiales (RNA_s) o topología es aquella organización y disposición de las neuronas en la RNA las cuales forman capas de procesadores que se encuentran interconectadas unas con otras con la ayuda de sinapsis unidireccionales. La arquitectura de la RNA depende de la complejidad del problema que se quiere solucionar (Raquel Flórez López, 2008, p.29):

a. Número de capas del sistema

- Red monocapa: esta se encuentra conformada por una sola capa de neuronas las cuales son encargadas de proyectar la entrada a una capa de neuronas de salida donde se realizan varios cálculos matemáticos (Nacelle, 2009, p.5).
- Red multicapa: es aquella que está formada por un conjunto de capas intermedias también conocidas como capas ocultas, las cuales se encuentran entre la capa de entrada y la de salida. Además este tipo de RNA tiene la posibilidad de estar total o parcialmente conectada (Nacelle, 2009, p.5).
- Red recurrente: en esta RNA existen lazos de realimentación. Cuyos lazos pueden ser entre neuronas de diferentes capas, neuronas de la misma capa o, entre una misma neurona (Nacelle, 2009, p.5).

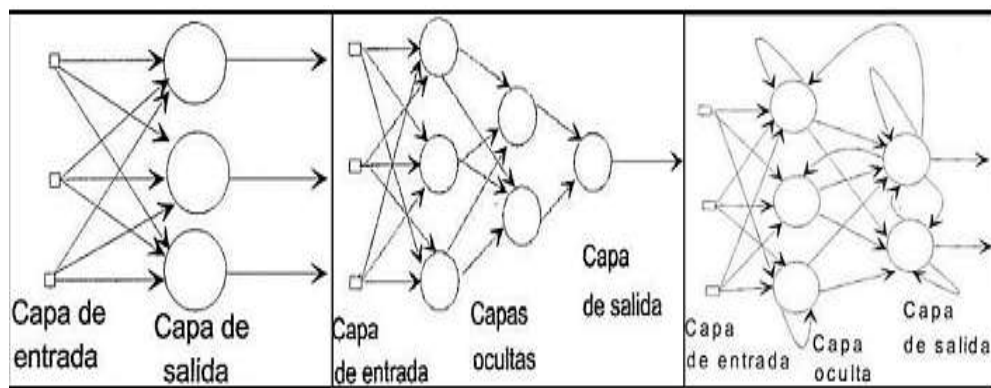


Figura 7-2: Red monocapa, Red multicapa, Red recurrente

Fuente: (Nacelle, 2009, p.5).

b. Según el flujo de datos en la red

- Red unidireccional o propagación hacia adelante (feedforward): los datos de la RNA circulan de manera de un único sentido, lo que quiere decir es que las neuronas de entrada circulan hacia las neuronas de salida de la red (Raquel Flórez López, 2008, p.29).
- Red de propagación hacia atrás (feedback): en este caso las salidas de las neuronas tienen la posibilidad de servir de entradas a unidades del mismo nivel o de anteriores niveles (Raquel Flórez López, 2008, p.29).

2.2.8.2. *Redes Neuronales Artificiales (RNA_s) según el tipo de aprendizaje*

a. Aprendizaje supervisado

El objetivo de este aprendizaje supervisado es la de obtener la salida que se requiera, para ello se presenta a la red un conjunto de patrones y la salida deseada, de esta manera interactiva la red ajustando sus pesos hasta lograr obtener los resultados, por lo cual se recepta la información de los errores que se han cometido en cada paso, gracias a aquello la red es capaz de estimar relaciones entrada/salida sin necesidad de proponer alguna forma funcional de partida de la RNA (Nacelle, 2009, p.6).

b. Aprendizaje no supervisado o auto organizado

El sistema de aprendizaje no supervisado no necesita de un vector de salidas deseadas, por lo cual ya no se ejecutan comparaciones entre las salidas reales y las salidas predichas. El conjunto de vectores de entrenamiento está formado solo por vectores de entrada y el algoritmo matemático de entrenamiento es el que se encarga de modificar los pesos de la red de tal manera que se generen vectores de salida consistentes (Olabe, 2016, p.17).

c. Aprendizaje híbrido

Como su nombre lo dice es aquel que se encuentra conformado la RNA con los dos tipos de aprendizaje básicos, el supervisado y autoorganizado, por lo general en distintas capas de neuronas (Nacelle, 2009, p.6).

d. Aprendizaje por refuerzo

En el aprendizaje por refuerzo, se le presenta a la red un conjunto de patrones de entrada y se le indica a la red si la salida que se obtenga es “o” la respuesta no es correcta. Sin embargo, no se le proporciona el valor de la salida esperada. Este tipo de aprendizaje es muy útil en aquellos casos en que se desconoce cuál es la salida exacta que debe proporcionar la red (Bertona 2005, p.11).

2.2.8.3. Flujo de trabajo típico para diseñar redes neuronales

La aplicación de la red neuronal artificial es única para cada problema, sin embargo, el desarrollo de la red implica los siguientes pasos:

- Acceder a los datos y prepararlos
- Crear la RNA
- Configurar las entradas y salidas de la red
- Ajustar los parámetros de la red (las ponderaciones y tendencias) para optimizar el rendimiento
- Entrenar la red
- Validar los resultados de la red
- Integrar la red en un sistema de producción (MathWorks, 2020).

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

3.1. Diseño de la investigación

Esta investigación tiene un enfoque predictivo porque se emplean los datos obtenidos por la simulación del proceso de destilación reactiva y la destilación por oscilación de presión a partir del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH) para diseñar una red neuronal artificial capaz de predecir la composición de carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG).

3.2. Tipo de investigación

Aplicativa: la investigación parte del conocimiento obtenido a partir de estudios previos y está encaminada en la simulación del proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) en el software de código abierto DWSIM para diseñar una red neuronal artificial capaz de predecir la composición del carbonato de dimetilo (DMC) en Matlab.

Cuantitativa: ya que se parte de una recopilación sistemática de datos cuantificables, es decir una base de datos obtenidos a partir de la simulación para desarrollar el modelo de predicción y el uso de técnicas estadísticas para comparar y evaluar la capacidad de predicción de la red neuronal artificial.

3.3. Métodos y técnicas de investigación

Método de la modelación: la investigación busca simular un proceso de producción de carbonato de dimetilo (DMC) mediante la destilación reactiva y la destilación por oscilación de presión del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH) para modelar un sistema artificial que permita obtener con precisión la cantidad de carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG) que se obtiene en el proceso al modificar sus principales condiciones de operación.

Método analítico: el proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) se analizará desde un punto de vista sistemático, operativo y comparativo; con la finalidad de mejorar la capacidad de predicción en los resultados.

3.4. Técnicas e instrumentos de recolección de datos primarios y secundarios

3.4.1. Técnicas de recolección de datos

Datos primarios:

- Simulación en software de procesos químicos
- Observación directa de las gráficas de predicción

Datos secundarios:

- Revisiones bibliográficas en libros y artículos de revistas científicas.
- Entrevistas a expertos en simulación y predicción con redes neuronales artificiales

3.4.2. Instrumentos de recolección de datos primarios y secundarios

- DWSIM
- Microsoft Excel
- Matlab

3.4.3. Identificación de variables

3.4.3.1. Variables independientes

- Temperatura de alimentación
- Relación de reflujo en la columna de destilación reactiva
- Presión en la columna de destilación reactiva
- Relación de reflujo en la columna de alta presión
- Presión en la columna de alta presión

3.4.3.2. Variables dependientes

- Flujo másico de Propilenglicol
- Flujo másico de Carbonato de dimetilo

3.4.4. Operación de variables

Tabla 1-3: Variables de la investigación

Tipos de variables	Variable		Unidad
Independientes	Temperatura de alimentación	T_F	K
	Relación de reflujo en la columna de destilación reactiva	RR_{C1}	adimensional
	Presión en la columna de destilación reactiva	P_{C1}	bar
	Relación de reflujo en la columna de alta presión	RR_{C2}	adimensional
	Presión en la columna de alta presión	P_{C2}	bar
Dependientes	Flujo másico de propilenglicol	PG_{B1}	kg/h
	Flujo másico de carbonato de dimetilo	DMC_{B2}	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

3.5. Procedimiento de investigación

La metodología a seguir está comprendida en las siguientes etapas, descritas en la siguiente figura.

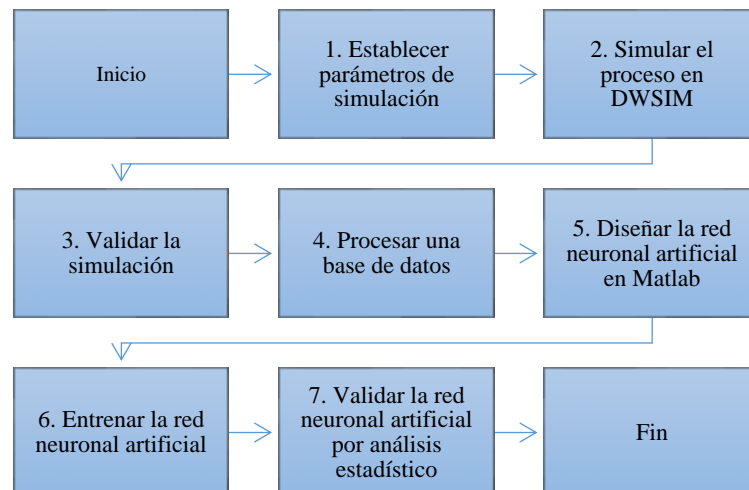


Figura 1-3: Metodología de investigación

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

3.5.1. Establecimiento de parámetros de simulación

Para el desarrollo de la simulación es necesario establecer los principales parámetros operativos, para ello se analiza la investigación realizada por Huang et al (2017) donde se realiza la optimización y control de un proceso de destilación reactiva para la síntesis de carbonato de dimetilo usando Aspen Plus (ver Figura 2-3 y Figura 3-3).

Con base en el artículo anterior se establecerán los parámetros y variables operativas óptimas del proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) a partir del carbonato de propileno (PC) y metanol (MeOH), se simulará el proceso en el software libre DWSIM, y se obtendrá una base de datos validados para entrenar la red neuronal artificial que predecirá el flujo másico de carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG) obtenidos en el proceso.

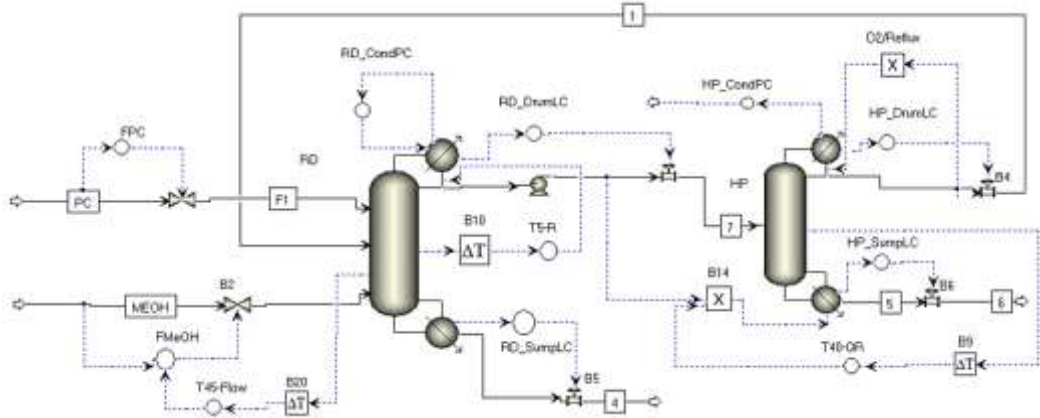


Figura 2-3: Proceso de síntesis de carbonato de dimetilo en Aspen Plus

Fuente: Huang et al., 2017, p.17.

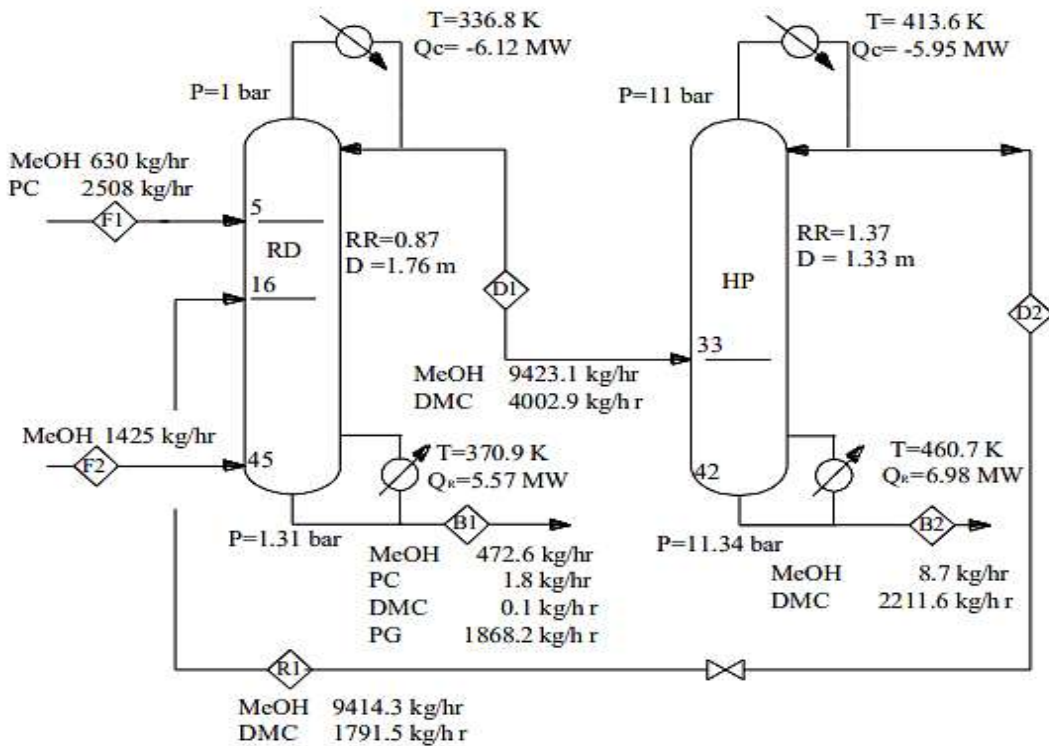


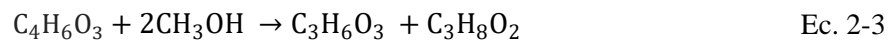
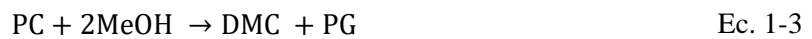
Figura 3-3: Condiciones óptimas para la producción de carbonato de dimetilo

Fuente: Huang et al., 2017, p.6.

3.5.2. Simulación del proceso de producción

3.5.2.1. Reacción cinética

Según Huang et al., (2017) en la producción de carbonato de dimetilo se induce una reacción de transesterificación del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH) para obtener carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG). La reacción de transesterificación reversible en fase líquida considerada es:



3.5.2.2. Modelo termodinámico

El equilibrio de fases de este sistema de reacción es complejo debido a la existencia de una mezcla azeotrópica binaria de DMC y MeOH. Para describir con precisión los equilibrios de fase del sistema Huang utiliza los modelos UNIQUAC y UNIFAC con los cuales se obtienen parámetros para ajustar los datos de vapor-líquido. Según Huang et al., (2017) los puntos de ebullición calculados de los componentes puros y las composiciones azeotrópicas utilizando el modelo UNIQUAC y UNIFAC indican que ambos modelos son adecuados para separar por destilación reactiva y destilación por oscilación de presión el sistema azeotrópico DMC – MeOH.

3.5.2.3. Proceso de destilación

El proceso para la producción de carbonato de dimetilo (DMC) por destilación reactiva se muestra en la Figura 4-3. En este diagrama de flujo, una mezcla del reactivo carbonato de propileno (PC) y metanol (MeOH) se alimenta a la parte superior de la columna de destilación reactiva en el plato 5, y una segunda corriente de metanol (MeOH) y de recirculación rica en metanol (MeOH) se introducen en la parte inferior y media de la columna de destilación reactiva, platos 45 y 16, respectivamente, las condiciones se describen en la Tabla 2-3. El producto superior de la columna de destilación reactiva es una mezcla de producto carbonato de dimetilo (DMC) y no reaccionado metanol (MeOH), mientras que el coproducto propilenglicol (PG) sale del fondo de la columna (B1).

El destilado de la columna de destilación reactiva se alimenta a la columna de alta presión (Destilación PSD), que produce carbonato de dimetilo (DMC) de alta pureza en los fondos (B2) y una corriente de destilado cuya composición es cercana a la del azeótropo. El destilado (corriente D2) se recicla de nuevo a la columna de destilación reactiva para aprovechar la alta

cantidad de metanol (MeOH) y disminuir costos de reactivos en el proceso. Las condiciones de operación en las columnas de describen en la Realizado por: **Iza, Yólida, 2021.**

Tabla 3-3.

Tabla 2-3: Condiciones en las corrientes de alimentación

Parámetro	Valor	Unidad
Paquete de propiedades termodinámicas	UNIQUAC	adimensional
Temperatura	298,15	K
Presión	1,01325	bar
Fracción másica de MeOH (Corriente MeOH1)	630	kg/h
Fracción másica de PC	2508	kg/h
Fracción másica de MeOH (Corriente MeOH2)	1425	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Tabla 3-3: Condiciones de operación en las columnas

Parámetro	Columna de destilación reactiva	Columna de destilación PSD	Unidad
Valor K	DECHEMA	DECHEMA	adimensional
Coefficiente de actividad	UNIFAC	UNIFAC	adimensional
Presión de vapor	Antoine	Antoine	adimensional
Presión del condensador	1	11	bar
Presión del reboiler	1,31	11,34	bar
Número de platos	45	42	adimensional
Platos de alimentación	5, 45	33	adimensional
Plato de recirculación	16	-	adimensional
Relación de reflujo	0,87	1,37	adimensional

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Los resultados para la corriente de destilado y residuo en la columna de destilación reactiva se describen posteriormente (ver **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.-4** y **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.-4**). Para la corriente de destilado y residuo en la columna de destilación por oscilación de presión ver **¡Error! No se encuentra el origen de la r eferencia.-4** y **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.-4** respectivamente.

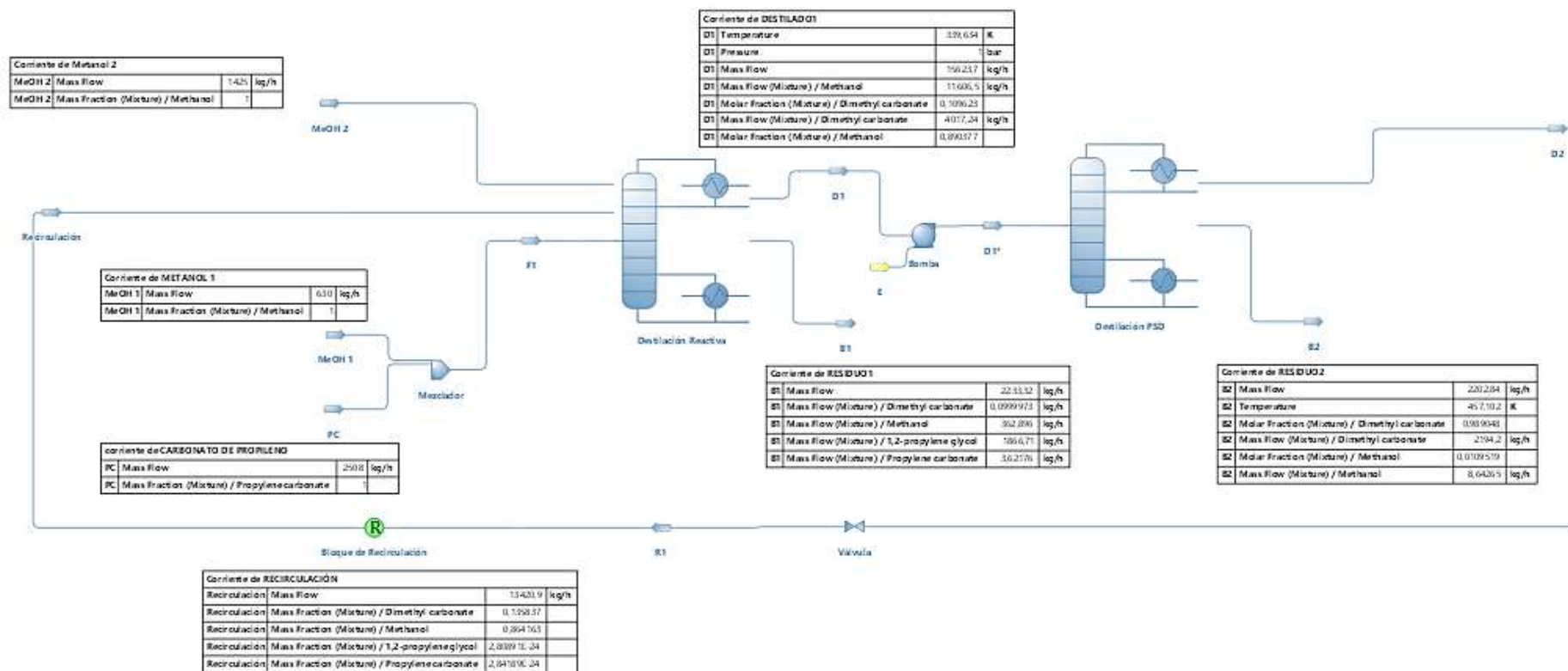


Figura 4-3: Proceso de síntesis de carbonato de dimetilo en DWSIM

Realizado por: Iza, Yólide, 2021.

3.5.3. Validación de la simulación

Una vez simulado el proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) en DWSIM a partir del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH), es necesario validar los resultados obtenidos en DWSIM comparándolos con los resultados reportados por Huang et al (2017) quien simula el proceso en Aspen Plus. En la siguiente tabla se indica el error relativo porcentual en la validación de la simulación.

Tabla 4-3: Validación de la simulación del proceso de síntesis de carbonato de dimetilo

Variable	Corriente de flujo	Huang et al. (2017)	DWSIM	Error relativo (%)
Flujo másico de carbonato de dimetilo	Residuo de la columna de destilación por oscilación de presión	2211,6	2197,38	0,65
Flujo másico de propilenglicol	Residuo de la columna de destilación reactiva	1868,2	1866,9	0,07

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Al comparar los resultados de la simulación en DWSIM con los resultados reportados por Huang et al (2017) utilizando Aspen Plus, en la Tabla 4-3 se describe un error de 0,65% y 0,07 % en los flujos másicos de carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG) obtenidos en la corriente de residuo de la columna de destilación por oscilación de presión y la columna de destilación reactiva respectivamente.

3.5.4. Procesamiento de la base de datos

Para el procesamiento de la base de datos se han establecido 5 variables de entrada y 2 variables de salida en el modelo de predicción (ver Figura 5-3) en función de las condiciones óptimas de operación que influyen directamente sobre la cantidad de carbonato de dimetilo (DMC) y de propilenglicol (PG) obtenidos por destilación por oscilación de presión del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH) y destilación reactiva.

Para diseñar la red neuronal artificial es necesario establecer una base de datos obtenidos por simulación del proceso validado. Para ello, a partir de las variables y los rangos de operación descritos en la Tabla 5-3 se generan 120 datos de salida por análisis de sensibilidad de las variables de entrada en DWSIM.

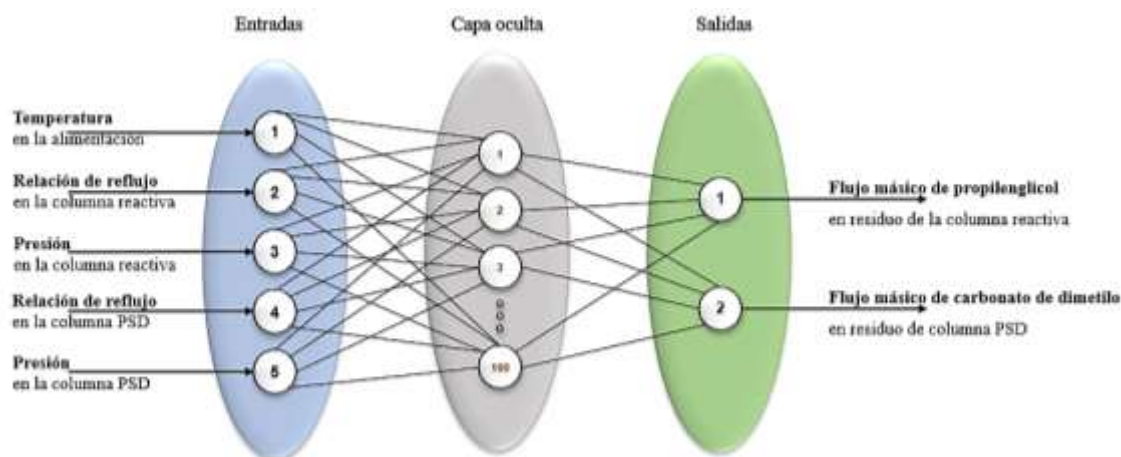


Figura 5-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Tabla 5-3: Rangos de operación de la base de datos

Variable de entrada	Rango	Unidad
Temperatura de alimentación	290 - 310	K
Relación de reflujo en la columna de destilación reactiva	0,1 - 1,5	adimensional
Presión en la columna de destilación reactiva	1,0 - 3,0	bar
Relación de reflujo en la columna de alta presión	0,5 - 2	adimensional
Presión en la columna de alta presión	10,0 - 15,0	bar

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

3.5.5. Diseño de la red neuronal artificial

3.5.5.1. Normalización de la base de datos

Para desarrollar la red neuronal artificial se realiza una normalización de la base de datos con la finalidad de evitar la redundancia en los datos con los que se va a entrenar el modelo predictivo, estandarizando de esta manera las entradas y salidas. Según Javaheri et al., (2017) la normalización de datos implica escalar los valores de los atributos (entradas y salidas) para que se encuentren numéricamente en el mismo intervalo / escala (0–1); y, por lo tanto, tengan la misma importancia. Este proceso es fundamental para mejorar el proceso de aprendizaje de las redes neuronales artificiales. La ecuación para la normalización de datos es la siguiente

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

Donde:

X_N = valor normalizado

X = valor que se desea normalizar

X_{\min} = valor mínimo

X_{\max} = valor máximo

Con la base de datos normalizada se procede a seleccionar dentro de la caja de herramientas de Matlab a la aplicación Neural Net Fitting (ver Figura 6-3), esta opción permite iniciar un asistente de diseño (ver Figura 7-3) que permitirá seleccionar datos, crear y entrenar la red y evaluar su rendimiento mediante el análisis de regresión y el error cuadrático medio.



Figura 6-3: Herramienta Neural Fitting de Matlab

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

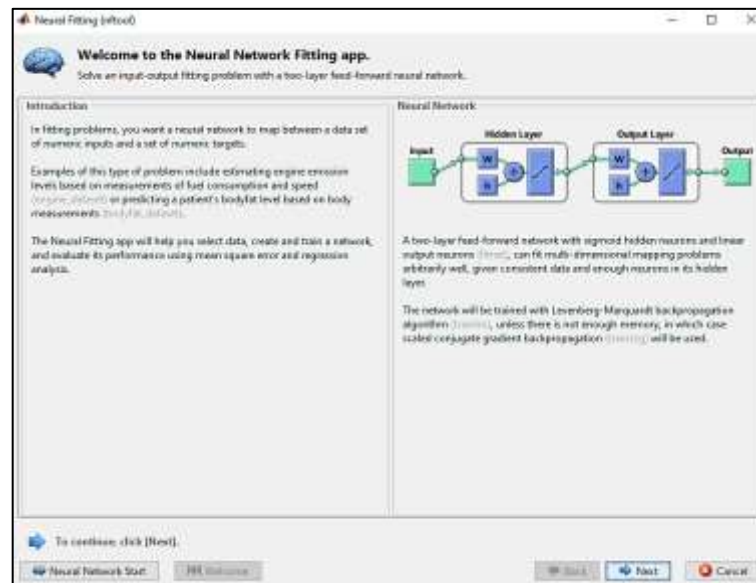


Figura 7-3: Asistente de diseño de red

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Luego se seleccionan las entradas y salidas normalizadas como se observa en la figura 8-3:

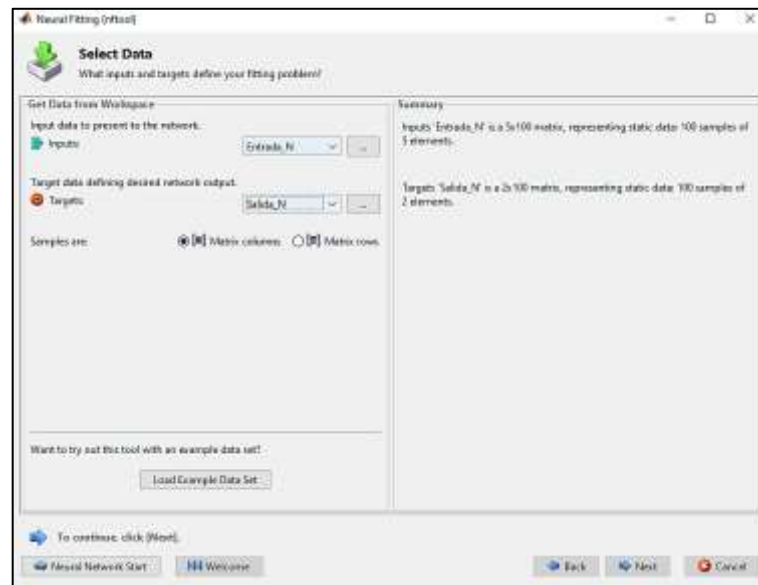


Figura 8-3: Selección de entradas y salidas normalizadas

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

De la Figura 8-3, la variable de los datos de entrada para el diseño de la red neuronal artificial tiene el nombre de Entradas_N, mientras que los datos de salida u objetivos están definidos con la variable Salidas_N. Aquí es importante mencionar que los datos de entrada y salida estén definidos como una matriz de columnas y por tanto ambas variables vinculadas con la base de datos deben tener el mismo número de filas y columnas.

3.5.5.2. Entrenamiento de la red neuronal artificial

Durante el entrenamiento de la red es indispensable establecer el número óptimo de neuronas en la capa oculta y el algoritmo de entrenamiento (Figura 10-3). Para Muhsin, et al., (2017) una red neuronal artificial con una única capa oculta tiene menos variación y proporciona mayor capacidad de generalización; por tanto, en este trabajo no se modifica el número de capas ocultas. Se inicia con 10 neuronas en la capa oculta y en función de los indicadores de desempeño de la red se irá aumentando progresivamente el número de neuronas en la capa oculta.

Los indicadores de desempeño son el error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de correlación (R), y sus ecuaciones se describen a continuación:

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n (y' y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2]}} \quad \text{Ec. 4-3}$$

Donde:

R = coeficiente de correlación lineal

y = resultados de la simulación de la planta en DWSIM

y' = resultados predichos por la red neuronal artificial

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2 \quad \text{Ec. 5-3}$$

Donde:

n = número de experimentaciones.

y_t = resultados de la simulación de la planta en DWSIM

y'_t = resultados predichos por la red neuronal artificial

Los ensayos realizados para establecer el número óptimo de neuronas en la capa oculta se resumen en la Tabla 6-3 con sus correspondientes indicadores de desempeño. Los indicadores de desempeño se obtuvieron a partir de los gráficos generados por Matlab durante el entrenamiento de la red.

Tabla 6-3: Ensayos de selección del número de neuronas y el algoritmo de entrenamiento.

Arquitectura de red Neuronas en capa oculta	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
10	1,19E-02	0,56597	4,96E-03	0,43433	1,06E-02	0,59061
15	1,76E-02	0,32951	9,28E-03	0,6473	1,05E-02	0,61062
20	8,87E-02	0,70142	8,21E-03	0,70339	2,90E-02	0,67038
25	9,74E-02	0,66775	5,84E-03	0,80878	1,53E-02	0,65288
30	8,20E-02	0,73547	5,49E-03	0,85369	1,46E-02	0,62829
35	1,20E-02	0,74368	6,15E-03	0,86135	1,68E-02	0,51984
40	2,17E-02	0,53625	4,36E-03	0,88514	1,60E-02	0,44317
45	2,16E-02	0,42597	2,49E-03	0,91811	2,36E-02	0,30561
55	3,19E-02	0,45772	3,15E-03	0,91515	3,91E-02	0,40132
60	2,18E-02	0,23321	3,92E-03	0,89263	6,39E-02	0,25354
65	1,15E-02	0,18469	4,17E-03	0,89803	9,94E-02	0,19162
75	6,22E-02	0,39712	3,87E-03	0,90542	1,46E-01	0,07373
80	1,63E-02	0,33742	5,63E-03	0,92831	1,85E-01	0,03112
85	2,67E-02	0,18469	4,14E-03	0,88919	4,21E-01	0,13558
90	2,98E-02	0,25257	6,31E-03	0,84324	4,12E-01	0,24005
95	4,64E-02	0,34554	9,47E-03	0,65164	4,71E-01	0,34452
100	7,03E-02	0,45212	9,43E-03	0,64315	1,25E-01	0,44899

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Se estableció que la mejor arquitectura para la red neuronal tiene los siguientes parámetros de diseño (ver Figura 9-3):

- 5 neuronas de entrada
- 80 neuronas en la capa oculta
- 2 neuronas en la capa de salida

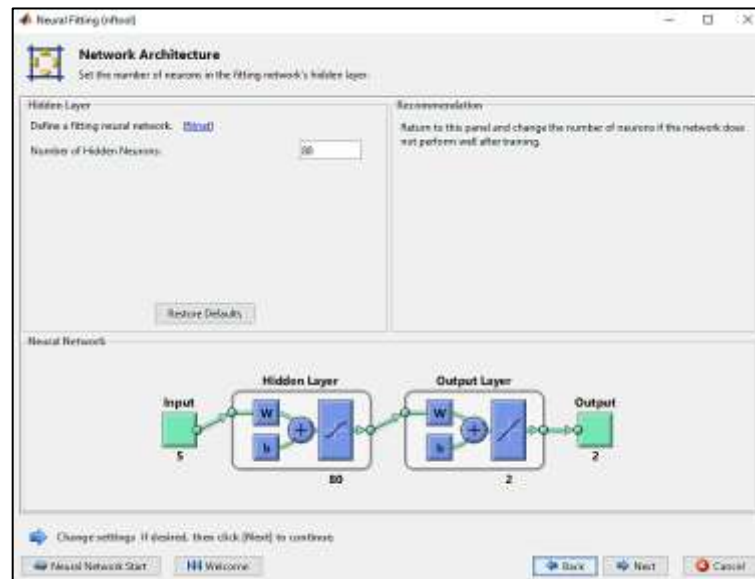


Figura 9-3: Arquitectura de la red neuronal artificial

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Adicionalmente, la red neuronal artificial trabaja con las siguientes funciones de activación, que están configuradas automáticamente por la herramienta Neural Net Fitting:

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

Las neuronas de la capa oculta emplean la función de activación sigmoidea y la neurona de la capa de salida utiliza la función de activación lineal (Muhsin, et al., 2017, p. 2481). Durante el entrenamiento de la red neuronal es importante seleccionar el algoritmo de entrenamiento. Para entrenar la red neuronal artificial, se selecciona el algoritmo de regularización bayesiana porque este algoritmo ayuda a evitar el problema de sobreajuste de los datos y logra resultados de estimación más precisos. Según Sariev, et al., (2019) el algoritmo de Regularización Bayesiana (BR) básicamente tiene una función objetivo que incluye la constante actualización de los pesos y los valores de sesgo de acuerdo con la optimización de Levenberg-Marquardt (LM)

minimizando una combinación de errores de estimación para lograr un buen modelo generalizado. De los ensayos presentados en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.-3**, además de establecer la mejor topología de red, también es posible determinar que el algoritmo de regularización bayesiana presenta la mejor correlación (R) y menor error (MSE) a diferencia de los algoritmos Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient. En la herramienta de diseño de la red neuronal, se presenta al algoritmo Bayesian Regularization como “*trainbr*” (ver Figura 11-3).

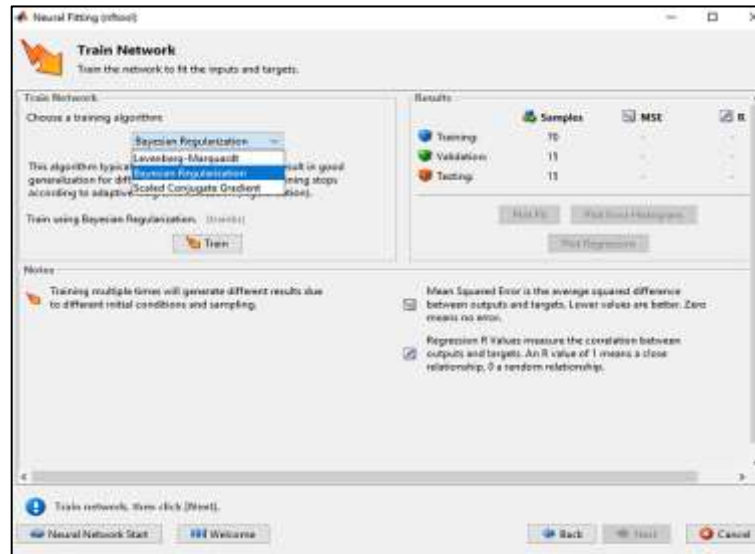


Figura 10-3: Selección del algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

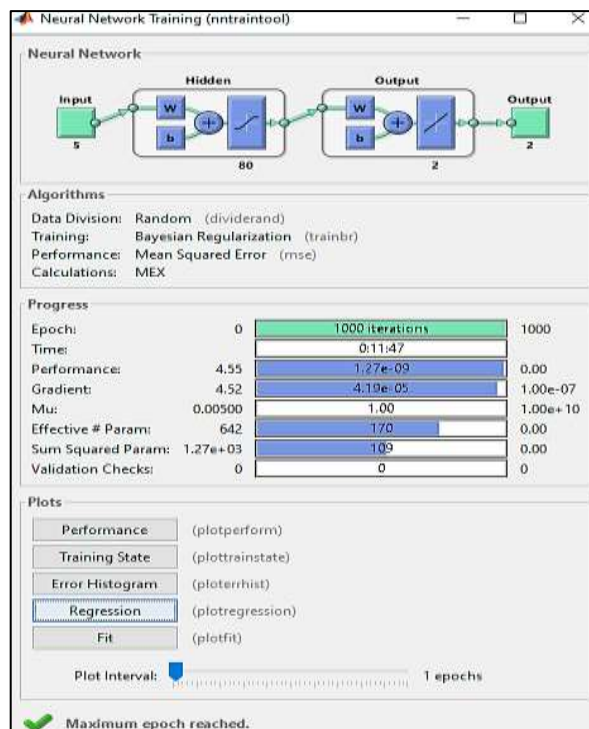


Figura 11-3: Proceso de entrenamiento de la red

3.5.6. Validación de la red neuronal artificial

En la validación del modelo de predicción, se comparan los resultados obtenidos por la red con los resultados obtenidos por simulación en DWSIM; empleando un nuevo conjunto conformado por 20 datos y se evalúa la predicción realizando un análisis estadístico en Statgraphics, En este estudio se lleva a cabo un análisis de la varianza (ANOVA), que es un método estadístico utilizado cuando se necesita contrastar la hipótesis de igualdad de medias dentro de un conjunto de dato eligiendo entre dos hipótesis:

- Hipótesis nula: las medias entre los datos a comparar son iguales
- Hipótesis alternativa: al menos una de las medias entre los datos a comparar es diferentes

Se utilizan las siguientes directrices para interpretar el valor P:

Si valor $p > 0,05$ se acepta la hipótesis nula

Si valor $p \leq 0,05$ se acepta la hipótesis alternativa

Tabla 7-3: Tabla ANOVA para el análisis de la varianza

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,0000347763	1	0,0000347763	0,10	0,9612
Intra grupos	0,403204	28	0,0144001		
Total (Corr.)	0,403238	29			

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

El valor clave en la tabla ANOVA es el P-valor. Un valor de P mayor a 0,05 conllevará aceptar la hipótesis nula con un 95,0% de confianza y por lo tanto concluir que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables analizadas

3.6. Resultados

Al simular el proceso de síntesis de carbonato de dimetilo en el software DWSIM con las condiciones de operación descritas anteriormente (ver Tabla 2-3 y Tabla 3-3) se obtienen los siguientes resultados para la corriente de destilado y residuo en la columna de destilación reactiva (ANEXO B y ANEXO C respectivamente), la corriente de destilado y residuo en la columna de destilación por oscilación de presión (ver ANEXO D y ANEXO E).

3.6.1. Base de datos para la red neuronal artificial

Mediante simulaciones en DWSIM entre los rangos presentados en la Tabla 5-3 se recopilieron 100 datos para el entrenamiento y 20 para validación de la red neuronal, manteniendo constante los flujos de alimentación del proceso. Los datos presentados en el ANEXO F se utilizaron para entrenar la red neuronal artificial y los datos presentados en el ANEXO G se emplearon para validar la red neuronal artificial.

3.6.2. Desarrollo de la red neuronal artificial

3.6.2.1. Lectura y normalización de la base de datos

Como se ha mencionado en la metodología para diseñar la RNA, primero es necesario importar la base de datos al entorno trabajo de Matlab. Una vez importados los datos se deben normalizar entradas y salidas de la red neuronal artificial mediante la ecuación de la normalización (ver Normalización de la base de datos). La programación para lectura y normalización de los datos de entrenamiento y validación se describe en el códigos del ANEXO H y ANEXO I respectivamente.

3.6.2.2. Entrenamiento de la red neuronal artificial

Una vez normalizados los datos, se inicia con el entrenamiento de la red neuronal artificial mediante el código del ANEXO J. En el código de entrenamiento de la red se describe una variable “hiddenLayerSize” importante al modificar el número de neuronas en la capa oculta durante los ensayos de entrenamiento de la red neuronal artificial. En función de coeficiente de correlación (R) y el error cuadrático medio (MSE) (ver Gráfico 1-3 a Gráfico 3-3) se determinó que una arquitectura de red con 80 neuronas en la capa oculta es ideal para el aprendizaje de la red neuronal artificial. Adicionalmente, en el ANEXO L se presentan algunos de los resultados obtenidos al modificar el número de neuronas en la capa oculta. Los datos predichos durante el entrenamiento

de la red neuronal con 80 neuronas se describen en el ANEXO M y se resumen en la Gráfico 4-3. Por tanto, que la red neuronal artificial trabaje mejor con 80 neuronas depende del algoritmo de entrenamiento (Regularización Bayesiana), el error cuadrático medio ($5,63E-03$) y la mejor correlación lineal (0,928) durante el entrenamiento.

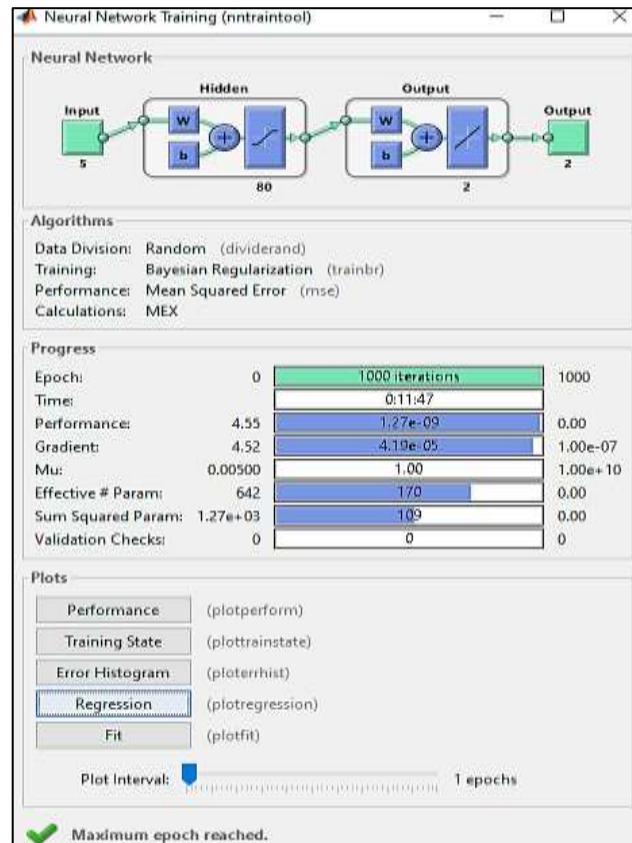


Gráfico 1-3: Arquitectura de red con 80 neuronas en capa oculta

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

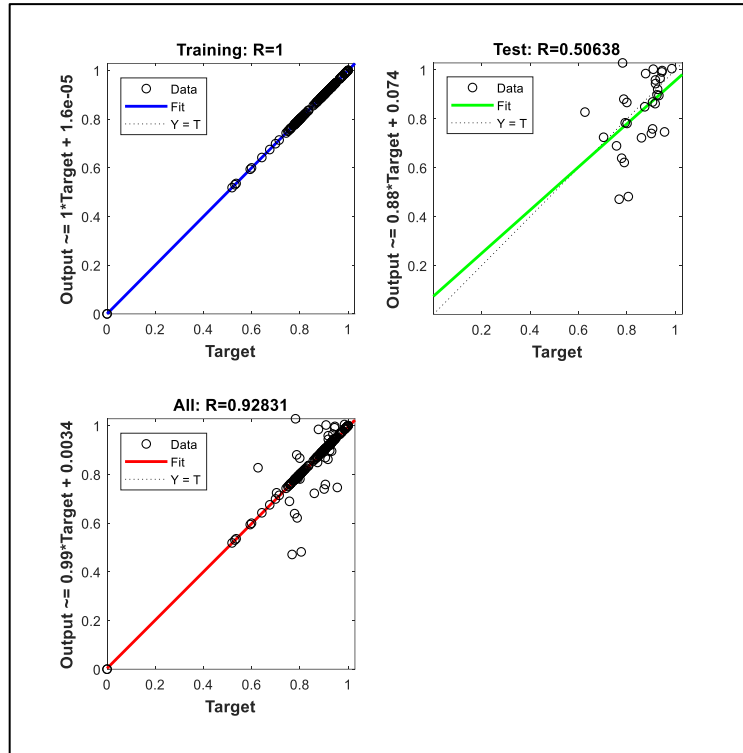


Gráfico 2-3: Regresión lineal con 80 neuronas en capa oculta

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

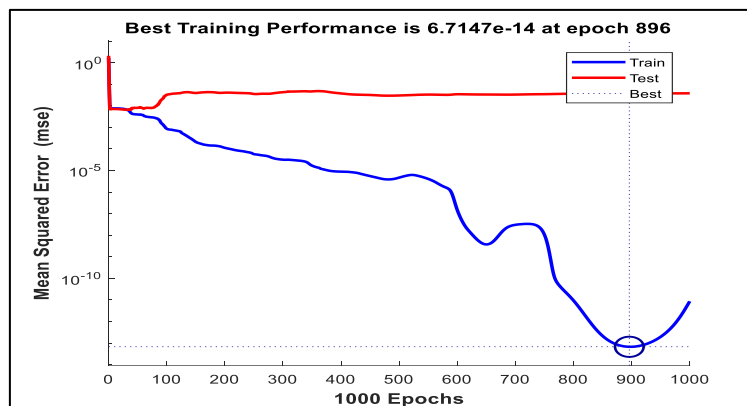


Gráfico 3-3: Error cuadrático medio con 80 neuronas en capa oculta

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

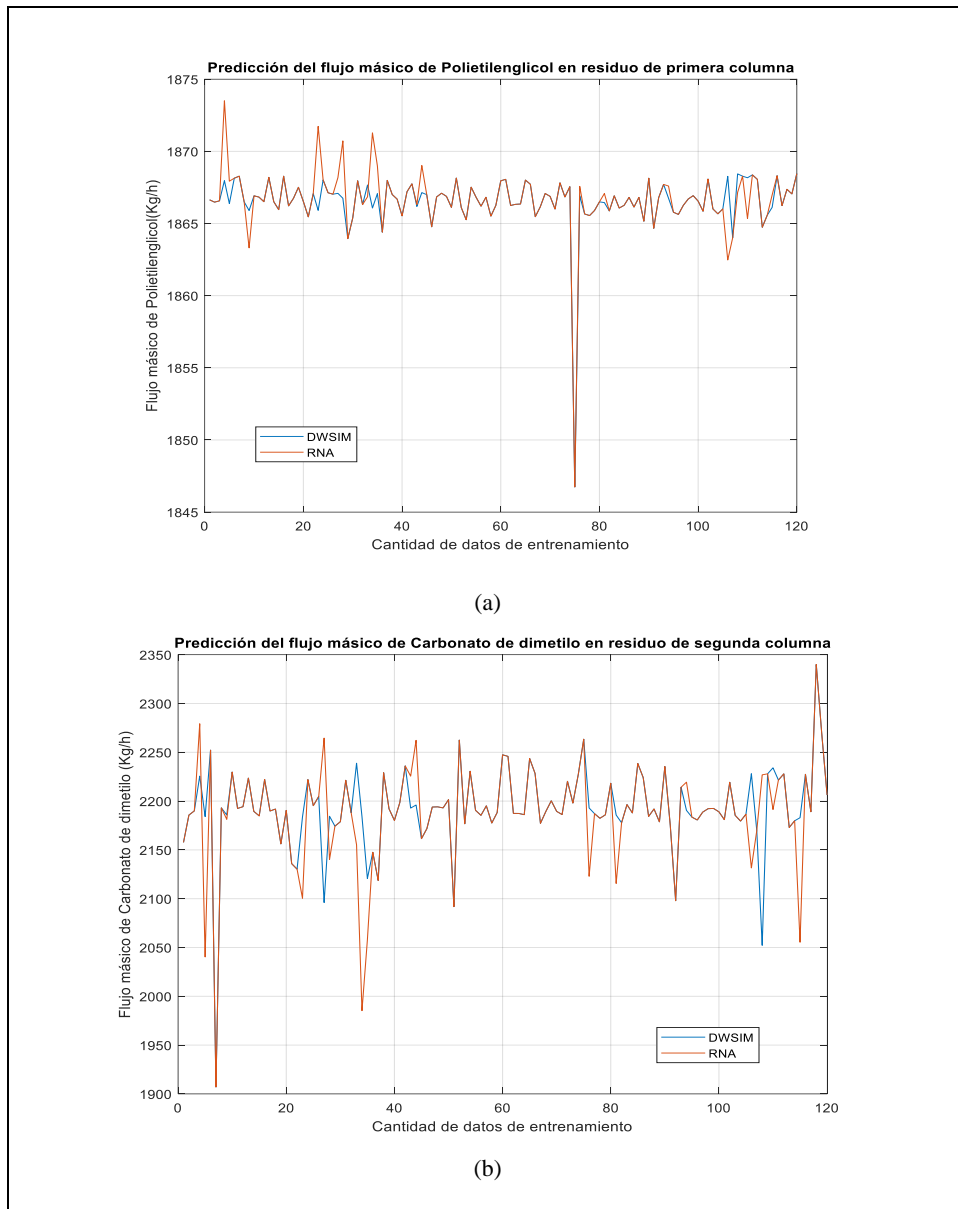


Gráfico 4-3: Predicción del entrenamiento RNA con 80 neuronas en capa oculta

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

3.6.2.3. Validación de la red neuronal artificial

Aunque internamente la red durante el entrenamiento realiza una validación, resulta necesario emplear un nuevo conjunto de datos de validación (ver ANEXO G) como entrada para evaluar por análisis estadístico la efectividad en la predicción de la RNA. Igualmente se realiza un nuevo código para validar la red neuronal y predecir los flujos másicos de propilenglicol y carbonato de dimetilo a partir del entrenamiento de la red neuronal artificial. En el código de validación, la variable “net” contiene las principales propiedades aprendidas por la red durante el entrenamiento como se indica en el ANEXO K. Los datos predichos por la red neuronal para su correspondiente validación por análisis estadístico se describen en el ANEXO N.

3.6.3. Análisis estadístico de los datos predichos

Para evaluar la predicción por parte de la red neuronal artificial se lleva a cabo un análisis estadístico tomando en cuenta los datos reales y predichos para las corrientes de flujo másico de propilenglicol (PG) en el residuo de la primera columna de destilación reactiva y el flujo másico de carbonato de dimetilo (DMC) en el residuo de la segunda columna de destilación por oscilación de presión, descritos en el ANEXO N.

El análisis estadístico consiste en un análisis de la varianza (ANOVA) para contrastar la hipótesis de igualdad de medias entre los datos reales obtenidos mediante simulación en DWSIM y los datos predichos mediante la RNA, eligiendo entre dos hipótesis en función del valor P estadístico.

Hipótesis nula (H_0): las medias entre los datos reales y predichos son iguales
Hipótesis alternativa (H_1): al menos una de las medias entre los datos predichos es diferentes de los datos reales

Se utilizan las siguientes directrices para interpretar el valor P:

Si valor $p > 0,05$ se acepta la hipótesis nula
Si valor $p \leq 0,05$ se acepta la hipótesis alternativa

3.6.3.1. Flujo másico real y predicho de propilenglicol

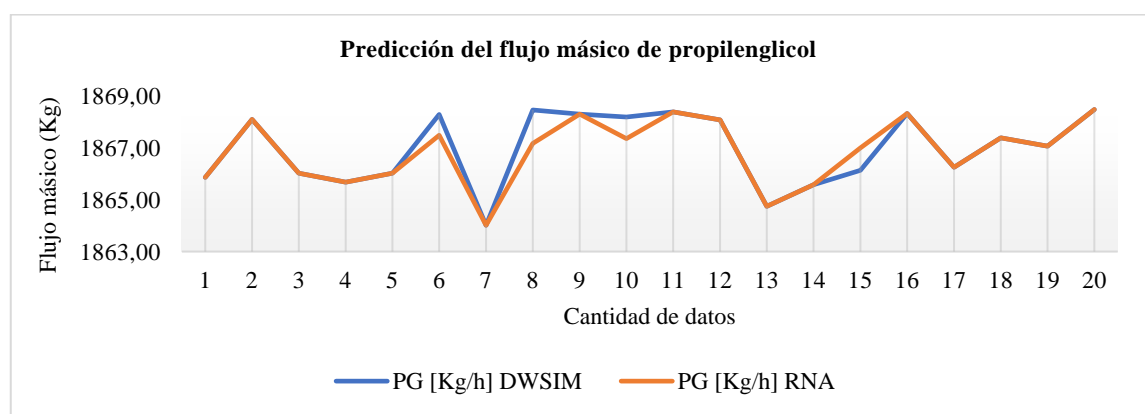


Gráfico 5-3: Predicción del flujo másico de propilenglicol

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

En la Tabla 8-3 se describe la media entre los datos reales mediante simulación en DWSIM y los datos predichos mediante la RNA para el flujo másico de propilenglicol obtenido en el residuo de

la columna de destilación reactiva. También muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. El error estándar es el resultado de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel. La tabla también muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95,0% de las veces. Se puede ver gráficamente los intervalos en la gráfica de Medias (ver Gráfico 6-3).

Tabla 8-3: Medias para el flujo másico de propilenglicol

VARIABLES A COMPARAR	CASOS	MEDIA	ERROR ESTÁNDAR	LÍMITE INFERIOR	LÍMITE SUPERIOR
DWSIM	20	1866,95	0,300739	1866,52	1867,38
RNA	20	1866,85	0,300739	1866,42	1867,28
Total	40	1866,9			

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

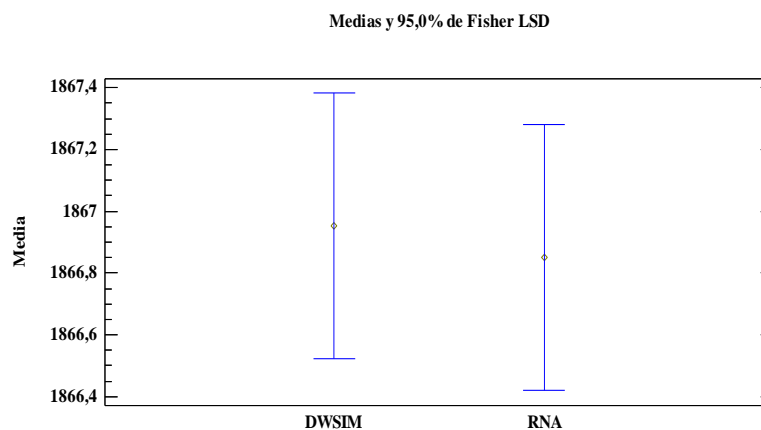


Gráfico 6-3: Gráfico de medias de la predicción del flujo másico de propilenglicol

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

En la Tabla 9-3 y el Gráfico 7-3 se describe la varianza de los datos reales y predichos en dos componentes: un componente entre grupos y un componente dentro de grupos. La razón-F, que en este caso es igual a 0,06 es el cociente entre el estimado entre grupos y el estimado dentro-de-grupos. Puesto que el valor-P (0,8108) de la razón-F es mayor que 0,05, se evidencia con un nivel del 95,0% de confianza que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos para el flujo másico de propilenglicol (PG).

Tabla 9-3: ANOVA de la predicción del flujo másico de propilenglicol

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,105063	1	0,105063	0,06	0,8108
Intra grupos	68,7373	38	1,80888		
Total (Corr.)	68,8424	39			

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

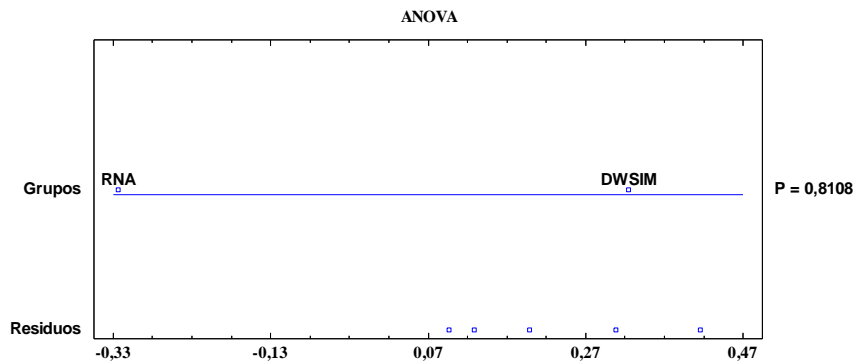


Gráfico 7-3: Gráfico ANOVA de la predicción del flujo másico de propilenglicol

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

3.6.3.2. Flujo másico real y predicho de carbonato de dimetilo

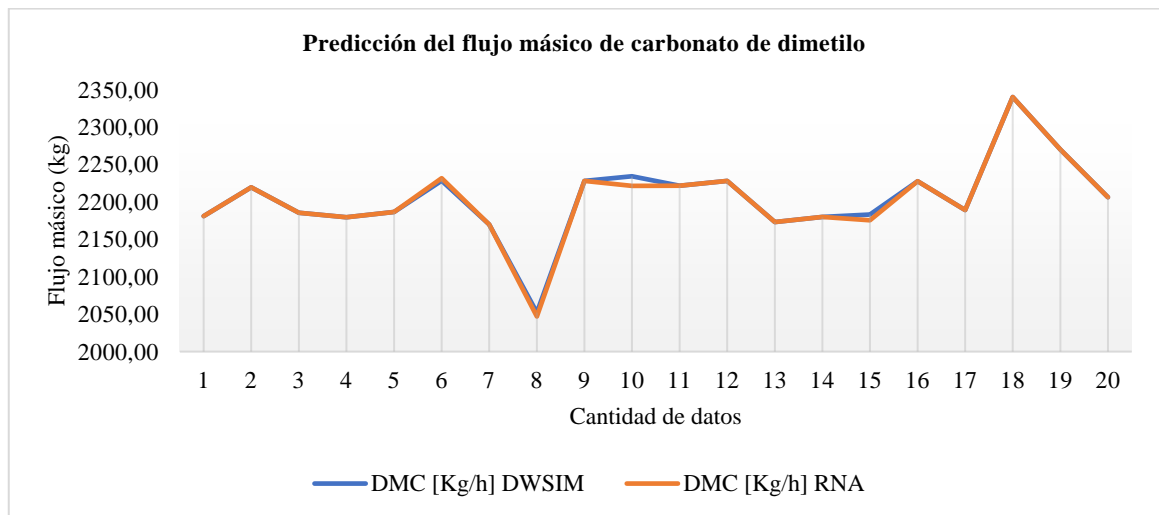


Gráfico 8-3: Predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

En la Tabla 10-3 y el Gráfico 9-3 se describe la media entre los datos reales y predichos para el flujo másico de carbonato de dimetilo (DMC) obtenido en el residuo de la columna de destilación por oscilación de presión.

Tabla 10-3: Medias para el flujo másico de carbonato de dimetilo

Variables a comparar	Casos	Media	Error Estándar	Límite Inferior	Límite Superior
DWSIM	20	2204,09	12,0893	2186,78	2221,39
RNA	20	2202,98	12,0893	2185,67	2220,29
Total	20	2204,09	12,0893	2186,78	2221,39

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

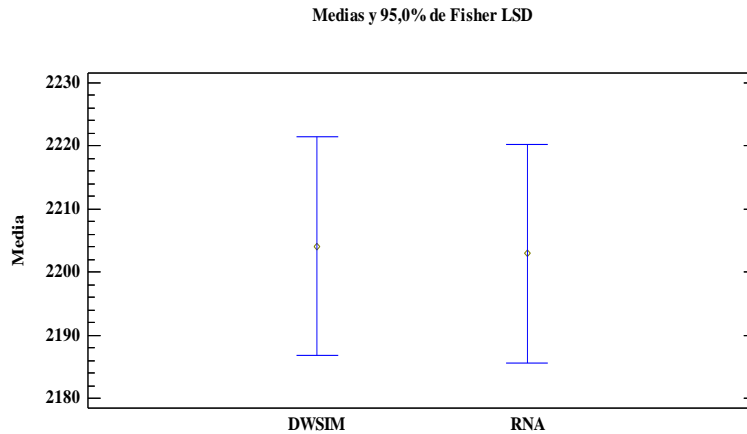


Gráfico 9-3: Gráfico de medias de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo.

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

En la Tabla 11-3 y el Gráfico 10-3 se describe la varianza de los datos reales y predichos para el flujo másico de carbonato de dimetilo (DMC), puesto que el valor-P (0,9487) de la razón-F es mayor que 0,05; se concluye con un nivel del 95,0% de confianza que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias del flujo másico real y predicho de carbonato de dimetilo (DMC).

Tabla 11-3: ANOVA de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	12,2656	1	12,2656	0,0042	0,9487
Intra grupos	111075,	38	2923,01		
Total (Corr.)	111087,	39			

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

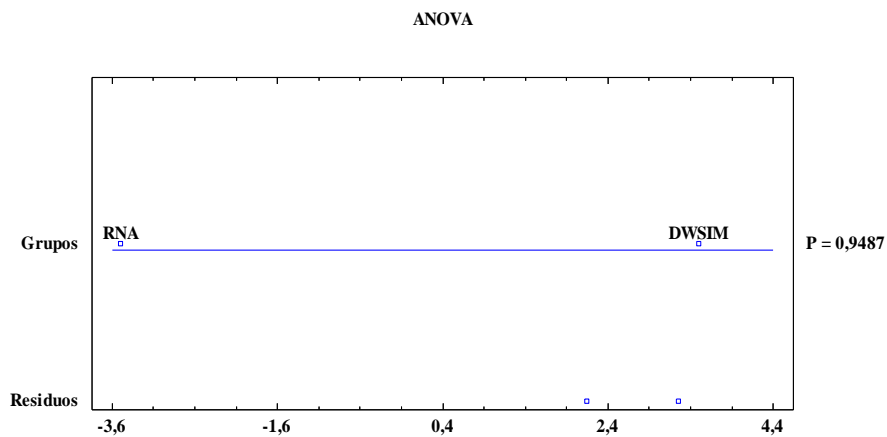


Gráfico 10-3: Gráfico ANOVA de la predicción del flujo másico de carbonato de dimetilo

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Cronograma

Tabla 1-4: Cronograma del trabajo de titulación

ACTIVIDAD	MESES																			
	MES 1				MES 2				MES 3				MES 4				MES 5			
	SEMANAS																			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Determinación de los parámetros óptimos de simulación			■	■	■	■														
Simulación y validación del proceso de síntesis de DMC					■	■	■	■												
Establecer la base de datos para diseño de RNA									■	■	■	■								
Determinación de entradas y salidas para la red neuronal artificial										■	■	■								
Diseño de la red neuronal										■	■	■	■							
Validación de la red mediante análisis estadístico													■	■	■					
Redacción del trabajo final			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Revisión del documento final						■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■		
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

4.2. Presupuesto

Tabla 2-4: Presupuesto del proyecto

Concepto	Cantidad	Valor Unitario	Valor Total	Fuente De Financiamiento	
Material de Oficina				Interna	Externa (Espoch)
Impresión del documento final	1	30	30,00	x	
Copias e impresiones adicionales	40	0,5	20,00	x	
Empastados	1	30,00	30,00	x	
Subtotal			80,00		
Logística				x	
Internet	5	125	125,00	x	
Licencia estudiantil de Matlab	1	55	55,00	x	
Imprevistos	1	30	30,00	x	
Subtotal			210,00		
Total			290,00	x	

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

4.3. Recursos

Tabla 3-4: Talento humano

Talento humano		Descripción
Estudiante	Yólida Iza	Realiza la propuesta tecnológica “Predicción de la composición de carbonato de dimetilo mediante redes neuronales artificiales a partir de la simulación de su proceso de síntesis”
Docentes de apoyo	Ing. Mayra Zambrano Ing. Darío Guamán	Revisión y corrección de la investigación.

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

Tabla 4-4: Recursos materiales

Equipo y software	Descripción	Uso
DWSIM	Software simulador de procesos químicos.	Simular el proceso de producción
Matlab	Software simulador de redes neuronales artificiales.	Diseñar la red neuronal artificial.
Statgraphics	Software de análisis estadístico.	Validar la red neuronal artificial

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

CONCLUSIONES

- El modelo de red neuronal artificial predice la composición de carbonato de dimetilo (DMC) y de propilenglicol (PG) a partir de la simulación en DWSIM de la destilación reactiva y la destilación por oscilación de presión de metanol (MeOH) y carbonato de propileno (PC).
- Se simuló el proceso de síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) a partir de metanol (MeOH) y carbonato de propileno (PC) utilizando una columna de destilación reactiva donde se induce una reacción de transesterificación del carbonato de propileno (PC) y el metanol (MeOH) para obtener carbonato de dimetilo (DMC) y propilenglicol (PG), a partir de la siguiente estequiometría $PC+2MeOH \rightarrow DMC +PG$. Luego, debido a que el sistema de reacción genera una mezcla azeotrópica de carbonato de dimetilo (DMC) y metanol (MeOH) se emplea una segunda columna de destilación a alta presión para separar el azeótropo por oscilación de presión. El sistema de destilación utiliza el modelo UNIQUAC y UNIFAC puesto que ambos modelos termodinámicos son adecuados para separar el sistema azeotrópico DMC – MeOH.
- La simulación se validó comparando los resultados obtenidos por Huang et al (2017) donde se realiza la optimización y control de un proceso de destilación reactiva para la síntesis de carbonato de dimetilo (DMC) en Aspen Plus. Para el flujo másico de propilenglicol (PG) obtenido en el residuo de columna de destilación reactiva, el error en la simulación fue del 0,07%; para el flujo másico de carbonato de dimetilo (DMC) obtenido en el residuo de la columna de destilación por oscilación de presión el error es del 0,65%.
- La red neuronal artificial fue entrenada con 100 datos obtenidos por simulación y está diseñada con una arquitectura de red que consta de 5 variables en la capa de entrada, 80 neuronas en la capa oculta y 2 variables en la capa de salida; el modelo de predicción se basa en el aprendizaje supervisado mediante el algoritmo de regularización bayesiana con el que se obtiene la mejor correlación de 0,928 y el menor error de predicción del $5,63 \times 10^{-3}$ durante el aprendizaje y prueba de la red.
- La red neuronal artificial se validó con 20 datos y mediante un análisis de la varianza del flujo másico real (DWSIM) y predicho (RNA) de propilenglicol (PG) y carbonato de dimetilo (DMC). Con un valor P mayor que 0,05 al comparar los datos reales y predichos, se corrobora con un 95% de confiabilidad que la red neuronal artificial tiene un buen rendimiento y predice resultados estadísticamente aceptables.

RECOMENDACIONES

- Comparar los resultados obtenidos por la simulación en DWSIM con los datos obtenidos por otro software libre de simulación de procesos químicos.
- Evaluar otros parámetros que influyen en el rendimiento de la red neuronal artificial, como las funciones de activación y cantidad de capas ocultas, analizando su influencia en la tasa de aprendizaje.
- Emplear la simulación y la red neuronal artificial como herramienta didáctica para afianzar conocimientos en las cátedras como ingeniería de procesos, ingeniería de reacciones, operaciones unitarias, entre otras asignaturas donde se simulen y analicen procesos mediante el uso de un software de código abierto y la aplicación de redes neuronales artificiales para predecir el comportamiento del sistema.

GLOSARIO

Análisis de la varianza: es una forma conceptualmente simple, poderosa y popular de realizar pruebas estadísticas en experimentos que involucran a dos o más grupos. Analiza toda la variabilidad del conjunto de datos dividiendo la varianza entre grupos versus la varianza dentro de los grupos. Si la variabilidad entre los grupos es mucho mayor que la variabilidad dentro de los grupos (valor- $P < 0,05$), entonces al menos uno de los grupos tiene una media que es significativamente diferente de los demás (Smalheiser, 2017, p.149).

Algoritmo de entrenamiento: un algoritmo inteligente que puede obtener sensibilidad de un conjunto proporcionado de datos de entrenamiento (Kim et al., 2015, p.100).

Coefficiente de actividad: es una función de desviación que se utiliza para tener en cuenta el comportamiento de líquido no ideal en una mezcla (Gebreyohannes et al., 2014, p.12445).

Destilación: es un método para separar mezclas líquidas por vaporización y condensación. Como técnica de separación, la destilación aprovecha el hecho de que cuando un líquido se vaporiza parcialmente, las composiciones de las dos fases son diferentes. Al separar las fases y repetir el procedimiento, a menudo es posible separar completamente la mezcla original (King, 2019, p.87).

Ecuación de estado: una ecuación de estado (EOS) es una relación PVT utilizada para predecir propiedades termodinámicas. Hay varias ecuaciones de estado que se utilizan para diferentes aplicaciones. Por ejemplo, el Peng-Robinson EOS y el Soave-Redlich-Kwong EOS. Otras formas de EOS incluyen las derivadas de la termodinámica estadística como Sanchez-Lacombe y SAFT (Brignole y Pereda, 2016, p.65).

Mezcla azeotrópica: es una solución de dos o más líquidos, cuya composición no cambia con la destilación simple. La composición de la fase líquida en el punto de ebullición es idéntica a la del vapor en equilibrio con ella, y tales mezclas o azeótropos forman soluciones de ebullición constante (Tillman et al., 2012, p.247).

Modelo termodinámico: ecuaciones que pueden ayudar a comprender el comportamiento de un sistema. Las categorías del modelo incluyen ecuaciones de estado, coeficientes de actividad, empíricos o específicos del sistema. Los modelos termodinámicos se pueden utilizar para predecir varias propiedades como la entalpía o el equilibrio de fases. La selección del modelo puede depender de parámetros tales como especies y composiciones del proceso, rangos de presión y temperatura, disponibilidad de datos, entre otros aspectos (Tillman et al., 2012, p.277).

Red neuronal artificial: es un modelo computacional que consta de varios elementos de procesamiento denominadas neuronas que reciben entradas y entregan salidas en función de sus funciones de activación predefinidas (Shichkin et al., 2018, p.150).

Regularización bayesiana: es un proceso matemático que convierte una regresión no lineal en un problema estadístico "bien planteado". La ventaja de las redes neuronales entrenadas con el

algoritmo de regularización bayesiana radica en que los modelos son robustos y el proceso de validación es innecesario (Burden y Winkler, 2008, p.25).

Simulación: es un comportamiento basado en variables que cambian con el tiempo y que permiten tomar decisiones basadas en datos pasados y actuales para comprender tendencias futuras (Lagarda et al., 2019, p.376).

BIBLIOGRAFÍA

BÄHRLE, B., et al. "Propylene Carbonate". *Springer Lexikon Kosmetik und Körperpflege* [En línea], 2011, 100(2), pp. 1-2. [Consulta: 15 enero 2021]. Disponible en [10.1007/978-3-540-71095-0_8540](https://doi.org/10.1007/978-3-540-71095-0_8540)

BERTONA, Luis Federico. Entrenamiento de redes neuronales basado en algoritmos evolutivos [En línea] (Trabajo de titulación). (Pregado) Universidad de Buenos Aires, Argentina, 2005, pp. 1-253. [Consulta: 20 enero 2021]. Disponible en: <http://laboratorios.fi.uba.ar/lsi/bertona-tesisingeneriainformatica.pdf>

BURDEN, F., & WINKLER, D. "Bayesian regularization of neural networks". *Methods in Molecular Biology* [en línea], 2008, 458, pp. 25-44. [Consulta: 24 enero 2021]. ISSN 10643745. Disponible en: [10.1007/978-1-60327-101-1_3](https://doi.org/10.1007/978-1-60327-101-1_3)

BRÍO, C., & SERRANO, C. "Predicción de la quiebra bancaria mediante el empleo de redes neuronales artificiales". *Revista Española de Financiación y Contabilidad* [en línea], 2015, 22 (74), pp. 155-172 [Consulta: 20 enero 2021]. Disponible en: <https://www.jstor.org/stable/42781034>

CAPELETTI, M., & SEDRAN, U. "Síntesis de dimetil carbonato por transesterificación ácida". *XXIII Congreso Iberoamericano de Catálisis* [en línea], 2012, 2654 (3000), pp. 1. [Consulta: 27 enero 2021]. Disponible en: <https://www.unl.edu.ar/cicat2012/trabajos/uploads/trabajos/779.pdf>

DAZA; E., et al. "Diseño de procesos de destilación reactiva bajo control cinético caso: metátesis de penteno". *Revista Mexicana de Ingeniería Química* [En línea], 2006, 5(1), pp. 129-130. ISSN 1665-2738. [Consulta: 10 febrero 2021]. Disponible en: <http://rmiq.org/iqfvp/Pdfs/Vol.%205,%20Supl.%201/20.pdf>

DWSIM. CAPE-OPEN. [blog]. 2019. [Consulta: 20 febrero 2021]. Disponible en: <https://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=CAPE-OPEN>

DWSIM. Fossee DWSIM Custom Modeling Project. [blog]. 2020. [Consulta: 21 febrero 2021]. Disponible en: <https://dwsim.fossee.in/custom-model>

ESSENCE. Modelado y simulación de procesos industriales. [blog]. 2021. [Consulta: 10 agosto 2021]. Disponible en: <https://essenceasesoria.ec/modelado-y-simulacion-de-procesos-industriales/>

GARCÍA ESPALLARGAS, José. Análisis tecnoeconómico de la producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno [En línea], (Trabajo de titulación). (Pregrado) Universidad de Sevilla, España. 2019. pp. 1-85. [Consulta: 11 mayo 2021]. Disponible en: <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/92479/fichero/TFG-2479-ESPALLARGAS.pdf>

GAURAV; M., et al. "ANN based soft sensor model for reactive distillation column". *International Journal of Advanced Technology and Engineering Exploration* [En línea], 2016, 3 (24), pp. 182-186. [Consulta: 16 mayo 2021]. ISSN 23945443. Disponible en: 10.19101/ijatec.2016.324003

GEBREYOHANNES, S; et al. "Generalized interaction parameter for the modified nonrandom two-liquid (NRTL) activity coefficient model". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2014, 53, pp. 20247-20257. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISSN 15205045. DOI 10.1021/ie503135c.

HU, C., & CHENG, S. "Development of alternative methanol/dimethyl carbonate separation systems by extractive distillation — A holistic approach". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2017, 127, pp. 195. [Consulta: 13 junio 2021]. ISSN 02638762. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2017.09.016>.

HUANG, Z., et al. "Optimization and control of a reactive distillation process for the synthesis of dimethyl carbonate". *Chinese Journal of Chemical Engineering* [En línea], 2017, 25 (8), pp. 1079-1090. [Consulta: 19 enero 2021]. ISSN 10049541. Disponible en: 10.1016/j.cjche.2017.03.039

IQBAL, A., & AHMAD, S. "Pressure swing distillation of azeotropic mixture – A simulation study". *Perspectives in Science* [en línea], 2016, 8, pp. 4-6. [Consulta: 01 marzo 2021]. ISSN 22130209. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.pisc.2016.01.001>

JAVAHERI, S., et al. "Response Modeling in Direct Marketing". *Data Mining Applications with R* [En línea], 2017, pp.153–180. [Consulta: 11 febrero 2021]. Disponible en: 10.1016/b978-0-12-411511-8.00006-2

JOHANNES; et al. "Synthesis of dimethyl carbonate and propylene glycol in a pilot-scale reactive distillation column: Experimental investigation, modeling and process analysis". *Chemical Engineering Journal* [en línea], 2013, 234, pp. 453. [Consulta: 11 febrero 2021]. ISSN 13858947. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2013.08.054>.

KIM, D.; et al. "Nonlinear Vibration Control of 3D Irregular Structures Subjected to Seismic Loads". *IG-Global* [En línea], 2015, pp. 103-119. [Consulta: 10 enero 2021]. Disponible en: 10.4018/978-1-4666-9479-8.ch003.

KING, C. "Distillation". *AccessScience* [en línea], 2019, [Consulta: 26 febrero 2021]. Disponible en: <https://www.accessscience.com/content/distillation/201100>.

LAGARDA, E., & VEGA, E. "Application of System Dynamics in a Gasoline Service Station". *Handbook of Research on Industrial Applications for Improved Supply* [en línea], 2019 pp. 375-403. [Consulta: 26 febrero 2021]. Disponible en: 10.4018/978-1-7998-0202-0.ch016.

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: 13 abril 2021]. Disponible en: <https://trepo.tuni.fi/handle/123456789/23943>

LUYBEN, W. "Pressure-swing distillation for minimum- and maximum-boiling homogeneous azeotropes". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [En línea], 2012, 51 (33), pp. 10881. [Consulta: 26 junio 2021]. ISSN 08885885. DOI 10.1021/ie3002414.

MATHWORKS. Redes Neuronales. [blog]. 2020. [Consulta: 22 abril 2021]. Disponible en: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html>

MORENO CÁRCAMO, A. Equilibrio de fases en sistemas multicomponentes [En línea], 2018, pp. 1-57. [Consulta: 08 mayo 2021]. Disponible en: http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/Equilibrio_de_fases_en_sist_multi_23218.pdf

NACELLE, A. Redes Neuronales Artificiales [En línea], 2009, pp. 1-9. [Consulta: 08 mayo 2021]. ISSN 02105691. Disponible en: <http://www.nib.fmed.edu.uy/Seminario%202009/Monografias%20seminario%202009/Nacell-Redes%20NeuronalesImplementacion.pdf>

MUHSIN, W.; et al. "Modelling and Optimal Operation of a Crude Oil Hydrotreating Process with Atmospheric Distillation Unit Utilising Stacked Neural Networks". *27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering* [En línea], 2017, pp. 2479–2484. [Consulta: 08 mayo 2021]. Disponible en: [10.1016/b978-0-444-63965-3.50415-3](https://doi.org/10.1016/b978-0-444-63965-3.50415-3)

OLABE, X. *Redes neuronales artificiales y sus aplicaciones*. [En línea], Bilbao: s.n, 2016, [Consulta: 08 mayo 2021]. Disponible en: https://ocw.ehu.es/pluginfile.php/40137/mod_resource/content/1/redes_neuro/contenidos/pdf/libro-del-curso.pdf

OSUOLALE, F., & ZHANG, J. "Energy efficient control and optimisation of distillation column using artificial neural network". *Chemical Engineering Transactions*, [En línea], 2014, 39 (2), pp. 37-42. [Consulta: 13 abril 2021]. ISSN 22839216. DOI 10.3303/CET1439007.

POLO CÓRDOBA, Ángel David. Evaluación de la cinética de oxidación del dietil carbonato y su comportamiento como aditivo oxigenante en motores de combustión [En línea] (Trabajo de titulación). (Maestría) Universidad de Antioquia, Colombia. 2016. pp. 1-104. [Consulta: 25 mayo 2021]. Disponible en: <http://hdl.handle.net/10495/4327>

QINGTAO; et al. "Simulation and analysis of dehydration distillation column based on distillation mechanism integrated with neural network". *Korean Journal of Chemical Engineering* [En línea], 2013, 30(3), pp. 518 -527. [Consulta: 13 julio 2021]. ISSN 02561115. Disponible en: [10.1007/s11814-012-0163-4](https://doi.org/10.1007/s11814-012-0163-4).

FLOREZ, R.; & Fernández, J. Las Redes Neuronales Artificiales. *Netbiblo* [En línea], 2008, España: s.n. ISBN 978-84-9745-246-5. [Consulta: 13 julio 2021] Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/libro?codigo=395241>

BENÍTEZ, R; et al. *Inteligencia Artificial Avanzada*. [En línea], 2013. Barcelona: s.n. [Consulta: 13 julio 2021]. Disponible en: [https://www.exabyteinformatica.com/uoc/Inteligencia_artificial/Inteligencia_artificial_avanzada/Inteligencia_artificial_avanzada_\(Modulo_1\).pdf](https://www.exabyteinformatica.com/uoc/Inteligencia_artificial/Inteligencia_artificial_avanzada/Inteligencia_artificial_avanzada_(Modulo_1).pdf)

REPKE, J.U., FORNER, F., & KLEIN, A. "Separation of homogeneous azeotropic mixtures by pressure swing distillation - Analysis of the operation performance". *Chemical Engineering and Technology* [en línea], 2005, 28(10), pp. 1151-1157. [Consulta: 03 agosto 2021]. ISSN 09307516. DOI 10.1002/ceat.200500232

ROSARIO ROSERO, Brayán David. Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2020.

SARIEV, E.; et al. "Bayesian regularized artificial neural networks for the estimation of the probability of default". *Quantitative Finance* [En línea], 2019, pp.1–18. [Consulta: 03 agosto 2021]. Disponible en: [10.1080/14697688.2019.1633014](https://doi.org/10.1080/14697688.2019.1633014)

SHARMA, N., & SINGH, K. "Neural network and support vector machine predictive control of tert-amyl methyl ether reactive distillation column". *Systems Science and Control Engineering* [En línea], 2014, 2 (1), pp. 512-522. ISSN 21642583. Disponible en: [10.1080/21642583.2014.924082](https://doi.org/10.1080/21642583.2014.924082)

SHICHKIN, A; et al. "Training algorithms for artificial neural network in predicting of the content of chemical elements in the upper soil layer". *AIP Conference Proceedings* [en línea], 2018, 2048, pp. 148-157. [Consulta: 26 julio 2021]. ISSN 15517616. DOI [10.1063/1.5082119](https://doi.org/10.1063/1.5082119). Disponible en: <https://doi.org/10.1063/1.5082119>

SMALHEISER, N. "Analysis of Variance (ANOVA)". *Data Literacy* [En línea], 2017, pp. 149-155. [Consulta: 6 mayo 2021]. DOI [10.1016/B978-0-12-811306-6.00011-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811306-6.00011-7). Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811306-6.00011-7>

SYED; et al. "Artificial neural network for anomalies detection in distillation column". *Communications in Computer and Information Science* [En línea], 2017, 751(18), pp. 310-421. ISSN 18650929. [Consulta: 6 febrero 2021]. Disponible en: [10.1007/978-981-10-6463-0_26](https://doi.org/10.1007/978-981-10-6463-0_26)

TILLMAN, D; et al. "Modeling and Fuel Blending". *Solid Fuel Blending* [en línea], 2012, pp. 271-293. [Consulta: 26 junio 2021]. DOI [10.1016/b978-0-12-380932-2.00007-6](https://doi.org/10.1016/b978-0-12-380932-2.00007-6)

ANEXOS

ANEXO A: Características de DWSIM

<ul style="list-style-type: none"> • <i>Operaciones de la unidad (estado estable)</i> 	<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 / equilibrio / reactores de Gibbs, PFR, CSTR), separador de componentes, orificio Placa, columnas de destilación / absorción, separador de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo (Excel), secuencia de comandos de Python y operación de la unidad de hoja de flujo.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Operaciones unitarias (dinámica)</i> 	<p>Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, PFR, CSTR, intercambiador de calor, hoja de cálculo y secuencia de comandos Python.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Modelos termodinámicos</i> 	<ul style="list-style-type: none"> • CoolProp • Peng-Robinson • Peng-Robinson – Stryjek – Vera 2 • Soave-Redlich-Kwong • Lee-Kesler • Lee-Kesler-Plöcker • COSMO - SAC • UNIFAC (-LL) • UNIFAC modificado (Dortmund) • UNIQUAC • NRTL • Chao-Seader • Grayson-Streed • Ley de Raoult • IAPWS-IF97 Steam Tables • IAPWS-08 Seawater • Aceite negro (Black - Oil) • Agua marina y electrolitos acuosos (Sour Water and Aqueous Electrolytes)
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Utilidades</i> 	<p>Envolvente de fase, cálculos de hidratos, propiedades de componentes puros, punto crítico, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de recipientes, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Herramientas</i> 	<p>Ajuste del controlador PID, Regresión de datos binarios, Creador de compuestos, C7 + a granel y Curvas de destilación, Gerente de caracterización y reacciones de petróleo.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Análisis de procesos</i> 	<p>Utilidad de análisis de sensibilidad y optimización restringida multivariante.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • <i>Extras</i> 	<p>Sistema de secuencias de comandos e interfaz de complementos.</p>

Fuente: (DWSIM, 2020).

ANEXO B: Corriente de destilado en la columna de destilación reactiva (D1)

Variable	Cantidad	Unidades
Temperatura	339,634	K
Presión	1	bar
Flujo másico	15623,7	kg/h
Flujo molar	406,825	kmol/h
Flujo volumétrico	20,2871	m ³ /h
Densidad	770,13	kg/m ³
Peso molecular	38,404	kg/kmol
Entalpía específica	-923,7	kJ/kg
Entropía específica	-2,63495	kJ/[kg.K]
Entalpía molar	-35473,7	kJ/kmol
Entropía molar	-101,193	kJ/[kmol.K]
Conductividad térmica	0,180797	W/[m.K]
Fracción molar de carbonato de dimetilo	0,109623	
Fracción másica de carbonato de dimetilo	0,257125	
Flujo molar de carbonato de dimetilo	44,5974	kmol/h
Flujo másico de carbonato de dimetilo	4017,24	kg/h
Fracción molar de metanol	0,890377	
Fracción másica de metanol	0,742875	
Flujo molar de metanol	362,228	kmol/h
Flujo másico de metanol	11606,5	kg/h
Fracción molar de propilenglicol	3,19E-11	
Fracción másica de propilenglicol	6,32E-11	
Flujo molar de propilenglicol	1,30E-08	kmol/h
Flujo másico de propilenglicol	9,88E-07	kg/h
Fracción molar de carbonato de propileno	1,10E-11	
Fracción másica de carbonato de propileno	2,92E-11	
Flujo molar de carbonato de propileno	4,47E-09	kmol/h
Flujo másico de carbonato de propileno	4,56E-07	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO C: Corriente de residuo en la columna de destilación reactiva (B1)

Variable	Cantidad	Unidades
Temperatura	385,802	K
Presión	1,31	bar
Flujo másico	2233,32	kg/h
Flujo molar	35,8937	kmol/h
Flujo volumétrico	2,60387	m ³ /h
Densidad	857,693	kg/m ³
Peso molecular	62,2205	kg/kmol
Entalpía específica	-783,362	kJ/kg
Entropía específica	-1,67454	kJ/[kg.K]
Entalpía molar	-48741,2	kJ/kmol
Entropía molar	-104,19	kJ/[kmol.K]
Conductividad térmica	0,193161	W/[m.K]
Fracción molar de carbonato de dimetilo	3,09E-05	
Fracción másica de carbonato de dimetilo	4,48E-05	
Flujo molar de carbonato de dimetilo	0,00111012	kmol/h
Flujo másico de carbonato de dimetilo	0,0999973	kg/h
Fracción molar de metanol	0,315534	
Fracción másica de metanol	0,162492	
Flujo molar de metanol	11,3257	kmol/h
Flujo másico de metanol	362,896	kg/h
Fracción molar de propilenglicol	0,683447	
Fracción másica de propilenglicol	0,835842	
Flujo molar de propilenglicol	24,5314	kmol/h
Flujo másico de propilenglicol	1866,90	kg/h
Fracción molar de carbonato de propileno	0,000988381	
Fracción másica de carbonato de propileno	0,00162169	
Flujo molar de carbonato de propileno	0,0354767	kmol/h
Flujo másico de carbonato de propileno	3,62176	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO D: Corriente de destilado en la columna PSD (D2)

Variable	Cantidad	Unidades
Temperatura	415,409	K
Presión	11	bar
Flujo másico	13420,9	kg/h
Flujo molar	382,197	kmol/h
Flujo volumétrico	20,1418	m ³ /h
Densidad	666,319	kg/m ³
Peso molecular	35,1151	kg/kmol
Entalpía específica	-725,586	kJ/kg
Entropía específica	-2,17748	kJ/[kg.K]
Entalpía molar	-25479	kJ/kmol
Entropía molar	-76,4623	kJ/[kmol.K]
Conductividad térmica	0,164342	W/[m.K]
Fracción molar de carbonato de dimetilo	0,0529531	
Fracción másica de carbonato de dimetilo	0,135837	
Flujo molar de carbonato de dimetilo	20,2385	kmol/h
Flujo másico de carbonato de dimetilo	1823,04	kg/h
Fracción molar de metanol	0,947047	
Fracción másica de metanol	0,864163	
Flujo molar de metanol	361,958	kmol/h
Flujo másico de metanol	11597,8	kg/h
Fracción molar de propilenglicol	1,30E-24	
Fracción másica de propilenglicol	2,81E-24	
Flujo molar de propilenglicol	4,95E-22	kmol/h
Flujo másico de propilenglicol	3,77E-20	kg/h
Fracción molar de carbonato de propileno	9,78E-25	
Fracción másica de carbonato de propileno	2,84E-24	
Flujo molar de carbonato de propileno	3,74E-22	kmol/h
Flujo másico de carbonato de propileno	3,81E-20	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO E: Corriente de residuo en la columna PSD (B2)

Variable	Cantidad	Unidades
Temperatura	457,102	K
Presión	11,34	bar
Flujo másico	2202,84	kg/h
Flujo molar	24,6286	kmol/h
Flujo volumétrico	82,5364	m ³ /h
Densidad	26,6893	kg/m ³
Peso molecular	89,4423	kg/kmol
Entalpía específica	179,406	kJ/kg
Entropía específica	0,29776	kJ/[kg.K]
Entalpía molar	16046,4	kJ/kmol
Entropía molar	26,6323	kJ/[kmol.K]
Conductividad térmica	0,0245051	W/[m.K]
Fracción molar de carbonato de dimetilo	0,989048	
Fracción másica de carbonato de dimetilo	0,996077	
Flujo molar de carbonato de dimetilo	24,3589	kmol/h
Flujo másico de carbonato de dimetilo	2197,38	kg/h
Fracción molar de metanol	0,0109519	
Fracción másica de metanol	0,00392341	
Flujo molar de metanol	0,26973	kmol/h
Flujo másico de metanol	8,64265	kg/h
Fracción molar de propilenglicol	5,27E-10	
Fracción másica de propilenglicol	4,48E-10	
Flujo molar de propilenglicol	1,30E-08	kmol/h
Flujo másico de propilenglicol	9,88E-07	kg/h
Fracción molar de carbonato de propileno	1,81E-10	
Fracción másica de carbonato de propileno	2,07E-10	
Flujo molar de carbonato de propileno	4,47E-09	kmol/h
Flujo másico de carbonato de propileno	4,56E-07	kg/h

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO F: Datos de entrenamiento de la red neuronal artificial

N	Entradas (Variables Independiente)					Salidas (Residuos)	
	Alimentación	C1 (RD)		C2(PSD)		B1	B2
	T [K]	RR1	PC1 [bar]	RR2	PC2 [bar]	PG [Kg/h]	DMC [Kg/h]
1	306	0,56	2,04	1,01	13,22	1866,64	2157,68
2	310	1,04	1,98	0,64	11,12	1866,48	2185,66
3	305	0,68	2,78	1,41	11,65	1866,57	2189,94
4	309	1,50	1,07	1,56	10,95	1867,97	2225,62
5	294	0,72	2,97	1,61	10,20	1866,38	2184,13
6	292	0,82	1,88	1,72	14,92	1868,14	2252,24
7	301	0,49	1,89	1,30	10,67	1868,28	1907,05
8	309	0,41	1,24	1,55	10,98	1866,50	2193,08
9	295	0,30	2,20	0,78	14,59	1865,90	2185,76
10	305	0,79	2,25	1,64	14,10	1866,92	2229,77
11	308	1,36	1,54	1,15	10,65	1866,83	2192,49
12	295	0,36	1,7	1,77	13,02	1866,51	2194,28
13	291	0,97	1,72	1,78	13,11	1868,20	2223,57
14	306	1,07	1,79	0,71	14,08	1866,51	2189,46
15	294	0,15	1,67	1,16	11,92	1865,96	2184,85
16	298	1,50	2,42	1,88	13,41	1868,28	2222,11
17	302	0,4	2,85	1,30	14,54	1866,22	2189,84
18	298	0,71	2,95	1,65	11,87	1866,75	2191,85
19	295	1,46	1,15	1,05	11,29	1867,51	2156,14
20	292	0,70	2,25	0,97	13,69	1866,52	2190,47
21	294	0,52	1,36	0,57	10,23	1865,46	2135,90
22	296	1,05	2,91	1,15	12,95	1867,07	2130,26
23	307	0,45	2,59	1,32	10,87	1865,91	2183,79
24	308	0,72	1,2	1,86	13,57	1868,02	2221,98
25	300	1,39	2,67	1,38	12,08	1867,13	2195,31
26	297	1,35	2,61	1,58	11,24	1867,03	2204,72
27	308	0,72	1,37	1,01	12,71	1867,09	2096,06
28	308	1,36	1,11	0,88	14,93	1866,75	2184,51
29	300	0,16	2,31	0,66	13,38	1863,95	2174,31
30	301	0,15	2,38	1,15	13,19	1865,38	2178,85
31	300	0,88	1,26	1,61	11,67	1867,96	2221,36
32	298	0,91	1,4	0,6	13,81	1866,31	2188,13
33	305	0,67	1,72	1,91	12,99	1867,67	2238,84
34	304	0,4	1,99	1,05	10,71	1866,07	2184,11
35	308	0,76	1,42	1,49	10,23	1867,07	2120,68
36	293	0,45	2,82	0,62	13,09	1864,40	2147,57
37	303	1,14	1,30	0,55	13,23	1867,99	2118,70
38	305	1,18	2,92	1,52	14,64	1867,01	2229,06
39	301	1,15	1,29	1,1	10,72	1866,69	2192,08
40	299	0,72	2,18	0,57	12,12	1865,53	2180,20

41	297	0,88	2,77	1,73	14,13	1867,20	2198,55
42	296	1,17	2,43	1,45	14,39	1867,75	2236,07
43	297	0,28	1,27	1,59	12,88	1866,18	2192,83
44	307	1,11	2,52	1,61	11,06	1867,14	2195,99
45	296	0,79	2,08	1,48	11,46	1867,00	2161,50
46	299	0,92	2,92	0,60	10,27	1864,77	2171,76
47	302	0,69	2,34	1,95	10,94	1866,84	2193,91
48	303	1,34	2,83	1,79	10,08	1867,10	2194,10
49	301	1,43	1,48	0,6	14,21	1866,88	2193,02
50	306	0,85	2,12	0,78	11,99	1866,12	2201,47
51	292	0,91	1,07	1,00	12,89	1868,15	2091,83
52	303	1,42	2,39	1,38	12,28	1866,10	2262,51
53	293	0,42	1,99	0,63	11,64	1865,26	2176,74
54	300	0,61	1,20	1,59	12,61	1867,52	2230,60
55	306	1,35	2,27	0,5	14,87	1866,82	2190,52
56	307	0,62	1,95	0,67	12,74	1866,20	2185,41
57	308	0,56	2,64	2,00	12,85	1866,82	2195,16
58	302	0,34	1,43	0,59	10,78	1865,51	2177,50
59	307	0,65	2,78	0,95	14,43	1866,25	2188,30
60	297	0,65	1,33	1,94	12,54	1867,96	2247,44
61	309	1,02	2,02	1,49	14,25	1868,06	2245,82
62	293	1,07	1,04	0,66	10,88	1866,25	2187,41
63	309	0,79	2,15	0,72	13,11	1866,33	2187,34
64	310	1,03	2,02	0,67	11,98	1866,35	2186,08
65	302	0,80	1,62	1,95	11,90	1868,01	2243,62
66	309	1,27	2,58	1,75	12,01	1867,72	2228,38
67	306	1,04	2,92	0,7	10,84	1865,47	2177,22
68	300	0,22	1,85	1,59	12,07	1866,15	2189,38
69	306	1,47	2,17	1,08	14,19	1867,08	2200,30
70	290	1,23	2,28	1,08	12,65	1866,88	2189,46
71	295	0,3	2,62	1,08	13,73	1866,00	2186,20
72	297	1,01	1,04	1,71	10,11	1867,82	2220,30
73	294	0,31	1,83	1,73	14,91	1866,84	2197,94
74	309	1,12	2,28	1,44	12,95	1867,55	2227,44
75	297	0,14	2,18	0,66	10,89	1846,74	2263,42
76	296	1,3	2,43	0,91	13,74	1866,92	2192,95
77	305	0,24	2,83	1,23	14,98	1865,66	2187,12
78	303	0,39	2,81	0,9	14,32	1865,55	2182,38
79	308	0,15	2,29	1,98	10,44	1865,90	2185,92
80	297	0,62	1,62	1,51	13,48	1866,50	2218,29
81	300	1,49	1,52	0,58	12,48	1866,45	2185,71
82	290	1,29	2,59	0,63	10,20	1865,87	2177,79
83	298	0,66	2,18	1,36	14,97	1866,92	2196,40
84	304	0,46	1,51	0,77	13,57	1866,07	2187,86
85	295	0,67	1,04	1,34	12,18	1866,26	2238,49

86	290	1,03	2,87	1,90	12,76	1866,81	2224,09
87	294	0,60	2,89	1,31	10,58	1866,14	2184,31
88	300	0,96	2,04	0,75	13,54	1866,81	2191,94
89	292	0,29	1,90	0,54	14,13	1865,16	2178,71
90	295	1,19	1,48	1,21	12,92	1868,14	2235,41
91	290	0,28	1,02	0,58	10,59	1864,67	2175,43
92	295	0,77	2,30	0,98	11,75	1866,79	2097,91
93	303	1,33	1,89	1,51	10,51	1867,71	2214,17
94	307	1,09	2,16	0,58	14,76	1866,75	2190,49
95	294	0,78	2,92	0,64	14,40	1865,78	2183,60
96	303	0,15	1,27	0,72	11,63	1865,63	2180,62
97	294	0,41	1,76	1,19	12,42	1866,26	2188,67
98	302	0,57	1,72	1,61	12,37	1866,70	2192,22
99	305	1,38	2,39	1,00	12,59	1866,93	2192,49
100	306	1,10	2,18	0,57	14,15	1866,55	2189,00

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO G: Datos de validación de la red neuronal artificial

N	Entradas (Variables Independiente)					Salidas (Residuos)	
	Alimentación	C1 (RD)		C2(PSD)		B1	B2
	T [K]	RR1	PC1 [bar]	RR2	PC2 [bar]	PG [Kg/h]	DMC [Kg/h]
1	294	1,04	2,72	0,68	11,73	1865,85	2180,99
2	304	1,32	1,78	1,67	14,20	1868,08	2219,30
3	293	0,32	1,65	1,50	10,11	1866,01	2185,42
4	304	0,68	1,29	0,60	10,73	1865,67	2179,51
5	291	0,36	2,83	1,35	12,66	1866,01	2186,54
6	294	1,04	1,90	1,54	10,28	1868,27	2228,05
7	302	0,41	2,52	0,74	10,09	1864,01	2169,81
8	310	1,44	2,72	0,99	11,82	1868,44	2052,21
9	306	1,11	1,93	1,66	10,29	1868,28	2227,93
10	291	1,07	1,18	0,82	11,19	1868,17	2234,12
11	293	1,46	2,64	1,98	12,91	1868,37	2221,55
12	290	1,34	1,21	0,95	12,13	1868,06	2227,91
13	302	0,38	2,50	0,83	10,23	1864,74	2173
14	310	0,65	2,81	0,66	13,18	1865,57	2179,82
15	304	0,34	2,39	1,26	11,68	1866,12	2182,97
16	308	1,32	2,12	1,23	12,22	1868,31	2227,46
17	291	0,29	1,64	1,10	12,74	1866,24	2189,08
18	299	0,82	2,58	1,27	12,91	1867,37	2339,96
19	300	0,13	1,21	1,94	13,34	1867,05	2269,89
20	310	1,18	2,21	1,27	10,08	1868,46	2206,23

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO H: Lectura y normalización de los datos de entrenamiento

```
%01. LEER DATOS DESDE MICROSOFT EXCEL
Extraer=readtable('Base de datos.xlsx','Sheet','Datos Ent');
Datos = table2array(Extraer)';

%02. NORMALIZAR ENTRADAS Y SALIDAS
%Variables de entrada
entrada=Datos(1:5,:);

%Temperatura de alimentación
T_max=max(entrada(1,:));
T_min=min(entrada(1,:));
T_N =[(entrada(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];

%Relación de reflujo en la primera columna
RR1_max=max(entrada(2,:));
RR1_min=min(entrada(2,:));
RR1_N =[(entrada(2,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];

%Presión en la primera columna
PC1_max=max(entrada(3,:));
PC1_min=min(entrada(3,:));
PC1_N =[(entrada(3,1:end)-PC1_min)/(PC1_max-PC1_min)];

%Relación de reflujo en la segunda columna
RR2_max=max(entrada(4,:));
RR2_min=min(entrada(4,:));
RR2_N =[(entrada(4,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];

%Presión en la segunda columna
PC2_max=max(entrada(5,:));
PC2_min=min(entrada(5,:));
PC2_N =[(entrada(5,1:end)-PC2_min)/(PC2_max-PC2_min)];

%Entradas normalizadas
Entrada_N =[T_N;RR1_N;PC1_N;RR2_N;PC2_N];

%Variables de salida
salida=Datos(6:7,:);

%Flujo másico de Polietilenglicol (PG)en residuo de la primera columna
PG_max=max(salida(1,:));
PG_min=min(salida(1,:));
PG_N =[(salida(1,1:end)-PG_min)/(PG_max-PG_min)];

%Flujo másico de Carbonato de dimetilo(DMC)en residuo de la segunda
columna
DMC_max=max(salida(2,:));
DMC_min=min(salida(2,:));
DMC_N =[(salida(2,1:end)-DMC_min)/(DMC_max-DMC_min)];

%salidas normalizadas
Salida_N =[PG_N;DMC_N];
```

ANEXO I: Lectura y normalización de los datos de validación

```
%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Extraer=readtable('Base de datos.xlsx','Sheet','Datos Val');

%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Datosv = table2array(Extraer)';

%Cargar archivo net y parámetros maximos y minimos de la Salida de la
red neuronal
%load('RNA400BR.mat');

%Normalización de variables de entrada
entradav=Datosv(1:5,:);

%Temperatura de alimentación
T_Nv =[(entradav(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];

%Relación de reflujo en la primera columna
RR1_Nv =[(entradav(2,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];

%Presión en la primera columna
PC1_Nv =[(entradav(3,1:end)-PC1_min)/(PC1_max-PC1_min)];

%Relación de reflujo en la segunda columna
RR2_Nv =[(entradav(4,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];

%Presión en la segunda columna
PC2_Nv =[(entradav(5,1:end)-PC2_min)/(PC2_max-PC2_min)];

%entradas normalizadas
Entrada_Nv =[T_Nv;RR1_Nv;PC1_Nv;RR2_Nv;PC2_Nv];
```


ANEXO J: Código de entrenamiento de la red neuronal artificial

```
%03 DESARROLLAR LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 25-ene-2021 14:22:10
%
% This script assumes these variables are defined:
%
%   Entrada_N - input data.
%   Salida_N - target data.

x = Entrada_N;
t = Salida_N;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help ntrain
% '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'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

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

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

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

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

%04. RESULTADOS DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL

DatosPred = net(Entrada_N(1:end,:))

%Flujo másico de Polietilenglicol(PG)predicho
PG_pred = DatosPred(1,:).*(PG_max-PG_min)+PG_min';
```

```

%Flujo másico de Carbonato de dimetilo(DMC)predicho
DMC_pred = DatosPred(2, :).*(DMC_max-DMC_min)+DMC_min';

%Resultados predichos
Resultados_Pred=[PG_pred;DMC_pred]';

%Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la RNA
Real= salida;
Prediccion= Resultados_Pred';

%Flujo másico de Polietilenglicol en residuo de la primera columna
figure;
    plot(Real(1, :))
    hold on
    plot(Prediccion(1, :));grid;legend('DWSIM', 'RNA')
    xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
    ylabel('Flujo másico de Polietilenglicol(Kg/h)')
    title('Predicción del flujo másico de Polietilenglicol en residuo
de primera columna')

%Flujo másico de Carbonato de dimetilo en residuo de la segunda
columna
figure;
    plot(Real(2, :))
    hold on
    plot(Prediccion(2, :));grid;legend('DWSIM', 'RNA')
    xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
    ylabel('Flujo másico de Carbonato de dimetilo (Kg/h)')
    title('Predicción del flujo másico de Carbonato de dimetilo en
residuo de segunda columna')

```

ANEXO K: Código de validación de la red neuronal artificial

```
%Validación de la red neuronal artificial
DatosPredv = net(Entrada_Nv(1:end, :));

%Resultados de la red en la validación

%Flujo másico de Polietilenglicol(PG)predicho
PG_predv = DatosPredv(1, :).*(PG_max-PG_min)+PG_min';

%Flujo másico de Carbonato de dimetilo(DMC)predicho
DMC_predv = DatosPredv(2, :).*(DMC_max-DMC_min)+DMC_min';

%Resultados predichos en la validación
Resultados_Predv=[PG_predv;DMC_predv]';

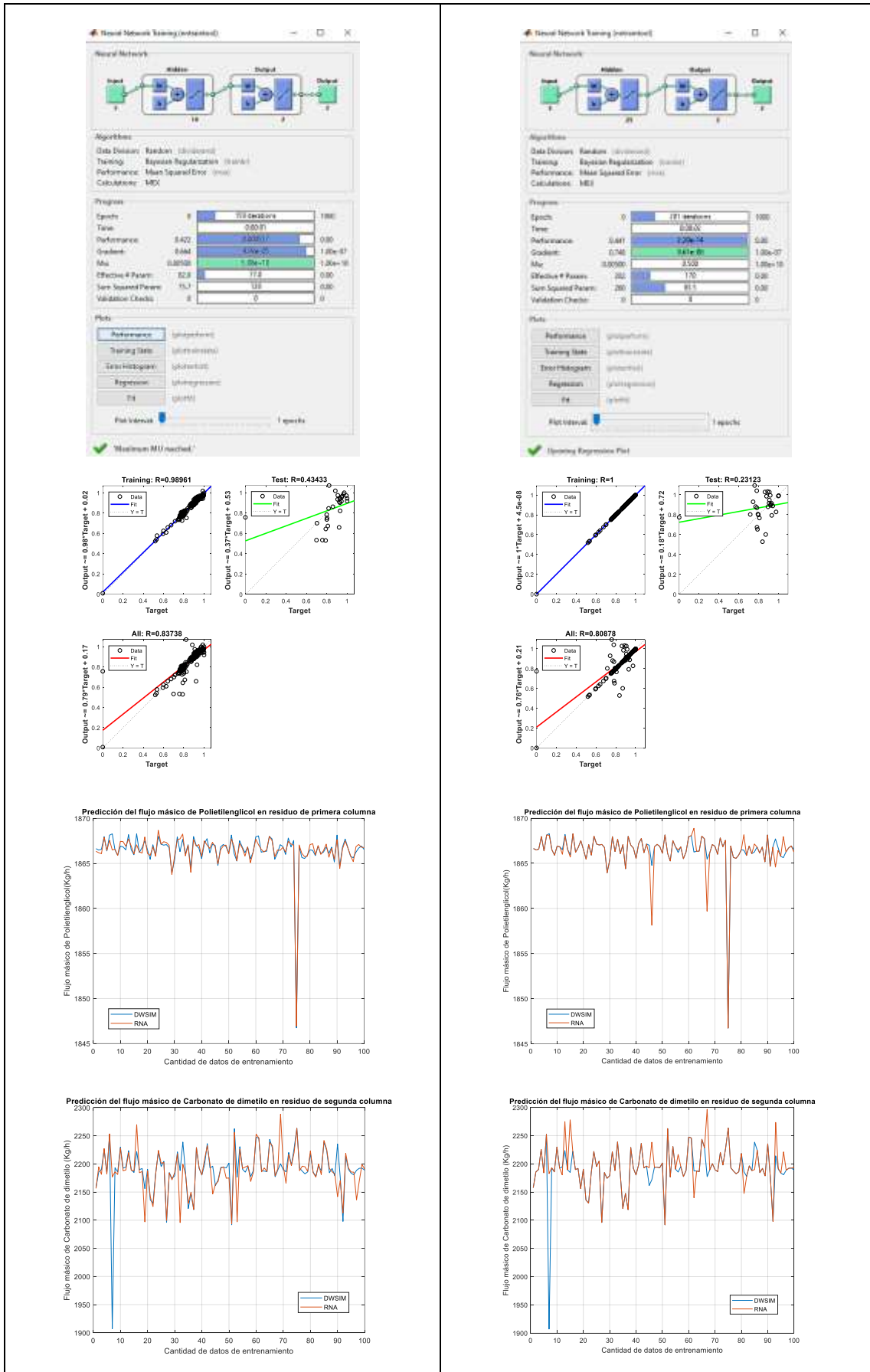
%
%_____GRAFICOS_____
%Parámetros de salida
salidav=Datosv(6:7, :);
Datos_RealesV=salidav';

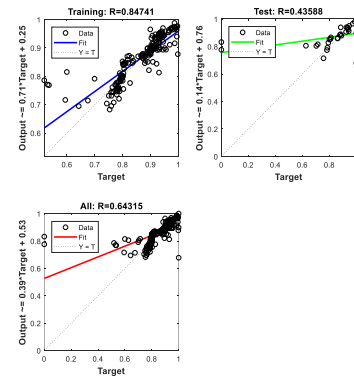
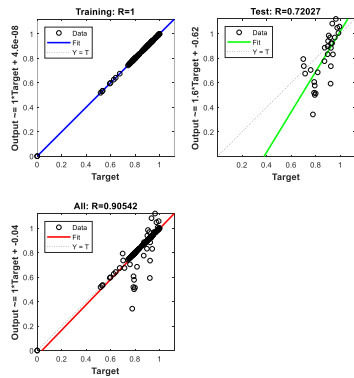
%Valores reales por DWSIM y valores predichos por la RNA
Realval= Datos_RealesV';
Prediccionval= Resultados_Predv';

%Flujo másico de Polietilenglicol en residuo de la primera columna
figure;
    plot(Realval(1, :))
    hold on
    plot(Prediccionval(1, :));grid;legend('DWSIM', 'RNA')
    xlabel('Cantidad de datos de validación')
    ylabel('Flujo másico de Polietilenglicol(Kg/h)')
    title('Predicción del flujo másico de Polietilenglicol en residuo
de primera columna')

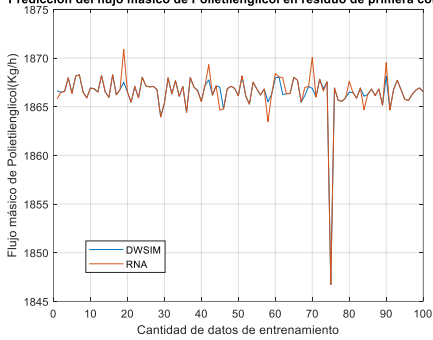
%Flujo másico de Carbonato de dimetilo en residuo de la segunda
columna
figure;
    plot(Realval(2, :))
    hold on
    plot(Prediccionval(2, :));grid;legend('DWSIM', 'RNA')
    xlabel('Cantidad de datos de validación')
    ylabel('Flujo másico de Carbonato de dimetilo (Kg/h)')
    title('Predicción del flujo másico de Carbonato de dimetilo en
residuo de segunda columna')
```

ANEXO L: Ensayos de entrenamiento de la red neuronal artificial

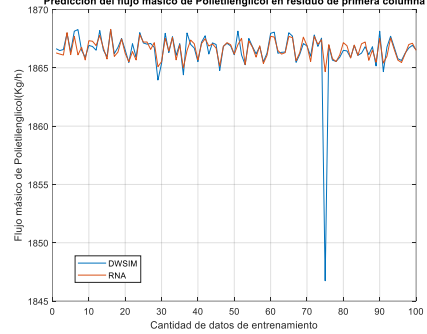




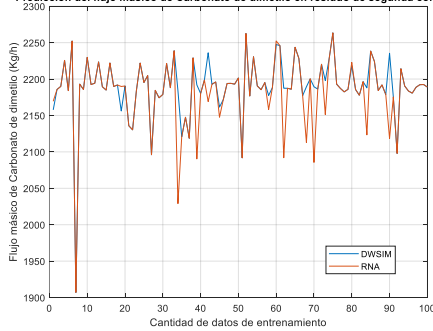
Predicción del flujo másico de Polietilenglicol en residuo de primera columna



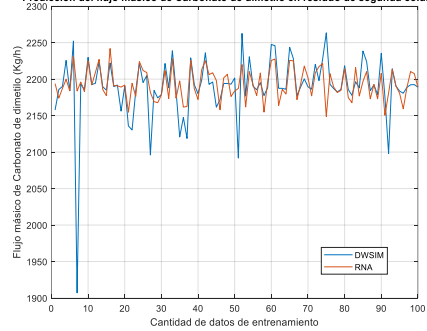
Predicción del flujo másico de Polietilenglicol en residuo de primera columna



Predicción del flujo másico de Carbonato de dimetilo en residuo de segunda columna



Predicción del flujo másico de Carbonato de dimetilo en residuo de segunda columna



ANEXO M: Resultados del entrenamiento de la red neuronal artificial

Flujo másico de polietilenglicol en residuo de la columna reactiva PG [Kg/h]			Flujo másico de carbonato de dimetilo en residuo de la columna PSD DMC [Kg/h]		
DWSIM	RNA	Error relativo (%)	DWSIM	RNA	Error relativo (%)
1866,64	1866,08	3,03E-02	2157,68	2165,21	3,48E-01
1866,48	1865,31	6,30E-02	2185,66	2273,53	3,86E+00
1866,57	1866,57	1,91E-06	2189,94	2189,94	7,23E-05
1867,97	1867,97	3,59E-06	2225,62	2225,62	4,49E-05
1866,38	1866,38	1,14E-05	2184,13	2184,13	2,06E-05
1868,14	1868,14	6,67E-06	2252,24	2252,24	5,10E-06
1868,28	1868,28	2,82E-09	1907,05	1907,06	4,56E-04
1866,50	1866,50	9,42E-06	2193,08	2193,08	9,16E-05
1865,90	1865,90	1,67E-06	2185,76	2185,76	7,93E-05
1866,92	1867,54	3,32E-02	2229,77	2216,61	5,94E-01
1866,83	1866,83	1,29E-05	2192,49	2192,49	1,38E-05
1866,51	1866,51	8,31E-06	2194,28	2194,28	5,71E-05
1868,20	1868,20	1,48E-06	2223,57	2223,57	3,84E-05
1866,51	1867,07	3,00E-02	2189,46	2186,31	1,44E-01
1865,96	1865,96	2,61E-05	2184,85	2184,85	2,83E-05
1868,28	1868,28	1,77E-06	2222,11	2222,11	1,63E-05
1866,22	1866,22	2,69E-06	2189,84	2189,84	4,49E-05
1866,75	1866,75	2,44E-06	2191,85	2191,85	2,93E-05
1867,51	1867,51	1,08E-05	2156,14	2156,14	6,79E-05
1866,52	1866,52	4,79E-06	2190,47	2190,47	9,99E-05
1865,46	1865,46	1,85E-05	2135,90	2135,90	8,38E-05
1867,07	1868,09	5,48E-02	2130,26	2201,87	3,25E+00
1865,91	1865,91	1,04E-05	2183,79	2183,79	1,03E-04
1868,02	1868,02	6,55E-06	2221,98	2221,98	3,05E-05
1867,13	1867,13	1,26E-05	2195,31	2195,31	4,27E-05
1867,03	1867,03	4,74E-06	2204,72	2204,72	3,21E-05
1867,09	1867,09	5,29E-06	2096,06	2096,06	1,82E-04
1866,75	1866,75	1,50E-05	2184,51	2184,51	2,69E-05
1863,95	1863,95	6,50E-06	2174,31	2174,31	2,28E-04
1865,38	1865,38	7,85E-07	2178,85	2178,85	1,24E-04
1867,96	1867,96	1,09E-05	2221,36	2221,36	1,03E-04
1866,31	1868,34	1,09E-01	2188,13	2128,47	2,80E+00
1867,67	1867,67	2,69E-06	2238,84	2238,84	4,20E-05
1866,07	1866,07	1,26E-05	2184,11	2184,11	1,01E-04
1867,07	1867,07	7,69E-06	2120,68	2120,68	8,32E-06
1864,40	1864,40	4,60E-06	2147,57	2147,57	6,57E-05
1867,99	1867,99	1,37E-06	2118,70	2118,70	8,88E-05
1867,01	1867,01	1,27E-05	2229,06	2229,06	6,04E-05
1866,69	1866,69	6,20E-06	2192,08	2192,08	9,96E-05

1865,53	1865,53	4,73E-07	2180,20	2180,20	2,10E-04
1867,20	1867,20	8,72E-06	2198,55	2198,55	1,32E-05
1867,75	1867,75	5,22E-06	2236,07	2236,07	4,53E-05
1866,18	1866,18	5,05E-06	2192,83	2192,83	1,05E-04
1867,14	1867,14	3,15E-06	2195,99	2195,99	1,70E-05
1867,00	1867,00	1,53E-05	2161,50	2161,50	2,33E-05
1864,77	1864,77	1,77E-05	2171,76	2171,76	1,53E-05
1866,84	1866,84	9,95E-06	2193,91	2193,91	6,68E-05
1867,10	1868,22	5,98E-02	2194,10	2078,75	5,55E+00
1866,88	1866,88	7,74E-06	2193,02	2193,02	7,51E-05
1866,12	1866,12	8,00E-06	2201,47	2201,47	2,65E-06
1868,15	1868,15	1,93E-05	2091,83	2091,83	1,02E-04
1866,10	1866,10	1,42E-05	2262,51	2262,51	1,27E-04
1865,26	1862,30	1,59E-01	2176,74	2152,71	1,12E+00
1867,52	1867,52	9,43E-06	2230,60	2230,60	6,81E-05
1866,82	1866,82	1,43E-05	2190,52	2190,52	4,52E-05
1866,20	1866,20	1,06E-05	2185,41	2185,41	2,21E-04
1866,82	1866,82	4,88E-06	2195,16	2195,16	2,66E-05
1865,51	1865,51	9,67E-06	2177,50	2177,50	1,45E-04
1866,25	1866,25	2,35E-06	2188,30	2188,30	1,09E-04
1867,96	1868,38	2,27E-02	2247,44	2173,00	3,43E+00
1868,06	1868,06	1,15E-05	2245,82	2245,82	1,19E-06
1866,25	1863,08	1,70E-01	2187,41	2220,74	1,50E+00
1866,33	1866,33	5,28E-07	2187,34	2187,34	3,32E-06
1866,35	1866,35	1,14E-06	2186,08	2186,08	7,56E-05
1868,01	1868,01	3,74E-06	2243,62	2243,62	2,37E-05
1867,72	1867,72	1,56E-06	2228,38	2228,38	1,07E-04
1865,47	1865,47	3,23E-06	2177,22	2177,22	9,05E-06
1866,15	1866,15	6,57E-07	2189,38	2189,38	6,62E-05
1867,08	1867,08	1,09E-05	2200,30	2200,30	2,59E-05
1866,88	1866,88	1,04E-05	2189,46	2189,46	2,09E-05
1866,00	1866,00	1,80E-05	2186,20	2186,20	1,06E-04
1867,82	1867,82	1,61E-05	2220,30	2220,30	7,55E-05
1866,84	1866,84	3,28E-06	2197,94	2197,94	4,87E-05
1867,55	1867,55	9,84E-06	2227,44	2227,44	3,14E-05
1846,74	1846,74	8,12E-06	2263,42	2263,42	1,23E-04
1866,92	1866,92	6,18E-06	2192,95	2192,95	1,36E-05
1865,66	1865,66	2,25E-05	2187,12	2187,12	7,32E-05
1865,55	1865,55	1,12E-05	2182,38	2182,38	3,90E-05
1865,90	1865,90	9,37E-07	2185,92	2185,92	5,63E-05
1866,50	1867,39	4,76E-02	2218,29	2209,62	3,92E-01
1866,45	1866,45	2,00E-06	2185,71	2185,71	2,16E-06
1865,87	1865,87	1,71E-05	2177,79	2177,79	1,01E-05
1866,92	1866,92	1,44E-05	2196,40	2196,40	6,77E-05
1866,07	1866,07	1,23E-06	2187,86	2187,86	1,08E-04

1866,26	1866,26	3,26E-06	2238,49	2238,49	7,04E-05
1866,81	1866,81	3,33E-06	2224,09	2224,09	6,73E-05
1866,14	1862,68	1,86E-01	2184,31	2134,69	2,32E+00
1866,81	1866,02	4,21E-02	2191,94	2215,91	1,08E+00
1865,16	1865,16	8,46E-06	2178,71	2178,71	1,79E-04
1868,14	1868,14	2,02E-06	2235,41	2235,41	4,21E-05
1864,67	1864,67	3,70E-06	2175,43	2175,43	7,44E-05
1866,79	1866,79	1,74E-05	2097,91	2097,91	7,90E-05
1867,71	1867,71	1,58E-05	2214,17	2214,17	2,11E-05
1866,75	1866,75	1,42E-05	2190,49	2190,49	1,01E-04
1865,78	1865,78	9,17E-06	2183,60	2183,60	3,27E-05
1865,63	1867,95	1,24E-01	2180,62	2074,93	5,09E+00
1866,26	1866,26	1,11E-05	2188,67	2188,67	1,29E-04
1866,70	1866,57	7,03E-03	2192,22	2185,35	3,14E-01
1866,93	1866,93	6,55E-06	2192,49	2192,49	1,82E-05
1866,55	1866,55	1,63E-05	2189,00	2189,00	8,31E-05

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.

ANEXO N: Resultados de la validación de la red neuronal artificial

Flujo másico de polietilenglicol en residuo de la columna reactiva PG [Kg/h]			Flujo másico de carbonato de dimetilo en residuo de la columna PSD DMC [Kg/h]		
DWSIM	RNA	Error relativo (%)	DWSIM	RNA	Error relativo (%)
1865,85	1865,85	1,94E-07	2180,99	2180,99	2,45E-06
1868,08	1868,08	1,85E-07	2219,30	2219,30	3,66E-06
1866,01	1866,01	4,07E-07	2185,42	2185,42	3,17E-06
1865,67	1865,67	2,84E-07	2179,51	2179,51	2,02E-06
1866,01	1866,01	7,34E-08	2186,54	2186,54	1,99E-06
1868,27	1867,47	4,28E-02	2228,05	2231,51	1,55E-01
1864,01	1864,01	5,43E-07	2169,81	2169,81	1,17E-05
1868,44	1867,16	6,86E-02	2052,21	2046,90	2,59E-01
1868,28	1868,28	2,09E-07	2227,93	2227,93	2,00E-06
1868,17	1867,34	4,43E-02	2234,12	2221,39	5,70E-01
1868,37	1868,37	1,53E-07	2221,55	2221,55	4,93E-06
1868,06	1868,06	8,56E-08	2227,91	2227,91	1,35E-06
1864,74	1864,74	6,49E-07	2173,00	2173,00	1,58E-05
1865,57	1865,57	5,66E-07	2179,82	2179,82	2,45E-06
1866,12	1866,98	4,62E-02	2182,97	2175,40	3,47E-01
1868,31	1868,31	7,95E-07	2227,46	2227,46	1,14E-05
1866,24	1866,24	7,78E-08	2189,08	2189,08	9,70E-07
1867,37	1867,37	1,40E-07	2339,96	2339,96	1,24E-05
1867,05	1867,05	2,36E-07	2269,89	2269,89	3,35E-06
1868,46	1868,46	2,17E-07	2206,23	2206,23	2,92E-06

Realizado por: Iza, Yólida, 2021.



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE UNIDAD DE
PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL**

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 26 / 08 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Yólida Narcisa Iza Corrales</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniera Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO
FABIO
MEDINA
NUSTE**

Firmado digitalmente por
LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, o=BANCO CENTRAL DEL
ECUADOR, ou=ENTIDAD DE
CERTIFICACION DE
INFORMACION-ECIBCE, l=QUITO,
serialNumber=0000621485,
cn=LEONARDO FABIO MEDINA
NUSTE
Fecha: 2021.08.26 11:58:26 -05'00'



1651-DBRA-UTP-2021