



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**FACULTAD DE CIENCIAS  
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

**EVALUACIÓN DEL USO DE REDES NEURONALES  
ARTIFICIALES EN LA PREDICCIÓN DE RESULTADOS DE UN  
PROCESO DE ISOMERIZACIÓN PARA SU USO COMO  
HERRAMIENTA DIDÁCTICA EN LA MATERIA DE  
SIMULACIÓN DE PROCESOS**

**Trabajo de Titulación**

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

**INGENIERO QUÍMICO**

**AUTOR: JEFFERSON WILMER JAYA SILVA**

**DIRECTOR: Ing. DARÍO FERNANDO GUAMÁN LOZADA MsC.**

Riobamba – Ecuador

2022

© 2022, **Jefferson Wilmer Jaya Silva**


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, JEFFERSON WILMER JAYA SILVA, 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, 18 de enero del 2022

JEFFERSON  
WILMER  
JAYA SILVA



Firmado digitalmente  
por JEFFERSON  
WILMER JAYA SILVA  
Fecha: 2022.01.26  
19:18:13 -05'00'

.....  
**Jefferson Wilmer Jaya Silva**

**210067708-3**

**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de Titulación; Tipo: Propuesta Tecnológica. **EVALUACIÓN DEL USO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA PREDICCIÓN DE RESULTADOS DE UN PROCESO DE ISOMERIZACIÓN PARA SU USO COMO HERRAMIENTA DIDÁCTICA EN LA MATERIA DE SIMULACIÓN DE PROCESOS**, realizado por el señor: **JEFFERSON WILMER JAYA SILVA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal autoriza su presentación.

	<b>FIRMA</b>	<b>FECHA</b>
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco MsC. <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	 Firmado electrónicamente por: <b>DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO</b>	2022-01-18
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada MsC. <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN</b>	 Firmado electrónicamente por: <b>DARIO FERNANDO GUAMAN LOZADA</b>	2022-01-18
Ing. Adrián Alejandro Rodríguez Pinos Mgs. <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	 Firmado electrónicamente por: <b>ADRIAN ALEJANDRO RODRIGUEZ PINOS</b>	2022-01-18

## **DEDICATORIA**

El presente trabajo va dedicado a todas aquellas personas que me brindaron su apoyo y amistad a lo largo de toda mi travesía académica en especial a mi amiga y confidente Gissela Venlasaga que junto con mi madre Hilda Silva siempre han permanecido firme apoyándome e impulsándome en todo momento.

*Jefferson*

## **AGRADECIMIENTO**

Agradezco infinitamente a mi madre Hilda Silva quien ha sido ese pilar y apoyo incondicional a lo largo de toda mi vida, en especial durante mi trayecto universitario y con quien estaré eternamente agradecido, agradezco a mis maestros que con sus conocimientos y sabiduría supieron guiarme en mi formación tanto profesionalmente y como individuo, finalmente agradezco profundamente a la Escuela Superior de Chimborazo en especial a la Facultad de Ciencias por su noble labor académica y su excelencia educativa en la formación de Ingenieros Químicos.

*Jefferson*

## TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xiii
RESUMEN... ..	xiv
SUMMARY... ..	xv

### CAPÍTULO I

1.	INTRODUCCIÓN.....	1
1.1.	Antecedentes.....	1
1.2.	Planteamiento del problema.....	3
1.3.	Objetivos.....	4
1.3.1.	<i>Objetivo General</i> .....	4
1.3.2.	<i>Objetivos Específicos</i> .....	4
1.4.	Justificación del proyecto.....	5
1.5.	Alcance.....	6

### CAPÍTULO II

2.	MARCO TEÓRICO.....	7
2.1.	Estado del arte.....	7
2.2.	Bases Teóricas.....	8
2.2.1.	<i>Destilación</i> .....	8
2.2.1.1.	<i>Metodos de destilación – Mezclas de dos componentes</i> .....	10
2.2.1.2.	<i>Columna de destilación</i> .....	10
2.2.1.3.	<i>Componentes principales de una columna de destilación</i> .....	11
2.2.1.4.	<i>Operación basica y terminología</i> .....	12
2.2.2.	<i>Isomerización</i> .....	13
2.2.2.1.	<i>Proceso de isomerización</i> .....	14
2.2.2.2.	<i>Definición de equipos y condiciones de operación</i> .....	16
2.2.2.3.	<i>Catalizadores empleados en la actualidad</i> .....	17

2.2.3.	<i>DWSIM – Chemical Process Simulator</i> .....	18
2.2.3.1.	<i>CAPE OPEN</i> .....	18
2.2.3.2.	<i>Modelos termodinámicos</i> .....	20
2.2.4.	<i>Redes neuronales artificiales</i> .....	22
2.2.2.1.	<i>Operaciones de las redes neuronales</i> .....	23
2.2.2.2.	<i>Componentes principales de una neurona artificial</i> .....	24
2.2.2.3.	<i>Enseñar a una red neuronal artificial</i> .....	26
2.2.2.4.	<i>Selección de la red</i> .....	27
2.2.2.5.	<i>Redes de predicción</i> .....	28

### CAPÍTULO III

3.	<b>METODOLOGÍA</b> .....	29
3.1.	<b>Establecimiento de parámetros y variables de estudio</b> .....	29
3.1.1.	<i>Selección de variables</i> .....	31
3.1.2.	<i>Operacionalización de variables</i> .....	32
3.2.	<b>Simulación en DWSIM</b> .....	32
3.2.1.	<i>Validación de la simulación</i> .....	35
3.3.	<b>Obtención de la base de datos</b> .....	36
3.4.	<b>Diseño de la red neuronal</b> .....	36
3.4.1.	<i>Normalización de entradas y salidas</i> .....	37
3.4.2.	<i>Desarrollo de la red neuronal artificial</i> .....	37
3.4.3.	<i>Arquitectura de la red neuronal</i> .....	38
3.5.	<b>Entrenamiento y validación</b> .....	40
3.5.1.	<i>Selección del algoritmo de entrenamiento</i> .....	40
3.5.2.	<i>Validación de la red neuronal</i> .....	41
3.6.	<b>Análisis estadístico</b> .....	41

### CAPÍTULO IV

4.	<b>GESTIÓN DEL PROYECTO</b> .....	42
4.1.	<b>Cronograma</b> .....	42
4.2.	<b>Presupuesto</b> .....	43
4.3.	<b>Recursos materiales</b> .....	43
4.4.	<b>Resultados</b> .....	43
4.4.1.	<i>Sistema de destilación</i> .....	43



4.4.2.	<i>Análisis de datos proporcionados por DWSIM</i> .....	45
4.4.3.	<i>Programación y diseño de la red neuronal artificial</i> .....	46
4.4.3.1.	<i>Normalización de los datos</i> .....	47
4.4.3.2.	<i>Código y diseño de la red neuronal</i> .....	47
4.4.4.	<i>Análisis estadístico</i> .....	51
4.4.4.1.	<i>Análisis ANOVA</i> .....	51
4.4.5.	<i>Predicciones de la red neuronal</i> .....	55
<b>CONCLUSIONES</b> .....		56
<b>RECOMENDACIONES</b> .....		57
<b>GLOSARIO</b>		
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>		
<b>ANEXOS</b>		

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2.</b>	Lista de principales equipos necesarios en una unidad de isomerización. ....	16
<b>Tabla 2-2.</b>	Selección de red .....	28
<b>Tabla 1-3.</b>	Parámetros de diseño óptimos para la isomerización de n-butano a isobutano. ....	30
<b>Tabla 2-3.</b>	Variables de operación .....	32
<b>Tabla 3-3.</b>	Condiciones de la corriente de alimentación .....	34
<b>Tabla 4-3.</b>	Especificaciones para la columna de destilación .....	35
<b>Tabla 5-3.</b>	Validación de la simulación realizada en DWSIM.....	35
<b>Tabla 6-3.</b>	Rango de especificaciones de los componentes de alimentación .....	36
<b>Tabla 7-3.</b>	Variables de entrada y salida establecidas en el modelo de predicción.....	37
<b>Tabla 8-3.</b>	Pruebas de entrenamientos .....	39
<b>Tabla 1-4.</b>	Cronograma del proyecto .....	42
<b>Tabla 2-4.</b>	Presupuesto del proyecto.....	43
<b>Tabla 3-4.</b>	Corriente de destilado (D).....	44
<b>Tabla 4-4.</b>	Corriente de residuo (W).....	44
<b>Tabla 5-4.</b>	Validación de la simulación. ....	45
<b>Tabla 6-4.</b>	Variables de codificación empleados en el diseño de la red neuronal.....	46
<b>Tabla 7-4.</b>	Resultados de pruebas de entrenamiento.....	47
<b>Tabla 8-4.</b>	Tabla ANOVA para la fracción molar de isobutano en el destilado.....	52
<b>Tabla 9-4.</b>	Tabla ANOVA para la fracción molar de isopentano en el residuo.....	53
<b>Tabla 10-4.</b>	Tabla ANOVA para el flujo molar del destilado .....	53
<b>Tabla 11-4.</b>	Tabla ANOVA para el flujo molar del residuo.....	53
<b>Tabla 12-4.</b>	Resumen de resultados de la Tabla ANOVA para flujos y fracciones molares de isobutano en el destilado e isopentano en el residuo .....	54
<b>Tabla 13-4.</b>	Comparación de los resultados del proceso de isomerización de n-butano a isobutano .....	55

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2.</b>	Esquema de ingeniería química de la destilación fraccionada binaria continúa industrial.....	9
<b>Figura 2-2.</b>	Diagrama de equilibrio liquido-vapor a presión temperatura constante .....	10
<b>Figura 3-2.</b>	Transferencia de masa y energía entre fase líquida y gaseosa.....	11
<b>Figura 4-2.</b>	Columna de destilación típica .....	12
<b>Figura 5-2.</b>	Destilación por lotes con columna rectificadora .....	13
<b>Figura 6-2.</b>	Esquema de isomerización de n-butano a isobutano .....	15
<b>Figura 7-2.</b>	Alimentación de butanos en la unidad de isomerización .....	15
<b>Figura 8-2.</b>	Paquetes de propiedades .....	19
<b>Figura 9-2.</b>	Operaciones unitarias .....	19
<b>Figura 10-2.</b>	Algoritmo WAR .....	20
<b>Figura 11-2.</b>	Selección de métodos termodinámicos .....	21
<b>Figura 12-2.</b>	Características de los modelos termodinámicos.....	22
<b>Figura 13-2.</b>	Diagrama de una red neuronal simple.....	23
<b>Figura 1-3.</b>	Etapas de la metodología del proyecto.....	29
<b>Figura 2-3.</b>	Diagrama de flujo del proceso de isomerización .....	30
<b>Figura 3-3.</b>	Diagrama tecnológico del proceso de isomerización .....	31
<b>Figura 4-3.</b>	Esquema del proceso de isomerización.....	33
<b>Figura 5-3.</b>	Herramientas de diseño de red Network Fitting.....	38
<b>Figura 6-3.</b>	Selección de datos normalizados .....	38
<b>Figura 7-3.</b>	Selección de la red neuronal .....	39

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-4.</b>	Arquitectura de red de 20 neuronas.....	48
<b>Gráfico 2-4.</b>	Correlación de entrenamiento de red de 20 neuronas.....	48
<b>Gráfico 3-4.</b>	Curvas de aprendizaje de red de 20 neuronas.....	49
<b>Gráfico 4-4.</b>	Comparación de datos reales de DWSIM vs datos predichos de la red neuronal de 20 neuronas del flujo molar en el destilado.....	49
<b>Gráfico 5-4.</b>	Comparación de datos reales vs datos predichos de la red neuronal de 20 neuronas de la fracción molar de isobutano en el destilado.....	50
<b>Gráfico 6-4.</b>	Comparación de datos reales de DWSIM vs datos predichos de la red neuronal de 15 neuronas del flujo molar en el residuo .....	50
<b>Gráfico 7-4.</b>	Comparación de datos reales vs datos predichos de la red neuronal de 15 neuronas de la fracción molar de isopentano .....	51
<b>Gráfico 8-4.</b>	Gráfico ANOVA de comparación de medias del isobutano en el destilado .....	52
<b>Gráfico 9-4.</b>	Gráfico ANOVA de comparación de medias del isopentano en el residuo.....	53
<b>Gráfico 10-4.</b>	Grafico ANOVA de comparacion de medias del flujo molar del destilado.....	53
<b>Gráfico 11-4.</b>	Grafico ANOVA de compracion de medias del flujo molar del residuo.....	54

## ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A:** BASE DE DATOS DE ENTRENAMIENTO GENERADA EN DWSIM PARA EL PROCESO DE ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO A ISOBUTANO.
- ANEXO B:** BASE DE DATOS DE VALIDACIÓN PROCESADA EN DWSIM PARA EL PROCESO DE ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO A ISOBUTANO
- ANEXO C:** NORMALIZACIÓN DE LOS DATOS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL
- ANEXO D:** CÓDIGO DE LA RED NEURONAL
- ANEXO E:** CÓDIGO DE LOS RESULTADOS PREDICHOS EN LA RED NEURONAL
- ANEXO F:** CÓDIGO PARA LAS GRAFICAS EN LA VALIDACION DE LAS VARIABLES DE SALIDA

## ÍNDICE DE ABREVIATURAS

<b>RNA</b>	Red neuronal artificial
<b>MSE</b>	Error cuadrático medio
<b>R</b>	Coefficiente de correlación de Pearson
<b>RT</b>	Correlación total
<b>F</b>	Razón en análisis ANOVA
<b>F</b>	Fahrenheit
<b>psi</b>	Libra por pulgada cuadrada
<b>h</b>	Hora
<b>lbm</b>	libra-masa
<b>lbmol</b>	libra-mol
<b>lbm/h</b>	libra masa por hora
<b>lbmol/h</b>	libra-mol por hora
<b>ft<sup>3</sup>/h</b>	Pie cubico por hora
<b>A</b>	Flujo molar en la alimentación
<b>D</b>	Flujo molar en destilado
<b>W</b>	Flujo molar en residuo
<b>X<sub>C3</sub></b>	Fracción molar de propano
<b>X<sub>iC4</sub></b>	Fracción molar de isobutano
<b>X<sub>nC4</sub></b>	Fracción molar de n-butano
<b>X<sub>iC5</sub></b>	Fracción molar de isopentano
<b>RR</b>	Relación de Reflujo
<b>%Crx</b>	Porcentaje de conversión en el reactor
<b>N</b>	Datos normalizados
<b>MLP</b>	Perceptrón multicapa
<b>LM</b>	Levenberg-Marquardt
<b>BR</b>	Regularización bayesiana

## RESUMEN

El objetivo de este trabajo se fundamenta en el desarrollo y evaluación de una red neuronal que sea capaz de predecir la concentración molar de isobutano e isopentano en un proceso de isomerización con un coeficiente de correlación lo más cercano a 1. Para el diseño de la red primero se modela el sistema a través de un software de simulación de código abierto, DWSIM, una vez simulado se obtiene a partir de este una base de 115 pares de datos haciendo variar las fracciones molares en la alimentación, relación de reflujo y porcentaje de conversión, a este grupo de datos se le aplica un análisis estadístico para verificar la existencia de datos atípicos y corroborar si la media de los datos es aceptable. En el software Matlab se selecciona la arquitectura y el logaritmo de red que mejor se adapte al conjunto de datos. Finalmente se procedió aplicar un análisis estadístico para realizar la comparación entre los valores arrojados por el simulador y los predichos por la red neuronal. Como resultados finales se verificó que la red que mejor se ajusta adecuadamente es el algoritmo Bayesian Regularization con una red de veinte neuronas ocultas, seis neuronas de entrada y cuatro neuronas de salida, dando un error cuadrático medio de  $1,73e-04$  y un coeficiente de correlación total de 0,9990. Concluyendo de esta manera que la red es capaz de predecir la fracción molar de isobutano e isopentano en el proceso de isomerización con la misma exactitud que lo haría un simulador ya que no existe una diferencia significativa entre las medias de los datos reales y los predichos por la red. Se recomienda emplear diferentes métodos termodinámicos y rangos específicos para las variables de entrada y de esta manera obtener resultados idóneos a la realidad del sistema de isomerización.

**Palabras clave:** <INGENIERÍA Y TECNOLOGIA>, <CONTROL AUTOMÁTICO>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>, < MATLAB (SOFTWARE)>, <SIMULACION>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <PROCESO DE ISOMERIZACION>.

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: 2022.01.13 15:34:54 -05'00'



0055-DBRA-UTP-2022

## ABSTRACT

The objective of this work is based on the development and evaluation of a neural network capable of predicting the molar concentration of isobutane and isopentane in an isomerization process with a correlation coefficient as close to 1. For the design of the network, the system is first modeled through an open code simulation software, DWSIM; once simulated, a base of 115 pairs of data is obtained from it by varying the mole fractions in the feed, reflux relationship and conversion percentage; a statistical analysis is applied to this group of data to verify the existence of atypical data and to corroborate if the mean of the data is acceptable. The Matlab software is used to select the architecture and the network logarithm that best suits the data set. Finally, a statistical analysis was applied to compare the values obtained by the simulator to those predicted by the neural network. As final result, it was verified that the best fitting network is the Bayesian Regularization algorithm with a network of twenty hidden neurons, six input neurons and four output neurons, giving a mean square error of  $1.73e-04$  and a total correlation coefficient of 0.9990. Thus concluding that the network is able to predict the mole fraction of isobutane and isopentane in the isomerization process with the same accuracy as a simulator would do, since there is no significant difference between the means of the real data and those predicted by the network. It is recommended to use different thermodynamic methods and specific ranges for the input variables to obtain results suitable to the reality of the isomerization system.

**Keywords:** <ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <AUTOMATIC CONTROL>, <ARTIFICIAL NEURAL NETWORK (ANN)>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <SIMULATION>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <ISOMERIZACION PROCESS>.

ANA GABRIELA REINOSO ESPINOSA  
Firmado digitalmente  
por ANA GABRIELA  
REINOSO ESPINOSA  
Fecha: 2022.01.17  
23:09:00 -05'00'



# CAPÍTULO I

## 1. INTRODUCCIÓN

### 1.1. Antecedentes

La producción de gasolinas de alto octanaje se ha venido desarrollando hace más de seis décadas y fueron utilizadas para proporcionar combustible a los aviones en la segunda gran guerra, esto mediante el proceso de alquilación, término que en química es conocido como una serie de reacciones que poseen como característica la incorporación de un grupo alquilo, con un determinado número de átomos de carbono a un agente alquilante que puede ser un alqueno, un alcohol o halogenuro de alquilo (Dalla, 2011, p. 24). Este proceso es empleado en muchas refinerías a nivel global para producir alquilatos de alta calidad que posteriormente son usados para mezclas con otras gasolinas (Luyben, 2011, p. 3382), esto con la finalidad de disminuir el grado de contaminación que causan la combustión de gasolinas en automotores aplicando para ello la eliminación de algunos componentes corrientes en la gasolina e incorporando alquilato y compuestos oxigenados que ayuden a mantener el número de octanos (Oviedo 2011, p. 48), favoreciendo una combustión limpia.

En el proceso de alquilación se ven involucrados sustancias químicas como los catalizadores ácidos donde reaccionan las olefinas y las isoparafinas con átomos de carbono terciarios como el isobutano o el isopentano (Villegas et al., 2006, p. 84). Siendo fundamental el isobutano ya que el isopentano como tal ya posee un número de octano (Oviedo, 2011, p. 49), lo suficientemente alto como para ser mezclado directamente con otras gasolinas para dar naftas de alta calidad, el problema radica en la cantidad de isobutano presente en las refinerías que no es la suficiente para cumplir el requerimiento de los procesos que implican alquilación, razón por la cual se debe acudir a la elaboración de isobutano por vías alternas.

La isomerización aparece como un método confiable del cual podemos extraer el isobutano necesario para los procesos de alquilación (Oviedo, 2011, p. 50), el reactor de isomerización es el corazón del proceso en la refinería del petróleo para mejorar el índice de octano de investigación de los productos de gasolina.

El proceso de isomerización es considerado como una solución simple, económica y muy atractiva para producir gasolina limpia con un alto índice de octanaje. Es deseable incluir nafta ligera en la gasolina y encontrar una formulación que pueda cumplir las especificaciones de índice de octanaje y corte de destilación inicial. Lo normal parafinas (C5 / C6) es difícil de incluir en el grupo de gasolina porque tienen índice de octanaje bajo. Convertirlos en compuestos ramificados con alto índice de octanaje a través del proceso de isomerización los hace más favorables para su

inclusión en la gasolina. La isomerización catalítica de mezclas de pentanos y hexanos se lleva a cabo habitualmente durante lecho fijo de catalizador que utiliza hidrógeno en condiciones de funcionamiento que minimizan las reacciones de hidro craqueo pero potencia las reacciones de isomerización (Ahmed et al. 2018, p. 8).

## **1.2. Planteamiento del problema**

Los análisis de procesos industriales se han realizado empleando plantas piloto que ayudan a solventar y responder dudas que surgen dentro del estudio de un proceso industrial, y para implementar tales plantas es indispensable una inversión inicial que en muchas veces resulta costoso y además de la incertidumbre de no saber si arrojará resultados correctos o con un margen de error aceptable. En nuestro caso en lo que respecta al control de la pureza de un producto se puede lograr por medio de varias alternativas, manipulando las variables que están relacionadas a la tasa de flujo o reflujo del proceso y, para ello se debe considerar un diseño de equipo fijo y un sistema con control desarrollado. Sin embargo, poner en marcha estos experimentos demanda tiempo, además de como mencionamos anteriormente el factor económico resulta elevado debido en sí a la cantidad de parámetros involucrados.

Por lo tanto, la manera de evitar estos problemas descritos resulta conveniente predecir datos experimentales con la ayuda de programas de simulación disponibles. Entre las metodologías de simulación para esta clase problemas mencionados cabe destacar el uso de redes neuronales por su capacidad de reflejar relaciones complejas entre variables y de dar respuestas rápidas aceptables.

En cuanto a la predicción, la tecnología actual ha permitido la creación de redes neuronales artificiales, esta tecnología se presenta como una variante de gran aplicabilidad a la solución de problemas, debido a su capacidad exclusiva como aproximada de funciones matemáticamente desconocidas y clasificación de patrones, que las convierten en una herramienta con grandes ventajas frente a los métodos convencionales de predicción.

### **1.3. Objetivos**

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

Evaluar una red neuronal en la predicción de resultados de un proceso de isomerización para su uso como herramienta didáctica en la materia de simulación de procesos.

#### ***1.3.2. Objetivos Específicos***

- Recopilar y procesar una base de datos generada por simulación del proceso de destilación con un reactor de isomerización.
- Entrenar una red neuronal artificial capaz de predecir con precisión la composición del producto de un proceso de isomerización.
- Evaluar la capacidad predictiva de la red neuronal con datos obtenidos de estudios de isomerización mediante un análisis estadístico.

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

En la actualidad, el empleo de simuladores para el modelado y diseño de procesos se ha convertido en una herramienta eficaz para la creación y optimización de procesos en la industria química y petroquímica y son partes esenciales dentro de la complementación de un ingeniero químico.

Los avances tecnológicos nos han facilitado enormemente el uso de software especializados capaz de desarrollar cálculos avanzados y un corto tiempo facilitando estudios y procesos que normalmente nos consumiría una gran cantidad de tiempo y dinero cumpliendo un rol fundamental en el diseño y optimización de procesos industriales.

En este proyecto se pretende diseñar una red neuronal para las estimaciones de los datos y cálculos presentes en los procesos de alquilación de olefinas como una forma de aportar al desarrollo tecnológico de la industria y educación. En efecto, éste es un campo de desempeño de un Ingeniero Químico de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, quien está capacitado para diseñar, controlar y evaluar procesos industriales en general, empleando simuladores.

La investigación va dirigida a los estudiantes de Ingeniería Química y carreras afines, quienes serán los principales beneficiarios del uso de simuladores con código abierto y desarrollo de proyectos relacionados con la predicción mediante redes neuronales artificiales.

### **1.5. Alcance**

Este proyecto está dentro de las líneas de investigación presentes en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo en la cual se tiene como objetivo desarrollar proyectos afines a la investigación científica y tecnológica garantizando el fortalecimiento académico y el mejoramiento en la calidad de vida de la sociedad.

Esta investigación pretende diseñar una red neuronal donde se vea reflejado la capacidad de conversión por isomerización y cuyos resultados sean similares o cercanos a los arrojados por un software especializado de simulación de procesos químicos de código abierto, ampliando de esta manera la disponibilidad de recurso tecnológicos y educativos, además de aportar a la formación correcta de ingenieros químicos dentro de esta prestigiosa institución.

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1. Estado del arte

La isomerización del n-butano ha atraído a muchos investigadores en la última década con el fin de investigar el potencial catalizador candidato para reemplazar el catalizador no ecológico Pt / Cl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Recientemente, el precio del n-butano ha disminuido debido al aumento de la producción de n-butano a partir del rápido crecimiento de la explotación de gas natural en esquisto y formación rocosa compacta y baja demanda de n-butano en el mercado (Dalla 2011), por lo tanto, se insta a un proceso químico alternativo para convertir el n-butano de bajo precio en un producto químico más valioso, alquilato o isooctano (2,2,4 trimetilpentano) que es uno de los productos químicos costosos derivados del n-butano.

El alquilato es un componente importante para aumentar el índice de octano que inhibe la autoignición de la gasolina en el motor. El proceso se inicia con la isomerización de n-butano para producir isobutano mediante el uso de un ácido catalizador, es decir, Pt / Cl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Pt / H-Zeolita. Luego, el isobutano se hace reaccionar con 2-buteno para convertirlo en alquila utilizando ácido sulfúrico o ácido clorhídrico como catalizador (Kurniawan et al., 2018, p. 1897).

El índice de octano del isomerizado producido depende principalmente de la operación de temperatura del reactor, las reacciones de isomerización de hidrocarburos son reacciones reversibles y la conversión de equilibrio de n-parafinas aumenta con la temperatura decreciente. Sin embargo, se logra después de un tiempo de contacto infinito del alimento en la zona de reacción o en un valor muy pequeño equivalente para la velocidad espacial horaria del líquido (Wang et al., 2019, p. 55). En otras palabras, para el comportamiento real una disminución de la temperatura siempre corresponde a una disminución de la velocidad de reacción debido a la disminución de la eficacia del catalizador. Por tanto, a baja temperatura, la conversión real será menor que la conversión de equilibrio. Por otro lado, como las reacciones de isomerización son exotérmicas, a alta temperatura (más alta que la óptima temperatura) el rendimiento de isoparafinas disminuye con el aumento de temperatura debido a la limitación termodinámica.

En el proceso tradicional de isomerización única, la materia prima que contiene tanto las isoparafinas como las parafinas normales se introducen en el reactor donde las parafinas normales son convertidas en isoparafinas para mejorar el RON. Para realizar la reacción es necesario un catalizador con un metal precioso, además, la reacción requiere la presencia de hidrógeno. Existen tres tipos de catalizadores, el cloruro de alúmina, el zeolítico y el catalizador de óxido metálico sulfatado, que requiere trabajar con una temperatura más baja, para obtener un octanaje más alto

en la corriente de salida (Cao et al., 2019, p. 6343). Los catalizadores de tipo cloruro de alúmina fueron desarrollado en la década de 1930, con el propósito de obtener i-butano utilizando n-butano como reactivo, sin embargo, el reactor también requiere una corriente de cloruro y una corriente básica para neutralizar la corriente de salida (Ahmed et al., 2018, p. 9).

Similarmente hay estudios que abordan la isomerización de n-butano sobre Beta platino-modificado y ZSM-5 en catalizadores de zeolita respecto a la desactivación y regeneración del catalizador también se investigó su rendimiento catalítico adicional. La mayor parte del coque era soluble en diclorometano, aunque el porcentaje dependía en gran medida de la reacción condiciones, gas portador y estructura de zeolita. El coque más insoluble se encontró sobre H- y Pt-Beta que en el ZSM-5 debido a la mayor acidez que Beta muestra, lo que permite que el coque soluble se repita. Se someten a alquilación y ciclación hasta que se forman moléculas poliaromáticas. Estas moléculas se encuentran en las bocas de los poros de la zeolita y son responsables de la pérdida de área superficial específica. El platino y el hidrógeno parecen inhibir estas reacciones recurrentes ya que la cantidad de coque insoluble aumentó drásticamente cuando el nitrógeno fue reemplazado por hidrogeno como gas portador (Villegas et al., 2006, p. 85).

También hay trabajos en la cual la isomerización de n-butano se la realizo sobre modernita (MOR) rentables fabricados mediante recristalización de zeolitas naturales donde se seleccionó un reactor de lecho fijo como modelo para evaluar las muestras dando que la conversión de n-butano se incrementó desde un 3,5% sobre el producto natural original MOR (HPH) al 25% sobre el MOR natural recristalizado (H-R26-H). El rendimiento de isobutano sobre el MOR natural recristalizado fue del 8%, que fue mucho más alto que el del padre MOR natural con solo 1%. El MOR natural recristalizado también exhibió un comparable rendimiento de isobutano con la mordenita sintética (aprox. 7%) (Kurniawan et al., 2018, p. 1895).

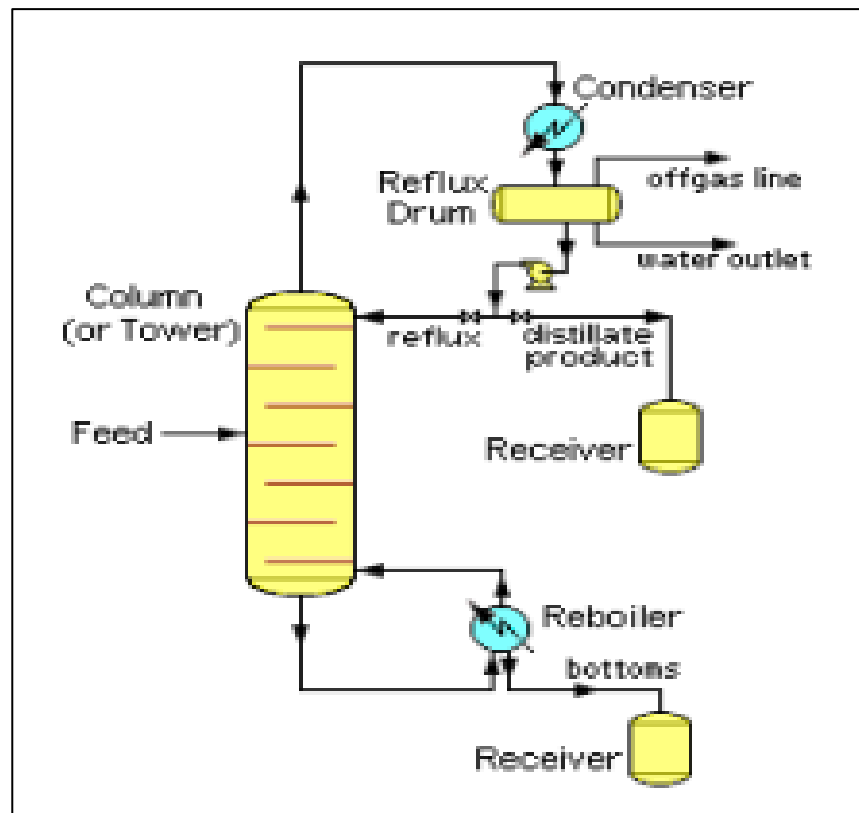
## **2.2. Bases Teóricas**

### **2.2.1. Destilación**

Una de las principales operaciones en las industrias de procesos es la separación de mezclas líquidas en sus diversos componentes. La destilación es el método más utilizado para lograr la separación de varios componentes aprovechando sus diferentes volatilidades y esta es la operación clave en cualquier refinería de procesamiento de petróleo crudo. En un intento por lograr la demanda de productos más puros, junto con la necesidad de una mayor eficiencia, los operadores de refinerías han promovido la investigación continua sobre las técnicas de destilación (Ruck, Sedano y Tolentino, 2007).



Es la separación de líquidos de una mezcla multicomponentes en sus componentes primarios mediante el uso de calor siendo el proceso de separación químico más utilizado. El vapor se vuelve más rico en la luz, más volátil o de bajo punto de ebullición componentes puntuales, y el líquido restante tiene más de componentes pesados, menos volátiles o de alto punto de ebullición. La destilación fraccionada es la separación de una mezcla de compuestos miscibles por su punto de ebullición, mediante calentamiento a temperaturas suficientemente altas.



**Figura 1-2:** Esquema de ingeniería química de la destilación fraccionada binaria continua industrial

Fuente: Patil, Choudhary y Bhatia, 2009, p. 7.

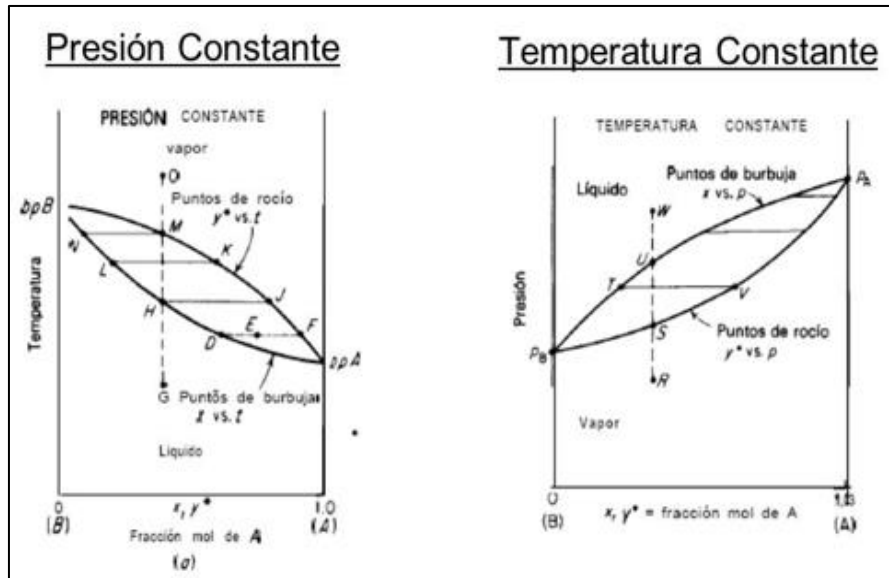
La destilación es la forma más común de tecnología de separación en la industria química. En la mayoría de los procesos de los productos químicos, la destilación es en estado estacionario continuo, donde el fraccionamiento por lotes no es tan económico. Durante el proceso suelen surgir cambios en la alimentación como el calor, la temperatura ambiente o la condensación, por lo que la cantidad de alimentación que se agrega y la cantidad de producto que se elimina son normalmente iguales. Esto recibe el nombre de continuo, destilación fraccionada en estado estacionario (Patil, Choudhary y Bhatia, 2009, p. 7).

### 2.2.1.1. Métodos de destilación – Mezclas de dos componentes

Para una mezcla binaria con una curva y-x normal (figura 2-2), el vapor siempre es más rico en el componente más volátil que el líquido a partir del cual se forma. Los tres métodos principales utilizados en la práctica de la destilación que dependen de este factor básico son:

- Destilación diferencial
- Destilación flash o en equilibrio
- Rectificación

De estos, la rectificación es el más importante y se diferencia de los otros dos métodos. Esto se debe a que parte del vapor se condensa y se devuelve como líquido al alambique, donde, como en los otros métodos, todo el vapor se elimina o se condensa como producto (Ujile y Amagbo, 2013, p. 787).



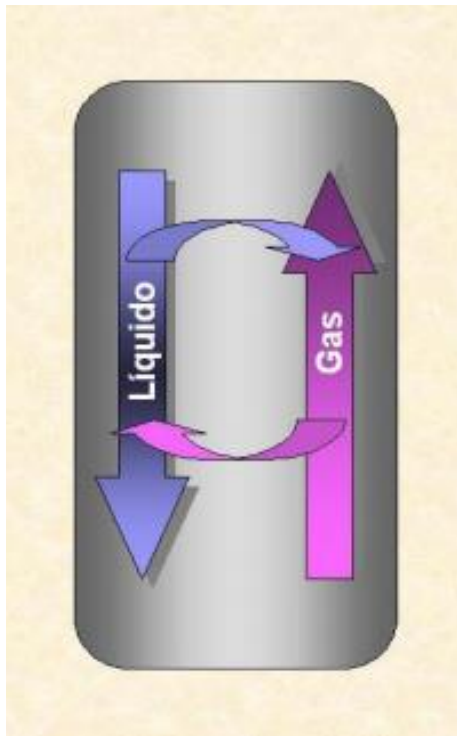
**Figura 2-1:** Diagrama de equilibrio líquido-vapor a presión temperatura constante

Fuente: Patil, Choudhary y Bhatia, 2009, p. 8.

### 2.2.1.2. Columna de destilación

Una columna de destilación es una estructura cerrada en la cual se realiza la separación física de un fluido en dos o más fracciones, dicha separación se consigue cuando el fluido se lo somete a condiciones apropiadas de temperatura y presión en toda la columna, de tal manera que las fracciones que va a separarse estén en fases diferentes. La parte en estado líquido que es la más pesada baja por gravedad, mientras que la más liviana se eleva y se condensa (Özkul y Kayabasi, 2018, p. 121). Logrando un buen intercambio entre la parte gaseosa del líquido que baja y la parte

gaseosa que sube y de la misma forma de la parte líquida que pueda arrastrar la fracción gaseosa que sube al líquido que baja como se aprecia en la figura.



**Figura 3-2:** Transferencia de masa y energía entre fase líquida y gaseosa

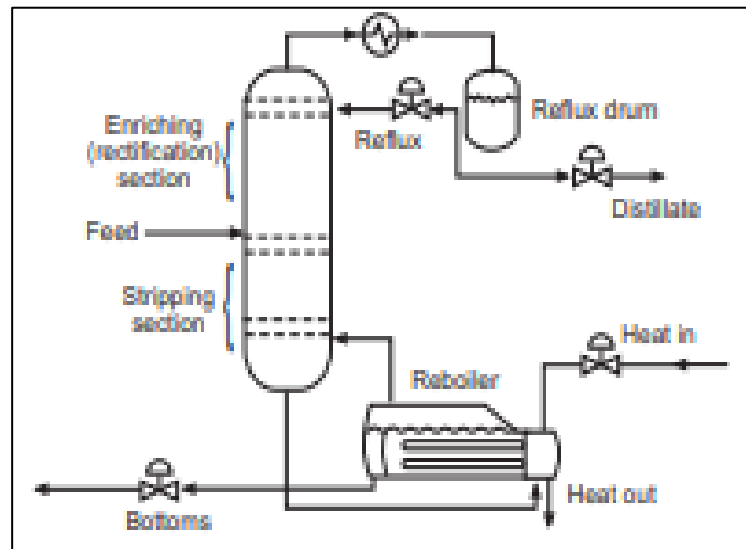
Fuente: Ruck, Sedano y Tolentino, 2007, p. 3.

### 2.2.1.3. Componentes principales de una columna de destilación

Las columnas de destilación se componen de varios componentes, cada uno de los cuales se utiliza para transferir energía térmica o mejorar la transferencia de material. Una unidad de destilación típica contiene varios componentes:

- a) Un caparazón vertical donde la separación se lleva a cabo componentes líquidos.
- b) Elementos internos de la columna, como bandejas / platos y/o pickings, que se utilizan para mejorar las separaciones de componentes.
- c) Un hervidor para proporcionar la necesaria vaporización para el proceso de destilación.
- d) Un condensador que servirá para enfriar y posteriormente condensar el vapor que sale de la columna en la sección superior.
- e) Un tambor de reflujo para contener el vapor condensado de la parte superior de la columna, de modo que el líquido (reflujo) se puede reciclar de nuevo a la columna (Patil, Choudhary y Bhatia 2009, p. 2).

La carcasa vertical alberga las partes internas de la columna y junto con el condensador y el calderín constituyen una columna de destilación. Un esquema de una unidad de destilación típica con una sola alimentación y dos corrientes de productos como se muestra en la siguiente figura.



**Figura 4-2:** Columna de destilación típica

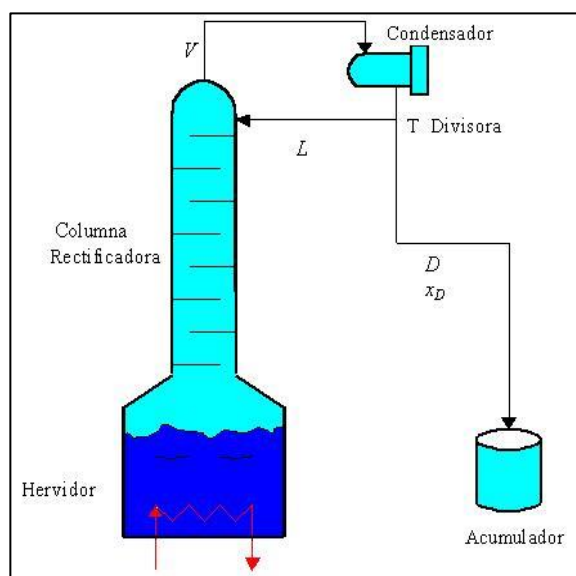
Fuente: Patil, Choudhary y Bhatia 2009, p. 2.

#### 2.2.1.4. Operación básica y terminología

La mezcla líquida que se va a procesar es conocida como la alimentación y esto se introduce normalmente en algún lugar cerca de la mitad de la columna a una bandeja conocida como bandeja de alimentación. La bandeja de alimentación divide la columna en una parte superior (enriquecedora o rectificación) sección y un fondo (decapado) sección. El alimento fluye por la columna donde se recoge en la parte inferior del hervidor.

Se suministra calor al hervidor para generar vapor. La fuente de entrada de calor puede ser cualquier fluido adecuado, aunque en la mayoría de las plantas químicas esto es normalmente vapor. En las refinerías, la calefacción la fuente pueden ser los flujos de salida de otras columnas. El vapor que se eleva en el hervidor se vuelve a introducido en la unidad en la parte inferior de la columna. El líquido extraído del hervidor es conocido como el producto de fondos o simplemente fondos.

El vapor sube por la columna y al salir por la parte superior de la unidad, un condensador se enfría. El líquido condensado se almacena en una bodega-recipiente conocida como tambor de reflujo. Algunos de esta el líquido se recicla de nuevo a la parte superior de la columna y esto se llama reflujo. El condensado se conoce el líquido que se elimina del sistema como destilado o producto superior (Patil, Choudhary y Bhatia, 2009, p. 3).



**Figura 5-2:** Destilación por lotes con columna rectificadora

Fuente: Özkul y Kayabasi, 2018.

### 2.2.2. Isomerización

La isomerización es el proceso por el cual una molécula se transforma en otra, donde el nuevo compuesto tenía los mismos átomos que el primero, sin embargo, son organizados de una manera diferente, ambos compuestos son isómeros. Esta técnica es ampliamente utilizada por la industria del petróleo, debido a que es una reacción utilizada para transformar n-parafina de bajo índice de octano en i-parafinas de alto octanaje, este proceso aumenta la pureza del combustible y la rentabilidad de la planta.

El contenido de aromáticos y olefinas en la gasolina debe reducirse por razones ambientales, y la pérdida del índice de octano causada por la reducción de aromáticos y olefinas debe compensarse mediante la adición de algunos compuestos que tienen índices de octano más altos ya que las cadenas lineales tienen menor número de octanaje que las ramificadas.

Hay dos tipos de isomerización la de n-butano y las de pentano/hexano donde la primera es utilizada para servir como entrada para la alquilación y la segunda es para transformar esos dos compuestos en sus isómeros parafínicos con la finalidad de aumentar el índice de octano (Ahmed et al., 2018). Una posible alternativa de aromáticos y olefinas son los alcanos ramificados con alto octanaje. Por lo tanto, la isomerización esquelética de alcanos se considera una reacción clave para producción de gasolina ambientalmente benigna en industrias.

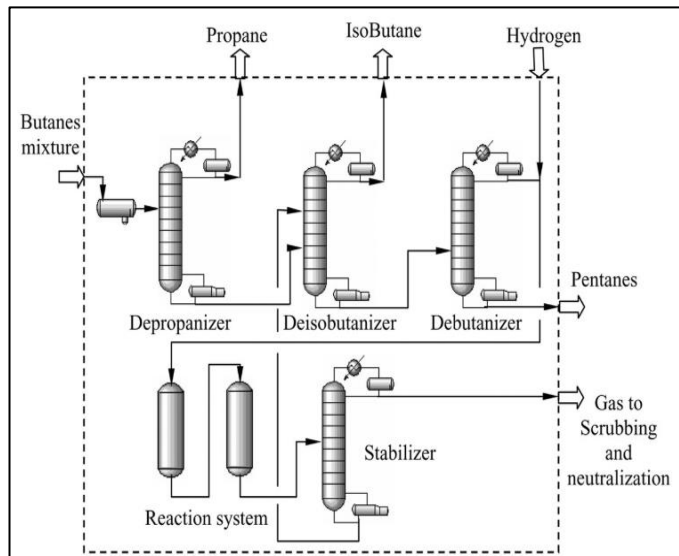
El proceso de reforma se emplea para producir compuestos de alto octanaje, pero este proceso es utilizado exclusivamente para el tratamiento de nafta pesada (C7-C8). El proceso de isomerización es considerado una solución simple, económica y muy atractiva para producir

gasolina limpia con un alto índice de octanaje. Es deseable incluir nafta ligera en la formulación de la gasolina para cumplir con las especificaciones de índice de octanaje y corte de destilación inicial, las parafinas normales (C5 / C6) es difícil de incluir en el grupo de gasolina porque tienen índice de bajo octanaje y conviene convertirlos en compuestos ramificados con alto índice de octanaje a través del proceso de isomerización los hace más favorables para su inclusión en la gasolina (Sharikov, Snegirev y Tkachev, 2020).

#### 2.2.2.1. *Proceso de isomerización*

Durante los estudios realizados en el ámbito de isomerización de n-butano a isobutano se tiene una variedad de procesos en la que varía desde la unidad reformadora de nafta hasta los reactores y catalizadores empleados en el proceso, en la figura 6-2 se muestra un esquema simple del proceso propuesto por Vázquez et al. (2005 p. 644) que consiste en alimentar la carga a una columna despropanizadora en que el propano y encendedores se eliminan para evitar la contaminación del producto deseado (isobutano). Posteriormente, se utiliza una columna desisobutanizadora con dos alimentaciones: producto del fondo de la columna despropanizadora y una corriente de recirculación de la sección estabilizadora, que contiene los productos de la reacción de isomerización.

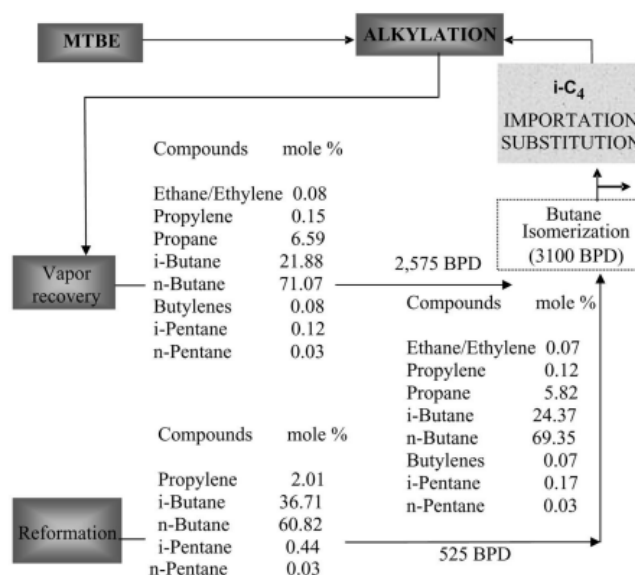
El isobutano se obtiene de la corriente superior de la columna desisobutanizadora con una pureza mínima del 96% en peso, mientras que el fondo produce una corriente rica en butano normal. Antes de alimentar esta corriente, se envía a una columna desbutanizadora donde los compuestos pesados son removidos. La sección de reacción recibe como alimentación la corriente de la columna de desbutanizador e hidrógeno de reposición, y consta de dos reactores secuenciales. Es apropiado explicar que la reacción del n-butano, la conversión se rige por el equilibrio químico por lo que es posible que la mejora de la conversión utilizando los dos reactores. Más tarde, los productos de la reacción van a la sección de estabilización donde el hidrógeno y los compuestos ligeros se eliminan y la mezcla de butanos (el n-butano no se convierte en isobutano producido) finalmente es recuperado para reciclarlo en el desisobutanizador (Vázquez et al., 2005, p. 643).



**Figura 6-2:** Esquema de isomerización de n-butano a isobutano

Fuente: Vázquez et al., 2005, p. 643.

Las corrientes de alimentación que pueden ingresar a una unidad de isomerización pueden venir de varios tratamientos anteriores que se le da al crudo en la refinería, un ejemplo de alimentación para la isomerización de isobutano es la presente en el trabajo de Vázquez et al. (2005 p. 645) donde, como se presenta en la figura 5-2 una corriente de butanos sale de la unidad de recuperación de vapor y la otra corriente sale de la unidad reformadora de nafta, la cual juntas suman una capacidad de operación de 3100 BPD.



**Figura 7-2:** Alimentación de butanos en la unidad de isomerización

Fuente: Vázquez et al., 2005, p. 644.

### 2.2.2.2. Definición de equipos y condiciones de operación

Los equipos empleados en una unidad de isomerización principalmente varían de acuerdo con el tipo de alimentación, la disponibilidad de implementación de dispositivos en la planta refinadora, el tipo de isomerización y los catalizadores a emplear. La isomerización de butano a isobutano los equipos principales que se necesitan en la unidad serían los expresados en la Tabla 1-2.

**Tabla 1-2:** Lista de principales equipos necesarios en una unidad de isomerización

<b>Equipos</b>
Tambor de compensación de alimentación
Tambores de reflujo: despropanizador
Columnas estabilizadoras y desisobutanizadoras
Protectores de azufre y cloruro
Tambor de reflujo desbutanizador
Separador regenerante
Tambor de flash cáustico gastado
Tambor LP condensado
Tambor de ventilación
Tambor de inyección de cloruro
Columna despropanizadora
Columna desisobutanizadora y periférico
Columna desbutanizadora
Columna estabilizadora
Columna de depuradora cáustica y periféricos
Pre calentador de alimentación del despropanizador
Condensador despropanizador y calderín
Enfriador de productos de propano
Enfriador de producto iC4
Condensador y calderín desbutanizador
Enfriador de productos de pentano
Calentadores de alimentación e intercambiadores de alimentación / efluente
Condensador estabilizador
Calderín estabilizador
Calentador de reciclaje cáustico
Secadores regenerante enfriador
Vaporizador regenerante
Ajustar el enfriador regenerante
Filtro de alimentación de butanos despropanizador
Secadores de hidrógeno y butanos
Sobrecalentador regenerante
Eyector de puesta en marcha
Paquete de aire para instrumentos

Fuente: Vázquez et al., 2005.

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



### 2.2.2.3. *Catalizadores empleados en la actualidad*

Según diversos estudios e investigaciones se emplean una variedad de catalizadores ya que el reactor es el corazón del proceso de isomerización y se requiere emplear los catalizadores que mejor convengan al sistema para lograr la máxima conversión. Los catalizadores empleados generalmente son los de platino sobre alúmina clorada para la isomerización de n-butano que requiere un suministro continuo de cloro para mantener la actividad, razón por la cual se han estado investigando otros catalizadores que puedan reemplazar a los de habitual uso como es el caso de catalizadores a base de zirconia sulfatada (SZ) que se considera como alternativa para la isomerización de n-butano. Durante los últimos 30 años, SZ ha sido extensamente investigada y es muy prometedora para la próxima generación de catalizadores para la isomerización de alcanos debido no solo a la alta actividad catalítica con alta selectividad al isobutano a baja temperatura de reacción y además por su respeto al medio ambiente, (Buitrago, Amaya y Ramos 2017, p. 1258). El defecto aquí es que estos catalizadores se desactivan rápidamente limitando su solicitud.

En el trabajo de investigación realizado por Yang et al. (2018), se enfocó en determinar el efecto de la adición de Cu sobre el catalizador y propiedades fisicoquímicas de los catalizadores de zirconia sulfatada (SZ) promovidos por Galio para la isomerización de n-butano en la cual se introdujo Cu mediante impregnación para mejorar las propiedades catalíticas (actividad, selectividad), los resultados del analizador elemental muestran que la adición de Cu mejoró significativamente la actividad catalítica y estabilidad de Ga/SZ en la isomerización con menos formación de coque cuando el contenido de Cu es aprox. 0,6% en peso, la conversión estable es del 55% y la selectividad para el isobutano es del 82% con un TOS de 200 h 250 ° C.

La adición de platino también mejoró el rendimiento, mientras que su rendimiento de isobutano (40%) es casi idéntico al de CuGa / SZ catalizador (45%), que tiene beneficios potenciales para aplicaciones comerciales. Por lo tanto, el Cu incluido en estos procesos juega un papel importante en la isomerización de n-butano con una operación de larga duración, lo que contribuye a la conservación de energía y la reducción de emisiones.

Otra investigación relacionada fue el que realizó Moreno et al. citado en Yang et al. (2018), donde estudiaron sistemáticamente la SZ promovida por Al y Ga y los resultados indican que Ga fue un promotor más eficaz que Al. La adición de platino aumentó significativamente la conversión general de n-butano (52%) a expensas de la selectividad para isobutano (83%).

### 2.2.3. DWSIM – Chemical Process Simulator

Hoy en día, la simulación juega un papel crucial en varios problemas relacionados con la ingeniería. Hay un montón de paquetes de software comercial disponibles. Algunos de ellos son gratuitos como DWSIM, mientras que los demás se pueden comprar en el mercado como ASPEN Plus, el software de investigación de código abierto se está volviendo cada vez más común en la comunidad de modelos de procesos químicos. Por tanto, es posible investigar el comportamiento de las plantas piloto utilizando una simulación por computadora sin tener que realizar experimentos para que el costo experimental se pueda reducir significativamente (Tangsrivong et al., 2020, p. 8).

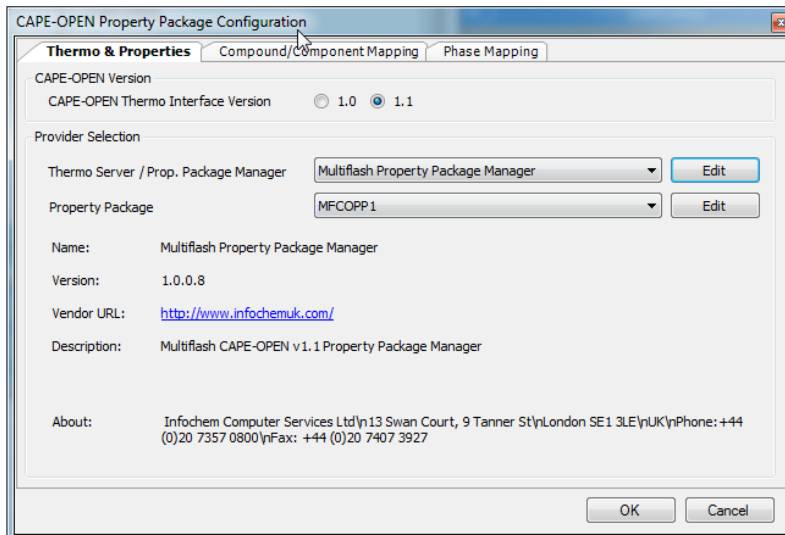
DWSIM es un simulador de procesos químicos de código abierto compatible con CAPE-OPEN para Windows, Linux y macOS. Construido sobre la parte superior de las plataformas Microsoft .NET y Mono y con una rica interfaz gráfica de usuario (GUI), DWSIM permite a los estudiantes de ingeniería química y a los ingenieros químicos comprender mejor el comportamiento de sus sistemas químicos mediante el uso de rigurosos modelos termodinámicos y de operaciones unitarias sin costo alguno (Medeiros, 2021).

#### 2.2.3.1. CAPE OPEN

Los estándares CAPE-OPEN son los estándares uniformes para interconectar componentes de software de modelado de procesos desarrollados específicamente para el diseño y operación de procesos químicos. Se basan en tecnologías de software universalmente reconocidas como COM y CORBA. Los estándares CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y disponibles de forma gratuita (Medeiros, 2021).

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

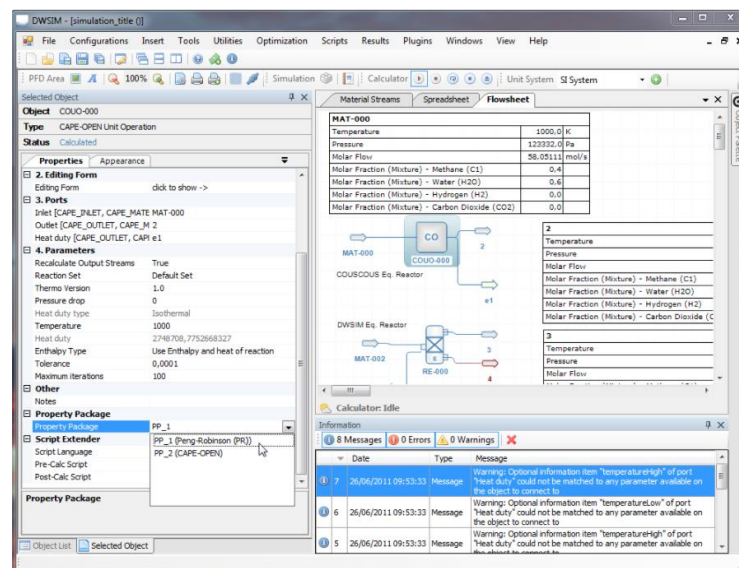
**Paquetes de propiedades (Thermo Specs 1.0 y 1.1):** se puede utilizar calculadoras de propiedades y equilibrio termodinámico CAPE-OPEN externas como paquetes de propiedades en DWSIM. La integración se realiza de forma transparente, solo se tiene que asignar los componentes y las fases del paquete de propiedades externas a los de las bases de datos DWSIM internas



**Figura 8-2:** Paquetes de propiedades

Fuente: Medeiros, 2021.

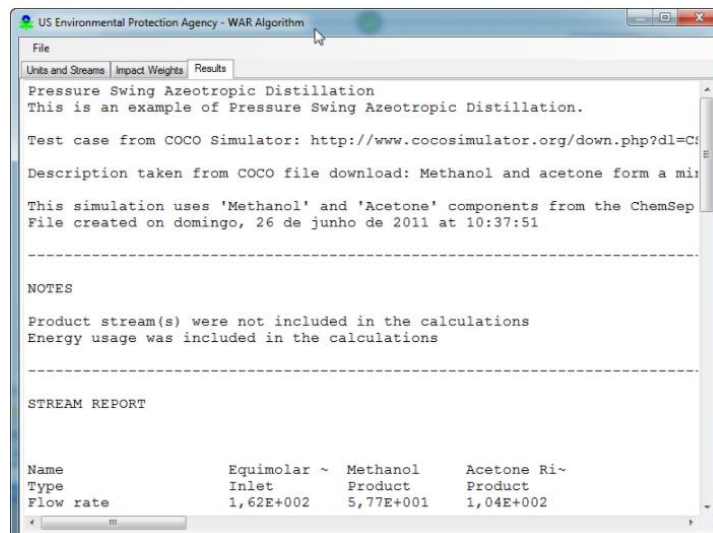
**Operaciones unitarias:** Las operaciones unitarias CAPE-OPEN se pueden agregar a los diagramas de flujo DWSIM y conectarse a los flujos de energía y materiales como las operaciones unitarias DWSIM normales. DWSIM también implementa las interfaces de reacción CAPE-OPEN para que pueda usar su modelo de reactor CAPE-OPEN junto con DWSIM y administrar sus reacciones usando el Administrador de reacciones como de costumbre (Medeiros, 2021).



**Figura 9-2:** Operaciones unitarias

Fuente: Medeiros, 2021.

**Objetos de supervisión de hojas de flujo:** DWSIM admite complementos CAPE-OPEN, "también conocidos" Objetos de supervisión de hojas de flujo, como el complemento WAR (Medeiros, 2021).



**Figura 10-2:** Algoritmo WAR

Fuente: Medeiros, 2021.

Los paquetes de propiedades CAPE-OPEN, las operaciones unitarias CAPE-OPEN, los paquetes de propiedades DWSIM y las operaciones unitarias DWSIM pueden trabajar juntos en cualquier combinación posible. Por ejemplo, se puede usar un paquete de propiedades DWSIM como proveedor de termodinámica para una operación de unidad CAPE-OPEN de la misma manera que puede usar un paquete de propiedades CAPE-OPEN como proveedor de termodinámica para una operación de unidad DWSIM (Medeiros, 2021).

#### 2.2.3.2. Modelos termodinámicos

En la simulación de procesos que involucran operaciones con crudo se tiene una variedad de modelos termodinámicos que calculan propiedades termodinámicas y equilibrios de fase que sirven para resolver los balances de materia y energía en cada uno de los equipos que ayudan a que la simulación se de en las condiciones más similares a las de un proceso en el mundo real. La elección del paquete termodinámico es vital para la validación de la simulación ya que una mala decisión podría invalidar todo el proceso, las desviaciones que se han comprobado ocurren al momento de seleccionar un modelo termodinámico erróneamente son en hasta un 5% de desviación en la cantidad de vapor generado en la zona flash o en la carga térmica del condensador, además puede existir desviaciones en las salidas de las temperaturas que oscilan entre un 3°C a 5°C e incluso se han visto desviación de hasta un 20% en la zona overflash, por eso la importancia de escoger el paquete termodinámico correcto, esta elección dependerá de los componentes que se estén utilizando, el tipo de proceso a simular y los rangos de presión que se establezcan.

Las fuerzas intermoleculares son las que básicamente determinan que tipo de método termodinámico se debe usar ya que los equilibrios de fases, las propiedades físicas y termodinámicas están regidas por estas fuerzas y mientras más grandes sean estas más difícil será modelar el sistema. Para modelar un sistema de fluidos puros o mezclas de sustancias apolares como son los hidrocarburos es un tanto más fácil realizar los cálculos ya que solo influyen fuerzas físicas de atracción y repulsión, mientras que para sustancias polares como ácidos orgánicos, alcoholes aparecen ya fuerzas de enlaces de hidrogeno que hace más difícil la modelación (Hechavarría, Rodney; López, 2013).

En resumen, las abreviaturas de los modelos son los siguientes:

EOS= ecuaciones de estado

LACT= modelos basados en coeficientes de actividad

V= fase vapor

L= fase líquida

	Baja presión 0,1-3 bar	Media presión 3-20 bar	Alta presión >20 bar
Mezclas líquidas ideales	Raoult-Dalton	EOS	EOS
Hidrocarburos + comp. supercríticos	EOS	EOS	EOS
Mezclas líquidas no ideales	V-ideal/EOS L-LACT	1) V-EOS , L-LACT 2) EOS modificadas	EOS modificadas
No ideales + comp. supercríticos	V-EOS L-LACT+coef. Henry	EOS modificadas	EOS modificadas

**Figura 11-2:** Selección de métodos termodinámicos

Fuente: Hechavarría, Rodney y López, 2013, p. 29.

Los métodos termodinámicos seleccionados se deben comprobar con datos experimentales reales para dar por válido la simulación, y en caso de no predecir los valores correctamente se debe ajustar los parámetros del modelo termodinámico. Estos modelos utilizan herramientas como las ecuaciones de estado, correlaciones empíricas y semiempíricas, la ley de los estados correspondientes (Villanueva Perales, 2010, p. 34).

Los métodos termodinámicos los podemos agrupar en 4 grupos fundamentalmente, estos son:

1. Modelos de coeficientes de actividad
2. Modelos combinados EOS-LACM
3. Ecuaciones de estado
4. Correlaciones especiales para sistema específicos.

K-factors method	T/P range	Mixture	Applications	Enthalpy/entropy
Grayson-Streed	-20 to 450 °C	Hydrocarbon + H <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub>	Refining Topping Heavy ends	Curl-Pitzer Lee-Kessler
Chao-Seader	20 to 250 °C 1 to 100 bar	Hydrocarbon + H <sub>2</sub> (max 20%)	Gas processing Depropaniser Debutaniser	Curl-Pitzer Lee-Kessler
BK10	0.1 to 7 bar 40 to 500 °C	Naphta C1 to C7	Vacuum distillation Atmospheric distillation	Lee-Kessler Rice
SRK	< T <sub>c</sub> < P <sub>c</sub>	Hydrocarbon LNG	BTX columns Oil & gas Cryogenics	SRK
PR	< or > T <sub>c</sub> ~ or ~ P <sub>c</sub>	H <sub>2</sub> S, CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> Hydrocarbon LNG	Oil & gas Cryogenics	PR
Modified EOS	< or > T <sub>c</sub> < or > P <sub>c</sub>	H <sub>2</sub> S, CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> Hydrocarbon Polar Sub-critical Supercritical	Petrochemicals Basic organics Gas processing	Modified EOS PR, SRK
Wilson	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
NRTL	20-200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
UNIQUAC	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
UNIFAC	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat

**Figura 12-2:** Características de los modelos termodinámicos  
Fuente: Villanueva Perales, 2010, p. 35.

#### 2.2.4. Redes Neuronales Artificiales

El término redes neuronales se refiere históricamente a redes de neuronas en el cerebro de los mamíferos, las neuronas son sus unidades fundamentales de cálculo, y son conectados entre sí en redes para procesar datos (Mehlig 2021). Esta puede ser una tarea muy compleja, y la dinámica de tales redes neuronales en respuesta a estímulos externos es, por lo tanto, a menudo bastante intrincada. Las entradas y salidas de cada neurona varían en función del tiempo en forma de trenes de picos, pero también la red en sí cambia con el tiempo: aprendiendo y mejorando las capacidades de procesamiento de datos estableciendo nuevas conexiones entre neuronas (Anderson y McNeil, 2007).

Los algoritmos de redes neuronales para el aprendizaje automático se inspiran en la arquitectura y la dinámica de las redes de neuronas en el cerebro, estos algoritmos utilizan muchos modelos de neuronas idealizados (Anderson y McNeil, 2007). Sin embargo, el principio fundamental es el mismo.

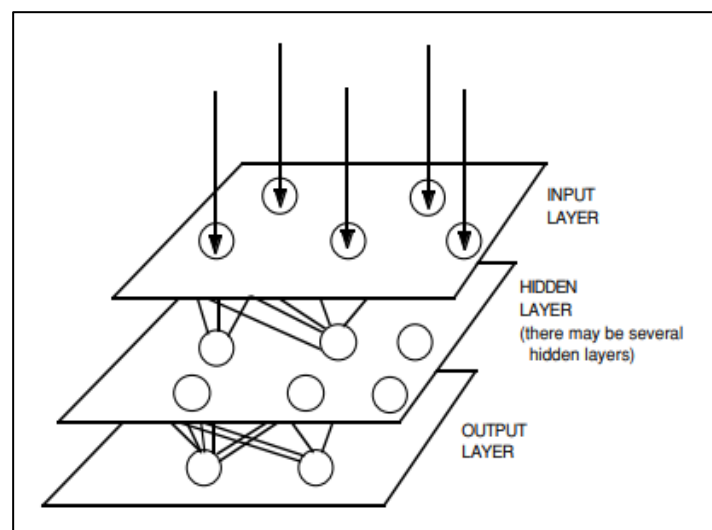
Las redes neuronales artificiales aprenden cambiando las conexiones entre sus neuronas, estas redes pueden realizar una multitud de tareas de procesamiento de información. Las redes neuronales pueden, por ejemplo, aprender a reconocer estructuras en un conjunto de "entrenamiento" datos y, hasta cierto punto, generalizar lo que han aprendido. Un conjunto de entrenamiento contiene una lista de patrones de entrada junto con una lista de etiquetas correspondientes, o valores objetivos, que codifican las propiedades de los patrones de entrada que se supone que debe aprender la red.

Las redes neuronales artificiales se pueden entrenar para clasificar dichos datos con mucha precisión ajustando la fuerza de la conexión entre sus neuronas, y pueden aprender a generalizar el resultado a otros conjuntos de datos, siempre que los nuevos datos no sean demasiado diferentes de los datos de entrenamiento. Un buen ejemplo de un problema de este tipo es el reconocimiento de objetos en imágenes, por ejemplo en la secuencia de imágenes de la cámara tomadas por un automóvil autónomo (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 13).

Las redes neuronales artificiales también son buenas para analizar grandes conjuntos de datos de alta dimensión, donde puede ser difícil determinar a priori qué las preguntas son más relevantes y gratificantes de hacer. Algoritmos de aprendizaje no supervisado organizar los datos de entrada sin etiquetar de diferentes maneras: pueden, por ejemplo, detectar familiaridad y similitud (grupos) de patrones de entrada y otras estructuras en la entrada (Mehlig, 2021, p. 2).

#### 2.2.4.1. Operaciones de las redes neuronales

Actualmente, las redes neuronales son el simple agrupamiento de las primitivas neuronas artificiales. Esta agrupación se produce mediante la creación de capas que luego se conectan entre sí. Cómo se conectan estas capas es la otra parte del "arte" de la ingeniería de redes para resolver problemas del mundo real.



**Figura 13-2:** Diagrama de una red neuronal simple

Fuente: Anderson y McNeil, 2007, p. 8.

Básicamente, todas las redes neuronales artificiales tienen una estructura similar o topología como se muestra en la Figura13-2. En esa estructura algunas de las neuronas interactúan con el mundo real para recibir sus entradas. Otras neuronas proporcionan el mundo real con las salidas de la red. Esta salida puede ser el particular personaje que la red cree que ha escaneado o la imagen en particular piensa que está siendo visto, todo el resto de las neuronas está oculto a la vista.

Pero una red neuronal es más que un montón de neuronas, los investigadores intentaron simplemente conectar neuronas de manera aleatoria, sin mucho éxito. Una de las formas más fáciles de diseñar una estructura es crear capas de elementos. Es la agrupación de estas neuronas en capas las conexiones entre estas capas y las funciones de suma y transferencia que comprende una red neuronal en funcionamiento (Anderson y McNeil, 2007, p. 20).

#### 2.2.4.2 Componentes principales de una neurona artificial

La red neuronal consta de siete componentes principales, estos componentes son válidos tanto si se utiliza la neurona para entrada, salida o está en una de las capas ocultas.

**Componente 1. Factores de ponderación:** una neurona suele recibir muchas entradas simultáneas. Cada entrada tiene su propio peso relativo que da al ingreso el impacto que necesita en la suma del elemento de procesamiento de función. Estos pesos realizan el mismo tipo de función que el de diferentes fuerzas sinápticas de las neuronas biológicas. En ambos casos, algunas entradas se hacen más importantes que otros para que tengan un mayor efecto en el elemento de procesamiento a medida que se combinan para producir una respuesta neuronal.

Los pesos son una medida de la fuerza de conexión de una entrada. Estas fortalezas pueden ser alteradas en respuesta a varios conjuntos de entrenamiento y de acuerdo con una red topología específica o mediante sus reglas de aprendizaje (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 12).

**Componente 2. Función de suma:** el primer paso en un procesamiento la operación del elemento es calcular la suma ponderada de todas las entradas matemáticamente, las entradas y los pesos correspondientes son vectores que se puede representar como  $(i_1, i_2 \dots i_n)$  y  $(w_1, w_2 \dots w_n)$ . La señal de entrada totales el punto, o producto interno, de estos dos vectores. Esta suma simplista la función se encuentra multiplicando cada componente del vector  $i$  por el componente correspondiente del vector  $w$  y luego sumando todos los productos.  $Input_1 = i_1 * w_1$ ,  $input_2 = i_2 * w_2$ , etc., se agregan como  $input_1 + input_2 + \dots + entrada\ n$ . El resultado es un solo número, no un vector de elementos múltiples (Basheer y Hajmeer, 2000, p.14).

**Componente 3. Función de transferencia:** el resultado de la suma función, casi siempre la suma ponderada, se transforma en un trabajo salida a través de un proceso algorítmico conocido como función de transferencia. En función de transferencia la suma total se puede comparar con algún umbral para determinar la salida neuronal. Si la suma es mayor que el umbral valor, el elemento de procesamiento genera una señal. Si la suma de la entrada y productos de peso es menor que el umbral, no hay señal (o alguna inhibición señal) se genera. Ambos tipos de respuesta son importantes

La función de transferencia podría ser algo tan simple como depender de si el resultado de la función de suma es positivo o negativo. La red podría generar cero y uno, uno y menos uno, u



otro número combinaciones. La función de transferencia sería entonces un "limitador duro" o un paso función (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 17).

**Componente 4. Escalado y limitación:** esta escala simplemente multiplica un factor de escala por el valor de la transferencia y luego agrega un desplazamiento. Limitar es el mecanismo que asegura que el resultado escalado no exceda un límite superior o inferior. Esta limitante es además de los límites estrictos que puede tener la función de transferencia original realizado. Este tipo de escalado y limitación se utiliza principalmente en topologías para probar modelos de neuronas biológicas, como el estado del cerebro en la caja de James Anderson (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 23).

**Componente 5. Función de salida (competencia):** cada elemento tiene permitido enviar una señal de salida que puede emitir a cientos de otras neuronas. Esto es como la neurona biológica, donde hay muchas entradas y una sola acción de salida. Algunas topologías de red, sin embargo, modifique el resultado de la transferencia para incorporar la competencia entre elementos de procesamiento vecinos. Las neuronas pueden competir con cada otros, elementos de procesamiento inhibidores a menos que tengan una gran resistencia.

La competencia puede ocurrir en uno o en ambos niveles. Primero, competencia determina qué neurona artificial estará activa o proporciona una salida. En segundo lugar, los insumos competitivos ayudan a determinar qué elemento de procesamiento participar en el proceso de aprendizaje o adaptación (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 24).

**Componente 6. Función de error y valor propagado hacia atrás:** en la mayoría redes de aprendizaje la diferencia entre la salida actual y la deseada se calcula la salida. Este error bruto es luego transformado por la función de error para que coincida con una arquitectura de red particular. El uso de arquitecturas más básicas este error directamente, pero algunos cuadran el error conservando su signo, el error de la neurona artificial normalmente se propaga a la función de aprendizaje de otro elemento de procesamiento. Este término de error es a veces llamado el error actual (Basheer y Hajmeer, 2000, p. 26).

**Componente 7. Función de aprendizaje:** el propósito y la función del aprendizaje es modificar los pesos de conexión variables en las entradas de cada elemento de procesamiento de acuerdo con algún algoritmo basado en neuronas. Este proceso de cambiar los pesos de las conexiones de entrada para lograr algunos resultados, también se puede llamar función de adaptación, así como modo de aprendizaje.

Hay dos tipos de aprendizaje: supervisado y no supervisado. Supervisado el aprendizaje requiere un maestro. El profesor puede ser un conjunto de datos de formación o un observador que califica el desempeño de los resultados de la red. De todas formas, tener un maestro es aprender por refuerzo. Cuando no hay profesor exterior, el sistema debe organizarse por algunos criterios internos diseñados en la red. Esto es aprender haciendo (Basheer y Hajmeer, 2000, p.27).

### *2.2.4.3 Enseñar una red neuronal artificial*

#### Aprendizaje supervisado

La gran mayoría de las soluciones de redes neuronales artificiales se han entrenado con supervisión. Debido a que la salida real de una neurona se compara con la salida deseada. Pesos, que suelen ser configurados aleatoriamente para empezar, luego son ajustados por la red para que la siguiente iteración, o ciclo, producirá una coincidencia más cercana entre el deseado y la salida real. El método de aprendizaje intenta minimizar los errores actuales de todos los elementos de procesamiento. Esta reducción global de errores se crea con el tiempo modificando continuamente los pesos de entrada hasta una red aceptable se alcanza la precisión.

Con el aprendizaje supervisado, la red neuronal artificial debe ser entrenada antes de que sea útil. La formación consiste en presentar aportes y enviar datos a la red. Estos datos a menudo se denominan conjunto de entrenamiento. Es decir, para cada conjunto de entrada proporcionado al sistema, el correspondiente También se proporciona un conjunto de salida. En la mayoría de las aplicaciones, se deben utilizar datos reales.

Esta fase de entrenamiento puede consumir mucho tiempo. En sistemas prototipo, con potencia de procesamiento inadecuada, el aprendizaje puede llevar semanas. Esta formación se considera completa cuando la red neuronal llega a un usuario definido nivel de desempeño. Este nivel significa que la red ha alcanzado la precisión estadística deseada, ya que produce los resultados requeridos para una determinada secuencia de entradas. Cuando no se necesita más aprendizaje, las ponderaciones se normalmente congelado para la aplicación. Algunos tipos de red permiten entrenamiento, a un ritmo mucho más lento, mientras está en funcionamiento. Esto ayuda a una red a adaptarse a las condiciones que cambian gradualmente (Anderson y McNeil, 2007, p. 26-27).

Los conjuntos de entrenamiento deben ser bastante grandes para contener todos los elementos necesarios de información si la red debe aprender las características y relaciones que son importante. No solo los sets tienen que ser grandes, sino también las sesiones de entrenamiento deben incluir una amplia variedad de datos.

#### Aprendizaje no supervisado

Actualmente, este método de aprendizaje se limita a las redes conocidas como organización de mapas. Este tipo de redes no son de uso generalizado. Ellos son básicamente una novedad académica. Sin embargo, han demostrado que pueden proporcionar una solución en unos pocos casos, lo que demuestra que su promesa no es infundada.

Un algoritmo de aprendizaje no supervisado podría enfatizar la cooperación entre grupos de elementos de procesamiento. En tal esquema, los clústeres trabajan juntos. Si alguna entrada externa activa cualquier nodo en el clúster, ella actividad del clúster en su conjunto podría incrementarse. Del mismo modo, si la entrada externa nódulos en el clúster se redujo, lo que podría tener un efecto inhibitor sobre el todo el grupo.

La competencia entre los elementos de procesamiento también podría constituir una base para aprendiendo. El entrenamiento de clústeres competitivos podría amplificar las respuestas de grupos específicos a estímulos específicos. Como tal, asociaría esos grupos entre sí y con una respuesta específica adecuada. Normalmente, cuando la competencia por el aprendizaje está en efecto, sólo los pesos pertenecientes al elemento de procesamiento ganador se actualizará (Anderson y McNeil, 2007, p. 27-28).

#### *2.2.4.4 Selección de red*

Porque todas las redes neuronales artificiales se basan en el concepto de neuronas, conexiones y funciones de transferencia, existe una similitud entre las diferentes estructuras o arquitecturas de redes neuronales. La mayoría de las variaciones se derivan de las diversas reglas de aprendizaje y cómo esas reglas modifican topología típica de una red. Las siguientes secciones describen algunos de las redes neuronales artificiales más comunes. Están organizados en muy toscos categorías de aplicación. Estas categorías no pretenden ser exclusivas, están destinados simplemente a separar parte de la confusión sobre la red arquitecturas y sus mejores coincidencias con aplicaciones específicas.

Básicamente, la mayoría de las aplicaciones de las redes neuronales se incluyen en las siguientes cinco categorías:

**Tabla 2-2:** Selección de red

<b>Tipo de red</b>	<b>Redes</b>	<b>Usar para la red</b>
Predicción	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Propagación hacia atrás</li> <li>- Delta Bar Delta</li> <li>- Barra delta extendida delta</li> <li>- Búsqueda aleatoria dirigida</li> <li>- Redes neuronales de orden superior</li> <li>- Mapa autoorganizado en la parte posterior-propagación</li> </ul>	Utilice valores de entrada para predecir algunos producción (por ejemplo, elija las mejores acciones en el mercado de valores, predecir el clima, identificar a las personas con riesgos de cáncer)
Clasificación	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Aprendizaje de a cuantificación de vectores</li> <li>-Contrapropagación</li> <li>-Red neuronal probabilística</li> </ul>	Utilice valores de entrada para determinar la clasificación (por ejemplo, es la entrada la letra A)
Asociación de datos	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Hopfield</li> <li>- Máquina de Boltzmann</li> <li>- Red de Hamming</li> <li>- Asociativo memoria bidireccional</li> <li>-Patrón de reconocimiento espaciotemporal</li> </ul>	Como clasificación, pero también reconoce datos que contienen errores (p. ej., no solo identificar el carácter que fueron escaneados, pero también identifica cuándo el escáner no estaba funcionando correctamente)
Conceptualización	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Red de resonancia adaptativa</li> <li>- Mapa autoorganizado</li> </ul>	Analice las entradas para que las relaciones de agrupación pueden ser inferido (por ejemplo, extraer de un dato basar los nombres de los más probables comprar un producto en particular)
Filtrado de datos	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Recirculación</li> </ul>	Suavizar una señal de entrada (por ejemplo, tomar el ruido de una señal telefónica)

**Fuente:** Anderson y McNeil, 2007, p. 31.

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

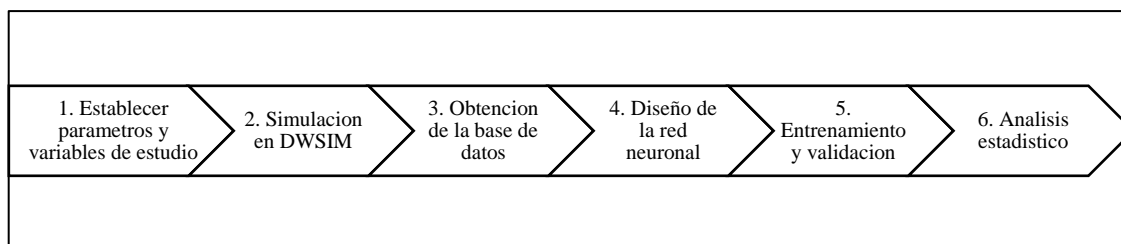
#### 2.2.4.5 Redes de predicción

El uso más común de las redes neuronales es proyectar lo que lo más probable es que suceda, hay muchas aplicaciones en las que la predicción puede ayudar en el establecimiento de prioridades (Ramírez et al., 2018). Básicamente, todas las organizaciones deben establecer prioridades que rigen la asignación de sus recursos, esta proyección del futuro es lo que impulsó la creación de redes de predicción y que ayuda en gran medida alcanzar los resultados esperados dentro de una empresa industrial prediciendo los valores al final o intermedio del proceso

## CAPÍTULO III

### 3. METODOLOGÍA

El propósito de este trabajo adopta una perspectiva evaluativa pues se encargará de la evaluación del uso de las redes neuronales en la predicción de resultados de un proceso de isomerización. La metodología empleada se detalla a continuación:



**Figura 1-3:** Etapas de la metodología del proyecto

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

El trabajo se enfoca en el ámbito cuantitativo debido a que los datos que se emplearon para modelar la red son los arrojados por el software DWSIM y mediante análisis estadístico analizar e implementar los datos predichos por la red lo que servirá en la estimación de la varianza entre los datos predichos de la red y los obtenidos mediante la simulación.

Las fuentes que nos proporcionan la información en este proyecto son:

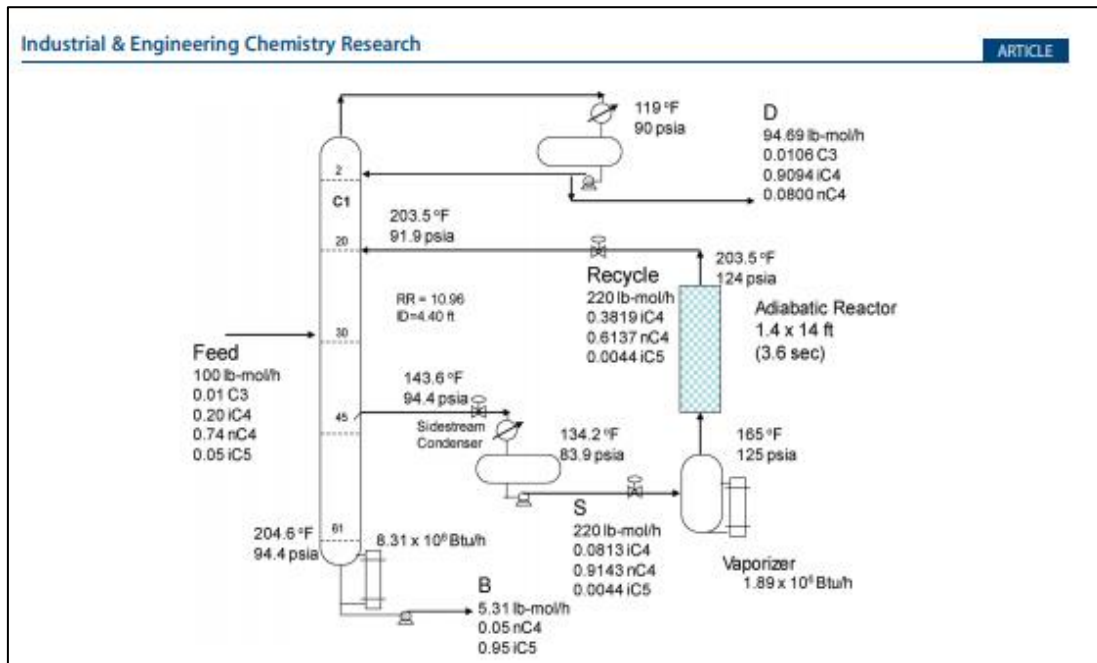
*Primaria:* Datos proporcionados por el autor del escrito y obtenidos de la simulación realizada

*Secundaria:* Artículos científicos publicados en revistas indexadas y no indexadas, con temática acorde a la tratada en este trabajo, trabajos de titulación similares al tema abordado, páginas de internet que abarquen temas expuestos en este trabajo, libros electrónicos afines la tema.

#### 3.1. Establecimiento de parámetros y variables de estudio

El trabajo utilizado como punto de partida para la realización de este proyecto es la proporcionada en el artículo científico “Control of an Isomerization Column/Reactor Process” propuesto por William L. Luyben del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Lehigh, Estados Unidos. De este artículo se extraerá toda la información pertinente para realizar la simulación del proceso de isomerización en el software DWSIM.

Como se mencionó anteriormente en el trabajo presentado por Luyben se desarrolla el control de una columna y reactor de un proceso de isomerización por medio de simulación dinámicas en Aspen Plus, Aspen Dynamics and Aspen Tray Sizing (figura 2-3); razón por la cual los parámetros de los que partimos se detallan en la Tabla 1-3, estos sirvieron de base para la simulación del proceso de isomerización en el programa DWIM y de esa manera que nos proporcione una base de datos de la cual podamos confiar para proceder con el entrenamiento y posteriormente predicción en la red de inteligencia artificial (Rosario, 2020, p. 44).



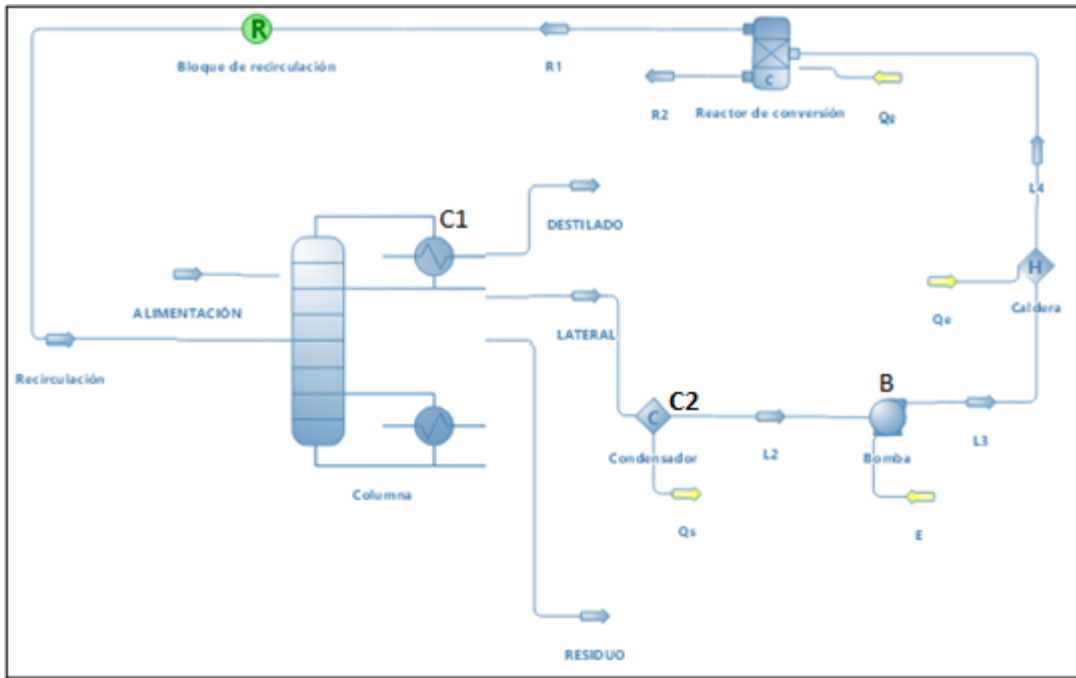
**Figura 1-3:** Diagrama de flujo del proceso de isomerización.

Fuente: Luyben, 2011, p. 383.

**Tabla 1-3:** Parámetros de diseño óptimos para la isomerización de n-butano a isobutano.

Equipo	Temperatura	Presión	Calor (energía)	Relación de reflujo	Porcentaje de conversión (n-butano)
Columna de destilación (Alimentación)	77	14,7	-	10,96	-
Condensador 1 (C1)	119	90	-	-	-
Condensador 2 (C2)	134,2	83,9	-1,76 X 10 <sup>6</sup>	-	-
Calderin	204,6	94,4	8,31 X 10 <sup>6</sup>	-	-
Vaporizador	165	125	1,88 X 10 <sup>6</sup>	-	-
Reactor	203,5	124	-	-	32,77
Bomba centrífuga 1	134,5	115,7	3059,48	-	-
Unidades	°F	psi	Btu/h		%

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Figura 3-3:** Diagrama tecnológico del proceso de isomerización

Fuente: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.1.1. Selección de variables

Variables independientes

- Presión de la columna de destilación
- Temperatura de alimentación
- Flujo de alimentación
- Fracción molar de propano, n-butano, isobutano e isopentano en la alimentación
- Relación de Reflujo en la columna
- Porcentaje de conversión en el reactor
- Temperatura del calderín
- Temperatura del condensador

Variables dependientes

- Flujo molar en el destilado
- Fracción molar de isobutano en el destilado
- Flujo molar en el residuo
- Fracción molar de isopentano en el residuo

### 3.1.2. Operacionalización de variables

Tabla 2-3: Variables de operación

	Variable		Unidad de medida
	<b>Independiente</b>	Presión en la columna de destilación	P
Temperatura de alimentación		$T_F$	K
Flujo de alimentación		F	kmol/h
Fracción molar de isobutano, isopentano, propano y n-butano en la alimentación		$X_x$	Adimensional
Relación de Reflujo en la columna		RR	Adimensional
Porcentaje de conversión en el reactor		%C	Adimensional
Temperatura del calderín (Reboiler)		$T_R$	K
Temperatura del condensador		$T_c$	K
<b>Dependiente</b>		Flujo molar en el destilado	$D_1$
	Fracción molar de isobutano en el destilado	$X_{C,D1}$	adimensional
	Flujo molar en el residuo	$W_1$	kmol/h
	Fracción molar de isopentano en el residuo	$X_{C,w1}$	adimensional

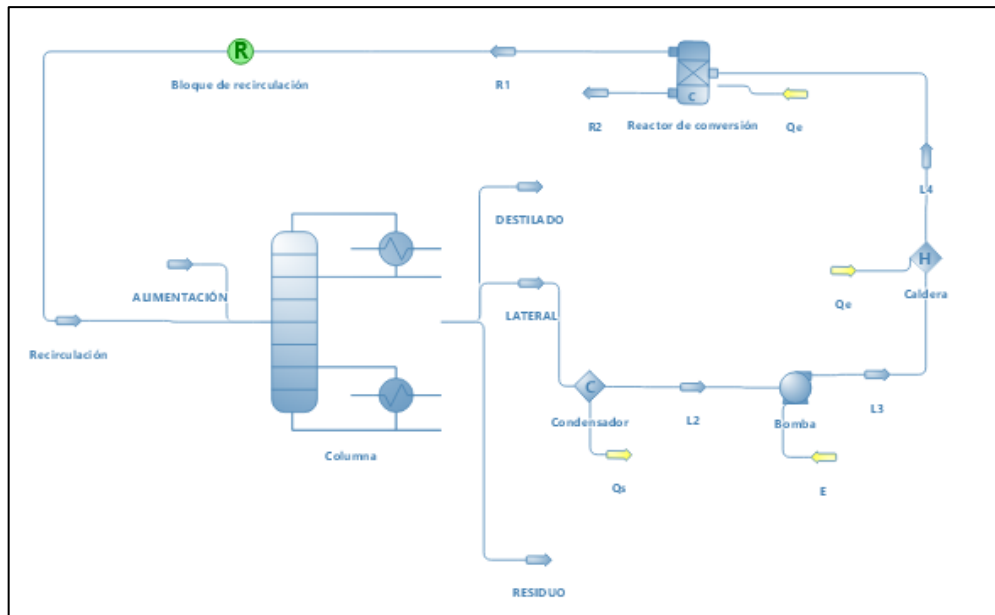
Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.2. Simulación en DWSIM

En el programa DWSIM se desarrolló la simulación del proceso de isomerización de n-butano a isobutano como se muestra en la figura 2-3, los datos obtenidos fueron extraídos de acuerdo con los parámetros establecidos en la tabla 1-3.

Dentro del simulador DWSIM se eligió la herramienta ChemSep Rigorous separation Column, con esta herramienta nos permite conectar la columna a las corrientes de alimentación y de salida tanto de destilado como residuo (Rosario, 2020, p. 41).





**Figura 4-3:** Esquema del proceso de isomerización en DWSIM

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

En el proceso estudiado que muestra el diagrama de flujo para la transformación del n-butano a isobutano una alimentación fresca de 100 lb-mol / h ingresa al plato número 30 de una gran columna de destilación con un total de 62 platos. La composición en la alimentación es 1% en moles de propano (C3), 20% en moles isobutano (iC4), 74% en moles de n-butano (nC4) y 5% en moles de isopentano (iC5). El pesado iC5 se elimina en los fondos con una pureza de 95% mol y el nC4 sale en el destilado con un 8% molar de impureza. Se selecciona un reflujo en el tambor de 90 psi y una temperatura de 119 °F para que el agua de refrigeración pueda ser usada dentro del condensador superior.

Para que el mayor porcentaje de nC4 en la alimentación se convierta a iC4 se usa un reactor que es alimentado por una corriente lateral de vapor extraída desde la columna (Etapa 45). Una corriente de vapor lateral se utiliza para reducir la impureza iC5 aún más de lo que sería si se retirase una corriente secundaria líquida. El vapor es condensado, bombeado hasta 125 psi, vaporizado y alimentado a un reactor tubular de fase gaseosa. La tasa de flujo lateral es de 220 lb-mol / h con una composición de 8,13% en moles de iC4.

A la entrada del reactor la temperatura es de 165 F, la cual es la temperatura de punto de rocío de la corriente secundaria a 125 psia. La reacción exotérmica eleva la temperatura hasta 203.5 °F en el reactor adiabático. El efluente en el reactor es 38,19% en moles de iC4 y se encuentra esencialmente en equilibrio a esta temperatura, este efluente se retroalimenta a la columna en la sección de rectificación (Etapa 20) donde la presión es 91,9 psia. Se selecciona la presión de 125 psia en el vaporizador para que el flujo de vapor pueda fluir de regreso al interior de la columna

a través de una válvula de control. Las condiciones en la columna y las corrientes de alimentación se muestran a continuación:

**Tabla 3-1:** Condiciones de la corriente de alimentación.

Parámetro	Valor	Unidad
Paquete de propiedades termodinámicas	Chao Seader	adimensional
Algoritmo flash termodinámico	Nested Loops (VLE)	adimensional
Temperatura	77	F
Presión	14,7	Psi
Flujo másico	5868,33	lbm/h
Flujo molar	100	lbmol/h
Flujo volumétrico	10,55	ft <sup>3</sup> /s
Fraccion molar de propano	0,01	adimensional
Fraccion molar de isobutano	0,20	adimensional
Fraccion molar de n-butano	0,74	adimensional
Fraccion molar de isopentano	0,05	adimensional
Entalpía específica	-1,84	BTU/lbm
Entropía específica	5,50	kJ/kmolK

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

Por otra parte, dentro de las propiedades de la columna podemos encontrar el paquete de propiedades termodinámicas DECHEMA utilizado en la simulación, además las especificaciones generales para la destilación están dadas por el modelo termodinámico UNIFAC y ANTOINE en la columna. El reactor es programado de acuerdo a la especificaciones que se encuentran dentro de la base de datos de Chemsep de Cape Open Technology que determinan las propiedades y comportamiento de cada equipo y herramienta que se encuentra en el software, dando disponibilidad de las propiedades termodinámicas y del transporte de las corrientes del proceso ya que son fundamentales para los balances de materia y energía al grado de que si se logra obtener buenas correlaciones los resultados serán sumamente confiables.

A continuación, se presenta las especificaciones para la columna de destilación:

**Tabla 4-3:** Especificaciones para la columna de destilación

Parámetro	Columna	Unidad
Valor K	DECHEMA	adimensional
Coefficiente de actividad	UNIFAC	adimensional
Presión de vapor	ANTOINE	adimensional
Presión	90	psi
Número de platos	62	adimensional
Plato de alimentación	30	adimensional
Plato de corriente lateral	45	adimensional
Plato de recirculación	20	adimensional
Relación de reflujo	10,96	adimensional
Temperatura del calderín	204,6	F
Temperatura del condensador	119	F

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.2.1. Validación de la simulación

Una vez realizada la simulación en DWSIM del proceso de isomerización es necesario indicar los resultados conseguidos en el programa y compararlos con los expuestos en el trabajo de Luyben. Los resultados se presentan en la tabla 5-3 junto con el valor de los porcentajes de errores reportados en cada componente. Cabe recalcar que las condiciones de operación con los que se trabajó son las expuestas en la Tabla 1-3 que de igual manera son los empleados en este trabajo como se expresa en la Tabla 4-3.

**Tabla 2-3:** Validación de la simulación realizada en DWSIM

Object	Luyben			DWSIM		Error (%)	
	Alimentación	Residuo	Destilado	Residuo	Destilado	Residuo	Destilado
<b>Flujo molar (kmol/h)</b>	100	5,31	94,69	5,27218	94,7279	-0,71	0,040
<b>Fracción molar Propano</b>	0,01	-	0,0106	1,6424E-18	0,0105562	-	-0,41
<b>Fracción molar Isobutano</b>	0,20	-	0,9094	3,11744E-05	0,908794	-	-0,07
<b>Fracción molar n-butano</b>	0,74	0,05	0,0800	0,0502767	0,0802119	0,55	0,26
<b>Fracción molar Isopentano</b>	0,05	0,95	-	0,948715	3,31574E-11	-0,135	-

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.3. Obtención de la base de datos

Una vez realizada la simulación y validación del proceso de isomerización en DWSIM, se ejecuta el programa 115 veces con la finalidad de obtener una base de datos del n-butano en el destilado y del isopentano en el residuo, lo que nos servirá para el entrenamiento y posterior predicción en la red neuronal. Para obtener este conjunto de datos se ha mantenido el flujo de alimentación a 100kmol/h, una temperatura de 77°F y una presión de 14.7 psi de en la columna de destilación, los demás parámetros se muestran en la tabla 6-3 en el cual se detallan los rangos establecidos para cada uno de los componentes.

**Tabla 6-3:** Rango de especificaciones de los componentes de alimentación

Parámetro	Rango	Unidad
Fracción molar de propano	0,01 – 0,1	adimensional
Fracción molar de isobutano	0,1 - 0,5	adimensional
Fracción molar de n-butano	0,5 - 0,8	adimensional
Fracción molar de isopentano	0,01 - 0,1	adimensional
Relación de reflujo en columna de destilacion	5 – 15	adimensional
Porcentaje de conversion en la reaccion	30 - 40	adimensional

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

Una vez establecidos los valores se generó una base de 115 pares de datos de números aleatorios con los cuales se realizó la simulación en DWSIM, dentro de los 115 pares de datos se seleccionó 100 para el entrenamiento de la red neuronal (Anexo 1) y 15 para su correcta validación (Anexo 2).

Cabe destacar que luego de haber generado una hoja de reporte con los pares de datos seleccionados estos se exportaron hacia Microsoft Excel para aplicar la prueba de Grubbs (Parra, 2020, p. 20), que es un método estadístico que se utiliza con la finalidad de descartar datos anómalos alejados de los valores estándar (Sharikov, Snegirev y Tkachev, 2020, p. 336).

### 3.4. Diseño de la red neuronal

Para diseñar la red neuronal artificial primero definiremos los parámetros de entrada y salida en la red, en este trabajo se establecen 6 variables de entrada junto con 4 variables de salida (Tabla 7-3), que serán las adecuadas para entrenar el modelo de predicción.

**Tabla 7-3:** Variables de entrada y salida establecidas en el modelo de predicción

		Variables	Unidad
<b>Entrada</b>	1	Fracción molar de propano en la alimentación	$X_{c3}$ Adimensional
	2	Fracción molar de isobutano en la alimentación	$X_{ic4}$ Adimensional
	3	Fracción molar de n-butano en la alimentación	$X_{nc4}$ Adimensional
	4	Fracción molar de isopentano en la alimentación	$X_{ic5}$ Adimensional
	5	Relación de reflujo en la columna	RR Adimensional
	6	Porcentaje de conversión de la reacción de isomerización	%C Adimensional
<b>Salida</b>	1	Flujo molar en el destilado	$D$ lb-mol/h
	2	Fracción molar de isobutano en el destilado	$X_{ic4}$ Adimensional
	3	Flujo molar en el residuo	$R$ lb-mol/h
	4	Fracción molar de isopentano en el residuo	$X_{ic5}$ Adimensional

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.4.1. Normalización de entradas y salidas

Como iniciación antes de realizar el diseño de la red neuronal es preciso importar los datos obtenidos a Matlab y posteriormente ser normalizados en base a su rango comprendido en el intervalo 0 y 1 con la finalidad de reducir la redundancia de datos (Rosario, 2020, p. 44), esto por medio de la Ecuación de normalización:

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

Donde:

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

$X$  = Valor que se desea normalizar

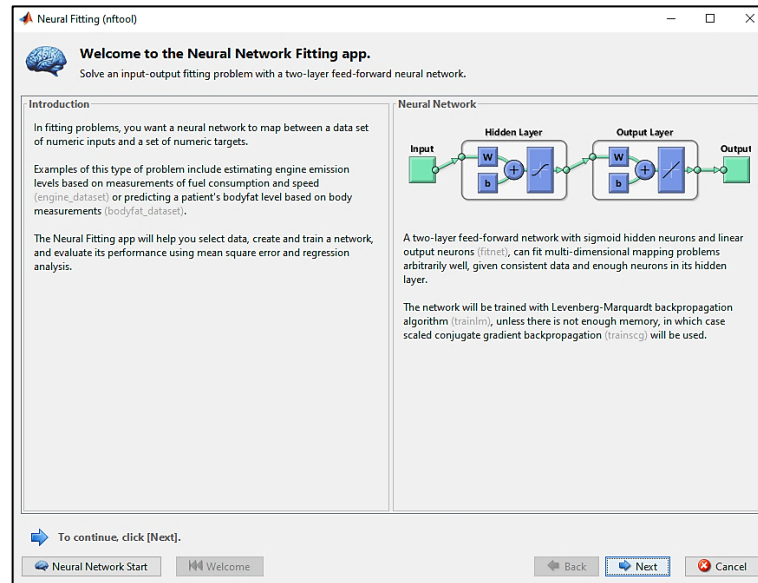
$X_{\text{max}}$  = Valor máximo

$X_{\text{min}}$  = Valor mínimo

Se puede proceder a diseñar la red directamente sin realizar el paso previo de la normalización, pero el problema que nos aparecerá es que la red demorara más tiempo en realizar iteraciones y comparaciones, reduciendo la viabilidad y veracidad de los datos predichos.

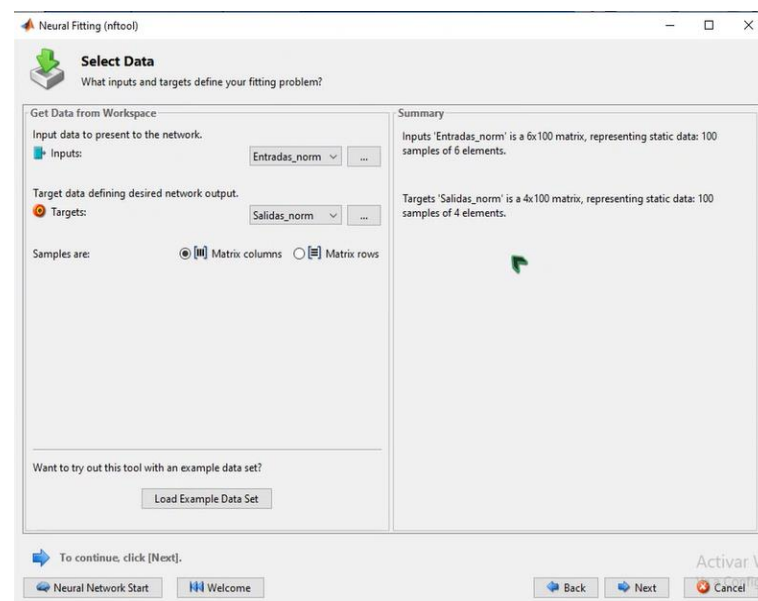
### 3.4.2. Desarrollo de la red neuronal artificial

Una vez normalizada la base de datos se procede a ejecutar la herramienta Neural Net Fiting del toolbox de Matlab ubicada en el apartado aplicaciones, que nos permite resolver problemas de ajuste usando dos capas (Rosario, 2020, p. 45), posteriormente se selecciona las variables de entrada y salida de los datos normalizados en el software (Figura 5-3).



**Figura 5-3:** Herramienta de diseño de red Network Fitting.

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Figura 6-3:** Selección de datos normalizados.

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

### 3.4.3. Arquitectura de la red neuronal

Para la arquitectura de la red neuronal se tiene que definir el número de neuronas y las funciones de transferencia, para ello es de vital importancia determinar el número de neuronas y numero de capas haciendo uso de las reglas heurísticas o la aplicación de métodos numéricos (Rosario, 2021, p. 44). El método más adecuado para este caso de estudio es la generación dinámica, que

complemente la búsqueda de dinámica y forzada que indica que si el valor está por debajo del valor esperado una nueva neurona aparece y es incorporada (Mehlig, 2021), pero caso contrario si el error es cero o cercano a cero una neurona es retirada, esto con el objetivo de que la red no memorice garantizando así un óptimo rendimiento en el pronóstico y minimización el error en la predicción.

A continuación, se muestran algunos de los ensayos realizados con los valores de la correlación lineal y error cuadrático medio para varios tipos de red neuronal. En cada una de las pruebas los valores obtenidos se los obtuvieron a través del software de Matlab durante el entrenamiento de la red neuronal.

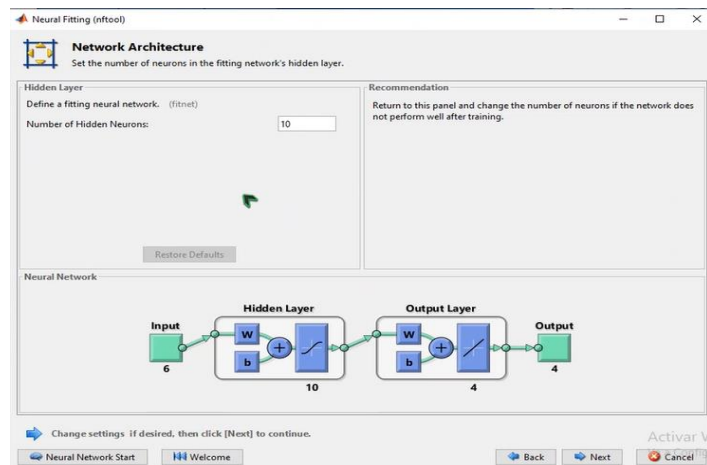
**Tabla 8-3:** Pruebas de entrenamientos.

N	Topología de Red	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization	
		R	MSE	R	MSE
1	I-10-O	0,96231	6,48E-03	0,96473	6,51E-03
2	I-15-O	0,98006	3,40E-03	0,99814	3,23E-04
3	I-20-O	0,97138	5,12E-03	0,99901	1,73E-04
4	I-22-O	0,97429	4,51E-03	0,99685	5,42E-04
5	I-25-O	0,98108	3,24E-03	0,99698	5,22E-04
6	I-30-O	0,97089	5,38E-03	0,99520	8,30E-04

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

En este caso de estudio se comenzó con una red que consta de:

- Seis entradas como variables de predicción.
- 20 capas ocultas con 100 neuronas seleccionadas para experimentación.
- 4 salidas correspondiente a corrientes de flujo molares en destilado, residuo y fracciones molares de isobutano e isopentano predichas.



**Figura 7-3:** Selección de la red neuronal.

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

A esto podemos incluir que se añade a la red neuronal la función de transferencia en la capa oculta de Hyperbolic tangent sigmoid (tansing) y la función de transferencia para la capa da salida la función lineal (purelin) (Rosario, 2021, p. 48).

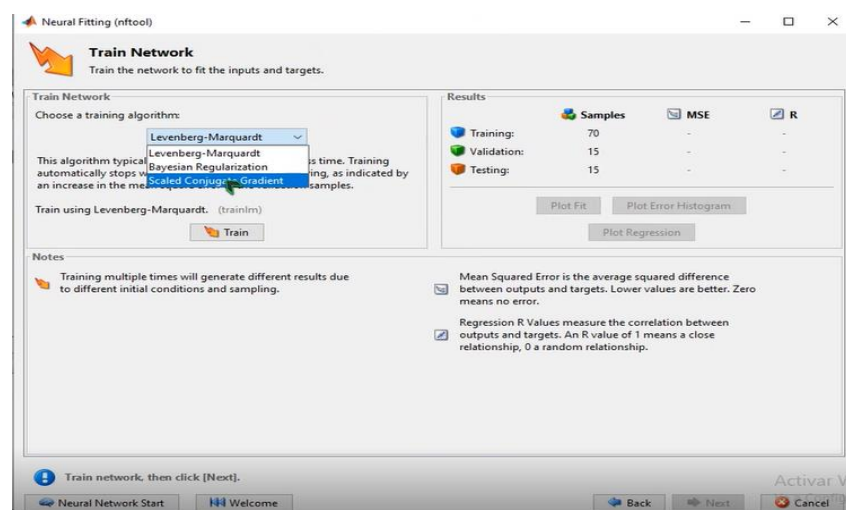
### 3.5. Entrenamiento y validación

#### 3.5.1. Selección del algoritmo de entrenamiento

Uno de los problemas más grandes que enfrentan las redes neuronales es el problema de sobreajuste (Parra, 2020, p. 23), razón por la cual para diseñar la red neuronal de predicción del proceso de isomerización para la producción de isobutano se utiliza el algoritmo bayesiano y así evitar este problema de sobreajuste logrando mejores resultados y rendimiento a la vez.

Las pruebas realizadas que se presentan en la Tabla 8-3, permiten identificar la topología de la red y además con este algoritmo de regularización bayesiana ayuda a mejorar la correlación y minimizar el error que en el algoritmo Levenberg-Marquardt.

Con ayuda del algoritmo Bayesian Regularization (Figura 7-3), es posible actualizar los pesos y valores de sesgo acorde a la optimización de Levenberg-Marquardt, minimizando una combinación de errores cuadráticos y pesos para posteriormente producir una red que generalice bien mediante una combinación perfecta (Rosario, 2021, p. 48). Dentro de la herramienta de Neural Fiting se encuentran tres algoritmos que nos permiten predecir como son: Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient, pero se utiliza el mencionado anteriormente por ser el que mejor se ajusta a nuestros tipos de datos y siendo el que menor error cuadrático medio y mejor correlación.



**Figura 8-3:** Selección del algoritmo en el entrenamiento de la red neuronal

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



### ***3.5.2. Validación de la red neuronal***

La validación de la red neuronal se realiza mediante la comparación de resultados obtenidos a través de la ejecución de la red neuronal artificial y los obtenidos por el programa de simulación DWSIM, para ello se emplearon un conjunto de 15 pares de datos y comprobando la predicción con un análisis estadístico, esto como medida de lo exacta que resulta la red al momento de la predicción y poder mejorar el proceso de entrenamiento cuando la exactitud no es la adecuada. Durante este proceso de prueba los pares de datos seleccionados para validación no influyen en el entrenamiento de la red ya que la finalidad es generar nuevos datos y mostrárselos a la red sin revelarles las salidas deseadas y comparar que tan exacto son los resultados.

### **3.6. Análisis estadístico**

El análisis estadístico empleado en este trabajo de investigación es el ANOVA el cual compara los resultados arrojados de las salidas en la simulación de DWSIM y las presentados en las salidas de los datos predichos de la red neuronal, para posteriormente comparar los resultados en una tabla ANOVA realizando comparaciones entre varias muestras en función del análisis de varianzas (Parra, 2020, p. 26).

Al momento de empezar a comparar las muestras primero se realiza un análisis de varianza simple para posteriormente aplicar el análisis ANOVA que nos ayuda a contrastar la hipótesis de igualdad y elegir entre la hipótesis nula o la alternativa. Este tipo de análisis es un tipo notable de hipótesis prueba que se utilizan mucho en la experimentación de datos (Neamat y Hassan, 2021).

La tabla de ANOVA lo que hace es descomponer la varianza de los datos observados en dos tipos de componentes, el primer componente es entre grupos que cuantifica las diferencias entre datos reales y el segundo componente es dentro de grupos que se encarga de cuantificar las diferencias de los datos predichos por la red (Rosario, 2021, p. 51).

## CAPÍTULO IV

### 4. GESTIÓN DEL PROYECTO

#### 4.1. Cronograma

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

ACTIVIDAD	MESES																											
	1° Mes				2° Mes				3° Mes				4° Mes				5° Mes				6° Mes							
	SEMANAS																											
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4				
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Elaboración del anteproyecto			■	■	■	■	■	■																				
Identificación de variables					■	■	■	■	■																			
Simulación del proceso de conversión del n-butano a isobutano			■	■	■	■	■	■																				
Obtención de pares de datos experimentales					■	■	■	■	■	■																		
Diseño y entrenamiento de la red neuronal artificial									■	■	■	■	■	■														
Validación del proceso por medio de los resultados arrojados en la red neuronal y del programa DWSIM													■	■	■	■												
Obtención de resultados finales del proceso																	■	■	■	■	■	■						
Redacción y revisión del documento final									■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■						
Defensa del trabajo final																									■	■		

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

## 4.2. Presupuesto

Tabla 2-4: Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación (Internet)	\$40	X	
Cursos online para simulación en el software DWSIM	\$70	X	
Cursos online para el diseño de redes neuronales artificiales MATLAB	\$100	X	
Copias e impresiones	\$10	X	
Empastados	\$50	X	
Imprevisto	\$30	X	
<b>TOTAL</b>	<b>\$300</b>		

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021

## 4.3. Recursos materiales

En el desarrollo de todas las fases del proyecto se utilizó el software DWSIM versión 6.0 Update 7 (Classic UI, 64-bit) en la cual se utilizan herramientas adicionales como ChemSep Rigorous Separation Column (CAPE-OPEN), todas las simulaciones fueron realizadas en un ordenador procesador Intel® Core™ i5-7200U CPU @ 2.50GHz 2.70 GHz con memoria instalada 8,00 GB y sistema operativo de 64 bits, procesador x64, Windows 10.

## 4.4. Resultados

A lo largo del trabajo de investigación se han mostrado algunos resultados producto de las simulaciones y la predicción de las redes neuronales, en este capítulo se muestra todos los resultados finales obtenidos en el proceso de predicción de la isomerización del-butano a isobutano.

### 4.4.1. Sistema de destilación

El sistema de isomerización de n-butano a isobutano que se simula en este proyecto se titula “Control of an Isomerization Column/Reactor Process” propuesto por William L. Luyben del

Departamento de Ingeniería Química en la Universidad de Lehigh en Pennsylvania, Estados Unidos. Y tomando en cuenta los parámetros establecidos en este trabajo de investigación señalados en el capítulo 3 (Tabla 1-3) se llevó a cabo la simulación en DWSIM, obteniéndose los siguientes resultados:

**Tabla 3-4:** Corriente de destilado (D)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	118,929	F
Presión	90,000	psi
Flujo másico	5491,970	lbm/h
Flujo molar	94,731	lbmol/h
Entalpía molar	-122,852	BTU/lbm
Entropía molar	-0,257	BTU/ [lbm.R]
Capacidad calorífica (Cp)	0,624	BTU/ [lbm.R]
Fracción molar de Propano	0,011	adimensional
Fracción molar de Isobutano	0,909	adimensional
Fracción molar de N-butano	0,080	adimensional
Fracción molar de Isopentano	$3,32 \cdot 10^{-11}$	adimensional
Fase de la mezcla	Líquido	adimensional

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

**Tabla 4-4:** Corriente de residuo (W)

Parámetros	Valor	Unidad
Temperatura	201,482	F
Presión	94,400	psi
Flujo másico	376,411	lbm/h
Flujo molar	5,269	lbmol/h
Entalpía molar	-76,900	BTU/lbm
Entropía molar	-0,149	BTU/ [lbm.R]
Capacidad calorífica (Cp)	0,643	BTU/ [lbm.R]
Fracción molar de Propano	$1,64 \cdot 10^{-18}$	adimensional
Fracción molar de Isobutano	$3,12 \cdot 10^{-05}$	adimensional
Fracción molar de N-butano	0,050	adimensional
Fracción molar de Isopentano	0,949	adimensional
Fase de la mezcla	Líquido	adimensional

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

**Tabla 5-4:** Validación de la simulación

Parámetro	ASPEN (Luyben, 2011)			DWSIM		Error (%)	
	Alimentación	Residuo	Destilado	Residuo	Destilado	Residuo	Destilado
Flujo molar (kmol/h)	100	5,31	94,69	5,27218	94,7279	-0,712	0,040
Fracción molar Propano	0,01	-	0,0106	1,6424E- 18	0,0105562	-	-0,410
Fracción molar Isobutano	0,20	-	0,9094	3,11744E- 05	0,908794	-	-0,067
Fracción molar n- butano	0,74	0,05	0,0800	0,0502767	0,0802119	0,550	0,260
Fracción molar Isopentano	0,05	0,95	-	0,948715	3,31574E- 11	-0,135	-

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

De los resultados presentados en la Tabla 5-4, el promedio de error porcentual en la validación de la simulación es de 0,311%.

#### 4.4.2. Análisis de datos proporcionados por DWSIM

Una vez ejecutada la simulación del proceso de isomerización en DWSIM se crea una base de datos, recopilando un conjunto de datos de entrada, manteniendo constante el flujo de alimentación, la temperatura y presión del sistema; obteniendo como datos de salida los flujos del destilado y residuo; concentraciones de n-butano en el destilado y concentraciones de isopentano en el residuo. Los datos que se presentan en el Anexo A se utilizan para el entrenamiento de la red neuronal y los presentados en el Anexo B son los utilizados para la validación de la red.

#### 4.4.3. Programación y diseño de la red neuronal artificial

Para el diseño de la red neuronal artificial es necesario poseer una base de datos de la cual la red pueda realizar su entrenamiento validación y prueba, el software Matlab realiza estas tres operaciones por sí misma, pero es preciso implementar argumentos matemáticos para que la red codifique y prediga de la mejor forma asegurando la veracidad de los resultados.

Las variables que se emplearon para la codificación de la red neuronal para una mayor comprensión se detallan a continuación:

**Tabla 6-4:** Variables de codificación empleados en el diseño de la red neuronal

Variable	Descripción
Extraer	Importa los datos contenidos en Excel hacia Matlab
Datos	Vincula Matlab con la base de datos de entradas en Excel destinadas para el entrenamiento
entradas	Recopila los datos de las entradas para el entrenamiento, sin normalizar
XC3_max	Fracción molar máxima de propano en la alimentación
XC3_min	Fracción molar mínima de propano en la alimentación
XC3_N	Fracciones molares normalizadas de propano en la alimentación
XiC4_max	Fracción molar máxima de isobutano en la alimentación
XiC4_min	Fracción molar mínima de isobutano en la alimentación
XiC4_N	Fracciones molares normalizadas de isobutano en la alimentación
XnC4_max	Fracción molar máxima de n-butano en la alimentación
XnC4_min	Fracción molar mínima de n-butano en la alimentación
XnC4_N	Fracciones molares normalizadas de n-butano en la alimentación
XiC5_max	Fracción molar máxima de isopentano en la alimentación
XiC5_min	Fracción molar mínima de isopentano en la alimentación
XiC5_N	Fracciones molares normalizadas de isopentano en la alimentación
RR_max	Relación de reflujo máximo en la columna de destilación
RR_min	Relación de reflujo mínima en la columna de destilación
RR_N	Relación de reflujo normalizado en la columna de destilación
Crx_max	Conversión máxima en el reactor
Crx_min	Conversión mínima en el reactor
Crx_N	Conversión normalizada en el reactor
Entradas_norm	Variable de entrada que recopila todas las entradas normalizadas
salidas	Recopila los datos de las salidas
D_max	Flujo molar máximo del destilado
D_min	Flujo molar mínimo del destilado
D_N	Flujo molar normalizado del destilado
DXiC4_max	Fracción molar máximo de isobutano en el destilado
DXiC4_min	Fracción molar mínimo de isobutano en el destilado
DXiC4_N	Fracción molar normalizado de isobutano en el destilado
R_max	Flujo molar máximo del residuo
R_min	Flujo molar mínimo del residuo
R_N	Flujo molar normalizado del residuo
RXiC5_max	Fracción molar máximo de isopentano en el residuo
RXiC5_min	Fracción molar mínimo de isopentano en el residuo
RXiC5_N	Fracción molar normalizado de isopentano en el residuo
Salidas_norm	Variable de salida que recopila todas las variables normalizadas
Datos_P	Variable de entrada que recopila todas las entradas normalizadas para la predicción
D_P	Flujo molar predicho del destilado
DXiC4_P	Fracción molar predicho de isobutano en el destilado
R_P	Flujo molar predicho del residuo
RXiC5_P	Fracción molar predicho de isopentano en el residuo
Resultados_P	Resultados predichos

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

#### 4.4.3.1. Normalización de los datos

Para hacer el diseño de la red neuronal se hace prescindible establecer un conjunto de datos que serán normalizados antes de ser ingresados a la red esto con el propósito de que la red realice las iteraciones y predicciones lo más rápido y exacto posible, dentro del software se han normalizado los datos de entrada que vienen a ser las variables independientes y los datos de salida que son las variables dependientes.

La normalización de los datos de entrenamiento de la red neuronal se presenta en el ANEXO C y los datos de validación se encuentran en el ANEXO D.

#### 4.4.3.2. Código y diseño de la red neuronal

Una vez normalizados los datos se procede a desarrollar el script de la red neuronal que nos arroja los valores ingresados de los flujos molares y concentraciones de propano, n-butano, isobutano e isopentano obtenidas en el entrenamiento y validación.

**Tabla 7-4:** Resultados de pruebas de entrenamiento

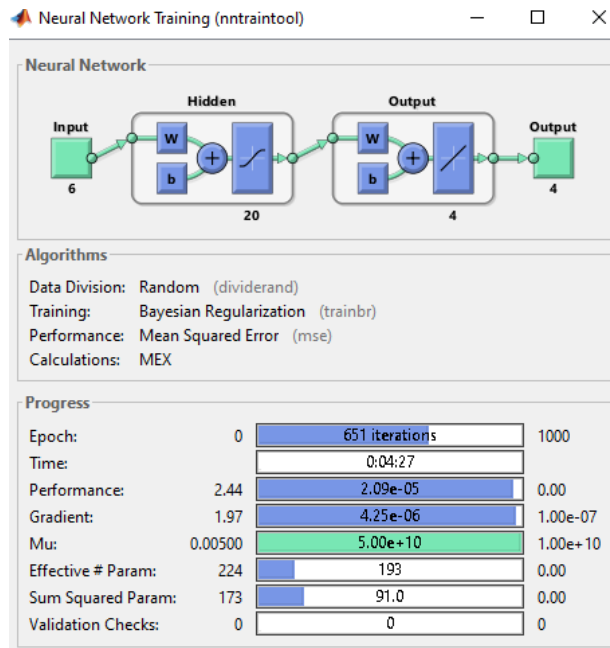
Arquitectura de red	Levenberg-Marquardt					Regularización Bayesiana			
	MSE	R entrenamiento	R validación	R prueba	R total	MSE	R entrenamiento	R prueba	R total
10	6,48E-03	0,96490	0,94859	0,96711	0,96231	6,51E-03	0,99915	0,82606	0,96473
15	3,40E-03	0,99542	0,94860	0,94769	0,98006	3,23E-04	0,99986	0,98833	0,99814
20	5,12E-03	0,99988	0,99672	0,84486	0,97138	1,73E-04	0,99993	0,99287	0,99901
22	4,51E-03	0,99940	0,99237	0,83708	0,97429	5,42E-04	0,99997	0,98207	0,99685
25	3,24E-03	0,99323	0,97300	0,92091	0,98108	5,22E-04	0,99998	0,98107	0,99698
30	5,38E-03	0,99818	0,95712	0,91229	0,97089	8,30E-04	1,00000	0,97358	0,99520

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

Durante los ensayos realizados en el entrenamiento de la red neuronal se encontró que el algoritmo que mejor se adapta nuestros grupos de datos es el algoritmo Regularización Bayesiana con una topología de 20 neuronas ocultas, dándonos un error cuadrático medio (MSE) de  $1.73 \cdot 10^{-4}$  y un valor del coeficiente de correlación total (RR) de 0.99901. Resultados ideales para el proceso de predicción que quiere ejecutar la red.

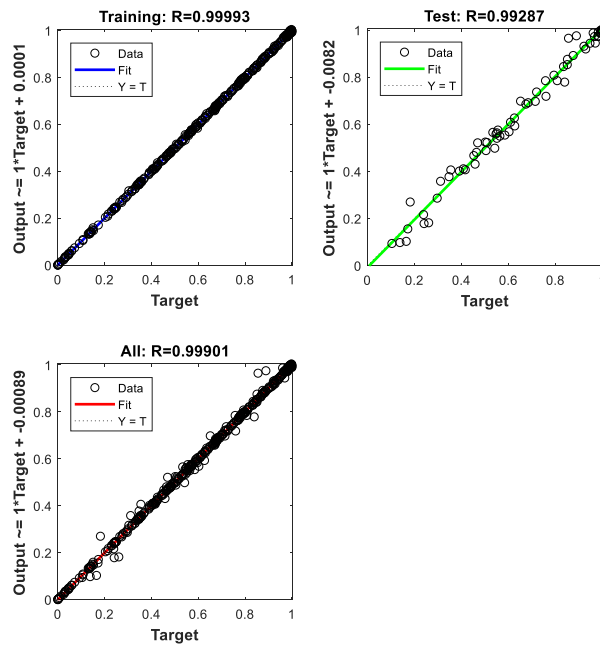
Los resultados expresados mediante las gráficas de datos reales de DWSIM vs datos predichos por la red se presentan a continuación:

-Resultados para una red de 20 neuronas ocultas



**Gráfico 1-4:** Arquitectura de red de 20 neuronas

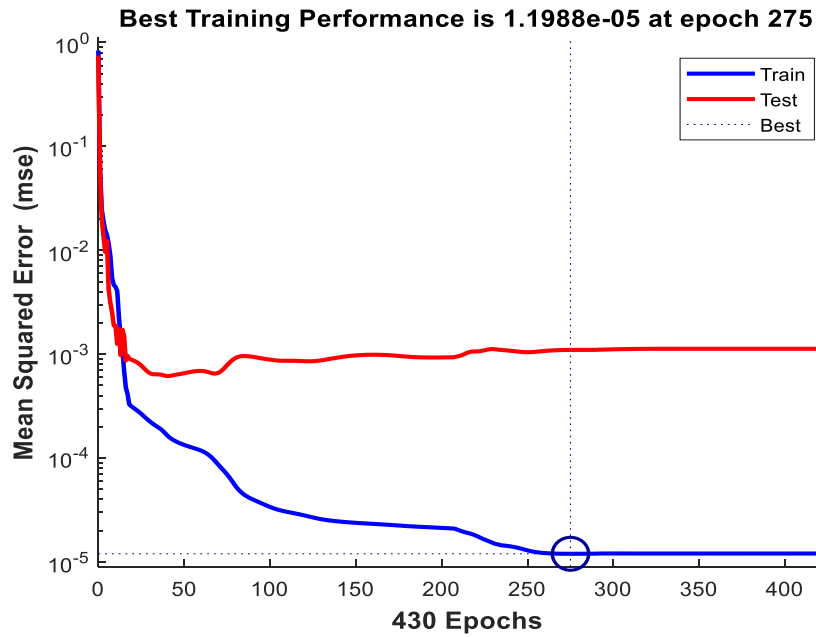
Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Gráfico 2-4:** Correlación de entrenamiento de red de 20 neuronas

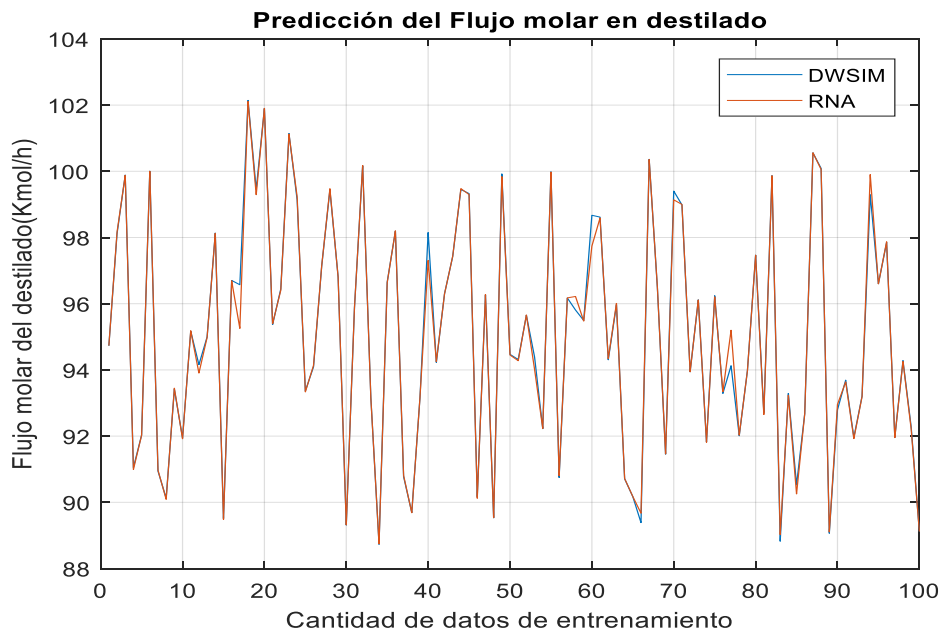
Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.





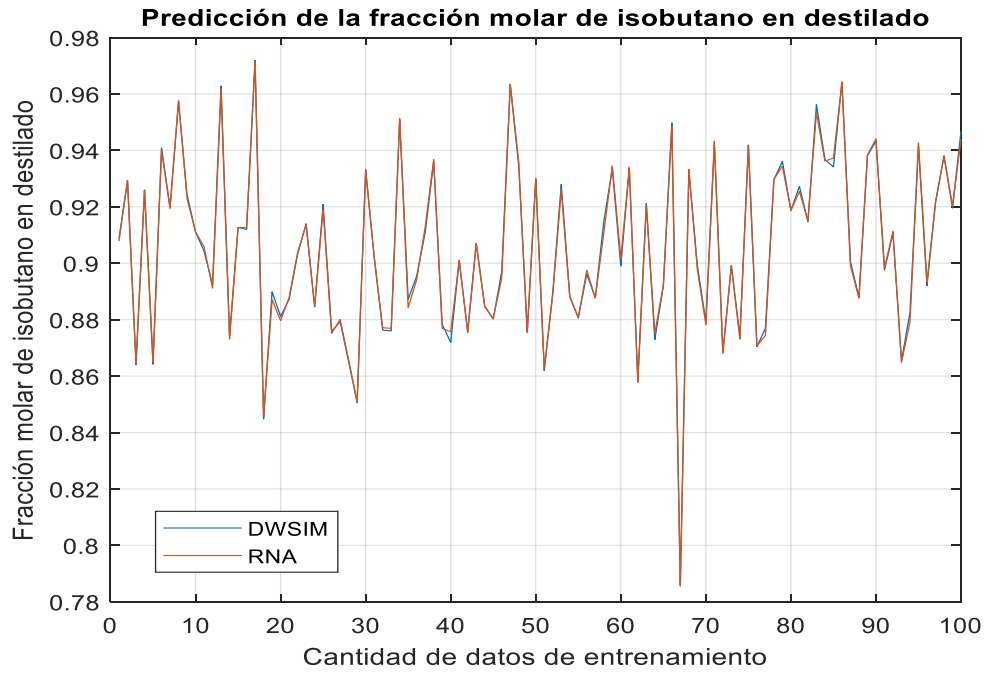
**Gráfico 3-4:** Curvas de aprendizaje de red de 20 neuronas

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



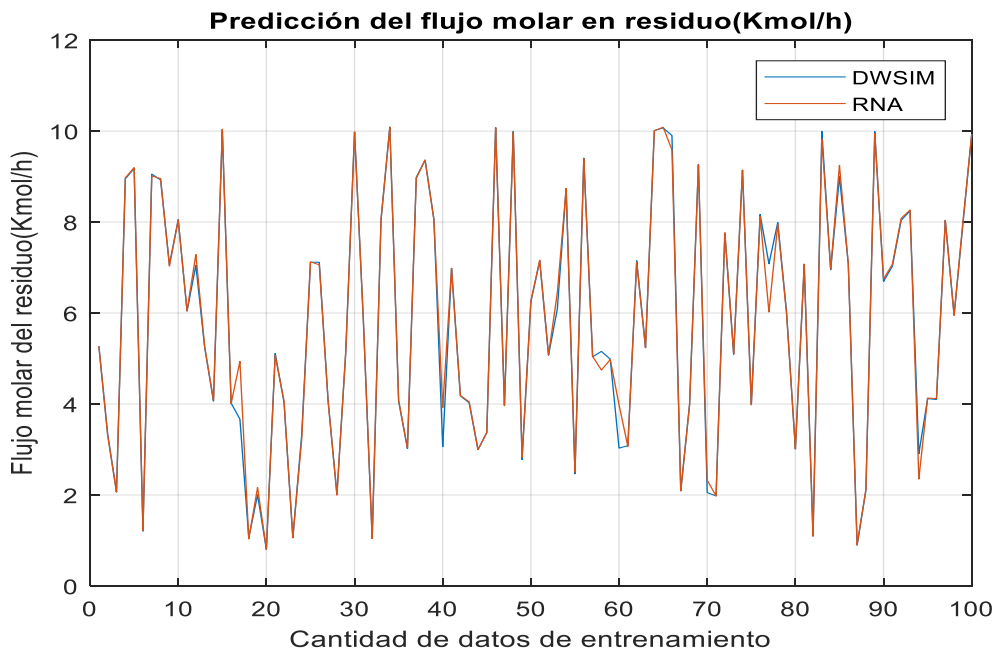
**Gráfico 4-4:** Comparación de datos reales de DWSIM vs datos predichos de la red neuronal de 20 neuronas del flujo molar en el destilado

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



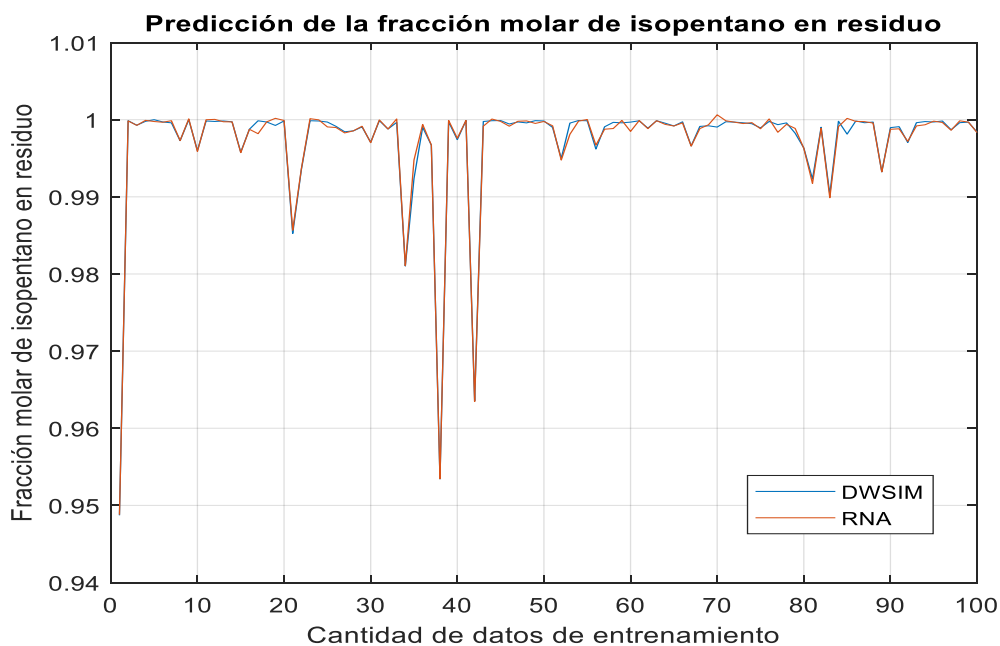
**Gráfico 5-4:** Comparación de datos reales vs datos predichos de la red neuronal de 20 neuronas de la fracción molar de isobutano en el destilado

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Gráfico 6-4:** Comparación de datos reales de DWSIM vs datos predichos de la red neuronal de 15 neuronas del flujo molar en el residuo

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Gráfico 7-4:** Comparación de datos reales vs datos predichos de la red neuronal de 15 neuronas de la fracción molar de isopentano

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

La comparación de los datos proporcionados por DWSIM y la red neuronal se observa cómo se ajustan los valores tanto del flujo molar y la fracción de isobutano en el destilado como del flujo molar y fracción de isopentano en el residuo, que son los que arrojaría la red neuronal ideal de 20 neuronas ocultas. Las gráficas de correlación muestran que los datos de entrenamiento, validación y testing son bastante aceptables.

#### 4.4.4. Análisis estadístico

Para comprobar la veracidad de las predicciones hechas en la red neuronal se empleó un análisis estadístico en SPSS tomando en cuenta los datos reales obtenidos de DWSIM y los predichos de la red neuronal, estos valores son de las variables dependientes de las corrientes de salida las cuales comprenden a las corrientes de flujo de salida y las fracciones molares de isobutano en el destilado e isopentano en el residuo.

##### 4.4.4.1. Análisis ANOVA

El objetivo del análisis ANOVA es el de contrastar la hipótesis de igualdad de medias, que viene a ser la media de datos reales basados en la simulación de DWSIM con la media de los datos predichos por la red neuronal. A la red neuronal se ingresaron 15 pares de datos sin dar a conocer

las salidas, pero los resultados de estas salidas ya estarán en la base de datos de valores reales a los cuales se compararán aplicando el análisis y verificar la viabilidad de este proyecto tomando como nivel de confianza el 95% y un nivel de significancia del 5%.

Se ha planteado la hipótesis nula y la hipótesis alternativa las cuales son:

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

$$H_0: \mu_1 = \mu_2$$

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

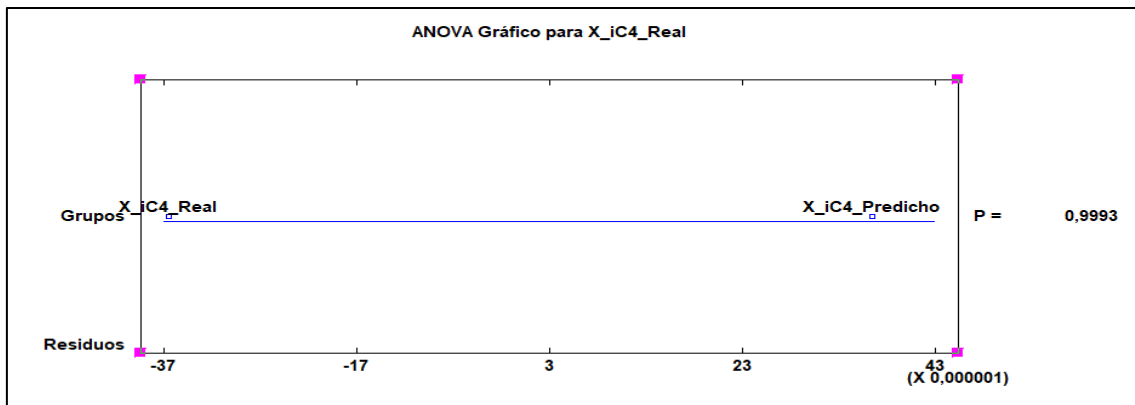
$$H_1: \mu_1 \neq \mu_2$$

**Tabla 8-4:** Tabla ANOVA para la fracción molar de isobutano en el destilado

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	1,33333E-9	1	1,33333E-9	7,50679E-7	0,9993
Intra grupos	0,0497327	28	0,00177617		
Total (Corr.)	0,0497327	29			

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

En el análisis ANOVA la razón-F nos da un valor de  $7,50679 \cdot 10^{-7}$  resultado del cociente entre el estimado entre-grupos que cuantifica la dispersión de los valores de cada muestra con respecto a sus correspondientes medias y el estimado dentro-de-grupos donde cuantifica la dispersión de las medias de las muestras con respecto a la media global y puesto que el valor-P es mayor a 0,05 dentro de las características del análisis anova en este caso se acepta la hipótesis nula afirmando que no existe una diferencia estadística significativa entre las medias de los datos reales y los predichos por la red para la fracción molar de isobutano en el destilado, teniendo un nivel de confianza del 95%. De la misma manera como se puede observar en el Grafico 13-4 no existe diferencia significativa entre los datos de isobutano reales simulados en el software DWSIM y los predichos por la red neuronal en Matlab.



**Gráfico 8-4:** Grafico ANOVA de comparación de medias del isobutano en el destilado

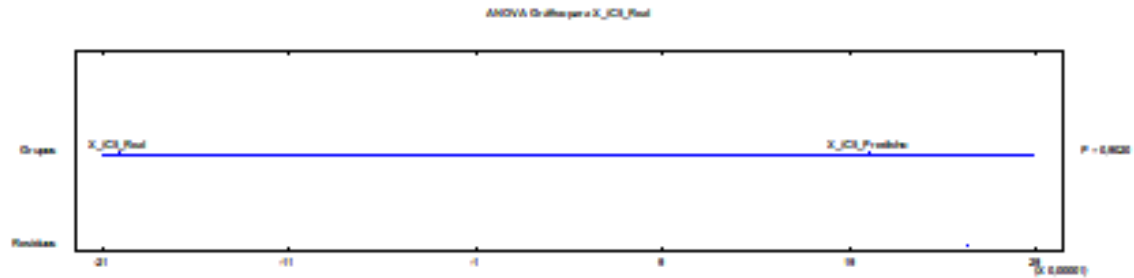
Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

**Tabla 9-4:** Tabla ANOVA para la fracción molar de isopentano en el residuo

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	4,03333E-8	1	4,03333E-8	0,02	0,9020
Intra grupos	0,0000731667	28	0,0000026131		
Total (Corr.)	0,000073207	29			

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

**Gráfico 9-4:** Grafico ANOVA de comparación de medias del isopentano en el residuo

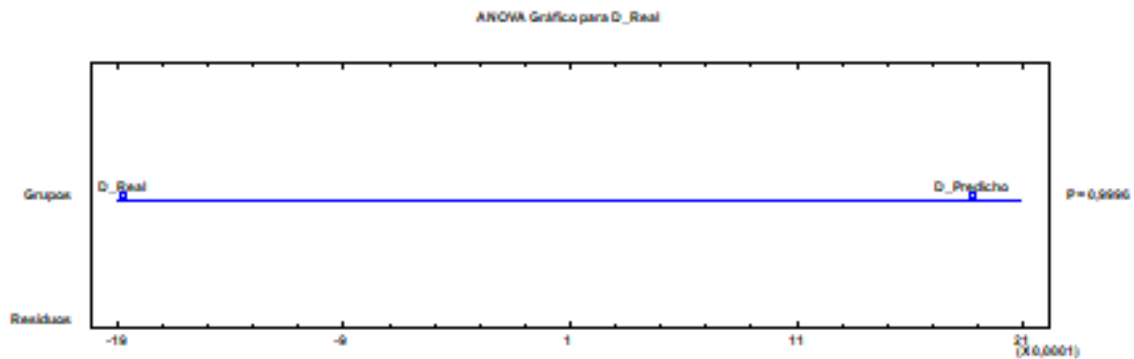


Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021

**Tabla 10-4:** Tabla ANOVA para el flujo molar del destilado

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00000353633	1	0,00000353633	0,00	0,9996
Intra grupos	428,668	28	15,3096		
Total (Corr.)	428,668	29			

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



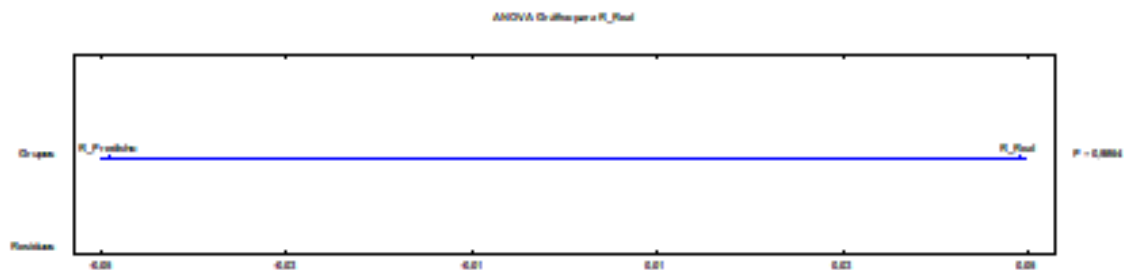
**Gráfico 10-4:** Grafico ANOVA de comparación de medias del flujo molar del destilado

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

**Tabla 11-4.** Tabla ANOVA para el flujo molar del residuo

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00240308	1	0,00240308	0,00	0,9864
Intra grupos	228,654	28	8,1662		
Total (Corr.)	228,656	29			

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.



**Gráfico 11-4:** Grafico ANOVA de comparación de medias del flujo molar del residuo

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

De igual forma para los demás datos de salida se realiza el mismo análisis obteniéndose los resultados que se detallan en la Tabla 12-4.

**Tabla 12-4:** Resumen de resultados de la Tabla ANOVA para flujos y fracciones molares de isobutano en el destilado e isopentano en el residuo.

Variables comparadas (Real y Predicha)		Media	Razón-F	Valor-P
Flujo molar de destilado	D_Real	95,2122	2,30989E-7	0,9996
	D_Predicho	95,2129		
Fracción molar de isobutano en destilado	Xic4_Real	0,904333	7,50679E-7	0,9993
	Xic4_Predicho	0,904347		
Flujo molar de residuo	W_Real	5,68519	0,000294271	0,9864
	W_Predicho	5,66729		
Fracción molar de isopentano en residuo	Xic5_Real	0,998973	0,0154351	0,9020
	Xic5_Predicho	0,999047		

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

Puesto que en cada una de las variables de salida comparadas el valor-P es mayor a 0,005 se acepta la hipótesis nula ( $H_0$ ) de acuerdo con la condición:

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

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

Teniendo un nivel de confianza del 95% se estima que no existe una diferencia significativa entre la media de las dos variables es decir entre datos reales de DWSIM y datos predichos por la red neuronal.

#### 4.4.5. Predicciones de la red neuronal

Finalmente, para medir la viabilidad y aceptación de los datos generados en la red se registró datos adicionales, corroborando que la red este prediciendo de la mejor forma ingresando 15 datos de entrada, pero sin darle a conocer las salidas para que nos arroje resultados cercanos a los reales de DWSIM una vez que ya ha sido entrenada. La comparación de los datos entre DWSIM y la red neuronal junto con su respectivo porcentaje de error se presentan en la Tabla 12-4:

**Tabla 13-4:** Comparación de los resultados del proceso de isomerización de n-butano a isobutano.

DWSIM				RNA				Error de predicción			
D [lb-mol/h]	X_iC4	R [lb-mol/h]	X_iC5	D [lb-mol/h]	X_iC4	R [lb-mol/h]	X_iC5	D [lb-mol/h]	X_iC4	R [lb-mol/h]	X_iC5
91,9328	0,9411	7,8288	0,9996	91,6306	0,9431	8,0826	0,9993	0,329	0,209	3,241	0,029
89,3184	0,9342	9,9697	0,9983	89,3505	0,9348	9,9132	0,9984	0,036	0,066	0,567	0,017
91,5866	0,9543	7,9378	0,9996	91,5253	0,9539	7,9128	0,9996	0,067	0,042	0,314	0,004
96,9858	0,8806	4,9638	0,9998	96,9963	0,8798	4,9979	0,9998	0,011	0,086	0,686	0,002
98,2126	0,9099	3,7370	0,9999	98,1843	0,9096	3,7526	0,9999	0,029	0,027	0,417	0,004
93,9703	0,9306	6,7520	0,9998	93,9713	0,9312	6,7313	0,9995	0,001	0,058	0,306	0,028
99,5962	0,8420	3,1041	0,9995	99,5846	0,8422	3,0725	0,9995	0,012	0,025	1,018	0,006
100,1420	0,8180	2,0568	0,9980	100,4732	0,8151	1,6789	0,9994	0,331	0,362	18,370	0,139
100,4410	0,9189	0,7688	0,9997	100,4833	0,9192	0,7629	0,9997	0,042	0,034	0,768	0,001
89,3888	0,9513	9,8993	0,9998	89,4062	0,9510	9,9039	0,9998	0,020	0,033	0,047	0,003
94,1744	0,9030	6,0653	0,9935	94,1578	0,9037	6,0719	0,9937	0,018	0,083	0,109	0,023
100,1500	0,8650	2,0484	0,9995	100,1767	0,8647	2,0165	0,9994	0,027	0,039	1,560	0,013
95,9061	0,8685	6,0434	0,9998	95,9187	0,8693	6,0358	0,9999	0,013	0,088	0,125	0,007
93,4132	0,8996	7,0673	0,9980	93,3803	0,8996	7,0900	0,9980	0,035	0,001	0,322	0,001
92,9648	0,9480	7,0353	0,9998	92,9542	0,9480	6,9865	0,9998	0,011	0,005	0,694	0,000

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

## CONCLUSIONES

- La red neuronal artificial diseñada mediante el algoritmo de Bayesian Regularization y 20 neuronas ocultas predice los valores establecidos en las 4 salidas del proceso de isomerización: flujo molar de destilado, fracción molar de isobutano en el destilado, flujo molar de residuo y fracción molar del isopentano en el residuo.
- En el software DWSIM se generó por simulación una base de datos de 100 pares para entrenamiento y 15 pares de datos para validación del proceso de isomerización empleando el paquete termodinámico Chao Seader, el algoritmo termodinámico Nested Loops, manteniendo constante el flujo de alimentación, la temperatura y presión, dándonos un promedio de error porcentual de 0,311%
- Se desarrolló una red neuronal la cual fue entrenada mediante el algoritmo Bayesian Regularization operando con 20 neuronas ocultas, teniendo como variables de entrada: fracción molar de propano, fracción molar de isobutano, fracción molar de n-butano, fracción molar de isopentano, relación de reflujo e la columna y porcentaje de conversión de la reacción de isomerización, dándonos un coeficiente de correlación total de 0,99901 y error cuadrático de  $1,73 \cdot 10^{-4}$ .
- Para evaluar los resultados obtenidos por la red neuronal se creó una base de datos confiable, la cual se usó para validar los valores obtenidos de la red neuronal y haciendo uso de un análisis estadístico ANOVA se obtuvo un valor-P mayor a 0,05 en todas las variables comparadas lo que nos indica que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre los datos reales y los datos predichos por la red neuronal.



## RECOMENDACIONES

- En la simulación del proceso de isomerización se emplearon datos de un estudio de investigación realizado en el software de simulación Aspen Plus por lo que resultaría conveniente comparar los resultados arrojados en DWSIM con otros trabajos en Aspen u otros programas.
- Emplear diferentes métodos y algoritmos termodinámicos como UNIQUAC, WILSON empleando diferentes datos de entrada y comprobar sus grados de confiabilidad.
- La red neuronal fue diseñada con parámetros exclusivos establecidos en el trabajo de estudio, pero se puede reestructurar la red y ver otras variables que no fueron tomadas en cuenta en esta investigación como número de iteraciones, tasa de aprendizaje y función de activación.

## GLOSARIO

**Algoritmo de retropropagación:** propaga el error de la capa de salida a la capa de entrada y mejora la precisión al cambiar los pesos y los sesgos. Los pesos generalmente se ajustan después de cada época de entrenamiento para minimizar el error entre el objetivo y el resultado previsto (Hernández y Rodríguez, 2018).

**Alquilación:** es un proceso de refinación de petróleo que permite obtener una mezcla de isómeros del iso octano, conocida como alquilato, un aditivo de la gasolina comercial que permite mejorar el índice de octano (Vallejo, 2018).

**Coefficiente de correlación:** El coeficiente de correlación es la medida específica que cuantifica la intensidad de la relación lineal entre dos variables en un análisis de correlación (Lalinde, 2018).

**Destilación:** proceso de separación de una mezcla líquida por evaporación y condensación sucesivas (García, 2020).

**Error cuadrático medio:** El coeficiente de correlación es la medida específica que cuantifica la intensidad de la relación lineal entre dos variables en un análisis de correlación. En los informes de correlación, este coeficiente se simboliza con la R (García, 2020).

**Isomerado:** Producto obtenido de una reacción de isomerización (Hernández y Rodríguez, 2018).

**Isomerización:** Transformación de una molécula en su o sus respectivos isómeros sin modificar su composición molecular (Hernández y Rodríguez, 2018).

**Normalización estadística:** es la transformación de escala de la distribución de una variable con el objetivo de poder hacer comparaciones respecto a conjuntos de elementos y a la media mediante la eliminando los efectos de influencias (Benavides, 2020).

**Perceptrón:** es una red neuronal artificial simple, que puede estar compuesta por una sola neurona o varias neuronas dispuestas en una sola capa (Ruelas, 2020).

**Perceptrón multicapa:** en una red neuronal artificial que incluye en su arquitectura una o varias capas intermedias, llamadas capas ocultas. Esta arquitectura suele entrenarse mediante el algoritmo de retropropagación de errores o BackPropagation (Ruelas, 2020).

**Porcentaje de conversión:** es la proporción de cualquiera de los reactivos que se transforma en productos (Rojas, 2021).

**Presión de vapor:** es la presión a la que un líquido y su vapor están en equilibrio de fase, a una temperatura dada (Ladino, 2022).

**Red neuronal artificial:** Las redes neuronales artificiales son técnicas computacionales que pertenecen al campo del aprendizaje automático. Las RNA utilizan un gran conjunto de unidades computacionales elementales, llamadas neuronas (artificiales) para aprender tareas y resolver problemas de tal manera que imitan el comportamiento del cerebro humano (Jaime, 2019).

**Regularización:** es un proceso importante para reducir los problemas de sobreajuste y, por lo tanto, lograr un sistema de red neuronal artificial eficiente (Reyes, Godoy y Realpe, 2019).

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

**Relación de reflujo:** se puede considerar como un proceso donde se llevan a cabo una serie de vaporizaciones instantáneas, de modo que los productos líquidos y gaseosos de cada etapa de equilibrio se desplacen en contracorriente. El líquido de una etapa se mueve hacia el fondo de la columna, y el vapor hacia la parte superior de ella (Reyes, Godoy y Realpe, 2019).

**Software de código abierto:** Se entiende al software en cuya licencia el titular garantiza al usuario el acceso al código fuente y lo faculta a usar dicho software con cualquier propósito (Reyes, Godoy y Realpe, 2019).

## **BIBLIOGRAFÍA**

**AHMED, A.M., JARULLAH, A.T., ABED, F.M. y MUJTABA, I.M.** "Modelización de un reactor de isomerización de nafta industrial y desarrollo y evaluación de un nuevo proceso de isomerización". Investigación y diseño de ingeniería química [en línea], 2018, vol. 137, pp. 1-49. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.06.033. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.06.033>.

**ANDERSON, D. y MCNEIL, G.** "Tecnología de redes neuronales artificiales para espectrometría y dosimetría de neutrones". Dosimetría de protección radiológica, 2007, S.I.

**BASHEER, I.A. y HAJMEER, M.** "Redes neuronales artificiales: fundamentos, informática, diseño y aplicación". Revista de métodos microbiológicos, 2000, vol. 43, no. 1, pp. 3-31. ISSN 01677012. DOI 10.1016/S0167-7012(00)00201-3.

**BENAVIDES C.** Normalización, integración de sistemas de gestión, principios cooperativos y sostenibilidad de las empresas turísticas, 2020.

**BUITRAGO, J., AMAYA, D. y RAMOS, O.** "Modelo y simulación de un reactor de isomerización de pentano para corriente de nafta en refinación de petróleo". Ciencias de la Ingeniería Contemporánea, 2017, vol. 10, no. 26, pp. 1255-1267. DOI 10.12988/ces.2017.710136.

**CAO, P., ZHENG, L., SUN, W. y ZHAO, L.** "Modelado multiescala de alquilación de isobutano con olefinas C4 mixtas utilizando ácido sulfúrico como catalizador". Investigación en Química Industrial y de Ingeniería, 2019, vol. 58, no. 16, pp. 6340-6349. ISSN 15205045. DOI 10.1021/acs.iecr.9b00874.

**DALLA, B.** Alquilación de isobutano con olefinas: estudio de catalizadores sólidos ácidos. 2001, S.I.: Universidad Nacional del Litoral.

**GARCÍA, B.** "Análisis y modelación estadística del proceso de añejamiento de ron en una ronera cubana". Iteckne, 2020, vol. 17, no 2, p. 91-97.

**HECHAVARRÍA, RODNEY; LÓPEZ, G.** "Proposición mediante simulación, de mejoras de diseño y funcionamiento para una torre de refinamiento de crudo". [en línea], 2013, S.I.: Universidad de Costa Rica. Disponible en:

<http://repositorio.sibdi.ucr.ac.cr:8080/jspui/bitstream/123456789/7477/1/42891.pdf>.

**HERNÁNDEZ, J., RODRÍGUEZ, J.** "Algoritmos de Retro propagación con restricciones para la estimación de parámetros de curvas de titulación". *Ciencia e Ingeniería*, 2018, vol. 39, no 1, p. 13-26.

**JAIME, F.** "Relación del reflujo gastroesofágico y manifestaciones respiratorias, desde el punto de vista de la gastroenterología pediátrica". *Neumología Pediátrica*, 2019, vol. 14, no 3, p. 126-130.

**KURNIAWAN, T., MURAZA, O., BAKARE, I.A., SANHOOB, M.A. y AL-AMER, A.M.** "Isomerización de n-butano sobre catalizadores rentables de mordenita fabricados mediante recristalización de zeolitas naturales". *Investigación en Química Industrial y de Ingeniería*, 2018, vol. 57, no. 6, pp. 1894-1902. ISSN 15205045. DOI 10.1021/acs.iecr.7b04040.

**LADINO, E.** "Estimación de fugas en tuberías a presión para sistemas de agua potable mediante redes neuronales artificiales y Epanet". *Revista Científica*, 2022, vol. 43, no 1, p. 2-19.

**LALINDE, J.** "Sobre el uso adecuado del coeficiente de correlación de Pearson: definición, propiedades y suposiciones". *Archivos venezolanos de Farmacología y Terapéutica*, 2018, vol. 37, no 5, p. 587-595.

**LUYBEN, W.L.** "Control de un proceso de columna / reactor de isomerización". *Investigación en química industrial y de ingeniería [en línea]*, 2011, vol. 50, no. 6, pp. 3382-3389. ISSN 08885885. DOI 10.1021/ie101724k. Disponible en: [https://www.researchgate.net/publication/231376598\\_Control\\_of\\_an\\_Isomerization\\_ColumnReactor\\_Process](https://www.researchgate.net/publication/231376598_Control_of_an_Isomerization_ColumnReactor_Process).

**MEDEIROS, D.** "Simulador de procesos químicos". [en línea], 2021. [Consulta: 13 junio 2021]. Disponible en: <https://dwsim.inforside.com.br/new/>.

**MEHLIG, B.** "Aprendizaje automático con redes neuronales". [en línea], 2021, S.l.: Universidad ofGothenburg. Disponible en: <http://arxiv.org/abs/1901.05639>.

**NEAMAT, S. y HASSAN, M.** "Una revisión sobre el uso de modelos ANOVA y RSM en el reemplazo del polvo de vidrio de los ingredientes del concreto". *Revista de tendencias de ciencia y tecnología aplicadas*, 2021, vol. 2, no. 02, pp. 72-77. DOI 10.38094/jastt202103.

**OVIEDO, A.** "Perspectivas para la producción de alquilato". Ingeniería e Investigación, 2011, vol. 0, no. 39, pp. 48-54. ISSN 0120-5609.

**ÖZKUL, F.B. y KAYABASI, E.** "Una descripción general de las columnas de destilación y los circuitos de columna". Conferencia: XIV Simposio Internacional de Combustión, no. April, 2018. pp. 109-180.

**PARRA, F.** Modelo de predicción de la concentración de Cloroformo durante el proceso de destilación De una mezcla metanol-cloroformo (Trabajo de titulación) (Tercer nivel). Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Riobamba-Ecuador. 2020. pp. 20-46.

**PATIL, K., CHOUDHARY, P. y BHATIA, T.** "Operaciones de destilación: métodos, aspectos operativos y de diseño2. Conferencia Nacional sobre Avances en Transferencia de Calor y Masa, FAMT, no. Junio 2014, pp. 1-9.

**RAMÍREZ, J.A., HENRY, SARMIENTO, O. y LÓPEZ-LEZAMA, J.M.** "Diagnóstico de fallas en procesos industriales mediante inteligencia artificial. Espacios". [en línea], 2018, vol. 39, no. 24, pp. 7. Disponible en: <https://www.revistaespacios.com/a18v39n24/a18v39n24p12.pdf>.

**REYES, J., GODOY, A., REALPE, M.** "Uso de software de código abierto para fusión de imágenes agrícolas multiespectrales adquiridas con drones". El 17 LACCEI Conferencia Nacional para la Ingeniería Educación, y tecnología: Industria, Innovación, e Infraestructura para la ciudad y comunidad sostenible. 2019, p. 24-26.

**ROJAS, R.** Desarrollo de un controlador DMC para el control de la presión del vapor de una caldera pirotubular de una planta de fosfato bicálcico. 2021.

**ROSARIO, B.** Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo (Trabajo de titulación) (Tercer nivel). Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Riobamba-Ecuador. 2020. pp. 38-72.

**RUCK, G., SEDANO, D. y TOLENTINO, S.** "Columnas de destilación" [en línea], 2007, S.l.: Universidad Nacional de Callao. Disponible en: [https://nanopdf.com/download/columnas-de-destilacion\\_pdf](https://nanopdf.com/download/columnas-de-destilacion_pdf).

**RUELAS, E.** "Control estadístico de procesos multivariantes a través de la red neuronal artificial perceptron multicapa y el análisis del gráfico mewma". IEEE Transacción de América Latina, 2020, vol. 18, no 6, p. 1041-1048.

**VALLEJOS, M.** Producción de cumeno mediante la alquilación de benceno por propileno. Tesis Doctoral. 2018.

**SHARIKOV, Y. V., SNEGIREV, N. V. y TKACHEV, I. V.** "Desarrollo de un sistema de control basado en el modelo matemático predictivo del proceso de isomerización C5-C6". Revista de tecnología química y metalurgia, 2020, vol. 55, no. 2, pp. 335-344. ISSN 13147978.

**TANGSRIWONG, K., LAPCHIT, P., KITTIJUNJIT, T., KLAMRASSAMEE, T., SUKJAI, Y. y LAOONUAL, Y.** "Modelado de procesos químicos utilizando software comercial y de código abierto: una comparación entre Aspen plus y DWSIM". Serie de conferencias IOP: Ciencias de la tierra y el medio ambiente, 2020, vol. 463, no. 1. ISSN 17551315. DOI 10.1088/1755-1315/463/1/012057.

**UJILE, A. y AMAGBO, L.** "Determinación de la eficiencia de la placa de la columna de rectificación en operaciones de refinería". Revista Internacional de Ingeniería y Tecnología, 2013, vol. 3, no. 8, pp. 787-793.

**VÁZQUEZ, E.B., DE LA PAZ ZAVALA, C., RODRÍGUEZ, E.R., BARRÓN, I.N. y MONTOR, L.C.** "Conversión de una unidad reformadora de nafta en isomerización de butano". Ciencia y Tecnología del Petróleo, 2005, vol. 23, no. 5-6, pp. 641-648. ISSN 10916466. DOI 10.1081/LFT-200032988.

**VILLANUEVA PERALES, Á.L.** "Métodos Termodinámicos En Simuladores De Procesos". Simulación y Optimización de procesos químicos [en línea], 2010, pp. 1-49. Disponible en: [https://www.cartagena99.com/recursos/fisica/apuntes/Metodos termodinamicos en simuladores de proceso 23Feb .pdf](https://www.cartagena99.com/recursos/fisica/apuntes/Metodos%20termodinamicos%20en%20simuladores%20de%20proceso%2023Feb.pdf).

**VILLEGAS, J.I., KUMAR, N., HEIKKILÄ, T., LEHTO, V.P., SALMI, T. y MURZIN, D.Y.** "Isomerización de n-butano a isobutano sobre catalizadores de zeolita Beta y ZSM-5 modificados con Pt: Desactivación y regeneración del catalizador". Revista de ingeniería química, 2006, vol. 120, no. 1-2, pp. 83-89. ISSN 13858947. DOI 10.1016/j.cej.2006.03.011.

**WANG, D., ZHANG, T., YANG, Y. y TANG, S.** "Microreactor de simulación y diseño

configurado con micromezcladores para intensificar el proceso de alquilación de isobutano / 1-buteno". Revista del Instituto de Ingenieros Químicos de Taiwán [en línea], 2019, vol. 98, pp. 53-62. ISSN 18761070. DOI 10.1016/j.jtice.2018.05.010.

**YANG, K., LI, H., ZHAO, S., LAI, S., LAI, W., LIAN, Y. y FANG, W.** "Mejora de la actividad y estabilidad del catalizador de zirconio sulfatado promovido por CuGa para la isomerización de n-butano". Investigación en Química Industrial y de Ingeniería, 2018, vol. 57, no. 11, pp. 3855-3865. ISSN 15205045. DOI 10.1021/acs.iecr.7b04590.



## ANEXOS

### ANEXO A: BASE DE DATOS DE ENTRENAMIENTO GENERADA EN DWSIM PARA PROCESO DE ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO A ISOBUTANO

N°-	Entradas						Salidas			
	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4
	Fracción de propano (X_C3)	Fracción de isobutano (X_iC4)	Fracción de n-butano (X_nC4)	Fracción de isopentano (X_iC5)	Relación de reflujo (RR)	Porcentaje de conversión (%C)	Flujo de destilado (D) [lb-mol/h]	Fracción de isobutano (X_iC4)	Flujo de residuo (R) [lb-mol/h]	Fracción de isopentano (X_iC5)
1	0,01	0,20	0,74	0,05	10,96	33,00	94,7279	0,9088	5,2722	0,9487
2	0,05	0,44	0,48	0,03	6,92	33,47	98,1177	0,9293	3,3374	0,9999
3	0,06	0,27	0,65	0,02	14,49	31,70	99,8854	0,8640	2,0641	0,9993
4	0,05	0,35	0,51	0,09	10,73	32,51	91,0510	0,9260	8,9491	0,9998
5	0,10	0,17	0,64	0,09	5,70	34,23	92,0303	0,8642	9,1794	1,0000
6	0,02	0,42	0,55	0,01	5,66	33,60	100,0040	0,9408	1,2055	0,9997
7	0,05	0,30	0,56	0,09	10,00	32,08	90,9458	0,9198	9,0540	0,9996
8	0,01	0,30	0,60	0,09	10,85	33,89	90,1260	0,9572	8,9270	0,9973
9	0,05	0,38	0,50	0,07	14,18	31,11	93,4151	0,9243	7,0653	1,0000
10	0,04	0,12	0,76	0,08	13,61	36,25	91,9474	0,9110	8,0527	0,9960
11	0,07	0,35	0,52	0,06	14,95	32,77	95,1675	0,9043	6,0421	0,9998
12	0,08	0,15	0,70	0,07	13,92	39,64	94,1589	0,8924	7,0508	0,9998
13	0,02	0,42	0,51	0,05	6,79	37,34	94,9958	0,9628	5,2439	0,9998
14	0,09	0,13	0,74	0,04	8,40	39,41	98,1342	0,8743	4,0644	0,9997

15	0,04	0,24	0,62	0,10	8,96	30,24	89,5115	0,9127	10,0129	0,9958
16	0,03	0,24	0,69	0,04	11,51	35,32	96,7030	0,9120	4,0194	0,9988
17	0,01	0,43	0,52	0,04	6,12	39,81	96,5724	0,9719	3,6673	0,9999
18	0,10	0,25	0,64	0,01	5,70	33,45	102,1420	0,8448	1,0650	0,9997
19	0,04	0,16	0,78	0,02	13,98	38,45	99,4515	0,8899	2,0036	0,9993
20	0,08	0,39	0,52	0,01	12,03	30,40	101,8950	0,8812	0,8053	0,9998
21	0,03	0,18	0,74	0,05	11,12	32,76	95,3705	0,8872	5,1100	0,9852
22	0,02	0,20	0,74	0,04	11,25	34,85	96,4435	0,9032	4,0369	0,9935
23	0,06	0,42	0,51	0,01	8,88	34,51	101,1420	0,9140	1,0564	0,9999
24	0,09	0,22	0,66	0,03	11,47	38,90	99,1304	0,8845	3,3118	0,9998
25	0,05	0,33	0,55	0,07	6,96	32,41	93,3644	0,9209	7,1160	0,9997
26	0,08	0,06	0,79	0,07	13,34	38,88	94,0940	0,8759	7,1156	0,9991
27	0,05	0,28	0,63	0,04	5,92	30,41	97,1357	0,8793	4,0739	0,9984
28	0,04	0,18	0,76	0,02	13,55	35,37	99,4394	0,8652	2,0157	0,9986
29	0,09	0,20	0,66	0,05	5,40	32,18	96,8112	0,8506	5,1384	0,9991
30	0,03	0,11	0,76	0,10	10,91	31,64	89,3130	0,9332	9,9757	0,9971
31	0,08	0,28	0,59	0,05	5,19	39,43	95,8844	0,9023	5,8173	0,9999
32	0,02	0,28	0,69	0,01	6,82	32,68	100,1660	0,8763	1,0436	0,9988
33	0,09	0,09	0,74	0,08	13,49	39,28	93,1607	0,8760	8,0490	0,9996
34	0,01	0,14	0,75	0,10	9,34	36,34	88,7306	0,9508	10,0885	0,9810
35	0,03	0,14	0,79	0,04	14,36	35,55	96,6542	0,8872	4,0682	0,9924
36	0,04	0,16	0,77	0,03	6,41	38,07	98,1909	0,8954	3,0187	0,9990
37	0,04	0,25	0,62	0,09	6,59	31,08	90,7764	0,9110	8,9852	0,9967
38	0,01	0,25	0,65	0,09	14,36	30,19	89,6905	0,9359	9,3625	0,9534

39	0,09	0,16	0,67	0,08	12,70	37,13	93,1461	0,8783	8,0636	0,9997
40	0,04	0,22	0,71	0,03	5,50	32,59	98,1494	0,8720	3,0603	0,9974
41	0,08	0,25	0,60	0,07	13,05	39,35	94,2273	0,9009	6,9824	0,9999
42	0,02	0,19	0,75	0,04	13,91	31,73	96,3005	0,8756	4,1799	0,9636
43	0,06	0,35	0,55	0,04	5,68	32,36	97,4291	0,9070	4,0260	0,9998
44	0,09	0,34	0,54	0,03	12,74	33,52	99,4529	0,8849	2,9959	0,9999
45	0,10	0,27	0,60	0,03	6,41	38,37	99,3264	0,8802	3,3739	0,9999
46	0,07	0,08	0,75	0,10	14,60	36,66	90,1692	0,8970	10,0705	0,9994
47	0,01	0,42	0,53	0,04	11,26	36,22	96,2617	0,9633	3,9780	0,9997
48	0,04	0,20	0,66	0,10	9,77	37,67	89,5313	0,9345	9,9930	0,9996
49	0,10	0,21	0,66	0,03	12,23	39,11	99,9208	0,8756	2,7795	0,9999
50	0,05	0,28	0,61	0,06	12,29	39,11	94,4703	0,9297	6,2521	0,9998
51	0,09	0,06	0,78	0,07	11,30	37,77	94,3142	0,8620	7,1409	0,9990
52	0,04	0,14	0,77	0,05	9,50	35,43	95,6491	0,8897	5,0732	0,9950
53	0,04	0,23	0,67	0,06	8,69	37,34	94,3913	0,9279	6,0891	0,9996
54	0,09	0,26	0,56	0,09	14,81	36,65	92,2244	0,8884	8,7410	0,9999
55	0,09	0,24	0,64	0,03	8,71	37,64	99,9842	0,8806	2,4647	0,9999
56	0,06	0,08	0,77	0,09	13,76	36,66	90,7485	0,8962	9,4069	0,9962
57	0,06	0,14	0,75	0,05	10,00	37,50	96,1735	0,8877	5,0372	0,9991
58	0,05	0,38	0,52	0,05	8,73	30,13	95,8090	0,9147	5,1564	0,9997
59	0,03	0,39	0,53	0,05	5,61	31,82	95,4940	0,9335	4,9864	0,9996
60	0,06	0,26	0,65	0,03	10,01	35,70	98,6716	0,8990	3,0301	0,9997
61	0,05	0,36	0,57	0,02	13,66	39,32	98,6161	0,9336	3,0856	0,9999
62	0,09	0,13	0,71	0,07	8,52	34,56	94,3054	0,8588	7,1497	0,9989

63	0,06	0,28	0,61	0,05	8,91	39,93	95,9655	0,9212	5,2442	0,9999
64	0,09	0,14	0,67	0,10	13,24	35,55	90,7106	0,8730	10,0118	0,9995
65	0,07	0,14	0,69	0,10	7,76	35,32	90,1697	0,8920	10,0700	0,9992
66	0,03	0,25	0,62	0,10	8,75	38,83	89,3866	0,9497	9,9015	0,9997
67	0,08	0,16	0,74	0,02	7,88	30,38	100,3620	0,7861	2,0871	0,9966
68	0,02	0,25	0,69	0,04	7,32	37,47	96,4807	0,9328	3,9997	0,9991
69	0,07	0,26	0,59	0,08	6,53	32,49	91,4552	0,8992	9,2671	0,9992
70	0,04	0,28	0,66	0,02	5,87	31,96	99,4023	0,8793	2,0528	0,9990
71	0,02	0,44	0,52	0,02	9,30	32,92	98,9854	0,9420	1,9800	0,9997
72	0,10	0,24	0,59	0,07	14,50	33,32	93,9425	0,8683	7,7592	0,9997
73	0,06	0,34	0,55	0,05	11,33	30,50	96,1164	0,8992	5,0933	0,9996
74	0,09	0,03	0,79	0,09	6,61	39,99	91,8273	0,8742	9,1381	0,9995
75	0,01	0,40	0,55	0,04	12,02	32,02	96,2418	0,9419	3,9979	0,9989
76	0,10	0,14	0,68	0,08	6,15	37,75	93,2896	0,8704	8,1665	0,9998
77	0,08	0,15	0,70	0,07	14,61	35,68	94,1265	0,8769	7,0831	0,9994
78	0,04	0,32	0,56	0,08	6,79	33,05	92,0099	0,9296	7,9902	0,9996
79	0,02	0,24	0,68	0,06	12,84	35,73	93,9797	0,9361	6,0204	0,9983
80	0,01	0,19	0,77	0,03	7,69	38,13	97,4663	0,9188	3,0142	0,9963
81	0,02	0,20	0,71	0,07	10,72	34,22	92,7108	0,9272	7,0509	0,9923
82	0,01	0,28	0,70	0,01	10,50	36,32	99,8671	0,9147	1,0983	0,9990
83	0,01	0,11	0,78	0,10	5,73	38,88	88,8247	0,9562	9,9944	0,9903
84	0,04	0,37	0,52	0,07	12,76	34,00	93,2899	0,9368	6,9498	0,9998
85	0,03	0,13	0,75	0,09	11,32	38,12	90,5261	0,9341	8,9982	0,9981
86	0,02	0,38	0,53	0,07	10,51	38,59	92,6809	0,9642	7,0808	0,9998

87	0,03	0,35	0,61	0,01	9,57	32,22	100,5580	0,9005	0,8974	0,9996
88	0,07	0,18	0,73	0,02	14,92	39,15	100,0880	0,8879	2,1107	0,9997
89	0,02	0,24	0,64	0,10	9,42	31,84	89,0652	0,9381	9,9879	0,9932
90	0,02	0,30	0,61	0,07	14,98	34,49	92,7968	0,9434	6,6948	0,9990
91	0,06	0,10	0,77	0,07	13,57	38,88	93,6906	0,8976	7,0318	0,9991
92	0,04	0,22	0,66	0,08	7,49	32,46	91,9614	0,9106	8,0387	0,9970
93	0,10	0,06	0,76	0,08	8,39	39,35	93,2073	0,8655	8,2478	0,9996
94	0,08	0,18	0,71	0,03	6,24	38,43	99,2920	0,8825	2,9066	0,9998
95	0,03	0,26	0,67	0,04	9,84	39,95	96,6043	0,9415	4,1180	0,9997
96	0,08	0,32	0,56	0,04	11,74	34,18	97,8504	0,8921	4,0992	0,9998
97	0,04	0,14	0,74	0,08	10,29	37,62	91,9610	0,9214	8,0391	0,9987
98	0,03	0,36	0,55	0,06	10,06	33,28	94,2817	0,9379	5,9580	0,9996
99	0,05	0,36	0,51	0,08	9,35	30,86	92,2780	0,9196	7,9617	0,9997
100	0,02	0,33	0,55	0,10	10,12	30,58	89,1193	0,9468	9,9338	0,9984

**Realizado por:** Jaya, Jefferson, 2021.

**ANEXO B: BASE DE DATOS DE VALIDACIÓN PROCESADA EN DWSIM PARA EL PROCESO DE ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO A ISOBUTANO**

N°-	Entradas						Salidas			
	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4
	Fraccion de propano (X_C3)	Fraccion de isobutano (X_iC4)	Fraccion de n-butano (X_nC4)	Fraccion de isopentano (X_iC5)	Relacion de reflujo (RR)	Porcentaje de conversion (%C)	Flujo de destilado (D) [lb-mol/h]	Concentracion de isobutano (X_iC4)	Flujo de residuo (R [lb-mol/h])	Fraccion de isopentano (X_iC5)
1	0,03	0,29	0,60	0,08	10,51	35,24	91,9328	0,9411	7,8288	0,9996
2	0,03	0,24	0,63	0,10	6,66	33,07	89,3184	0,9342	9,9697	0,9983
3	0,02	0,39	0,51	0,08	6,58	32,64	91,5866	0,9543	7,9378	0,9996
4	0,09	0,27	0,59	0,05	7,80	34,39	96,9858	0,8806	4,9638	0,9998
5	0,07	0,32	0,58	0,03	9,58	37,68	98,2126	0,9099	3,7370	0,9999
6	0,05	0,35	0,54	0,06	12,34	35,77	93,9703	0,9306	6,7520	0,9998
7	0,10	0,12	0,75	0,03	10,82	36,66	99,5962	0,8420	3,1041	0,9995
8	0,07	0,11	0,80	0,02	12,39	34,71	100,1420	0,8180	2,0568	0,9980
9	0,02	0,43	0,54	0,01	14,14	31,11	100,4410	0,9189	0,7688	0,9997
10	0,03	0,31	0,56	0,10	8,59	37,11	89,3888	0,9513	9,8993	0,9998
11	0,03	0,14	0,77	0,06	13,59	35,99	94,1744	0,9030	6,0653	0,9935
12	0,07	0,28	0,63	0,02	11,85	31,78	100,1500	0,8650	2,0484	0,9995
13	0,10	0,27	0,57	0,06	11,56	33,34	95,9061	0,8685	6,0434	0,9998
14	0,05	0,16	0,72	0,07	8,43	35,13	93,4132	0,8996	7,0673	0,9980
15	0,03	0,37	0,53	0,07	9,69	35,05	92,9648	0,9480	7,0353	0,9998

Realizado por: Jaya, Jefferson, 2021.

## ANEXO C: NORMALIZACIÓN DE LOS DATOS DE ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL

```
% Leer datos de simulación
Extraer=readtable('Datos_simulacion.xlsx','Sheet','Datos Entrenamiento');
Datos = table2array(Extraer);

% Normalizar datos
% Variables de entrada
entrada=Datos(1:6,:);

% Fracción molar de propano
XC3_max=max(entrada(1,:));
XC3_min=min(entrada(1,:));
XC3_N=[(entrada(1,1:end)-XC3_min)/(XC3_max-XC3_min)];

% Fracción molar de isobutano
XiC4_max=max(entrada(2,:));
XiC4_min=min(entrada(2,:));
XiC4_N =[(entrada(2,1:end)-XiC4_min)/(XiC4_max-XiC4_min)];

% Fracción molar de butano
XnC4_max=max(entrada(3,:));
XnC4_min=min(entrada(3,:));
XnC4_N =[(entrada(3,1:end)-XnC4_min)/(XnC4_max-XnC4_min)];

% Fracción molar de isopentano
XiC5_max=max(entrada(4,:));
XiC5_min=min(entrada(4,:));
XiC5_N =[(entrada(4,1:end)-XiC5_min)/(XiC5_max-XiC5_min)];

% Relación de reflujo en la columna de destilación
RR_max=max(entrada(5,:));
RR_min=min(entrada(5,:));
RR_N =[(entrada(5,1:end)-RR_min)/(RR_max-RR_min)];

% Conversión en el reactor
Crx_max=max(entrada(6,:));
Crx_min=min(entrada(6,:));
Crx_N =[(entrada(6,1:end)-Crx_min)/(Crx_max-Crx_min)];

% Entradas normalizadas
Entradas_norm =[XC3_N;XiC4_N;XnC4_N;XiC5_N;RR_N;Crx_N];

% Variables de salida
salidas=Datos(7:10,:);

% Flujo molar del destilado
D_max=max(salidas(1,:));
D_min=min(salidas(1,:));
D_N=[(salidas(1,1:end)-D_min)/(D_max-D_min)];

% Fracción molar de isobutano en destilado
DXiC4_max=max(salidas(2,:));
DXiC4_min=min(salidas(2,:));
DXiC4_N=[(salidas(2,1:end)-DXiC4_min)/(DXiC4_max-DXiC4_min)];

% Flujo molar del residuo
```

```
R_max=max(salidas(3,:));
R_min=min(salidas(3,:));
R_N=[(salidas(3,1:end)-R_min)/(R_max-R_min)];

%Fracción molar de isopentano en destilado
RXiC5_max=max(salidas(4,:));
RXiC5_min=min(salidas(4,:));
RXiC5_N=[(salidas(4,1:end)-RXiC5_min)/(RXiC5_max-RXiC5_min)];

%salidas normalizadas
Salidas_norm =[D_N;DXiC4_N;R_N;RXiC5_N];
```



## ANEXO D: CÓDIGO DE LA RED NEURONAL

```
% _____ Desarrollar la red neuronal artificial _____
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 16-feb-2021 12:41:30
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% Entradas_norm - input data.
% Salidas_norm - target data.

x = Entradas_norm;
t = Salidas_norm;

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 20;
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)
```

## ANEXO E: CÓDIGO DE LOS RESULTADOS PREDICHOS EN LA RED NEURONAL

% \_\_\_\_\_ Resultados predichos por la red neuronal artificial \_\_\_\_\_

```
Datos_P = net(Entradas_norm(1:end,:))
```

%Flujo molar del destilado

```
D_P = Datos_P(1,:).*(D_max-D_min)+D_min';
```

%Fracción molar de isobutano en destilado

```
DXiC4_P = Datos_P(2,:).*(DXiC4_max-DXiC4_min)+DXiC4_min';
```

%Flujo molar del residuo

```
R_P = Datos_P(3,:).*(R_max-R_min)+R_min';
```

%Fracción molar de isopentano en destilado

```
RXiC5_P = Datos_P(4,:).*(RXiC5_max-RXiC5_min)+RXiC5_min';
```

%Resultados predichos

```
Resultados_P=[D_P;DXiC4_P;R_P;RXiC5_P];
```

## ANEXO F. Código para las gráficas en la validación de las variables de salida

```
% Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la RNA
```

```
Real= salidas;
```

```
Prediccion= Resultados_P';
```

```
%Flujo molar del destilado
```

```
figure;
```

```
plot(Real(1,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccion(1,:));grid;legend('DWSIM','RNA')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
```

```
ylabel('Flujo molar del destilado(Kmol/h)')
```

```
title('Predicción del Flujo molar en destilado')
```

```
%Fracción molar de isobutano en destilado
```

```
figure;
```

```
plot(Real(2,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccion(2,:));grid;legend('DWSIM','RNA')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
```

```
ylabel('Fracción molar de isobutano en destilado')
```

```
title('Predicción de la fracción molar de isobutano en destilado')
```

```
%Flujo molar del residuo
```

```
figure;
```

```
plot(Real(3,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccion(3,:));grid;legend('DWSIM','RNA')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
```

```
ylabel('Flujo molar del residuo(Kmol/h)')
```

```
title('Predicción del flujo molar en residuo(Kmol/h)')
```

```
%Fracción molar de isopentano en residuo
```

```
figure;
```

```
plot(Real(4,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccion(4,:));grid;legend('DWSIM','RNA')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de entrenamiento')
```

```
ylabel('Fracción molar de isopentano en residuo')
```

```
title('Predicción de la fracción mol
```



**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:** 13 / 01 / 2022

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> <i>Jefferson Wilmer Jaya Silva</i>
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> <i>Ciencias</i>
<b>Carrera:</b> <i>Ingeniería Química</i>
<b>Título a optar:</b> <i>Ingeniero Químico</i>
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> <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: 2022.01.13 15:40:46 -05'00'



**0055-DBRA-UTP-2022**