



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

PREDICCIÓN MEDIANTE RNA DE LA CONCENTRACIÓN DE CO₂
Y H₂S DEL PROCESO DE ENDULZAMIENTO DE GAS NATURAL

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: ESTIVEN RENATO BASTIDAS MORENO

DIRECTOR: Ing. NELSON SANTIAGO CHUQUÍN VASCO, Mgs.

Riobamba – Ecuador

2022

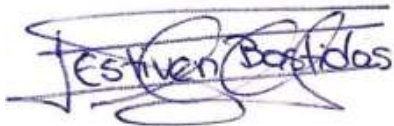
©2022, Estiven Renato Bastidas Moreno

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

Yo, ESTIVEN RENATO BASTIDAS MORENO, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular 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 Integración Curricular. El patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 09 de junio de 2022

A handwritten signature in blue ink that reads "Estiven Bastidas". The signature is stylized with loops and flourishes.

Estiven Renato Bastidas Moreno

0604752899

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Propuesta Tecnológica, **PREDICCIÓN MEDIANTE RNA DE LA CONCENTRACIÓN DE CO₂ Y H₂S DEL PROCESO DE ENDULZAMIENTO DE GAS NATURAL**, realizado por el señor: **ESTIVEN RENATO BASTIDAS MORENO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy, Msc. PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: CARLOS RAMIRO CEPEDA GODOY	2022-06-09
Ing. Nelson Santiago Chuquín Vasco, Mgs. DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 Firmado electrónicamente por: NELSON SANTIAGO CHUQUIN VASCO	2022-06-09
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco, MsC. MIEMBRO DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO	2022-06-09

DEDICATORIA

El presente Trabajo de Integración Curricular va dedicado a mi madre y a mis hermanas; Mónica, Dayana y Ariana; que han sido durante toda la carrera la fuente de apoyo y motivación permanente para mi superación y por quiénes seguiré formándome como profesional y persona cada día más.

Estiven

AGRADECIMIENTO

Gracias a mi madre por su amor invaluable y esfuerzo impresionante por forjarme cada día, ha sido siempre el pilar fundamental de mi vida, quién me ha proporcionado buenos valores y enseñanzas que me han convertido en el hombre que soy ahora y que las seguiré aplicando toda mi vida.

De igual manera, agradezco al Ing. Daniel Chuquín por la confianza y oportunidad para desarrollar el presente Trabajo de Integración Curricular, desde el inicio de la carrera ha sido un excelente docente y amigo que me ha guiado y motivado para superar mis obstáculos.

De manera especial a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo por abrirme sus puertas para mi formación como profesional y por permitirme conocer a mis amigos y docentes que formarán parte de mí a lo largo de mi vida.

Estiven

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xiv
RESUMEN.....	xv
ABSTRACT.....	xvi

CAPÍTULO I

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

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	6
2.1. Estado del Arte.....	6
2.1.1. <i>Gas natural</i>	6
2.1.2. <i>Gases ácidos</i>	6
2.1.2.1. <i>Dióxido de carbono</i>	7
2.1.2.2. <i>Ácido sulfhídrico</i>	7
2.1.2.3. <i>Óxidos de nitrógeno</i>	7
2.1.3. <i>Endulzamiento de gas natural</i>	8
2.1.4. <i>Solución de MDEA</i>	10
2.2. Bases Teóricas.....	10
2.2.1. <i>Proceso de absorción con MDEA</i>	10
2.2.2. <i>Columna de regeneración</i>	11

2.2.3.	<i>DWSIM</i>	11
2.2.4.	<i>MATLAB</i>	12
2.2.5.	<i>NEURAL NETWORK TOOLBOX</i>	12
2.2.6.	<i>Redes neuronales aplicadas al proceso de endulzamiento de gas natural</i>	13
2.3.	Marco Legal	16

CAPÍTULO III

3.	METODOLOGÍA	17
3.1.	Etapas de la metodología	17
3.2.	Identificación de los parámetros de funcionamiento	18
3.2.1.	<i>Generalidades del proceso</i>	19
3.2.2.	<i>Proceso de endulzamiento de gas natural</i>	19
3.2.2.1.	<i>Gas amargo</i>	20
3.2.2.2.	<i>Solución de MDEA pobre a absorbedor</i>	21
3.2.2.3.	<i>Parámetros de funcionamiento de la torre de absorción</i>	21
3.2.2.4.	<i>Parámetros de funcionamiento del intercambiador de calor</i>	22
3.2.2.5.	<i>Parámetros de funcionamiento de la torre de regeneración</i>	22
3.2.2.6.	<i>Parámetros adicionales para la simulación</i>	22
3.3.	Simulación del proceso de endulzamiento de gas natural en DWSIM	23
3.4.	Validación de los resultados de la simulación	33
3.5.	Procesamiento de datos	34
3.6.	Diseño de la RNA	39
3.7.	Entrenamiento de los datos	40
3.8.	Validación de los resultados de la RNA	43
3.9.	Análisis Estadístico	43

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	45
4.1.	Presupuesto	45
4.2.	Requerimientos de tecnología, equipos y maquinaria	45
4.3.	Cronograma	46
4.4.	Discusión y análisis de resultados	47

4.4.1.	<i>Informe de resultados de la simulación en DWSIM</i>	47
4.5.	Validación de los resultados de DWSIM	51
4.6.	Balance de masa del sistema	53
4.6.1.	<i>Balance general de masa para el absorbedor</i>	53
4.6.2.	<i>Balance general de masa para el separador</i>	55
4.6.3.	<i>Balance general de masa del regenerador</i>	57
4.7.	Reporte de resultados de la RNA	59
4.7.1.	<i>Error cuadrático medio (MSE)</i>	59
4.7.2.	<i>Gráficos sobre el comportamiento de la RNA</i>	60
4.7.3.	<i>Código de la RNA</i>	61
4.7.4.	<i>Gráficas de comparación entre las salidas predichas y deseadas</i>	62
4.7.4.1.	<i>Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA</i>	62
4.7.4.2.	<i>Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la RNA</i>	67
4.8.	Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion XVI	69
 CONCLUSIONES		73
RECOMENDACIONES		74
GLOSARIO		
BIBLIOGRAFÍA		
ANEXOS		

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Operaciones y modelos contenidos en DWSIM	11
Tabla 2-3. Condiciones de alimentación para la simulación del proceso.....	19
Tabla 3-3. Composición del gas amargo	20
Tabla 4-3. Condiciones de la amina que ingresa al absorbedor	21
Tabla 5-3. Condiciones operativas de la torre de absorción.....	21
Tabla 6-3. Condiciones operativas del intercambiador de calor pobre/rico	22
Tabla 7-3. Condiciones operativas de la torre de regeneración.....	22
Tabla 8-3. Condiciones operativas adicionales para la simulación.....	22
Tabla 9-3. Parámetros utilizados en la simulación en DWSIM	24
Tabla 10-3. Parámetros de entrada a la RNA	34
Tabla 11-3. Parámetros de salida de la RNA	35
Tabla 12-3. Restricciones para las entradas de la RNA	35
Tabla 13-3. Base de datos obtenidos para la RNA.....	35
Tabla 14-4. Matriz de Presupuesto.....	45
Tabla 15-4. Cronograma del Trabajo de Integración Curricular.....	46
Tabla 16-4. Resultados de la torre de absorción en DWSIM	48
Tabla 17-4. Resultados de la torre de regeneración en DWSIM.....	49
Tabla 18-4. Flujos adicionales de interés del proceso de endulzamiento.....	50
Tabla 19-4. Comparación de las fracciones molares resultantes de DWSIM	52
Tabla 20-4. MSE de cada fase del diseño de la RNA	59
Tabla 21-4. Valores reales vs valores predichos en el absorbedor.....	62
Tabla 22-4. Valores reales vs valores predichos en el absorbedor para la validación de la RNA ...	67
Tabla 23-4. ANOVA.....	70
Tabla 24-4. Medias con intervalos de confianza del 95.0%	70
Tabla 25-4. Prueba de Kruskal-Wallis	71
Tabla 26-4. Resumen estadístico de la fracción molar de CO ₂	71
Tabla 27-4. Resumen estadístico de la fracción molar de H ₂ S.....	72

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Diagrama general de una planta de endulzamiento con aminas	9
Figura 2-2. Neurona biológica y neurona artificial	13
Figura 3-2. Esquema del modelo PCA-RBF-NN.....	14
Figura 4-2. Validación de la RNA de CO ₂ en la amina pobre	14
Figura 5-2. Estructura de un modelo neuro-fuzzy	15
Figura 6-3. Proceso de endulzamiento de gas natural en Aspen HYSYS	19
Figura 7-3. Flowsheet de la simulación de endulzamiento de gas	23
Figura 8-3. Selección de los componentes en DWSIM	25
Figura 9-3. Selección de unidades de medida en DWSIM	25
Figura 10-3. Configuración operativa del absorbedor	26
Figura 11-3. Selección del modelo termodinámico del absorbedor.....	26
Figura 12-3. Especificación de presión del absorbedor	27
Figura 13-3. Opciones numéricas de solución del absorbedor.....	27
Figura 14-3. Especificaciones de la válvula.....	28
Figura 15-3. Especificaciones del separador.....	28
Figura 16-3. Especificaciones del intercambiador pobre / rico.....	29
Figura 17-3. Condiciones generales del regenerador	29
Figura 18-3. Especificación del condensador que posee el regenerador.....	30
Figura 19-3. Especificación del recalentador que posee el regenerador	30
Figura 20-3. Presiones en cada etapa del regenerador	31
Figura 21-3. Estimaciones del regenerador.....	31
Figura 22-3. Especificaciones de la bomba.....	32
Figura 23-3. Especificaciones del enfriador.....	32
Figura 24-3. Tabla maestra de propiedades de DWSIM.....	33
Figura 25-3. Simulación de DWSIM con sus resultados	34
Figura 26-3. Matriz de datos para RNA en Excel.....	40
Figura 27-3. Datos de validación y prueba de la RNA	41
Figura 28-3. Algoritmo de entrenamiento de la RNA.....	41
Figura 29-3. Entrenamiento de la RNA	42
Figura 30-3. Evaluación de la RNA.....	42
Figura 31-4. Simulación completa del proceso de endulzamiento de gas natural en DWSIM.....	47
Figura 32-4. Tablas de resultados en DWSIM.....	48

Figura 33-4. Balance general de masa del absorbedor.....	53
Figura 34-4. Balance general de masa del absorbedor.....	55
Figura 35-4. Balance general de masa del regenerador	57
Figura 36-4. Representación de la RNA en MATLAB.....	59

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de integración curricular.....	17
Gráfico 2-4. Regresión del entrenamiento y prueba de la RNA.....	60
Gráfico 3-4. Rendimiento del entrenamiento de la RNA.....	61
Gráfico 4-4. Fracción molar de CO ₂ real vs CO ₂ predicho en el flujo de gas dulce	66
Gráfico 5-4. Fracción molar de H ₂ S real vs H ₂ S predicho en el flujo de gas dulce	66
Gráfico 6-4. Fracción molar de CO ₂ del gas dulce en la validación de la RNA.....	68
Gráfico 7-4. Fracción molar de H ₂ S del gas dulce en la validación de la RNA	69

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. VARIABLES UTILIZADAS EN EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

ANEXO B. VALIDACIÓN DE LA RNA

ANEXO C. SCRIPT DEL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

ANEXO D. SCRIPT PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

GN	Gas Natural
GEI	Gases de efecto invernadero
RNA	Red Neuronal Artificial
MDEA	Metildietanolamina
MEA	Metiletanolamina
DEA	Dietanolamina
VLE	Equilibrio vapor – líquido
BR	Bayesian Regularization
MSE	Error cuadrático medio
RBF-NN	Red neuronal con función de base radial
ACP	Análisis de componentes principales
ERD	Desviación relativa del error
RMSE	Error cuadrático medio
%AARD	% de la desviación relativa media absoluta
SSE	Suma del error cuadrático
STD	Desviación estándar
R²	Factor de correlación
PSO	Optimización del enjambre de partículas
RNA-MLP	Perceptrón Multicapa
NARX	Autorregresivo no lineal, entrada externa

RESUMEN

El presente Trabajo de Integración Curricular tiene como objetivo predecir mediante RNA las concentraciones de CO₂ y H₂S del proceso de endulzamiento de gas natural, para lo cual se simuló en el software gratuito DWSIM el proceso de endulzamiento, el mismo que nos sirvió para generar la base de datos esencial para el diseño de la red neuronal artificial (RNA) idóneo para la predicción de las fracciones molares de interés del gas natural que ingresa al proceso. Para el desarrollo de la RNA se utilizó la base de datos generada de DWSIM, la misma que está compuesta por 130 datos con tres entradas: temperatura, presión y flujo molar del gas amargo, y sus respectivas salidas: fracción molar del CO₂ y H₂S del flujo de gas dulce que sale por la parte superior de la torre de absorción. La red neuronal artificial se diseñó en MATLAB utilizando 170 neuronas ocultas en su arquitectura y se entrenó con el algoritmo de Bayesian Regularization; donde se obtuvo un error cuadrático medio (MSE) de 1.6317e-05 y un coeficiente de regresión total de 0.99882. La RNA se validó por medio de un análisis estadístico comparativo obteniendo un porcentaje de confianza del 95%. La simulación logró disminuir las concentraciones de CO₂ Y H₂S hasta las fracciones molares de 0.0019 y 0.00138, respectivamente y regenerando una fracción molar de 0.11081967 de amina MDEA utilizada. Se recomienda que para el diseño y entrenamiento de la RNA los datos a utilizar de entradas y salidas sean normalizados, es decir, que la red trabaje en un rango de 0-1 y no con valores muy grandes, con la finalidad de que la predicción de las fracciones molares de CO₂ y H₂S sean más precisas y confiables.

Palabras clave: <ENDULZAMIENTO DE GAS NATURAL> <GAS AMARGO> <DWSIM (SOFTWARE)> <RED NEURONAL ARTIFICIAL (RNA)> <ÁCIDO SULFHÍDRICO> <AMINAS> <METILDIETANOLAMINA (MDEA)> <BAYESIAN REGULARIZATION>.

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 ECIBICE, l=QUITO, serialNumber=0000621485, cn=LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Fecha: 2022.06.15 10:08:41 -05'00'



1240-DBRA-UTP-2022

ABSTRACT

The aim of this Curriculum Integration Work is to predict by means of ANN the concentrations of CO₂ and H₂S of the natural gas sweetening process, for which the sweetening process was simulated in the free software DWSIM, the same one that served us to generate the base of essential data for the design of the artificial neural network (ANN) suitable for the prediction of the molar fractions of interest of the natural gas that enters the process. For the ANN development, the database generated from DWSIM was used, which is composed of 130 data with three inputs: temperature, pressure and molar flow of the sour gas, and their respective outputs: molar fraction of CO₂ and H₂S of the sweet gas flow exiting the top of the absorption tower. The artificial neural network was designed in MATLAB using 170 hidden neurons in its architecture and trained with the Bayesian Regularization algorithm; where a mean square error (MSE) of 1.6317e-05 and a total regression coefficient of 0.99882 were obtained. The ANN was validated by means of a comparative statistical analysis, obtaining a confidence percentage of 95%. The simulation was able to reduce the concentrations of CO₂ and H₂S to molar fractions of 0.0019 and 0.00138, respectively, and regenerated a molar fraction of 0.11081967 of the MDEA amine used. It is recommended that for the design and training of the ANN the data to be used for inputs and outputs be normalized, that is, that the network works in a range of 0-1 and not with very large values, in order to make the prediction of the molar fractions of CO₂ and H₂S more precise and reliable.

Keywords: <NATURAL GAS SWEETENING> <SOUR GAS> <DWSIM (SOFTWARE)>
<ARTIFICIAL NEURAL NETWORK (ANN)> <HYDROGEN SULFUR> <AMINES>
<METHYLDIETHANOLAMINE (MDEA)> <BAYESIAN REGULARIZATION>.



CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Identificación del problema

En la actualidad el intercambio entre energía y el medio ambiente está provocando cambios primordiales en la gestión social de los sistemas energéticos, e incluso la generación de electricidad. El cambio climático por las emisiones antropogénicas de gases de efecto invernadero (GEI) es quizás el más importante de los cambios sociales que influyen en el medio ambiente (Mac Kinnon et al., 2018, p.2). La OECD establece que la contaminación ambiental va a ser uno de los factores primordiales en todo el mundo de una muerte prematura para el año 2050, por efecto de las altas concentraciones de gases contaminantes presentes en el aire.

El gas natural es una fuente de energía esencial en la industria, debido a su amplio uso como combustible industrial y doméstico. Para que el gas natural sea adecuado y no tenga efectos frente al medio ambiente, es necesario eliminar todos los contaminantes que afecten a su utilización y capacidad energética óptima, ya que estos dentro de una planta pueden presentar problemas como la corrosión, congelación, obstrucción, erosión y lo más importante riesgo contra la salud y el medio ambiente (Erdmann et al., 2012, p.90).

Al extraer gas natural de los pozos petrolíferos con gas asociado, las corrientes presentan impurezas o contaminantes como nitrógeno (N_2), dióxido de carbono (CO_2), sulfuro de hidrógeno (H_2S) y agua. El N_2 se considera un gas inerte ya que solo va a afectar el poder calorífico del gas y también, al costo de transporte; mientras que el CO_2 y el H_2S , forman ácidos o soluciones ácidas en presencia del agua contenida en el gas; mismas sustancias que son indeseables y deben eliminarse del gas natural antes de su comercialización.

Es por esto que aparece un proceso encargado de eliminar las sustancias ácidas del gas natural, al que se lo conoce como, proceso de endulzamiento del gas natural, y se realiza utilizando algún absorbente de las sustancias ácidas que, por lo general son soluciones de aminas; estos procesos al ser intensivos en energía, deben lograr que las corrientes de gases tratadas cumplan con las Normas de Calidad del gas natural comercial en cuanto al contenido de CO_2 y H_2O , deben cumplir con la economía del proceso; es decir, que la sustancia absorbente usada pueda ser recuperada y reutilizada en un circuito cerrado (Gutiérrez et al., 2008, pp.2-3).

Al no encontrar mucha información en la literatura en base a las características de los procesos de endulzamiento de gas natural dado que, al ser empleados en su mayoría por compañías, los datos no

se encuentran disponibles. Por ello el uso indispensable de paquetes interactivos de simulación de procesos, ayuda a analizar problemas de operación en plantas existentes, o en su defecto para diseñar nuevas plantas (Morales et al., 2005, p.2).

En este estudio se simulará un proceso de endulzamiento de gas natural (eliminación parcial de los gases ácidos presentes en estado estacionario), así también intentar alcanzar las especificaciones de calidad del gas natural comercial y mejorar la eficiencia del proceso, empleando el software libre DWSIM para procesos químicos, con la finalidad de comparar los resultados encontrados con los datos arrojados en los artículos de referencia.

Posteriormente, se elaborará una base de datos proveniente de la simulación desarrollada para la creación y diseño de una red neuronal (RNA), el cual será capaz de estimar los valores obtenidos de los compuestos resultantes de interés, como son el dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno principalmente, generando un análisis a fondo del proceso para optimizarlo, y así lograr la disminución de costos, conjuntamente con un alto aprovechamiento energético.

1.2. Justificación del proyecto

El gas natural obtenido a través del endulzamiento, presenta algunas ventajas frente a distintos procesos, esto se debe a que el endulzamiento de GN a pesar de disminuir el CO₂ que contribuye al calentamiento global, también garantiza la eliminación de H₂S del gas natural producido (Erdmann et al., 2012, pp.92-93).

Sin embargo, el H₂S al ser altamente tóxico, limita el diseño de instalaciones de producción y el procesamiento de gas natural, por ello, es importante también la optimización del rendimiento del proceso existente, teniendo siempre en cuenta el mantenimiento de la concentración de CO₂ y H₂S en el gas natural tratado por debajo de las concentraciones de descarga permitida (Gutiérrez et al., 2008, p.3). Este proceso de endulzamiento es llevado a cabo en un sistema compuesto primordialmente por una torre absorbidora y una torre regeneradora, la primera unidad es en donde se obtiene el gas dulce o tratado y la segunda unidad necesaria para recuperar y reacondicionar la amina y realimentarla al ciclo, lo que implica una disminución de costos y deriva en un menor impacto ambiental por la casi nula deposición de efluentes contaminantes (Morales et al., 2005, pp.2-3).

El gas natural representa potencialmente un combustible más limpio y más eficiente en relación con otras opciones fósiles como son el carbón o petróleo, y su sustitución directa por estos puede tener beneficios inmediatos en materia de emisiones, es decir, con el aumento de la generación de gas ha conducido a la reducción de las emisiones de GEI (Mac Kinnon et al., 2018, p.2).

Además, el gas natural es una fuente de energía rentable y establecida con muchas aplicaciones en varios sectores energéticos, como la generación de energía, el transporte, la industria y el entorno construido. En la actualidad, el gas natural representa un componente importante del sistema energético estadounidense en todos los sectores, a excepción del transporte. El uso del gas natural en EE.UU. ha aumentado de forma constante en la última década, reflejando el aumento de la disponibilidad de reservas no convencionales y se espera que la tendencia continúe en los próximos años (Mac Kinnon et al., 2018, p.3).

Gracias a todos estos beneficios exhibidos, el endulzamiento de gas natural presenta gran viabilidad, por ello, en Estados Unidos el gas natural ha sido defendido como un eficaz combustible “puente” de corto a mediano plazo, hacia un futuro con bajas emisiones de carbono y sulfuro de hidrógeno, y sobre todo en el contexto de proporcionar una opción rentable para desplazar incluso centrales eléctricas de carbón.

Este estudio radica en la simulación en el software DWSIM, en el cual se estudiará con detenimiento el comportamiento del sistema, hallando aquellos parámetros y variables críticas que controlarán el proceso de forma óptima. Así se encontrarán los resultados que serán validados estadísticamente a partir de los valores encontrados en bibliografía.

Debido a que DWSIM es una plataforma de código abierto las personas interesadas en el tema tienen la oportunidad de acceder a él para estudios futuros, es así que se establecería una base sólida que motive al estudio de endulzamiento de gas natural y que sea accesible y de utilidad en el país. Empleando el conjunto de datos provenientes de la simulación se entrenará la red neuronal utilizando el Toolbox de MATLAB, como una herramienta didáctica, confiable y rápida para obtener las fracciones molares de los compuestos de interés, mediante las condiciones de temperatura, flujo molar, y presión, evidenciando la influencia de cada variable en el sistema, de esta forma optimizar recursos, costos y consumo de energía del proceso de manera sencilla y directa.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Predecir mediante RNA las concentraciones de CO₂ y H₂S del proceso de endulzamiento de gas natural.

1.3.2. *Objetivos Específicos*

- Validar la simulación del proceso obtención de gas natural comparando los resultados obtenidos con referencias bibliográficas.
- Determinar la cantidad de gases ácidos obtenidos del proceso de endulzamiento de gas natural.
- Diseñar una (RNA) que sea capaz de predecir las composiciones molares de los gases ácidos y de los demás productos resultantes de las reacciones.
- Realizar un análisis estadístico para validar la RNA.

1.4. Alcance

En el presente trabajo se obtendrá una simulación en la plataforma de procesos químicos DWSIM. El ciclo será capaz de obtener las concentraciones de dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno, como corrientes de salida. El paquete de aminas será recirculado al proceso para mejorar la eficiencia del mismo y a la vez disminuir costos. Como corrientes de entrada tenemos el gas ácido bruto formado por: metano, etano, propano, isopentano, isobutano, CO₂ y H₂S. Esta última al poseer un valor superior a los 5.7 mg/m³ hace que el gas natural obtenido de los pozos sea un gas agrio, del cual se espera obtener una disminución de concentración hasta una conversión aproximada del 99% siendo así inofensivo para la salud y el medioambiente.

Los datos obtenidos a partir de la simulación en DWSIM nos servirá para la preparación de la red neuronal, el éxito de la RNA dependerá de los datos de entrada, mejorando el aprendizaje de la red, dando como resultados valores confiables.

Se obtendrá una red neuronal artificial empleando el sistema de cómputo numérico MATLAB, la cual será capaz de receptor ciertos valores y reaccionar ante variables como la temperatura, flujo molar y presión, las cuales resultan decisivas en el proceso de endulzamiento. Las fracciones molares halladas de gas natural y gases ácidos serán predichas adecuadamente asegurando la confiabilidad estadística de los resultados. Permitiendo que la obtención de gas natural se realice optimizando costos operativos como recursos de reactivos, al analizar a fondo el funcionamiento del proceso para lograr el control del mismo.

Finalmente, la recopilación de información facilitará una base sólida para la institución, que podrá realizar estudios futuros, los cuales brinden el conocimiento adecuado para el aprovechamiento de la composición de gas ácido bruto en la extracción de gas natural de pozos, misma que se someterá a una serie de experimentaciones que resultarán positivas para la sociedad. Al corroborar la viabilidad

del proyecto, impulsa también al país a invertir en un proceso amigable con el ambiente, buscando alternativas ecológicas de generación de energías limpias y sostenibles.

El endulzamiento de gas natural, es la mejor alternativa para disminuir la dependencia de combustibles fósiles además de generar energía más limpia minimizando las emisiones de gases de efecto invernadero y a la vez reduciendo la contaminación ambiental mejorando la calidad de aire para un futuro mejor en la salud de la humanidad.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del Arte

2.1.1. *Gas natural*

El gas natural (GN) es una de las principales formas de energía fósil en el mundo que se emplea principalmente en la producción de electricidad, como también para el transporte; se espera que su consumo aumente un 69 % hasta 2040 (Quek et al., 2018, p.1). El GN está compuesto por una mezcla de hidrocarburos combustibles, conformados desde el metano (CH_4), hasta el pentano (C_5H_{12}), presentando impurezas como es el dióxido de carbono (CO_2) y el ácido sulfhídrico (H_2S); por lo que la eliminación del CO_2 y H_2S del GN resulta de vital importancia, ya que por una parte el CO_2 es un gas que al ser liberado al ambiente genera un efecto invernadero, además de esta, la especificación de venta del GN impone que el contenido de CO_2 debe ser inferior al 2 – 3 %; en cambio el H_2S , resulta ser muy tóxico, corrosivo y dañino para el medioambiente y los equipos de la planta (Qiao et al., 2012, pp.1-2).

Para la eliminación de esos gases contaminantes existen técnicas como la absorción, adsorción, criogenia, bucle de carbonato, la oxidación y la separación por membranas; generalmente la más usada en los procesos de tratamiento de gases ácidos, es la absorción química, donde se utilizan disolventes de alcaloides como la MEA, DEA y la MDEA, debido a su versatilidad y capacidad para eliminar los gases ácidos hasta niveles de ppm (Paul et al., 2007, pp.2576-2577).

2.1.2. *Gases ácidos*

El GN deriva de los yacimientos petroleros, formándose por deposición y conversión de la materia orgánica a presiones y temperaturas altas; sin embargo, la producción de la misma va acompañado de la formación de sustancias como óxidos de nitrógeno, el CO_2 y el H_2S ; a estos compuestos se los denomina gases ácidos (Imagens y Computadorizada, 2021, p.8).

El gas se considera ácido si su contenido de H_2S supera los 5.7 mg/m^3 (3.8 ppm en volumen) (Abkhiz, 2014, p.78).

2.1.2.1. Dióxido de carbono

El dióxido de carbono (CO_2) al hacer contacto con el agua favorece la formación de ácido carbónico (H_2CO_3) que, al combinarse con el hierro del acero de los equipos, tuberías, etc., da lugar a la acidificación, generando incrustaciones que a su vez incrementa los costes de funcionamiento y mantenimiento de la planta (Gil, 2011, pp.352-353).

Generalmente, el CO_2 a temperaturas bajas no es corrosivo en ambiente seco, aun así, cuando aumenta la humedad de un 60 – 70 % es altamente corrosivo, es decir, una pequeña cantidad de CO_2 en ambiente húmedo aumenta la velocidad de corrosión del acero. Así también, el CO_2 al momento de transportar el GN reduce el valor calorífico del mismo (Saghafi y Arabloo, 2017, p.256).

2.1.2.2. Ácido sulfhídrico

El sulfuro de hidrógeno o ácido sulfhídrico (H_2S) tiene su origen en la formación del yacimiento junto con el gas natural, durante su tratamiento puede presentarse en dos fases; gaseosa y líquida. Es un problema muy común en las plantas de endulzamiento ya que genera corrosión, acortando la vida útil de los equipos, siendo las zonas con más riesgo a la corrosión: el regenerador, los separadores y el circuito de solución de aminas (Imagens y Computadorizada, 2021, p.9).

Cuando se aplica algún material para frenar la corrosión por el H_2S , en ocasiones esta corrosión forma una película negra sobre el material y en algunos casos puede llegar a ocultar el daño producido al material, que sólo puede ser descubierto durante la limpieza de los mismos. El H_2S dependiendo de su concentración puede ser altamente tóxico, generando un alto grado de riesgo para la salud de las personas, animales y medioambiente (Rezakazemi et al., 2017, pp.362-363).

2.1.2.3. Óxidos de nitrógeno

Los óxidos de nitrógeno (NO_x) generalmente se forman cuando se combustiona el GN, ya que se pueden mezclar los radicales del nitrógeno con el oxígeno de combustión, donde el óxido de nitrógeno unido al sulfuro provoca la lluvia ácida; la combustión del GN produce doce veces menos los óxidos de nitrógeno que cuando se combustiona carbón y dos punto cinco veces menos que cuando se combustiona el fuel oil (Imagens y Computadorizada, 2021, p.9).

2.1.3. Endulzamiento de gas natural

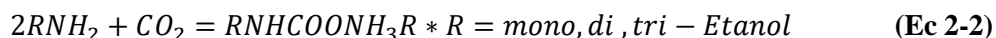
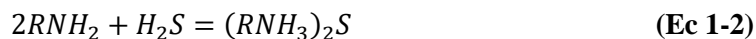
El gas natural ácido producido en los yacimientos de gas/petróleo contiene distintos hidrocarburos e impurezas como agua, H₂S, CO₂ e incluso helio; es importante remover estas impurezas para que el gas cumpla con las especificaciones necesarias; por ello el endulzamiento de gas natural es un proceso que atraviesa el gas natural ácido con la finalidad de remover el H₂S y el CO₂, ya que son gases que afectan directamente al manejo de del gas natural, emisión de compuestos causantes de lluvia ácida; además de que el ácido sulfhídrico se caracteriza por tener olor desagradable y a la vez es tóxico, y el dióxido de carbono es un gas incoloro e inodoro que a elevadas concentraciones incrementa la frecuencia respiratoria y puede llegar a ser sofocante generando grandes riesgos a la salud (Wang et al., 2014, pp.2-3).

Existen algunos métodos de endulzamiento de gas natural, como son: la adsorción, la absorción química y física y la separación por membranas; donde factores como el caudal de gas, presión, temperatura y selectividad de los gases ácidos, son determinantes para elegir la mejor técnica de endulzamiento (Darani et al., 2021, p.12072).

Actualmente, el proceso más utilizado para la eliminación de estos gases ácidos es la absorción – desorción (absorción química), su aplicación ha ido aumentando debido a su bajo coste operativo, la reactividad y flexibilidad para adaptar la composición del disolvente a las composiciones del gas (Omar, 2017, p.51); desde el punto de vista económico lo más importante en este proceso, es la tasa de circulación del disolvente, una tasa de circulación más baja conlleva un menor coste de energía de bombeo y, por lo tanto, una reducción de energía de regeneración necesaria, lo que supone aproximadamente un 70% del coste total de funcionamiento del proceso de endulzamiento de gas (Mandal y Bandyopadhyay, 2006, p.6076); además de que en el proceso la regeneración de la solución rica en aminas consume una gran cantidad de vapor, por lo que el proceso de endulzamiento supone de 50 – 60% del consumo total de energía en el proceso de purificación de gas natural, es así, que la unidad de endulzamiento de GN es una instalación clave para la conservación y reducción del consumo de energía (Shang, 2019, p.472).

Dentro del proceso de absorción – desorción, se emplean aminas que en el campo de la industria del gas son consideradas las más exitosas y comunes, donde se utiliza una solución de alcanolamina como disolvente químico para la eliminación de gases ácidos del flujo de gas; su aplicación es alta debido a que estas alcanolaminas tienen gran afinidad con los gases ácidos, y existen varios tipos de aminas que se pueden emplear en este proceso, por ejemplo, la MEA, DEA y la amina empleada en este trabajo denominada MDEA (Abdulrahman y Sebastine, 2013, pp.116-117).

La reacción de las aminas con el H₂S y el CO₂ se presentan a continuación:



Generalmente, el proceso de aminas se compone de las mismas unidades de operación, que son: torre contactora o absorbedor, torre de regeneración y de un intercambiador de calor; sin embargo, dependiendo de la composición del gas a tratar y del proceso que se vaya a emplear, se adaptan estas unidades añadiendo más equipos para alcanzar las concentraciones de gas de salida deseados, que en base a la regulación de contratos de gas para gasoductos y gas natural, restringe el contenido de H₂S de 4 ppm y el CO₂ de 2% en el flujo de gas natural, aproximadamente (Stewart y Arnold, 2011, p.9).

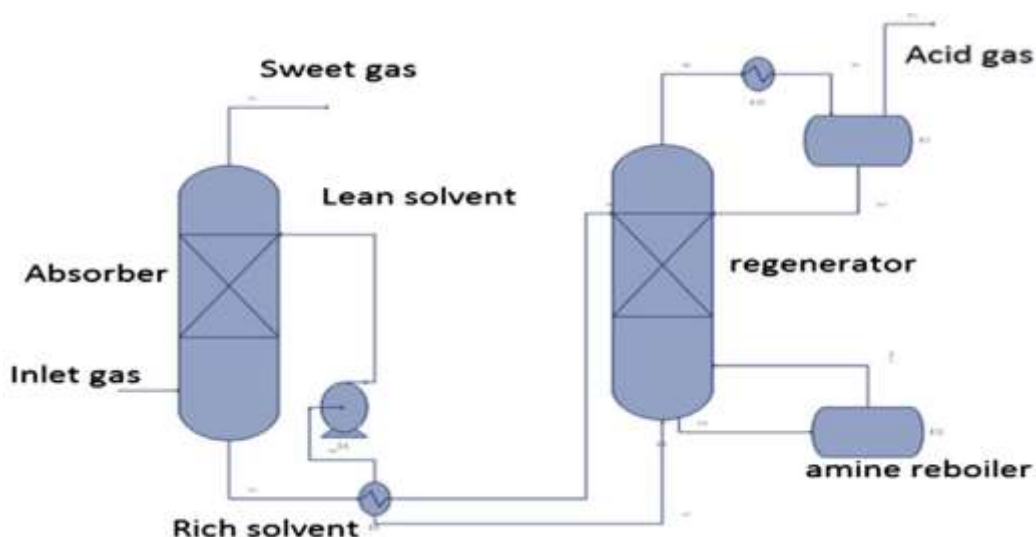


Figura 1-2. Diagrama general de una planta de endulzamiento con aminas

Fuente:(Abdulrahman y Sebastine 2013).

Es necesario la modelación del equilibrio vapor – líquido (VLE) de los sistemas de gas ácido y amina acuosa para el diseño, síntesis y análisis de las unidades que componen el proceso de endulzamiento de gas; existen dos categorías de modelos de VLE, los modelos empíricos basados en el modelo de Kent – Eisenberg y los modelos basados en el coeficiente de actividad o en el exceso de energía de Gibbs (Gex). Kent y Eisenberg plantearon un modelo VLE para predecir las presiones parciales de equilibrio del H₂S y CO₂ en la MEA y DEA acuosas (Patil et al., 2006, pp.498-499).

Haji – Sulaiman et al., ampliaron el modelo propuesto por Kent – Eisenberg para estimar la carga de CO₂ en las mezclas acuosas de DEA, MDEA y DEA – MDEA, concluyendo que el modelo pronostica una carga de CO₂ en una amplia gama de condiciones de funcionamiento (Haji-Sulaiman, 1998, pp.961-962).

Sin embargo, el proceso de endulzamiento resulta a la vez ser un proceso no tan bueno con el medio ambiente, ya que la aplicación de aminas conlleva a una segunda contaminación, esta desventaja a permitido la incursión de nuevas tecnologías como es la separación de gases por medio de una membrana polimérica; no es muy común ya que es una tecnología que se está implementando recientemente con un 5% de aplicación en el mercado, pero resulta ser muy prometedor para un futuro; por lo que actualmente el endulzamiento con regeneración de aminas es la mejor opción para el GN (He et al., 2020, pp.2-3).

2.1.4. Solución de MDEA

Conocida también como METILDIETANOLAMINA, es una alcanolamina terciaria ampliamente utilizada como absorbente en el proceso de endulzamiento de gas natural, debido a su baja presión permite su uso en altas concentraciones sin que exista pérdidas importantes por efecto de la vaporización, además que es una solución no corrosiva, resistentes a la degradación térmica y presenta baja miscibilidad en hidrocarburos (Medina, 2015, p.28).

La solución acuosa de MDEA es considerado más un absorbente selectivo y eficiente para el H₂S que para el CO₂, debido a que no forma carbamato; el H₂S reacciona directamente con la MDEA dando como resultado una sal de amina denominada sulfuro de metildietanolamina mediante una reacción exotérmica reversible (Pal et al., 2015, p.125).

Para alcanzar la desulfuración selectiva de las corrientes de gas ácido con MDEA, es importante que el tiempo de contacto del gas y líquido dentro del absorbedor sea tan largo, eliminando así el H₂S; debido a que el CO₂ no reacciona directamente con la MDEA, es necesario que forme ácido carbónico al reaccionar con el agua, para finalmente poder reaccionar con la solución de MDEA (Younas y Banat, 2014, p.247).

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Proceso de absorción con MDEA

Este proceso es una operación unitaria que se encarga de la transformación de los componentes volátiles de una mezcla líquida a la fase gaseosa, para ello se emplean torres o columnas de absorción. El proceso de absorción con MDEA, es una absorción química donde la regeneración del solvente químico es su objetivo principal; el proceso consta de dos trenes paralelos idénticos donde la solución

de MDEA circula a contracorriente del gas amargo, con la finalidad de retener gran cantidad de impurezas contenidas en el gas (Al-Lagtah et al., 2015, pp.368-369).

Cuando la solución de aminas y el gas amargo entran en contacto dentro de la torre de absorción, el MDEA se encarga de capturar los gases ácidos, de tal modo que las concentraciones disminuyen a tal punto que ya nos producen efectos en el ambiente (Erdmann et al., 2012, p.93).

2.2.2. *Columna de regeneración*

La columna de regeneración está compuesto por un condensador y un rehervidor, cuya función es la regeneración de la solución de MDEA; la columna opera a temperaturas de 46.12°C y 119.4°C y presiones de 151.709 kPa y 179.266 kPa; debido a estas condiciones de funcionamiento se evaporan grandes cantidades de agua, por lo que en una etapa posterior se adiciona agua a la amina para compensar esta pérdida (Al-Lagtah et al., 2015, p.369).

2.2.3. *DWSIM*

Desarrollado por Daniel Wagner Oliveira de Medeiros, es un simulador de procesos químicos, de código abierto que cumple con CAPE – OPEN, un estándar de ingeniería de procesos que promueve la interoperabilidad de las soluciones de simulación, permitiendo combinar interfaces de componentes de modelamiento de diferentes softwares entre sí. DWSIM tiene una interfaz gráfica intuitiva y fácil de usar, consta de una lista completa de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas reactivos y herramientas de caracterización de crudos (Medeiros, 2019).

Tabla 1-2. Operaciones y modelos contenidos en DWSIM

OPERACIONES UNITARIAS	MODELOS TERMODINÁMICOS
Mezclador	Peng-Robinson
Splitter	Soave-Redlich-Kwong
Separador	, Lee-Kesler
Bomba	Lee-Kesler-Plöcker
Compresor	, UNIFAC
Expansor	UNIFAC modificado (Dortmund)
Calentador – Enfriador	UNIQUAC y UNIQUAC extendido
Válvulas	NRTL

Segmentos de cañería	COSMO-SAC
Columna de destilación	LIQUAC
Intercambiador de calor	PC-SAFT
Reactores	FPROPS
Placa orificio	CoolProp
Columnas de destilación/absorción	Chao-Seader
Separador de sólidos	Grayson-Streed
Filtros	Ley de Raoult
-	Tablas de vapor IAPWS-IF97
-	Agua marina IAPWS-08

Fuente: (Medeiros, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

2.2.4. MATLAB

Matlab es un lenguaje informático técnico y un entorno interactivo para el desarrollo de algoritmos, el análisis y la visualización de datos y cálculos numéricos. MATLAB integra análisis numérico, cálculo de matrices, procesamiento de señales y la visualización gráfica en un entorno completo para representar problemas y sus soluciones sin necesidad de la programación tradicional. Es adecuado para el procesamiento de señales e imágenes, comunicaciones, modelado y análisis financiero, entre otros. Se pueden añadir conjunto de herramientas (colecciones de funciones para fines específicos) para ampliar considerablemente la funcionalidad integrada del programa principal (Cabezas y Páez, 2010, p.3).

2.2.5. NEURAL NETWORK TOOLBOX

Se utilizará este Toolbox ya que proporciona la capacidad para diseñar, inicializar, simular y entrenar los modelos neuronales más utilizados, como son: Perceptrones, redes lineales, redes de retropropagación, redes de base radial, aprendizaje asociativo y competitivo, aplicaciones autoorganizativas, aprendizaje de cuantización vectorial, redes de Elman y redes de Hopfield.

El toolbox permite al usuario definir sus propias funciones de transferencia e inicialización, reglas de aprendizaje, funciones de entrenamiento y estimación de error para usarlas posteriormente con las funciones básicas; así también aporta las facilidades y prestaciones gráficas de MATLAB para el estudio del comportamiento de las redes: visualización gráfica de la matriz de pesos y vector de desplazamiento mediante diagramas de Hinton, representación de errores a lo largo del

entrenamiento, mapas de superficie de error en función de pesos y vector de desplazamiento, etc. (Cabezas y Páez, 2010, pp.3-5).

Esta herramienta tiene el soporte de MATLAB 4.2c y SIMULINK. La librería de SIMULINK contiene modelos de capas de redes neuronales de cada tipo de neurona implementada en el toolbox de redes neuronales. Es posible por tanto diseñar sistemas SIMULINK para simular redes neuronales creadas usando esta herramienta. Simplemente, las capas se conectan de acuerdo con la arquitectura de la red y se proporcionan como entrada a la caja de diálogo de cada capa la matriz de pesos apropiada y el vector de desplazamiento. Usando el generador de código C de SIMULINK es posible generar automáticamente el código correspondiente a un diseño neuronal (Cabezas y Páez, 2010, pp.3-5).

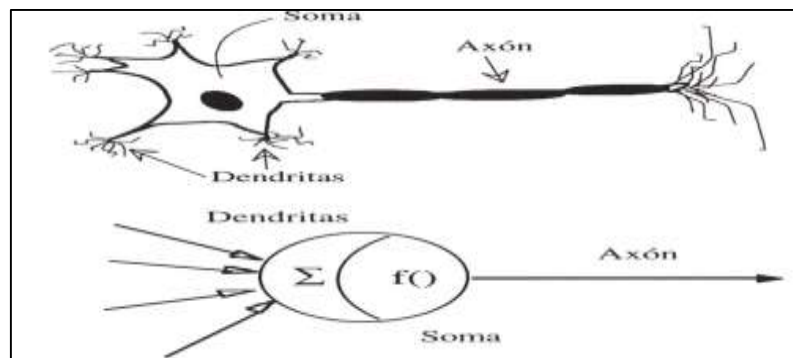


Figura 2-2. Neurona biológica y neurona artificial

Fuente: (Martín, 1995).

2.2.6. *Redes neuronales aplicadas al proceso de endulzamiento de gas natural*

Las redes neuronales artificiales son marcos para que diferentes algoritmos de aprendizaje automático procesen datos complejos; estos pueden utilizarse de distintas formas, como la previsión, regresión y el ajuste de curvas. Dentro de una RNA la unidad fundamental es una neurona que utiliza una función para formular la salida, su ventaja principal es su menor complejidad para problemas de múltiples variables; además debido a sus características de inmunidad al ruido y tolerancia a los fallos, se utilizan para datos intrínsecamente ruidosos de los sistemas energéticos (Mosavi et al., 2019, p.5).

- Los autores Khoshnevisan et al. (2021, pp.2-3) diseñaron una (RBF-NN) para modelar el consumo de energía y el contenido final de agua de una planta de gas natural, utilizando las variables de dimensión reducida logradas por el enfoque (ACP), es decir, la normalización de los datos para evaluar, modelar, optimizar y mejorar el funcionamiento de la red neuronal, con esto los resultados de los autores de ERD, RMSE, %AARD, SSE, STD y R^2 , demuestran gran precisión del

procedimiento introducido; la (RBF-NN) cuenta con una capa oculta diseñada, la activación de la misma se considera RBF y las entradas ponderadas se calculan mediante la función de peso de distancia euclidiana. Las neuronas de la capa de salida ocupan funciones de activación y funciones de peso de producto de puntos para calcular sus entradas ponderadas.

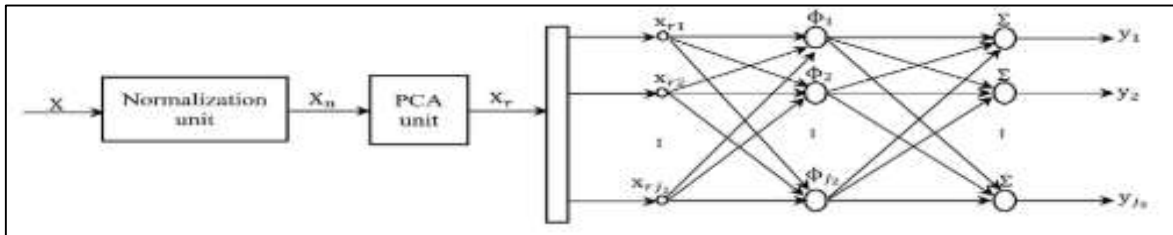


Figura 3-2. Esquema del modelo PCA-RBF-NN

Fuente: (Khoshnevisan et al., 2021).

- Los autores Nahdliyah et al. (2017, pp.2-40) simularon un proceso de endulzamiento de gas natural, para usarlo como base para diseñar una red neuronal, donde el objeto de estudio únicamente es la torre de regeneración de aminas, además de esto el regenerador será optimizado por la (PSO) con la finalidad de determinar el impacto de las variables en el regenerador para todo el sistema; los datos de entrada corresponden a caudal del regenerador de alimentación, presión y temperatura del regenerador, concentraciones de CO₂ y H₂S, la temperatura de la etapa inferior del regenerador y la temperatura del condensador; mientras que los parámetros de salida son la energía del regenerador y condensador, respectivamente, y el contenido de CO₂ en la amina pobre. Los datos serán entrenados con el algoritmo Levenberg-Marquardt, además utilizarán una RNA-MLP con una estructura NARX; donde los resultados demostraron una buena predicción para los parámetros de salida.

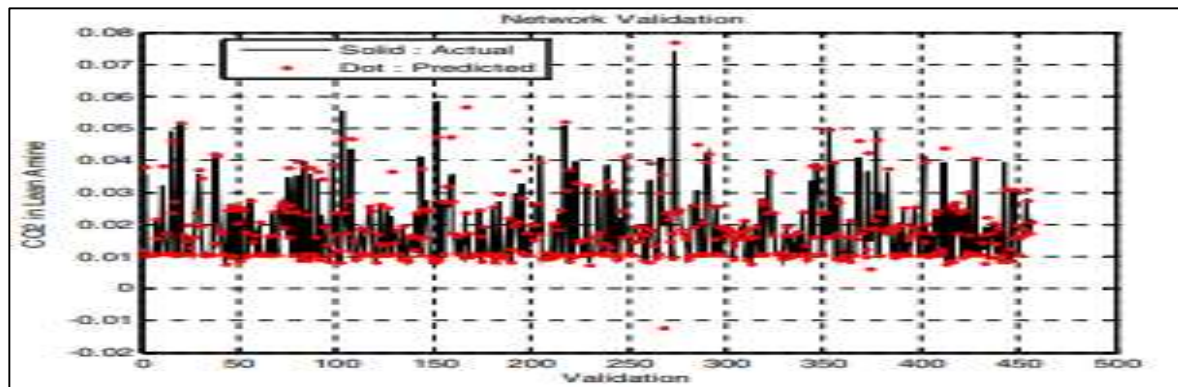


Figura 4-2. Validación de la RNA de CO₂ en la amina pobre

Fuente: (Nahdliyah et al., 2017).

- Los autores Hafizi et al. (2014, pp.527-530) realizaron una predicción del caudal de amina sucia de una columna de absorción de una refinería de gas, donde el objetivo de estudio fue comparar las predicciones entre los modelos neuro-fuzzy y una RNA; un modelo neuro-fuzzy es un sistema difuso que se entrena mediante un algoritmo proporcionado por un modelo inteligente, con esta analogía, la unión de una red neuronal con la lógica difusa intenta suavizar la deficiencia de cada uno de estos sistemas, permitiendo tener un sistema más eficiente, robusto y fácil de entender (de Campos Souza, 2020, pp.5-6); como entradas experimentales para cada caso se tiene el caudal y presión del gas, y como salida únicamente el caudal de amina sucia; para en entrenamiento de neuro-fuzzy adaptativo se ocuparon algoritmos de mínimos cuadrados recursivos y de retro propagación del error, mientras que para la RNA se aplica un modelo RNA-MLP. Como resultado, la comparación de ambos métodos demostró que los dos predicen el caudal de amina sucia con gran precisión, sin embargo, el modelo neuro-fuzzy predijo mejor el sistema, con un R^2 de 0.964, mientras que la RNA-MLP con un R^2 de 0.859.

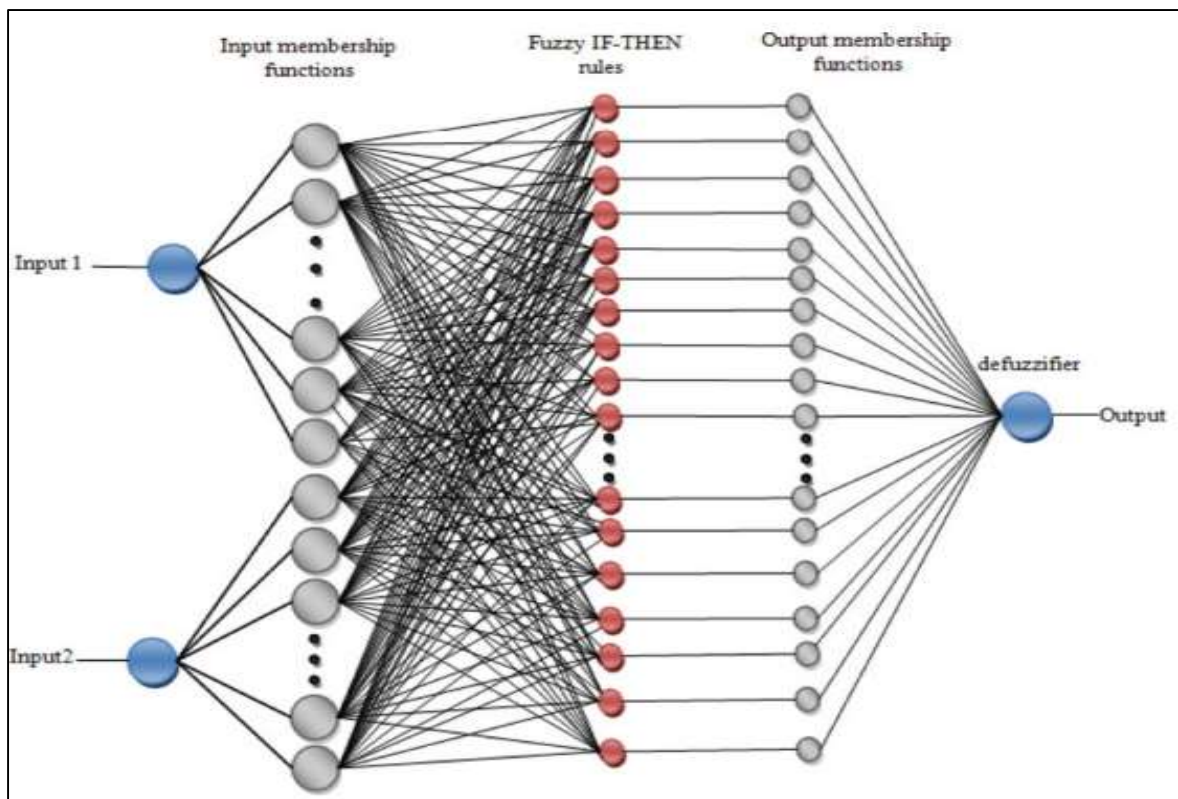


Figura 5-2. Estructura de un modelo neuro-fuzzy

Fuente: (Hafizi et al., 2014).

2.3. Marco Legal

DWSIM es un simulador de proceso químicos gratuito y de código abierto, compatible con CAPE – OPEN, y desarrollado para Windows, Linux, Android, MacOS e iOS. El simulador se encuentra regido bajo la Licencia Pública General del Sistema Operativo GNU v3, destinada a garantizar la libertad para compartir y cambiar todas las versiones de un programa, asegurándose de que siga siendo un software libre para todos sus usuarios; el potente motor de termodinámica de DWSIM también está disponible como una biblioteca de enlace dinámico (DLL) independiente que se puede vincular con aplicaciones propietarias (Medeiros, 2019).

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

3.1. Etapas de la metodología

En base al estudio bibliográfico, presentado en el Capítulo II, el presente trabajo de integración curricular consta de las siguientes etapas:

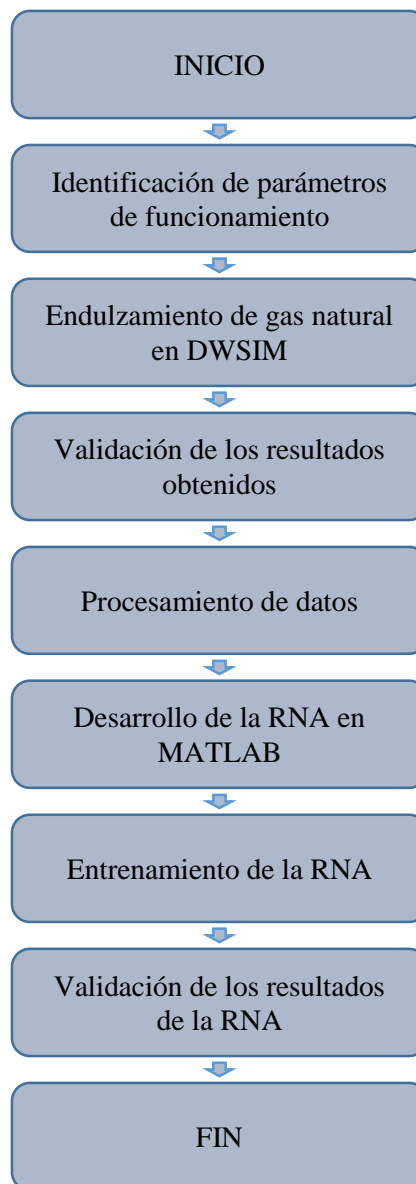


Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de integración curricular

Realizado por: Bastidas, E. 2021

El presente trabajo de integración curricular de tipo, propuesta tecnológica, trata de una simulación del proceso de endulzamiento de gas natural de la planta de Lekhwair, además, del desarrollo de una red neuronal artificial (RNA) con la capacidad de poder predecir las concentraciones de los principales gases ácidos como son el CO₂ y H₂S en el proceso, de modo que, esta propuesta tecnológica tiene un enfoque cuantitativo, ya que para el desarrollo y entrenamiento de la RNA se emplea la base de datos proveniente de la simulación realizada en DWSIM.

Además de esto, para la interpretación y validación de los resultados obtenidos, se realizará un análisis estadístico mediante el cual se comparará los datos obtenidos de la simulación y los datos de la predicción de la RNA, estableciendo un grado de error y su confiabilidad.

La información empleada para la literatura y desarrollo del trabajo de integración curricular proviene de los conocimientos y datos obtenidos por el autor a partir de la simulación realizada en DWSIM y el procesamiento del mismo para el desarrollo de la RNA en MATLAB y el análisis estadístico en Excel; así también de los artículos científicos más relevantes específicamente de cuartil Q1 y Q2 publicados en revistas científicas indexadas en Mendeley.

3.2. Identificación de los parámetros de funcionamiento

La información necesaria para realizar la simulación en DWSIM procede de:

- Artículo científico publicado en “*Journal of Natural Gas Science and Engineering*”, titulado como: *Optimization and performance improvement of Lekhwair natural gas sweetening plant using Aspen HYSYS*, el cuál fue propuesto por Nasir M.A. Al-Lagtah, Sultan Al-Habsi y Sagheer A. Onaizi (2015) de la Escuela de Ingeniería Química y Materiales Avanzados, Universidad de Newcastle y el Departamento de Ingeniería Química, Imperial College London, South Kensington Campus, Londres, SW7 2AZ, Reino Unido.
- Tesis de la Universidad de San Agustín de Arequipa, titulado como: *MODELACIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO DE LA DESACIDIFICACIÓN DEL GAS NATURAL, MEDIANTE EL USO DEL SIMULADOR ASPEN HYSYS 8.8*, propuesto por Ricky Augusto Vera Pérez y Lizeth Magnolia Valdivia Pérez (2019) de la Facultad de Ingeniería de Procesos de la Escuela Profesional de Ingeniería Química.

3.2.1. Generalidades del proceso

El GN al ser producido junto con el petróleo en un yacimiento o pozo, la alimentación al proceso es rico en H₂S y CO₂, además de presentar una mezcla de hidrocarburos como el metano, etano, propano e hidrocarburos de mayor peso molecular.

Tabla 2-3. Condiciones de alimentación para la simulación del proceso

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Temperatura	35	°C
Presión	5687.857	kPa
Flujo molar	10	MMSCfD

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

La concentración deseada del producto de H₂S debe ser con un máximo de 5 ppm; sin embargo, lo ideal sería 0.040 ppm (Al-Lagtah et al., 2015, p.368).

3.2.2. Proceso de endulzamiento de gas natural

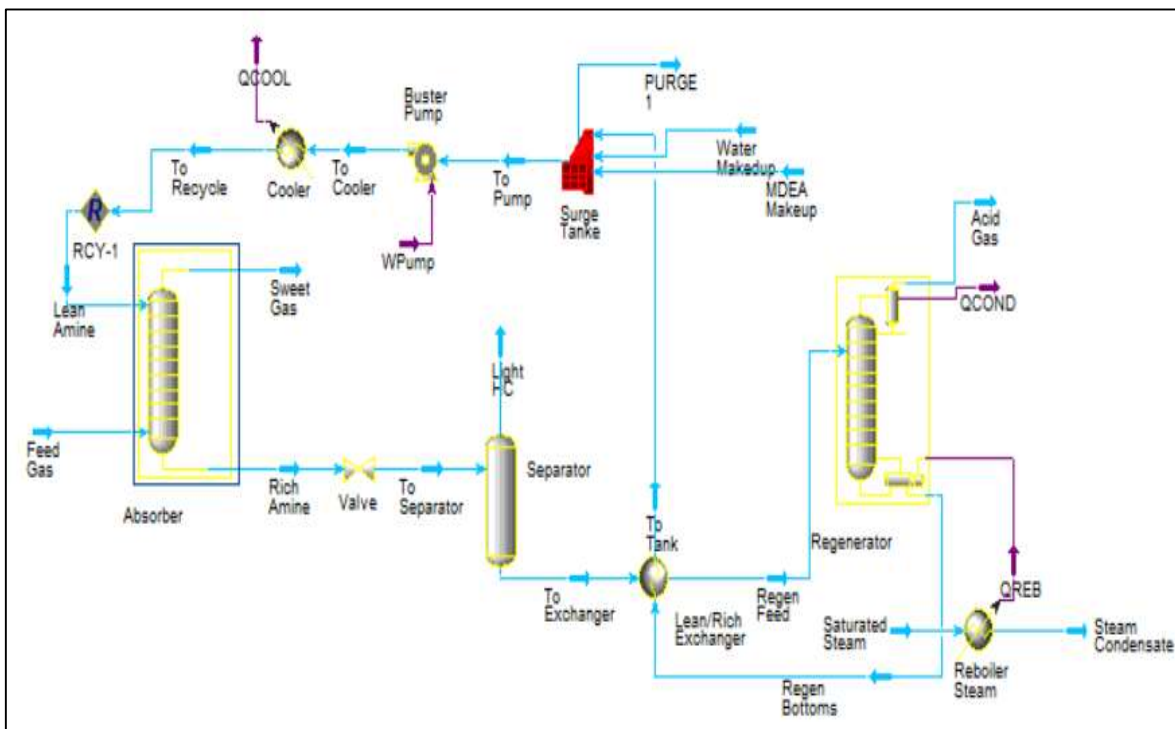


Figura 6-3. Proceso de endulzamiento de gas natural en Aspen HYSYS

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

La simulación consta de los siguientes equipos: columna de absorción o contractor, válvula de expansión, separador, intercambiador de calor, columna de extracción o stripper, mezclador, bombas y un enfriador.

El proceso comienza con un gas de entrada, denominado gas amargo, que ingresa por la parte inferior a la primera torre llamado absorbedor o contractor, en este equipo el gas es inducido a fluir hacia arriba a contracorriente de la solución de MDEA que ingresa por la parte superior del absorbedor, al entrar en contacto la amina absorbe los gases ácidos que están presentes en el gas natural, el gas que sale del absorbedor por la parte superior se denomina gas dulce, debido a que sus impurezas fueron removidas. Por otro lado, la solución de amina rica que sale por la parte inferior se transporta hacia un tanque flash, aquí alguna cantidad de gases serán liberados de forma instantánea por la parte superior del tanque, mientras que, por la parte inferior la solución de amina rica va a pasar a un intercambiador de calor donde va a ser calentada por la corriente de amina pobre que sale de la torre de extracción o stripper; la corriente llega al stripper por la parte superior y fluye hacia abajo a través de la columna y entra en contacto con el vapor que sale del rehervidor, los gases ácidos y vapor de agua salen por la parte superior de la columna y entran a un circuito de reflujo, donde el agua es condensada y recirculada al contractor y los gases ácidos son liberados.

La amina que sale del rehervidor es una amina pobre ya que los gases ácidos fueron removidos, esta amina es llevada al intercambiador de calor en el cuál va a ser enfriada y va a salir hacia el mezclador, en el cual se agrega agua de compensación para formar la solución de amina que entrará nuevamente al absorbedor; la amina que sale del mezclador es enfriada, con la consideración de que la temperatura de entrada al absorbedor debe ser mayor a la del gas que entra al absorbedor para evitar la formación de hidratos.

Esta corriente es bombeada hacia el absorbedor; se añade la función de reciclo, la cual se utiliza cuando hay una corriente de reflujo en el proceso, donde se usa las condiciones de la corriente asumida y ahí se resuelve el diagrama de flujo hacia la corriente calculada hasta que los valores convergen con la corriente asumida dentro de las tolerancias especificadas (Vera y Valdivia, 2019, pp.44-50).

3.2.2.1. Gas amargo

Tabla 3-3. Composición del gas amargo

COMPOSICIÓN	CANTIDAD	UNIDAD
Metano	0.6931	% mol
Etano	0.1524	% mol

Propano	0.0693	% mol
Isobutano	0.0083	% mol
N-butano	0.0250	% mol
Isopentano	0.0075	% mol
N-pentano	0.0127	% mol
CO₂	0.0110	% mol
H₂S	0.0207	% mol

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.2.2.2. Solución de MDEA pobre a absorbedor

Tabla 4-3. Condiciones de la amina que ingresa al absorbedor

PARÁMETROS	CANTIDAD	UNIDAD
Caudal	16.29	MMSCfD
Temperatura	43.3	°C
Presión	5874.82	kPa
MDEA	0.1102	% mol
Agua	0.8887	% mol
CO₂	0.0001	% mol
H₂S	0.001	% mol

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.2.2.3. Parámetros de funcionamiento de la torre de absorción

Tabla 5-3. Condiciones operativas de la torre de absorción

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	5617.249	kPa
# de etapas	22	-
Etapas de entrada de amina pobre	22	-
Etapas de entrada de gas de alimentación	1	-

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.2.2.4. Parámetros de funcionamiento del intercambiador de calor

Tabla 6-3. Condiciones operativas del intercambiador de calor pobre/rico

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Temperatura de condensador	49.9	°C
Presión de condensador	68.647	kPa
Temperatura de enfriador	40	°C
Presión de enfriador	980.665	kPa

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.2.2.5. Parámetros de funcionamiento de la torre de regeneración

Tabla 7-3. Condiciones operativas de la torre de regeneración

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
# de etapas	22	-
Temperatura inferior	119.4	°C
Temperatura superior	46.12	°C
Presión inferior	179.266	kPa
Presión superior	151.709	kPa
Etapas de alimentación lateral intermedia	3	-

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.2.2.6. Parámetros adicionales para la simulación

Tabla 8-3. Condiciones operativas adicionales para la simulación

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Presión de la válvula	482.585	kPa
Temperatura del enfriador	43.3	°C

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

3.3. Simulación del proceso de endulzamiento de gas natural en DWSIM

Para este apartado se ocupan las condiciones operativas detalladas anteriormente en las Tablas 2-3, 3-3, 4-3, 5-3, 6-3, 7-3 y 8-3, como base para la simulación de endulzamiento de gas natural en el simulador de procesos químicos DWSIM.

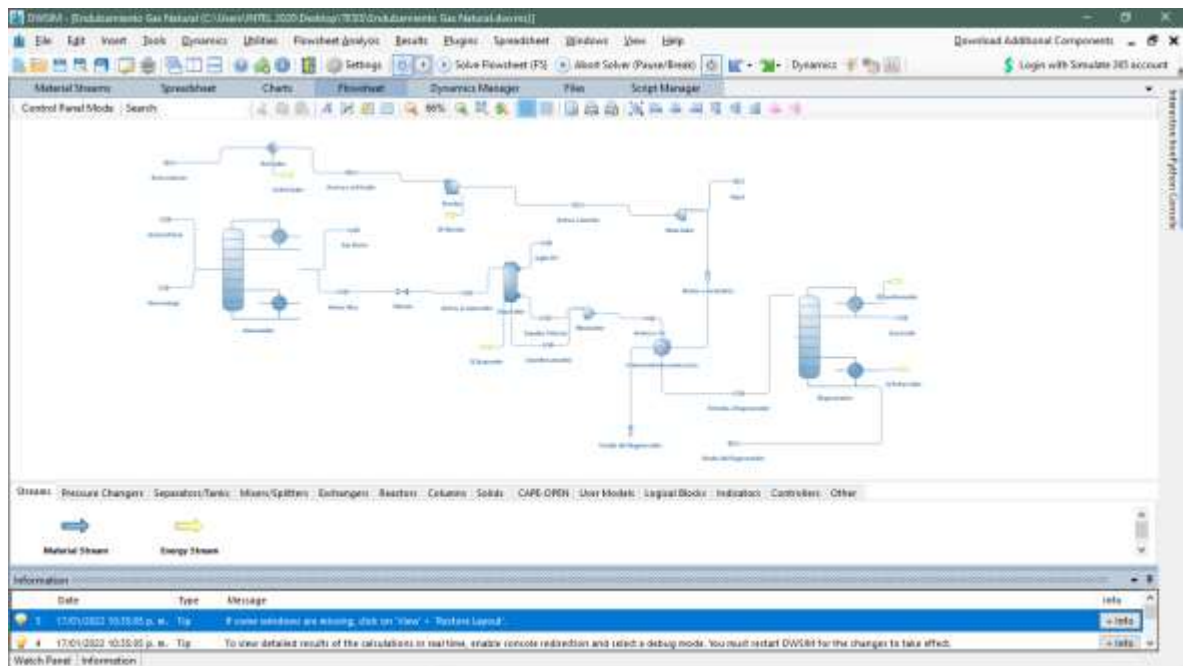


Figura 7-3. Flowsheet de la simulación de endulzamiento de gas

Realizado por: Bastidas, E. 2022

En la simulación del proceso de endulzamiento de gas natural, se emplean dos torres, una torre absorbadora que corresponde al modelo de “ChempSep Column” y una torre de destilación que corresponde al modelo “Distillation Column” de DWSIM, donde se emplean distintos paquetes termodinámicos que permiten una mejor aproximación de los resultados.

La torre de absorción o contactor utiliza el modelo termodinámico EOS / SRK – UMR / IDEAL, en cambio la torre de destilación o regenerador emplea el paquete de propiedades de Peng – Robinson (PR) con el método de resolución Wang – Henke (Bubble Point), todas las líneas de flujo y demás equipos trabajan con el paquete de propiedades de Peng – Robinson (PR).

Tabla 9-3. Parámetros utilizados en la simulación en DWSIM

PARÁMETRO	ENTRADA A ABSORBEDOR		FONDO DE REGENERADOR A INTERCAMBIADOR	MEZCLADOR
	GAS AMARGO	AMINA POBRE		
Presión (kPa)	5689.11	5874.82	179.266	980.881
Temperatura (°C)	35	43.33	172.661	25
Flujo molar de la corriente (kmol/h)	498.045	811.315	808.824	2.491
# de Platos	20	20	-	-
# de Plato de alimentación	20	1	-	-
Metano (%)	0.6931	-	7.6509459E-37	-
Etano (%)	0.1524	-	3.3581602E-37	-
Propano (%)	0.0693	-	6.6699072E-45	-
Isobutano (%)	0.0083	-	6.3251466E-56	-
N-butano (%)	0.0250	-	1.0281499E-16	-
Isopentano (%)	0.0075	-	2.5473761E-62	-
N-pentano (%)	0.0127	-	5.9462014E-63	-
CO₂ (%)	0.0110	0.0001	4.3140868E-09	-
H₂S (%)	0.0207	0.001	5.4360233E-07	-
Agua (%)	-	0.8887	0.88917978	1
MDEA (%)	-	0.1102	0.11081967	-

Fuente: (Vera y Valdivia, 2019).

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Los parámetros establecidos en la Tabla 9-3, son los valores que se ingresa a la simulación para que se ejecute todo el proceso de endulzamiento del gas amargo; la torre de absorción de ChempSep posee variedad de modelos termodinámicos, por lo que se determinó el modelo más adecuado que se mencionó anteriormente, siendo el mismo el más óptimo para el funcionamiento y el que más se ajusta a los resultados.

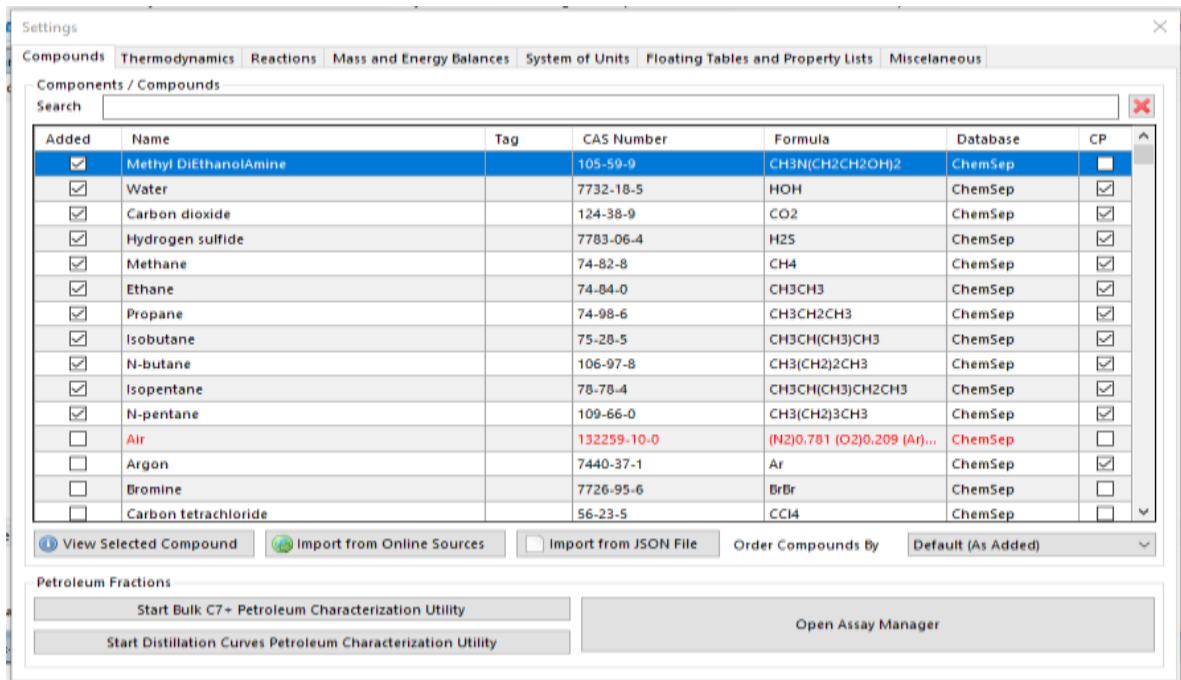


Figura 8-3. Selección de los componentes en DWSIM

Realizado por: Bastidas, E. 2022

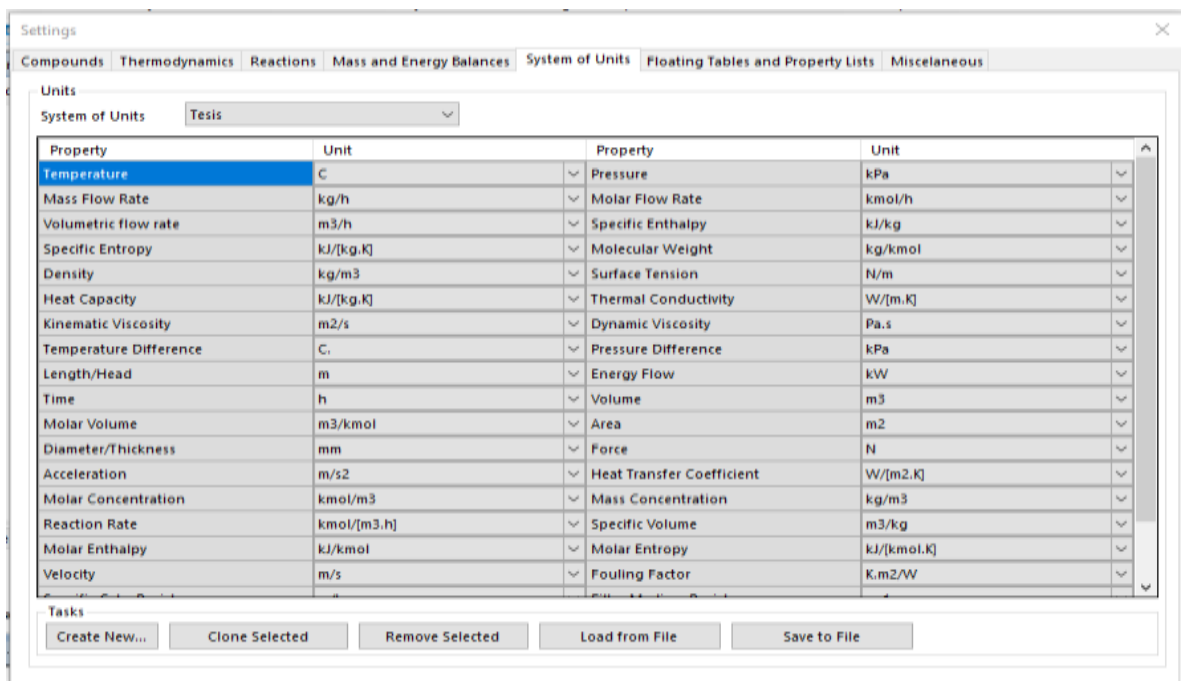


Figura 9-3. Selección de unidades de medida en DWSIM

Realizado por: Bastidas, E. 2022

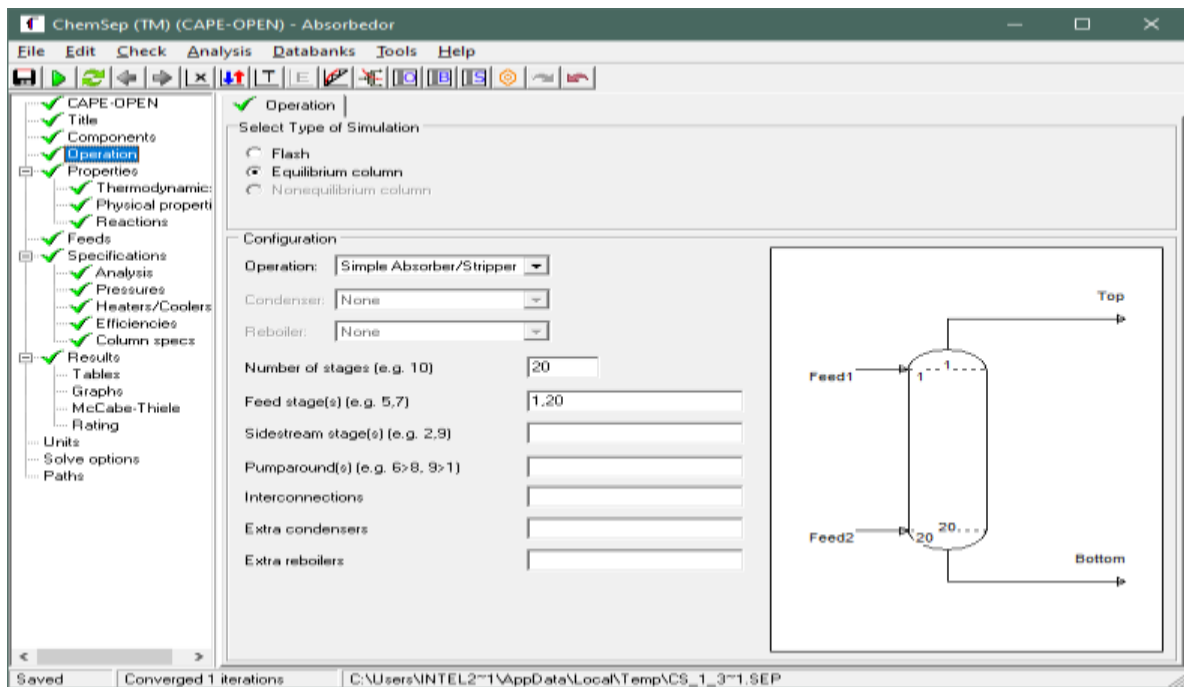


Figura 10-3. Configuración operativa del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

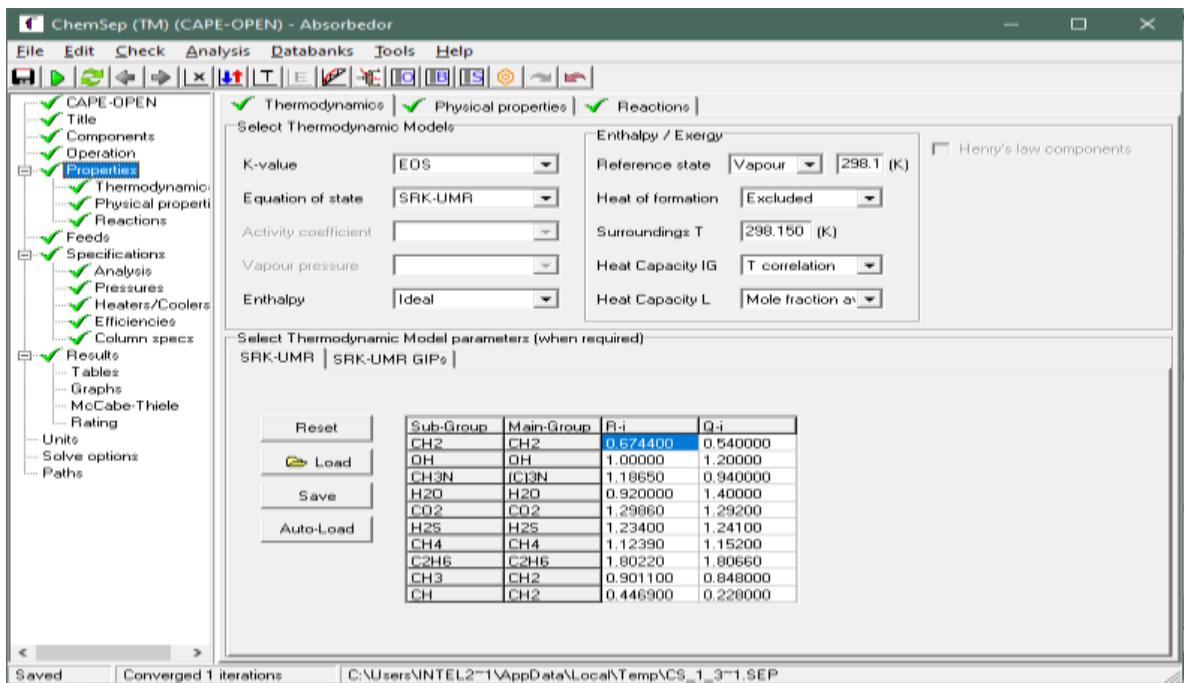


Figura 11-3. Selección del modelo termodinámico del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

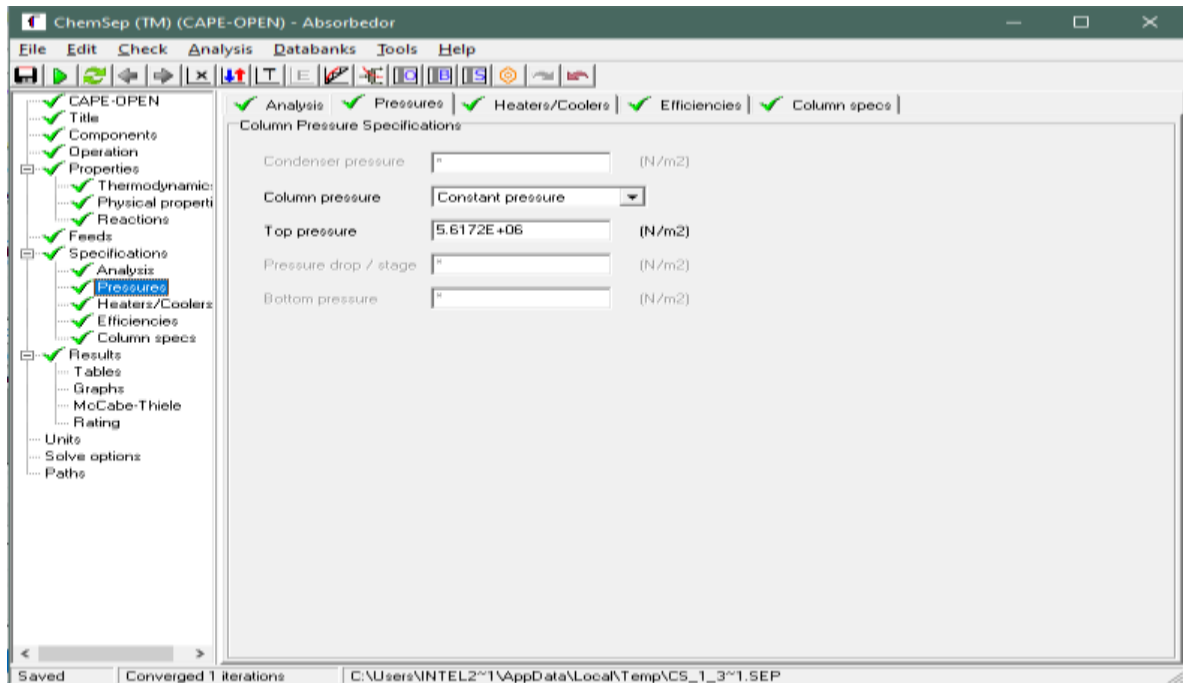


Figura 12-3. Especificación de presión del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

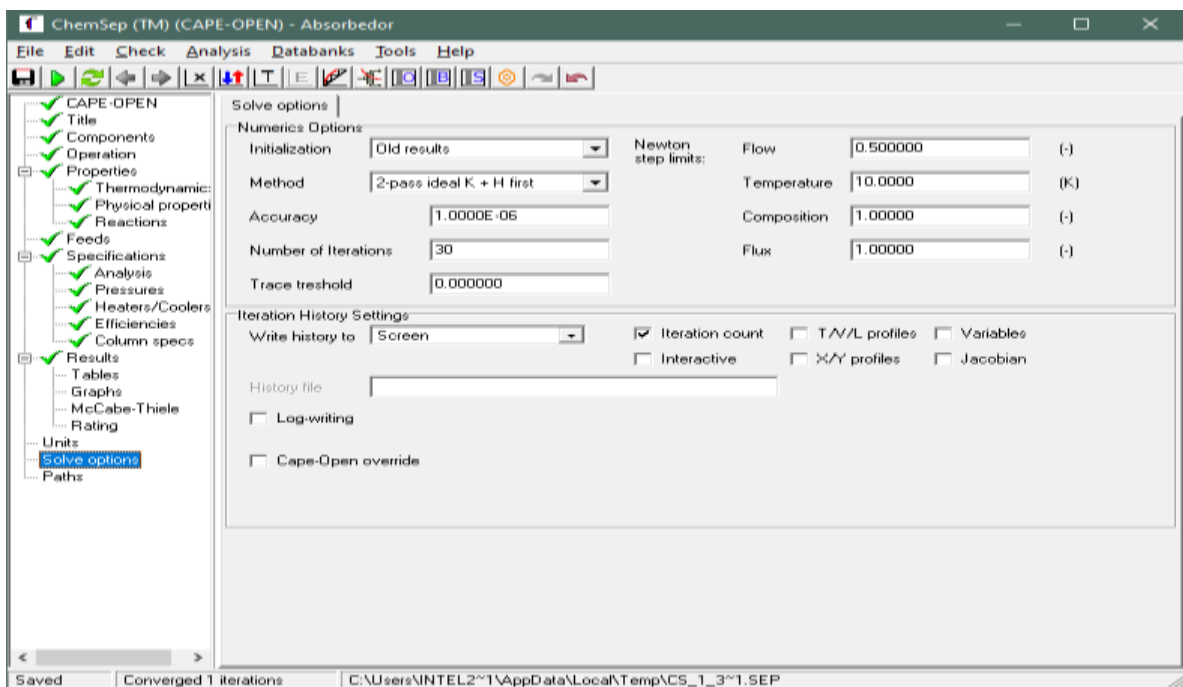


Figura 13-3. Opciones numéricas de solución del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

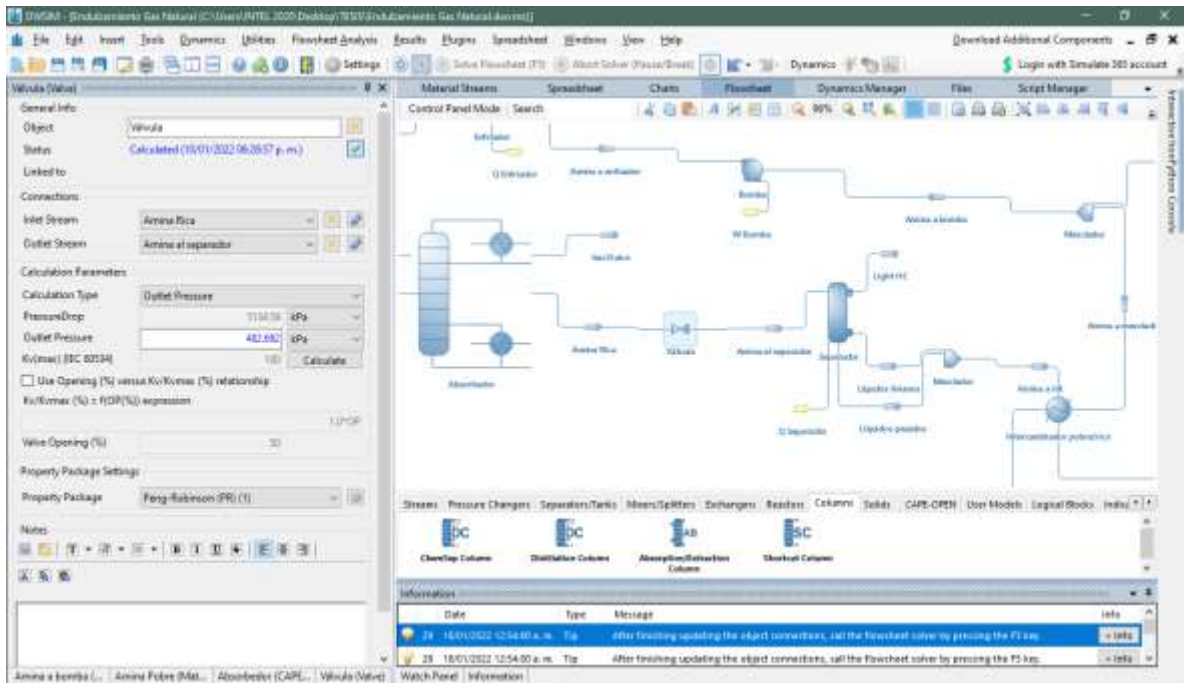


Figura 14-3. Especificaciones de la válvula

Realizado por: Bastidas, E. 2022

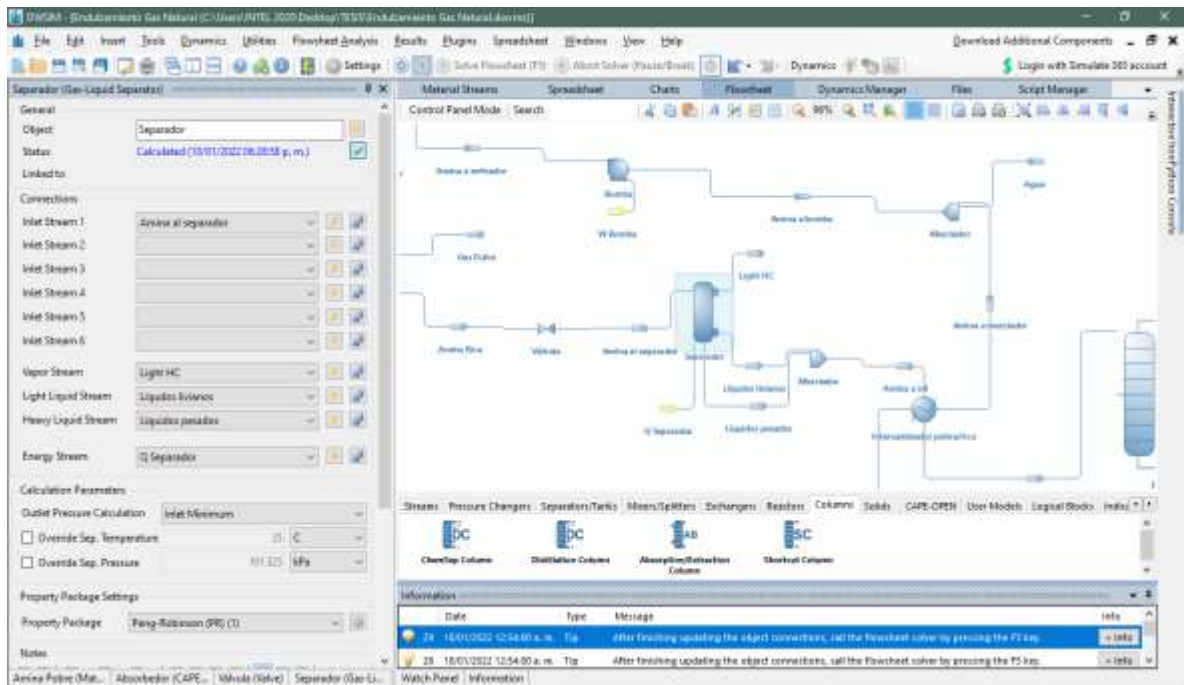


Figura 15-3. Especificaciones del separador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

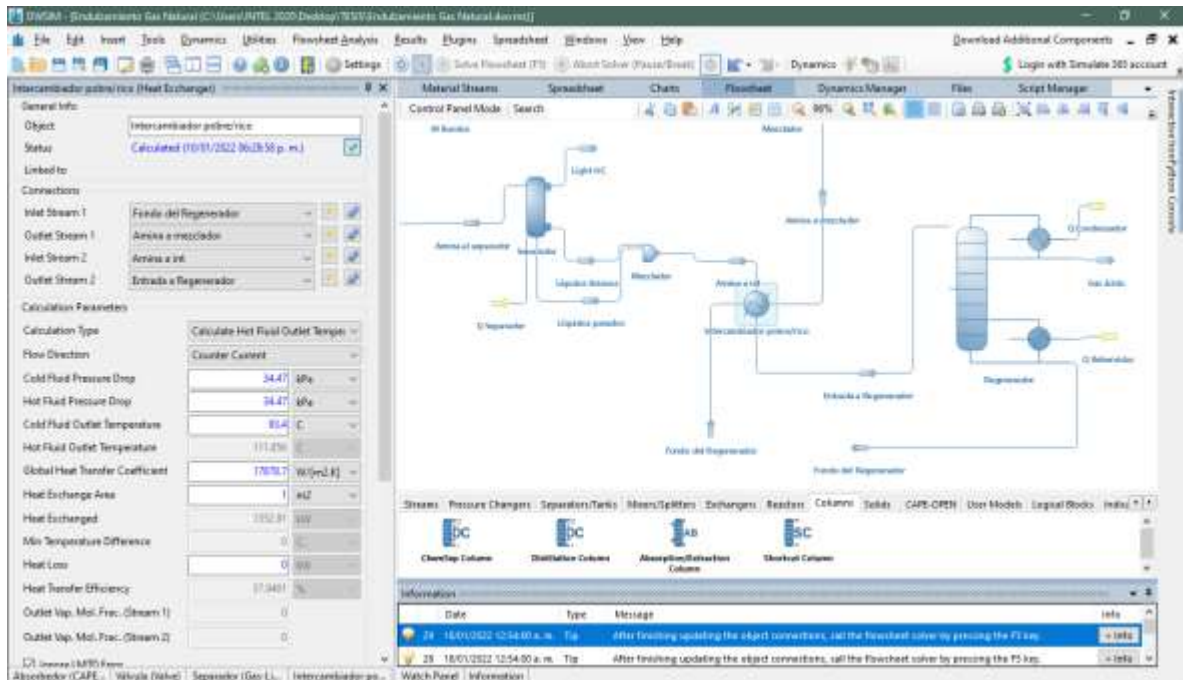


Figura 16-3. Especificaciones del intercambiador pobre / rico

Realizado por: Bastidas, E. 2022

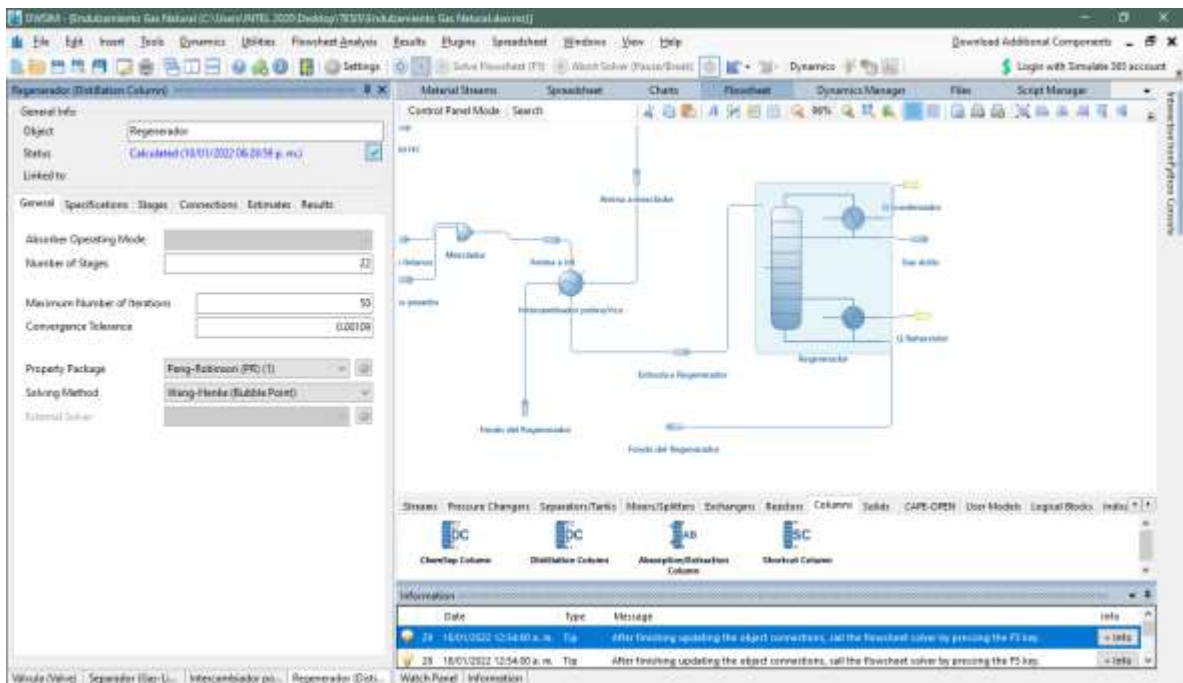


Figura 17-3. Condiciones generales del regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

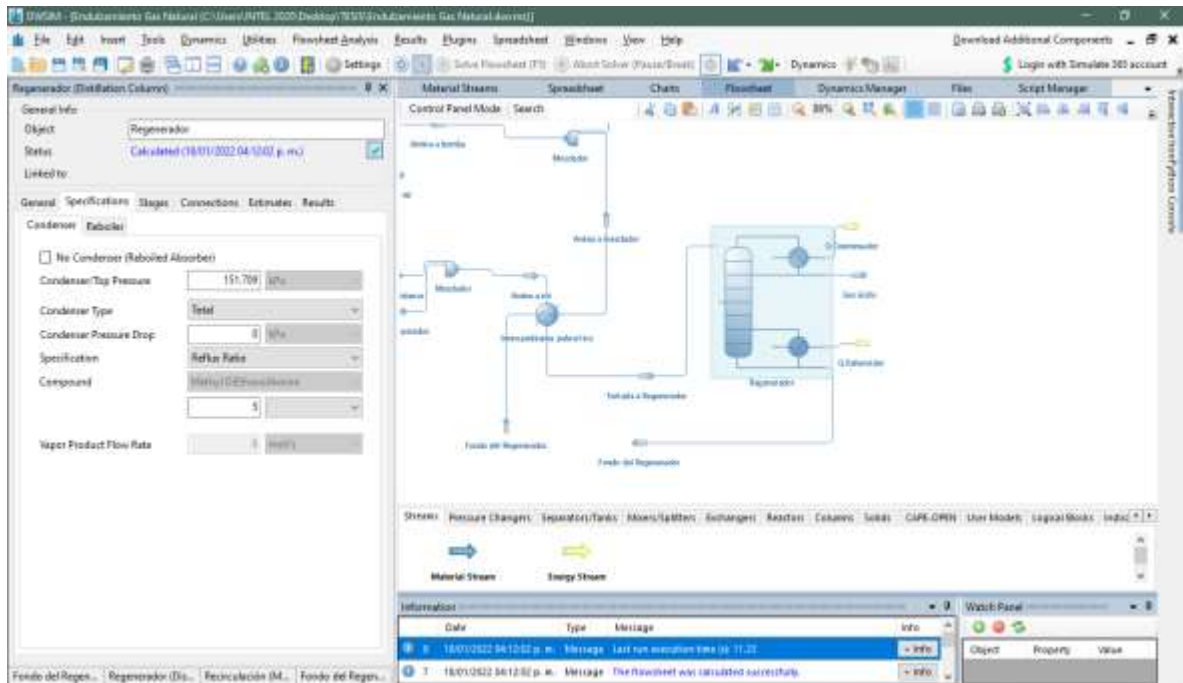


Figura 18-3. Especificación del condensador que posee el regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

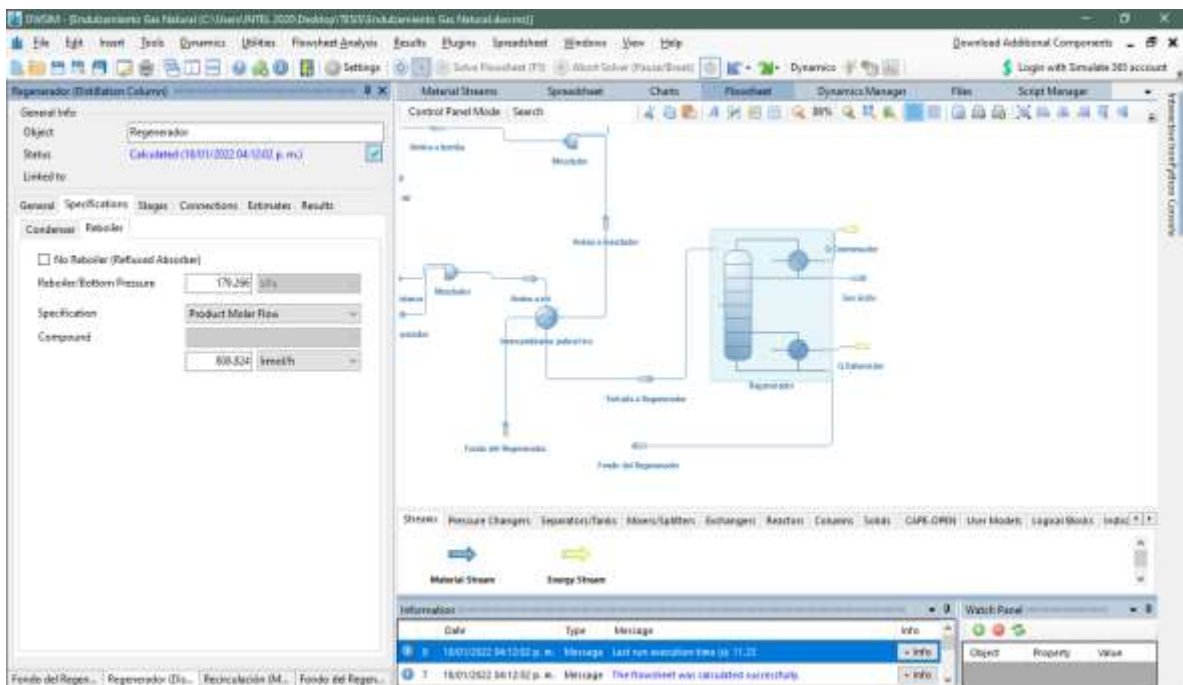


Figura 19-3. Especificación del recalentador que posee el regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

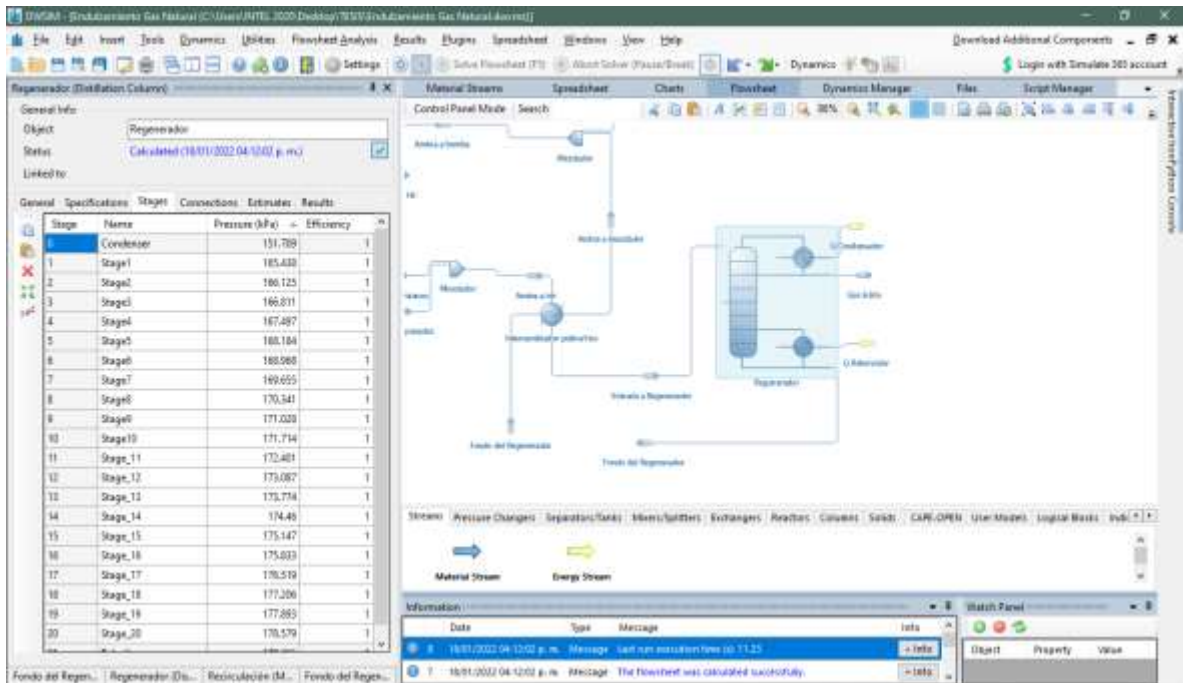


Figura 20-3. Presiones en cada etapa del regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

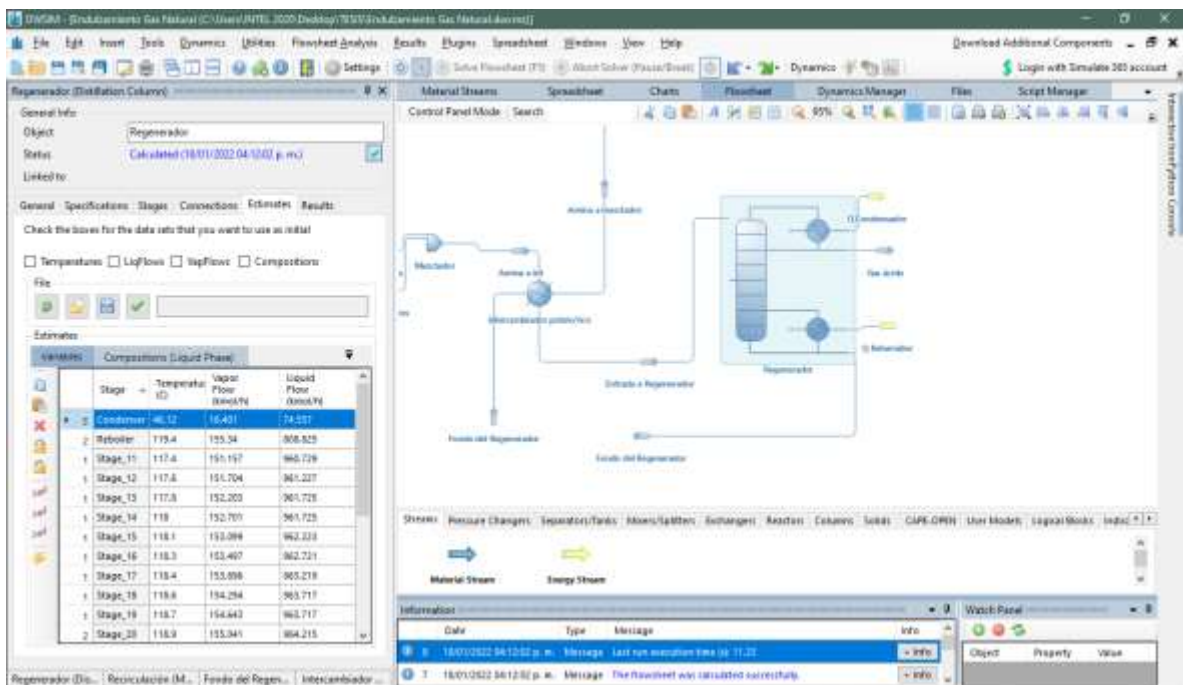


Figura 21-3. Estimaciones del regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

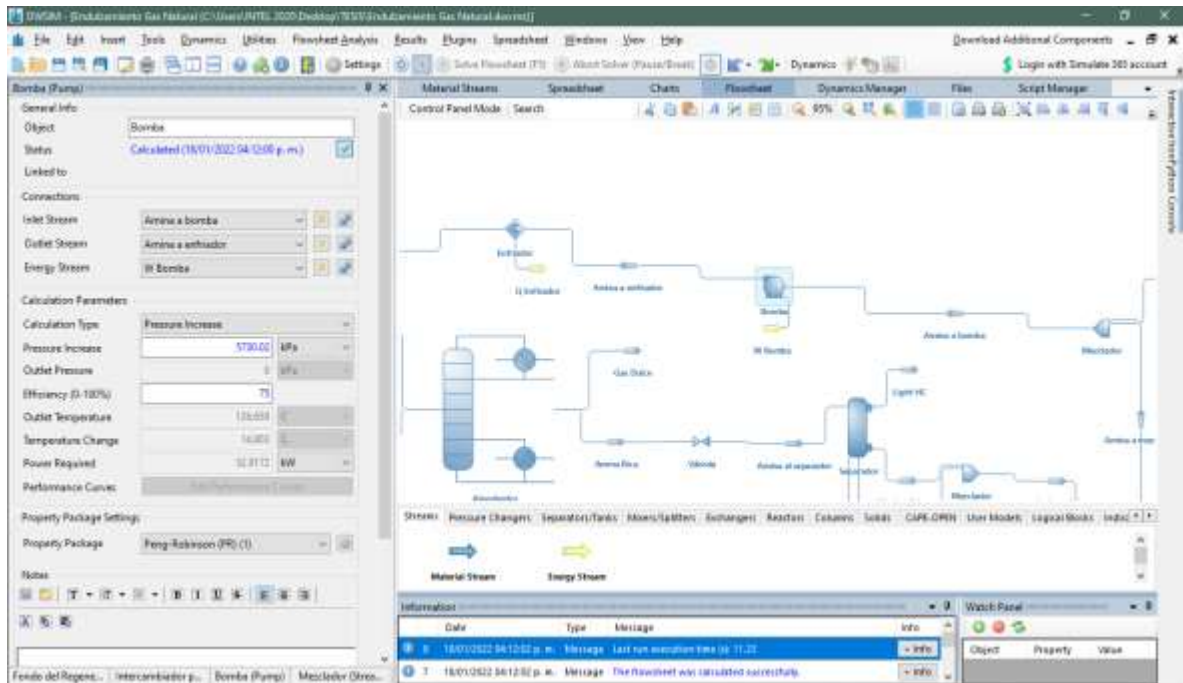


Figura 22-3. Especificaciones de la bomba

Realizado por: Bastidas, E. 2022

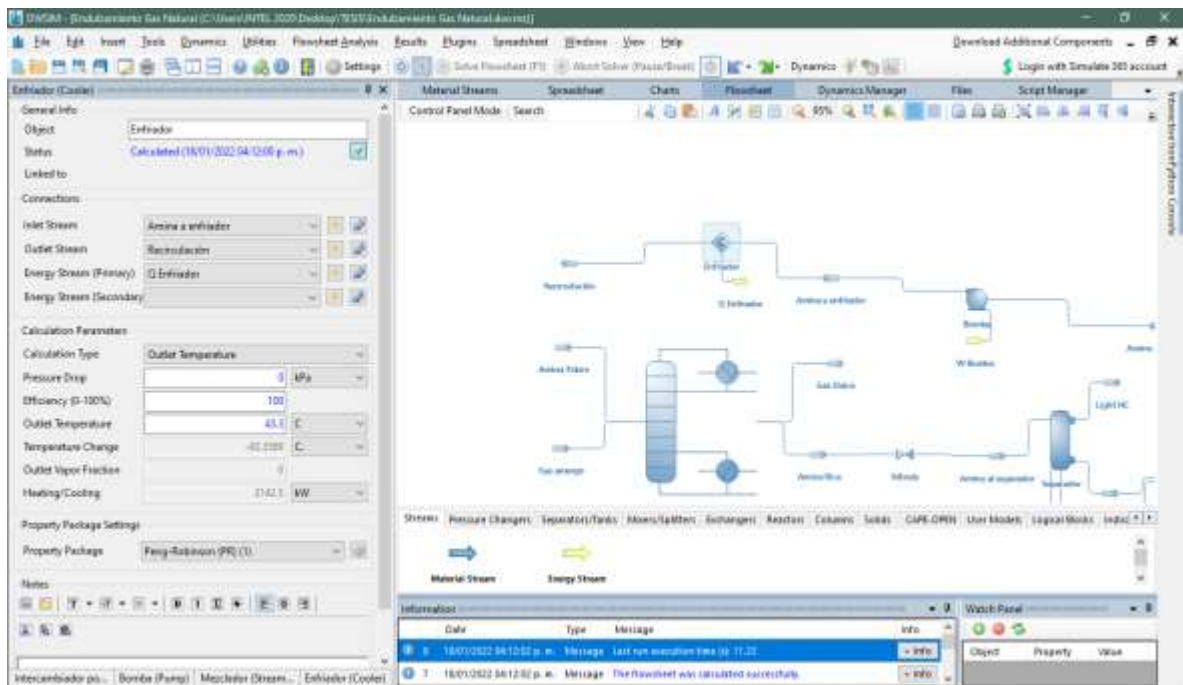


Figura 23-3. Especificaciones del enfriador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

3.4. Validación de los resultados de la simulación

La validación de la simulación del proceso de endulzamiento se realiza con la finalidad de asegurar la confiabilidad de los resultados, comparando los mismos con los valores definidos en bibliografía como fracción molar, temperatura presión, etc.

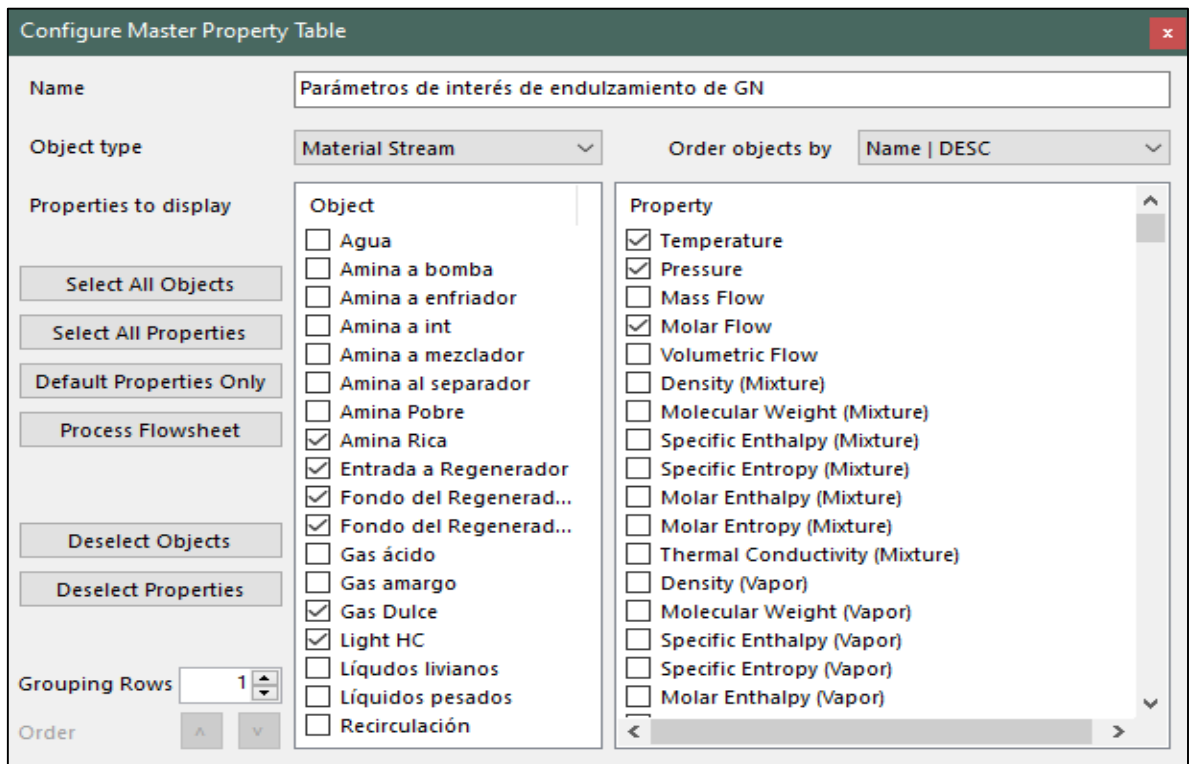


Figura 24-3. Tabla maestra de propiedades de DWSIM

Realizado por: Bastidas, E. 2022

DWSIM da la facilidad de insertar tablas con los parámetros de cada corriente, seleccionando los más importantes para la validación de los resultados, como son: temperatura, presión, flujo molar y las fracciones molares de los componentes que intervienen en el proceso de endulzamiento de gas.

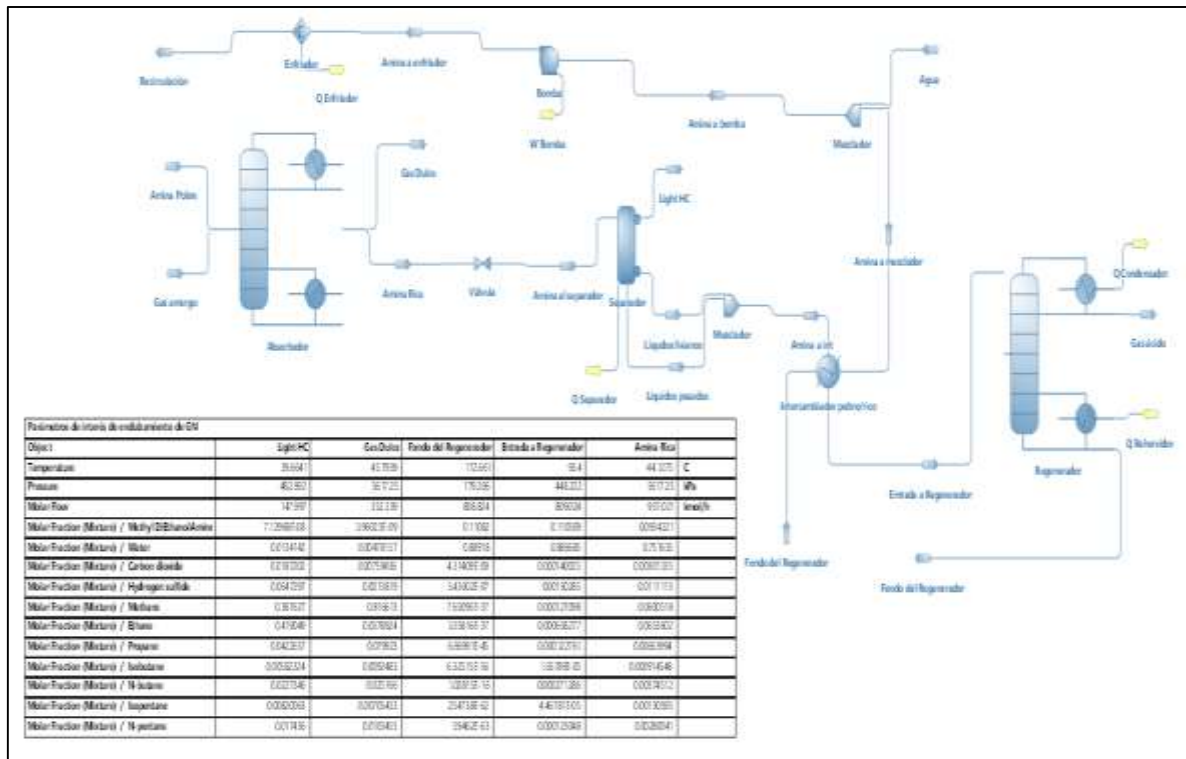


Figura 25-3. Simulación de DWSIM con sus resultados

Realizado por: Bastidas, E. 2022

3.5. Procesamiento de datos

Ya completada la simulación y realizada la validación de los resultados del proceso de endulzamiento de gas natural, se genera una base de datos para diseñar la RNA ejecutando 150 repeticiones de la simulación con una variación de los parámetros que conforman las entradas de la RNA.

Tabla 10-3. Parámetros de entrada a la RNA

ENTRADA			
Parámetros	Temperatura	Presión	Flujo Molar
Detalle	°C	kPa	kmol/h
Identificación	T	P	F

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Tabla 11-3. Parámetros de salida de la RNA

SALIDA		
Ubicación	Absorbedor	
	Gas dulce	
Fracciones molares	Dióxido de carbono	Ácido sulfhídrico
Identificación	CO ₂	H ₂ S

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Consideraciones:

- Es importante tener en cuenta la formación de espuma o hidratos en el absorbedor ya que si esto ocurriera se produce una caída de presión en el absorbedor, reduciendo la capacidad de tratamiento del gas y la eficiencia de endulzamiento; por ello es necesario que la temperatura de la amina pobre que entra al absorbedor sea mayor a la temperatura de entrada del gas amargo; entonces el rango de temperatura del gas amargo varía entre 20 – 42 °C.
- La solución de amina va relacionada con la solución que ingresa de gas amargo, por lo que, si el flujo de gas excede la de la solución de amina, esto conllevaría a un aumento de la corriente de amina y esto generaría un aumento en el coste energético del proceso; entonces el rango de flujo molar de gas amargo varía entre 420 – 755 kmol/h.

Tabla 12-3. Restricciones para las entradas de la RNA

RESTRICCIÓN			
Parámetros	Temperatura	Presión	Flujo Molar
Detalle	°C	kPa	kmol/h
Rango	20-42	5600-5800	420-755

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Tabla 13-3. Base de datos obtenidos para la RNA

GAS AMARGO			CONCENTRACIONES FINALES	
Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujo molar (kmol/h)	CO₂	H₂S
37	5770	548	0.0080467270	0.0013921072
31	5725	503	0.0075481464	0.0013749543
36	5604	547	0.0080263151	0.0013914251
31	5677	729	0.0089334444	0.0024351055

33	5669	716	0.0088609599	0.0020756465
22	5665	551	0.0078561954	0.0013683279
29	5793	602	0.0083473419	0.0014308830
24	5732	672	0.0086215241	0.0015599811
38	5711	559	0.0081381354	0.0013981891
25	5628	536	0.0078107663	0.0013732497
41	5709	608	0.0084803729	0.0014698127
33	5608	627	0.0084748653	0.0014779131
35	5787	555	0.0080654862	0.0013920872
27	5729	480	0.0073222524	0.0013772959
25	5789	639	0.0084797198	0.0014647665
29	5611	509	0.0076710925	0.0013798382
24	5766	548	0.0078815315	0.0013723245
22	5633	464	0.0069602160	0.0013719096
24	5762	566	0.0080164930	0.0013762784
28	5662	468	0.0072107402	0.0013800289
25	5680	658	0.0085741078	0.0015242201
40	5657	461	0.0072642989	0.0013853443
26	5678	575	0.0081233759	0.0013868789
33	5655	674	0.0086965750	0.0016912106
41	5606	632	0.0086061604	0.0015507159
30	5633	428	0.0066980408	0.0013882136
21	5621	673	0.0085724727	0.0015046491
27	5637	466	0.0071558658	0.0013787376
36	5694	505	0.0076805281	0.0013834536
42	5714	508	0.0077864599	0.0013840382
33	5763	460	0.0071165422	0.0013812587
30	5775	642	0.0085740507	0.0015581252
27	5703	555	0.0080033066	0.0013818343
36	5600	532	0.0079116198	0.0013867597
28	5651	755	0.0089870805	0.0025817179
34	5688	533	0.0078817518	0.0013825919
21	5667	646	0.0084396314	0.0014344541
31	5669	733	0.0089465935	0.0024960156
34	5696	683	0.0087459413	0.0017928255
30	5760	429	0.0067134771	0.0013879991
30	5778	561	0.0081052471	0.0013947345
35	5780	529	0.0078676071	0.0013840595
27	5782	719	0.0088555717	0.0020287557
32	5791	567	0.0080947430	0.0013875753
34	5798	614	0.0084179158	0.0014554236

37	5717	538	0.0079716432	0.0013885074
39	5623	633	0.0085854442	0.0015487308
35	5604	452	0.0070714881	0.0013852676
29	5619	653	0.0086128747	0.0015886509
31	5667	489	0.0075227816	0.0013833897
37	5679	601	0.0083893733	0.0014480598
38	5627	612	0.0084635900	0.0014748911
34	5650	653	0.0086161385	0.0015943253
28	5751	487	0.0074268368	0.0013783915
20	5785	551	0.0078013505	0.0013640726
41	5694	656	0.0087193848	0.0016834180
22	5622	542	0.0077842831	0.0013675605
30	5656	522	0.0078076131	0.0013828217
28	5789	526	0.0077962426	0.0013786492
32	5800	462	0.0071125718	0.0013795781
20	5710	665	0.0085141608	0.0014649620
30	5635	616	0.0084423587	0.0014702624
30	5700	576	0.0082060298	0.0014057424
29	5750	425	0.0066055601	0.0013871311
22	5706	626	0.0083526050	0.0014108256
36	5648	624	0.0085011367	0.0015064359
36	5621	607	0.0084101424	0.0014593518
23	5601	533	0.0077353415	0.0013690445
30	5747	729	0.0089238014	0.0023609675
21	5616	735	0.0088270723	0.0018646406
24	5737	519	0.0076361965	0.0013704996
22	5775	651	0.0084843385	0.0014559892
35	5664	644	0.0085866716	0.0015719261
25	5732	421	0.0063590510	0.0013820051
41	5691	657	0.0087238502	0.0016903281
38	5761	673	0.0087544346	0.0017947783
32	5724	668	0.0086564654	0.0016239234
25	5608	688	0.0087082009	0.0016743304
24	5770	687	0.0086869780	0.0016350011
35	5636	696	0.0088088040	0.0019627536
30	5726	686	0.0087672342	0.0018523258
41	5739	453	0.0071750069	0.0013862154
32	5679	696	0.0087740036	0.0018230843
40	5690	596	0.0083993861	0.0014422493
39	5797	648	0.0086573467	0.0016232783
24	5784	586	0.0081531231	0.0013848956

42	5792	443	0.0070497568	0.0013874582
30	5770	746	0.0089783417	0.0026169799
30	5789	594	0.0083170008	0.0014265347
26	5747	433	0.0066292493	0.0013816935
31	5616	635	0.0084853569	0.0014741914
35	5760	732	0.0089350615	0.0024154598
40	5620	663	0.0087374971	0.0017279506
21	5702	637	0.0083917627	0.0014186841
35	5670	747	0.0089833888	0.0026523553
26	5658	676	0.0086720018	0.0016320475
39	5731	626	0.0085502459	0.0015209740
21	5723	582	0.0080578367	0.0013724724
23	5786	517	0.0075896896	0.0013687501
30	5615	539	0.0079454051	0.0013860412
40	5647	742	0.0090283161	0.0027255392
37	5715	438	0.0069081306	0.0013880977
31	5776	436	0.0066951796	0.0013817561
29	5628	569	0.0081423625	0.0013957078
41	5654	600	0.0084353813	0.0014513916
39	5684	746	0.0090281149	0.0027723991
22	5665	603	0.0082182166	0.0013874828
40	5766	703	0.0088969860	0.0021355692
20	5640	683	0.0085983062	0.0015207600
22	5620	704	0.0087251846	0.0016755263
37	5611	691	0.0088137392	0.0019594026
24	5764	619	0.0083535160	0.0014163248
39	5734	566	0.0081988557	0.0014035833
20	5782	600	0.0081517809	0.0013767033
38	5615	493	0.0075920364	0.0013834026
32	5775	559	0.0080386229	0.0013841485
25	5650	428	0.0064978864	0.0013810791
35	5771	715	0.0088772439	0.0021801133
21	5764	594	0.0081372596	0.0013774559
34	5621	494	0.0075331079	0.0013803417
39	5795	476	0.0074269683	0.0013840889
35	5671	510	0.0077065362	0.0013821994
33	5607	497	0.0075399346	0.0013786041
36	5610	646	0.0086092874	0.0015995257
27	5677	733	0.0089048339	0.0021953172
20	5655	563	0.0078991644	0.0013656923
34	5791	434	0.0067675121	0.0013860756

41	5691	556	0.0081561261	0.0013974801
20	5670	575	0.0079852816	0.0013677676
40	5645	600	0.0084225020	0.0014500361
42	5600	640	0.0086579826	0.0015922287
31	5671	438	0.0068917820	0.0013880887
23	5620	723	0.0088151401	0.0018575583
32	5677	642	0.0085352672	0.0015089984
23	5737	580	0.0080913943	0.0013782151
41	5782	578	0.0083029117	0.0014164235
30	5621	483	0.0074376561	0.0013820982
29	5688	554	0.0080372006	0.0013878388
37	5658	744	0.0089967518	0.0026956689
40	5767	591	0.0083698971	0.0014335675
25	5719	545	0.0078823758	0.0013742583
23	5738	565	0.0079860845	0.0013731932
24	5780	613	0.0083191181	0.0014083840
32	5720	629	0.0084686321	0.0014696826
38	5645	543	0.0080227135	0.0013903770
40	5677	688	0.0088403935	0.0019576409
20	5630	566	0.0079193901	0.0013659567
27	5705	454	0.0069955495	0.0013801612
34	5640	451	0.0070278660	0.0013839202
36	5608	540	0.0079738857	0.0013889164

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

De la base de datos diseñada para la RNA, los 130 primeros datos se ocuparán para el diseño, entrenamiento y aprendizaje de la RNA; por tanto, los últimos 20 datos resaltados son destinados para la validación externa, con el fin de corroborar el funcionamiento de la RNA.

3.6. Diseño de la RNA

El diseño de la red neuronal artificial (RNA) se basa en tres parámetros de entrada: temperatura, presión y flujo molar del gas amargo que ingresa al absorbedor; en cuanto a los parámetros de salida corresponden a las fracciones molares de CO₂ y H₂S presentes en el gas dulce, tal y como se especifica en las Tablas 10-3 y 11-3.

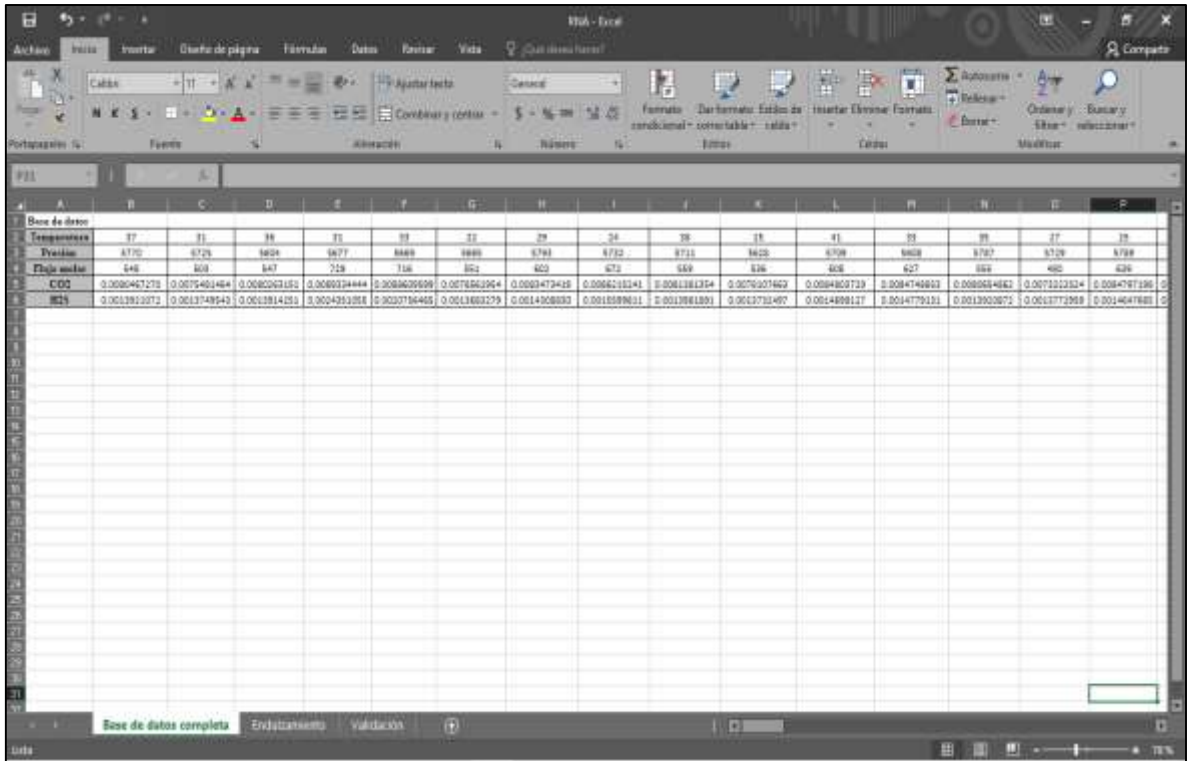


Figura 26-3. Matriz de datos para RNA en Excel

Realizado por: Bastidas, E. 2022

3.7. Entrenamiento de los datos

Para el entrenamiento de la red neuronal, MATLAB facilita tres algoritmos: Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient; cabe recalcar que en un 90% Levenberg-Marquardt suele ser el algoritmo más utilizado, sin embargo, la presente RNA está diseñada con el algoritmo Bayesian Regularization empleando un total de 170 neuronas ocultas.

En algunas aplicaciones la red neuronal puede caer en un problema denominado sobre-entrenamiento, consecuente de esto el error de test de la red es mucho mayor que del entrenamiento; es por eso que Bayesian Regularization minimiza este fenómeno y sus efectos, garantizando su adecuado aprendizaje (Bayesiano et al., 2009, pp.2-3).

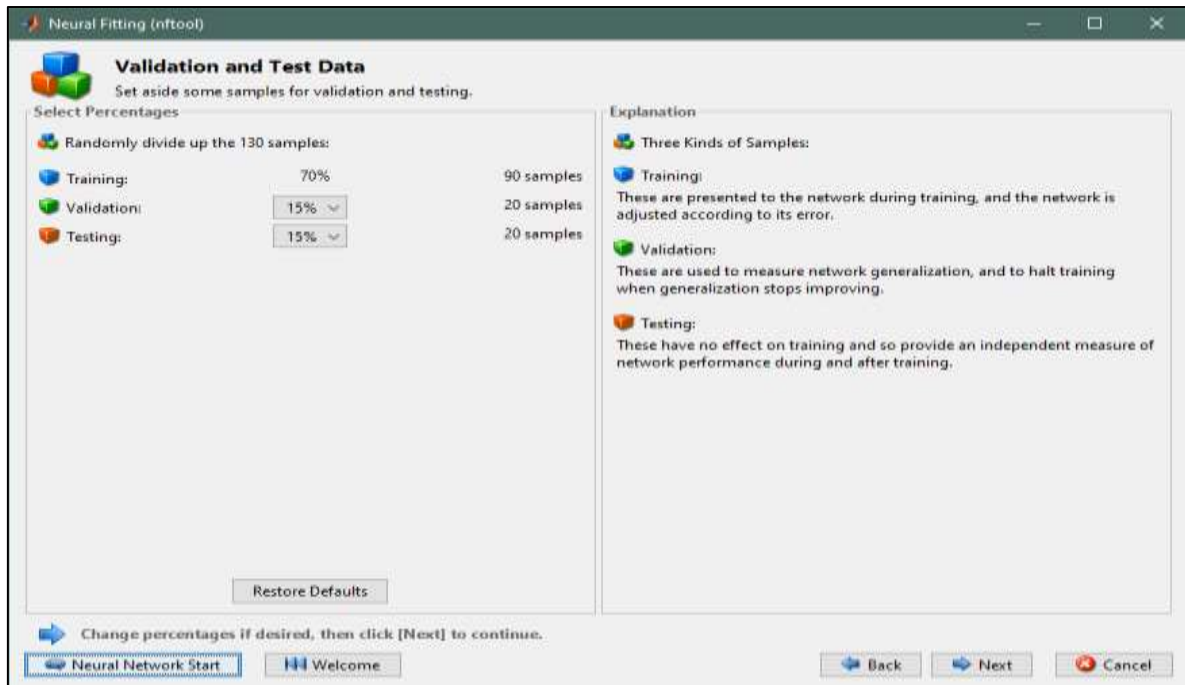


Figura 27-3. Datos de validación y prueba de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

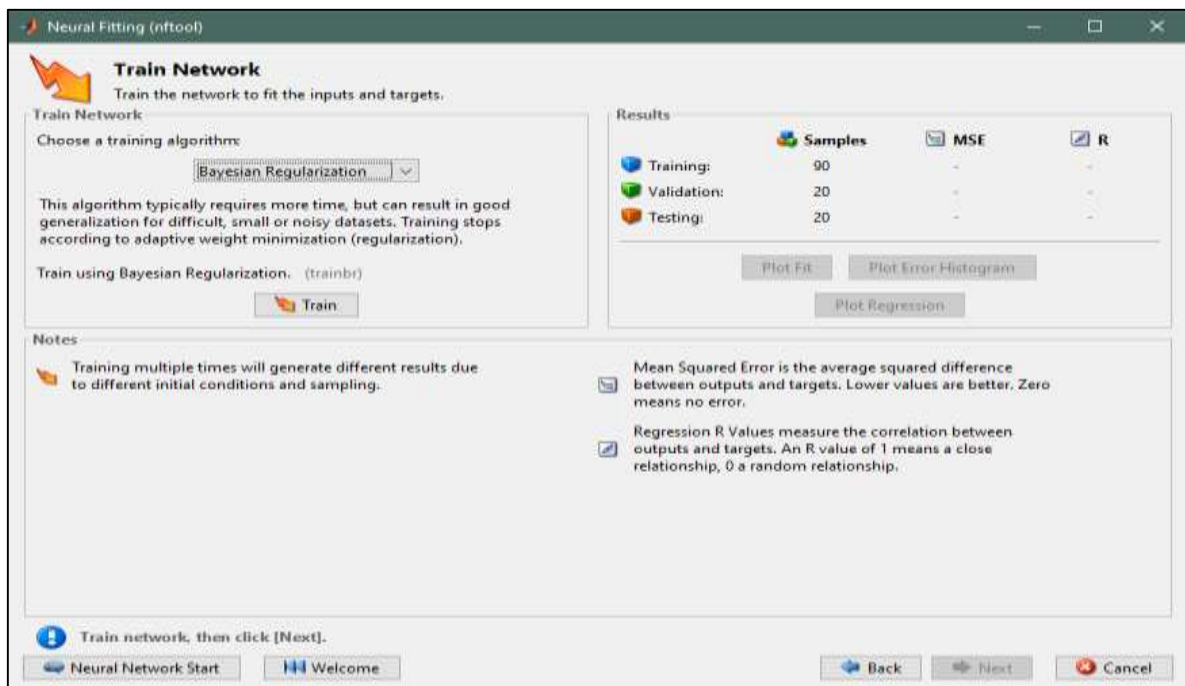


Figura 28-3. Algoritmo de entrenamiento de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

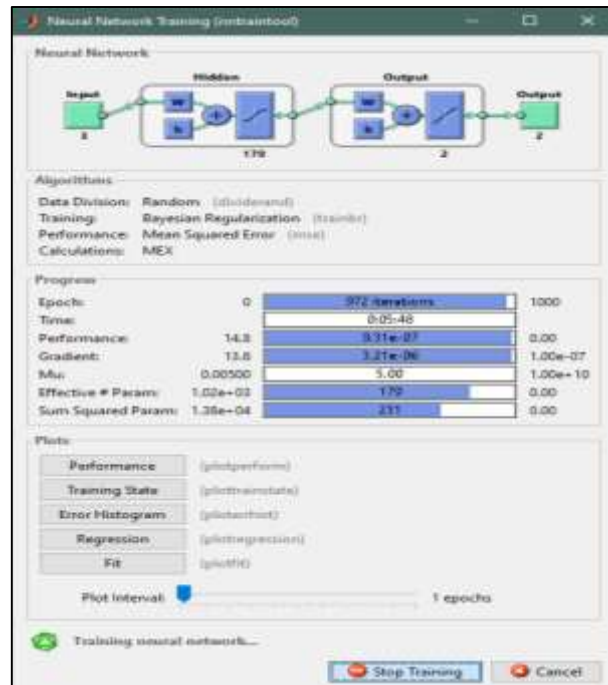


Figura 29-3. Entrenamiento de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

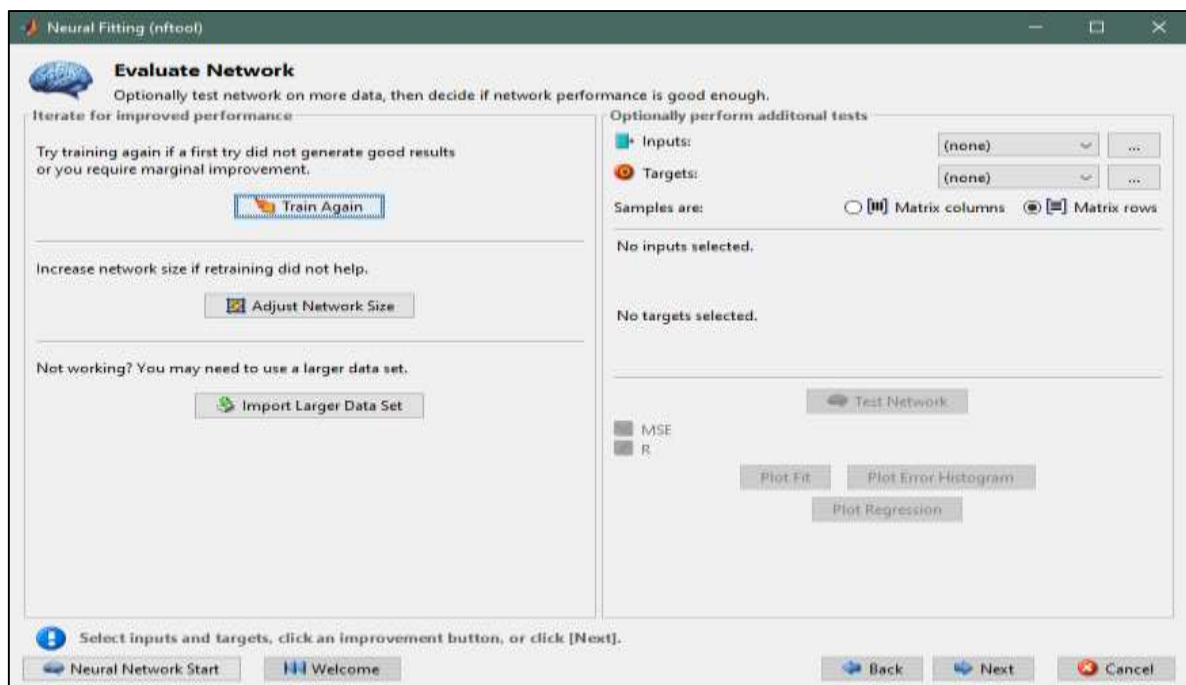


Figura 30-3. Evaluación de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Para un mejor procesamiento de los resultados es importante normalizar los datos de entrada y salida, que MATLAB con el comando “normalize” lo genera inmediatamente, con la finalidad de que la red neuronal trabaje en un rango de valores de 0-1, para tener una mejor aproximación de los resultados; sin embargo, la fórmula para normalizar los datos, es:

(Ec 3-3)

$$x' = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}$$

Donde:

x': valor normalizado

x: valor a normalizar

x_{max}: valor máximo

x_{min}: valor mínimo

3.8. Validación de los resultados de la RNA

Una vez entrenada la RNA, es necesario validar la misma para demostrar la confiabilidad de la predicción de las fracciones molares de CO₂ y H₂S en el proceso de endulzamiento de gas natural, para ello se empleará el MSE y regresión que se generan en MATLAB.

En cuanto al diseño de la RNA y el número total de datos utilizados, el entrenamiento emplea el 70% para la base del aprendizaje de la red, la prueba ocupa el 15% para medir la generalización de la res, y por último la validación manipula el 15% que falta para proporcionar una medida independiente sobre el rendimiento de la RNA.

Como MATLAB no realiza una validación interna de las predicciones de la RNA diseñada, por lo cual, se realiza una validación externa donde se ingresarán 20 datos adicionales de los parámetros de entrada de temperatura, presión y flujo molar de gas amargo, de forma que, los resultados de la validación se compararán con los resultados obtenidos de la simulación en DWSIM, comprobando así el funcionamiento correcto de la RNA que fue diseñada con el algoritmo de Bayesian Regularization.

3.9. Análisis Estadístico

Este análisis consiste en comparar los valores de fracción molar de interés, CO₂ y H₂S, obtenidos de simulación en DWSIM y los valores predichos por la RNA diseñada en MATLAB.

La evaluación de los resultados se realiza con el programa estadístico Statgraphics Centurion XVI, empleando las siguientes pruebas estadísticas:

- **ANOVA:** Es una técnica estadística empleada, su procedimiento implica la separación de la variación total observada en los datos en componentes individuales atribuibles a diversos factores, así como los causados por aleatoriedad; también permite realizar pruebas de hipótesis de significación para determinar qué factores influyen en el resultado del experimento.

La metodología del ANOVA es un medio para estructurar los datos y su validación a las fuentes de variabilidad de forma que se recupere la que la homogeneidad se recupera en subconjuntos de sujetos y la heterogeneidad se atribuya a los factores pertinentes.

El método ANOVA se basado en el uso de sumas de cuadrados de la desviación de las observaciones respecto a las respectivas medias (→ Modelo lineal) (Henson, 2015, p.1).

- **Prueba de Kruskal-Wallis:** Es un procedimiento no paramétrico, similar al ANOVA, donde las hipótesis que considera son:

H₀: Medias o medianas de los n grupos donde todas son iguales.

H₁: Existen diferencias al menos en una de las medias o medianas.

Esta prueba proporciona información sobre la posible igualdad de medias o medianas entre grupos y permite rechazar la hipótesis de igualdad cuando el valor de p sea mayor a 0.05.

Para hacer uso de esta prueba se debe conocer qué tipo de variable se va a comparar, ya sea cuantitativa o cualitativa, si la variable es cuantitativa se debe determinar si los datos que se van a estudiar cumplen con los criterios de pertenencia a una distribución normal (López, 2013, p.166).

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Presupuesto

Tabla 14-4. Matriz de Presupuesto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Internet e investigación	\$30	X	
Impresión del proyecto final	\$35	X	
Copias adicionales	\$25	X	
Empastado	\$50	X	
TOTAL		\$140	

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

4.2. Requerimientos de tecnología, equipos y maquinaria

El presente trabajo de integración curricular se elabora mediante la aplicación del computador y softwares:

- Computador Lenovo IdeaPad S145-15API, procesador AMD Ryzen 5 3500U 2.1GHz.
- Software DWSIM 6.7.0
- Software MATLAB 9.6.0.1072779

4.3. Cronograma

Tabla 15-4. Cronograma del Trabajo de Integración Curricular

ACTIVIDAD	PERIODO ACADÉMICO																													
	OCTUBRE				NOVIEMBRE				DICIEMBRE				ENERO				FEBRERO				MARZO									
	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 y de datos de la simulación base																														
Desarrollo del anteproyecto																														
Elaboración de la introducción y marco teórico																														
Simulación en DWSIM del proceso de endulzamiento de gas natural																														
Obtención de datos experimentales																														
Diseño y entrenamiento del RNA																														
Validación y eficiencia de los datos obtenidos por la RNA																														
Estudio técnico y económico																														
Redacción del trabajo final																														

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

4.4. Discusión y análisis de resultados

4.4.1. Informe de resultados de la simulación en DWSIM

La Figura 23-4 representa la simulación completa del proceso de endulzamiento de gas natural, realizada en el software libre para procesos químicos DWSIM.

Respecto al proceso de endulzamiento de gas de referencia, la presente simulación presenta ciertos cambios, como la adición de un mezclador después del separador, con la finalidad de combinar los líquidos pesados y livianos para pasar al siguiente proceso, además de que se emplea un intercambiador de calor con la propiedad de calcular la temperatura de salida, en vez de un intercambiador de tubos y coraza.

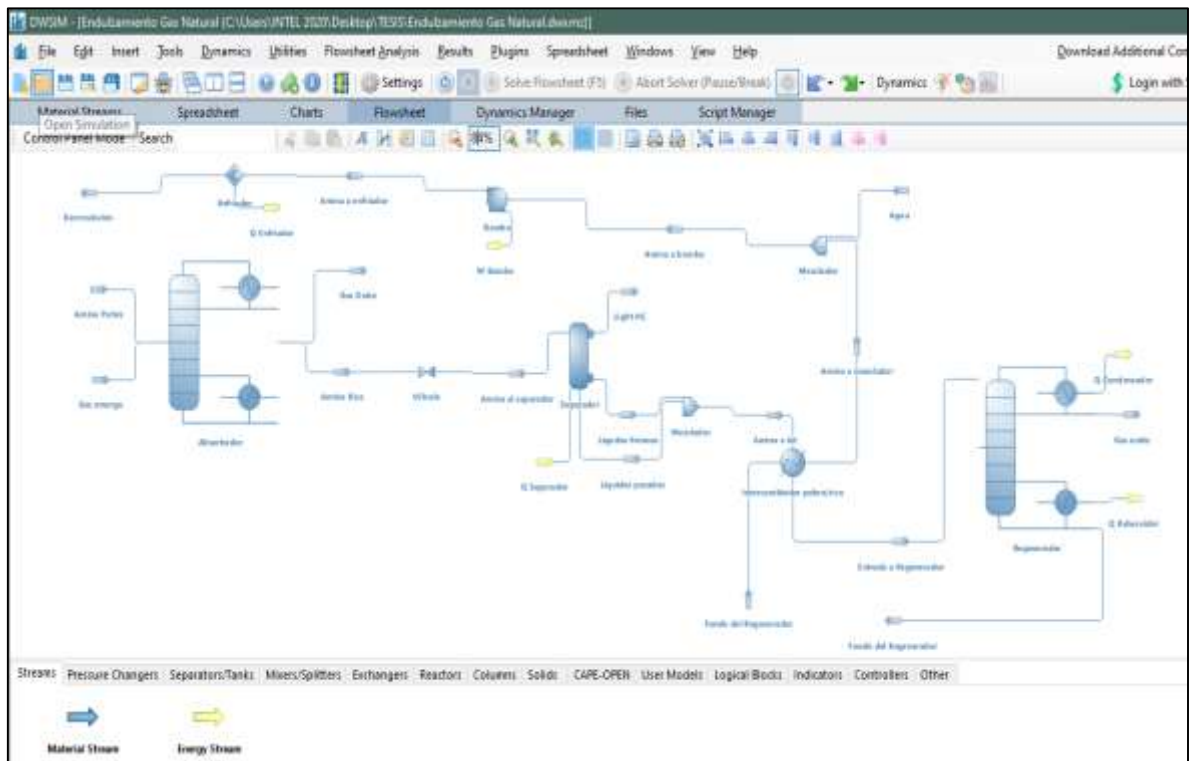


Figura 31-4. Simulación completa del proceso de endulzamiento de gas natural en DWSIM

Realizado por: Bastidas, E. 2022

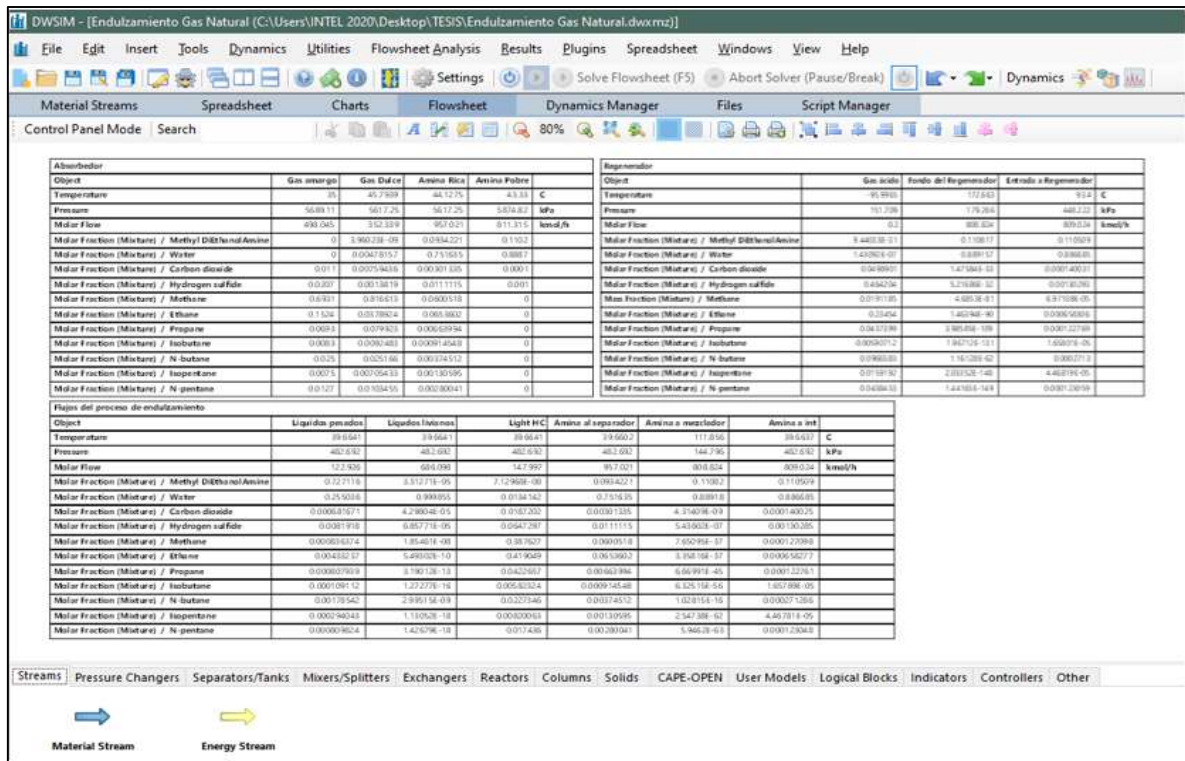


Figura 32-4. Tablas de resultados en DWSIM

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Los resultados que son de objeto de interés de la simulación del proceso de endulzamiento de gas natural, se presentan a continuación:

Tabla 16-4. Resultados de la torre de absorción en DWSIM

Absorbedor			
Objeto	Gas Dulce	Amina Rica	Unidades
Temperatura	45.7939	44.1275	°C
Presión	5617.25	5617.25	kPa
Flujo molar	352.339	957.021	kmol/h
Fracción Molar (Mezcla) / Metil Dietanol Amina	3.9602295E-09	0.093422061	
Fracción Molar (Mezcla) / Agua	0.004781569	0.75163513	
Fracción Molar (Mezcla) / Dióxido de Carbono	0.0075943589	0.0030133503	

Fracción Molar (Mezcla) / Sulfuro de Hidrógeno	0.0013819012	0.011111506	
Fracción Molar (Mezcla) / Metano	0.81661257	0.060051802	
Fracción Molar (Mezcla) / Etano	0.037892426	0.065360183	
Fracción Molar (Mezcla) / Propano	0.079922999	0.0066399363	
Fracción Molar (Mezcla) / Isobutano	0.0092482968	0.00091454753	
Fracción Molar (Mezcla) / N-butano	0.025166037	0.0037451186	
Fracción Molar (Mezcla) / Isopentano	0.0070543279	0.0013059536	
Fracción Molar (Mezcla) / N-pentano	0.010345507	0.0028004075	

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

Tabla 17-4. Resultados de la torre de regeneración en DWSIM

Regenerador				
Objeto	Entrada a regenerador	Gas ácido	Fondo del Regenerador	Unidades
Temperatura	93.4	-95.9965	172.663	°C
Presión	448.222	151.709	179.266	kPa
Flujo molar	809.024	0.2	808.824	kmol/h
Fracción Molar (Mezcla) / Metil Dietanol Amina	0.11050876	9.4403339E-31	0.11081687	
Fracción Molar (Mezcla) / Agua	0.88668463	1.4309226E-07	0.88915725	
Fracción Molar (Mezcla) / Dióxido de Carbono	0.00014002543	0.049890062	1.4758406E-33	

Fracción Molar (Mezcla) / Sulfuro de Hidrógeno	0.0013028499	0.46420381	5.2168564E-32	
Fracción Molar (Mezcla) / Metano	0.00012709761	0.045282371	8.5349323E-81	
Fracción Molar (Mezcla) / Etano	0.00065827652	0.23453986	1.463945E-90	
Fracción Molar (Mezcla) / Propano	0.00012276131	0.043739905	3.9858519E-109	
Fracción Molar (Mezcla) / Isobutano	1.6578937E-05	0.0059071156	1.9671161E-131	
Fracción Molar (Mezcla) / N-butano	0.00027128608	0.096658292	1.16128E-62	
Fracción Molar (Mezcla) / Isopentano	4.4678066E-05	0.015919189	2.0335164E-148	
Fracción Molar (Mezcla) / N-pentano	0.00012304764	0.043843254	1.4416531E-149	

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

Tabla 18-4. Flujos adicionales de interés del proceso de endulzamiento

Flujos adicionales de interés			
Objeto	Light HC	Amina a int	Unidades
Temperatura	39.6641	39.6637	°C
Presión	482.692	482.692	kPa
Flujo molar	147.997	809.024	kmol/h
Fracción Molar (Mezcla) / Metil Dietanol Amina	7.1296837E-08	0.11050876	
Fracción Molar (Mezcla) / Agua	0.013414248	0.88668463	
Fracción Molar (Mezcla) / Dióxido de Carbono	0.01872019	0.00014002543	
Fracción Molar (Mezcla) / Sulfuro de Hidrógeno	0.064729724	0.0013028499	

Fracción Molar (Mezcla) / Metano	0.38762654	0.00012709761	
Fracción Molar (Mezcla) / Etano	0.41904912	0.00065827652	
Fracción Molar (Mezcla) / Propano	0.042265657	0.00012276131	
Fracción Molar (Mezcla) / Isobutano	0.0058232356	1.6578937E-05	
Fracción Molar (Mezcla) / N-butano	0.022734568	0.00027128608	
Fracción Molar (Mezcla) / Isopentano	0.008200632	4.4678066E-05	
Fracción Molar (Mezcla) / N-pentano	0.017436012	0.00012304764	

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2021.

4.5. Validación de los resultados de DWSIM

Previo al análisis y procesamiento de la base de datos, es necesario validar el proceso simulado con los resultados que están en bibliografía; para validar el mismo se toma como bibliografía el trabajo expuesto por Vera y Valdivia (2019).

Para determinar el error porcentual se emplea la siguiente fórmula:

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

Tabla 19-4. Comparación de las fracciones molares resultantes de DWSIM

RESULTADOS	ABSORBEDOR		REGENERADOR
	Gas dulce	Amina rica	Fondo del regenerador
CO ₂ DWSIM	0.007594359	0.001069183	4.31E-09
CO ₂ (Deseado)	0.0019	0.0056	0.0001
%Error	299.7031	80.90744286	99.99568591
H ₂ S DWSIM	0.001381901	0.006420858	5.44E-07
H ₂ S (Deseado)	0	0.0134	0.001
%Error	0	52.08315224	99.94563977
MDEA DWSIM	3.96E-09	0.10855777	0.11081967
MDEA (Deseado)	0	0.1081	0.1105
%Error	0	0.42346901	0.289294118

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Los valores que se observan en la Tabla 19-4, son errores grandes, esto se debe a que DWSIM no cuenta con un paquete de aminas como lo tiene Aspen HYSYS, además también se justifica debido a los paquetes termodinámicos y parámetros de funcionamiento del absorbedor, en cuanto al regenerador se debe a la presencia de trazas del compuesto en el destilado y fondo de la torre de destilación.

Las condiciones de operación y modelos termodinámicos empleados permitieron simular y aproximar los datos lo más similares posible a los datos en bibliografía, por lo que se valida su funcionamiento y nos es útil para la obtención de la base de datos para el diseño de la RNA.

4.6. Balance de masa del sistema

4.6.1. Balance general de masa para el absorbedor

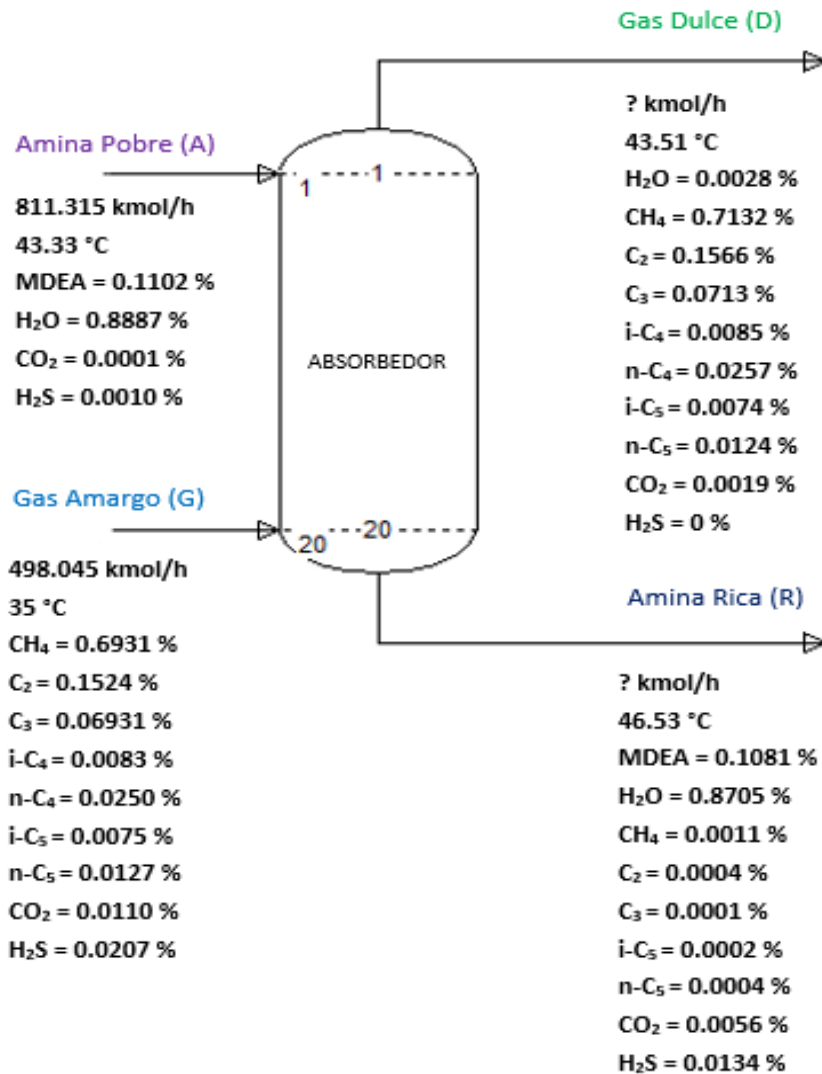


Figura 33-4. Balance general de masa del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Balance global de materia

$$A + G = D + R$$

(Ec 5-4)

Donde:

A = Flujo molar de la amina pobre

G = Flujo molar del gas amargo

D = Flujo molar del gas dulce

R = Flujo molar de la amina rica

Flujos de entrada

$$A = 811.315 \text{ kmol/h}$$

$$G = 498.045 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (H₂S)

$$A * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{A}} + G * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{G}} = D * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{D}} + R * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{R}} \quad (\text{Ec 6-4})$$

Donde:

$X_{\text{H}_2\text{S}-\text{A}}$ = Fracción molar del H₂S en la amina pobre

$X_{\text{H}_2\text{S}-\text{G}}$ = Fracción molar del H₂S en el gas amargo

$X_{\text{H}_2\text{S}-\text{D}}$ = Fracción molar del H₂S en el gas dulce

$X_{\text{H}_2\text{S}-\text{R}}$ = Fracción molar del H₂S en la amina rica

$$A * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{A}} + G * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{G}} - D * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{D}} = R * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{R}}$$

$$\frac{A * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{A}} + G * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{G}} - D * X_{\text{H}_2\text{S}-\text{D}}}{X_{\text{H}_2\text{S}-\text{R}}} = R$$

$$\frac{811.315 \text{ kmol/h} * 0.0010 + 498.045 * 0.0207 - D * 0}{0.0134} = R$$

$$\frac{0.811 \text{ kmol/h} + 10.309 \text{ kmol/h}}{0.0134} = R$$

$$\frac{11.12 \text{ kmol/h}}{0.0134} = R$$

$$R = 829.851 \text{ kmol/h}$$

Entonces,

$$D = A + G - R \quad (\text{Ec 7-4})$$

$$D = (811.315 + 498.045 - 829.851) \text{ kmol/h}$$

$$D = 479.509 \text{ kmol/h}$$

4.6.2. Balance general de masa para el separador

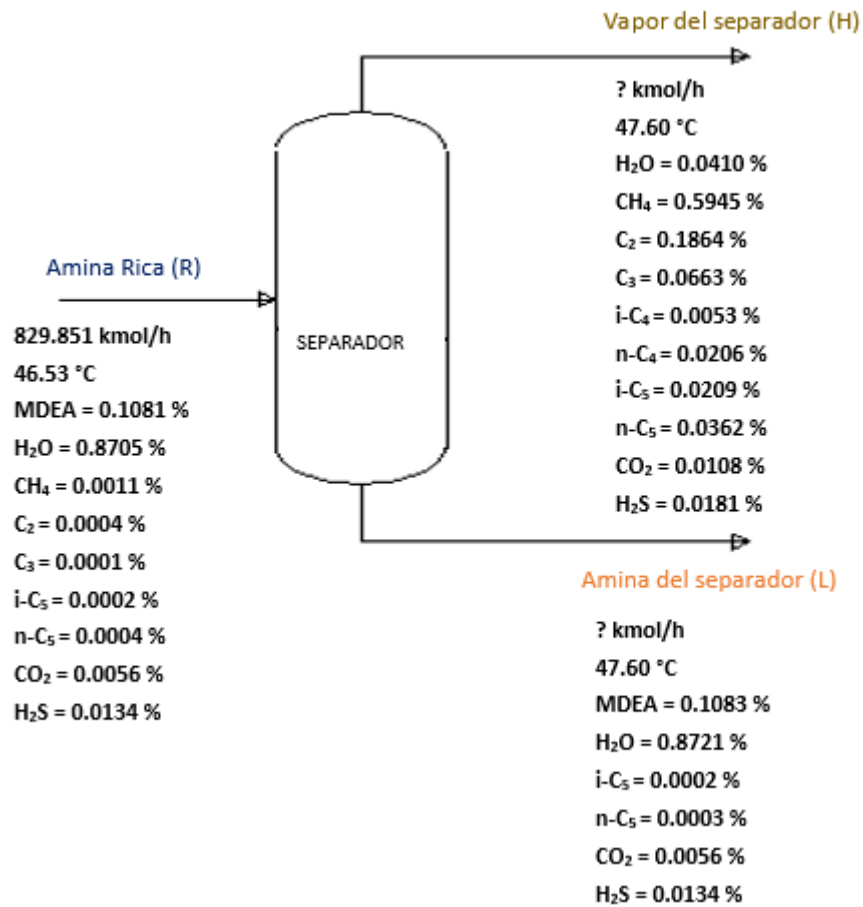


Figura 34-4. Balance general de masa del absorbedor

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Balance global de materia

$$R = H + L \quad (\text{Ec 8-4})$$

Donde:

H = Flujo molar del vapor del separador

L = Flujo molar de la amina que sale del separador

Flujo de entrada

$$R = 829.851 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (n-C₅)

$$R * X_{n-C5-R} = H * X_{n-C5-H} + L * X_{n-C5-L} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Donde:

X_{n-C5-R} = Fracción molar del n-C₅ en la amina rica

X_{n-C5-H} = Fracción molar del n-C₅ en el vapor del separador

X_{n-C5-L} = Fracción molar del n-C₅ en la amina que sale del separador

$$R * X_{n-C5-R} - L * X_{n-C5-L} = H * X_{n-C5-H} \quad (\text{Ec 10-4})$$

$$\frac{R * X_{n-C5-R} - L * X_{n-C5-L}}{X_{n-C5-H}} = H$$

Entonces,

$$R = \frac{R * X_{n-C5-R} - L * X_{n-C5-L}}{X_{n-C5-H}} + L$$

$$R = \frac{R * X_{n-C5-R} - L * X_{n-C5-L} + L * X_{n-C5-H}}{X_{n-C5-H}}$$

$$R * X_{n-C5-H} = R * X_{n-C5-R} + L(X_{n-C5-H} - X_{n-C5-L})$$

$$R(X_{n-C5-H} - X_{n-C5-R}) = L(X_{n-C5-H} - X_{n-C5-L})$$

$$\frac{R(X_{n-C5-H} - X_{n-C5-R})}{(X_{n-C5-H} - X_{n-C5-L})} = L$$

$$\frac{829.851 \text{ kmol/h} (0.0362 - 0.0004)}{(0.0362 - 0.0003)} = L$$

$$L = 827.539 \text{ kmol/h}$$

Finalmente,

$$\frac{829.851 \text{ kmol/h} * 0.0004 - 827.539 \text{ kmol/h} * 0.0003}{0.0362} = H$$

$$H = 2.312 \text{ kmol/h}$$

4.6.3. Balance general de masa del regenerador

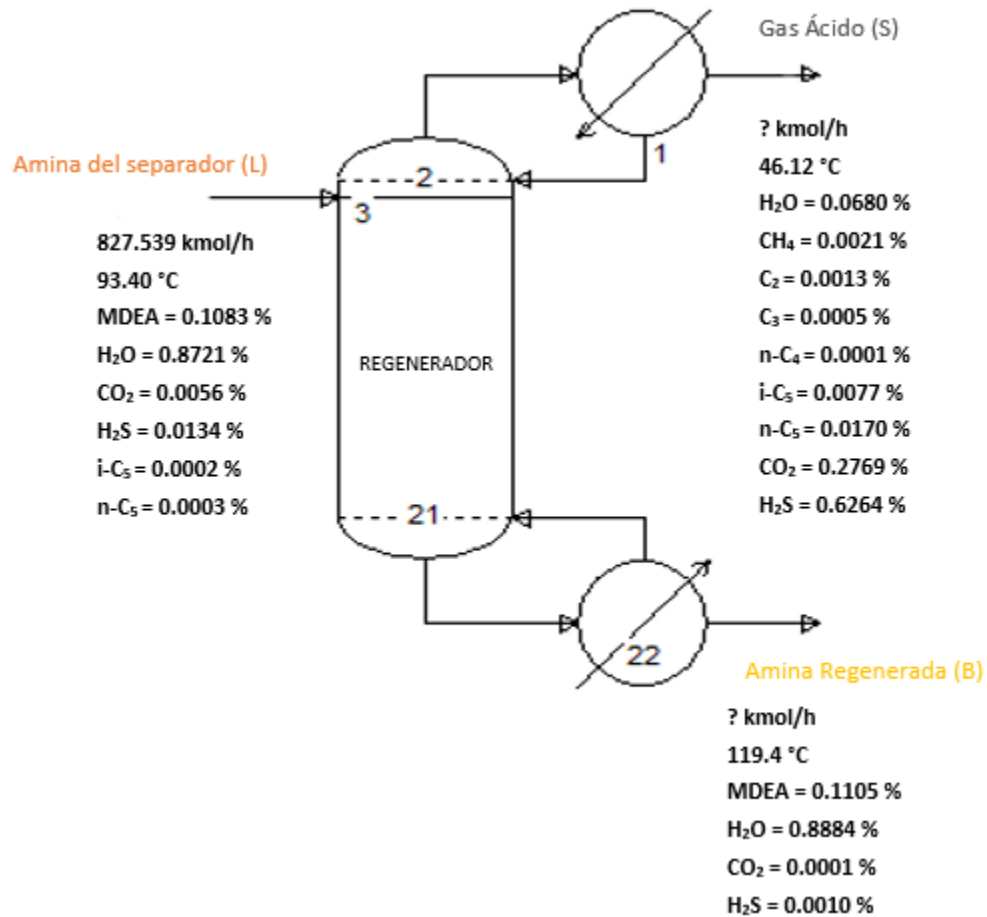


Figura 35-4. Balance general de masa del regenerador

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Balance global de materia

$$L = S + B \quad (\text{Ec 11-4})$$

Donde:

S = Flujo molar del gas ácido

B = Flujo molar de la amina regenerada

Flujo de entrada

$$L = 827.539 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (H₂S)

$$L * X_{H_2S-L} = S * X_{H_2S-S} + B * X_{H_2S-B} \quad (\text{Ec 12-4})$$

Donde:

X_{H_2S-L} = Fracción molar del H₂S en la amina que sale del separador

X_{H_2S-S} = Fracción molar del H₂S en el gas ácido

X_{H_2S-B} = Fracción molar del H₂S en la amina regenerada

$$L * X_{H_2S-L} - B * X_{H_2S-B} = S * X_{H_2S-S}$$

$$\frac{L * X_{H_2S-L} - B * X_{H_2S-B}}{X_{H_2S-S}} = S$$

Entonces,

$$L = \frac{L * X_{H_2S-L} - B * X_{H_2S-B}}{X_{H_2S-S}} + B$$

$$L = \frac{L * X_{H_2S-L} - B * X_{H_2S-B} + B(X_{H_2S-S})}{X_{H_2S-S}}$$

$$L(X_{H_2S-S}) - L(X_{H_2S-L}) = B(X_{H_2S-S}) - B(X_{H_2S-B})$$

$$L(X_{H_2S-S} - X_{H_2S-L}) = B(X_{H_2S-S} - X_{H_2S-B})$$

$$\frac{L(X_{H_2S-S} - X_{H_2S-L})}{(X_{H_2S-S} - X_{H_2S-B})} = B$$

$$\frac{827.539 \text{ kmol/h} (0.6264 - 0.0134)}{(0.6264 - 0.0010)} = B$$

$$B = 811.131 \text{ kmol/h}$$

Finalmente,

$$\frac{827.539 \text{ kmol/h} * 0.0134 - 811.131 \text{ kmol/h} * 0.0010}{0.6264} = S$$

$$S = 16.408 \text{ kmol/h}$$

4.7. Reporte de resultados de la RNA

La presente RNA que fue diseñada en MATLAB, posee 170 neurona ocultas y se la entrenó con una base de 130 datos con 3 entradas y 2 salidas, con la utilización del algoritmo Bayesian Regularization, con un tiempo de ejecución de 06:17 minutos.

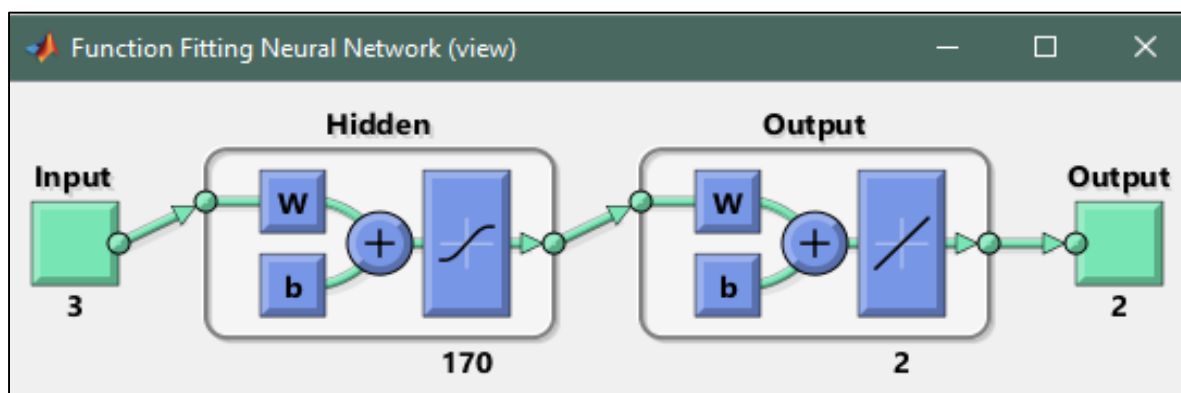


Figura 36-4. Representación de la RNA en MATLAB

Realizado por: Bastidas, E. 2022

4.7.1. Error cuadrático medio (MSE)

Tabla 20-4. MSE de cada fase del diseño de la RNA

FASE	MSE
trainPerformance (Entrenamiento)	1.6317e-05
testPerformance (Prueba)	0.0058
valPerformance (Validación)	NaN

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

En la Tabla 20-4 se observa los valores de error cuadrático medio (MSE) para la fase de entrenamiento y para la fase de prueba de la RNA, en cuanto a la fase de validación no tiene valor ya que cuando se emplea el algoritmo BR, al ser un modelo más sólido, reduce la necesidad de realizar una validación. Mientras más bajos sean los valores del MSE es mejor ya que mientras más se aproxima a cero el error disminuye, por lo que los valores de 1.6317e-05 y 0.0058 son pequeños y aceptables para el funcionamiento de la RNA.

4.7.2. Gráficos sobre el comportamiento de la RNA

A continuación, en el Grafico 2-4 se especifica el valor del coeficiente de regresión para el entrenamiento y prueba de la RNA en MATLAB:

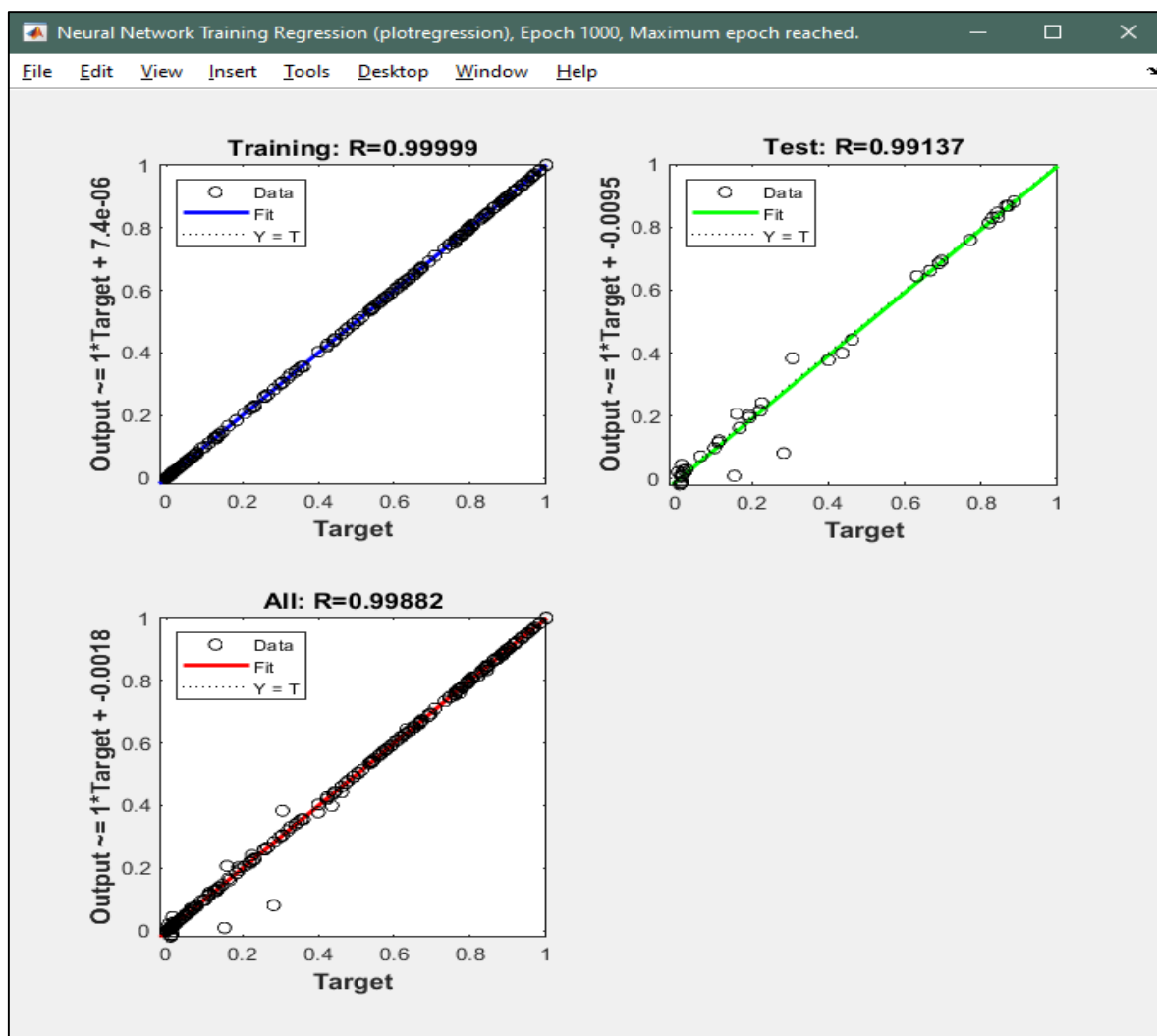


Gráfico 2-4. Regresión del entrenamiento y prueba de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Los valores de regresión (*R) se encargan de medir la correlación entre productos y objetivos, detallando que *R=1 relación cercana y *R=0 relación aleatoria.

En base a los valores obtenidos por la RNA las regresiones de entrenamiento y prueba son de 0.99999 y 0.99137 respectivamente, con una regresión general de 0.99882; lo que nos indica que las salidas con los objetivos tienen una correlación muy cercana.

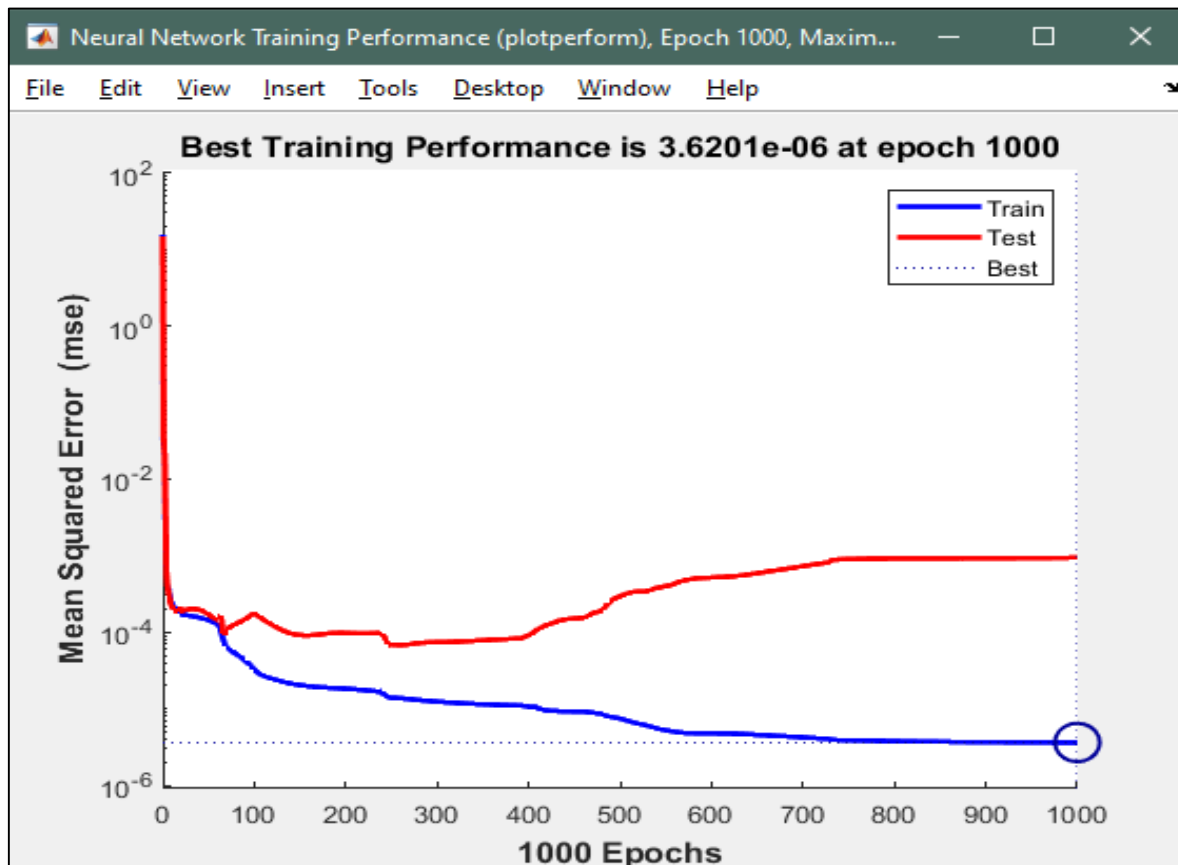


Gráfico 3-4. Rendimiento del entrenamiento de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

El progreso del MSE durante la fase de entrenamiento se puede evidenciar en el Gráfico 3-4 con un valor de $1.6317e-05$; la función de rendimiento MSE para los datos de prueba son menores a cero, siendo valores deseables, ya que mientras más cerca se encuentren las curvas de entrenamiento y prueba, la capacidad de predicción de la RNA será mejor.

4.7.3. Código de la RNA

En MATLAB se elaboró un script para el entrenamiento y validación de la RNA, los mismos que serán detallados en los Anexos A, B, C y D, en donde se incluyen los comandos utilizados como:

- Extracción de la base de datos de Excel

- Normalización de los datos para la RNA
- Valores máximos y mínimos
- Diseño de la RNA
- Agrupación de datos de entrada y salida
- Resultados predichos normalizados
- Resultados predichos reales sin normalizar
- Gráficos de comparación

4.7.4. Gráficas de comparación entre las salidas predichas y deseadas

Se analizarán dos grupos, el primero corresponde a los 130 datos empleados para el entrenamiento y prueba de la RNA; mientras que el segundo grupo corresponde a los 20 valores externos diferentes, que nos permiten demostrar el aprendizaje, funcionamiento y eficiencia de la RNA.

4.7.4.1. Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA

Tabla 21-4. Valores reales vs valores predichos en el absorbedor

# Datos	GAS DULCE					
	Valor Predicho de CO ₂	Valor Real de CO ₂	%Error	Valor Predicho de H ₂ S	Valor Real de H ₂ S	%Error
1	0.644772669	0.632262416	1.97864898	0.026983365	0.019906321	35.55173744
2	0.444943081	0.445476697	0.119785486	0.007058109	0.007726688	8.652860941
3	0.625412108	0.624615404	0.12755105	0.018583584	0.019421988	4.316774272
4	0.964498138	0.964457745	0.004188134	0.753143755	0.760500424	0.967345814
5	0.93501964	0.937302518	0.243558328	0.503731807	0.505262026	0.302856356
6	0.561286459	0.560882619	0.072000833	0.003435995	0.003021529	13.71706859
7	0.745353005	0.744883264	0.063062324	0.048956225	0.047439567	3.197030251
8	0.848195344	0.847601499	0.070061869	0.1391816	0.139107302	0.053410402
9	0.662276225	0.666507197	0.634797688	0.021202991	0.024224851	12.47421475
10	0.543199066	0.54386329	0.122130735	0.005040925	0.006516316	22.64148242
11	0.794880603	0.794721326	0.020041917	0.075209318	0.075082092	0.169448903
12	0.789792308	0.792657987	0.361527748	0.08116743	0.080833883	0.412632709
13	0.637538077	0.639290268	0.274083732	0.020935068	0.01989212	5.243020851
14	0.356378392	0.360848909	1.238889001	0.00992588	0.009389371	5.714004048
15	0.793020378	0.794476652	0.183299759	0.070415195	0.071498974	1.515797195
16	0.492133484	0.491536603	0.121431719	0.011486494	0.011194563	2.607793034

17	0.57105676	0.570374408	0.11963239	0.005909162	0.005859366	0.849860049
18	0.24154068	0.22521742	7.247778589	0.020724034	0.005564761	272.4155362
19	0.618830754	0.620935702	0.338996142	0.008560062	0.008666882	1.232507272
20	0.319806986	0.319072542	0.230180987	0.010963443	0.011329972	3.235040365
21	0.829815734	0.829837696	0.002646485	0.121831843	0.113714753	7.138114846
22	0.339393667	0.339137503	0.075534164	0.01478787	0.015104239	2.094567432
23	0.6597835	0.660977772	0.180682733	0.018281895	0.016193901	12.89370861
24	0.874478849	0.875718189	0.141522707	0.228103196	0.232288464	1.801754799
25	0.841921838	0.84184572	0.009041792	0.131763988	0.13252843	0.576813331
26	0.127271786	0.126997427	0.216034957	0.016995965	0.017141622	0.849724184
27	0.828502839	0.82922513	0.087104408	0.099108509	0.099818117	0.710901834
28	0.300248233	0.298514674	0.580728303	0.010558678	0.010413068	1.39833306
29	0.493359427	0.495071509	0.345825195	0.013108286	0.013761724	4.74822138
30	0.534768528	0.534757263	0.0021065	0.013636047	0.014176826	3.814531245
31	0.284286184	0.283782679	0.177426525	0.010687393	0.012203207	12.42144262
32	0.829213705	0.829816304	0.072618396	0.136607387	0.137789497	0.857909714
33	0.619207248	0.615995616	0.521372531	0.011409388	0.012611919	9.534875589
34	0.581497118	0.581646536	0.025688924	0.016232798	0.016109262	0.766863699
35	0.985310369	0.984551703	0.077057014	0.864678954	0.864604408	0.008621997
36	0.57243462	0.57045694	0.346683631	0.013482502	0.013149863	2.529601395
37	0.778131505	0.779458136	0.17019914	0.050637462	0.049975272	1.325035233
38	0.970540715	0.969383858	0.119339419	0.809319524	0.803750409	0.692891111
39	0.895847658	0.894212531	0.182856697	0.30396043	0.304441406	0.157986569
40	0.127059989	0.132780405	4.308177347	0.02023321	0.016989313	19.09374907
41	0.652012497	0.65418609	0.332259128	0.022081461	0.021771869	1.421981097
42	0.565769209	0.565157841	0.108176586	0.013277951	0.014191951	6.440265433
43	0.936476528	0.93528391	0.127514009	0.47226268	0.471966621	0.06272882
44	0.651860449	0.650250887	0.247529343	0.016567531	0.016688389	0.724200588
45	0.759687965	0.771322714	1.50841507	0.071878619	0.06486493	10.81275971
46	0.605710524	0.6041334	0.261055692	0.017332521	0.017350238	0.102116653
47	0.834652557	0.834084707	0.068080602	0.13136343	0.131118885	0.186506216
48	0.266797016	0.266903838	0.040022629	0.014522556	0.015049777	3.503179807
49	0.832534752	0.844361131	1.400630527	0.206851038	0.159464655	29.71591542
50	0.399385924	0.435974156	8.392293939	0.006655633	0.013716351	51.47664708
51	0.756326985	0.760629695	0.565677463	0.059662231	0.059636171	0.043699047
52	0.790087707	0.788433865	0.209762919	0.079461861	0.078688074	0.983359932
53	0.845508052	0.845583865	0.008965785	0.1670526	0.163493835	2.176696911
54	0.403080227	0.400029881	0.762529624	0.010859885	0.010167316	6.81171909
55	0.540452879	0.540335803	0.021667406	-0.000204712	0	0
56	0.88447323	0.884263538	0.023713836	0.225424156	0.22675523	0.587009181
57	0.534684901	0.533941758	0.139180487	0.003855273	0.002476627	55.66625878

58	0.540468351	0.542681991	0.407907415	0.013516548	0.013313035	1.528674375
59	0.537614665	0.538422205	0.14998253	0.009679042	0.010350299	6.485387215
60	0.081520988	0.282295228	71.12208062	-0.018426512	0.011009876	267.3634878
61	0.806933857	0.807379454	0.055190572	0.071583987	0.071637791	0.07510608
62	0.777768563	0.780479878	0.347390805	0.073529807	0.075401407	2.482182729
63	0.692860569	0.691942812	0.132634821	0.028958283	0.029588167	2.128838784
64	0.095683946	0.092350925	3.609082976	0.014058634	0.016372979	14.13514755
65	0.747702206	0.746855005	0.113435757	0.033043222	0.033197558	0.464899053
66	0.803521811	0.802500171	0.127307065	0.099917097	0.101086857	1.15718317
67	0.770257929	0.768410526	0.240418717	0.066502618	0.067654198	1.702156317
68	0.514901464	0.515606524	0.136743778	0.002830605	0.00353036	19.8210646
69	0.959930518	0.96084514	0.095189373	0.710456751	0.707857801	0.367157027
70	0.924368493	0.924607039	0.025799706	0.35544833	0.355434624	0.003856161
71	0.479554983	0.478463342	0.22815563	0.005005385	0.004563572	9.681278324
72	0.796180154	0.796206978	0.003369045	0.065769221	0.065266542	0.770194534
73	0.834648302	0.834544534	0.012434082	0.1467685	0.147589	0.555935512
74	0.000939142	0	0	0.012575997	0.012733198	1.234576997
75	0.886394575	0.885936432	0.051712753	0.230677414	0.231661834	0.424938498
76	0.89747248	0.897394418	0.008698784	0.305862628	0.305828016	0.011317177
77	0.86256154	0.860691731	0.217244874	0.184821432	0.184510339	0.168604515
78	0.880910936	0.880073658	0.095137335	0.221013283	0.220302465	0.322655364
79	0.868519792	0.872122818	0.41313286	0.194887795	0.1923762	1.30556461
80	0.919903922	0.917763095	0.233265699	0.427485585	0.425100998	0.560946002
81	0.901740746	0.902189595	0.049751122	0.346156548	0.346690345	0.15396929
82	0.38317773	0.305685599	25.3502723	0.043809595	0.015722775	178.6378148
83	0.90430713	0.904725649	0.04625927	0.330876781	0.325927049	1.518662578
84	0.764057153	0.76438084	0.042346341	0.05689852	0.055510352	2.500736492
85	0.861839043	0.861021897	0.09490417	0.183725376	0.184052278	0.177613624
86	0.673629472	0.672122113	0.224268513	0.015192079	0.014785634	2.748921779
87	0.25858589	0.258762534	0.068264592	0.016697617	0.01660524	0.556309808
88	0.981053289	0.981277843	0.022883843	0.888576788	0.889642636	0.119806356
89	0.733364774	0.733516427	0.020674794	0.043997715	0.044352002	0.798807849
90	0.097617259	0.101225727	3.564773681	-0.013527033	0.012511942	208.1129708
91	0.800321775	0.796588507	0.46865708	0.0788637	0.078191243	0.86001598
92	0.966301552	0.965063567	0.128280127	0.746615227	0.746550747	0.008637114
93	0.891030529	0.891049038	0.002077235	0.261116286	0.258376165	1.060516136
94	0.762584684	0.761524848	0.139172883	0.038286965	0.038777585	1.26521326
95	0.983094732	0.983168663	0.007519693	0.914612868	0.914761385	0.016235575
96	0.868297027	0.86651221	0.205977141	0.202807377	0.190278959	6.58423718
97	0.813981122	0.820898194	0.842622456	0.115865577	0.111409819	3.999430721
98	0.635400726	0.636424498	0.160862964	0.005039598	0.005964384	15.50514361

99	0.460741897	0.461040232	0.06470906	0.002930188	0.003321318	11.77636075
100	0.593249328	0.594303691	0.177411415	0.015151691	0.015599082	2.86805682
101	1.000130358	1	0.01303578	0.965996716	0.966726537	0.075494033
102	0.205960465	0.205704409	0.124477426	0.017670866	0.017059325	3.584788407
103	0.127974401	0.125925522	1.627056332	0.012296313	0.012556392	2.071291818
104	0.668881599	0.668090816	0.118364468	0.023290373	0.022462973	3.683396933
105	0.777376232	0.7778659	0.062950172	0.061151646	0.062001958	1.371427054
106	1.000404747	0.999924623	0.048015947	1.000989695	1	0.098969525
107	0.694087572	0.696508413	0.347568232	0.017285907	0.016622708	3.989719995
108	0.949928242	0.950799154	0.091597955	0.548604652	0.547810895	0.14489631
109	0.839829974	0.838903262	0.110467071	0.111539131	0.111257865	0.252804839
110	0.881888738	0.886436345	0.513021272	0.217097932	0.221151629	1.832994425
111	0.917634656	0.919611994	0.215018634	0.420574693	0.422721578	0.507871988
112	0.747518495	0.747196298	0.043120852	0.036592707	0.037102334	1.37357128
113	0.685593104	0.689255144	0.531303892	0.029831472	0.028055071	6.331834717
114	0.671896909	0.671619278	0.041337576	0.008633778	0.008968588	3.733139613
115	0.442566911	0.461919425	4.189586447	0.008871991	0.01372551	35.36129988
116	0.629880618	0.629226336	0.103981828	0.015115102	0.014255146	6.032600311
117	0.050587769	0.052012593	2.73938366	0.012274009	0.01207568	1.642388677
118	0.94198552	0.943403074	0.150259592	0.57857625	0.579439995	0.14906547
119	0.665437252	0.666179092	0.111357461	0.011286491	0.009502981	18.76790471
120	0.438006445	0.439842749	0.417490998	0.013657305	0.01155208	18.22378104
121	0.378106589	0.400079145	5.492052394	0.005879798	0.014212826	58.63033954
122	0.504973765	0.504815052	0.031439838	0.012727428	0.012871163	1.116720574
123	0.443760254	0.44240027	0.307410328	0.010173092	0.010318275	1.407046682
124	0.846582231	0.843017203	0.422889111	0.161754916	0.167186444	3.248784901
125	0.952220107	0.953739252	0.159283075	0.58933367	0.590235716	0.152828076
126	0.577104827	0.576980308	0.021581199	0.001326191	0.001150088	15.31205957
127	0.009302451	0.153023804	93.92091272	-0.010999409	0.015623508	170.4029384
128	0.673688894	0.673247142	0.065615182	0.02508841	0.023721417	5.762694321
129	0.609500344	0.609242821	0.042269279	0.001687673	0.002623681	35.67540028
130	0.771990093	0.773040864	0.135926984	0.060860161	0.061039468	0.293755655
		%Error Promedio	1.977988838		%Error Promedio	14.02041181

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

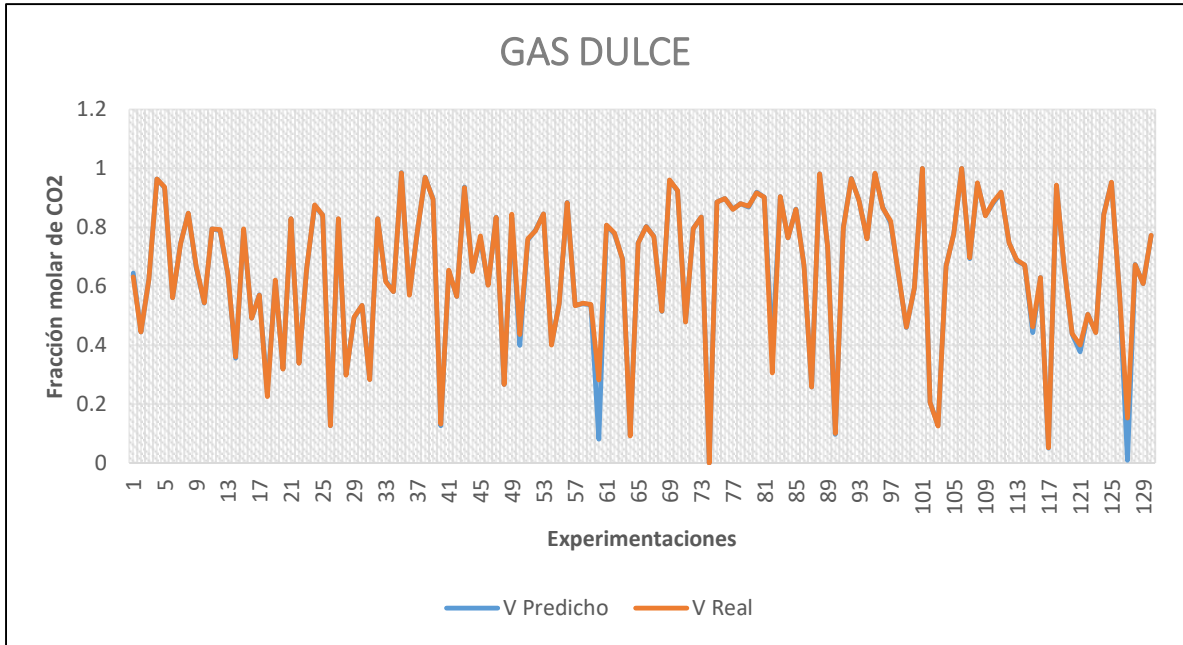


Gráfico 4-4. Fracción molar de CO₂ real vs CO₂ predicho en el flujo de gas dulce

Realizado por: Bastidas, E. 2022

El promedio del error porcentual para la fracción de CO₂ en el flujo de gas dulce que sale del absorbedor es de 1.978%.

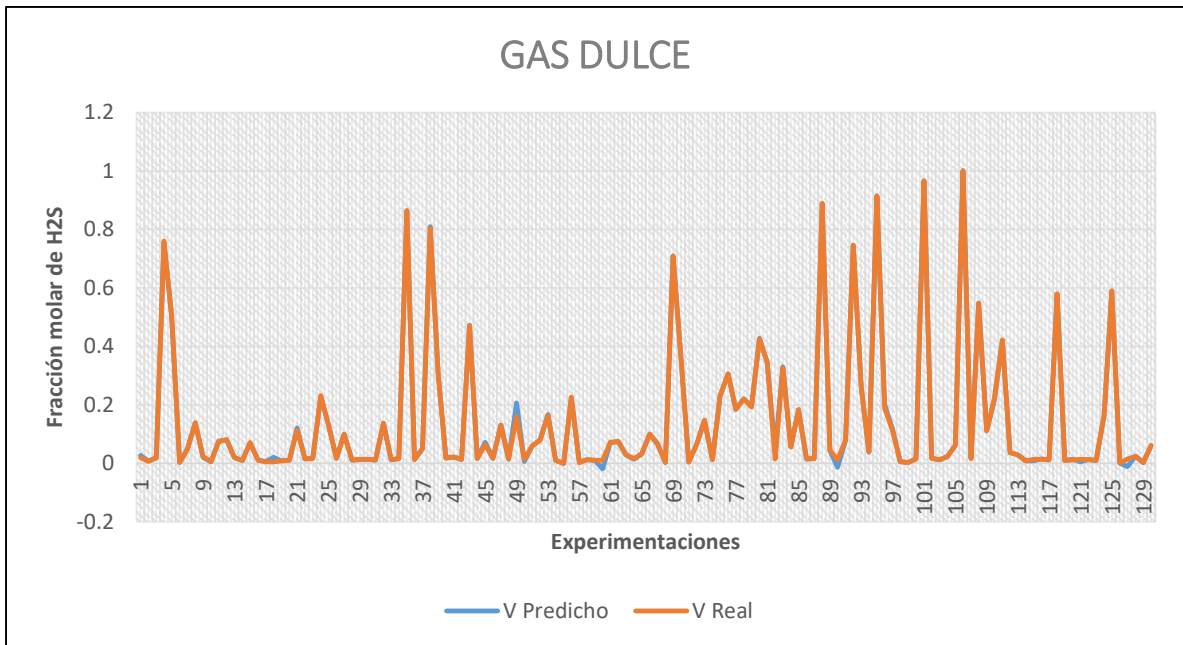


Gráfico 5-4. Fracción molar de H₂S real vs H₂S predicho en el flujo de gas dulce

Realizado por: Bastidas, E. 2022

El promedio del error porcentual para la fracción de H₂S en el flujo de gas dulce que sale del absorbedor es de 14.020%.

Al observar ambos gráficos de dispersión, podemos demostrar en ambos casos la confiabilidad entre los valores reales y predichos por la RNA, representados por una curva naranja y una curva azul respectivamente.

Cuando se sobreponen las curvas se observan pequeños desfases entre los puntos, debido al MSE que tiene un valor de 1.6317e-05; sin embargo, como los valores son muy cercanos a cero, se demuestra la viabilidad de aprendizaje de la RNA.

4.7.4.2. Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la RNA

La validación de la RNA se realiza con la finalidad de usar la red como una herramienta confiable en el estudio del proceso de endulzamiento de gas natural; por lo que, se ingresaron datos de entrada externos a la RNA que permitieron evaluar el aprendizaje y la capacidad de predicción.

El conjunto seleccionado fue de 20 datos diferentes con las mismas entradas (temperatura, presión y flujo molar), para adquirir las fracciones molares de interés del producto de la torre de absorción, los mismos que se compararan con los valores reales obtenidos de la simulación en DWSIM.

Tabla 22-4. Valores reales vs valores predichos en el absorbedor para la validación de la RNA

# Datos	GAS DULCE					
	Valor Predicho de CO ₂	Valor Real de CO ₂	%Error	Valor Predicho de H ₂ S	Valor Real de H ₂ S	%Error
1	0.008661638	0.0086579826	0.042219686	0.001604104	0.0015922287	0.745823272
2	0.006695972	0.0068917820	2.841203359	0.001439214	0.0013880887	3.683144881
3	0.008837668	0.0088151401	0.255553934	0.001917657	0.0018575583	3.235382324
4	0.008540968	0.0085352672	0.066791117	0.001495953	0.0015089984	0.86449003
5	0.008071454	0.0080913943	0.246436565	0.001378739	0.0013782151	0.037998339
6	0.008314284	0.0083029117	0.13697129	0.001385861	0.0014164235	2.157743343
7	0.007259141	0.0074376561	2.400149663	0.001384515	0.0013820982	0.174879048
8	0.007994348	0.0080372006	0.533183995	0.001377986	0.0013878388	0.709959338
9	0.009049232	0.0089967518	0.583319511	0.002901782	0.0026956689	7.646083292
10	0.008380785	0.0083698971	0.130087418	0.001411703	0.0014335675	1.525202216
11	0.007827167	0.0078823758	0.7004116	0.001369017	0.0013742583	0.381354924
12	0.007957606	0.0079860845	0.356606081	0.001374845	0.0013731932	0.120271435
13	0.00831003	0.0083191181	0.109243956	0.00141491	0.0014083840	0.463343565
14	0.0084684	0.0084686321	0.002742287	0.00147187	0.0014696826	0.148827025

15	0.007957246	0.0080227135	0.816027543	0.001381766	0.0013903770	0.619339904
16	0.008854157	0.0088403935	0.155690548	0.002017269	0.0019576409	3.045902005
17	0.007885326	0.0079193901	0.430141302	0.001355449	0.0013659567	0.769287097
18	0.006773038	0.0069955495	3.180756142	0.001362968	0.0013801612	1.245747439
19	0.006863792	0.0070278660	2.334619193	0.001392119	0.0013839202	0.592459768
20	0.007908494	0.0079738857	0.820074621	0.001384486	0.0013889164	0.318995013
	%Error Promedio		1.977988838	0.807111491		14.02041181

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

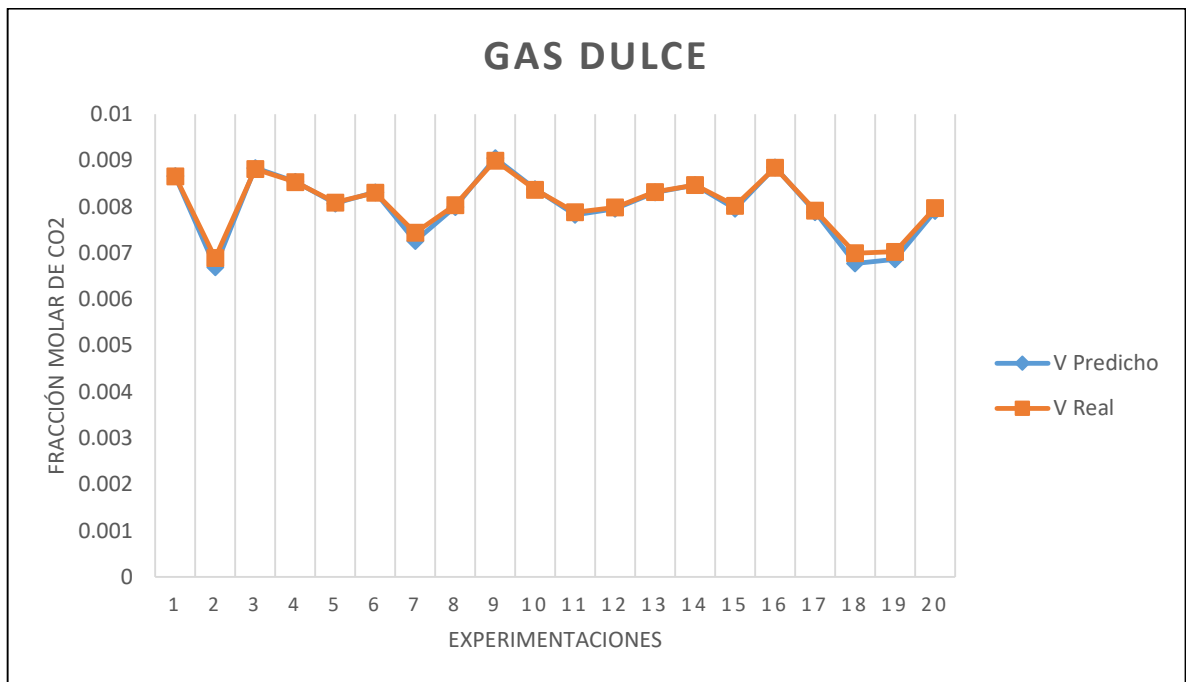


Gráfico 6-4. Fracción molar de CO₂ del gas dulce en la validación de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

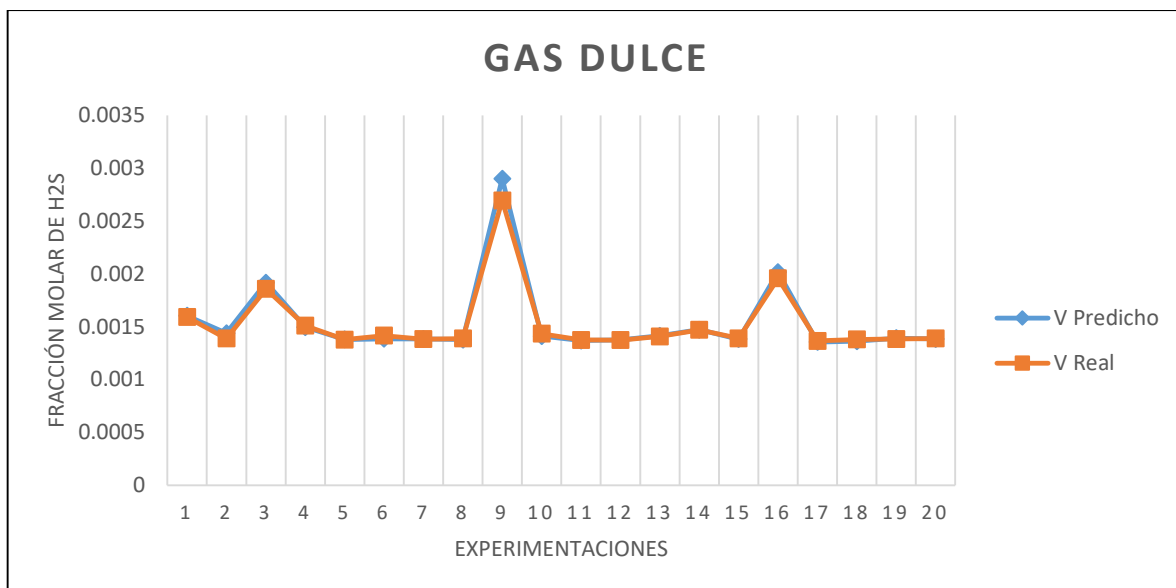


Gráfico 7-4. Fracción molar de H₂S del gas dulce en la validación de la RNA

Realizado por: Bastidas, E. 2022

Al observar ambos gráficos de dispersión, podemos demostrar en ambos casos la confiabilidad entre los valores reales y predichos por la RNA, representados por una curva naranja y una curva azul respectivamente.

Cuando se sobreponen las curvas se observan algunos desfases entre los puntos; sin embargo, la validación es aceptable, afirmando así el funcionamiento correcto de la RNA. Aun así, es necesario realizar un análisis estadístico para demostrar que la RNA diseñada es confiable como una herramienta de predicción.

4.8. Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion XVI

Este análisis estadístico comparativo se realiza para evidenciar el nivel de confiabilidad de la predicción de las fracciones molares de CO₂ y H₂S.

Para ello se utilizó el programa estadístico informático Statgraphics Centurion XVI, empleando como muestra el conjunto de datos para la validación de la RNA.

Tabla 23-4. ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Fracción molar de CO₂ en el flujo de gas dulce					
Entre grupos	2.30999E-8	1	2.30999E-8	0.06	0.8158
Intra grupos	0.0000159491	38	4.19713E-7		
Total (Corr.)	0.0000159722	39			
Fracción molar de H₂S en el flujo de gas dulce					
Entre grupos	2.08853E-9	1	2.08853E-9	0.02	0.8952
Intra grupos	0.00000450886	38	1.18654E-7		
Total (Corr.)	0.00000451095	39			

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente (entre grupos) y un componente (dentro de grupos). La razón-F es la relación entre la estimación entre grupos y la estimación dentro de grupos, con una fracción molar de CO₂ es igual a 0.0550374, y una fracción molar de H₂S de 0.0176018.

Puesto que el valor-P de la razón-F es superior a 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las 2 variables con un nivel de confianza del 95.0%.

Tabla 24-4. Medias con intervalos de confianza del 95.0%

Fracción molar de CO₂ en el flujo de gas dulce					
			Error Est.		
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
CO ₂ _DWSIM	20	0.0080786	0.000144864	0.00787123	0.00828597
CO ₂ _RNA	20	0.00803054	0.000144864	0.00782317	0.00823791
Total	40	0.00805457			
Fracción molar de H₂S en el flujo de gas dulce					
			Error Est.		
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
H ₂ S_DWSIM	20	0.00152666	0.0000770241	0.0014164	0.00163692
H ₂ S_RNA	20	0.00154111	0.0000770241	0.00143085	0.00165137
Total	40	0.00153388			

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

La Tabla 24-4 muestra la media para cada columna de datos; así también, el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. El error estándar es el resultado de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel.

La tabla además muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces.

Tabla 25-4. Prueba de Kruskal-Wallis

Fracción molar de CO ₂ en el flujo de gas dulce		
	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
CO ₂ _DWSIM	20	21.05
CO ₂ _RNA	20	19.95
Estadístico = 0.0885366 Valor-P = 0.766046		
Fracción molar de H ₂ S en el flujo de gas dulce		
	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
H ₂ S_DWSIM	20	21.0
H ₂ S_RNA	20	20.0
Estadístico = 0.0731707 Valor-P = 0.786775		

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

La prueba de Kruskal-Wallis evalúa la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las 2 columnas es la misma. Primero se combinan los datos de todas las columnas y se ordenan de menor a mayor. Después, se calcula el rango (rank) promedio para los datos de cada columna. Puesto que el valor-P es mayor o igual que 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel del 95.0% de confianza.

Tabla 26-4. Resumen estadístico de la fracción molar de CO₂

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo
CO ₂ _DWSIM	20	0.0080786	0.000608707	7.53481%	0.00689178
CO ₂ _RNA	20	0.00803054	0.000684764	8.527%	0.00669597
Total	40	0.00805457	0.000639956	7.94525%	0.00669597
	Máximo	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada	
CO ₂ _DWSIM	0.00899675	0.00210497	-1.11937		-0.212364
CO ₂ _RNA	0.00904923	0.00235326	-1.24004		-0.191138

Total	0.00904923	0.00235326	-1.65616	-0.367129
-------	------------	------------	----------	-----------

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

Tabla 27-4. Resumen estadístico de la fracción molar de H₂S

	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo
H ₂ S_DWSIM	20	0.00152666	0.000319364	20.9192%	0.00136596
H ₂ S_RNA	20	0.00154111	0.000367852	23.8693%	0.00135545
Total	40	0.00153388	0.000340096	22.1722%	0.00135545
	Máximo	Rango	Sesgo Estandarizado	Curtosis Estandarizada	
H ₂ S_DWSIM	0.00269567	0.00132971	5.4936	8.9373	
H ₂ S_RNA	0.00290178	0.00154633	5.63269	9.40396	
Total	0.00290178	0.00154633	7.64561	11.5582	

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

El sesgo estandarizado y la curtosis estandarizada para la fracción molar de H₂S se encuentran fuera del rango de -2 a +2 para 2 columnas. Esto indica algo de no normalidad significativa en los datos, lo cual viola el supuesto de que los datos provienen de distribuciones normales.

Por ello se utilizó la prueba de Kruskal-Wallis para comparar las medianas en lugar de las medias, como se puede evidenciar en la Tabla 25-4.

CONCLUSIONES

- Se predijo las concentraciones de CO₂ y H₂S del proceso de endulzamiento de gas natural mediante el diseño y entrenamiento de la RNA, valores que pueden ser evidenciados en la Tabla 21-4 donde se comparan los valores obtenidos en la simulación en DWSIM y los valores predichos por la RNA; presentando un porcentaje de error promedio de concentraciones de CO₂ y H₂S de 1.98% y 14.02%, respectivamente.
- Al comparar los resultados obtenidos de la simulación en DWSIM con los resultados de bibliografía, se puede evidenciar que los valores de fracciones molares de CO₂ y H₂S se asemejan a los referenciados en bibliografía, obteniendo fracciones molares de 0.0019 y 0.00138 de CO₂ y H₂S, respectivamente, validando el proceso de endulzamiento simulado; sin embargo, estas concentraciones medianamente altas se deben a que DWSIM es un software gratuito que no presenta paquetes de aminas que pueden reducir aún más las concentraciones de gas ácido, así también como las condiciones del absorbedor y regenerador, que aun eligiendo las mejores condiciones para cada una, fue lo máximo que se pudo aproximar a los datos en bibliografía. Cabe recalcar que la fracción molar de MDEA recuperada supera al referenciado en bibliografía.
- Se determinó las cantidades de gases ácidos de interés obtenidos del proceso de endulzamiento de gas natural, donde los resultados de fracción molar de CO₂ y H₂S son de 0.0019 y 0.00138, respectivamente.
- Gracias a la herramienta Neural Net Fitting de MATLAB y la base de datos generada por la simulación en DWSIM, se diseñó y entrenó la RNA, la cual fue capaz de predecir satisfactoriamente las fracciones molares de CO₂ y H₂S; la RNA consta de 170 neuronas ocultas y fue creada con el algoritmo de Bayesian Regularization, con un MSE de 1.6317e-05 y un coeficiente de regresión total de 0.99882.
- Los valores obtenidos de la RNA se validaron por medio de un análisis estadístico comparativo entre los valores reales de las fracciones molares de CO₂ y H₂S en DWSIM y los valores predichos por la RNA, generando un valor de confianza general del 95%, dando a conocer que no existen diferencias significativas entre los valores analizados, demostrando una RNA confiable para la predicción de datos.

RECOMENDACIONES

- Diseñar una RNA capaz de predecir más fracciones molares presentes en un gas ácido como el metano, etano, propano, etc., empleando distintas entradas a las mencionada en el presente trabajo y con distintas condiciones del absorbedor y de amina pobre para que se amplíe el rango de operación para generar la base de datos.
- Simular en DWSIM un proceso de endulzamiento de gas natural utilizando diferentes soluciones acuosas de aminas como las aminas: DEA y MEA, de modo que se pueda evidenciar cual es la mejor amina para retener la mayor cantidad de gases ácidos presentes en un gas natural.
- Tomar como base la simulación presentada en el trabajo de Integración Curricular para mejorar las condiciones de operación en la torre de absorción y de regeneración, de forma que se logre minimizar aún más las fracciones molares de gases ácidos presentes en el gas dulce, de modo que sea útil la simulación para posibles investigaciones futuras en base a la refinación de gas natural.
- Para el diseño y entrenamiento de la red neuronal artificial es importante utilizar el análisis de componentes principales (ACP), de modo que la RNA no trabaje con valores muy grandes y solo emplee valores en un rango de 0 y 1, esto con la finalidad de que la predicción de los datos sea más precisa.

GLOSARIO

Absorción: Es un proceso único en el que una mezcla gaseosa (NG) entra en contacto con un disolvente líquido (amina) y los componentes se transfieren de la fase gaseosa a la líquida; esto puede ser por absorción física, química o biológica (Mandal y Bandyopadhyay, 2006, p.6077).

Monoetanolamina (MEA): Es una amina primaria con la fórmula $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$. Se considera la más fuerte, la más activa y la más simple de todas las bases y, debido a su peso molecular, permite un mayor transporte de gas ácido, lo que significa menores tasa de ciclado (Omar, 2017, p.50).

Dietanolamina (DEA): Se trata de una amina orgánica secundaria incolora o blanca y viscosa con la fórmula $\text{HN}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_2$, que, como base débil, refleja la naturaleza hidrofílica del grupo alcohol, siendo además soluble en agua (Haji-Sulaiman, 1998, pp.963).

Gas Amargo: El gas natural se considera ácido si está compuesto por hidrocarburos, sulfuro de hidrógeno y dióxido de carbono en concentraciones superiores a 50 ppm (Morales et al., 2005, p.4)

Gases de efecto invernadero (GEI): Se trata de componentes de la atmósfera, tanto naturales como artificiales, que absorben y emiten radiación infrarroja, provocando el efecto invernadero debido al aumento de las concentraciones de gases de efecto invernadero (Morales et al., 2005, p.2)

ChempSep: Es un simulador de columnas de destilación, absorción y extracción con una interfaz de usuario sencilla e intuitiva con una base de datos de 400 sustancias químicas (Medeiros, 2019).

Error Cuadrático Medio (MSE): Resulta de la diferencia cuadrática promedio entre salidas y los objetivos, donde los valores más bajos son los mejores, es así que cero significa que no hay error (Henson, 2015, p.3).

Regresión (*R): Se utiliza para medir la correlación entre el producto y el objetivo, con un valor de 1 correspondiente a una relación estrecha y 0 a una relación aleatoria (Henson, 2015, p.4).

BIBLIOGRAFÍA

ABDULRAHMAN, R.K. y SEBASTINE, I.M. "Natural gas sweetening process simulation and optimization: A case study of Khurmala field in Iraqi Kurdistan region". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* [en línea], 2013, vol. 14, pp. 116–120. ISSN 18755100. DOI 10.1016/j.jngse.2013.06.005. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2013.06.005>.

ABKHIZ, V. "Operational Investigation of Multi Feed Amine Process Performance in Comparison with Conventional Process". *International Journal of Oil, Gas and Coal Engineering* [en línea], 2014, vol. 2, no. 6, pp. 78. ISSN 2376-7669. DOI 10.11648/j.ogce.20140206.11.

AL-LAGTAH, N.M.A., AL-HABSI, S. y ONAIZI, S.A. "Optimization and performance improvement of Lekhwair natural gas sweetening plant using Aspen HYSYS". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* [en línea], 2015, vol. 26, pp. 367–381. ISSN 18755100. DOI 10.1016/j.jngse.2015.06.030. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2015.06.030>.

BAYESIANO, L.-M., RODRIGUEZ-TORO, V.A., GARZÓN, J.E. y LÓPEZ, J.A., [sin fecha]. "Control neuronal por modelo inverso de un servosistema usando algoritmos de aprendizaje Control Neuronal por Modelo Inverso de un Servosistema Usando Algoritmos de Aprendizaje Levenberg-Marquardt y Bayesiano. S.l.: s.n. ISBN 978-958-8387-23-9.

CABEZAS, I. y PÁEZ, J.D. *Matlab, Toolbox de optimización, Aplicaciones en ciencias económicas* \n. [en línea], 2010, Disponible en: http://fce.unal.edu.co/wiki/images/e/ef/Manual_optimizacion.pdf.

DARANI, N.S., BEHBAHANI, R.M., SHAHEBRAHIMI, Y., ASADI, A. y MOHAMMADI, A.H. "Simulation and optimization of the acid gas absorption process by an aqueous diethanolamine solution in a natural gas sweetening unit". *ACS Omega* [en línea], 2021, vol. 6, no. 18, pp. 12072–12080. ISSN 24701343. DOI 10.1021/acsomega.1c00744.

DE CAMPOS SOUZA, P.V. "Fuzzy neural networks and neuro-fuzzy networks: A review the main techniques and applications used in the literature". *Applied Soft Computing Journal* [en línea],

2020, vol. 92, pp. 106275. ISSN 15684946. DOI 10.1016/j.asoc.2020.106275. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2020.106275>.

ERDMANN, E., RUIZ, L., MARTÍNEZ, J., GUTIERREZ, J. y TARIFA, E. "Natural Gas Sweetening With Amines. Process Simulation and Parametric Sensitivity Analysis". [en línea], 2012, no. December. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/descarga/articulo/4134741.pdf>.

GILL, A.B. "Ecology of Aquatic Systems". Fish and Fisheries [en línea], 2011, vol. 12, no. 3, pp. 352–352. ISSN 1467-2979. DOI 10.1111/j.1467-2979.2010.00396.x.

GUTIÉRREZ, J.P., BENÍTEZ, L., RUIZ, L.A., ERDMANN, E. y TARIFA, E. "Simulacion Del Proceso De Endulzamiento De Gas Natural Con Aminas. Analisis Del Uso De Diferentes Simuladores". 2008 , pp. 1–12. Disponible en: http://www.usfx.bo/nueva/vicerrectorado/citas/TECNOLOGICAS_20/Ingenieria%20de%20Petroleo%20y%20Gas/TL98.pdf

HAFIZI, A., KOOLIVAND-SALOOKI, M., JANGHORBANI, A., AHMADPOUR, A. y MORADI, M.H. "An investigation of artificial intelligence methodologies in the prediction of the dirty amine flow rate of a gas sweetening absorption column". Petroleum Science and Technology [en línea], 2014, vol. 32, no. 5, pp. 527–534. ISSN 10916466. DOI 10.1080/10916466.2011.582067.

HAJI-SULAIMAN, M.Z., AROUA, M.K. y BENAMOR, A. "Analysis of equilibrium data of CO₂ in aqueous solutions of diethanolamine (DEA), methyldiethanolamine (MDEA) and their mixtures using the modified Kent Eisenberg model". Chemical Engineering Research and Design [en línea], 1998, vol. 76, no. 8, pp. 961–968. ISSN 02638762. DOI 10.1205/026387698525603.

HE, X., KUMAKIRI, I. y HILLESTAD, M. "Conceptual process design and simulation of membrane systems for integrated natural gas dehydration and sweetening". Separation and Purification Technology [en línea], 2020, vol. 247, no. December 2019, pp. 116993. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.116993. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.116993>.

HENSON, R.N. "Analysis of Variance (ANOVA)". *Brain Mapping: An Encyclopedic Reference*, 2015, vol. 1, pp. 477–481. DOI 10.1016/B978-0-12-397025-1.00319-5.

RIBEIRO, M., PELLEGRINI, F. y da SILVA, E. "Solventes de amina para absorção de gases ácidos em gás natural". *Anuário de Resumos 2021* [en línea], 2021, pp. 8-10. Disponible en: <https://doity.com.br/media/doity/submissoes/609074b3-aa74-48e3-b81e-6c640a883292-resexpsapct2021final--mariana-araujo-de-assis-ribeiropdf.pdf>

KHOSHNEVISAN, L., HOURFAR, F., ALHAMELI, F. y ELKAMEL, A. "Combining design of experiments, machine learning, and principal component analysis for predicting energy consumption and product quality of a natural gas processing plant". *International Journal of Energy Research* [en línea], 2021, vol. 45, no. 4, pp. 5974–5987. ISSN 1099114X. DOI 10.1002/er.6217.

LÓPEZ SOTO, P. "Contraste de hipótesis. Comparación de más de dos medias independientes mediante pruebas no paramétricas: Prueba de Kruskal-Wallis". *Revista Enfermería del Trabajo* [en línea], 2013, vol. 3, no. 4, pp. 166–171. ISSN 2174-2510.

MAC KINNON, M.A., BROUWER, J. y SAMUELSEN, S. "The role of natural gas and its infrastructure in mitigating greenhouse gas emissions, improving regional air quality, and renewable resource integration". *Progress in Energy and Combustion Science* [en línea], 2018, vol. 64, pp. 62–92. ISSN 03601285. DOI 10.1016/j.pecs.2017.10.002. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2017.10.002>.

MANDAL, B. y BANDYOPADHYAY, S.S. "Simultaneous absorption of CO₂ and H₂S into aqueous blends of N-methyldiethanolamine and diethanolamine". *Environmental Science and Technology* [en línea], 2006, vol. 40, no. 19, pp. 6076–6084. ISSN 0013936X. DOI 10.1021/es0606475.

MARTÍN, B. "Fundamentos de las redes neuronales artificiales: hardware y software". *Scire: representación y organización del conocimiento* [en línea], 1995, vol. 1, no. 1, pp. 103-125–125. ISSN 2340-7042.

MEDEIROS, D. DWSIM - Simulador de Procesos Químicos. 2019. Disponible en:
<https://dwsim.fossee.in>

MEDINA, E. Diseño de un Proceso para la Obtención de Petróleo Sintético mediante la Síntesis de Fischer-Tropsch. Parte 1: Unidad de Absorción [en línea] (Trabajo de titulación) (Superior). Universidad de Cádiz, Facultad de Ciencias, Puerto Real. 2015. pp. 7-39. Disponible en:
<https://rodin.uca.es/handle/10498/17713>

MORALES, G.V., TIRADO, G.M., CABRERA, D.E. y MERCADO, L. "Simulación del Proceso de Endulzamiento de Gas Natural". Información tecnológica [en línea], 2005, vol. 16, no. 6, pp. 33–36. [Consulta: 16 agosto 2021]. ISSN 0718-0764. DOI 10.4067/S0718-07642005000600006. Disponible en:
http://www.scielo.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0718-07642005000600006&lng=en&nrm=iso&tlng=en.

MOSAVI, A., SALIMI, M., ARDABILI, S.F., RABCZUK, T., SHAMSHIRBAND, S. y VARKONYI-KOCZY, A.R. "State of the art of machine learning models in energy systems, a systematic review". Energies [en línea], 2019, vol. 12, no. 7. ISSN 19961073. DOI 10.3390/en12071301.

NAHDLIYAH, S.D.N., FITRIYANI, N. y BIYANTO, T.R. "Optimization of CO2 contents and energy saving on sweetening gas processing plant using Particle Swarm Optimization (PSO) algorithm". Proceedings - 2016 6th International Annual Engineering Seminar, InAES 2016 [en línea], 2017, pp. 250–255. DOI 10.1109/INAES.2016.7821943.

OMAR, N.M. "Simulation and Optimization of Gas Sweetening Process at Mellitah Gas Plant Using Different Blends of Amines". University Bulletin [en línea], 2017, ISSUE No.19- Vol. (1), pp. 47–66. Disponible en: http://www.bulletin.zu.edu.ly/issue_n19_1/Contents/E_03.pdf

PAL, P., ABUKASHABEH, A., AL-ASHEH, S. y BANAT, F. "Role of aqueous methyldiethanolamine (MDEA) as solvent in natural gas sweetening unit and process contaminants with probable reaction pathway". Journal of Natural Gas Science and Engineering [en línea], 2015, vol. 24, pp. 124–131. ISSN 18755100. DOI 10.1016/j.jngse.2015.03.007.

Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2015.03.007>.

PATIL, P., MALIK, Z. y JOBSON, M. "Prediction of CO₂ and H₂S Solubility in Aqueous MDEA Solutions Using an Extended Kent and Eisenberg Model". Inst. Chem. Eng. Symp. Ser. FIELD Full Journal Title: Institution of Chemical Engineers Symposium Series [en línea], 2006, vol. 152, no. 152, pp. 498–510. Disponible en: <http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/prost/proceedings/distillation06/CD-proceedings/paper047.pdf>.

PAUL, S., GHOSHAL, A.K. y MANDAL, B. "Removal of CO₂ by single and blended aqueous alkanolamine solvents in hollow-fiber membrane contactor: Modeling and simulation". Industrial and Engineering Chemistry Research [en línea], 2007, vol. 46, no. 8, pp. 2576–2588. ISSN 08885885. DOI 10.1021/ie061476f.

QIAO, Z., WANG, Z., ZHANG, C., YUAN, S., ZHU, Y. y WANG, J. "PVAm-PIP/PS composite membrane with high performance for CO₂/N₂ separation". AIChE Journal [en línea], 2012, vol. 59, no. 4, pp. 215–228. ISSN 12350621. DOI 10.1002/aic.

QUEK, V.C., SHAH, N. y CHACHUAT, B. "Modeling for design and operation of high-pressure membrane contactors in natural gas sweetening". Chemical Engineering Research and Design [en línea], 2018, vol. 132, pp. 1005–1019. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.01.033. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2018.01.033>.

REZAKAZEMI, M., HEYDARI, I. y ZHANG, Z. "Hybrid systems: Combining membrane and absorption technologies leads to more efficient acid gases (CO₂ and H₂S) removal from natural gas". Journal of CO₂ Utilization [en línea], 2017, vol. 18, pp. 362–369. ISSN 22129820. DOI 10.1016/j.jcou.2017.02.006. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcou.2017.02.006>.

SAGHAFI, H. y ARABLOO, M. "Modeling of CO₂ solubility in MEA, DEA, TEA, and MDEA aqueous solutions using AdaBoost-Decision Tree and Artificial Neural Network". International Journal of Greenhouse Gas Control [en línea], 2017, vol. 58, pp. 256–265. ISSN 17505836. DOI 10.1016/j.ijggc.2016.12.014. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2016.12.014>.

SHANG, J., QIU, M. y JI, Z. "Efficiency improvement, consumption reduction and optimization of high-sulfur natural gas sweetening units". *Natural Gas Industry B* [en línea], 2019, vol. 6, no. 5, pp. 472–480. ISSN 23528559. DOI 10.1016/j.ngib.2019.02.004. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ngib.2019.02.004>.

VERA PEREZ, R.A. y VALDIVIA PÉREZ, L.M. "Simulación En Estado Estacionario De La Desacidificación Del Gas Natural, Mediante El Uso Del Simulador Aspen Hysys 8.8". Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa [en línea], 2019. Disponible en: <http://repositorio.unsa.edu.pe/handle/UNSA/10401>.

WANG, T., HOVLAND, J. y JENS, K.J. "Amine reclaiming technologies in post-combustion carbon dioxide capture Amine scrubbing is the most developed technology for carbon dioxide (CO₂) capture". [en línea], 2014, [Consulta: 26 octubre 2021]. DOI 10.1016/j.jes.2014.06.037. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jes.2014.06.037>.

YOUNAS, O. y BANAT, F. "Parametric sensitivity analysis on a GASCO's acid gas removal plant using ProMax simulator". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* [en línea], 2014, vol. 18, pp. 247–253. ISSN 18755100. DOI 10.1016/j.jngse.2014.03.007. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2014.03.007>.

ANEXOS

ANEXO A. VARIABLES UTILIZADAS EN EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA	
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
RNA	Archivo de Excel con la base de datos que vincula con MATLAB
Endulzamiento	Hoja específica del archivo de Excel con los valores a ingresar que vincula con MATLAB
Datos	Datos numéricos extraídos de Excel
Entradas	Valores de temperatura, presión y flujo molar
T	Temperatura
T_N	Temperatura normalizada
P	Presión
P_N	Presión normalizada
F	Flujo molar
F_N	Flujo molar normalizado
EntradasTotales	Matriz de todas las entradas
Ent_N	Matriz de todas las entradas normalizadas
Salidas	Fracciones molares de CO ₂ Y H ₂ S
CO2	Fracción molar de CO ₂
CO2_N	Fracción molar de CO ₂ normalizada
H2S	Fracción molar de H ₂ S
H2S_N	Fracción molar de H ₂ S normalizada
SalidasFinales	Matriz de todas las salidas
SF_N	Matriz de todas las salidas normalizadas
PropPred	Valores normalizados predichos por la RNA
CO2_pred	Fracción molar de CO ₂ predicho
H2S_pred	Fracción molar de H ₂ S predicho
ValorReal	Conjunto de las fracciones molares predichas por la RNA sin normalizar

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

ANEXO B. VALIDACIÓN DE LA RNA

VALIDACIÓN DE LA RNA	
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
RNA	Archivo de Excel con la base de datos que vincula con MATLAB
Validación	Hoja específica del archivo de Excel con los valores a ingresar que vincula con MATLAB
DatosVal	Datos numéricos extraídos de Excel
EntradasVal	Valores de temperatura, presión y flujo molar distintos a los seleccionados en el diseño y entrenamiento
Tval	Temperatura para la validación
T_Nval	Temperatura normalizada para la validación
Pval	Presión para la validación
P_Nval	Presión normalizada para la validación
Fval	Flujo molar para la normalización
F_Nval	Flujo molar normalizado para la validación
EntradasTotalesVal	Matriz de todas las entradas para la validación
Ent_Nval	Matriz de todas las entradas normalizadas para la validación
Prop_PredVal	Valores normalizados predichos por la RNA para la validación
CO2_predVal	Fracción molar de CO ₂ predicho para la validación
H2S_predVal	Fracción molar de H ₂ S predicho para la validación
ValorRealVal	Conjunto de todas las fracciones predichas por la RNA sin normalizar para la validación
SalidasVal	Fracciones molares de CO ₂ Y H ₂ S para la validación

Realizado por: Bastidas, Estiven, 2022.

ANEXO C. SCRIPT DEL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

%Leer tabla desde la hoja de excel

```
Extraer=readtable('RNA.xlsx','Sheet','Endulzamiento');
```

%Convertir la tabla en matriz numérica

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

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

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

%Parámetro de entrada Temperatura

```
T=Entradas(1,:);
```

%Temperatura Normalizada

```
T_N=normalize(T(1,:),'range');
```

%Parámetro de entrada Presión

```
P=Entradas(2,:);
```

%Presión Normalizada

```
P_N=normalize(P(1,:),'range');
```

%Parámetro de entrada Flujo molar

```
F=Entradas(3,:);
```

%Flujo molar normalizado

```
F_N=normalize(F(1,:),'range');
```

```
EntradasTotales=[T;P;F];
```

%Entradas Normalizadas

```
Ent_N=[T_N,P_N,F_N];
```

```

%-----SALIDAS-----
%Parámetro de salidas
Salidas=Datos(4:5,:);

CO2=Salidas(1,:);
H2S=Salidas(2,:);

%Salidas de CO2 y H2S normalizadas
CO2_N=normalize(Salidas(1,:), 'range');
    CO2_max=max(Salidas(1,:))
    CO2_min=min(Salidas(1,:))

H2S_N=normalize(Salidas(2,:), 'range');
    H2S_max=max(Salidas(2,:))
    H2S_min=min(Salidas(2,:))

SalidasFinales=[CO2;H2S]';

%Salidas Finales normalizadas
SF_N=[CO2_N,H2S_N];

%-----RED NEURONAL-----
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 09-Feb-2022 23:28:19
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% Ent_N - input data.
% SF_N - target data.

x = Ent_N';

```

```

t = SF_N';

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 170;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

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

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% For a list of all data division functions type: help nndivision
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

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

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

```

```

    'plotregression', 'plotfit'});

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

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

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

% View the Network
view(net)

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

% Deployment
% Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
% See the help for each generation function for more information.
if (false)

```



```

% Generate MATLAB function for neural network for application
% deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
% tools, or simply to examine the calculations your trained neural
% network performs.
genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
% Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
% generation with MATLAB Coder tools.
genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
% Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
% Simulink Coder tools.
gensim(net);
end
%-----
PropPred=net(Ent_N(:,1:3))
Prop_Reales=SF_N'

%VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR
CO2_pred=PropPred(1,:).*(CO2_max-CO2_min)+CO2_min;
H2S_pred=PropPred(2,:).*(H2S_max-H2S_min)+H2S_min;

%VALORES REALES
ValorReal=[CO2_pred;H2S_pred]';

```

ANEXO D. SCRIPT PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

%Leer tabla desde la hoja de excel

```
Extraer=readtable('RNA.xlsx','Sheet','Validación');
```

%Convertir la tabla en matriz numérica

```
DatosVal=table2array(Extraer);
```

%Cargar archivo net y parámetros de la Salida de la RNA

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

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

```
EntradasVal=DatosVal(1:3,:);
```

%Parámetro de entrada Temperatura

```
Tval=EntradasVal(1,:);
```

%Temperatura Normalizada

```
T_Nval=normalize(Tval(1,:),'range');
```

%Parámetro de entrada Presión

```
Pval=EntradasVal(2,:);
```

%Presión Normalizada

```
P_Nval=normalize(Pval(1,:),'range');
```

%Parámetro de entrada Flujo molar

```
Fval=EntradasVal(3,:);
```

%Flujo molar normalizado

```
F_Nval=normalize(Fval(1,:),'range');
```

```
EntradasTotalesVal=[Tval;Pval;Fval];
```

%Entradas Normalizadas

Ent_Nval=[T_Nval,P_Nval,F_Nval];

%Validación de la RNA

Prop_PredVal=net(Ent_Nval(:,1:3));

%VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR

CO2_predVal=Prop_PredVal(1,:).*(CO2_max-CO2_min)+CO2_min;

H2S_predVal=Prop_PredVal(2,:).*(H2S_max-H2S_min)+H2S_min;

%VALORES REALES

ValorRealVal=[CO2_predVal;H2S_predVal]';

%SALIDAS DWSIM

SalidasVal=DatosVal(4:5,:);



epoch

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: 20 / 06 / 2022

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Estiven Renato Bastidas Moreno
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.



1240-DBRA-UTP-2022



Firmado electrónicamente por:
**LEONARDO
FABIO MEDINA
NUSTE**