



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“MODELADO Y SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN DEL
TERC-BUTANOL PARA LA PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN
DE LOS PRODUCTOS MEDIANTE REDES NEURONALES
ARTIFICIALES”**

Trabajo de titulación

TIPO: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: DANIELA ESTEFANÍA OLEAS HINOJOSA

DIRECTOR: ING. DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO

Riobamba – Ecuador

2020

© 2020, Daniela Estefanía Oleas Hinojosa

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

Yo, Daniela Estefanía Oleas Hinojosa, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 14 de enero de 2021

Daniela E. Oleas Hinojosa
CI. 0604838169

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo “MODELADO Y SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN DEL TERC-BUTANOL PARA LA PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE LOS PRODUCTOS MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES”, realizado por la señorita: DANIELA ESTEFANÍA OLEAS HINOJOSA, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Luis Santiago Carrera Armendáriz PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	_____	14/01/2021
Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	_____	14/01/2021
Ing. Juan Pablo Chuquin Vasco MIEMBRO DEL TRIBUNAL	_____	14/01/2021

DEDICATORIA

El presente trabajo de titulación le dedico principalmente a Dios, por ser el inspirador y por ayudarme dándome fuerzas para continuar en este proceso de obtener uno de los anhelos más deseados.

A mis padres Joaquín Oleas y Fanny Hinojosa, por su amor, trabajo y sacrificio en todos estos años, gracias a ustedes he logrado llegar hasta aquí y convertirme en lo que en día soy.

Daniela Oleas

AGRADECIMIENTO

Como prioridad en mi vida agradezco a Dios por su infinita bondad, y por haber estado conmigo en los momentos que más lo necesitaba, por darme salud, fortaleza, responsabilidad y sabiduría, por haberme permitido culminar un peldaño más de mis metas, y porque tengo la certeza y el gozo de que siempre va a estar conmigo.

Agradezco de igual manera a mis padres Joaquín Oleas y Fanny Hinojosa quien con su apoyo, dedicación y ejemplo de lucha me ayudaron a superarme tanto académicamente como personalmente, este logro no es suficiente para agradecerles todo lo que hacen por mí.

A mis abuelitos que son como mis segundos padres María Luisa Santillán y Luis Estuardo Hinojosa que ahora es mi angelito de la guardia y sé que todas las bendiciones que Dios derrama sobre mí son por intersección suya

Agradezco también a mi Director de Trabajo de titulación el Ing. Daniel Chuquín, quien además de ser una persona con una gran calidad humana ha sido una pieza muy fundamental para que esta propuesta tecnológica se logre con éxito, gracias por toda su ayuda y colaboración desinteresada, apreció todo lo que ha hecho por mí.

Finalmente, gracias a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, que me acogió durante toda mi vida universitaria y me brindó las herramientas necesarias para poderme desenvolver como profesional.

Daniela Oleas

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	x
ÍNDICE DE FIGURAS	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
INDICE DE ABREVIATURAS	xiv
RESUMEN.....	xvi
SUMMARY	xvii
CAPITULO I	
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Planteamiento del problema.....	2
1.3. Justificación	3
1.1. Objetivo.....	4
1.1.1. Objetivo General.....	4
1.1.2. Objetivos Específicos.....	4
1.2. Alcance.....	5
CAPITULO II	
2. MARCO TEÓRICO.....	6
2.1. Estado del arte.....	6
2.2. Bases Teóricas.....	7
2.2.1. Separación de mezclas azeotrópicas.	7
2.2.1.1. Mezclas azeotrópicas.	7
2.2.1.2. Mezcla ter-butanol y agua.....	11
2.2.1.3. Destilación Extractiva Heterogénea Azeotrópica (AHED).....	13
2.2.2. DWSIM – Simulador de procesos químicos.....	15
2.2.2.1. Estándar CAPE-OPEN.....	19
2.2.2.2. IronPython.....	19

2.2.3.	Red de Neuronas Artificiales.	19
2.2.3.1.	Neurona de Entrada Múltiple.	19
2.2.3.2.	Estructura feedforward (avance) de RNAs.....	22
2.3.	Marco Legal	23
2.3.1.	Nacional	23
2.3.2.	Internacional.....	25
CAPITULO III		
3.	METODOLOGÍA	26
3.1.	Definición de Parámetros.....	27
3.1.1.	Diagrama PFD.....	27
3.1.2.	Parámetros del proceso a simular.....	29
3.1.2.1.	Generales.....	29
3.1.2.2.	Columna de Destilación 1	29
3.1.2.3.	Columna de Destilación 2	30
3.1.2.4.	Decantador y Makeup	30
3.2.	Simulación en DWSIM.....	31
3.2.1.	Procedimiento para realizar la simulación	31
3.2.2.	Crear y configurar la flowsheet.....	31
3.2.3.	Generar PFD.	32
3.2.3.1.	Diagrama de proceso.....	32
3.2.4.	Análisis de sensibilidad (IronPython)	34
3.2.4.1.	Algoritmo	34
3.2.5.	Configuración de la red neuronal.....	37
3.3.	Análisis estadístico.....	38
4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	39
4.1.1.	Cronograma.....	39
4.1.2.	Presupuesto	40
4.2.	Resultados, Discusión y Análisis De Resultados	40
4.2.1.	Simulación en DWSIM.....	40

4.2.2.	Balance de materia	42
4.2.2.1.	Balance general	42
4.2.2.2.	Balance de columna C1.....	44
4.2.2.3.	Balance de columna C2.....	45
4.2.2.4.	Balance en el decantador C3.....	47
4.2.3.	Redes Neuronales Artificiales.....	48
4.2.4.	Validación de resultados.....	49
4.2.5.	Predicción de valores con Red Neuronal Artificial.....	51
4.2.6.	Interpretación de los datos predichos por la RNA	51
4.2.6.1.	Datos de entrenamiento.....	52
4.2.6.2.	Datos de validación.....	57
4.2.7.	Análisis estadístico del error de aproximación.....	62

CONCLUSIONES

RECOMENDACIONES

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Propiedades físicas del terbutanol.....	12
Tabla 2-2. Operaciones unitarias de DWSIM.....	16
Tabla 3-2. Modelos termodinámicos disponibles en DWSIM.....	16
Tabla 4-2. Algoritmos flash disponibles en DWSIM.....	17
Tabla 5-2. Principales características del simulador DWSIM.....	18
Tabla 6-2. Legislación sobre software libre.....	23
Tabla 1-3. Condiciones generales de la simulación.....	29
Tabla 2-3. Condiciones de la columna C1.....	29
Tabla 3-3. Condiciones de Operación C2.....	30
Tabla 4-3. Condiciones de Operación Decantador.....	30
Tabla 5-3. Variables seleccionadas para las entradas RNA.....	36
Tabla 6-3. Variables de salida en datos de entrenamiento.....	36
Tabla 1-4. Cronograma del proyecto.....	39
Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto.....	40
Tabla 3-4. Resultados obtenidos de la simulación en DWSIM.....	41
Tabla 4-4. Validación de la simulación en DWSIM.....	41
Tabla 5-4. Error cuadrático medio de fases de ajuste de RNA.....	49
Tabla 12-4. Resultados de test ANOVA.....	63

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Principio físico químico para la formación de azeótropos.	8
Figura 2-2. Carácter azeotrópico de mezclas según ley de Raoult.....	9
Figura 3-2. Diagramas T y composición de mezclas azeotrópicas.	10
Figura 4-2. Estructura química y nomenclatura de 2-metil-2-propanol.....	11
Figura 5-2. Diagrama Temperatura y composición de la mezcla Terbutanol + Agua.	13
Figura 6-2. Métodos de separación de mezclas azeotrópicas.....	14
Figura 7-2. Diagrama de proceso de destilación azeotrópica heterogénea.	15
Figura 11-2. Principales tipos de redes neuronales.	20
Figura 12-2. Estructura de una neurona artificial.....	21
Figura 13-2. Diagrama de capas de una red neuronal artificial tipo feedforward.	23
Figura 1-3. Diagrama de proceso a seguir para el desarrollo de una RNA.	26
Figura 2-3. Diagrama de proceso de separación de terbutanol y agua por Yu et al., (2015).	28
Figura 3-3. Diagrama de proceso AHED para separación de terbutanol y agua.....	28
Figura 4-3. Procedimiento para simular en DWSIM.	31
Figura 5-3. Diagrama de proceso de AHED en DWSIM.....	32
Figura 6-3. Algoritmo para análisis de sensibilidad.....	34
Figura 7-3. Procedimiento para entrenamiento de RNA.....	37
Figura 1-4. Diagrama de balance general de masa.....	42
Figura 2-4. Diagrama de balance de masa columna C1.....	44
Figura 3-4. Diagrama de balance de masa columna C2.	45
Figura 4-4. Diagrama de balance de masa decantador C3.	47
Figura 5-4. Estructura de la RNA entrenada.	49

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-4. Evolución de MSE del proceso de entrenamiento.....	50
Gráfico 2-4. Resultados de la aproximación de la RNA.....	50
Gráfico 3-4. Flujo molar de destilado (D1), columna C1.....	52
Gráfico 4-4. Fracción molar de terbutanol de D1.....	53
Gráfico 5-4. Flujo molar de fondo (B1), columna C1.....	53
Gráfico 6-4. Flujo molar de destilado (D2), columna C2.....	54
Gráfico 7-4. Fracción molar de ciclohexano en D2.....	54
Gráfico 8-4. Flujo molar de fondo (B2), columna C2.....	55
Gráfico 9-4. Flujo molar de acuosos (AQ) del decantador.....	55
Gráfico 10-4. Fracción molar de agua en AQ.....	56
Gráfico 11-4. Flujo molar de orgánicos (OR) de decantador.....	56
Gráfico 12-4. Fracción molar de ciclohexano en OR.....	57
Gráfico 13-4. Flujo molar de destilado (D1), columna C1.....	57
Gráfico 14-4. Fracción molar de terbutanol en D1.....	58
Gráfico 15-4. Flujo molar de fondo (B1), columna C1.....	58
Gráfico 16-4. Flujo molar de destilado (D2), columna C2.....	59
Gráfico 17-4. Fracción molar de ciclohexano en D2.....	59
Gráfico 18-4. Flujo molar de fondo (B2), columna C2.....	60
Gráfico 19-4. Flujo molar de acuosos (AQ) del decantador.....	60
Gráfico 20-4. Fracción molar de agua en AQ.....	61
Gráfico 21-4. Flujo de orgánicos (OR) del decantador.....	61
Gráfico 22-4. Fracción molar de ciclohexano en OR.....	62

ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A** Código de la función de análisis de sensibilidad en IronPython-DWSIM.
- ANEXO B** Resultados de proceso de simulación de Destilación Extractiva Azeotrópica Heterogénea (Terbutanol/Agua/Ciclohexano).
- ANEXO C** Código escrito en Matlab para el ajuste de redes neuronales. Archivo “Red.m”.
- ANEXO D** Resultados obtenidos de DWSIM para todas las corrientes.
- ANEXO E** Resultados de entrenamiento de RNA.
- ANEXO F** Aval del trabajo de integración curricular.

INDICE DE ABREVIATURAS

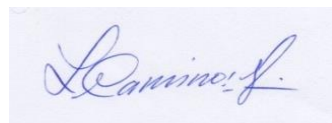
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
AQ	Flujo de fase acuosa
AQ_norm	Fase Acuosa Normalizada
AQ_pred	Fase Acuosa Predicha
AQ_predv	Fase Acuosa de la Validación
B1	Flujo de fondo de la columna C1 (Residuos)
B2	Flujo de fondo de la columna C2 (Residuos)
C1	Columna de extracción de agua
C2	Columna de extracción de terbutanol
C3	Decantador
CPRNA	Control predictivo con redes neuronales artificiales.
cy	Fracción Molar del Ciclohexano
Cy_Norm	Fracción Molar del Ciclohexano Normalizado
Cy_Normv	Fracción Molar del Ciclohexano de la Validación
D1	Destilado de la columna C1
D2	Destilado de la columna C2
Datos	Datos Iniciales vincula Matlab con la base de datos en Excel
Datos v	Datos para la Validación
dest_norm	Destilación de la C1 normalizada
dest_pred	Destilación de la C1 predicha
dest_predv	Destilación de la C1 de la validación
dest2_norm	Destilación de la C2 normalizada
dest2_pred	Destilación de la C2 predicha
dest2_predv	Destilación de la C2 de la validación
entrada_norm	Datos Iniciales de entrada
entrada_normv	Datos de entrada para la validación
F	Alimentación de mezcla azeotrópica terbutanol-agua
MCP	Modelo de control predictivo
OR	flujo de fase orgánica
OR_norm	Fase Orgánica normalizada
OR_pred	Fase Orgánica predicha
OR_predv	Fase Orgánica de la validación
PID	Controlador proporcional integral diferencial
R_norm	Residuo de la columna 1 Normalizado

R1_pred	Residuo de la columna 1 predicho
R1_predv	Residuo de la columna 1 de la validación
R2_norm	Residuo de la columna 2 Normalizado
R2_pred	Residuo de la columna 2 predicho
R2_predv	Residuo de la columna 2 de la validación
Real	Valores obtenidos del entrenamiento
RNA	Red de neuronas artificiales
Sal_norm	Salidas Normalizadas
Salidas	Salidas Generales
Salidasv	Salidas de la Validación
T	Temperatura
T_Norm	Temperatura Normalizada
T_Normv	Temperatura para la validación
TAME	Tert-amil metil eter
TBA	Terbutanol
Valor_DWSIM	Conjunto de Datos de la Simulación
Valor_DWSIMv	Conjunto de Datos de la Validación
Valor_Real	Conjunto de Datos del entrenamiento
Valor_Realv	Conjunto de Datos de la Validación
w	Agua
xAQw_norm	Porcentaje de agua en la Fase Acuosa Normalizada
xAQw_pred	Porcentaje de agua en la Fase Acuosa predicha
xAQw_predv	Porcentaje de agua en la Fase Acuosa de la validación
xcy_norm	Porcentaje de Ciclohexano en el Decantador
xcy_pred	Porcentaje de Ciclohexano predicho
xcy_predv	Porcentaje de Ciclohexano de la validación
xORcy_norm	Porcentaje de ciclohexano en la fase Orgánica Normalizada
xORcy_pred	Porcentaje de ciclohexano en la fase Orgánica predicha
xORcy_predv	Porcentaje de ciclohexano en la fase Orgánica de la Validación
xtb_norm	Porcentaje de terbutanol de la Alimentación
xtb_pred	Porcentaje de terbutanol Normalizado
xtb_predv	Porcentaje de terbutanol de la Alimentación para Validar

RESUMEN

El objetivo del presente trabajo fue desarrollar un modelo basado en Redes Neuronales Artificiales (RNA) para la predicción de la composición de los productos del proceso de destilación de la mezcla azeotrópica terbutanol y agua. El método de separación fue la destilación azeotrópica heterogénea usando como agente de separación al Ciclohexano. Para realizar la simulación se usó el simulador de procesos DWSIM, desarrollando una función de análisis de sensibilidad codificada en Python. Esta función permite obtener resultados de la simulación variando aleatoriamente los parámetros de entrada: flujo molar de alimentación, fracción molar de terbutanol en la alimentación, temperatura de la alimentación y el flujo molar del agente azeotrópico. Los resultados se tabularon y usaron como datos para el proceso de entrenamiento de la Red de Neuronas Artificiales, conformados por 4 entradas y 10 salidas. La RNA fue desarrollada en MATLAB con la herramienta Neural Network Fitting y probada con un segundo grupo de datos generados con el simulador. El resultado fue comparado y validado usando el test ANOVA de una vía para datos independientes. El valor del coeficiente de correlación lineal para las predicciones fue de 0.9599 con un 95% de confianza. Los resultados del test ANOVA muestran que no existe diferencia significativa entre los resultados obtenidos del simulador y los obtenidos de la RNA, para todas las salidas estudiadas. La estructura feedforward de la RNA está conformada por 25 nodos en las capas ocultas y 10 en la capa de salida, usando un algoritmo de aprendizaje de tipo backpropagation. Se recomienda la aplicación de otras estructuras de RNA, así como de algoritmos de aprendizaje, para extender el estudio del proceso de separación de terbutanol-agua.

Palabras clave: <TECNOLOGÍA Y CIENCIAS DE LA INGENIERÍA> <RED NEURONAL ARTIFICIAL> <DESTILACION AZEOTRÓPICA> <TERBUTANOL> <MATLAB (SOFTWARE)> <SIMULADOR DWSIM>



11-08-2020
0196-DBRAI-UPT-2020

SUMMARY

The objective of this work was to develop a model based on Artificial Neural Networks (ANN) for the prediction of the composition of the products of the distillation process of the azeotropic mixture terbutanol and water. The separation method was heterogeneous azeotropic distillation using Cyclohexane as the separating agent. To carry out the simulation, the DWSIM process simulator was used, developing a sensitivity analysis function encoded in Python. This function enables simulation results to be obtained by randomly varying the input parameters: feed molar flow, molar fraction of terbutanol in feed, feed temperature, and azeotropic agent molar flow. The results were tabulated and used as data for the Artificial Neuron Network training process, made up of 4 inputs and 10 outputs. The RNAs were developed in MATLAB with the Neural Network Fitting tool and tested with a second set of data generated with the simulator. The result was compared and validated using the one-way ANOVA test for independent data. The value of the linear correlation coefficient for the predictions was 0.9599 with 95% confidence. The results of the ANOVA test show that there is no significant difference between the results obtained from the simulator and those obtained from the RNA, for all the outputs studied. The feedforward structure of RNA is made up of 25 nodes in the hidden layers and 10 in the output layer, using a backpropagation-type learning algorithm. The application of other RNA structures, as well as learning algorithms, is recommended to extend the study of the terbutanol-water separation process.

Keywords: <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY> <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK> <AZEOTROPIC DISTILLATION> <TERBUTANOL> <MATLAB (SOFTWARE)> <DWSIM SIMULATOR>

CAPITULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

La simulación es un campo de la matemática e informática, que empezó su desarrollo con la aparición de las primeras computadoras “personales” en la década de 1950, en Estados Unidos. Varias ramas de la ingeniería empezaron a desarrollar modelos matemáticos de procesos relacionados a sus campos. La ingeniería química no se quedó atrás, en el uso de lo que para entonces era un campo inexplorado. El primer simulador de procesos químicos fue publicado en 1958 y el esquema de modelado modular de los procesos en 1960. La estructura de un simulador de procesos químicos, siguen este esquema hasta la actualidad. Este esquema modular está conformado por tres módulos: 1) la librería de subrutinas de unidades de proceso, 2) la librería de propiedades termodinámicas y físicas, y 3) el software ejecutor con su librería de servicios (Motard, Shacham y Rosen, 1975, p. 417).

El primer simulador comercial fue lanzado en 1966 en los Ángeles por *Simulation Science*. El nombre de este simulador era PROCESS y ayudaba a diseñar columnas de destilación. Este software evoluciono a PRO/II y es propiedad de Schneider Electric en la actualidad. Otro software de diseño y simulación para la industria del gas y petróleo fue lanzado en 1969 con el nombre DESIGN. En la actualidad se conoce como DESIGN II y es propiedad de *WinSim* desde 1995 (Siewhui Chong, 2019, p. 4).

El proyecto que definió las bases de los simuladores modernos fue el proyecto ASPEN (Advanced System for Process ENgineering), llevado a cabo por el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) y el Departamento de Energía de los Estados Unidos de América. Este proyecto derivó en la creación de AspenTech Co., quienes comercializaron el software resultante del proyecto. Proyecto similar fue llevado a cabo en el Reino Unido por el Imperial College dando origen al simulador SPEEDUP, actualmente conocido como gPROMS. Todo este desarrollo tuvo lugar en la época dorada de la computación, la década de 1980 (Siewhui Chong, 2019, p. 8).

Una definición plateada por Thome, (2001) captura las características esenciales del proceso de simulación:

“Simulación es el proceso de diseño de un modelo operacional de un sistema y conducir experimentos con dicho modelo con el propósito de: comprender el comportamiento del sistema o evaluar alternativas para el desarrollo y operación del sistema. Este modelo debe reproducir

aspectos específicos del comportamiento del sistema modelado con un grado aceptable de precisión.”

Las áreas de aplicación de la simulación en ingeniería química son: la investigación y desarrollo, el diseño y la operación de procesos industriales. La simulación puede minimizar la necesidad de investigación en laboratorio, pero no eliminarla por completo, por ejemplo, para calibrar modelos se requiere datos experimentales. Siendo la experimentación la que valida un modelo, el proceso de innovación en procesos empieza en el laboratorio.

En el diseño de procesos la simulación a probado ser una herramienta útil en distintos aspectos de la disciplina como: mantener una alta eficiencia en el uso de materia prima y energía, aumentar la flexibilidad de los procesos a la dinámica del mercado y la optimización con el objetivo de obtener procesos limpios (ambientalmente) y seguros. Todo esto se debe lograr en las etapas tempranas del diseño, para evitar costosas modificaciones.

La operación de procesos con el desarrollo de nuevas tecnologías, emplea la simulación con el objetivo de optimizar en tiempo real operaciones o el proceso completo. El control de procesos basado en modelos, también emplea simulaciones para calibrar, tanto modelos como controladores.

En conclusión, la simulación de procesos es una herramienta clave para asegurar excelencia en: la investigación, desarrollo, diseño y operación de Procesos. Aun en la actualidad existe mucho por desarrollar en este campo, con el uso de la Inteligencia Artificial (Redes Neuronales Artificiales incluidas).

1.2. Planteamiento del problema.

El ter-butanol (2-metil-2-propanol) es uno de los químicos más usados en la industria como: solvente, componente básico para preparar resinas sintéticas solubles en aceite, agente desespumante en pinturas o como removedor de recubrimientos. Como resultado el ter-butanol es uno de los principales contaminantes presentes en las aguas residuales provenientes de la industria de los plásticos (petroquímica). Esta es la razón por la que este trabajo plantea la generación de un modelo del proceso de separación de la mezcla azeotrópica, conformada por ter-butanol y agua. El modelo es en una red neuronal artificial, que predice las concentraciones de salida del proceso antes descrito.

Generalmente dentro del ámbito industrial siempre se busca mejorar la productividad de los procesos, y por consiguiente lograr un aumento en la competitividad frente a los rivales empresariales. En el pasado, cuando las computadoras no eran de acceso masivo, el trabajo de

diseño de ingeniería tomaba años en producir innovaciones, esto ha cambiado con la aparición del diseño asistido por ordenador. En la actualidad, existe una enorme cantidad de software que intenta simplificar el proceso de diseño y toma de decisiones de los grupos de trabajo multidisciplinares a cargo del desarrollo de proyectos en el área química.

Muchos productos de la industria química se obtienen en combinación con subproductos. Muchas de las veces estos subproductos no son reutilizables para la industria y son desechados. Es aquí cuando al combinarse con otros efluentes de desecho industriales, el resultado es una mezcla difícil de tratar, de forma que pueda ser eliminada con el menor impacto ambiental posible. La dificultad de separar estos subproductos aumenta por la presencia de azeótropos que complican el proceso de separación por métodos como la destilación. Como consecuencia, estudiar como separar estos subproductos de mezclas con agua es de vital importancia para la industria química, por la reciente tendencia a desarrollar procesos químicos amigables con el ambiente.

Como resultado, el presente trabajo pretende ser una referencia para los estudiantes hacia las nuevas tecnologías aplicadas a la profesión. Temas como la inteligencia artificial, modelado y simulación, uso de lenguajes de programación orientada al cálculo (MATLAB), deben ser de conocimiento general para los estudiantes de pregrado.

1.3. Justificación

Las actividades como el diseño, instalación, puesta en marcha, operación, mantenimiento, evaluación, optimización, simulación y planificación de los procesos industriales se encuentran íntimamente relacionados con la disciplina de Ingeniería Química. En los últimos años, la simulación de procesos ha llegado a ser una herramienta adecuada y oportuna de apoyo para el diseño, caracterización y monitoreo del funcionamiento de procesos industriales. Per se, es un modelo predictivo que en diferentes empresas de nuestro país estarían prestos a implementar, ya que se encuentran en una etapa de cambios significativos, debido a la globalización en la que nos encontramos inmersos y todos ellos refieren a la simulación como: “Una herramienta de partida para cualquier proceso”.

De igual forma, se tiene conocimiento que una de las áreas de investigación está dedicada a la predicción del comportamiento de un proceso, basado en la inteligencia artificial. Esto debido a que muchos procesos tienen comportamientos no lineales como es el caso de estudio de la destilación azeotrópica del ter-butanol. Por consiguiente, el diseño de la red neuronal en MATLAB ayudara en la predicción.

Dentro de esta propuesta Tecnológica se utilizó como simulador de procesos químicos a DWSIM que tiene una interfaz gráfica intuitiva y fácil de usar. Con muchas de las funciones que se encuentran en simuladores comerciales. Permite usar una lista completa de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas reactivos y herramientas de caracterización de crudos. MATLAB se usó para diseñar una red neuronal para las estimaciones de los datos y cálculos presentes de la destilación del ter-butanol.

1.1. Objetivo

1.1.1. Objetivo General.

Modelar y simular el proceso de destilación del ter-butanol para la predicción de la composición de los productos mediante Redes Neuronales Artificiales.

1.1.2. Objetivos Específicos.

- Determinar los parámetros de simulación de la destilación del ter-butanol a partir de fuentes bibliográficas.
- Validar el proceso de simulación con base en referencias científicas especializadas y mediante balances de masa del proceso.
- Diseñar una red neuronal para la predicción de la composición de ter-butanol de la destilación ter-butanol agua.
- Predecir la composición de ter-butanol variando los parámetros de entrada de la RNA.

1.2. Alcance

El presente trabajo usa herramientas tecnológicas con énfasis en el desarrollo de un modelo para predecir la composición de salida de un proceso de destilación extractiva heterogénea de una mezcla de terbutanol y agua, usando como agente separador al ciclohexano. Como resultado se obtiene datos generados por un modelo creado en el simulador DWSIM y los resultados obtenidos con la herramienta Neural Fitting Tool de MATLAB. Al final, el modelo de red de neuronas artificiales se pone a prueba y valida comparando sus resultados con los resultados del simulador, usando el test ANOVA en el software SPSS.

CAPITULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del arte

En la industria química existen muchos procesos que tienen comportamientos complejos difíciles de modelar con las técnicas tradicionales. Los errores que se obtienen por modelos limitados por su aplicabilidad a rangos pequeños con márgenes de error considerables, aumentan los costos del proceso de diseño. En procesos de diseño de sistemas de control avanzado se ha detectado que el coste de modelado asciende a casi el 75% (Hussain, 1999, p. 8). Las aplicaciones registradas en artículos publicados muestran que las redes neuronales se han usado en distintas áreas como: control de procesos, detección de fallas de operación, procesamiento de señales, análisis de datos de sensores y modelado de procesos.

La primera aplicación formal de redes neuronales artificiales se remonta al año 1943 en el trabajo de McCulloch W. y Pitts W. en la universidad de Chicago. El modelo de neurona desarrollado intentaba imitar el comportamiento de una neurona del cerebro humano (Rojas, 1996). Las RNA (Red de Neuronas Artificiales) presentan una capacidad de solución de problemas que son altamente no lineales, difíciles de modelar por métodos numéricos o modelos estadísticos. Por ello, en las décadas posteriores al trabajo de McCulloch y Pitts, a la par del desarrollo del hardware, fue creciendo la tendencia del uso de esta herramienta matemática. Muchos autores han realizado revisiones del estado del arte en distintas áreas de la ciencia y técnica en el campo de las redes neuronales por ejemplo: en medicina (Haque y Kashitiban, 2005, p. 12), ingeniería de control de procesos (Hussain, 1999, p. 5) (Kramer y Morgado-Dias, 2018, p. 7), reconocimiento facial (Kasar, Bhattacharyya y Kim, 2016, p. 13), Ingeniería de transporte (Kirby y Parker, 1994, p. 2), entre otros.

En la ingeniería química existen diferentes áreas para la aplicación de las redes neuronales, como por ejemplo en el control de procesos químicos como la destilación. Singh, Gupta y Gupta (2005) desarrollaron un modelo (estimador) de control basado en RNA para controlar la composición de salida de una columna de destilación de 17 etapas, incluyendo condensador y reboiler, para la separación de una mezcla de 5 componentes. El estimador tenía 17 entradas, 10 salidas, 5 capas con la siguiente configuración de neuronas: 17 entrada-35x3 capas ocultas y 10 salidas. El resultado fue un modelo muy preciso cumpliendo con el objetivo planteado por el estudio.

También se han hecho comparaciones entre los métodos de control aplicables a procesos químicos. Por ejemplo, Sharma y Singh (2012) desarrollaron un estudio comparativo sobre tres

métodos para controlar la composición de salida de proceso de síntesis de tert-amil metil eter (TAME), proceso que se lleva a cabo dentro de una columna de destilación reactiva, y que es altamente complejo y no lineal. Los métodos usados fueron: PID, Modelo de control predictivo (MCP) y Control Predictivo con Redes Neuronales Artificiales (CPRNA). Los resultados muestran que tanto MCP y CPRNA permiten un control preciso de la composición de TAME en la corriente de fondos de la columna, manipulando el flujo de energía de entrada al reboiler.

Otro ejemplo de aplicación es la correlación de propiedades físico-químicas; Nguyen et al., (2007) desarrollaron un modelo basado en RNA para la correlación de propiedades de equilibrio vapor-líquido, con el objeto de obtener mejores aproximaciones comparadas con las obtenidas por modelos termodinámicos. La arquitectura de la RNA fue de 4 capas con la siguiente distribución 8-6-7-4. Los casos de estudio fueron dos mezclas ternarias de: agua/etanol/2-propanol saturado con NaNO₃, NaCl y KCl a 1 atm, y agua/etanol/1-propanol saturado con las mismas sales y a la misma presión. Estas mezclas son muy comunes en la industria electrónica en el tratamiento de semiconductores para la fabricación de placas de circuitos, siendo necesaria su recuperación con el objetivo de reducir costos. Los datos usados para el entrenamiento fueron obtenidos con el modelo de Tan-Wilson. El resultado fue un bajo error en los datos obtenidos por la RNA en comparación con el modelo termodinámico.

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Separación de mezclas azeotrópicas.

2.2.1.1. Mezclas azeotrópicas.

El termino azeótropo significa “sin forma de hervir”, este término es asignado a mezclas que tiene un punto en su composición que las hace imposible de separar por destilación simple. El carácter azeotrópico de una mezcla está definido por su no idealidad. Matemáticamente el carácter ideal o no ideal de una mezcla lo define un parámetro llamado coeficiente actividad química (γ). Una mezcla ideal tiene un valor igual a 1 para este parámetro, mientras que una mezcla azeotrópica tiene valores diferentes a la unidad. La ecuación 1 describe el equilibrio entre fases líquida y vapor de una mezcla a de n componentes a condiciones de presión y temperatura constantes. Donde y_i y x_i corresponden a la fracción del componente i en el vapor y líquido respectivamente y P_i^{sat} es la presión de saturación de vapor del componente i . Como se observa el coeficiente de actividad

química depende de la temperatura (T) y la composición (x), como resultado la interacción entre las moléculas de los componentes (diferentes o similares) puede ser fuerte o débil.

$$y_i P = x_i \gamma_i(T, x) P_i^{sat}(T) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \text{Ecuación 1}$$

Si el coeficiente de actividad es igual a 1 ($\gamma_i = 1$) se obtiene la ecuación de la ley de Raoult, véase ecuación 2. Si la variación del coeficiente de actividad química es muy grande existe una alta probabilidad de formación de un azeótropo, con un punto extremo de presión en condiciones isotérmicas o una temperatura extrema en condiciones isobáricas. En la figura 1-2, se observa un diagrama con el principio de formación de azeótropos en función del coeficiente de actividad.

$$y_i P = x_i P_i^{sat}(T) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \text{Ecuación 2}$$

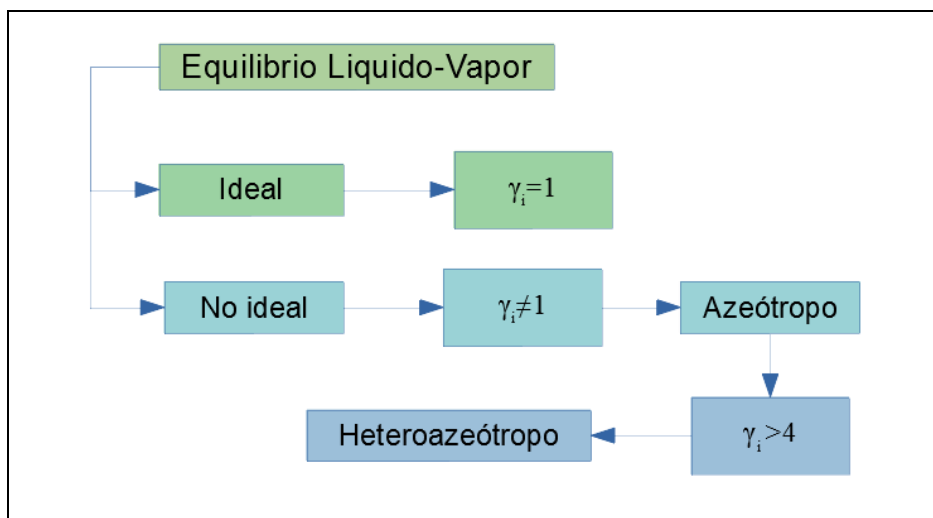


Figura 1-2. Principio físico químico para la formación de azeótropos.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

La figura 1-2, muestra que un sistema en equilibrio líquido vapor puede ser de carácter ideal o no ideal, en función de su valor de coeficiente de actividad. Dentro del comportamiento no ideal si el valor del coeficiente de actividad es mucho mayor que 4 el sistema muestra un comportamiento heterogéneo. Las mezclas azeotrópicas pueden ser homogéneas o heterogéneas. Una mezcla homogénea no presenta división de la fase líquida (figura 3-2 a) y en cambio si la desviación de comportamiento de la mezcla es positiva en relación a la ley de Raoult, (mayor a 4 normalmente) la fase líquida se separa en dos fases que convergen tangencialmente en el azeótropo (figura 3-2 b). En este punto tanto el vapor como el líquido (dos fases) tienen la misma composición.

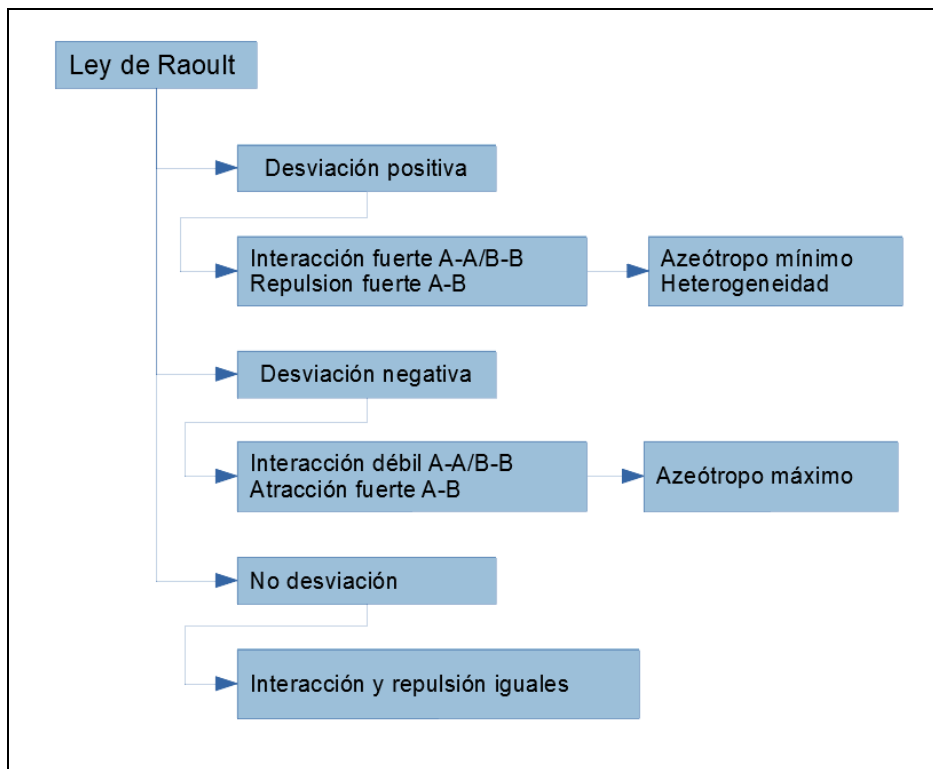


Figura 2-2. Carácter azeotrópico de mezclas según ley de Raoult.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Con base en la ley de Raoult, se puede definir el comportamiento que tiene las mezclas no ideales y si estas pueden formar azeótropos. Si una mezcla tiene una desviación positiva con relación a la ley de Raoult (Resultados superiores a los calculados con la ecuación de Raoult) dentro de la mezcla, la interacción entre moléculas del mismo componente es más fuerte a comparación con la fuerza entre moléculas de distintos componentes. El resultado es posiblemente la formación de un azeótropo mínimo y la posible separación de la fase líquida (heterogeneidad). En cambio, si la desviación es negativa existe una atracción débil entre iguales y fuerte entre moléculas diferentes. Esto produce un azeótropo máximo y posiblemente un sistema homogéneo. (véase figura 2-2)

En la figura 3-2, se muestra diagramas de temperatura y composición de sistemas azeotrópicos: a) homogéneo y b) heterogéneo. A un sistema azeotrópico homogéneo también se lo puede llamar homoazeotrópico y a uno heterogéneo heteroazeotrópico. En la figura 3-2 (a), se observa un sistema homoazeotrópico donde la composición de la fase líquida y de vapor son iguales y las curvas de temperatura de condensación y ebullición son tangenciales con una pendiente igual a 0. En la figura 3-2 (b) se observa un punto heteroazeotrópico donde el vapor se encuentra en equilibrio con dos fases líquidas. La composición del vapor y el total de líquido son iguales pero la composición de las fases es diferente. Por la forma que toman las curvas de equilibrio de las fases se le suele llamar como azeótropo de ebullición intermedio o “silla de montar”.

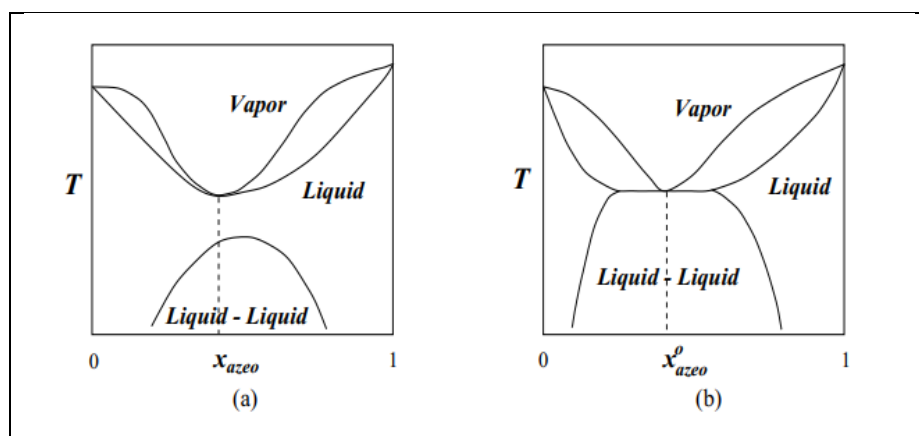


Figura 3-2. Diagramas T y composición de mezclas azeotrópicas.

Fuente: (Hilmen, 2000)

Otra forma de definir si una mezcla es azeotrópica, es con la volatilidad relativa (ecuación 3). Valores de volatilidad cercanos a la unidad hacen inviable la separación de esos componentes (punto azeotrópico). El rango establecido de volatilidad para separaciones inviables económicamente es $(0.95 < \alpha_i < 1.05)$, esto debido a que se requiere un mayor número de etapas y por un aumento en los costos de operación. La ecuación 3 permite calcular la volatilidad relativa de un componente i dentro una mezcla de componentes n . En sistemas multicomponente se tiene volatilidades en relación a cada par de componentes de una mezcla.

$$\alpha_i = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} = \frac{\gamma_i P_i^{sat}}{\gamma_j P_j^{sat}} \quad \text{Ecuación 3}$$

Las mezclas azeotrópicas son un campo aun en exploración, muchos investigadores aún siguen buscando comprenderlas de mejor manera, por ejemplo: Liu et al., (2020) en su trabajo obtuvieron datos de equilibrio químico entre fases de una mezcla azeotrópica conformada por etil-acetato y n-pentano. Con el objetivo de usarlos para el diseño, modelado y optimización de sistemas de extracción de esta mezcla. Usaron dos componentes como posibles agentes de separación: p-xileno y butil-butirato. Los datos experimentales fueron evaluados usando modelos termodinámicos: NTRL, UNIQUAC y el modelo de Wilson, obteniendo un bajo error entre los modelos y los datos experimentales. Sosa et al., (2020) sintetizaron líquidos iónicos próticos (PIL en inglés) en base al catión 2-hidroxi-etil-amonio, para usarlo como agente separador de mezclas azeotrópicas de hexano y heptano con etanol. De los PIL se obtuvieron sus propiedades termodinámicas con el objetivo de usarlos en simuladores. Al final plantearon un proceso de

extracción líquido-líquido en lugar de una destilación extractiva o azeotrópica como mejor solución para la separación.

2.2.1.2. Mezcla ter-butanol y agua.

El terbutanol (TBA) o 2-metil-2-propanol (CAS 75-65-0) es un compuesto orgánico usado como solvente para: resinas, grasas, aceites, ácidos grasos, hidrocarburos e hidróxidos alcalinos. Es usado también en la industria de los colorantes, en la industria farmacéutica como intermedio en la síntesis de drogas sintéticas. Es útil en la industria de los elastómeros, soluciones de limpieza, cosméticos y medicina. Pero es mucho más conocido por su uso como antidetonante de combustibles y como aditivo anticongelante. Es un líquido combustible y tóxico en caso de contacto cutáneo, con los ojos, ingestión e inhalación. El TBA se sintetiza por hidratación en fase líquida de alquenos usando resinas de intercambio iónico, específicamente se obtiene mediante hidratación catalítica de 2-metilpropeno. También se obtiene como subproducto de la síntesis de óxido de propileno y éteres de t-butil. Su fórmula condensada es $C_4H_{10}O$ y presenta una estructura tridimensional casi tetraédrica, figura 4-2.

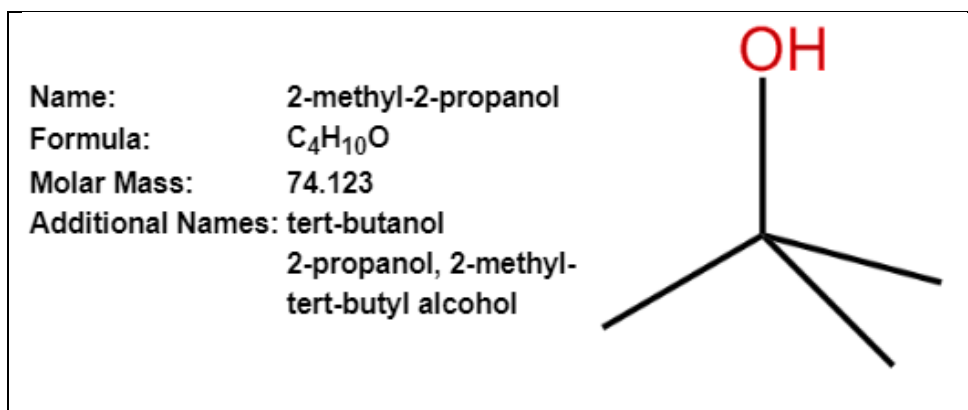


Figura 4-2. Estructura química y nomenclatura de 2-metil-2-propanol.

Fuente: (NIST, 2020)

El ter-butanol es un líquido de color blanco o translucido, con un olor alcanforado. Su punto de fusión está alrededor de $25.7^{\circ}C$ (298.85 K), punto de inflamación alrededor de $82.41^{\circ}C$ (354.5K). Su presión de vapor a condiciones normales es de 4.1kPa y una densidad relativa al agua (estado líquido) de 0.786. Más propiedades se muestran en la tabla 1-2.

Tabla 1-2. Propiedades físicas del terbutanol.

Propiedad	Valor
Estado Físico	Líquido
Color	Blanco
Olor	Alcanfor
Umbral olfativo	219 ppm
Punto de fusión	25.7 °C
Punto de inflamación	82.41 °C
Tasa de evaporación	16.2 °C
Límites de explosión	Inferior: 2.4% V/V Superior: 8% V/V
Presión de vapor a 20°C	4.1 kPa
Densidad relativa de vapor (aire=1)	2.55
Densidad relativa (agua=1)	0.78581
Solubilidad en agua	Soluble
Solubilidad en otros disolventes	Soluble en ésteres, hidrocarburos alifáticos y aromáticos, alcohol y éter.
Temperatura de auto inflamación	477.78 °C

Realizado por: OLEAS D., 2020.

A presión atmosférica, el terbutanol forma un azeótropo con el agua. Este azeótropo contiene aproximadamente 12% en masa de agua y su temperatura de ebullición es de 79.9 °C (353.05 K). Para separar este azeótropo, se utiliza el ciclo hexano como agente para la destilación heteroazeotrópica de la mezcla TBA-agua (Gracsová, Šulgan et. al 2020). En figura 5-2, se observa la curva el diagrama temperatura y composición de la mezcla TBA-Agua. Se muestran las curvas de temperatura de ebullición y condensación unirse cerca del punto azeotrópico.

Las mezclas de terbutanol-agua se pueden encontrar en las vertientes de residuos de la industria farmacéutica y de procesamiento químico. La separación de estos componentes es primordial para salvaguardar la integridad del ambiente, recuperar el terbutanol por razones económicas y para mejorar la tecnología de la industria química. Ecuador como un país en vías de desarrollo debe precisar en su camino hacia la industrialización del conocimiento para evitar la contaminación y la ineficiencia en su industria química.

En un estudio reciente de Liu X, et al. (2020) midieron las propiedades críticas del ter-butanol en mezclas con hidrocarburos del rango de hidrocarburos de la gasolina con el objetivo de prestar

mayor información para posteriores diseños de procesos que usen este compuesto como aditivo. Ya que varios otros autores encontraron que es una mejor alternativa al etanol, por ser menos corrosivo y de mayor poder calórico.

2.2.1.3. Destilación Extractiva Heterogénea Azeotrópica (AHED).

La destilación azeotrópica es una técnica desarrollada para separar mezclas que resultan difíciles con métodos convencionales como la destilación simple. Los azeótropos se forman debido a la diferencia de temperatura entre los componentes de una mezcla y al carácter no lineal de la misma. Pequeñas diferencias en las temperaturas de ebullición de los componentes aumentan la probabilidad de formación de un azeótropo. Conocer cuando y donde se forman estas mezclas es necesario para industrias como la del procesamiento de petróleo. Durante el proceso de fraccionamiento se forman mezclas azeotrópicas, que hacen difícil la separación de los hidrocarburos. Existen muchas mezclas azeotrópicas descubiertas en el último siglo y en este trabajo trataremos con una de ellas: terbutanol y agua. Con el paso del tiempo muchos métodos fueron desarrollados con el objetivo de reducir los costos del proceso de separación de mezclas azeotrópicas. Algunos de los métodos más usados se muestran en la figura 6-2.

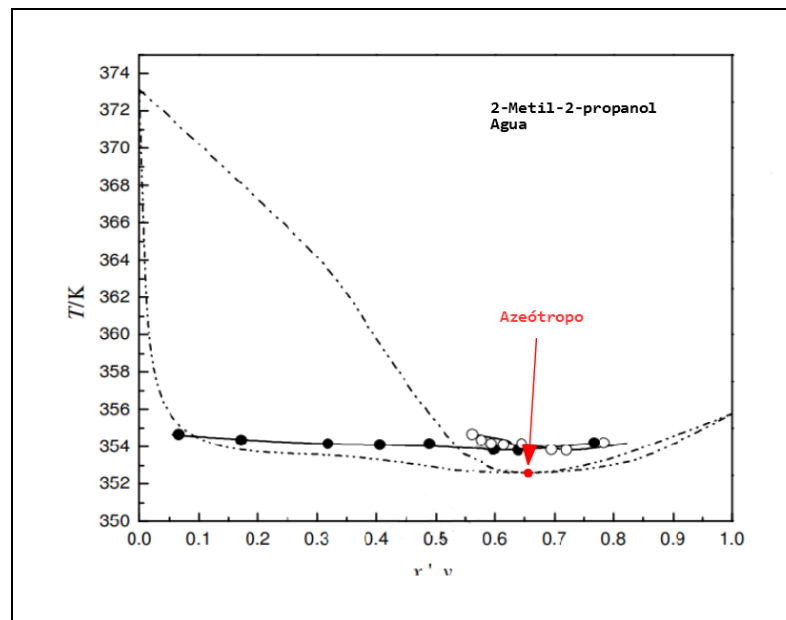


Figura 5-2. Diagrama Temperatura y composición de la mezcla Terbutanol + Agua.

Fuente: (Hartanto et al., 2016)

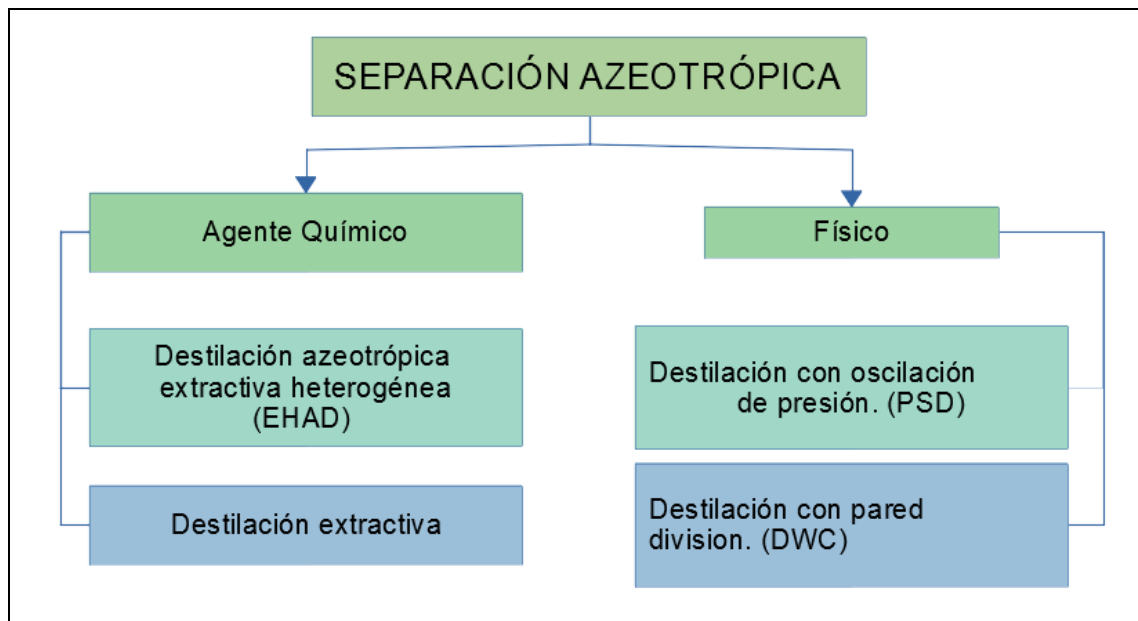


Figura 6-2. Métodos de separación de mezclas azeotrópicas.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

El objeto de estudio de este trabajo es el método de destilación azeotrópica extractiva heterogénea (AHED). El proceso se lleva a cabo en un sistema columna-decantador. En la figura 7-2, se observa un diagrama de proceso del método AHED. El método AHED usa una sustancia como agente de azeotrópico (entrainer) que forma heteroazeótropos con al menos uno de los componentes de la mezcla. Formando dos fases líquidas, que pueden ser separadas usando una operación líquido-líquido; el método más común es la decantación (Hilmen, 2000). El agente azeotrópico se recupera, pero trazas del mismo se pierden en el producto. Siendo necesario realimentarlo en pequeñas cantidades, esto normalmente se realiza después del decantador (Shi et al., 2018, p. 3).

En la figura 7-2, se puede observar que el proceso AHED comienza con la alimentación de la mezcla azeotrópica (F) en la columna C1. En esta columna se extrae por la corriente de fondo el componente B en mayor cantidad con pequeñas trazas de los otros componentes (A y entrainer). La corriente superior pasa por un intercambiador de calor, que condensa la corriente, entrando al decantador en forma líquida. En el decantador coexisten dos fases líquidas que son separadas: una es retro alimentada a la columna C1 (AQ) y la segunda es alimentada a la columna C2 (OR). La corriente AQ tiene una composición mayoritaria en el componente B, mientras que OR mayoritariamente está compuesta por el componente A. Debido a que trazas del agente azeotrópico (entrainer) se pierden en las corrientes B1 y B2, es necesario realimentar el proceso. En el proceso de la figura 7-2, la alimentación del agente azeotrópico se hace en la corriente AQ. El proceso descrito se lleva en condiciones isobáricas. Una variante de este proceso será usada en este trabajo y su descripción está en la sección de definición de parámetros.

2.2.2.DWSIM – Simulador de procesos químicos.

DWSIM posee una interfaz gráfica intuitiva y fácil de usar, con gran parte de las herramientas necesarias para modelar procesos químicos. En la tabla 2-2 se presentan las operaciones unitarias básicas del simulador:

Para el cálculo de las propiedades físico-químicas se requiere modelos termodinámicos. DWSIM integra una lista de modelos aplicables a un amplio rango de componentes puros y mezclas, en la tabla 3-2 se observa una lista de los modelos termodinámicos disponibles.

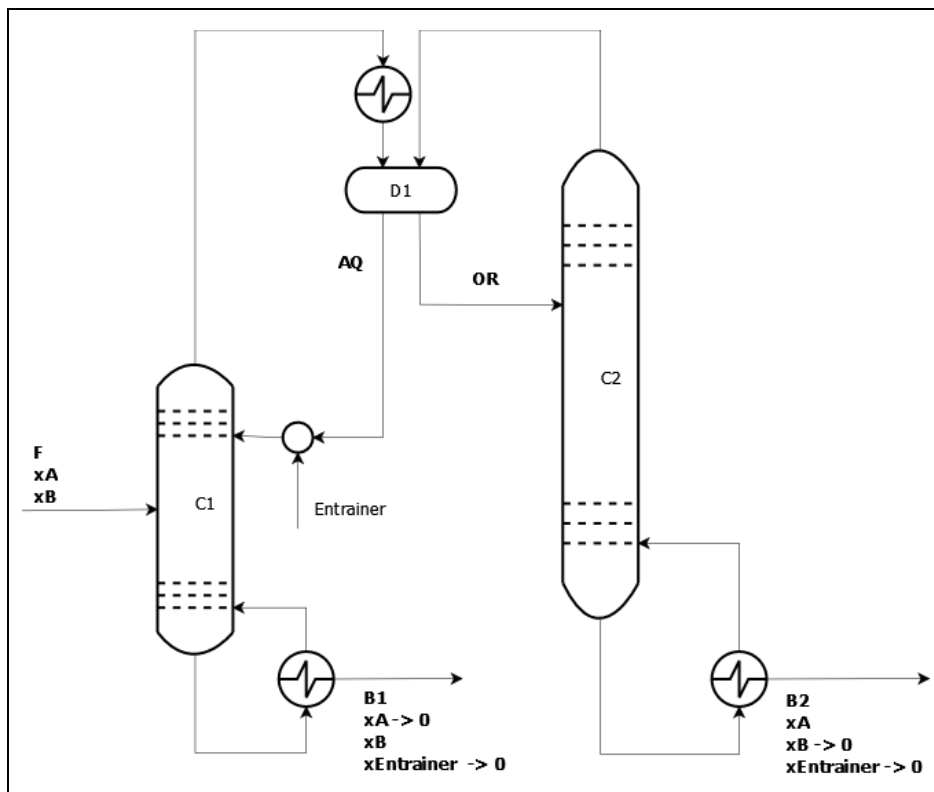
























Figura 7-2. Diagrama de proceso de destilación azeotrópica heterogénea.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla 2-2. Operaciones unitarias de DWSIM.

Operación unitaria	Símbolo	Operación Unitaria	Símbolo
Mezclador		Columna shortcut	
Divisor (Splitter)		Separador de solidos	
Separador		Reactor de conversión	
Bomba		Reactor CSTR	
Compresor		Reactor de equilibrio	
Expansión		Reactor Gibbs	
Intercambiador de calor		Reactor de flujo pistón	
Válvulas		Filtros	
Tubería		Corriente de materia	
Columna de destilación		Corriente de energía	
Columna de absorción		Separador flash	

Fuente: DWSIM simulador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla 3-2. Modelos termodinámicos disponibles en DWSIM.

Peng-Robinson	FPROPS
Soave-Redlich-Kwong	CoolProp
Lee-Kesler	Chao-Seader
Lee-Kesler-Plöcker	Grayson-Streed
UNIFAC, UNIFAC modificado (Dortmund), UNIFAC y UNIFAC extendido	Ley de Raoult
NRTL	Tablas de vapor IAPWS-IF97
COSMO-SAC	Agua marina IAPWS-08
LIQUAC	PC-SAFT

Fuente: DWSIM simulador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Para el cálculo de las composiciones de las corrientes y sus fases en equilibrio, se requiere de algoritmos flash. DWSIM tiene algunos incluidos, estos se presentan en la tabla 4-2.

Tabla 4-2. Algoritmos flash disponibles en DWSIM.

Algoritmo	Descripción
Nested Loops SVLLE	Algoritmo flash de equilibrio global. Puede calcular el equilibrio entre: una fase sólida, una de vapor y dos líquidas.
Nested Loops VLE	Algoritmo flash para equilibrio líquido vapor basado en la ecuación de Rachford-Rice.
Nested Loops VLLE	Algoritmo extendido para cálculo de equilibrio entre una fase de vapor y dos líquidas.
Nested Loops Immiscible VLLE	Algoritmo VLLE simplificado para mezclas de hidrocarburos y agua.
Nested Loops (SVLE –Eutectic)	Algoritmo para sistemas Vapor-Sólido-Líquido.
Nested Loops (SLE- Solid solution)	Algoritmo para sistemas Sólido-Líquido.
Gibbs Minimization VLLE	Encuentra el equilibrio de fases y su composición a través de la minimización de la energía de Gibbs. Sistemas Vapor-Líquido-Líquido.
Gibbs Minimization VLE	Encuentra el equilibrio de fases y su composición a través de la minimización de la energía de Gibbs. Sistemas Vapor-Líquido.
Inside-Out VLE (Boston-Britt)	Basado en el procedimiento inside-Out de Boston y Britt. Sistemas Vapor- Líquido.
Inside-Out VLLE (Boston-Fournier)	Basado en el procedimiento inside-Out de Boston y Fournier. Sistemas Vapor- Líquido-Líquido.
Definido por el usuario	Programados por el usuario en Python.
CAPE-OPEN ES Socket	Para acceso externo para Servidores de Equilibrio CAPE-OPEN Thermo versión 1.1.

Fuente: DWSIM simulador.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Otras características de las funcionalidades que posee la aplicación se muestran en la tabla 5-2.

Tabla 5-2. Principales características del simulador DWSIM.

Característica	Descripción
Compatibilidad OS	Windows 32/64 XP o más actualizado. Linux 64 bits. macOS Raspberry Pi 2
Interface	Gráfica con soporte en todas las plataformas.
Procesamiento	Motor de cálculo paralelo multinúcleo CPU y GPU (CUDA/OpenCL)
Modelos termodinámicos	VLE, VLLE y SLE usando ecuaciones de estado, coeficientes de actividad y modelos de Chao-Seader.
CAPE-OPEN standard	Soporta CAPE-OPEN UnitOperations y paquete de propiedades Thermo 1.0/1.1.
Cálculo de propiedades	Expone paquete de propiedades como CAPE-OPEN 1.1 Thermodynamic Equilibrium
Flexibilidad	Incluye Operaciones Unitarias programables con Python Script CAPE-OPEN
Interconexión con otras aplicaciones	Puede conectarse con modelos de columnas y base de datos de ChempSep.
Diagrama de flujo	Interface de dibujo para diagrama de proceso.
Herramientas	Caracterización de las fracciones de petróleo usando el modelo UNIFAC. Soporta reacciones y reactores químicos. Modelos de columnas de desalación/absorción. Automatización a través de API con lenguajes de programación C#, VB.NET, Visual C++ y Python.

Fuente: <https://sourceforge.net/projects/dwsim/>
Realizado por: OLEAS D., 2020.

2.2.2.1. Estándar CAPE-OPEN

DWSIM sigue los lineamientos de los estándares CAPE-OPEN, los cuales norman el desarrollo de los simuladores de procesos químicos. Estos estándares están basados en tecnologías universalmente reconocidas por su interoperabilidad de software como son: COM y CORBA. Son de acceso libre y multiplataforma, y se puede acceder a ellos en forma de un conjunto de documentos. Este estándar fue desarrollado por: compañías operadoras, firmas de tecnología, grupos académicos, y grandes simuladores comerciales (como Aspen Plus o Aspen Hysys) (Colan, 2020). DW-SIM ha recibido reconocimientos por ser la primera implementación de código abierto del estándar CAPE-OPEN.

2.2.2.2. IronPython

Es una implementación del lenguaje Python compatible con la plataforma .NET, esto lo hace compatible con DWSIM. Al igual que la automatización mediante macros en softwares como Microsoft Excel, DWSIM tiene la opción de escribir código en Python para controlar el simulador y todas sus herramientas.

2.2.3.Red de Neuronas Artificiales.

Las redes neuronales artificiales se desarrollaron en un intento de copiar, matemáticamente, las características de las neuronas biológicas. Están compuestas por neuronas artificiales interconectadas, responsables del procesamiento de las relaciones de entrada-salida. Estas relaciones se aprenden entrenando las ANN con un conjunto de patrones de entrada-salida (Schmitz, Zemp et al. 2006).

2.2.3.1. Neurona de Entrada Múltiple.

Una neurona artificial es un modelo matemático que intenta representar un elemento que permite convertir datos de entrada en valores de salida deseados. Es un modelo empírico (basado en datos experimentales) y requiere de un ajuste. Estos ajustes se realizan mediante algoritmos matemáticas de optimización, siguiendo una función objetivo. Normalmente se le llama nodo a una neurona interconectada dentro de una red. El conjunto de nodos en el mismo nivel de

interconexión se le llama capa. De la forma en que se conectan los nodos y se distribuyen en capas depende la estructura de una red neuronal. Existen una infinita cantidad de estructuras posibles para una red neuronal y elegir la adecuada depende del proceso a modelar y de la persona que modela el proceso. En la figura 11-2 se muestra los principales tipos de estructuras de redes neuronales.

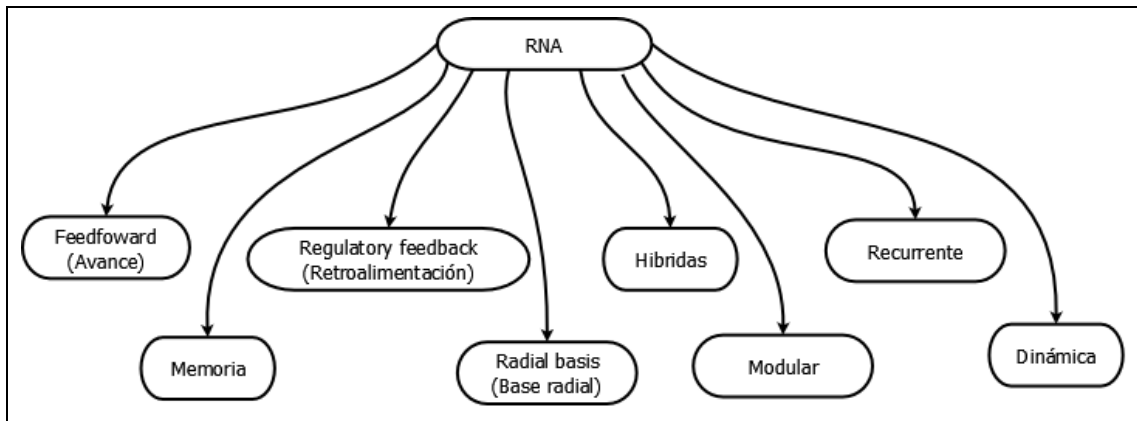


Figura 8-2. Principales tipos de redes neuronales.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En este trabajo usaremos una arquitectura de tipo feedforward o de avance. En esta estructura no existen conexiones hacia una capa precedente, todas las conexiones van en una sola dirección. Es la estructura más usada en las últimas décadas, muchos estudios de optimización y simulación han usado esta forma de RNA. Más adelante se da mayor detalle sobre esta estructura de RNA.

Una neurona artificial está compuesta de entradas, el nodo y las salidas. Las entradas pueden ser múltiples como se muestra en la figura 12-2, denotadas con el símbolo ‘p’. Al centro se encuentra el nodo compuesto por dos funciones: sumatorio y la función de transferencias. Al final se encuentra la salida. El procesamiento de los datos ocurre de la siguiente manera: Los datos de entrada se multiplica por el peso (w) correspondiente y luego son sumados junto con el bias (b). Luego la función de transferencia (f) recibe el resultado que se conoce como “activación” o “entrada neta” (n). Esta función de transferencia debe ser una función que sea diferenciable y que tenga límites definidos, como por ejemplo la ecuación de la curva logística (sigmoid) ecuación 7 o una función arco tangente (ecuación 8). Al final la función de transferencia devuelve un resultado (a), que puede ser un valor entre 0 a 1.

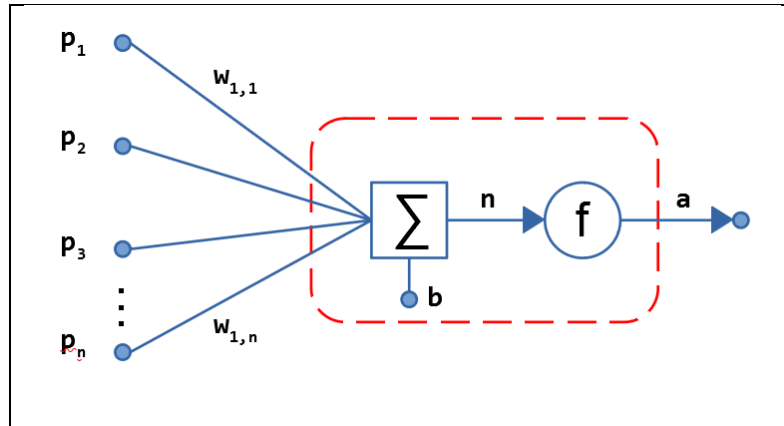


Figura 9-2. Estructura de una neurona artificial.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

El proceso de suma de las entradas multiplicadas con su peso se puede describir con la siguiente ecuación:

$$n = w_{1,1}p_1 + w_{1,2}p_2 + \dots + w_{1,R}p_R + b \quad \text{Ecuación 4}$$

Esta expresión puede ser escrita en forma matricial:

$$n = \begin{bmatrix} w_{1,1} \\ w_{1,2} \\ w_{1,3} \\ \dots \\ w_{1,R} \end{bmatrix} [p_1 \quad p_2 \quad p_3 \quad \dots \quad p_R] + b = WP + b \quad \text{Ecuación 5}$$

Donde el vector W para el caso de neurona es una columna y una fila las entradas “p”. El resultado pasa a la función de transferencia f(n). Así la salida de la neurona puede ser escrita como:

$$a = f(n) = f(WP + b) \quad \text{Ecuación 6}$$

Las funciones de transferencia más usadas son las siguientes (sigmoide y tangente):

$$a = f(n) = \frac{1}{1 + e^{-n}} \quad \text{Ecuación 7}$$

$$a = f(n) = \frac{1}{n} \tan^{-1}(n) + \frac{1}{2} \quad \text{Ecuación 8}$$

El objetivo del bias 'b' es servir como indicador de cuando se obtiene una respuesta positiva (1) o negativa (0), es decir:

$$a = f(n) = \begin{cases} 0, & n < b \\ 1, & n \geq b \end{cases} \quad \text{Ecuación 9}$$

2.2.3.2. Estructura *feedforward* (avance) de RNAs

Una red neuronal *feedforward* o de avance tienen solo una dirección para el flujo de datos, no existen interconexión entre nodos con capas precedentes (figura 13-2). Esta estructura se divide en tres tipos de capas en general:

- Capa de entrada: Es el primer nivel y recibe la información externa con la que se piensa iniciar el entrenamiento. Corresponde a la primera capa de círculos azules en la figura 13-2.
- Capas Oculta: Es el segundo nivel y pueden ser varias. Su principal función es simplificar aún más las tareas que realizara la red neuronal. Cada nueva capa oculta permite un mejor ajuste del modelo a los resultados esperados. La cantidad a usar depende del nivel de complejidad del modelo a aproximar y el grado de error que se espera obtener.
- Capa de Salida: Comprende el tercer nivel y trasfiere información desde la red hacia el exterior. El número de nodos en esta capa depende de las características de la respuesta a obtener. Por ejemplo, si la RNA tiene que reconocer a que numero corresponde del 0 al 9 en una imagen manuscrita de un número. Una estructura simple tendría 10 nodos en la capa de salida, uno para cada número.

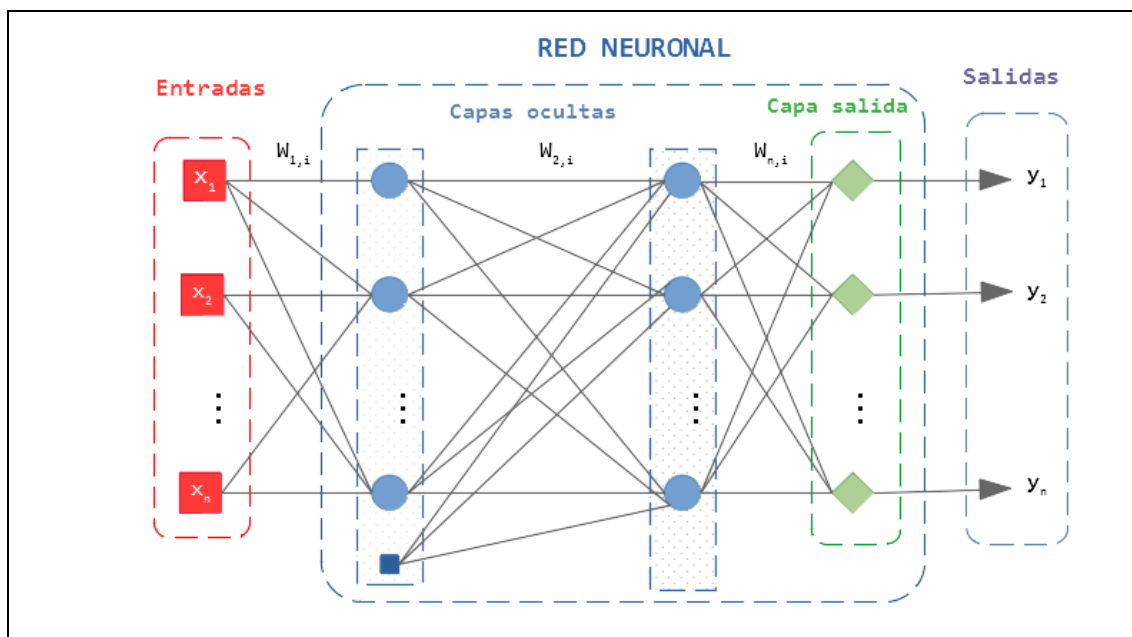


Figura 10-2. Diagrama de capas de una red neuronal artificial tipo feedforward.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

2.3. Marco Legal

2.3.1. Nacional

Tabla 6-2. Legislación sobre software libre

NORMATIVA	OBSERVACIÓN
<p>Decreto 1040 (abril 2008)</p> <p>Definición y características.</p>	<p>Artículo 2.- “Se entiende por software libre, a los programas de computación que se pueden utilizar y distribuir sin restricción alguna, que permitan su acceso a los códigos fuentes y que sus aplicaciones puedan ser mejoradas.</p> <p>Estos programas de computación tienen las siguientes libertades:</p> <p>a) Utilización del programa con cualquier propósito de uso común;</p> <p>b) Distribución de copias sin restricción alguna;</p> <p>c) Estudio y modificación del programa (Requisito: código fuente disponible)</p> <p>d) Publicación del programa mejorado (Requisito: código fuente disponible).” (Gobierno del Ecuador, 2008)</p>
<p>Código Orgánico de Economía Social de los Conocimientos,</p>	<p>Artículo 142.- Tecnologías libres. – “Los estándares abiertos son formas de manejo y almacenamiento de los datos en los que se conoce su estructura y se permite su modificación y acceso no</p>

<p>Creatividad e Innovación (2016)</p> <p>Estándares abiertos</p> <p>Uso académico de software libre</p>	<p>imponiéndose ninguna restricción para su uso. Los datos almacenados en formatos de estándares abiertos no requieren de software propietario para ser utilizados. Estos formatos estándares podrían o no ser aprobados por una entidad internacional de certificación de estándares.”</p> <p>Artículo 144.- “Uso de tecnologías digitales libres en los sistemas de educación. No obstante, lo anterior, las instituciones del Sistema de Educación Superior no estarán obligadas a usar exclusivamente tecnologías digitales libres en el ejercicio de la libertad de cátedra y de investigación, pero deberá garantizarse una enseñanza holística de soluciones informáticas independientemente de su tipo de licenciamiento.” (Asamblea Nacional del Ecuador, 2016)</p>
<p>Constitución de la República del Ecuador.</p> <p>Tecnología y producción.</p>	<p>Título II Derechos. Sección tercera: Comunicación e Información. Art. 16, numeral 2. “Garantizar el derecho al acceso universal a las tecnologías de información y comunicación.”</p> <p>Título VI Régimen de desarrollo. Capítulo Sexto: Trabajo y producción. Sección primera Formas de organización de la producción y su gestión. Art. 334, numeral 3. “Impulsar y apoyar el desarrollo y la difusión de conocimientos y tecnologías orientados a los procesos de producción.”</p> <p>Título VII Régimen de buen vivir. Capítulo primero Inclusión y equidad. Sección Octava. Ciencia, tecnología, innovación y saberes ancestrales. Art. 385, numeral 3 “Desarrollar tecnologías e innovaciones que impulsen la producción nacional, eleven la eficiencia y productividad, mejoren la calidad de vida y contribuyan a la realización del buen vivir” (Lexis, 2008).</p>
<p>Plan nacional de gobierno electrónico. (2015)</p>	<p>“El Plan Nacional de Gobierno Electrónico propone un modelo incluyente, cercano al ciudadano, eficaz y eficiente, alineado a la política pública del Gobierno Nacional, el mismo que busca una mayor participación e interacción entre los ciudadanos y el Estado.”</p> <p>Principio 7. Principio de adecuación tecnológica: “Recomienda el uso de estándares abiertos y de software libre en razón de seguridad,</p>

	sostenibilidad a largo plazo y socialización del conocimiento.” (Gobierno Electrónico, 2015)
--	---

Fuente: Varios

Realizado por: OLEAS D., 2020.

2.3.2. Internacional

Según MDN desarrollador del navegador web mozilla:

“LGPL (GNU Lesser General Public License en español Licencia Pública General Reducida de GNU) es una licencia de software libre publicada por la Free Software Foundation. LGPL es una alternativa más permisiva que la estricta licencia copyleft GPL. Esto supone que cualquier trabajo que use un elemento con licencia GPL tiene la obligación de ser publicado bajo las mismas condiciones (libre de usar, compartir, estudiar, y modificar). Por otro lado, LGPL solo requiere que los componentes derivados del elemento bajo LGPL continúen con esta licencia, y no el programa al completo. LGPL es usado habitualmente para licencias de componentes compartidos como por ejemplo librerías (.dll, .so, .jar, etc.).” (MDN, 2020).

DWSIM usa la licencia de tipo LGPL para su código de distribución abierta. En este trabajo se realiza con las herramientas que son de acceso libre del simulador.

CAPITULO III

3. METODOLOGÍA

En este trabajo de Integración Curricular se busca desarrollar un modelo de predicción de la composición de los productos de un proceso de destilación extractiva heterogénea de la mezcla ter-butanol y agua, utilizando redes neuronales artificiales.

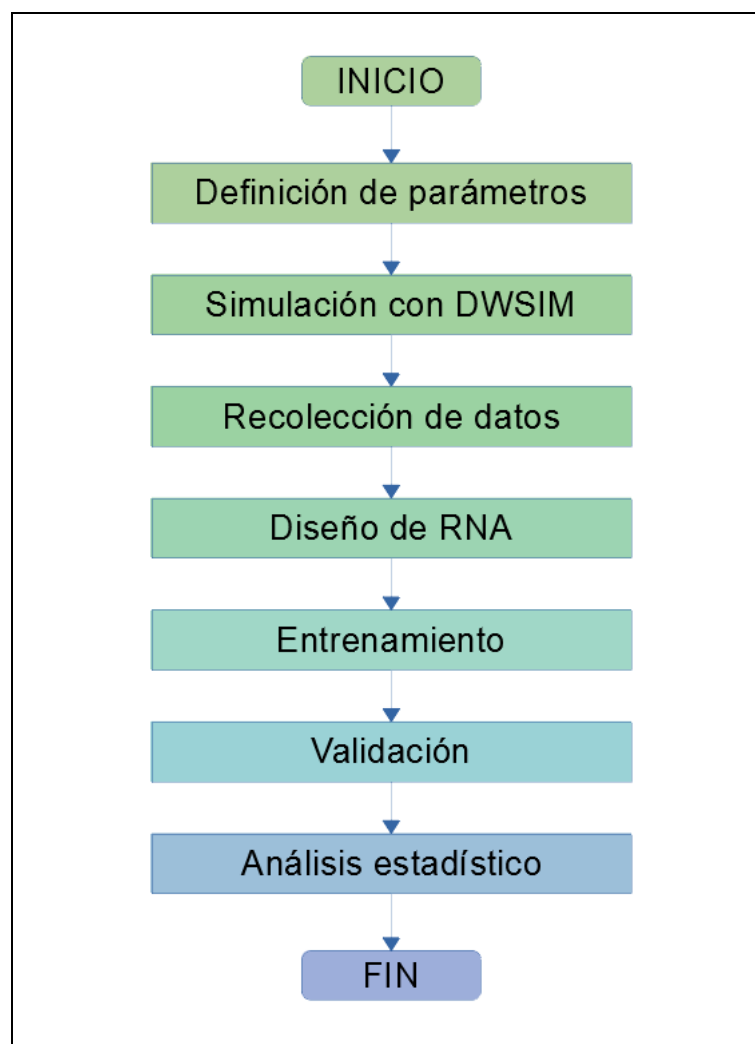


Figura 1-3. Diagrama de proceso a seguir para el desarrollo de una RNA.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

La figura 1-3, detalla el procedimiento que se emplea para el diseño y validación de la red neuronal. Las etapas del proceso son las siguientes:

- **Definición de parámetros:** Se especifica el diagrama del proceso EHAD, definir las composiciones de entrada, los parámetros de las columnas, el modelo termodinámico, entre otros.
- **Simulación en DWSIM:** Con toda la información del proceso, se simula desarrolla un flowsheet del proceso. Con el fin de validar la simulación se comparan los resultados con los obtenidos por el trabajo de Yu et al., (2015).
- **Recolección de datos:** Para generar datos a partir de modelo desarrollado en DWSIM, se usa IronPython para programar una función que cambie los parámetros de entrada y guarde los resultados.
- **Diseño y entrenamiento de la RNA:** Usando la herramienta de MATLAB Neural Fitting tool se configura la RNA. Se prueba con distintas configuraciones hasta obtener márgenes de error aceptables en la comparación con los datos del simulador.
- **Validación y análisis estadístico:** Se aplica el test ANOVA con los resultados del simulador y los de la RNA.

3.1. Definición de Parámetros.

3.1.1. Diagrama PFD

Lo primero es definir el diagrama de flujo de proceso (PFD) de la AHED. El diagrama PFD resultante se basa en el trabajo de Yu et al., (2015) donde se simula el proceso usando ASPEN HYSYS, el diagrama PFD se muestra en la figura 2-3. El proceso consta de dos columnas de platos (C1 y C2), cuatro intercambiadores de calor y un decantador (D1). Para mantener la simplicidad en el modelo no se agrega ninguna bomba o válvula.

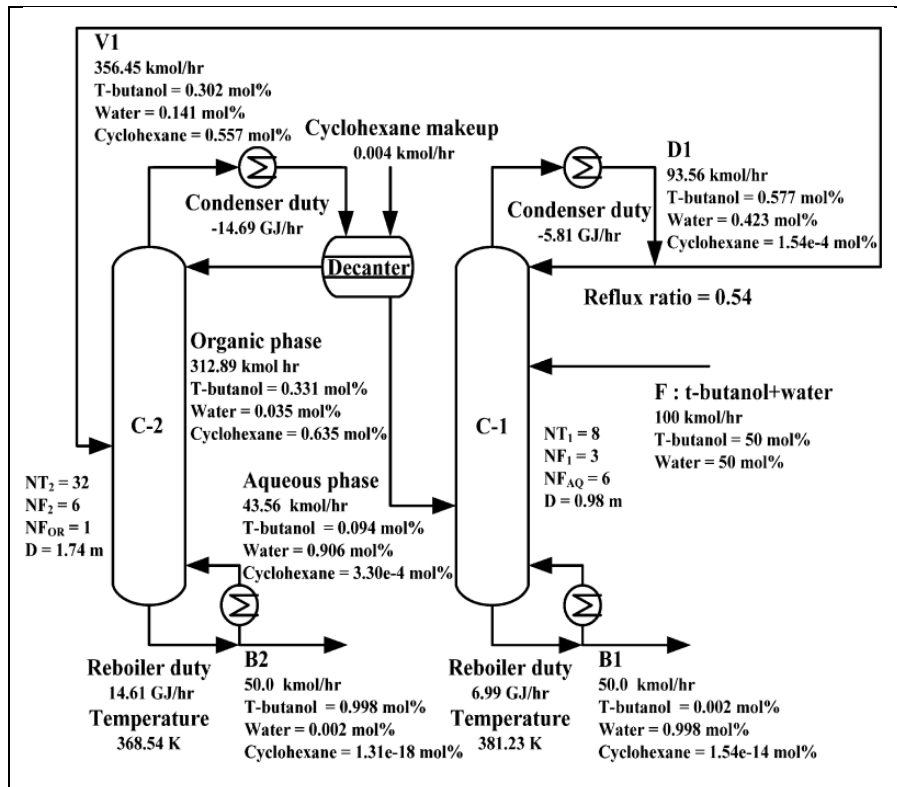


Figura 2-3. Diagrama de proceso de separación de terbutanol y agua por Yu et al., (2015).

Realizado por: OLEAS D., 2020.

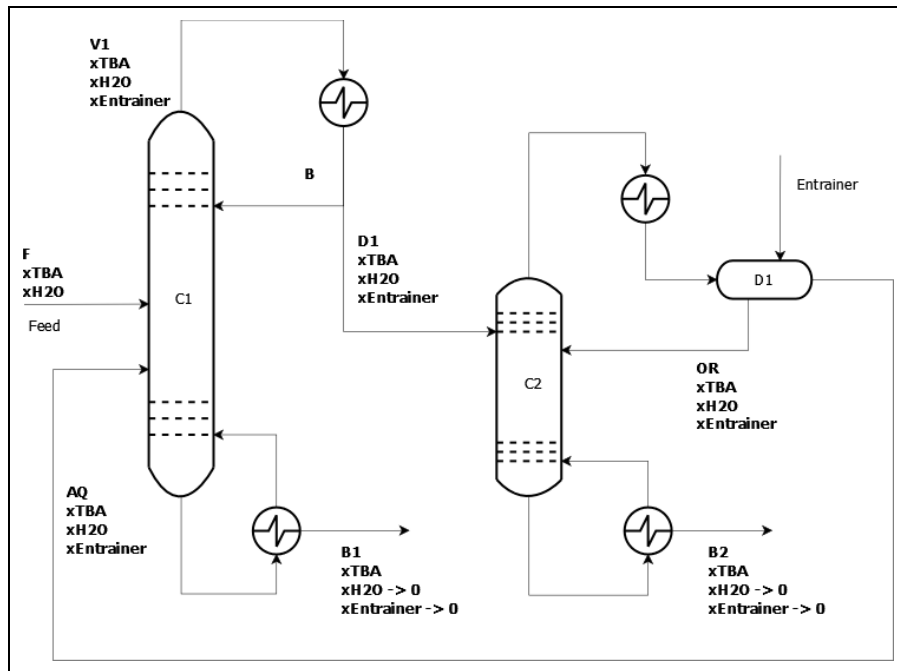


Figura 3-3. Diagrama de proceso AHED para separación de terbutanol y agua.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.1.2. Parámetros del proceso a simular

Definido el diagrama PFD es necesario precisar los parámetros para las entradas y las operaciones que permiten configurar la simulación. Como se va a realizar una comparación con los resultados obtenidos por Yu et al., (2015), se usan exactamente los mismos valores. A continuación, se presenta en tablas la información necesaria para configurar el flowsheet.

3.1.2.1. Generales

Tabla 1-3. Condiciones generales de la simulación.

Condición	Valores
Componentes	Terbutanol, Agua, Ciclohexano
Modelo termodinámico	UNIFAC
Algoritmo flash	Nested Loops VLE

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.1.2.2. Columna de Destilación 1

Tabla 2-3. Condiciones de la columna C1.

Condición	Valores		
Composición de la alimentación. (F).	T- butanol	Agua	
	50 mol%	50 mol%	
Flujo molar de la alimentación (F).	100 kmol/h		
Flujo molar de la fase Acuosa (AQ).	43.56 kmol/h		
Composición de la fase acuosa (AQ).	T-butanol	Agua	Ciclohexano
	0.094mol%	0.906mol%	3.3e-4mol%
Número de platos (NT_1).	8		
Plato de alimentación (NF_1)	3		
Plato de alimentación fase acusa (NF_{AQ})	6		
Diámetro de columna	0.98 m		
Presión operativa	0.868 atm		
Caída de presión por plato	0.0068 atm		
Temperatura del flujo de entrada (T_F)	30 ° C (303.15 K)		

Relación de Reflujo (L1/V1)	5
Flujo molar de fondo (B1)	50 kmol/h

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.1.2.3. Columna de Destilación 2

Tabla 3-3. Condiciones de Operación C2

Condición	Valores		
Flujo de entrada (D1)	356.45 kmol/h		
Flujo de entrada de la fase orgánicos (OR)	312.89 kmol/h		
Composición fase orgánica	T-butanol	Agua	Ciclohexano
	0.331mol%	0.035mol%	0.635mol%
Número de Platos (NT ₂)	32		
Plato de alimentación (NF ₂)	6		
Plato de alimentación Fase Orgánica (NF _{OR})	1		
Diámetro de columna	1.74 m		
Presión operativa	1 atm		
Caída de presión por plato	0.0068 atm		
Flujo molar de fondo (B2)	50 kmol/h		

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.1.2.4. Decantador y Makeup

Tabla 4-3. Condiciones de Operación Decantador

Condiciones	Valor		
Flujo de entrada (Ciclohexano)	0.004 kmol/h		
Porcentaje de separación en decantador.	T butanol	Agua	Ciclohexano
	0.037% mol	0.765% mol	0.878e-5% mol

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.2. Simulación en DWSIM.

3.2.1. Procedimiento para realizar la simulación

En la figura 4-3 se muestra el proceso para crear la simulación en DWSIM.

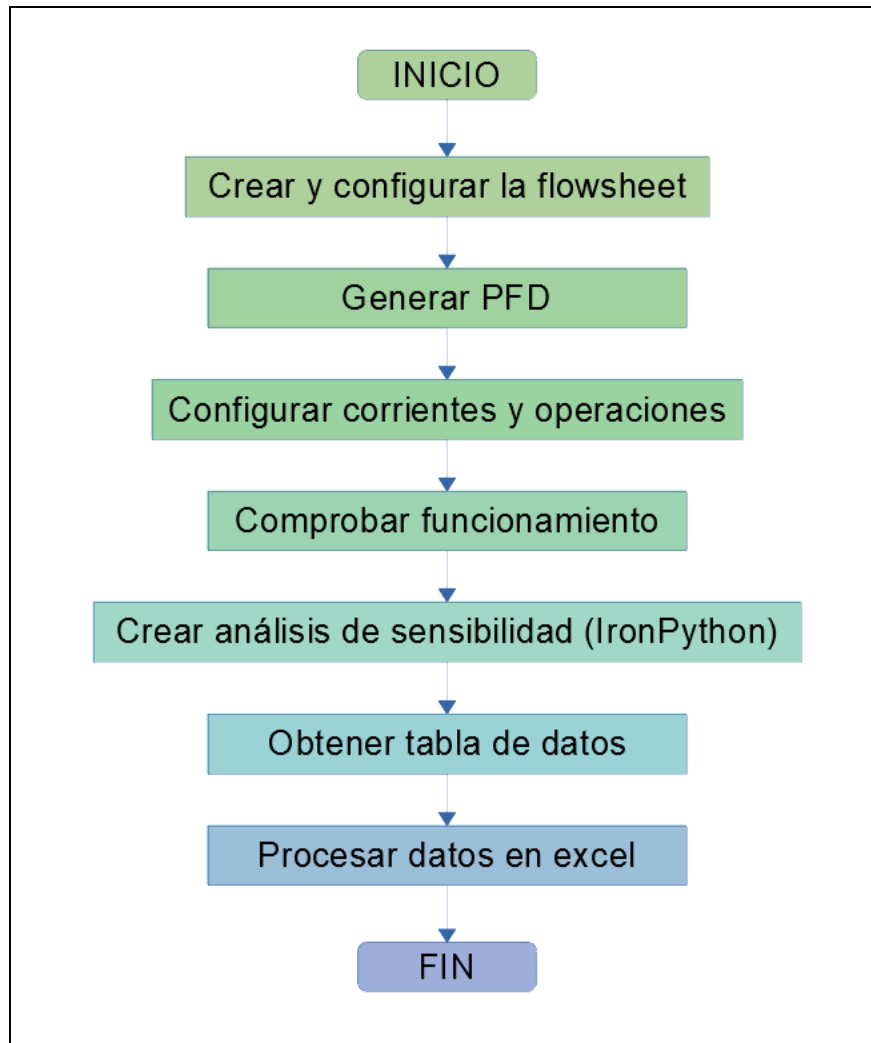


Figura 4-3. Procedimiento para simular en DWSIM.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.2.2. Crear y configurar la flowsheet.

En primera instancia se creará un flowsheet y se definirán los componentes: 2-metil-2-propanol, agua y ciclo hexano. Luego se definen el modelo termodinámico y el algoritmo flash, y finalmente el sistema de unidades en el que se va a trabajar. En la figura 5-3 observamos la pantalla principal de asistente de configuración de simulación.

3.2.3. Generar PFD.

3.2.3.1. Diagrama de proceso.

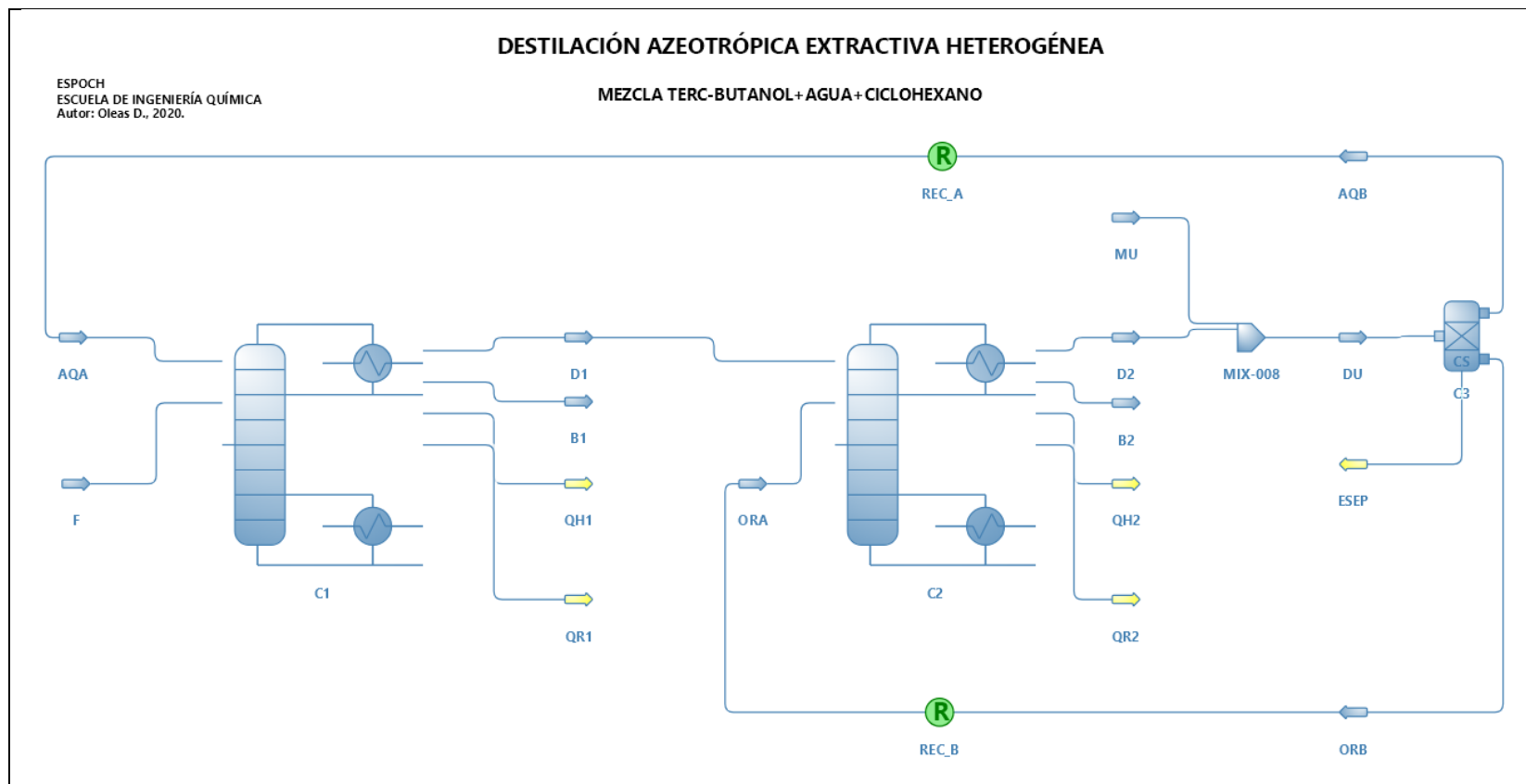


Figura 5-3. Diagrama de proceso de AHED en DWSIM.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En la figura 5-3 se muestra el diagrama de proceso realizado en DWSIM siguiendo lo especificado en la figura 3-3. Algo importante a recalcar es que para el ingreso del ciclo-hexano se usó un mezclador (MIX-008), y en caso del decantador se optó por el nombre C3 para evitar confusión con la corriente D1 de salida de la columna C1. Para el cálculo del reflujo se requirieron bloques lógicos (R círculo verde) que permiten al simulador aplicar un ajuste por iteración en los balances de masa y energía. Por ello también fue necesario crear dos variantes de las corrientes de acuosos AQ (AQA y AQB) y para la corriente de orgánicos OR (ORA y ORB) que se usan en la entrada y salida de los bloques de reflujo. Se agregaron los flujos de energía de los condensadores (QH1 y QH2), reboilers (QR1 y QR2) de las dos columnas y del decantador (ESEP).

3.2.4. Análisis de sensibilidad (IronPython)

3.2.4.1. Algoritmo

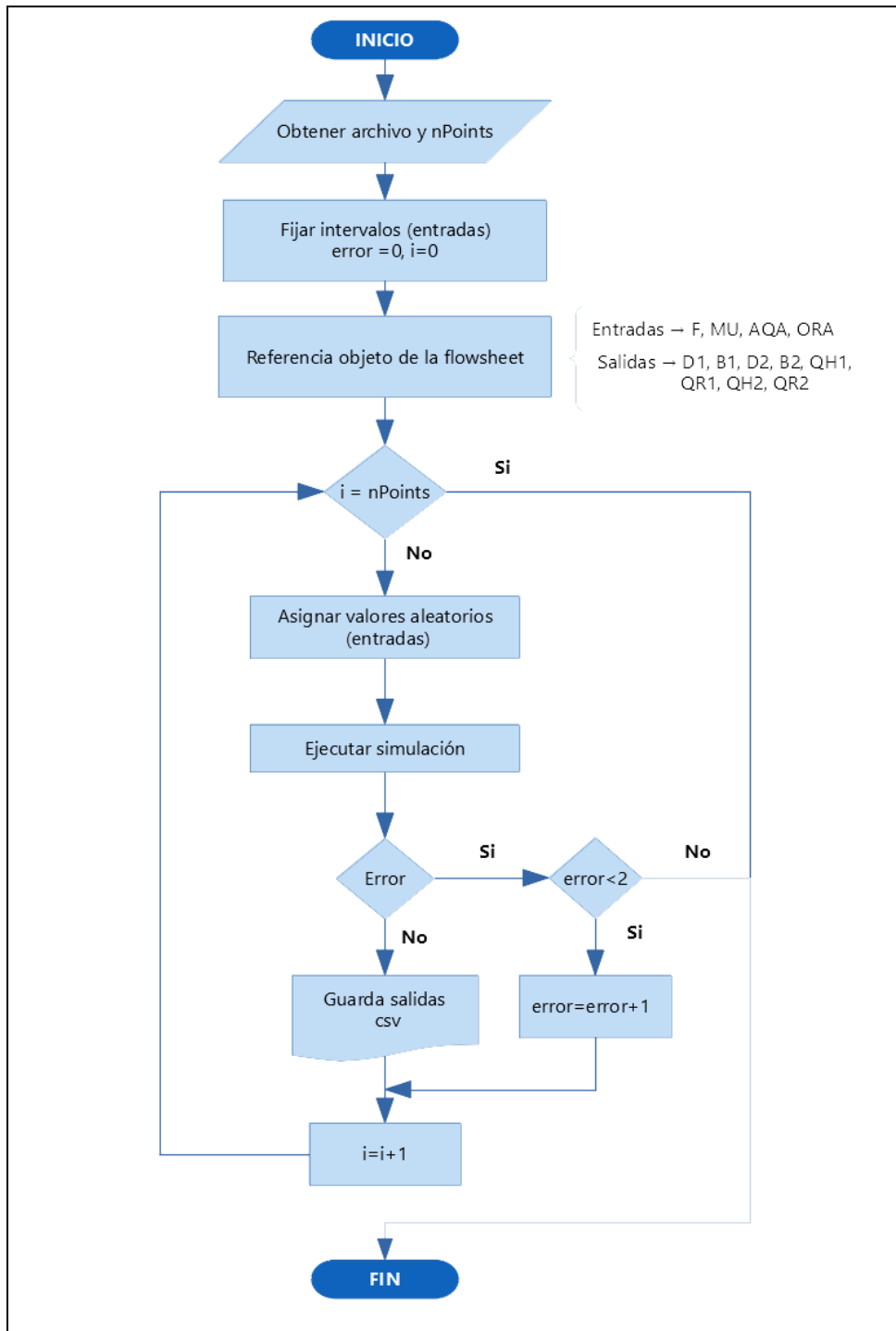


Figura 6-3. Algoritmo para análisis de sensibilidad.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

El modelo desarrollado en DWSM es estacionario y para obtener datos de diferentes estados del proceso, cambiando sus parámetros, hay que simular el número de veces que se necesite para obtener la tabla de datos de entrenamiento para la red neuronal. Esta tarea es repetitiva y hacerla manualmente llevaría demasiado tiempo. Por esta razón, se utiliza la funcionalidad de automatización de tareas de DWSIM con IronPython. Existe otras formas de hacer esto, por ejemplo, usando la librería “automation.dll”, que permite la interoperabilidad con lenguajes de programación como: C sharp, Visual Basic .NET o Visual C++. Pero la forma más sencilla es usar el intérprete integrado de Python.

Como se requiere escribir líneas de código (Anexo A), para hacerlo de forma ordenada se desarrolla un diagrama de flujo, como guía visual de lo que se debe implementar (ver figura 15-3). A continuación, se describe el algoritmo:

1. Lo primero es especificar el nombre del archivo “csv” en donde se va a guardar los resultados (fileName) y el número filas o datos (nPoints) que deberá tener la tabla de resultados. Por ejemplo, si se quiere obtener 250 filas de datos en la tabla de datos de entrenamiento, se especifica nPoints=250.
2. Se fijan los intervalos (manualmente) para las variables de entrada (F, xf, tf y mu). También se inicializan los contadores i (casos de simulación) y error (errores de simulación), estos servirán para tomar decisiones: si continuar o parar el análisis de sensibilidad.
3. La función accede por referencia a los objetos de interés dentro de la flowsheet. Objetos como las corrientes de entrada y salida, y las operaciones. Esto con el objetivo de ingresar y obtener los valores de sus propiedades y parámetros. Los métodos que permiten hacer esto son: “`Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('<Nombre de objeto>')`” y “`<objeto>.GetPhase('Overall').Properties.<Propiedad>`” (DWSIM, 2020).
4. Se generan valores aleatorios dentro de los rangos especificados previamente y se asignan a los objetos. Esto con el objetivo de entrenar a la red neuronal con datos de estados diferentes.
5. Se ejecuta la simulación, pero antes se abre la conexión con el archivo csv, para guardar los resultados; dependiendo si la simulación es exitosa u ocurre un error.
6. Cuando se incurre en errores de simulación, se debe a los datos ingresados al ejecutar la simulación. En el caso de DWSIM cuando se intenta continuar con una nueva simulación, esta toma varios datos de la anterior. Si la simulación anterior da un error, este se propagará a la siguiente y así consecutivamente. Con el objeto de detener el análisis se evalúa el número de errores. Si los errores son mayores que 2 se procede a detener el análisis.
7. En el caso de que no ocurra ningún error, la función escribe los datos en el archivo csv y vuelve al paso 4 hasta completar los casos (nPoints).

Los resultados obtenidos por la función programada en IronPytho-DWSIM se muestran en el Anexo B. En esta tabla se muestran varias columnas, no todas son usadas en el proceso de entrenamiento de la RNA, sólo las que muestran mayor variación. Las tablas 6-3 y 7-3, muestran las columnas de datos de la tabla de entrenamiento de la red neuronal.

Tabla 5-3. Variables seleccionadas para las entradas RNA.

Variable	Descripción	Rango	Unidades
F	Flujo molar de alimentación a la columna C1	50 – 150	kmol/h
x_F_tb	Fracción molar de TBA en F	0.1 – 0.95	
T_F	Temperatura de F	293.15 – 373.15	K
MU	Flujo molar de alimentación de Ciclohexano	0.001 – 0.01	kmol/h

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Las salidas que presentaron mayor variación durante el análisis de sensibilidad del modelo en DWSIM, son listadas en la tabla 6-3. Los resultados de estas variables son las entradas para el entrenamiento de la RNA.

Tabla 6-3. Variables de salida en datos de entrenamiento.

Variable	Descripción	Unidades
D1	Flujo molar de destilado columna C1.	kmol/h
x_D1_tb	Fracción molar de TBA de D1.	
B1	Flujo molar de fondo de columna C1.	kmol/h
D2	Flujo molar de destilado columna C2.	kmol/h
x_D2_tb	Fracción molar de TBA de D2.	
B2	Flujo molar de fondo de columna C2.	kmol/h
AQ	Flujo de fase acuosa del decantador.	kmol/h
x_AQA_w	Fracción molar de agua en AQ.	
OR	Flujo de fase orgánica del decantador.	kmol/h
x_OR_cy	Fracción molar de ciclohexano en OR.	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

3.2.5. Configuración de la red neuronal.

Para el diseño de la red neuronal, se utiliza la herramienta Neural Fitting (nftool) del toolbox de MATLAB. En la figura 7-3 se observa un diagrama de flujo del proceso de entrenamiento de la RNA.

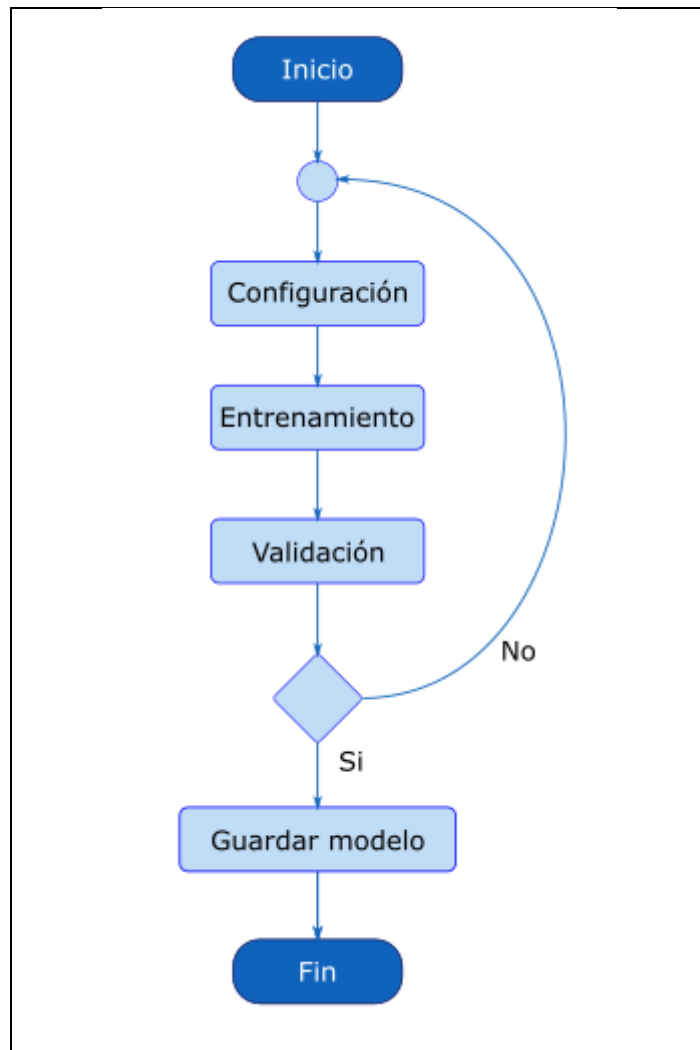


Figura 7-3. Procedimiento para entrenamiento de RNA
Realizado por: OLEAS D., 2020.

El primer paso es configurar los datos, la estructura de la RNA y seleccionar el algoritmo de entrenamiento. La selección para la RNA configurada es el algoritmo de entrenamiento “Bayesian Regularization”, como se puede ver en la línea 85 del código mostrado en el Anexo C.

El siguiente paso es correr el proceso de entrenamiento. El proceso puede ser monitorizado por una ventana que muestra los avances realizados por el algoritmo de resolución. Al cerrar la ventana de monitoreo de proceso de entrenamiento, aparece el asistente de la herramienta Neural Fitting con los resultados. En este punto se puede extender el proceso de entrenamiento de la RNA o ver mediante gráficos el avance del proceso de entrenamiento. Entre los gráficos que se pueden observar están: Gráfico de aproximación, histograma del error o un gráfico de regresión.

La evaluación de la red neuronal se realiza en la ventana del asistente mediante una prueba del rendimiento con otros datos provenientes del mismo sistema (Simulación DWSIM). En este caso se evalúa el desempeño de la RNA de forma manual, usando un conjunto de 20 muestras separadas de los datos generados en DWSIM mediante un script de Matlab.

Al final se guardan los resultados como variables en el workspace como: un modelo matemático de la RMA, los resultados del proceso de entrenamiento, errores y las salidas obtenidas.

3.3. Análisis estadístico

Para indicar que existe una correlación o diferencia entre los datos proporcionados por el simulador y los resultados obtenidos por la RNA, se usa el test ANOVA. El objetivo del test es medir si existe una diferencia significativa entre la media de ambos grupos de datos. Para realizar el análisis se usa el software SPSS.

CAPITULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1.1. Cronograma

Tabla 1-4. Cronograma del proyecto.

TIEMPO ACTIVIDADES	MES 1				MES 2				MES 3				MES 4				MES 5				MES 6					
	SEMANAS																									
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4		
Revisión bibliográfica.	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Elaboración del anteproyecto.	•	•	•																							
Determinación de variables.	•	•	•	•																						
Simulación de la destilación de Terbutanol.			•	•																						
Obtención de datos experimentales.				•	•	•	•	•																		
Diseño de la red neuronal.							•	•	•	•																
Estudio técnico y económico.									•	•	•	•														
Redacción del trabajo final.	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Análisis de costos.	•	•	•	•																						
Revisión del documento final.					•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Defensa de los resultados.																										•

Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.1.2. Presupuesto

En la tabla 2.4 se detallan los costos del trabajo de integración curricular.

Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto.

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Curso DWSIM	\$150	X	
Curso MATLAB	\$150	X	
Papel de impresión	\$30	X	
Copias e Impresiones	\$100	X	
Empastados	\$80	X	
Imprevistos	\$25	X	
TOTAL	\$532		

Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2. Resultados, Discusión y Análisis De Resultados

4.2.1. Simulación en DWSIM

Los resultados de la simulación (véase tabla 3-4), muestran concordancia con los obtenidos por el trabajo de Yu H. et al. (2015), quienes usaron Aspen Hysys para simular el proceso. La simulación muestra que el proceso permite extraer los componentes de la mezcla azeotrópica con un alto grado de pureza, en torno al 99%. En el proceso de búsqueda de los rangos de operación de los parámetros (variables) del proceso se encontró: que la cantidad de realimentación del ciclohexano no afecta la composición de salida de los productos, esto porque las cantidades son muy pequeñas. La temperatura de entrada de la alimentación de la mezcla azeotrópica (T_F) afecta directamente a la potencia térmica del reboiler (QR1) de la columna C1, pero no afecta a la potencia térmica del condensador (QH1). La composición de terbutanol en la corriente de alimentación (x_{FTBA}) afecta directamente a la composición del destilado (D1) pero casi no afecta la composición de la corriente de fondo (B1). El aumento o disminución del flujo molar de F afecta directamente a la potencia térmica de todos los intercambiadores de calor en el proceso. Los rangos óptimos encontrados mediante simple inspección son los siguientes: para el flujo de alimentación F un rango entre 50 y 150 kmol/h, la fracción molar de terbutanol en F entre 0.1 y

0.95, la temperatura 293.15 y 373.15, y el makeup 0.001 y 0.01 kmol/h. Variaciones aleatorias de estos parámetros definen un estado del proceso.

Tabla 3-4. Resultados obtenidos de la simulación en DWSIM.

PROPIEDAD	ORA	MU	F	D2	D1	B2	B1	AQA	UNID.
Temperatura	337.74	353.95	0	333.76	352.423	360.267	370.77 2	347.22 9	K
Presión	1	1	1	1	1	1.204	1.0408	1	atm
Flujo molar	278.12	0.002397	100	319.79	91.6658	50.6326	49.833 2	41.679 5	kmol/h
Flujo volumétrico	29.31	0.00028	2922.38	29.50	5.69827	5.27138	0.9417 8	0.9622 3	m3/h
Fracción molar (Agua)	0.0427	0	0.5	0.1583	0.42322	0	0.998	0.9292 9	
Fracción molar (2-methyl-2-propanol)	0.27457	0	0.5	0.2479	0.57663	0.998	0.002	0.0703 9	
Fracción molar (Ciclo hexano)	0.6826	1	0	0.5937	0.00014	0.002	0	0.0003 1	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla 4-4. Validación de la simulación en DWSIM.

Variable	Descripción	Unidades	DWSIM	Yu et al. (2005)	Error (%)
D1	Destilado C1	kmol/h	91.6658	93.56	2.02%
x_D1_tb	Fracción t-butanol en D1		0.57663	0.577	0.06%
B1	Residuos de C1	kmol/h	49.8332	50	0.33%
D2	Destilado de C2	kmol/h	320	356	10.28%
x_D2_cy	Fracción molar de Ciclohexano en D2		0.5937	0.557	6.59%
B2	Residuos de C2	kmol/h	50.6326	50	1.27%
AQA	Corriente de acuosos	kmol/h	41.6795	43.56	4.32%
x_AQ_w	Fracción de agua en AQA		0.9292	0.906	2.56%
OR	Corriente de Orgánicos	kmol/h	278.12	312.89	11.11%
x_OR_cy	Fracción de Ciclohexano en corriente OR		0.6826	0.635	7.50%

Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2.2. Balance de materia

4.2.2.1. Balance general.

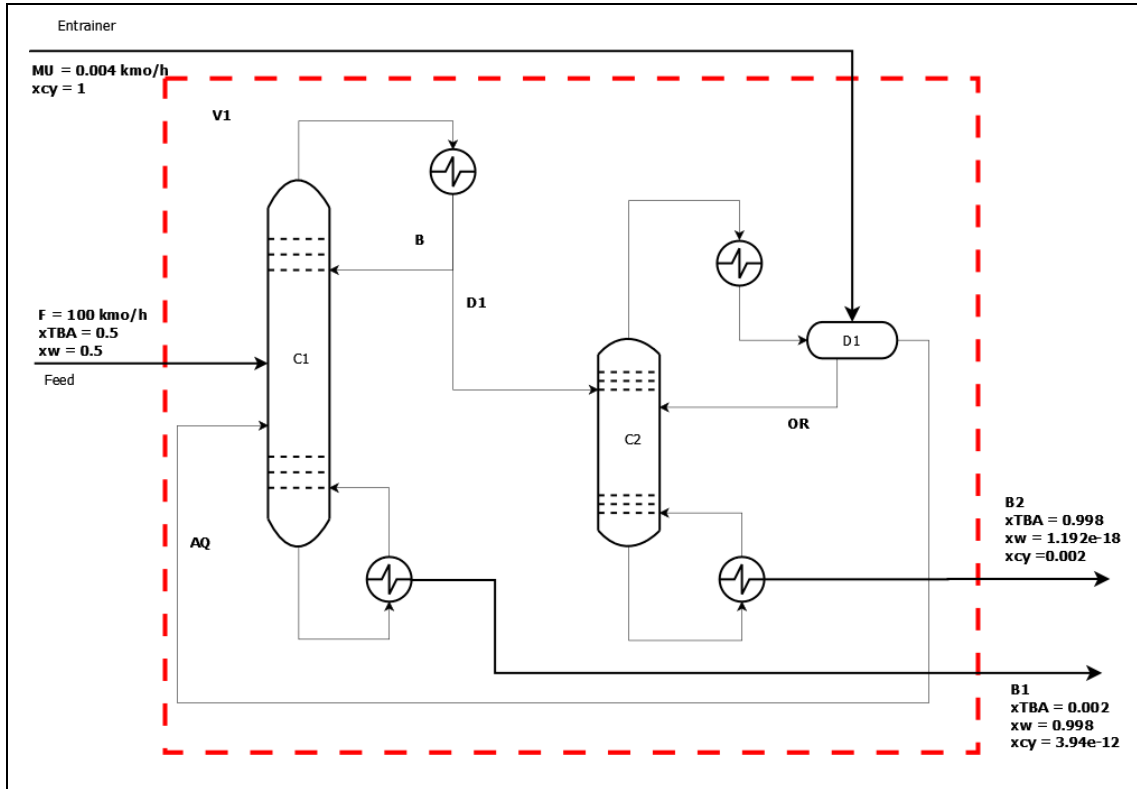


Figura 1-4. Diagrama de balance general de masa.

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Para realizar el balance general del proceso primero delimitamos con el objetivo de obtener las corrientes de entrada y salida globales. Las ecuaciones del balance general son las siguientes:

$$F + MU = B_1 + B_1 \quad \text{Ecuación 10}$$

$$F x_T^F = B_1 x_T^{B1} + B_2 x_T^{B2} \quad \text{Ecuación 11}$$

$$F x_w^F = B_1 x_w^{B1} + B_2 x_w^{B2} \quad \text{Ecuación 12}$$

Donde:

F Flujo de entrada a la columna C1 (mezcla azeotrópica). (kmol/h)

MU Flujo de entrada del entrainer (ciclohexano). (kmol/h)

B_1 Flujo de fondo de la columna C1. (kmol/h)

B_1 Flujo de fondo de la columna C2. (kmol/h)

x_j^i Fracción molar de componente j en la corriente i.

Se hace un pequeño cambio en la nomenclatura, en la figura se tiene “TBA” como referencia al terbutanol en las ecuaciones solo como “T”. Resolviendo con los datos mostrados en la figura 1-4. Como se tiene solo dos incógnitas en el balance las corrientes B1 y B2, se puede resolver usando las primeras dos ecuaciones (10 y 11) por un sistema de ecuaciones lineales.

$$\begin{cases} F + MU = B_1 + B_2 \\ Fx_T^F = B_1x_T^{B1} + B_2x_T^{B2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} F + MU = B_1 + B_2 \\ -F \frac{x_T^F}{x_T^{B1}} = -B_1 - B_2 \frac{x_T^{B2}}{x_T^{B1}} \end{cases}$$

$$F \left(1 - \frac{x_T^F}{x_T^{B1}} \right) + MU = B_2 \left(1 - \frac{x_T^{B2}}{x_T^{B1}} \right)$$

$$B_2 = \frac{F \left(1 - \frac{x_T^F}{x_T^{B1}} \right) + MU}{\left(1 - \frac{x_T^{B2}}{x_T^{B1}} \right)}$$

$$B_2 = \frac{(100) \left(1 - \frac{0.5}{0.002} \right) + 0.004}{\left(1 - \frac{0.988}{0.002} \right)} = 50.50 \text{ kmol/h}$$

$$B_2 = F + MU - B_1$$

$$B_1 = 100 + 0.004 - 50.51 = 49.50 \text{ kmol/h}$$

Comprobamos el resultado con la ecuación 12:

$$F = \frac{B_1x_w^{B1} + B_2x_w^{B2}}{x_w^F}$$

$$F = \frac{(49.5)(0.998) + (50.5)(1.192e - 18)}{(0.5)} = 99.00 \approx 100 \text{ kmol/h}$$

4.2.2.2. Balance de columna C1.

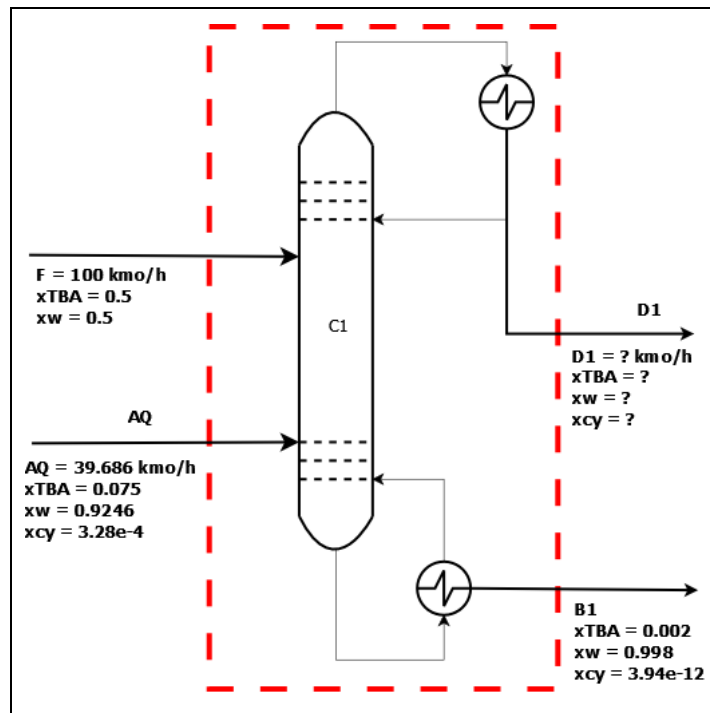


Figura 2-4. Diagrama de balance de masa columna C1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Se plantea las ecuaciones del balance de masa de la columna C1, demarcando las entradas y salidas de la operación. Las ecuaciones resultantes son las siguientes:

$$F + AQ = B_1 + D_1 \quad \text{Ecuación 13}$$

$$Fx_T^F + AQx_T^{AQ} = B_1x_T^{B1} + D_1x_T^{D1} \quad \text{Ecuación 14}$$

$$Fx_w^F + AQx_w^{AQ} = B_1x_w^{B1} + D_1x_w^{D1} \quad \text{Ecuación 15}$$

Donde:

AQ Flujo de acuosos proveniente del condensador. (kmol/h)

D_1 Corriente de destilado de la columna C1. (kmol/h)

En este caso son 3 las incógnitas: D_1 , x_T^{D1} y x_w^{D1} . La composición x_{cy}^{D1} Se obtiene de la resta de las otras composiciones de la unidad. Para resolver el balance se procede de la siguiente manera:

$$D_1 = F + AQ - B_1$$

$$D_1 = 100 + 39.686 - 49.5 = 90.186 \text{ kmol/h}$$

$$x_T^{D1} = \frac{F x_T^F + AQ x_T^{AQ} - B_1 x_T^{B1}}{D_1}$$

$$x_T^{D1} = \frac{(100)(0.5) + (39.686)(0.075) - (49.5)(0.002)}{90.186} = 0.586$$

$$x_w^{D1} = \frac{x_w^F + AQ x_w^{AQ} - B_1 x_w^{B1}}{D_1}$$

$$x_w^{D1} = \frac{(100)(0.5) + (39.686)(0.9246) - (49.5)(0.998)}{90.186} = 0.413$$

$$x_{cy}^{D1} = 1 - x_T^{D1} - x_w^{D1}$$

$$x_{cy}^{D1} = 1 - 0.586 - 0.413 = 0.001$$

4.2.2.3. Balance de columna C2.

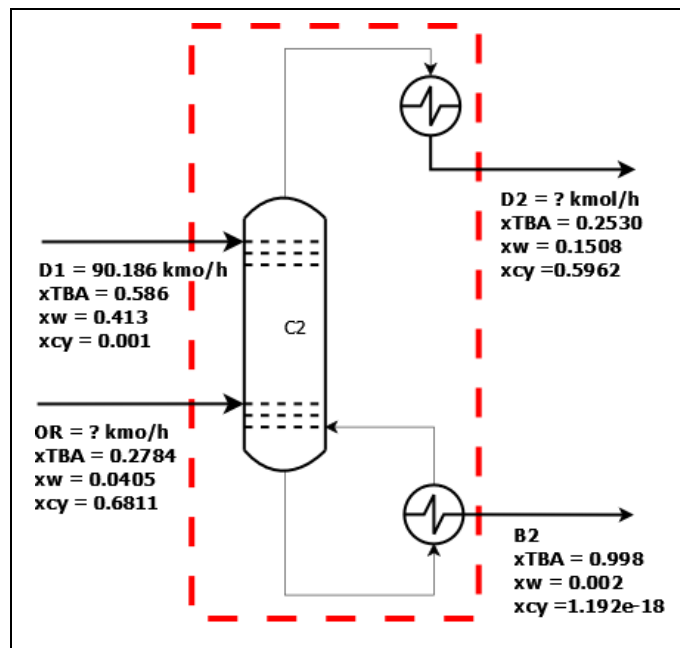


Figura 3-4. Diagrama de balance de masa columna C2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Para la columna 2 se requiere calcular el flujo molar del destilado (D_2) y del flujo de orgánicos proveniente del decantador (OR). Las ecuaciones de balance de masa son las siguientes:

$$D_1 + OR = B_2 + D_2 \quad \text{Ecuación 16}$$

$$D_1 x_T^{D1} + OR x_T^{OR} = B_2 x_T^{B2} + D_2 x_T^{D2} \quad \text{Ecuación 17}$$

$$D_1 x_w^{D1} + OR x_w^{OR} = B_2 x_w^{B2} + D_2 x_w^{D2} \quad \text{Ecuación 18}$$

Donde:

D_2 Corriente de destilado de la columna C2. (kmol/h)

Para resolver el balance de masa de la columna C2 usamos de nuevo el método de sistema de ecuaciones de primer grado. Las incógnitas en este caso se colocan al lado derecho de las ecuaciones y luego se resuelve de la siguiente manera:

$$\begin{cases} D_1 - B_2 = D_2 - OR \\ D_1 x_T^{D1} - B_2 x_T^{B2} = D_2 x_T^{D2} - OR x_T^{OR} \end{cases}$$

$$\begin{cases} D_1 - B_2 = D_2 - OR \\ -D_1 \frac{x_T^{D1}}{x_T^{D2}} + B_2 \frac{x_T^{B2}}{x_T^{D2}} = -D_2 + OR \frac{x_T^{OR}}{x_T^{D2}} \end{cases}$$

$$D_1 \left(1 - \frac{x_T^{D1}}{x_T^{D2}}\right) + B_2 \left(\frac{x_T^{B2}}{x_T^{D2}} - 1\right) = OR \left(\frac{x_T^{OR}}{x_T^{D2}} - 1\right)$$

$$OR = \frac{D_1 \left(1 - \frac{x_T^{D1}}{x_T^{D2}}\right) + B_2 \left(\frac{x_T^{B2}}{x_T^{D2}} - 1\right)}{\left(\frac{x_T^{OR}}{x_T^{D2}} - 1\right)}$$

$$OR = \frac{90.186 \left(1 - \frac{0.5860}{0.2530}\right) + (50.5) \left(\frac{0.998}{0.2530} - 1\right)}{\left(\frac{0.2784}{0.2530} - 1\right)} = 298.84 \text{ kmol/h}$$

$$D_2 = OR + D_1 - B_2$$

$$D_2 = 50.5 + 298.84 - 90.186 = 338.52 \text{ kmol/h}$$

4.2.2.4. Balance en el decantador C3.

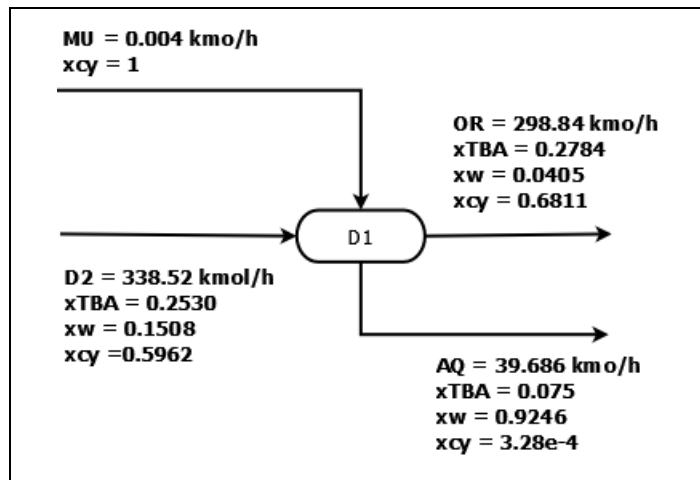


Figura 4-4. Diagrama de balance de masa decantador C3.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Como todas las incógnitas de las corrientes del proceso están resueltas, para el decantador se calcula los porcentajes de división de corrientes y separación de cada componente. Los porcentajes de separación se realizan en función de la corriente de orgánicos. Las ecuaciones que permiten calcular dichos porcentajes quedan de la siguiente manera:

$$p_{OR} = \frac{100OR}{D2 + MU} \quad \text{Ecuación 19}$$

$$p_{AQ} = 100 - p_{OR} \quad \text{Ecuación 20}$$

$$p_T^{OR} = \frac{100x_T^{OR}OR}{D2x_T^{D2}} \quad \text{Ecuación 21}$$

$$p_w^{OR} = \frac{100x_w^{OR}OR}{D2x_w^{D2}} \quad \text{Ecuación 22}$$

$$p_{cy}^{OR} = \frac{100x_{cy}^{OR}OR}{D2x_{cy}^{D2} + MU} \quad \text{Ecuación 23}$$

Donde:

- p_{OR} Porcentaje de separación de la corriente de orgánicos. (%)
- p_{AQ} Porcentaje de separación de la corriente de orgánicos. (%)
- p_T^{OR} Porcentaje de separación de terbutanol en la corriente de orgánicos. (%)
- p_w^{OR} Porcentaje de separación de agua en la corriente de orgánicos. (%)

p_{cy}^{OR} Porcentaje de separación de ciclohexano en la corriente de orgánicos. (%)

Resolviendo las ecuaciones se obtiene los siguientes resultados:

$$p_{OR} = \frac{100 (298.84)}{338.52 + 0.004} = 88.27 \%$$
$$p_{AQ} = 100 - 88.27 = 11.73\%$$
$$p_T^{OR} = \frac{100(0.2784)(298.84)}{(338.52)(0.2530)} = 97.14\%$$
$$p_w^{OR} = \frac{100(0.0405)(298.84)}{(338.52)(0.1508)} = 23.70\%$$
$$p_{cy}^{OR} = \frac{100(0.6811)(298.84)}{(338.52)(0.5962) + 0.004} \approx 100\%$$

En el caso del porcentaje de separación del ciclohexano en la corriente de orgánicos, este sale casi 100% porque existen solo trazas de este compuesto en la corriente de acuosos (AQ), $3.28e-4$ fracción molar. Para obtener los porcentajes de separación en función de la corriente de acuosos se debe simplemente restar de 100 los porcentajes de separación en función de la corriente de orgánicos (OR).

4.2.3.Redes Neuronales Artificiales.

La mejor configuración de la RNA se obtiene con 35 nodos en la capa oculta comprobado mediante análisis estadístico. El MSE obtenido en el proceso de entrenamiento, validación y testeo fueron: $2.051e-5$, 0 y 0.0597, y el coeficiente de correlación lineal: 0.99921, 0, 0.78855, respectivamente. Mostrando que la RNA se ajustó con margen de error muy pequeño en 675 iteraciones.

La estructura de la RNA es la siguiente: 4 elementos de entrada, 25 nodos en las capas intermedias ocultas y 10 nodos en la capa de salida. La RNA no tiene retroalimentaciones. La RNA se prueba con 20 datos extra, generados con DWSIM, el resultado muestra un buen ajuste para las corrientes de la columna C1, pero menos precisión en las corrientes de salida del decantador.

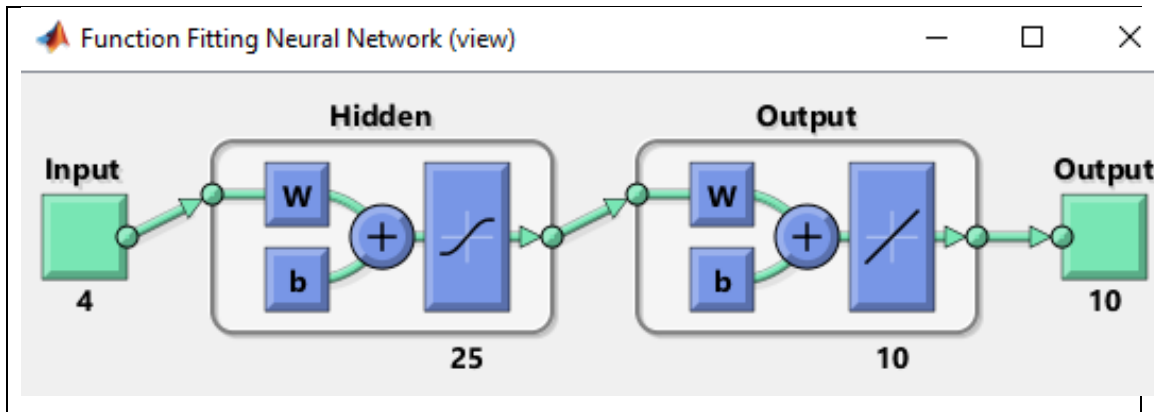


Figura 5-4. Estructura de la RNA entrenada.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla 5-4. Error cuadrático medio de fases de ajuste de RNA.

Fase	MSE
Entrenamiento	2.0516e-5
Prueba	0.0597
Validación	NAN

Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2.4. Validación de resultados.

Los resultados del ajuste de la RNA a los datos obtenidos del simulador se muestran en el gráfico 2-4. Los resultados muestran el grado de aproximación de la RNA en las etapas de entrenamiento, prueba y el ajuste de todos los datos. El valor del coeficiente de correlación lineal para todos los datos es de 0.95999, mostrando que la relación entre las salidas (output) y los datos objetivo (target) es casi lineal. En el gráfico 1-4, se muestra el avance del MSE (Error cuadrático medio) durante las iteraciones del proceso de entrenamiento y testeo de la RNA, siendo mayor el MSE durante el proceso de testeo.

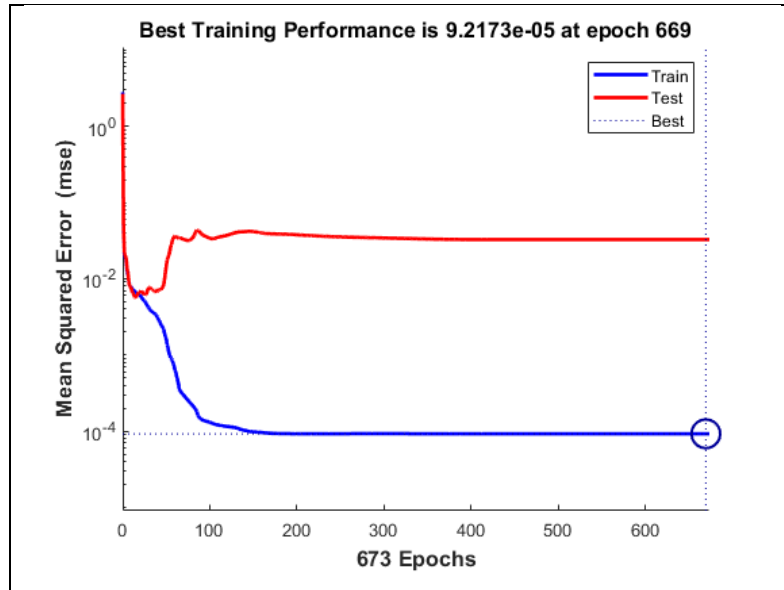


Gráfico 1-4. Evolución de MSE del proceso de entrenamiento.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

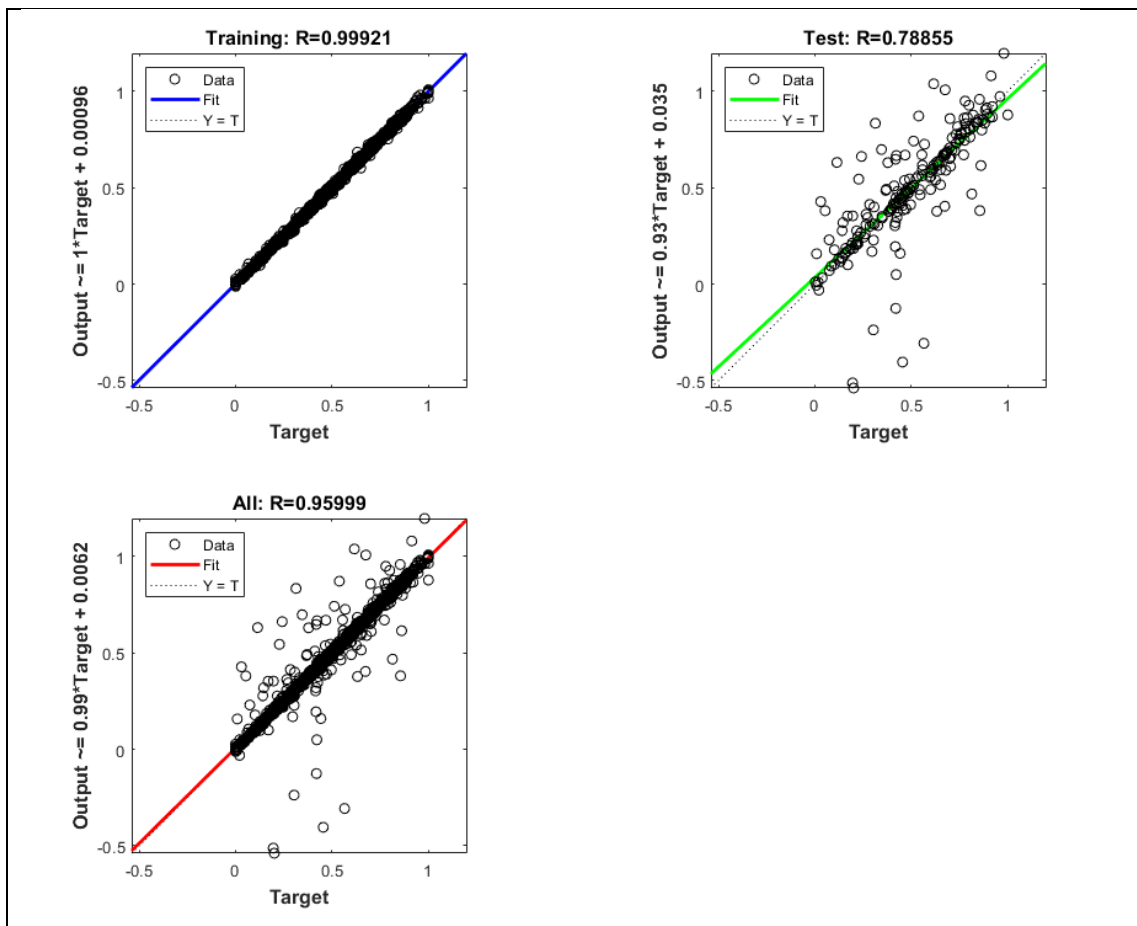


Gráfico 2-4. Resultados de la aproximación de la RNA.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2.5. Predicción de valores con Red Neuronal Artificial.

En el anexo E en las tablas E-1 a E-2 se encuentran los resultados del cálculo del error porcentual de los 135 casos usados para el entrenamiento, como se observa los errores son bajos a comparación con los errores obtenidos en el proceso de generalización de la RNA con los 20 casos de validación.

En la tabla E-3 del anexo E, se observa el cálculo del error para las salidas de la RNA, a partir de los datos de validación para la columna C1. Se compara con los datos experimentales obtenidos en DWSIM, mostrando que el error promedio de predicción para el flujo molar del destilado (D1) es de 9.61%, para la composición de terbutanol de D1 es de 2.92% y el flujo molar de fondo (B1) es de 4.63%. La figura 17-4 muestra los datos de DWSIM (Real) y la predicción.

La tabla E-4 muestra el error promedio porcentual calculado para las salidas de la columna C2, mostrando un 32.23% de error para el flujo molar de destilado (D2), 1.50% para la fracción molar de ciclohexano de D2 y 4.73% para la corriente de fondo (B2). La predicción de la RNA para D2 tiene un margen de error considerable.

Las tablas E-5 y E-6 contienen el error porcentual de las salidas del decantador C3. Los errores promedio porcentuales de las salidas son: 15.59% para el flujo molar de acuosos (AQ), 3.18% para la fracción molar de agua en la corriente AQ, 35.46% para el flujo molar de orgánicos (OR) y 2.32% para la fracción molar de ciclohexano en OR.

Las predicciones realizadas con la RNA muestran ser muy precisa al predecir las propiedades de las corrientes de salida de la columna C1, pero su precisión disminuye en la columna C2. Se tiene el mismo resultado con el decantador (menor precisión).

4.2.6. Interpretación de los datos predichos por la RNA

A continuación, se muestran los gráficos de los resultados obtenidos por DWSIM y la RNA, para el proceso de entrenamiento y la validación.

4.2.6.1. Datos de entrenamiento.

Columna C1.

El destilado de la columna C1 (D1) muestra un error de 1.06% en la predicción en el proceso de entrenamiento, como lo muestra el gráfico 3-4, casi no existen valores atípicos.

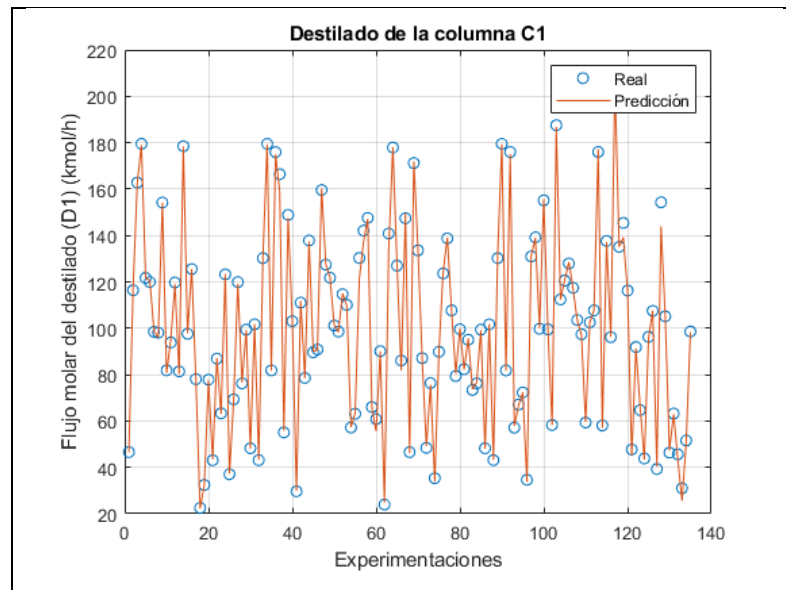


Gráfico 3-4. Flujo molar de destilado (D1), columna C1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Para la composición molar de terbutanol del gráfico 3-4, el error promedio porcentual es de 0.53% y del flujo de fondo (B1) es 2.58% ver gráfico 4-4. Siendo valores de error bajos para las predicciones en el proceso de entrenamiento.

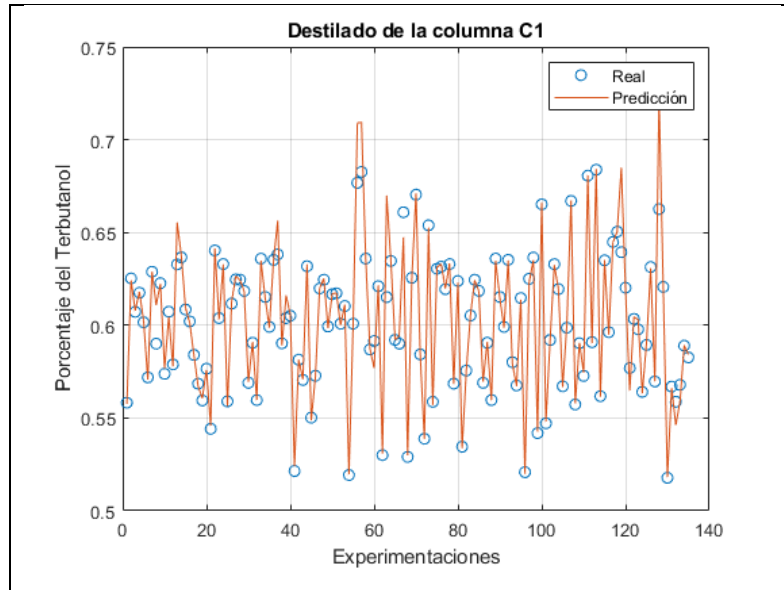


Gráfico 4-4. Fracción molar de terbutanol de D1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

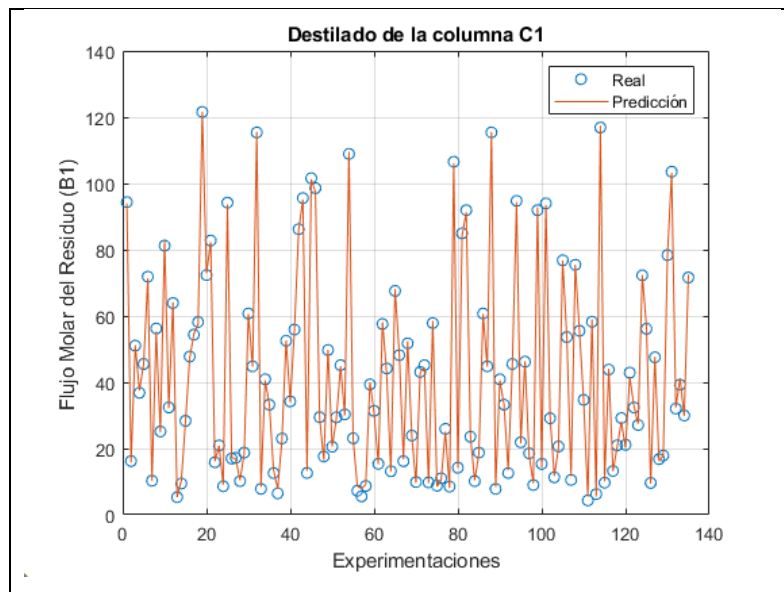


Gráfico 5-4. Flujo molar de fondo (B1), columna C1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Normalmente los resultados obtenidos por la RNA en el proceso de generalización suelen producir mayor porcentaje de error. Esto se observa en los datos generados por los datos de validación.

Columna C2.

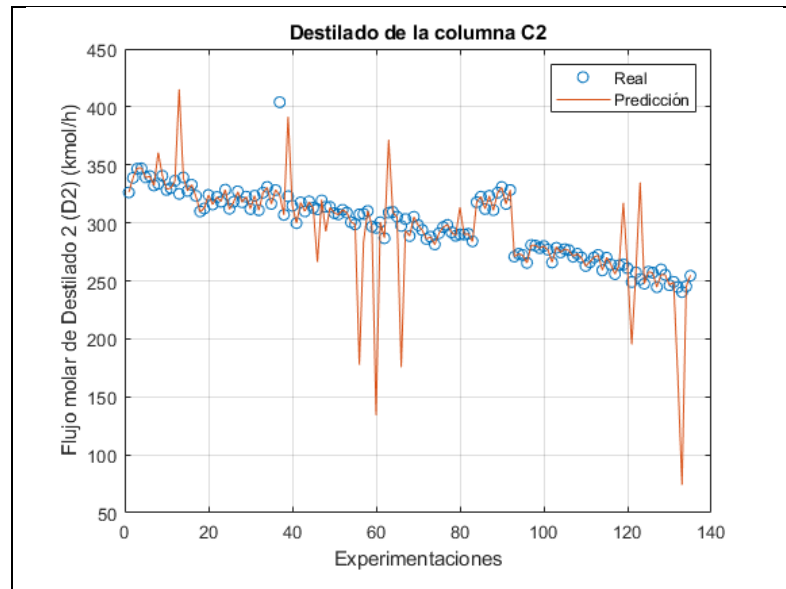


Gráfico 6-4. Flujo molar de destilado (D2), columna C2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

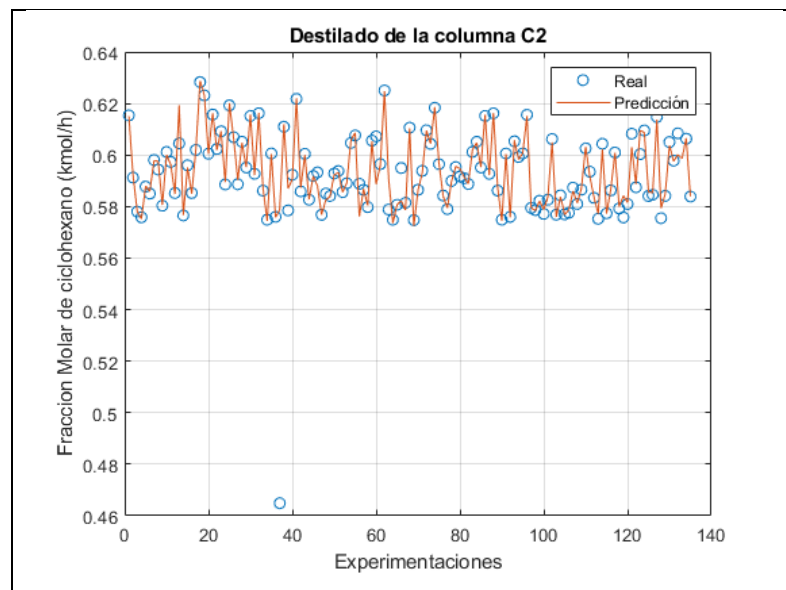


Gráfico 7-4. Fracción molar de ciclohexano en D2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En el caso de la columna C2 en el proceso de entrenamiento se obtiene un error de 3.41% para el destilado D2, un 0.45% para la composición de ciclohexano y un 1.36% para la corriente de fondo B2. Como se puede observar en los gráficos 7-4, 8-4 y 9-4 no existen muchos valores atípicos.

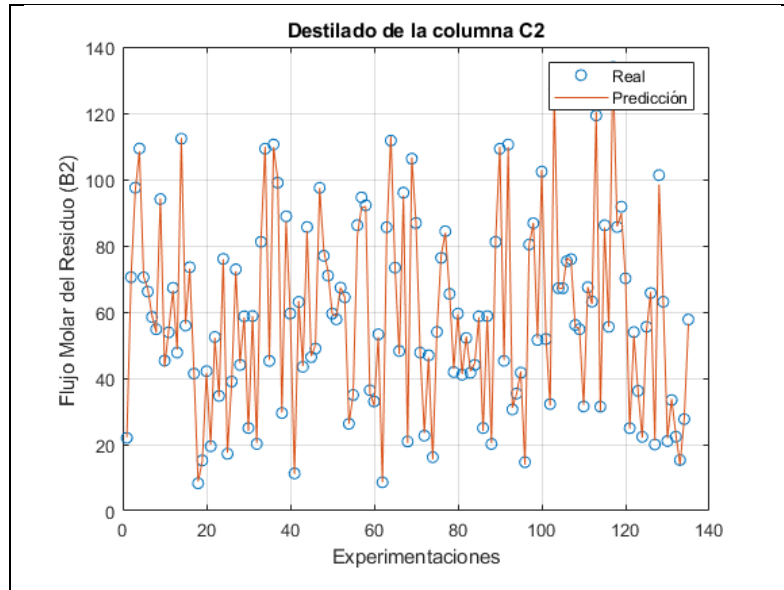


Gráfico 8-4. Flujo molar de fondo (B2), columna C2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Decantador C3.

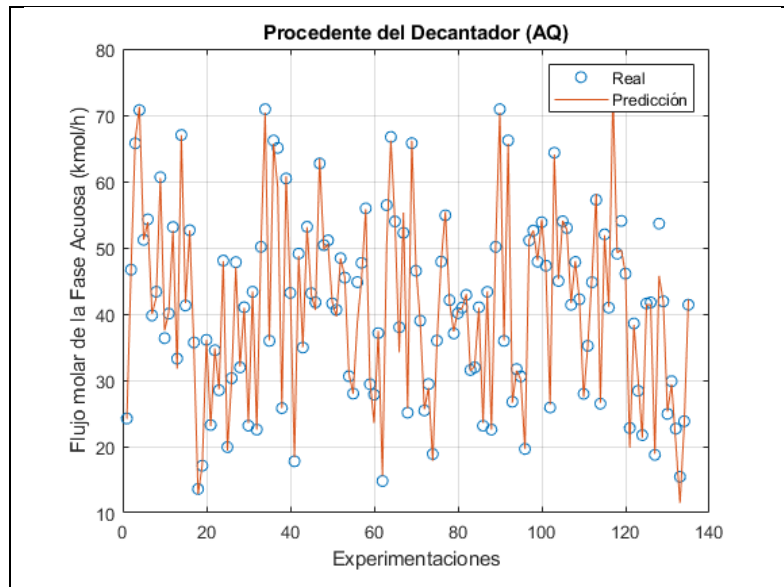


Gráfico 9-4. Flujo molar de acuosos (AQ) del decantador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

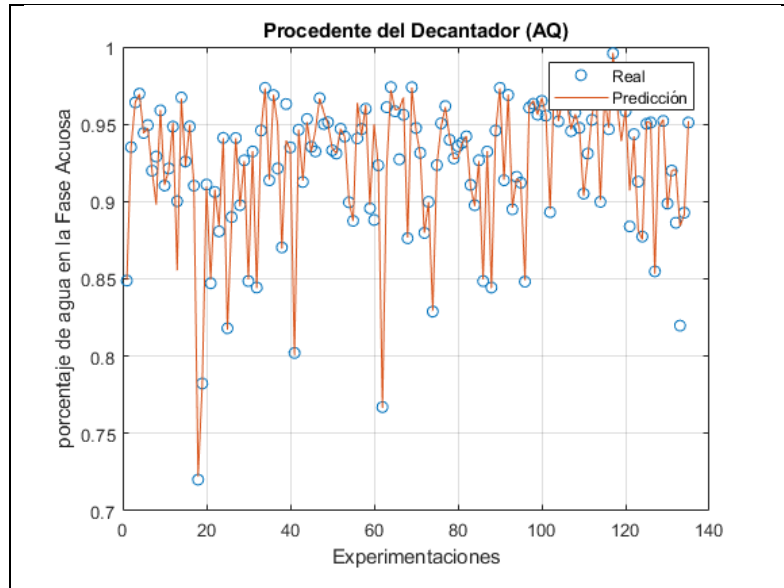


Gráfico 10-4. Fracción molar de agua en AQ.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

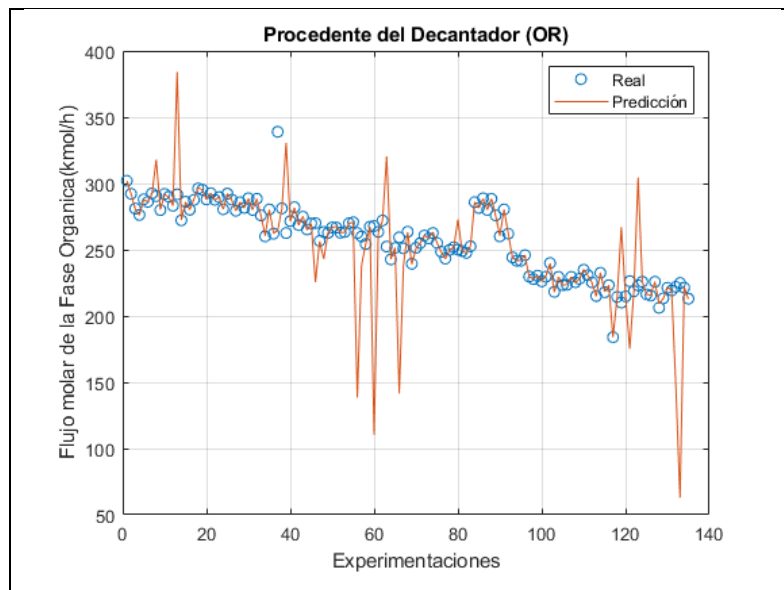


Gráfico 11-4. Flujo molar de orgánicos (OR) de decantador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En el decantador los errores porcentuales promedio fueron: para el flujo molar de acuosos 1.94%, para la composición molar de agua 0.52%, el flujo molar de orgánicos 3.83% y la composición de ciclohexano en la corriente de orgánicos 0.67%.

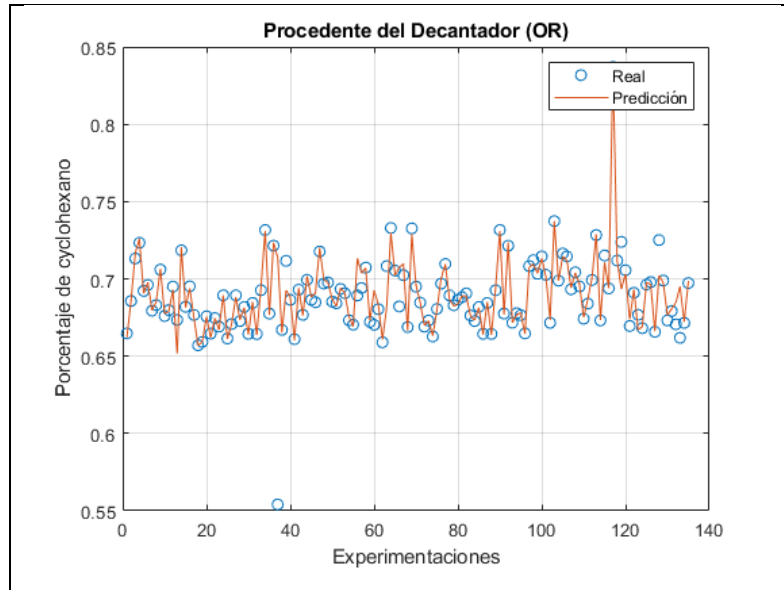


Gráfico 12-4. Fracción molar de ciclohexano en OR.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2.6.2. Datos de validación.

Columna C1

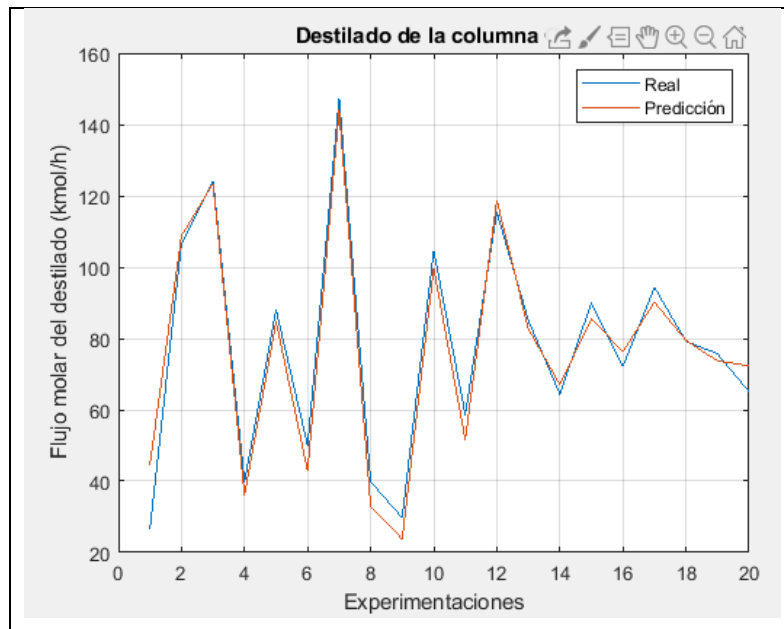


Gráfico 13-4. Flujo molar de destilado (D1), columna C1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

El gráfico 13-4 nos muestra los datos de DWSIM (Real) y la predicción de la RNA, con muy pocos datos atípicos. Esto concuerda con la medida del error mostrado en la tabla 8-4 que es de

9.61%. A su vez el gráfico 14-4 muestra la predicción de la fracción molar de terbutanol en la corriente de destilado D1. Igualmente muestra un grado de correlación alto, con muy pocos valores atípicos esto refleja el 0.31% de error promedio calculado.

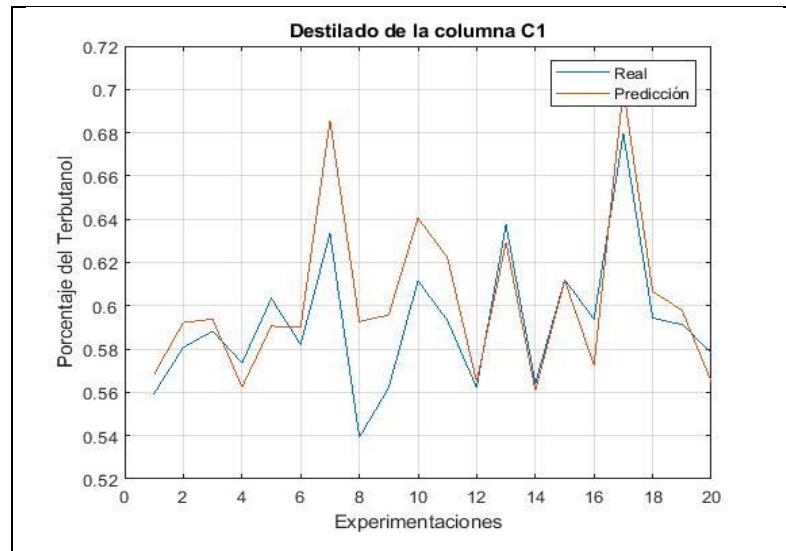


Gráfico 14-4. Fracción molar de terbutanol en D1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

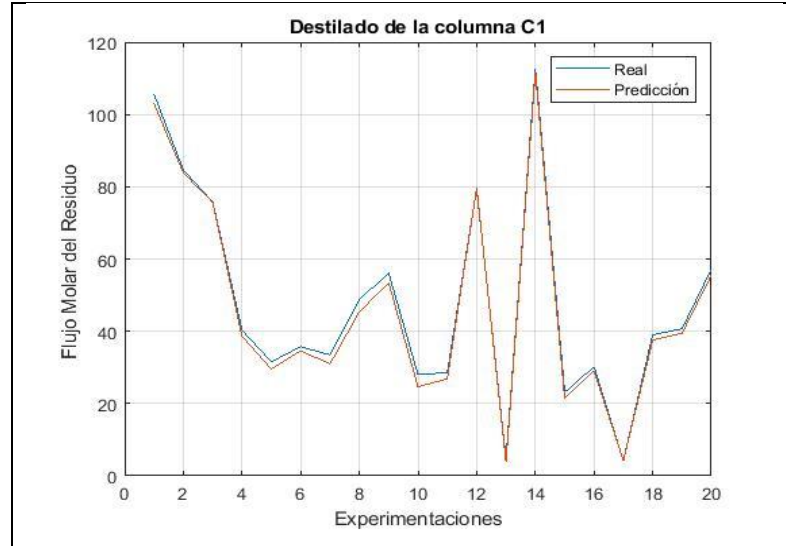


Gráfico 15-4. Flujo molar de fondo (B1), columna C1.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En el gráfico 15-4 se muestra la comparación entre los datos de DWSIM y los generados por la RNA para el flujo molar de fondo B1. El error promedio porcentual de estos datos es de 4.46%. Como resultado general para la columna C1 las predicciones son muy precisas quedando validado para las salidas de esta operación.

Columna C2

En el caso de la columna C2, en el gráfico 16-4 se muestra los datos predichos por la RNA contra los datos generados por el simulador. A diferencia de la columna C1 la columna muestra mayor incidencia de datos atípicos y errores de predicción. Siendo el error promedio porcentual del 32.23%.

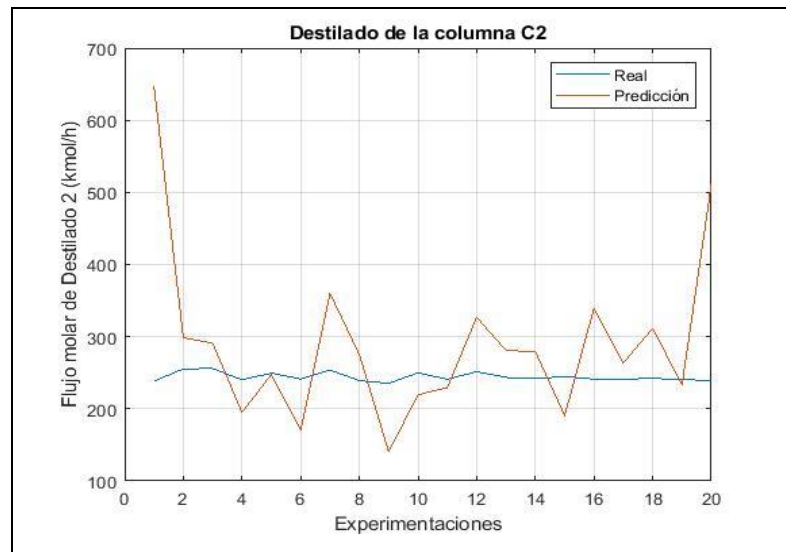


Gráfico 16-4. Flujo molar de destilado (D2), columna C2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

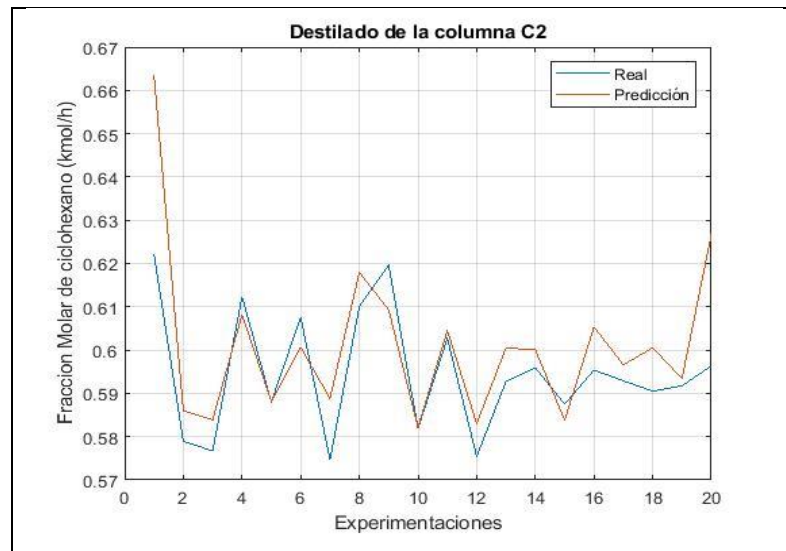


Gráfico 17-4. Fracción molar de ciclohexano en D2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

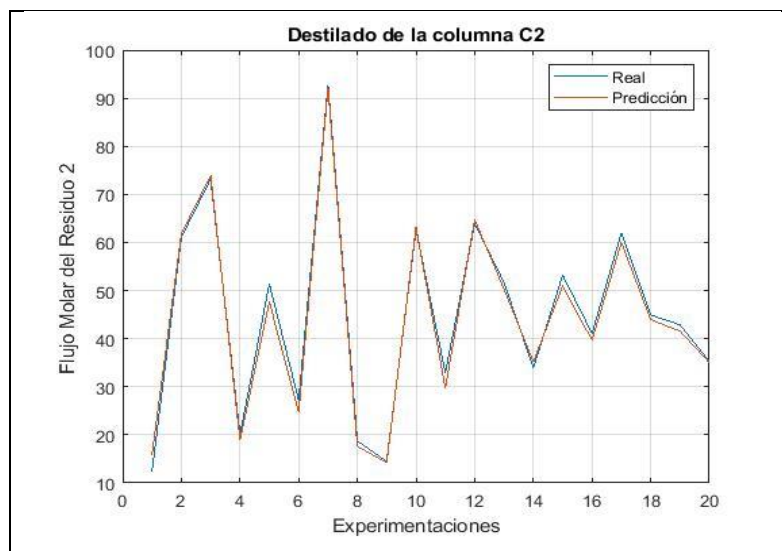


Gráfico 18-4. Flujo molar de fondo (B2), columna C2.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

En el gráfico 17-4 se muestra los valores predichos en el proceso de entrenamiento para la fracción molar de ciclohexano en la corriente de destilado D2, con un margen de error de 1.089% presenta menor incidencia de error. Los datos predichos para la corriente de fondos B2 se muestran en el gráfico 18-4, con un error del 1.2131%.

Decantador C3

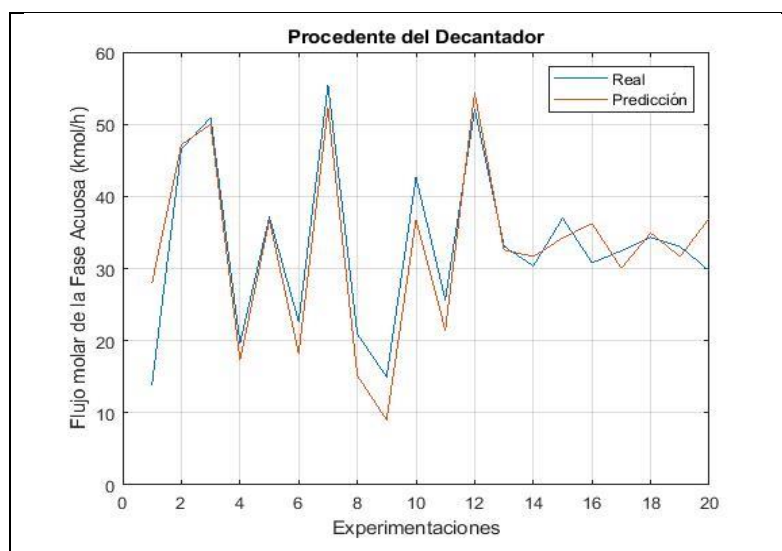


Gráfico 19-4. Flujo molar de acuosos (AQ) del decantador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

Para el decantador las predicciones fueron menos precisas para el flujo molar de orgánicos (OR), con un error promedio porcentual de 35.46% muestra mayor incidencia de valores atípicos como se observa en el grafico 21-4. En el grafico 20-4 se muestra la predicción para la composición molar de agua de la corriente de acuosa AQ teniendo un error del 2.62%.

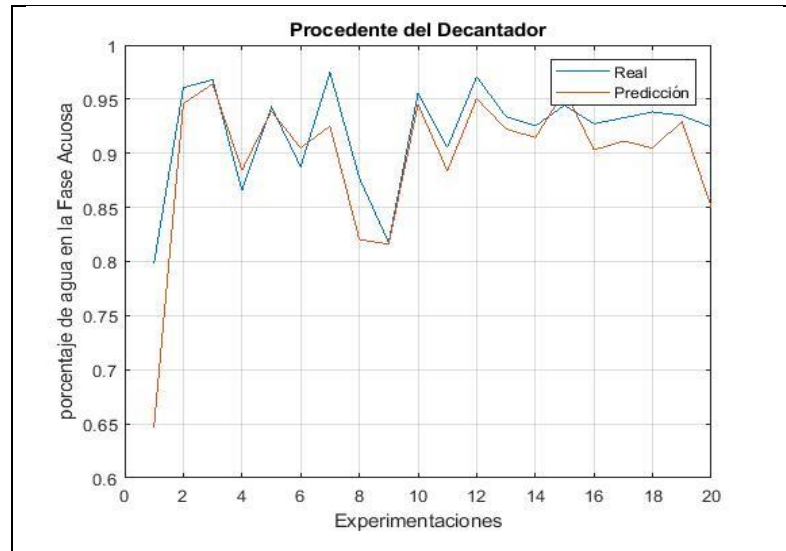


Gráfico 20-4. Fracción molar de agua en AQ.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

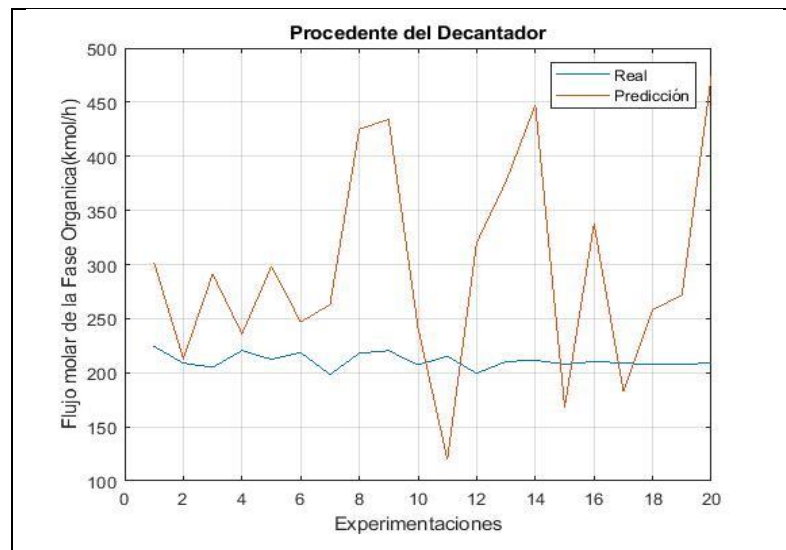


Gráfico 21-4. Flujo de orgánicos (OR) del decantador.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

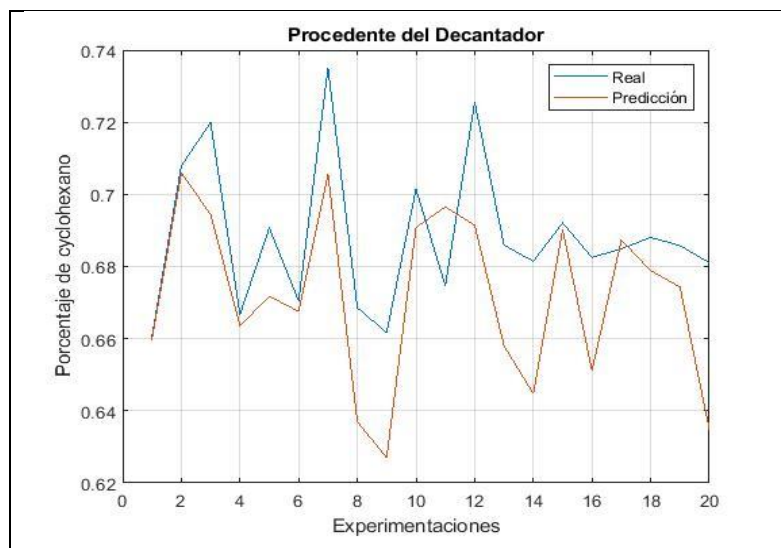


Gráfico 22-4. Fracción molar de ciclohexano en OR.
Realizado por: OLEAS D., 2020.

4.2.7. Análisis estadístico del error de aproximación.

Para poder indicar que existe una relación o diferencia entre los datos proporcionados por el simulador y los resultados obtenidos por la RNA, se usa el test ANOVA con el objetivo de medir si existe una diferencia significativa entre la media de ambos grupos de datos. Para realizar el análisis se usa el software SPSS.

El análisis estadístico para todas las variables de salida de la RNA (Tabla 12-4), muestran que el valor de P para todas las variables analizadas es mayor a 0.05, lo que indica que no existe diferencia significativa entre las medias de ambos grupos (Valores de predichos por la RNA y los datos experimentales obtenidos en DWSIM). Con esto se verifica que el modelo basado en la RNA proporciona resultados similares, pudiendo remplazar el diagrama de bloques del proceso de separación con un modelo basado en los pesos y bias de la red neuronal. El resultado mostrado en la figura 8-5, corresponde al análisis ANOVA del flujo de destilado de la columna C1 (D1).

Tabla 6-4. Resultados de test ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Resultados del destilado de la columna C1 (D1).					
Entre grupos	8.64178	1	8.64178	0.01	0.9279
Intragrupos	39554	38	1040.9		
Total (Corr.)	39562.7	39			
Resultados para composición de TBA en D1.					
Entre grupos	0.0010312	1	0.0010312	0.82	0.3699
Intra grupos	0.0475796	38	0.0012521		
Total (Corr.)	0.0486108	39			
Resultados para flujo de fondo de C1 (B1).					
Entre grupos	23.2288	1	23.2288	0.03	0.8734
Intra grupos	34293.7	38	902.465		
Total (Corr.)	34316.9	39			
Resultados del destilado de la columna C2 (D2).					
Entre grupos	21433.3	1	21433.3	3.17	0.083
Intra grupos	256945	38	6761.71		
Total (Corr.)	278378	39			
Resultados de la composición de Ciclohexano en D2.					
Entre grupos	0.000421	1	0.000421	1.5	0.2289
Intra grupos	0.0106969	38	0.0002815		
Total (Corr.)	0.0111179	39			
Resultados de flujo de fondo de C2 (B2).					
Entre grupos	5.26077	1	5.26077	0.01	0.9139
Intra grupos	16887.4	38	444.405		
Total (Corr.)	16892.6	39			
Resultados de flujo molar acuoso (AQ).					
Entre grupos	1.79499	1	1.79499	0.01	0.9127
Intra grupos	5603.08	38	147.45		
Total (Corr.)	5604.88	39			
Resultados de composición de agua en AQ.					
Entre grupos	0.0054005	1	0.0054005	1.44	0.2375
Intra grupos	0.142474	38	0.0037493		
Total (Corr.)	0.147875	39			
Resultados de flujo molar orgánico (OR).					
Entre grupos	21787.4	1	21787.4	3.43	0.0719
Intra grupos	241599	38	6357.87		
Total (Corr.)	263386	39			
Resultados de composición de Ciclohexano en OR.					
Entre grupos	0.0009533	1	0.0009533	1.81	0.1868
Intra grupos	0.0200421	38	0.0005274		
Total (Corr.)	0.0209954	39			

Realizado por: OLEAS D., 2020.

CONCLUSIONES

Se simuló la destilación del terbutanol para la predicción de la composición de los productos mediante redes Neuronales Artificiales. Usando el simulador DWSIM se construyó un modelo que permitió obtener datos para el entrenamiento de la Red Neuronal Artificial. Para facilitar la generación de los datos se escribió en Python una función de análisis de sensibilidad. Los datos generados se tabularon y modificaron de tal manera que pudieron ser usados en MATLAB. La herramienta Neural Fitting de MATLAB permitió generar el modelo basado en RNA. Este modelo fue evaluado con un grupo más pequeño de datos, mostrando mayor error en la predicción de las variables de salida. Pero el error se mantuvo dentro del rango de confianza, validando el modelo.

Usando como referencia el trabajo de Yu H. et al. (2015) y mediante un análisis de sensibilidad, se definió como parámetros de entrada de la red neuronal: el flujo molar de la mezcla azeotrópica, la composición de terbutanol en la alimentación, la temperatura de dicho flujo y el flujo molar del agente azeotrópico. Estas variables de diseño se usaron para generar los datos para el entrenamiento de la RNA.

Se diseñó una red neuronal configurada con: 25 nodos en capas ocultas y 10 en capa de salida. Esta RNA mostro una capacidad de aproximación con un coeficiente de correlación lineal de 0.95999, con un nivel de confianza del 95%. El test ANOVA demostró que no existe diferencia significativa entre las medias de los grupos, lo que significa que no existe una diferencia entre los datos experimentales obtenidos del simulador DWSIM y los obtenidos del modelo RNA.

Para la evaluación del modelo obtenido, se usó una tabla de 20 casos con parámetros de entrada diferentes (aleatorios). Al comparar los resultados de DWSIM con la predicción de la RNA, la RNA mostró un buen desempeño en la predicción de las salidas de la columna C1, con errores de: 0.31% Destilado de la columna C1 (D1), 0.99% fracción de terbutanol en D1 (x_{D1_tb}) y 4.46% Residuos de la columna C1 (B1), mientras que las salidas de la columna C2 fueron: 32.23% Destilado de la columna C2 (D2), 1.50% fracción de ciclohexano en D2 (x_{D2_cy}) y 1.21% Residuos de la columna C2 (B2) y para el decantador de: 4.34% Corriente acuosa (AQ) y 2.62% Fracción de agua en AQ (x_{AQ_w}).

RECOMENDACIONES

Para mejorar la calidad de los datos de entrenamiento de la RNA es recomendable reprocesar los datos. Eliminando datos atípicos que pueden aumentar el margen de error de las predicciones.

Este trabajo usa una estructura de RNA de tipo feedforward con entrenamiento backpropagation. Se recomienda extender el estudio del proceso de separación de terbutanol-agua usando otras estructuras de RNA.

Se recomienda extender el estudio de las RNA en la separación de la mezcla azeotrópica terbutanol-agua a el proceso de destilación con variación de presión (PSD). Método físico que no requiere el uso de un agente azeotrópico de separación.

BIBLIOGRAFÍA

ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR, 2016. "Código orgánico de la economía social de los conocimientos, creatividad e innovación". *Registro Oficial* [en línea], vol. IV, pp. 113. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: <http://www.wipo.int/edocs/lexdocs/laws/es/ec/ec075es.pdf>.

COLAN, 2020. "Process Simulation end user, the CAPE-OPEN Laboratories Network". *Experience CAPE-OPEN as a Process Simulation end-user* [en línea]. [Consulta: 26 julio 2020]. Disponible en: <https://www.colan.org/process-simulation-end-user/>.

DWSIM, 2020. "DWSIM - Chemical Process simulator". *DWSIM Wiki* [en línea]. [Consulta: 3 agosto 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Automation>.

GOBIERNO DEL ECUADOR, 2008. *Decreto Ejecutivo 1014* [en línea]. 2008. Quito: s.n. [Consulta: 6 agosto 2020]. ISBN 15000.000.00. Disponible en: <https://www.gobiernoelectronico.gob.ec/wp-content/uploads/2018/09/Decreto-Ejecutivo-Nº-1014-del-10-de-abril-del-2008.pdf>.

GOBIERNO ELECTRÓNICO, 2015. "Plan Nacional de Gobierno Electrónico". *Gobierno Electrónico* [en línea], pp. 84. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: https://www.telecomunicaciones.gob.ec/wp-content/uploads/2018/08/PNGE_2018_2021sv2.pdf.

GRACZOVÁ, E. et.al. 2020. "tert-Butanol–water mixture separation by extractive distillation: Application of experimental data in process simulations". *Separation and Purification Technology*, pp. 116968. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2020.116968.

HAQUE, M. et. al 2005. "Application of neural networks in power systems; A review". *Proceedings - Wec 05: Fourth World Enformatika Conference* [en línea]. S.l.: International Scientific Information, Inc., pp. 53-57. [Consulta: 13 julio 2020]. ISBN 9759845857. Disponible en: <https://www.medscimonit.com/abstract/index/idArt/502532>.

HARTANTO, D. et.al. 2016. "Isobaric vapour-liquid equilibrium of (tert-butanol + water) system with biological buffer TRIS at 101.3 kPa". *Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 98, pp. 159-164. ISSN 10963626. DOI 10.1016/j.jct.2016.03.013.

HILMEN, E.-K., 2000. "Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation". 288 [en línea], no. November, pp. 1-298. [Consulta: 16 julio 2020]. Disponible en: <https://ntnuopen.ntnu.no/ntnu-xmlui/handle/11250/248113>.

HUSSAIN, Mohamed., 1999. "Review of the applications of neural networks in chemical process control - simulation and online implementation". *Artificial Intelligence in Engineering*, vol. 13, no. 1, pp. 55-68. ISSN 09541810. DOI 10.1016/S0954-1810(98)00011-9.

KASAR, M. et.al. 2016. "Face recognition using neural network: A review". *International Journal of Security and its Applications* [en línea], vol. 10, no. 3, pp. 81-100. [Consulta: 13 julio 2020]. ISSN 17389976. DOI 10.14257/ijasia.2016.10.3.08. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.14257/ijasia.2016.10.3.08>.

KIRBY, H. et.al. 1994. "The development of traffic and transport applications of artificial intelligence: an overview". *Artificial intelligence application to traffic engineering* [en línea], no. Transport, pp. 3-27. DOI <http://worldcat.org/isbn/9067641715>. Disponible en: <https://trid.trb.org/view/425233>.

KRAMER, A. et.al. 2018. "Applications of Artificial Neural Networks in Process Control Applications: A Review". *2018 International Conference on Biomedical Engineering Applications, ICBEA 2018 - Proceedings*. S.l.: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., ISBN 9781538680582. DOI 10.1109/ICBEA.2018.8471743.

LEXIS, 2008. "Constitucion de la republica del Ecuador 2008 Decreto Legislativo 0 Registro Oficial". *Constitución del Ecuador* [en línea]. S.l.: s.n., pp. 136. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: www.lexis.com.ec.

LIU, K. et.al. 2020. "Vapour-liquid equilibrium measurements and correlation for separating azeotropic mixture (ethyl acetate + n-heptane) by extractive distillation". *Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 144, pp. 106075. ISSN 10963626. DOI 10.1016/j.jct.2020.106075.

MDN, 2020. "LGPL - Glosario | MDN". *Definición de LGPL* [en línea]. [Consulta: 6 agosto 2020]. Disponible en: <https://developer.mozilla.org/es/docs/Glossary/LGPL>.

MOTARD, R. et.al. 1975. "*Steady state chemical process simulation* [en línea]". 1 mayo 1975. S.l.: John Wiley & Sons, Ltd. [Consulta: 9 noviembre 2020]. Disponible en: <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690210302>.

NGUYEN, V. et.al. 2007. "Prediction of vapor-liquid equilibrium data for ternary systems using artificial neural networks". *Fluid Phase Equilibria*, vol. 254, no. 1-2, pp. 188-197. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2007.03.014.

NIST, 2020. "2-Propanol, 2-methyl"- . *NIST Chemistry WebBrowser* [en línea]. [Consulta: 17 julio 2020]. Disponible en: <https://webbook.nist.gov/cgi/inchi/InChI%3D1S/C4H10O/c1->

4(2%2C3)5/h5H%2C1-3H3.

ROJAS, R., 1996. "The Biological Paradigm". *Neural Networks*. S.I.: Springer Berlin Heidelberg, pp. 3-27.

SCHMITZ, J. et.al. 2006. "Artificial neural networks for the solution of the phase stability problem". *Fluid Phase Equilibria*, vol. 245, no. 1, pp. 83-87. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2006.02.013.

SHI, P. et.al. 2018. "Separation of azeotrope (2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol + water) via heterogeneous azeotropic distillation by energy-saving dividing-wall column: Process design and control strategies". *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 135, pp. 52-66. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.05.025.

SIEWHUI CHONG, C. et.al. 2019. "Chemical engineering process simulation (2017)". [en línea], pp. 831419. [Consulta: 9 noviembre 2020]. Disponible en: <https://www.elsevier.com/books/chemical-engineering-process-simulation/foo/978-0-12-803782-9>.

SINGH, V. et.al. 2005. "ANN based estimator for distillation - Inferential control". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 44, no. 7, pp. 785-795. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2004.08.010.

SOSA, J. et.al. 2020. "Separation of azeotropic mixtures using protic ionic liquids as extraction solvents". *Journal of Molecular Liquids*, vol. 297, pp. 111733. ISSN 01677322. DOI 10.1016/j.molliq.2019.111733.

THOME, B. (ed), 2001. "Systems engineering principles and practice". *Journal of Manufacturing Systems* [en línea], vol. 20, no. 1, pp. 70. [Consulta: 10 noviembre 2020]. ISSN 02786125. DOI 10.1016/s0278-6125(01)80027-3. Disponible en: <https://www.abebooks.com/9780471935520/Systems-Engineering-Principles-Practice-Computer-Based-0471935522/plp>.

YU, H. et.al. 2015. "Design and control of dividing-wall column for tert-butanol dehydration system via heterogeneous azeotropic distillation". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], vol. 54, no. 13, pp. 3384-3397. [Consulta: 19 julio 2020]. ISSN 15205045. DOI 10.1021/ie504325g. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie504325g>.

ANEXOS

ANEXO A

Código de la función de análisis de sensibilidad en IronPython-DWSIM.

```
1. from System.IO import Directory, Path
2. lpath = Path.Combine(Directory.GetCurrentDirectory(), "Lib")
3. import sys
4. sys.path.append(lpath)
5. import os
6. print os.getcwd()
7.
8. import System
9. import csv
10. import random
11.
12. DIR = "C:\Users\DANNY\Documents\user\DWSIM\data\data3\\" # Fichero
13. FIELDS = ['N', 'F', 'x_F', 'T_F', 'MU', 'T_D1', \
14.           'T_D2', 'QH1', 'QR1', 'QH2', 'QR2', \
15.           'D1', 'R1', 'D2', 'R2', 'x_D1_w', \
16.           'x_D1_tb', 'x_D1_cy', 'x_D2_w', 'x_D2_tb', 'x_D2_cy', \
17.           'AQ', 'ORA', 'x_AQ_w', 'x_AQ_tb', 'x_AQ_cy', \
18.           'x_ORA_w', 'x_ORA_tb', 'x_ORA_cy', 'T_AQ', 'T_ORA']
19.
20. def multiVarAnalysis(fileName, nPoints):
21.
22.     # Dirección completa del archivo
23.     path = DIR + fileName
24.
25.     # Intervalos de entradas
26.     interv_F = [50, 150]           # Flujo molar F [kmol/h]
27.     interv_xf = [0.1, 0.95]       # Composición [fracción molar]
28.     interv_tf = [293.15, 373.15]  # Temperatura [K]
29.     interv_mu = [0.001, 0.01]     # Flujo molar MU [kmol/h]
30.
31.     # Repuesta
32.     res = []
33.
34.     # Entradas
35.     e1_f = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('F')
36.     e2_mu = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('MU')
37.     e3_aq = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('AQA')
38.     # Salidas
39.     o1_d1 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('D1')
40.     o2_r1 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('R1')
41.     o3_d2 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('D2')
42.     o4_r2 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('R2')
43.     o5_qh1 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('QH1')
44.     o6_qr1 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('QR1')
45.     o7_qh2 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('QH2')
46.     o8_qr2 = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('QR2')
47.     o9_ora = Flowsheet.GetFlowsheetSimulationObject('ORA')
48.
49.     j = 0
50.     error = 0
51.
52.     # Escribir encabezado de archivo
53.     with open(path, 'wb') as outfile:
54.         writer = csv.DictWriter(outfile, fieldnames = FIELDS)
55.         writer.writeheader()
56.
57.         for i in range(nPoints):
58.             temp = {}
```

```

59.
60.     # Variables aleatorias
61.     val_F = random.uniform(interv_F[0], interv_F[1])
62.     val_xf = random.uniform(interv_xf[0], interv_xf[1])
63.     val_tf = random.uniform(interv_tf[0], interv_tf[1])
64.     val_mu = random.uniform(interv_mu[0], interv_mu[1])
65.
66.     #Asignación de variables
67.     # Flujo molar F
68.     e1_f.GetPhase('Overall').Properties.massflow = None
69.     e1_f.GetPhase('Overall').Properties.volumetric_flow = None
70.     e1_f.GetPhase('Overall').Properties.molarflow = val_F/3.6
71.     # Flujo molar AQA
72.     e3_aq.GetPhase('Overall').Properties.massflow = None
73.     e3_aq.GetPhase('Overall').Properties.volumetric_flow = None
74.     e3_aq.GetPhase('Overall').Properties.molarflow = 100/3.6
75.     # Composición F
76.     comp_f = System.Array[float]([1-val_xf, val_xf, 0])
77.     e1_f.SetOverallComposition(comp_f)
78.     # Temperatura
79.     e1_f.GetPhase('Overall').Properties.temperature = val_tf
80.     # Flujo molar MU
81.     e2_mu.GetPhase('Overall').Properties.massflow = None
82.     e2_mu.GetPhase('Overall').Properties.volumetric_flow = None
83.     e2_mu.GetPhase('Overall').Properties.molarflow = val_mu/3.6
84.
85.     try:
86.         # Correr simulación
87.         Flowsheet.RequestCalculation()
88.
89.         # Obtener resultados
90.         # Flujo molar de salidas
91.         d1 = o1_d1.GetPhase('Overall').Properties.molarflow*3.6
92.         r1 = o2_r1.GetPhase('Overall').Properties.molarflow*3.6
93.         d2 = o3_d2.GetPhase('Overall').Properties.molarflow*3.6
94.         r2 = o4_r2.GetPhase('Overall').Properties.molarflow*3.6
95.         aq = e3_aq.GetPhase('Overall').Properties.molarflow*3.6
96.         ora = o9_ora.GetPhase('Overall')\
97.             .Properties.molarflow*3.6
98.
99.         # Composición de salidas
100.        compd1 = list(o1_d1.GetOverallComposition())
101.        compd2 = list(o3_d2.GetOverallComposition())
102.        compaq = list(e3_aq.GetOverallComposition())
103.        compora = list(o9_ora.GetOverallComposition())
104.
105.        # Temperatura de salidas
106.        d1_t = o1_d1.GetPhase('Overall').\
107.            Properties.temperature
108.        d2_t = o3_d2.GetPhase('Overall').\
109.            Properties.temperature
110.        aq_t = e3_aq.GetPhase('Overall').\
111.            Properties.temperature
112.        ora_t = o9_ora.GetPhase('Overall').\
113.            Properties.temperature
114.
115.        # Flujos de energia
116.        qh1 = o5_qh1.EnergyFlow
117.        qr1 = o6_qr1.EnergyFlow
118.        qh2 = o7_qh2.EnergyFlow
119.        qr2 = o8_qr2.EnergyFlow
120.
121.        # Asignacion a diccionario
122.        temp['N'] = j
123.        temp['F'] = val_F
124.        temp['x_F'] = val_xf
125.        temp['T_F'] = val_tf
126.        temp['MU'] = val_mu

```

```

127.         temp['T_D1'] = d1_t
128.         temp['T_D2'] = d2_t
129.         temp['QH1'] = qh1
130.         temp['QR1'] = qr1
131.         temp['QH2'] = qh2
132.         temp['QR2'] = qr2
133.         temp['D1'] = d1
134.         temp['R1'] = r1
135.         temp['D2'] = d2
136.         temp['R2'] = r2
137.         temp['x_D1_w'] = compd1[0]
138.         temp['x_D1_tb'] = compd1[1]
139.         temp['x_D1_cy'] = compd1[2]
140.         temp['x_D2_w'] = compd2[0]
141.         temp['x_D2_tb'] = compd2[1]
142.         temp['x_D2_cy'] = compd2[2]
143.         temp['AQ'] = aq
144.         temp['ORA'] = ora
145.         temp['x_AQ_w'] = compaq[0]
146.         temp['x_AQ_tb'] = compaq[1]
147.         temp['x_AQ_cy'] = compaq[2]
148.         temp['x_ORA_w'] = compora[0]
149.         temp['x_ORA_tb'] = compora[1]
150.         temp['x_ORA_cy'] = compora[2]
151.         temp['T_AQ'] = aq_t
152.         temp['T_ORA'] = ora_t
153.
154.         # Insertar en respuesta
155.         res.append(temp)
156.
157.         # Escribir archivo de salida
158.         writer.writerow(temp)
159.
160.         # Aumento iterador de caso
161.         j += 1
162.
163.     except Exception as e:
164.         print type(e)
165.         if error < 2:
166.             error += 1
167.         else:
168.             print 'Fatal error. Too much simulations failed.'
169.             return 0
170.
171.     print j, temp
172.
173.     return res
174.
175.
176. r = multiVarAnalysis('multi_data_9.csv', 25)

```


ANEXO B

Resultados de proceso de simulación de Destilación Extractiva Azeotrópica Heterogénea (Terbutanol/Agua/Ciclohexano).

N	F Kmol/h	x_Tb (%)	T (°K)	MU Kmol/h	D1 Kmol/h	x_D1 (tb)	R1 (tb)	D2 Kmol/h	x_D2 (cy)	R2 (cy)	AQ Kmol/h	x_AQ (w)	ORA Kmol/h	x_ORA (cy)
1	116,745	0,1933	354,873	0,006907	46,591	0,5582	94,383	326,237	0,6154	21,9918	24,234	0,8489	302,010	0,6647
2	85,715	0,8140	350,568	0,006744	116,395	0,6253	16,217	338,843	0,5913	70,5144	46,687	0,9352	292,162	0,6857
3	147,691	0,6539	345,512	0,004021	162,766	0,6072	51,050	346,777	0,5780	97,5279	65,746	0,9641	281,035	0,7132
4	145,577	0,7472	318,319	0,008778	179,507	0,6175	36,800	346,990	0,5758	109,319	70,772	0,9698	276,227	0,7233
5	116,483	0,6051	348,844	0,009713	121,712	0,6016	45,509	339,178	0,5878	70,4456	51,186	0,9443	288,001	0,6922
6	136,955	0,4820	354,040	0,009637	119,953	0,5719	71,859	340,339	0,5850	66,1463	54,265	0,9494	286,083	0,6960
7	68,814	0,8542	329,121	0,003878	98,463	0,6288	10,287	332,219	0,5981	58,4871	39,771	0,9199	292,452	0,6794
8	110,615	0,4965	297,116	0,003764	98,066	0,5901	56,214	333,771	0,5944	54,7898	43,358	0,9291	290,416	0,6831
9	118,731	0,7881	350,125	0,008696	154,195	0,6227	25,147	340,564	0,5803	94,0696	60,646	0,9590	279,927	0,7060
10	126,496	0,3471	351,123	0,008769	81,871	0,5738	81,232	328,467	0,6012	45,3388	36,356	0,9103	292,121	0,6760
11	85,968	0,6274	354,283	0,003647	93,852	0,6073	32,401	330,103	0,5973	53,8594	40,057	0,9214	290,050	0,6797
12	130,546	0,5109	369,435	0,007796	119,724	0,5789	63,900	336,241	0,5852	67,2988	53,119	0,9485	283,130	0,6950
13	53,231	0,9059	293,365	0,009357	81,381	0,6328	5,322	324,998	0,6045	47,7607	33,262	0,9002	291,745	0,6734
14	121,025	0,9207	313,727	0,008009	178,488	0,6366	9,439	339,194	0,5765	112,2936	67,009	0,9673	272,193	0,7184
15	84,583	0,6670	343,276	0,006661	97,593	0,6085	28,351	327,490	0,5960	55,8896	41,285	0,9259	286,212	0,6820
16	120,634	0,6047	359,921	0,008994	125,507	0,6020	47,745	332,800	0,5852	73,5006	52,631	0,9486	280,178	0,6951
17	96,673	0,4401	314,088	0,004699	78,059	0,5840	54,359	323,284	0,6020	41,4018	35,690	0,9103	287,599	0,6767
18	66,915	0,1370	371,345	0,008191	22,531	0,5685	58,176	309,795	0,6283	8,3092	13,583	0,7201	296,220	0,6570
19	136,793	0,1074	340,054	0,009341	32,431	0,5595	121,592	312,386	0,6231	15,1966	17,101	0,7824	295,294	0,6592

20	114,314	0,3658	305,341	0,006751	77,844	0,5766	72,349	324,033	0,6005	42,1365	36,092	0,9110	287,948	0,6757
21	102,404	0,1961	359,933	0,006942	43,079	0,5442	82,767	315,879	0,6157	19,4852	23,243	0,8472	292,643	0,6646
22	68,069	0,7706	365,226	0,005637	86,903	0,6403	15,852	322,215	0,6024	52,4532	34,532	0,9062	287,689	0,6746
23	55,596	0,6276	314,141	0,001946	63,301	0,6039	20,924	318,222	0,6092	34,6533	28,503	0,8807	289,721	0,6691
24	83,719	0,8981	298,830	0,004304	123,244	0,6330	8,608	328,591	0,5886	76,0179	48,060	0,9412	280,535	0,6894
25	111,507	0,1551	354,246	0,008000	37,062	0,5590	94,220	312,210	0,6193	17,2009	19,912	0,8180	292,306	0,6614
26	55,797	0,7013	311,018	0,002608	69,338	0,6117	16,979	318,092	0,6069	38,9967	30,312	0,8900	287,782	0,6708
27	89,225	0,8082	350,860	0,007599	119,903	0,6247	17,205	327,223	0,5887	72,8533	47,815	0,9411	279,415	0,6894
28	54,267	0,8180	329,051	0,002935	76,235	0,6245	10,164	317,804	0,6051	44,0035	31,945	0,8977	285,862	0,6727
29	76,843	0,7616	312,306	0,001510	99,411	0,6185	18,757	322,559	0,5951	58,6813	41,014	0,9267	281,547	0,6818
30	85,684	0,2811	304,034	0,001370	48,252	0,5690	60,742	311,977	0,6152	24,9691	23,148	0,8486	288,830	0,6644
31	102,651	0,5573	357,462	0,002448	101,666	0,5906	44,805	323,359	0,5927	58,7661	43,343	0,9324	280,019	0,6844
32	135,799	0,1539	338,380	0,002164	43,133	0,5597	115,387	310,951	0,6162	20,1646	22,548	0,8444	288,406	0,6643
33	87,844	0,9119	333,801	0,009730	130,241	0,6359	7,810	326,034	0,5862	81,1746	50,129	0,9459	275,915	0,6927
34	149,565	0,7263	322,367	0,009874	179,493	0,6152	40,892	330,946	0,5749	109,2726	70,898	0,9735	260,058	0,7316
35	78,948	0,5830	347,771	0,003838	81,813	0,5991	33,242	316,348	0,6006	45,2400	35,945	0,9138	280,407	0,6775
36	122,451	0,8961	347,675	0,004899	175,952	0,6352	12,589	328,281	0,5760	110,5355	66,191	0,9689	262,095	0,7214
37	108,062	0,9365	333,793	0,004981	166,412	0,6382	6,471	404,054	0,4649	99,0354	65,066	0,9214	338,992	0,5541
38	52,677	0,5546	371,885	0,005254	55,086	0,5902	23,030	306,978	0,6110	29,5093	25,795	0,8703	281,188	0,6670
39	140,443	0,6250	319,900	0,005746	148,866	0,6039	52,510	323,008	0,5785	88,8515	60,448	0,9630	262,566	0,7116
40	93,573	0,6374	300,962	0,004806	103,041	0,6051	34,207	314,770	0,5923	59,5086	43,179	0,9350	271,596	0,6865
41	67,547	0,1791	372,073	0,004761	29,660	0,5214	55,889	299,806	0,6218	11,2739	17,778	0,8021	282,034	0,6609
42	148,030	0,4193	328,729	0,001962	111,037	0,5814	86,195	317,676	0,5859	63,0206	49,113	0,9464	268,565	0,6930
43	138,970	0,3023	295,953	0,006625	78,596	0,5705	95,568	309,892	0,6004	43,4617	34,933	0,9126	274,966	0,6767
44	97,412	0,8686	349,402	0,004483	137,833	0,6318	12,623	318,479	0,5827	85,6414	53,166	0,9534	265,317	0,6994
45	148,002	0,3159	358,882	0,006376	89,644	0,5502	101,596	312,966	0,5919	46,3846	43,132	0,9354	269,840	0,6864

46	147,313	0,3356	341,035	0,004411	90,847	0,5728	98,597	311,794	0,5932	48,9250	41,747	0,9324	270,051	0,6849
47	126,412	0,7665	329,293	0,008440	159,594	0,6198	29,473	319,338	0,5768	97,4797	62,717	0,9668	256,629	0,7177
48	94,522	0,8159	304,265	0,004537	127,423	0,6245	17,610	313,839	0,5851	76,9530	50,389	0,9501	263,454	0,6970
49	120,915	0,5838	325,096	0,001347	121,780	0,5993	49,722	313,755	0,5841	70,9855	51,109	0,9513	262,646	0,6977
50	80,014	0,7460	302,345	0,007353	101,185	0,6167	20,539	308,392	0,5929	59,5027	41,589	0,9331	266,811	0,6852
51	86,918	0,6686	368,370	0,003099	98,556	0,6172	29,401	307,359	0,5938	57,7811	40,639	0,9311	266,723	0,6842
52	111,060	0,5978	314,343	0,003567	114,662	0,6008	45,149	311,201	0,5856	67,3507	48,415	0,9470	262,789	0,6935
53	94,538	0,6839	331,196	0,009309	110,096	0,6104	30,306	308,813	0,5890	64,4312	45,484	0,9420	263,338	0,6907
54	135,346	0,1985	366,942	0,001860	57,199	0,5193	108,920	300,553	0,6047	26,2519	30,616	0,8995	269,939	0,6732
55	58,032	0,6001	355,893	0,001396	63,085	0,6008	23,090	298,741	0,6076	34,9587	27,986	0,8875	270,756	0,6704
56	92,588	0,9240	366,861	0,004934	130,312	0,6768	7,270	307,385	0,5888	86,1985	44,810	0,9409	262,580	0,6893
57	99,669	0,9481	367,018	0,001028	142,107	0,6826	5,558	307,663	0,5865	94,5946	47,711	0,9469	259,953	0,6941
58	100,310	0,9132	322,553	0,003503	147,548	0,6359	8,707	310,271	0,5798	92,1859	55,941	0,9600	254,334	0,7073
59	75,806	0,4720	350,765	0,007715	66,017	0,5870	39,358	296,830	0,6056	36,3887	29,409	0,8956	267,429	0,6721
60	64,724	0,5089	298,535	0,001868	60,827	0,5915	31,354	295,753	0,6072	32,9894	27,834	0,8881	267,921	0,6703
61	67,996	0,7821	331,248	0,003682	90,139	0,6210	15,379	300,578	0,5965	53,2446	37,115	0,9234	263,467	0,6804
62	66,567	0,1416	368,468	0,005067	23,987	0,5300	57,591	286,816	0,6250	8,6172	14,783	0,7671	272,039	0,6590
63	128,336	0,6583	372,876	0,008349	140,818	0,6152	44,155	308,792	0,5789	85,5703	56,433	0,9610	252,367	0,7083
64	124,365	0,8942	336,653	0,007223	177,920	0,6347	13,138	309,393	0,5749	111,7118	66,715	0,9740	242,686	0,7329
65	140,785	0,5191	328,561	0,003554	126,989	0,5921	67,567	305,313	0,5807	73,3683	53,968	0,9583	251,349	0,7053
66	96,380	0,4996	329,487	0,006170	86,097	0,5901	48,165	297,330	0,5950	48,2119	38,006	0,9273	259,330	0,6821
67	111,412	0,8541	356,442	0,008684	147,417	0,6609	16,176	303,278	0,5814	96,0116	52,243	0,9561	251,044	0,7024
68	72,988	0,2970	369,400	0,009198	46,589	0,5290	51,717	288,654	0,6106	20,9095	25,109	0,8763	263,553	0,6687
69	129,473	0,8143	338,418	0,007303	171,228	0,6256	23,909	305,157	0,5747	106,2705	65,774	0,9739	239,390	0,7326
70	96,767	0,9007	349,837	0,001011	133,575	0,6704	9,882	297,942	0,5865	86,8426	46,516	0,9476	251,427	0,6949
71	90,903	0,5319	368,552	0,009050	87,120	0,5843	43,104	293,923	0,5938	47,7461	38,988	0,9314	254,944	0,6846

72	67,971	0,3407	367,408	0,005029	48,440	0,5388	45,146	286,108	0,6096	22,6712	25,446	0,8797	260,667	0,6691
73	56,568	0,8312	367,115	0,001845	76,364	0,6538	9,788	288,025	0,6043	46,9270	29,422	0,8998	258,605	0,6730
74	74,138	0,2168	355,911	0,003801	35,338	0,5587	57,851	281,460	0,6183	16,1603	18,872	0,8288	262,591	0,6627
75	62,488	0,8630	345,779	0,003379	89,857	0,6304	8,776	291,087	0,5964	53,9996	35,993	0,9236	255,096	0,6806
76	86,667	0,8737	328,484	0,002855	123,621	0,6316	11,003	296,369	0,5843	76,3236	47,910	0,9506	248,462	0,6969
77	109,768	0,7643	326,049	0,005420	138,754	0,6195	25,917	298,201	0,5790	84,3745	54,893	0,9617	243,314	0,7096
78	73,969	0,8880	329,190	0,006560	107,699	0,6330	8,504	291,882	0,5899	65,4624	42,092	0,9400	249,796	0,6893
79	148,357	0,2878	329,036	0,009614	79,373	0,5685	106,548	288,879	0,5953	41,8937	37,068	0,9279	251,821	0,6829
80	73,321	0,8126	300,787	0,004181	99,570	0,6239	14,205	290,111	0,5917	59,4964	40,124	0,9357	249,992	0,6866
81	126,053	0,3307	368,804	0,006776	82,365	0,5345	84,954	289,953	0,5910	41,0643	40,966	0,9380	248,994	0,6882
82	143,822	0,3644	339,598	0,004343	95,021	0,5756	91,944	290,554	0,5887	52,1657	42,879	0,9422	247,679	0,6906
83	65,283	0,6386	344,676	0,009687	73,409	0,6053	23,567	284,121	0,6012	41,6473	31,547	0,9108	252,584	0,6763
84	54,267	0,8180	329,051	0,002935	76,235	0,6245	10,164	317,804	0,6051	44,0035	31,945	0,8977	285,862	0,6727
85	76,843	0,7616	312,306	0,001510	99,411	0,6185	18,757	322,559	0,5951	58,6813	41,014	0,9267	281,547	0,6818
86	85,684	0,2811	304,034	0,001370	48,252	0,5690	60,742	311,977	0,6152	24,9691	23,148	0,8486	288,830	0,6644
87	102,651	0,5573	357,462	0,002448	101,666	0,5906	44,805	323,359	0,5927	58,7661	43,343	0,9324	280,019	0,6844
88	135,799	0,1539	338,380	0,002164	43,133	0,5597	115,387	310,951	0,6162	20,1646	22,548	0,8444	288,406	0,6643
89	87,844	0,9119	333,801	0,009730	130,241	0,6359	7,810	326,034	0,5862	81,1746	50,129	0,9459	275,915	0,6927
90	149,565	0,7263	322,367	0,009874	179,493	0,6152	40,892	330,946	0,5749	109,2726	70,898	0,9735	260,058	0,7316
91	78,948	0,5830	347,771	0,003838	81,813	0,5991	33,242	316,348	0,6006	45,2400	35,945	0,9138	280,407	0,6775
92	122,451	0,8961	347,675	0,004899	175,952	0,6352	12,589	328,281	0,5760	110,5355	66,191	0,9689	262,095	0,7214
93	76,054	0,4002	309,421	0,005591	57,150	0,5801	45,512	270,988	0,6053	30,5859	26,752	0,8949	244,241	0,6716
94	129,990	0,2739	320,800	0,005891	67,050	0,5675	94,743	273,321	0,5992	35,3647	31,683	0,9160	241,644	0,6778
95	63,494	0,6587	365,588	0,008622	72,315	0,6147	21,879	272,225	0,6006	41,6895	30,578	0,9122	241,655	0,6765
96	61,027	0,2488	372,745	0,004176	34,652	0,5208	46,214	265,477	0,6156	14,6640	19,642	0,8482	245,840	0,6647
97	98,393	0,8119	335,711	0,004137	130,969	0,6250	18,536	280,903	0,5795	80,3620	51,105	0,9607	229,803	0,7083

98	95,432	0,9085	346,456	0,006289	139,205	0,6365	8,991	280,449	0,5786	86,7872	52,583	0,9632	227,872	0,7121
99	143,482	0,3636	369,952	0,008810	99,759	0,5419	91,932	278,229	0,5822	51,5639	47,893	0,9562	230,346	0,7033
100	116,502	0,8697	362,869	0,009227	155,140	0,6651	15,362	280,006	0,5771	102,3549	53,852	0,9651	226,163	0,7145
101	145,873	0,3604	357,488	0,005127	99,521	0,5472	93,996	276,875	0,5827	51,8370	47,277	0,9556	229,604	0,7026
102	61,386	0,5181	345,030	0,005098	58,263	0,5920	29,132	265,858	0,6062	32,2151	25,890	0,8931	239,974	0,6716
103	134,513	0,8716	349,072	0,009382	187,516	0,6329	11,325	278,466	0,5768	127,2424	64,328	0,9771	218,192	0,7373
104	87,903	0,7684	311,011	0,009488	112,412	0,6195	20,625	274,520	0,5844	67,1874	44,976	0,9519	229,554	0,6988
105	143,469	0,4648	369,524	0,002785	120,570	0,5671	76,814	277,350	0,5770	67,1745	53,987	0,9661	223,365	0,7164
106	129,234	0,5791	346,716	0,008582	127,929	0,5987	53,648	276,420	0,5776	75,3430	52,984	0,9649	223,445	0,7145
107	86,416	0,8806	365,841	0,001462	117,408	0,6670	10,527	270,857	0,5873	75,9365	41,384	0,9455	229,475	0,6932
108	131,219	0,4256	370,277	0,006577	103,574	0,5573	75,429	273,316	0,5810	56,0792	47,850	0,9575	225,472	0,7043
109	110,291	0,5025	329,249	0,006794	97,378	0,5903	55,533	270,228	0,5865	54,7976	42,222	0,9477	228,013	0,6951
110	66,251	0,4741	353,270	0,004786	59,339	0,5727	34,701	262,832	0,6026	31,4867	27,948	0,9051	234,889	0,6742
111	71,555	0,9415	372,363	0,007979	102,522	0,6806	4,334	265,979	0,5935	67,4713	35,193	0,9311	230,793	0,6840
112	120,916	0,5098	350,746	0,008093	107,690	0,5909	58,258	270,146	0,5834	63,1480	44,785	0,9529	225,369	0,6993
113	125,053	0,9498	358,222	0,005752	176,025	0,6838	6,253	272,321	0,5752	119,3130	57,238	0,9721	215,089	0,7283
114	148,266	0,2039	348,413	0,007146	58,077	0,5618	116,877	259,040	0,6044	31,4345	26,459	0,8998	232,588	0,6731
115	95,342	0,8979	338,893	0,002957	137,631	0,6350	9,691	269,930	0,5774	86,1577	52,013	0,9653	217,920	0,7151
116	99,183	0,5571	343,970	0,009517	96,171	0,5962	43,842	264,179	0,5863	55,4927	40,957	0,9468	223,232	0,6938
117	145,800	0,9083	355,408	0,003650	205,764	0,6449	13,225	255,834	0,6010	133,9237	73,189	0,9959	183,994	0,8370
118	106,814	0,8063	367,592	0,001126	135,100	0,6504	20,955	263,493	0,5793	85,6099	49,093	0,9628	214,401	0,7119
119	120,499	0,7585	369,627	0,007622	145,389	0,6394	29,187	264,154	0,5758	91,7705	54,048	0,9700	210,114	0,7239
120	91,185	0,7704	332,688	0,005096	116,257	0,6202	21,108	260,898	0,5810	70,1576	46,090	0,9584	214,813	0,7056
121	67,963	0,3677	306,406	0,001629	47,732	0,5769	42,901	249,023	0,6083	24,9395	22,792	0,8839	226,232	0,6695
122	85,838	0,6213	340,779	0,004476	91,896	0,6034	32,384	257,318	0,5875	53,9346	38,566	0,9435	218,757	0,6910
123	63,651	0,5696	316,167	0,002902	64,682	0,5978	27,101	251,464	0,6003	36,1869	28,400	0,9129	223,067	0,6767

124	94,585	0,2350	347,475	0,009499	43,871	0,5641	72,275	247,563	0,6095	22,3110	21,725	0,8773	225,847	0,6681
125	110,843	0,4942	331,955	0,009568	96,286	0,5894	56,129	257,883	0,5841	55,5289	41,582	0,9503	216,310	0,6963
126	75,044	0,8777	310,991	0,009020	107,492	0,6314	9,612	257,048	0,5846	65,7159	41,750	0,9511	215,307	0,6979
127	67,908	0,2918	314,461	0,004100	39,332	0,5697	47,527	244,600	0,6147	20,0078	18,747	0,8548	225,857	0,6657
128	117,544	0,8569	368,031	0,005614	154,335	0,6626	16,811	259,836	0,5755	101,3056	53,622	0,9706	206,220	0,7251
129	80,988	0,7815	294,484	0,005087	105,114	0,6207	17,900	255,210	0,5841	63,0877	41,910	0,9521	213,305	0,6989
130	99,655	0,2174	367,656	0,007601	46,360	0,5178	78,376	246,229	0,6050	21,0551	24,924	0,8987	221,312	0,6731
131	136,580	0,2466	351,790	0,001292	63,221	0,5669	103,539	249,059	0,5978	33,4192	29,858	0,9200	219,202	0,6792
132	55,047	0,4181	358,920	0,002450	45,636	0,5588	32,048	244,632	0,6084	22,3563	22,697	0,8863	221,938	0,6706
133	54,658	0,2728	337,979	0,004599	30,986	0,5679	39,255	240,343	0,6194	15,3362	15,437	0,8197	224,910	0,6618
134	57,520	0,4851	298,545	0,006242	51,579	0,5890	29,969	245,244	0,6063	27,6539	23,813	0,8927	221,438	0,6715
135	128,691	0,4317	331,643	0,001590	98,589	0,5827	71,617	254,439	0,5839	57,7323	41,396	0,9511	213,044	0,6973

ANEXO C

Código escrito en Matlab para el ajuste de redes neuronales. Archivo "Red.m"

```
1 %Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
2 Extraer=readtable('Datos.xlsx','Sheet','data');
3 %Convertir la tabla a Matriz Numérica
4 Datos = table2array(Extraer);
5 %Parámetro de Entrada
6 A=Datos(1,:);
7 A_Norm = normalize(A,'range');
8 %terbutanol
9 tb=Datos(2,:);
10 tb_Norm=normalize(tb,'range');
11
12 %Temperatura
13 T=Datos(3,:);
14 T_Norm=normalize(T,'range');
15 %cyclohexano
16 cy=Datos(4,:);
17 cy_Norm=normalize(cy,'range');
18
19 %-----ENTRADAS NORMALIZADAS -----
20 entrada_norm=[A_Norm;tb_Norm;T_Norm;cy_Norm];
21
22 %Parámetro de Salida
23 salidas=Datos(5:14,:);
24
25 %-----DESTILADO C1-----
26 dest_norm =normalize(salidas(1,1:end),'range');
27     dest_max=max(salidas(1,:))
28     dest_min=min(salidas(1,:))
29 xtb_norm =normalize(salidas(2,1:end),'range');
30     xtb_max=max(salidas(2,:))
31     xtb_min=min(salidas(2,:))
32 R_norm =normalize(salidas(3,1:end),'range');
33     R_max=max(salidas(3,:))
34     R_min=min(salidas(3,:))
35 %-----DESTILADO C2-----
36 dest2_norm =normalize(salidas(4,1:end),'range');
37     dest2_max=max(salidas(4,:))
38     dest2_min=min(salidas(4,:))
39 xcy_norm=normalize(salidas(5,1:end),'range');
40     xcy_max=max(salidas(5,:))
41     xcy_min=min(salidas(5,:))
42 R2_norm =normalize(salidas(6,1:end),'range');
43     R2_max=max(salidas(6,:))
44     R2_min=min(salidas(6,:))
45
46 %-----FASE ACUOSA -----
47
48 AQ_norm=normalize(salidas(7,1:end),'range');
49     AQ_max=max(salidas(7,:))
50     AQ_min=min(salidas(7,:))
51 xAQw_norm=normalize(salidas(8,1:end),'range');
52     xAQw_max=max(salidas(8,:))
53     xAQw_min=min(salidas(8,:))
54 %-----FASE ORGANICA -----
55
56 OR_norm=normalize(salidas(9,1:end),'range');
57     OR_max=max(salidas(9,:))
58     OR_min=min(salidas(9,:))
59 xORcy_norm=normalize(salidas(10,1:end),'range');
60     xORcy_max=max(salidas(10,:))
61     xORcy_min=min(salidas(10,:))
62
63 %-----SALIDAS NORMALIZADAS -----
```

```

64 sal_norm=[dest_norm;xtb_norm;R_norm;dest2_norm;
65     xcy_norm;R2_norm;AQ_norm;xAQw_norm;OR_norm;xORcy_norm];
66
67 %-----Red Neuronal-----
68 % Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
69 % Script generated by Neural Fitting app
70 % Created 03-Jun-2020 16:12:33
71 %
72 % This script assumes these variables are defined:
73 %
74 %     entrada_norm - input data.
75 %     sal_norm - target data.
76
77 x = entrada_norm;
78 t = sal_norm;
79
80 % Choose a Training Function
81 % For a list of all training functions type: help nntrain
82 % 'trainlm' is usually fastest.
83 % 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
84 % 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
85 trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian regularization backpropagation.
86
87 % Create a Fitting Network
88 hiddenLayerSize = 25;
89 net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
90
91 % Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
92 % For a list of all processing functions type: help nnprocess
93 net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
94 net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
95
96 % Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
97 % For a list of all data division functions type: help nndivision
98 net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
99 net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
100 net.divideParam.trainRatio = 70/100;
101 net.divideParam.valRatio = 15/100;
102 net.divideParam.testRatio = 15/100;
103
104 % Choose a Performance Function
105 % For a list of all performance functions type: help nnperformance
106 net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error
107
108 % Choose Plot Functions
109 % For a list of all plot functions type: help nnplot
110 net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
111     'plotregression', 'plotfit'};
112
113 % Train the Network
114 [net,tr] = train(net,x,t);
115
116 % Test the Network
117 y = net(x);
118 e = gsubtract(t,y);
119 performance = perform(net,t,y)
120
121 % Recalculate Training, Validation and Test Performance
122 trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
123 valTargets = t .* tr.valMask{1};
124 testTargets = t .* tr.testMask{1};
125 trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
126 valPerformance = perform(net,valTargets,y)
127 testPerformance = perform(net,testTargets,y)
128
129 % View the Network
130 view(net)
131

```



```

132 % Plots
133 % Uncomment these lines to enable various plots.
134 %figure, plotperform(tr)
135 %figure, plottrainstate(tr)
136 %figure, ploterrhist(e)
137 %figure, plotregression(t,y)
138 %figure, plotfit(net,x,t)
139
140 % Deployment
141 % Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
142 % See the help for each generation function for more information.
143 if (false)
144     % Generate MATLAB function for neural network for application
145     % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
146     % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
147     % network performs.
148     genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
149     y = myNeuralNetworkFunction(x);
150 end
151 if (false)
152     % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
153     % generation with MATLAB Coder tools.
154     genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
155     y = myNeuralNetworkFunction(x);
156 end
157 if (false)
158     % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
159     % Simulink Coder tools.
160     gensim(net);
161 end
162
163 %-----
164
165 PropPred = net(entrada_norm(1:end,:))
166 Prop_Reales= sal_norm'
167
168 %VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR
169
170 %-----DESTILADO C1-----
171
172 dest_pred = PropPred(1,:).*(dest_max-dest_min)+dest_min;
173
174 xtb_pred = PropPred(2,:).*(xtb_max-xtb_min)+xtb_min;
175 R1_pred = PropPred(3,:).*(R_max-R_min)+R_min;
176
177 %xtb_predecidos= sal_norm(2,:).*(xtb_max-xyb_min)+xtb_min;
178
179 %-----DESTILACION C2-----
180 dest2_pred = PropPred(4,:).*(dest2_max-dest2_min)+dest2_min;
181
182 xcy_pred = PropPred(5,:).*(xcy_max-xcy_min)+xcy_min;
183
184 R2_pred = PropPred(6,:).*(R2_max-R2_min)+R2_min;
185
186 %-----FASE ACUOSA -----
187
188 AQ_pred = PropPred(7,:).*(AQ_max-AQ_min)+AQ_min
189
190 xAQw_pred = PropPred(8,:).*(xAQw_max-xAQw_min)+xAQw_min;
191
192 %-----FASE ORGANICA -----
193 OR_pred = PropPred(9,:).*(OR_max-OR_min)+OR_min;
194 xORcy_pred = PropPred(10,:).*(xORcy_max-xORcy_min)+xORcy_min;
195
196
197 %-----VALORES REALES PRODUCTOS-----
198
199 Valor_Real=[dest_pred;xtb_pred;R1_pred;dest2_pred;

```

```

200     xcy_pred;R2_pred;AQ_pred;xAQw_pred;OR_pred;xORcy_pred]';
201
202 Valor_DWSIM=salidas'
203

```

Código de validación de red neuronal.

```

1  %Cargar Variables de red
2  %load('70 BR.mat')
3  %Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
4  Extraer=readtable('validacion_red.xlsx','Sheet','data');
5  %Convertir la tabla a Matriz Numérica
6  Datosv = table2array(Extraer);
7  %Parámetro de Entrada
8  Av=Datosv(1,:);
9  A_Normv=normalize(Av,'range');
10 %terbutanol
11 tbv=Datosv(2,:);
12 tb_Normv=normalize(tbv,'range');
13
14 %Temperatura
15 Tv=Datosv(3,:);
16 T_Normv=normalize(Tv,'range');
17 %ciclohexano
18 cyv=Datosv(4,:);
19 cy_Normv=normalize(cyv,'range');
20
21 %-----ENTRADAS NORMALIZADAS -----
22 entrada_normv=[A_Normv;tb_Normv;T_Normv;cy_Normv];
23
24 %-----
25
26 PropPredv = net(entrada_normv(1:end,:))
27
28
29 %VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR
30
31 %-----DESTILADO C1-----
32
33 dest_predv = PropPredv(1,:).*(dest_max-dest_min)+dest_min;
34
35 xtb_predv = PropPredv(2,:).*(xtb_max-xtb_min)+xtb_min;
36 R1_predv = PropPredv(3,:).*(R_max-R_min)+R_min;
37
38 %xtb_predecidos= sal_norm(2,:).*(xtb_max-xyb_min)+xtb_min;
39
40 %-----DESTILACION C2-----
41 dest2_predv = PropPredv(4,:).*(dest2_max-dest2_min)+dest2_min;
42
43 xcy_predv = PropPredv(5,:).*(xcy_max-xcy_min)+xcy_min;
44
45 R2_predv = PropPredv(6,:).*(R2_max-R2_min)+R2_min;
46
47 %-----FASE ACUOSA -----
48
49 AQ_predv = PropPredv(7,:).*(AQ_max-AQ_min)+AQ_min
50
51 xAQw_predv = PropPredv(8,:).*(xAQw_max-xAQw_min)+xAQw_min;
52
53 %-----FASE ORGANICA -----
54 OR_predv = PropPredv(9,:).*(OR_max-OR_min)+OR_min;
55 xORcy_predv = PropPredv(10,:).*(xORcy_max-xORcy_min)+xORcy_min;
56
57
58 %-----VALORES REALES PRODUCTOS-----

```

```

59
60 Valor_Realv=[dest_predv;xtb_predv;R1_predv;dest2_predv;
61 xcy_predv;R2_predv;AQ_predv;xAQw_predv;OR_predv;xORcy_predv]';
62
63 %Parámetro de Salida
64 salidasv=Datosv(5:14,:);
65
66 Valor_DWSIMv=salidasv';
67
68 %Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la red
69 neuronal
70 Real= salidasv;
71 Prediccion= Valor_Realv';
72
73 % _____ DESTILADO EN COLUMNA 1 _____
74 %% Flujo molar de Destilado
75 figure;
76 plot(Real(1,:), 'o')
77 hold on
78 plot(Prediccion(1,:));grid;legend('Real','Predicción')
79 xlabel('Experimentaciones')
80 ylabel('Flujo molar de (D1) (kmol/h)')
81 title('Destilado de la columna C1')
82
83 %Porcentaje del Terbutanol en Destilado
84 figure;
85 plot(Real(2,:), 'o')
86 hold on
87 plot(Prediccion(2,:));grid;legend('Real','Predicción')
88 xlabel('Experimentaciones')
89 ylabel('Porcentaje del Terbutanol')
90 title('Destilado de la columna C1')
91
92 %Flujo Molar del Residuo
93 figure;
94 plot(Real(3,:), 'o')
95 hold on
96 plot(Prediccion(3,:));grid;legend('Real','Predicción')
97 xlabel('Experimentaciones')
98 ylabel('Flujo Molar del Residuo (B1) ')
99 title('Destilado de la columna C1')
100
101
102 % _____ DESTILADO D2 _____
103 %% Flujo molar de Destilado 2
104 figure;
105 plot(Real(4,:), 'o')
106 hold on
107 plot(Prediccion(4,:));grid;legend('Real','Predicción')
108 xlabel('Experimentaciones')
109 ylabel('Flujo molar de Destilado 2 (kmol/h)')
110 title('Destilado de la columna C2')
111
112 %Fraccion Molar de ciclohexano en el Decantad
113 figure;
114 plot(Real(5,:), 'o')
115 hold on
116 plot(Prediccion(5,:));grid;legend('Real','Predicción')
117 xlabel('Experimentaciones')
118 ylabel('Fraccion Molar de ciclohexano (kmol/h)')
119 title('Destilado de la columna C2')
120
121 %Flujo Molar del Residuo 2
122 figure;
123 plot(Real(6,:), 'o')
124 hold on
125 plot(Prediccion(6,:));grid;legend('Real','Predicción')
126 xlabel('Experimentaciones')

```

```

127     ylabel('Flujo Molar del Residuo (B2) (kmol/h)')
128     title('Destilado de la columna C2')
129
130     % _____ FASE ACUOSA _____
131     %% Flujo molar de la Fase Acuosa
132     figure;
133     plot(Real(7,:), 'o')
134     hold on
135     plot(Prediccion(7,:));grid;legend('Real','Predicción')
136     xlabel('Experimentaciones')
137     ylabel('Flujo molar de la Fase Acuosa (kmol/h)')
138     title('Procedente del Decantador (AQ)')
139
140     %porcentaje de agua en la Fase Acuosa
141     figure;
142     plot(Real(8,:), 'o')
143     hold on
144     plot(Prediccion(8,:));grid;legend('Real','Predicción')
145     xlabel('Experimentaciones')
146     ylabel('porcentaje de agua en la Fase Acuosa')
147     title('Procedente del Decantador (AQ)')
148
149     %Flujo molar de la Fase Organica
150     figure;
151     plot(Real(9,:), 'o')
152     hold on
153     plot(Prediccion(9,:));grid;legend('Real','Predicción')
154     xlabel('Experimentaciones')
155     ylabel('Flujo molar de la Fase Acuosa(kmol/h)')
156     title('Procedente del Decantador (OR)')
157
158     %Porcentaje de cyclohexano en la Fase Organica
159     figure;
160     plot(Real(10,:), 'o')
161     hold on
162     plot(Prediccion(10,:));grid;legend('Real','Predicción')
163     xlabel('Experimentaciones')
164     ylabel('Porcentaje de cyclohexano')
165     title('Procedente del Decantador (OR)')
166

```

ANEXO D. Resultados obtenidos de DWSIM para todas las corrientes.

Resultados de la corriente de alimentación de la columna C1 (F).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	303.15	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	4606.84	kg/h
Molar Flow	100	kmol/h
Volumetric Flow	5.26513	m ³ /h
Mixture Density	874.972	kg/m ³
Mixture Molar Weight	46.0684	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-913.942	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-2.36648	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-42103.9	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-109.02	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.158214	W/[m.K]
Mixture Molar Fraction		
Water	0.5	
2-methyl-2-propanol	0.5	
Cyclohexane	0	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de destilado de la columna C1 (D1).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	352.409	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	4580.88	kg/h
Molar Flow	89.5581	kmol/h
Volumetric Flow	5.67489	m ³ /h
Mixture Density	807.218	kg/m ³
Mixture Molar Weight	51.1498	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-657.982	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-1.60956	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-33655.6	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-82.3288	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.133652	W/[m.K]
Water	0.40946	
2-methyl-2-propanol	0.590395	
Cyclohexane	0.000146	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de fondo de la columna C1 (B1).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	370.772	K
Pressure	1.0408	atm
Mass Flow	910.064	kg/h
Molar Flow	50.2035	kmol/h
Volumetric Flow	0.948783	m ³ /h
Mixture Density	959.191	kg/m ³
Mixture Molar Weight	18.1275	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-2226.5	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-5.88978	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-40360.8	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-106.767	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.67015	W/[m.K]
Water	0.998	
2-methyl-2-propanol	0.002	
Cyclohexane	3.94E-12	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de destilado de la columna C2 (D2).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	333.975	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	22786.7	kg/h
Molar Flow	318.056	kmol/h
Volumetric Flow	29.5942	m ³ /h
Mixture Density	769.972	kg/m ³
Mixture Molar Weight	71.6437	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-433.551	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-0.99061	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-31061.2	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-70.9707	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.119686	W/[m.K]
Water	0.150812	
2-methyl-2-propanol	0.253085	
Cyclohexane	0.596103	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de fondo de la columna C2 (B2).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	360.267	K
Pressure	1.204	atm
Mass Flow	3700.45	kg/h
Molar Flow	49.9105	kmol/h
Volumetric Flow	5.19621	m ³ /h
Mixture Density	712.144	kg/m ³
Mixture Molar Weight	74.1417	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-386.912	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-1.06181	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-28686.3	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-78.7245	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.10583	W/[m.K]
Water	1.19E-18	
2-methyl-2-propanol	0.998	
Cyclohexane	0.002	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de realimentacion de ciclohexano (MU).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	353.957	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	0.336638	kg/h
Molar Flow	0.004	kmol/h
Volumetric Flow	0.000467	m ³ /h
Mixture Density	720.296	kg/m ³
Mixture Molar Weight	84.1595	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-279.074	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-0.76558	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-23486.7	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-64.4305	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.109646	W/[m.K]
2-methyl-2-propanol	0	
Cyclohexane	1	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de acuosos del decantador C3 (AQ).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	347.422	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	882.918	kg/h
Molar Flow	39.686	kmol/h
Volumetric Flow	0.928683	m ³ /h
Mixture Density	950.72	kg/m ³
Mixture Molar Weight	22.2476	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-1841.77	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-4.88819	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-40975	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-108.751	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.425041	W/[m.K]
Water	0.924625	
2-methyl-2-propanol	0.075047	
Cyclohexane	0.000328	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Resultados de la corriente de orgánicos del decantador C3 (OR).

Propiedad	Valor	Unidad
Temperature	337.989	K
Pressure	1	atm
Mass Flow	21904.1	kg/h
Molar Flow	278.374	kmol/h
Volumetric Flow	29.4104	m ³ /h
Mixture Density	744.775	kg/m ³
Mixture Molar Weight	78.6859	kg/kmol
Mixture Specific Enthalpy	-372.076	kJ/kg
Mixture Specific Entropy	-0.89385	kJ/[kg.K]
Mixture Molar Enthalpy	-29277.2	kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	-70.3335	kJ/[kmol.K]
Mixture Thermal Conductivity	0.114394	W/[m.K]
Water	0.040493	
2-methyl-2-propanol	0.278462	
Cyclohexane	0.681045	

Realizado por: OLEAS D., 2020.

ANEXO E. Resultados de entrenamiento de RNA.

Tabla E-1. Resultados del error en la predicción de las salidas entrenamiento, parte 1.

D1_r	D1_p	error	x_D1_tb_r	x_D1_tb_p	error	R1_p	R1_p	error	D2_r	D2_p	error	x_D2_cy_p	x_D2_cy_r	error
46.59135	46.55152	0.09%	0.5582	0.5575	0.12%	94.38311	93.97717	0.43%	326.2374	326.3851	0.05%	0.615376	0.615101	0.04%
116.3946	116.6908	0.25%	0.6253	0.6242	0.18%	16.21703	15.75487	2.85%	338.8427	339.0479	0.06%	0.591265	0.592085	0.14%
162.7655	162.51	0.16%	0.6072	0.6079	0.11%	51.05009	51.15963	0.21%	346.7766	347.2259	0.13%	0.578013	0.578053	0.01%
179.5068	179.0397	0.26%	0.6175	0.6181	0.09%	36.79988	37.52098	1.96%	346.9896	347.3732	0.11%	0.575817	0.57522	0.10%
121.7122	121.6917	0.02%	0.6016	0.6024	0.12%	45.50911	45.47616	0.07%	339.1781	339.0556	0.04%	0.587757	0.587917	0.03%
119.9534	120.4686	0.43%	0.5719	0.5707	0.21%	71.8588	71.39216	0.65%	340.3385	340.1375	0.06%	0.58504	0.585902	0.15%
98.46347	98.73209	0.27%	0.6288	0.6289	0.00%	10.28657	10.25906	0.27%	332.2189	332.1999	0.01%	0.598078	0.597812	0.04%
98.06601	96.01961	2.09%	0.5901	0.6108	3.52%	56.21362	55.37683	1.49%	333.7709	360.6438	8.05%	0.59436	0.597512	0.53%
154.1949	154.1647	0.02%	0.6227	0.6223	0.05%	25.14726	24.83203	1.25%	340.564	340.7523	0.06%	0.580327	0.58062	0.05%
81.87073	80.72661	1.40%	0.5738	0.5768	0.51%	81.23177	82.83613	1.98%	328.4674	329.1447	0.21%	0.601174	0.600062	0.18%
93.8516	94.92337	1.14%	0.6073	0.6045	0.46%	32.40068	32.17923	0.68%	330.1029	329.9398	0.05%	0.597298	0.596268	0.17%
119.7237	118.9625	0.64%	0.5789	0.5778	0.20%	63.90033	64.11909	0.34%	336.2409	335.9791	0.08%	0.585228	0.584881	0.06%
81.38072	80.30369	1.32%	0.6328	0.6554	3.57%	5.322118	5.349918	0.52%	324.9983	415.2125	27.76%	0.604514	0.619362	2.46%
178.488	178.3653	0.07%	0.6366	0.6375	0.14%	9.438936	10.26295	8.73%	339.1942	339.0402	0.05%	0.57654	0.576729	0.03%
97.59253	97.92313	0.34%	0.6085	0.6093	0.13%	28.35071	28.35575	0.02%	327.4901	327.6479	0.05%	0.59602	0.595188	0.14%
125.5072	125.5371	0.02%	0.6020	0.6013	0.13%	47.7449	47.2933	0.95%	332.8004	332.8746	0.02%	0.585242	0.585018	0.04%
78.05868	77.67846	0.49%	0.5840	0.5839	0.01%	54.35898	54.62412	0.49%	323.2844	322.8894	0.12%	0.601989	0.60235	0.06%
22.53058	22.2804	1.11%	0.5685	0.5672	0.22%	58.17597	57.5992	0.99%	309.7946	309.5892	0.07%	0.628275	0.62873	0.07%
32.43089	32.38732	0.13%	0.5595	0.5606	0.20%	121.5919	121.601	0.01%	312.3865	312.5926	0.07%	0.623144	0.623374	0.04%
77.84357	77.57727	0.34%	0.5766	0.5759	0.11%	72.34927	72.90725	0.77%	324.033	323.9596	0.02%	0.600509	0.600436	0.01%
43.07943	43.49104	0.96%	0.5442	0.5458	0.31%	82.76693	82.27779	0.59%	315.8788	315.8213	0.02%	0.615691	0.616237	0.09%
86.90313	87.07657	0.20%	0.6403	0.6414	0.17%	15.85179	16.13534	1.79%	322.2153	322.3644	0.05%	0.602365	0.601905	0.08%
63.30138	63.01371	0.45%	0.6039	0.6030	0.14%	20.92396	20.82964	0.45%	318.2224	318.5548	0.10%	0.609185	0.609263	0.01%
123.2439	123.4343	0.15%	0.6330	0.6328	0.03%	8.608147	9.053998	5.18%	328.5911	328.4988	0.03%	0.588575	0.589419	0.14%

37.06194	37.26646	0.55%	0.5590	0.5565	0.44%	94.21951	93.65235	0.60%	312.2104	311.7221	0.16%	0.61926	0.620083	0.13%
69.3379	68.75371	0.84%	0.6117	0.6126	0.16%	16.97889	17.28121	1.78%	318.0916	317.8732	0.07%	0.606903	0.606495	0.07%
119.9035	119.0367	0.72%	0.6247	0.6266	0.30%	17.20536	16.85113	2.06%	327.2232	326.6295	0.18%	0.588658	0.590227	0.27%
76.235	76.62454	0.51%	0.6245	0.6243	0.03%	10.1637	10.42048	2.53%	317.8036	317.8965	0.03%	0.605142	0.60476	0.06%
99.41091	99.12344	0.29%	0.6185	0.6183	0.03%	18.75722	18.41239	1.84%	322.5595	322.5522	0.00%	0.595148	0.595262	0.02%
48.25175	47.9969	0.53%	0.5690	0.5695	0.09%	60.74161	60.59393	0.24%	311.9766	312.1804	0.07%	0.615168	0.615692	0.09%
101.6656	101.8581	0.19%	0.5906	0.5910	0.07%	44.80521	44.67904	0.28%	323.3594	323.3371	0.01%	0.592691	0.592212	0.08%
43.1335	43.2591	0.29%	0.5597	0.5596	0.00%	115.3874	115.5406	0.13%	310.9512	310.8203	0.04%	0.616184	0.616337	0.02%
130.2408	131.1677	0.71%	0.6359	0.6348	0.18%	7.810078	8.367741	7.14%	326.0344	325.9647	0.02%	0.586201	0.587457	0.21%
179.4926	179.3022	0.11%	0.6152	0.6147	0.09%	40.89212	40.55598	0.82%	330.9456	330.4962	0.14%	0.574879	0.574443	0.08%
81.81266	81.77134	0.05%	0.5991	0.5987	0.07%	33.24223	33.35494	0.34%	316.3481	316.3259	0.01%	0.60058	0.60037	0.04%
175.9523	174.9476	0.57%	0.6352	0.6349	0.05%	12.58866	13.41918	6.60%	328.2808	328.3723	0.03%	0.575994	0.575775	0.04%
166.4119	158.8726	4.53%	0.6382	0.6563	2.84%	6.471255	7.88036	21.77%	404.0537	323.8328	19.85%	0.464885	0.578889	24.52%
55.08603	55.87939	1.44%	0.5902	0.5892	0.17%	23.03028	22.47426	2.41%	306.9777	306.9436	0.01%	0.61095	0.611993	0.17%
148.8661	147.6164	0.84%	0.6039	0.6161	2.03%	52.51042	52.62183	0.21%	323.0076	391.5969	21.23%	0.578495	0.58698	1.47%
103.041	103.2339	0.19%	0.6051	0.6058	0.11%	34.20696	34.04311	0.48%	314.7702	315.1328	0.12%	0.592326	0.590589	0.29%
29.65988	29.94708	0.97%	0.5214	0.5241	0.51%	55.88939	56.03745	0.26%	299.8064	299.8807	0.02%	0.621794	0.622027	0.04%
111.0374	111.7951	0.68%	0.5814	0.5814	0.01%	86.19512	85.85995	0.39%	317.6758	317.5525	0.04%	0.585876	0.587252	0.23%
78.5957	78.43871	0.20%	0.5705	0.5708	0.04%	95.56815	95.15589	0.43%	309.8923	309.8833	0.00%	0.600449	0.599974	0.08%
137.8335	137.3349	0.36%	0.6318	0.6328	0.16%	12.6235	13.19336	4.51%	318.4789	318.0434	0.14%	0.582654	0.582738	0.01%
89.64396	89.92647	0.32%	0.5502	0.5488	0.25%	101.5964	101.2532	0.34%	312.9657	312.4498	0.16%	0.591877	0.591795	0.01%
90.84747	90.72928	0.13%	0.5728	0.5725	0.04%	98.5971	97.37485	1.24%	311.7937	266.2053	14.62%	0.593238	0.588019	0.88%
159.5942	160.3011	0.44%	0.6198	0.6200	0.03%	29.47333	29.23746	0.80%	319.3375	319.9615	0.20%	0.576792	0.576836	0.01%
127.4227	127.6692	0.19%	0.6245	0.6252	0.11%	17.61017	16.53053	6.13%	313.8387	292.6084	6.76%	0.585091	0.582582	0.43%
121.7798	121.9831	0.17%	0.5993	0.5984	0.15%	49.72156	49.78181	0.12%	313.7545	313.3459	0.13%	0.584093	0.58392	0.03%
101.1854	101.3619	0.17%	0.6167	0.6170	0.04%	20.53887	20.61436	0.37%	308.3923	308.6702	0.09%	0.59285	0.592257	0.10%
98.55604	98.32927	0.23%	0.6172	0.6173	0.02%	29.40133	29.06199	1.15%	307.3591	307.0324	0.11%	0.593788	0.593259	0.09%
114.6616	114.9627	0.26%	0.6008	0.6000	0.14%	45.14905	44.78552	0.81%	311.2011	311.185	0.01%	0.585617	0.585539	0.01%

110.0964	109.815	0.26%	0.6104	0.6111	0.12%	30.30558	29.94456	1.19%	308.8128	308.8835	0.02%	0.58902	0.589097	0.01%
57.19856	57.40402	0.36%	0.5193	0.5196	0.07%	108.9196	109.5486	0.58%	300.553	300.618	0.02%	0.604656	0.605803	0.19%
63.0847	63.29706	0.34%	0.6008	0.6011	0.05%	23.08954	22.73819	1.52%	298.7409	298.6779	0.02%	0.607597	0.608621	0.17%
130.3123	121.5281	6.74%	0.6768	0.7089	4.76%	7.270349	8.639602	18.83%	307.385	177.5252	42.25%	0.588839	0.576122	2.16%
142.1074	137.1651	3.48%	0.6826	0.7094	3.93%	5.557592	7.968691	43.38%	307.6628	283.6269	7.81%	0.586492	0.586893	0.07%
147.548	147.125	0.29%	0.6359	0.6359	0.00%	8.706545	9.137735	4.95%	310.2715	310.3897	0.04%	0.579787	0.580448	0.11%
66.01727	65.79477	0.34%	0.5870	0.5875	0.08%	39.35792	39.99645	1.62%	296.8303	297.2222	0.13%	0.60558	0.605276	0.05%
60.82668	55.58077	8.62%	0.5915	0.5769	2.47%	31.35422	30.74663	1.94%	295.753	134.0501	54.67%	0.607234	0.588632	3.06%
90.13895	90.04145	0.11%	0.6210	0.6216	0.09%	15.37948	15.24504	0.87%	300.578	300.7428	0.05%	0.596458	0.59596	0.08%
23.98719	24.72725	3.09%	0.5300	0.5308	0.14%	57.59129	58.11942	0.92%	286.8164	287.0871	0.09%	0.625036	0.624751	0.05%
140.8182	133.4318	5.25%	0.6152	0.6699	8.90%	44.15516	42.74051	3.20%	308.7919	371.5024	20.31%	0.578866	0.590587	2.02%
177.9202	178.0578	0.08%	0.6347	0.6349	0.04%	13.13807	13.03868	0.76%	309.3931	308.5937	0.26%	0.574896	0.573576	0.23%
126.9895	126.8781	0.09%	0.5921	0.5921	0.00%	67.56728	68.08576	0.77%	305.3135	305.3484	0.01%	0.580663	0.580729	0.01%
86.09741	81.71254	5.09%	0.5901	0.5942	0.70%	48.16484	48.74679	1.21%	297.3302	175.4867	40.98%	0.594966	0.582237	2.14%
147.417	149.5606	1.45%	0.6609	0.6474	2.04%	16.17558	16.73497	3.46%	303.2776	293.3325	3.28%	0.581443	0.578609	0.49%
46.58867	46.16431	0.91%	0.5290	0.5299	0.17%	51.71681	52.39438	1.31%	288.6536	288.6735	0.01%	0.610605	0.610346	0.04%
171.228	171.9928	0.45%	0.6256	0.6249	0.10%	23.90885	23.64759	1.09%	305.1572	305.1756	0.01%	0.574727	0.57244	0.40%
133.5753	133.7308	0.12%	0.6704	0.6711	0.11%	9.881615	9.644361	2.40%	297.9421	298.0106	0.02%	0.586482	0.586361	0.02%
87.12004	86.38226	0.85%	0.5843	0.5846	0.05%	43.10434	42.98289	0.28%	293.9226	293.8336	0.03%	0.593837	0.592799	0.17%
48.43961	49.19487	1.56%	0.5388	0.5387	0.03%	45.14613	44.40428	1.64%	286.1084	286.2468	0.05%	0.609605	0.609516	0.01%
76.36395	75.61675	0.98%	0.6538	0.6526	0.19%	9.787666	9.597654	1.94%	288.025	287.8048	0.08%	0.604316	0.604375	0.01%
35.33832	33.87958	4.13%	0.5587	0.5569	0.32%	57.85078	58.53463	1.18%	281.4596	281.184	0.10%	0.61833	0.618624	0.05%
89.85733	90.34197	0.54%	0.6304	0.6312	0.13%	8.776364	8.532636	2.78%	291.0866	291.0231	0.02%	0.596436	0.596911	0.08%
123.6208	124.3548	0.59%	0.6316	0.6330	0.22%	11.00304	10.56313	4.00%	296.3695	296.2149	0.05%	0.584269	0.584031	0.04%
138.7542	139.0428	0.21%	0.6195	0.6198	0.05%	25.91725	25.06945	3.27%	298.201	298.511	0.10%	0.579015	0.579392	0.07%
107.6995	107.7023	0.00%	0.6330	0.6333	0.06%	8.503864	8.073916	5.06%	291.8819	291.7707	0.04%	0.589934	0.589672	0.04%
79.37269	80.37286	1.26%	0.5685	0.5683	0.04%	106.5482	106.0575	0.46%	288.879	289.0448	0.06%	0.595332	0.595627	0.05%
99.56982	99.8069	0.24%	0.6239	0.6229	0.15%	14.20517	14.18396	0.15%	290.1114	313.333	8.00%	0.591652	0.594714	0.52%

82.36494	82.17825	0.23%	0.5345	0.5337	0.15%	84.95414	84.3128	0.75%	289.9535	289.8327	0.04%	0.590971	0.591437	0.08%
95.02144	95.67639	0.69%	0.5756	0.5756	0.01%	91.94433	91.27702	0.73%	290.5542	290.5672	0.00%	0.588743	0.588848	0.02%
73.40887	73.718	0.42%	0.6053	0.6055	0.04%	23.56695	23.52511	0.18%	284.1207	283.7412	0.13%	0.601196	0.602029	0.14%
76.235	76.62454	0.51%	0.6245	0.6243	0.03%	10.1637	10.42048	2.53%	317.8036	317.8965	0.03%	0.605142	0.60476	0.06%
99.41091	99.12344	0.29%	0.6185	0.6183	0.03%	18.75722	18.41239	1.84%	322.5595	322.5522	0.00%	0.595148	0.595262	0.02%
48.25175	47.9969	0.53%	0.5690	0.5695	0.09%	60.74161	60.59393	0.24%	311.9766	312.1804	0.07%	0.615168	0.615692	0.09%
101.6656	101.8581	0.19%	0.5906	0.5910	0.07%	44.80521	44.67904	0.28%	323.3594	323.3371	0.01%	0.592691	0.592212	0.08%
43.1335	43.2591	0.29%	0.5597	0.5596	0.00%	115.3874	115.5406	0.13%	310.9512	310.8203	0.04%	0.616184	0.616337	0.02%
130.2408	131.1677	0.71%	0.6359	0.6348	0.18%	7.810078	8.367741	7.14%	326.0344	325.9647	0.02%	0.586201	0.587457	0.21%
179.4926	179.3022	0.11%	0.6152	0.6147	0.09%	40.89212	40.55598	0.82%	330.9456	330.4962	0.14%	0.574879	0.574443	0.08%
81.81266	81.77134	0.05%	0.5991	0.5987	0.07%	33.24223	33.35494	0.34%	316.3481	316.3259	0.01%	0.60058	0.60037	0.04%
175.9523	174.9476	0.57%	0.6352	0.6349	0.05%	12.58866	13.41918	6.60%	328.2808	328.3723	0.03%	0.575994	0.575775	0.04%
57.15043	58.00848	1.50%	0.5801	0.5793	0.14%	45.51225	45.67522	0.36%	270.988	271.0053	0.01%	0.605326	0.605711	0.06%
67.04955	66.79299	0.38%	0.5675	0.5671	0.07%	94.74304	94.40915	0.35%	273.3212	273.1978	0.05%	0.599233	0.598224	0.17%
72.31464	72.3911	0.11%	0.6147	0.6138	0.14%	21.87936	21.53321	1.58%	272.2247	272.1405	0.03%	0.600586	0.600754	0.03%
34.65221	33.63628	2.93%	0.5208	0.5199	0.18%	46.21439	46.37185	0.34%	265.4771	265.444	0.01%	0.615587	0.615204	0.06%
130.9695	131.0199	0.04%	0.6250	0.6232	0.29%	18.53556	17.77201	4.12%	280.9032	280.6177	0.10%	0.579451	0.579553	0.02%
139.205	138.9574	0.18%	0.6365	0.6350	0.23%	8.991055	9.534004	6.04%	280.4488	280.6037	0.06%	0.578602	0.578324	0.05%
99.75922	100.1663	0.41%	0.5419	0.5426	0.14%	91.93222	92.79515	0.94%	278.2293	278.2978	0.02%	0.582237	0.582141	0.02%
155.1404	155.6232	0.31%	0.6651	0.6660	0.13%	15.3619	14.28655	7.00%	280.0064	279.8138	0.07%	0.577141	0.578867	0.30%
99.52093	99.59748	0.08%	0.5472	0.5481	0.16%	93.99623	93.51535	0.51%	276.8751	276.7639	0.04%	0.582668	0.583748	0.19%
58.26339	58.23517	0.05%	0.5920	0.5919	0.02%	29.13243	29.5208	1.33%	265.8585	266.123	0.10%	0.606195	0.604865	0.22%
187.5165	186.7968	0.38%	0.6329	0.6325	0.06%	11.32525	11.69924	3.30%	278.466	279.2297	0.27%	0.57685	0.575942	0.16%
112.4121	112.396	0.01%	0.6195	0.6194	0.02%	20.62488	20.10453	2.52%	274.52	274.6863	0.06%	0.584354	0.583832	0.09%
120.5695	120.7841	0.18%	0.5671	0.5667	0.06%	76.81353	76.75555	0.08%	277.3498	277.4486	0.04%	0.57697	0.576858	0.02%
127.929	128.5765	0.51%	0.5987	0.6004	0.28%	53.64816	53.27324	0.70%	276.4198	276.309	0.04%	0.577581	0.578653	0.19%
117.408	117.0852	0.27%	0.6670	0.6672	0.04%	10.52708	11.62625	10.44%	270.8568	271.1965	0.13%	0.587344	0.586039	0.22%
103.5743	103.444	0.13%	0.5573	0.5579	0.11%	75.42946	75.49416	0.09%	273.3158	273.3756	0.02%	0.581002	0.581305	0.05%

97.37781	97.17206	0.21%	0.5903	0.5905	0.03%	55.53278	55.60785	0.14%	270.2281	269.9406	0.11%	0.586548	0.587078	0.09%
59.33878	59.49113	0.26%	0.5727	0.5744	0.30%	34.70053	34.56947	0.38%	262.8323	262.7023	0.05%	0.602568	0.603217	0.11%
102.5222	102.7036	0.18%	0.6806	0.6808	0.03%	4.334132	5.518796	27.33%	265.9787	266.3042	0.12%	0.593526	0.591645	0.32%
107.6905	107.7685	0.07%	0.5909	0.5903	0.11%	58.25752	58.97793	1.24%	270.1462	270.4378	0.11%	0.583382	0.583413	0.01%
176.0245	177.1647	0.65%	0.6838	0.6842	0.06%	6.252604	5.510796	11.86%	272.321	271.9679	0.13%	0.575248	0.577167	0.33%
58.07712	56.99159	1.87%	0.5618	0.5614	0.07%	116.8774	117.4258	0.47%	259.0405	259.3282	0.11%	0.604357	0.602279	0.34%
137.6307	137.1649	0.34%	0.6350	0.6352	0.03%	9.691135	10.0934	4.15%	269.9303	270.3126	0.14%	0.577379	0.577232	0.03%
96.1708	96.26836	0.10%	0.5962	0.5948	0.24%	43.84183	44.09871	0.59%	264.1791	264.2442	0.02%	0.586286	0.58662	0.06%
205.7636	205.8228	0.03%	0.6449	0.6448	0.01%	13.22524	13.15311	0.55%	255.8337	255.7988	0.01%	0.600971	0.600842	0.02%
135.1002	135.0775	0.02%	0.6504	0.6504	0.00%	20.955	20.554	1.91%	263.4932	263.5723	0.03%	0.579261	0.579954	0.12%
145.3892	139.2047	4.25%	0.6394	0.6849	7.12%	29.18693	28.04341	3.92%	264.1544	317.2676	20.11%	0.575779	0.584164	1.46%
116.2572	116.0999	0.14%	0.6202	0.6190	0.19%	21.10845	20.28576	3.90%	260.8982	261.025	0.05%	0.580983	0.581531	0.09%
47.73221	44.92804	5.87%	0.5769	0.5648	2.10%	42.90145	41.64977	2.92%	249.0228	195.1739	21.62%	0.608257	0.603042	0.86%
91.89592	91.3074	0.64%	0.6034	0.6045	0.18%	32.38441	32.86662	1.49%	257.3181	257.4606	0.06%	0.587491	0.588671	0.20%
64.68177	66.26902	2.45%	0.5978	0.6030	0.87%	27.10073	27.39156	1.07%	251.4636	334.9002	33.18%	0.600343	0.60951	1.53%
43.87072	43.31741	1.26%	0.5641	0.5633	0.15%	72.27543	72.36167	0.12%	247.5627	247.5133	0.02%	0.609523	0.608693	0.14%
96.28604	95.58072	0.73%	0.5894	0.5902	0.14%	56.12887	56.72156	1.06%	257.8826	257.919	0.01%	0.584089	0.585698	0.28%
107.4921	107.5408	0.05%	0.6314	0.6307	0.11%	9.6123	9.397418	2.24%	257.0478	256.7026	0.13%	0.584582	0.585336	0.13%
39.33167	40.37092	2.64%	0.5697	0.5697	0.01%	47.52689	47.66266	0.29%	244.6	244.6284	0.01%	0.614734	0.613763	0.16%
154.3349	143.9269	6.74%	0.6626	0.7225	9.04%	16.81098	16.23793	3.41%	259.8364	255.3961	1.71%	0.575504	0.579358	0.67%
105.1139	105.1386	0.02%	0.6207	0.6204	0.05%	17.89993	17.8178	0.46%	255.2097	255.0814	0.05%	0.58415	0.584905	0.13%
46.35995	47.31687	2.06%	0.5178	0.5181	0.06%	78.37645	78.12751	0.32%	246.2289	246.4806	0.10%	0.605019	0.603662	0.22%
63.22142	62.97594	0.39%	0.5669	0.5661	0.14%	103.5387	103.2213	0.31%	249.059	248.9696	0.04%	0.597809	0.597572	0.04%
45.63613	43.47703	4.73%	0.5588	0.5463	2.24%	32.04785	32.37111	1.01%	244.632	167.8793	31.37%	0.60842	0.600127	1.36%
30.98617	25.59398	17.40%	0.5679	0.5589	1.57%	39.25461	41.23667	5.05%	240.343	74.11235	69.16%	0.619356	0.598666	3.34%
51.57906	50.89093	1.33%	0.5890	0.5892	0.03%	29.96941	29.79999	0.57%	245.2445	244.8462	0.16%	0.606316	0.606549	0.04%
98.58918	98.26884	0.32%	0.5827	0.5841	0.25%	71.61707	72.49758	1.23%	254.4388	254.9033	0.18%	0.583868	0.583967	0.02%
Error promedio		1.06%	Error promedio		0.53%	Error promedio		2.58%	Error promedio		3.41%	Error promedio		0.45%

Tabla E-2. Resultados del error en la predicción de las salidas entrenamiento, parte 2.

R2_r	R2_p	error	AQ_r	AQ_p	error	x_AQ_w_r	x_AQ_w_p	error	ORA_p	ORA_r	error	ORA_r	ORA_p	error
21.99183	22.21182	1.00%	24.23406	24.17172	0.26%	0.848911	0.84931288	0.05%	302.0103	301.9723	0.01%	0.664718	0.662103	0.39%
70.51438	70.27829	0.33%	46.68699	46.75759	0.15%	0.935175	0.9350345	0.02%	292.1624	292.2581	0.03%	0.68571	0.685727	0.00%
97.52794	96.48368	1.07%	65.74583	66.34083	0.91%	0.964065	0.96422816	0.02%	281.0348	280.5959	0.16%	0.713192	0.716419	0.45%
109.3197	108.517	0.73%	70.77178	71.26482	0.70%	0.969759	0.96948966	0.03%	276.2266	276.0799	0.05%	0.72331	0.72601	0.37%
70.44559	70.73783	0.41%	51.18643	51.22021	0.07%	0.944335	0.9442036	0.01%	288.0014	287.7066	0.10%	0.692185	0.690575	0.23%
66.14626	66.91245	1.16%	54.26544	53.87031	0.73%	0.949372	0.94754861	0.19%	286.0827	286.3407	0.09%	0.69598	0.697752	0.25%
58.48707	58.88098	0.67%	39.77114	40.01262	0.61%	0.919928	0.92004546	0.01%	292.4516	292.2411	0.07%	0.679371	0.67956	0.03%
54.78982	53.74663	1.90%	43.35847	42.50325	1.97%	0.929086	0.89801655	3.34%	290.4162	317.9533	9.48%	0.683055	0.685071	0.30%
94.06957	94.32372	0.27%	60.64568	60.4986	0.24%	0.958958	0.95919277	0.02%	279.927	280.2132	0.10%	0.706018	0.706502	0.07%
45.33884	43.39407	4.29%	36.35554	37.51346	3.18%	0.910332	0.9106801	0.04%	292.1206	291.7916	0.11%	0.675958	0.677637	0.25%
53.85941	54.79387	1.73%	40.05699	40.2515	0.49%	0.92144	0.92061549	0.09%	290.0496	289.8162	0.08%	0.679745	0.678886	0.13%
67.2988	66.45976	1.25%	53.11871	52.58454	1.01%	0.948476	0.95080743	0.25%	283.13	283.2225	0.03%	0.694987	0.69289	0.30%
47.76071	48.56644	1.69%	33.26232	31.74373	4.57%	0.900156	0.85545018	4.97%	291.7453	384.1406	31.67%	0.673402	0.651724	3.22%
112.2936	112.5412	0.22%	67.00935	66.99975	0.01%	0.967273	0.96649196	0.08%	272.1929	272.4052	0.08%	0.718438	0.720522	0.29%
55.88961	56.43266	0.97%	41.28517	41.63621	0.85%	0.925889	0.92286428	0.33%	286.2116	286.0166	0.07%	0.681957	0.681439	0.08%
73.50058	73.09086	0.56%	52.63112	52.6128	0.03%	0.948588	0.94977052	0.12%	280.1783	280.2022	0.01%	0.695144	0.693979	0.17%
41.40182	42.40028	2.41%	35.69005	34.88249	2.26%	0.910257	0.91067189	0.05%	287.5991	288.1239	0.18%	0.676654	0.674892	0.26%
8.30922	8.881807	6.89%	13.58252	12.82054	5.61%	0.720145	0.72221335	0.29%	296.2202	296.822	0.20%	0.657049	0.656824	0.03%
15.19656	14.83863	2.36%	17.10149	17.24296	0.83%	0.782354	0.78254781	0.02%	295.2944	295.1404	0.05%	0.659199	0.659366	0.03%
42.13646	41.58663	1.30%	36.09183	36.08442	0.02%	0.910985	0.9098417	0.13%	287.9479	287.89	0.02%	0.675741	0.675506	0.03%
19.48518	19.95973	2.44%	23.24292	23.077	0.71%	0.847152	0.8494984	0.28%	292.6428	292.6373	0.00%	0.664555	0.661888	0.40%
52.45324	52.19785	0.49%	34.53237	34.78504	0.73%	0.906162	0.9076526	0.16%	287.6886	287.3808	0.11%	0.674631	0.674609	0.00%
34.65334	34.3822	0.78%	28.50348	28.62496	0.43%	0.88069	0.88392203	0.37%	289.7209	289.8785	0.05%	0.669075	0.667032	0.31%
76.01794	75.99027	0.04%	48.0605	47.98841	0.15%	0.941166	0.9409987	0.02%	280.5349	280.618	0.03%	0.689367	0.689344	0.00%

17.20095	17.52784	1.90%	19.91244	19.38222	2.66%	0.818019	0.81707757	0.12%	292.3059	292.299	0.00%	0.66141	0.66115	0.04%
38.99672	38.52023	1.22%	30.31175	30.26927	0.14%	0.889976	0.88815955	0.20%	287.7824	287.6166	0.06%	0.670784	0.670868	0.01%
72.85333	72.34971	0.69%	47.81541	47.06092	1.58%	0.941084	0.94088824	0.02%	279.4153	279.5128	0.03%	0.689356	0.688257	0.16%
44.0035	44.55338	1.25%	31.94451	32.09584	0.47%	0.897656	0.89701635	0.07%	285.8621	285.9445	0.03%	0.672723	0.673366	0.10%
58.68134	58.43346	0.42%	41.0136	40.94408	0.17%	0.926689	0.92615192	0.06%	281.5474	281.5056	0.01%	0.6818	0.681422	0.06%
24.96912	24.03581	3.74%	23.14812	23.53505	1.67%	0.84857	0.84952995	0.11%	288.8298	288.5384	0.10%	0.664426	0.663979	0.07%
58.76614	58.79121	0.04%	43.34264	43.39391	0.12%	0.932357	0.93269346	0.04%	280.0192	280.1265	0.04%	0.684386	0.685047	0.10%
20.16455	20.46463	1.49%	22.5477	22.54997	0.01%	0.844411	0.84402174	0.05%	288.4057	288.4524	0.02%	0.664315	0.663681	0.10%
81.17458	81.5003	0.40%	50.12877	50.15532	0.05%	0.945909	0.94540647	0.05%	275.9153	275.8647	0.02%	0.692669	0.694518	0.27%
109.2726	109.885	0.56%	70.8979	70.40764	0.69%	0.973475	0.9731845	0.03%	260.0576	260.4453	0.15%	0.73157	0.730913	0.09%
45.23995	45.49627	0.57%	35.94487	36.03034	0.24%	0.913767	0.91404178	0.03%	280.407	280.2736	0.05%	0.677526	0.676778	0.11%
110.5355	109.794	0.67%	66.19098	65.72266	0.71%	0.968856	0.96917842	0.03%	262.0947	262.5077	0.16%	0.721417	0.723449	0.28%
99.03544	100.1634	1.14%	65.06648	59.05502	9.24%	0.921416	0.94903597	3.00%	338.9922	264.4792	21.98%	0.554085	0.713806	28.83%
29.50926	29.6753	0.56%	25.79482	25.80102	0.02%	0.870283	0.86956886	0.08%	281.1882	280.9434	0.09%	0.666957	0.665286	0.25%
88.85152	87.3125	1.73%	60.44776	60.79796	0.58%	0.963029	0.93953304	2.44%	262.5656	330.6583	25.93%	0.711636	0.692585	2.68%
59.50861	59.28533	0.38%	43.17852	43.6857	1.17%	0.934962	0.93346124	0.16%	271.5965	271.4038	0.07%	0.686454	0.687913	0.21%
11.27388	11.06646	1.84%	17.77754	18.37044	3.34%	0.80208	0.80072795	0.17%	282.0336	281.5771	0.16%	0.660949	0.660315	0.10%
63.02061	63.30158	0.45%	49.11295	48.7613	0.72%	0.946403	0.94644831	0.00%	268.5648	268.5535	0.00%	0.692972	0.694092	0.16%
43.46172	43.67578	0.49%	34.93276	34.99062	0.17%	0.912629	0.91346142	0.09%	274.9662	275.1482	0.07%	0.676695	0.676245	0.07%
85.64144	84.56312	1.26%	53.16641	53.11496	0.10%	0.953371	0.95145913	0.20%	265.317	264.8846	0.16%	0.69937	0.70174	0.34%
46.38458	46.67712	0.63%	43.13208	42.97306	0.37%	0.935376	0.9320112	0.36%	269.84	269.5767	0.10%	0.686447	0.688407	0.29%
48.925	49.98507	2.17%	41.74693	40.59299	2.76%	0.932387	0.94614001	1.48%	270.0511	225.5015	16.50%	0.684906	0.690686	0.84%
97.47971	97.4144	0.07%	62.71739	63.44206	1.16%	0.966831	0.96667886	0.02%	256.6286	256.3686	0.10%	0.717718	0.720125	0.34%
76.953	78.37833	1.85%	50.38902	49.74325	1.28%	0.950087	0.95751785	0.78%	263.4542	242.9576	7.78%	0.696956	0.699481	0.36%
70.98546	72.32021	1.88%	51.10944	50.57735	1.04%	0.951296	0.95021046	0.11%	262.6464	262.8108	0.06%	0.697708	0.697578	0.02%
59.50267	59.3732	0.22%	41.58902	41.81253	0.54%	0.933122	0.93432333	0.13%	266.8107	266.8064	0.00%	0.685224	0.686808	0.23%
57.78113	58.7456	1.67%	40.63947	39.61193	2.53%	0.931051	0.93119339	0.02%	266.7227	267.4841	0.29%	0.684219	0.682328	0.28%
67.35066	67.42004	0.10%	48.41538	48.37464	0.08%	0.946992	0.94700186	0.00%	262.7893	262.9478	0.06%	0.693467	0.694131	0.10%

64.43117	64.43366	0.00%	45.48369	45.60417	0.26%	0.942045	0.94190756	0.01%	263.3384	263.2259	0.04%	0.690723	0.690878	0.02%
26.25195	26.2972	0.17%	30.61572	30.97989	1.19%	0.899497	0.90088317	0.15%	269.9392	269.9001	0.01%	0.67319	0.675369	0.32%
34.9587	34.95369	0.01%	27.9863	27.94067	0.16%	0.887496	0.88749477	0.00%	270.756	270.6111	0.05%	0.670356	0.669153	0.18%
86.19846	83.0688	3.63%	44.81001	38.68962	13.66%	0.940872	0.96396702	2.45%	262.58	138.4164	47.29%	0.689286	0.713351	3.49%
94.5946	91.47559	3.30%	47.71075	45.17798	5.31%	0.946876	0.94265627	0.45%	259.9531	237.9183	8.48%	0.694089	0.703652	1.38%
92.18588	91.80449	0.41%	55.94105	55.82519	0.21%	0.959975	0.9624268	0.26%	254.3339	254.3727	0.02%	0.707269	0.707031	0.03%
36.38872	35.52111	2.38%	29.40873	30.02638	2.10%	0.8956	0.89772463	0.24%	267.4293	267.3498	0.03%	0.67214	0.673108	0.14%
32.98939	31.75195	3.75%	27.83358	23.5523	15.38%	0.888093	0.94999316	6.97%	267.9213	110.3308	58.82%	0.670274	0.692635	3.34%
53.24461	52.47157	1.45%	37.11517	37.43618	0.86%	0.92341	0.9231606	0.03%	263.4665	263.1799	0.11%	0.680441	0.683499	0.45%
8.617152	8.643035	0.30%	14.78262	15.58748	5.44%	0.767087	0.76645058	0.08%	272.0389	271.6446	0.14%	0.658962	0.660737	0.27%
85.57026	82.96342	3.05%	56.43283	50.47135	10.56%	0.961	0.9221001	4.05%	252.3674	320.3652	26.94%	0.708273	0.68155	3.77%
111.7118	113.0639	1.21%	66.71451	66.16624	0.82%	0.973981	0.97210924	0.19%	242.6858	242.8105	0.05%	0.732897	0.729804	0.42%
73.36827	73.56023	0.26%	53.96781	53.64577	0.60%	0.95835	0.95935213	0.10%	251.3492	251.5979	0.10%	0.705296	0.702181	0.44%
48.21194	47.22325	2.05%	38.00601	34.20925	9.99%	0.927288	0.95994535	3.52%	259.3304	141.4931	45.44%	0.682124	0.707495	3.72%
96.01163	95.17251	0.87%	52.24252	55.29274	5.84%	0.956109	0.9672802	1.17%	251.0438	238.0194	5.19%	0.702408	0.709674	1.03%
20.90954	20.43501	2.27%	25.10936	25.74307	2.52%	0.876272	0.87667073	0.05%	263.5534	263.2123	0.13%	0.668746	0.666427	0.35%
106.2705	106.6185	0.33%	65.77438	66.13585	0.55%	0.973919	0.9737585	0.02%	239.3901	239.0065	0.16%	0.7326	0.728991	0.49%
86.84257	86.79129	0.06%	46.51639	47.00683	1.05%	0.947573	0.94641239	0.12%	251.4267	250.9664	0.18%	0.694941	0.695976	0.15%
47.74608	47.56572	0.38%	38.98774	38.88262	0.27%	0.931449	0.93056113	0.10%	254.9439	254.9641	0.01%	0.684617	0.68453	0.01%
22.67123	23.44026	3.39%	25.4459	25.61975	0.68%	0.879663	0.87977773	0.01%	260.6675	260.5623	0.04%	0.669075	0.669891	0.12%
46.92695	46.32362	1.29%	29.42229	28.87203	1.87%	0.899794	0.89966548	0.01%	258.6046	258.8042	0.08%	0.673027	0.672839	0.03%
16.1603	15.45335	4.37%	18.87224	17.82307	5.56%	0.828843	0.82919988	0.04%	262.5912	263.2166	0.24%	0.662729	0.66316	0.06%
53.99957	54.59501	1.10%	35.99348	35.80231	0.53%	0.923582	0.92437628	0.09%	255.0965	255.4164	0.13%	0.680551	0.679954	0.09%
76.32363	76.99462	0.88%	47.91049	47.88308	0.06%	0.950575	0.94847106	0.22%	248.4618	248.346	0.05%	0.69689	0.700271	0.49%
84.37451	83.93998	0.52%	54.89271	55.42656	0.97%	0.961678	0.96102016	0.07%	243.3137	243.0094	0.13%	0.709604	0.709471	0.02%
65.46245	66.16031	1.07%	42.09205	41.71799	0.89%	0.93997	0.94182215	0.20%	249.7964	250.0885	0.12%	0.689304	0.686431	0.42%
41.89373	42.74581	2.03%	37.06797	37.35829	0.78%	0.927873	0.92772705	0.02%	251.8206	251.5331	0.11%	0.682933	0.68248	0.07%
59.49635	59.32694	0.28%	40.12378	40.5833	1.15%	0.93572	0.92814203	0.81%	249.9918	272.7622	9.11%	0.686571	0.683705	0.42%

41.06433	41.29188	0.55%	40.96587	40.82532	0.34%	0.93796	0.93781387	0.02%	248.9944	249.1229	0.05%	0.688164	0.689004	0.12%
52.1657	52.61037	0.85%	42.87908	43.00899	0.30%	0.942187	0.94238379	0.02%	247.6795	247.4122	0.11%	0.690628	0.688782	0.27%
41.64725	42.17384	1.26%	31.54667	31.4078	0.44%	0.910784	0.91004839	0.08%	252.5837	252.6804	0.04%	0.676252	0.676069	0.03%
44.0035	44.55338	1.25%	31.94451	32.09584	0.47%	0.897656	0.89701635	0.07%	285.8621	285.9445	0.03%	0.672723	0.673366	0.10%
58.68134	58.43346	0.42%	41.0136	40.94408	0.17%	0.926689	0.92615192	0.06%	281.5474	281.5056	0.01%	0.6818	0.681422	0.06%
24.96912	24.03581	3.74%	23.14812	23.53505	1.67%	0.84857	0.84952995	0.11%	288.8298	288.5384	0.10%	0.664426	0.663979	0.07%
58.76614	58.79121	0.04%	43.34264	43.39391	0.12%	0.932357	0.93269346	0.04%	280.0192	280.1265	0.04%	0.684386	0.685047	0.10%
20.16455	20.46463	1.49%	22.5477	22.54997	0.01%	0.844411	0.84402174	0.05%	288.4057	288.4524	0.02%	0.664315	0.663681	0.10%
81.17458	81.5003	0.40%	50.12877	50.15532	0.05%	0.945909	0.94540647	0.05%	275.9153	275.8647	0.02%	0.692669	0.694518	0.27%
109.2726	109.885	0.56%	70.8979	70.40764	0.69%	0.973475	0.9731845	0.03%	260.0576	260.4453	0.15%	0.73157	0.730913	0.09%
45.23995	45.49627	0.57%	35.94487	36.03034	0.24%	0.913767	0.91404178	0.03%	280.407	280.2736	0.05%	0.677526	0.676778	0.11%
110.5355	109.794	0.67%	66.19098	65.72266	0.71%	0.968856	0.96917842	0.03%	262.0947	262.5077	0.16%	0.721417	0.723449	0.28%
30.58592	31.0953	1.67%	26.75215	26.60113	0.56%	0.894942	0.89591147	0.11%	244.2415	244.2556	0.01%	0.671591	0.671686	0.01%
35.36468	35.20583	0.45%	31.68317	31.4419	0.76%	0.91603	0.91485219	0.13%	241.6439	241.6122	0.01%	0.677765	0.676624	0.17%
41.68945	42.08914	0.96%	30.57783	30.10073	1.56%	0.912185	0.91257891	0.04%	241.6555	242.0382	0.16%	0.676549	0.678047	0.22%
14.66396	13.86673	5.44%	19.64155	19.63554	0.03%	0.84821	0.84905088	0.10%	245.8397	245.8778	0.02%	0.664731	0.664382	0.05%
80.36199	80.12324	0.30%	51.10458	51.21164	0.21%	0.960718	0.96164143	0.10%	229.8027	229.3953	0.18%	0.708271	0.707427	0.12%
86.78717	86.8905	0.12%	52.58278	52.6056	0.04%	0.963217	0.96519162	0.21%	227.8723	227.9098	0.02%	0.712081	0.709564	0.35%
51.5639	52.05325	0.95%	47.89252	48.0596	0.35%	0.956218	0.95618804	0.00%	230.3456	230.3007	0.02%	0.703261	0.703513	0.04%
102.3549	102.8756	0.51%	53.8525	54.213	0.67%	0.965123	0.96700685	0.20%	226.1631	226.1565	0.00%	0.714535	0.713167	0.19%
51.83701	52.98279	2.21%	47.27668	46.52436	1.59%	0.95555	0.95634362	0.08%	229.6035	230.3066	0.31%	0.702604	0.701289	0.19%
32.21509	31.75803	1.42%	25.88966	26.28583	1.53%	0.893144	0.89494444	0.20%	239.9739	239.78	0.08%	0.671557	0.673365	0.27%
127.2424	125.5221	1.35%	64.32848	64.0567	0.42%	0.977128	0.97851922	0.14%	218.1919	217.9242	0.12%	0.737317	0.737347	0.00%
67.18738	67.05461	0.20%	44.9757	45.22152	0.55%	0.951927	0.95203946	0.01%	229.5538	229.4087	0.06%	0.698814	0.69879	0.00%
67.17448	67.15152	0.03%	53.98717	54.05951	0.13%	0.966113	0.96686916	0.08%	223.3654	223.2609	0.05%	0.716379	0.714388	0.28%
75.34302	76.2214	1.17%	52.98354	52.66776	0.60%	0.964922	0.96402138	0.09%	223.4449	223.6711	0.10%	0.714505	0.71214	0.33%
75.93645	75.37181	0.74%	41.38356	41.64198	0.62%	0.945536	0.94658454	0.11%	229.4747	229.4241	0.02%	0.693221	0.694083	0.12%
56.07923	55.57367	0.90%	47.8503	47.9927	0.30%	0.957533	0.95654521	0.10%	225.472	225.2907	0.08%	0.704267	0.703919	0.05%

54.79759	55.09378	0.54%	42.22184	42.17896	0.10%	0.947669	0.94717512	0.05%	228.0131	227.9106	0.04%	0.695126	0.696583	0.21%
31.48674	31.92677	1.40%	27.94778	27.44466	1.80%	0.905095	0.9035678	0.17%	234.8893	235.184	0.13%	0.674225	0.675107	0.13%
67.47128	67.57209	0.15%	35.1935	35.32529	0.37%	0.931061	0.92875313	0.25%	230.7932	230.7456	0.02%	0.684	0.686609	0.38%
63.14801	62.38001	1.22%	44.78504	45.66304	1.96%	0.952861	0.95574848	0.30%	225.3693	224.8907	0.21%	0.699277	0.700768	0.21%
119.313	120.4991	0.99%	57.23809	58.13751	1.57%	0.972056	0.97036484	0.17%	215.0887	214.8177	0.13%	0.728291	0.728784	0.07%
31.4345	29.98683	4.61%	26.4592	26.59172	0.50%	0.899796	0.90079622	0.11%	232.5884	232.6897	0.04%	0.673074	0.673313	0.04%
86.15767	85.52507	0.73%	52.01311	51.88448	0.25%	0.965333	0.9669209	0.16%	217.9201	218.3129	0.18%	0.715144	0.710704	0.62%
55.49269	55.46534	0.05%	40.95709	41.07881	0.30%	0.946798	0.94775323	0.10%	223.2315	223.1523	0.04%	0.693824	0.693873	0.01%
133.9237	133.9762	0.04%	73.18932	73.14077	0.07%	0.995867	0.99600466	0.01%	183.9938	183.9839	0.01%	0.837017	0.836573	0.05%
85.60989	85.82558	0.25%	49.09317	49.25895	0.34%	0.9628	0.96143147	0.14%	214.4012	214.2744	0.06%	0.711852	0.711585	0.04%
91.77047	89.77825	2.17%	54.04838	49.62575	8.18%	0.970009	0.93907454	3.19%	210.1137	267.0376	27.09%	0.723855	0.693425	4.20%
70.1576	70.29904	0.20%	46.08982	46.08355	0.01%	0.958366	0.95980156	0.15%	214.8134	214.9651	0.07%	0.705598	0.703134	0.35%
24.93947	24.76297	0.71%	22.79202	19.83268	12.98%	0.88393	0.9070864	2.62%	226.2324	175.2284	22.54%	0.669493	0.673794	0.64%
53.93464	52.94998	1.83%	38.56604	38.33339	0.60%	0.94353	0.94211015	0.15%	218.7566	219.135	0.17%	0.691024	0.693124	0.30%
36.1869	35.87336	0.87%	28.39982	30.21252	6.38%	0.912853	0.88181758	3.40%	223.0667	304.4888	36.50%	0.676735	0.667017	1.44%
22.31105	22.02338	1.29%	21.72503	21.29794	1.97%	0.87732	0.8753963	0.22%	225.8472	226.0573	0.09%	0.668126	0.669029	0.14%
55.52889	54.32267	2.17%	41.58178	41.39472	0.45%	0.950274	0.95153449	0.13%	216.3104	216.474	0.08%	0.69634	0.697691	0.19%
65.7159	66.06562	0.53%	41.75026	41.39173	0.86%	0.951122	0.95076598	0.04%	215.3065	215.4503	0.07%	0.697908	0.69628	0.23%
20.00778	21.19954	5.96%	18.74731	18.91001	0.87%	0.854807	0.85323896	0.18%	225.8568	225.7685	0.04%	0.665722	0.666159	0.07%
101.3056	98.47788	2.79%	53.62225	45.73949	14.70%	0.970647	0.94840498	2.29%	206.2198	209.2031	1.45%	0.725112	0.702118	3.17%
63.08771	63.0961	0.01%	41.9098	41.91104	0.00%	0.95211	0.95304769	0.10%	213.3049	213.1437	0.08%	0.698885	0.697502	0.20%
21.0551	21.83289	3.69%	24.92415	25.27711	1.42%	0.898678	0.89560804	0.34%	221.3124	221.3879	0.03%	0.673124	0.676519	0.50%
33.41915	33.74807	0.98%	29.85826	29.39021	1.57%	0.920027	0.91998293	0.00%	219.202	219.6127	0.19%	0.679194	0.680574	0.20%
22.35631	23.13456	3.48%	22.69696	20.44217	9.93%	0.886255	0.92066231	3.88%	221.9375	147.4744	33.55%	0.670599	0.684595	2.09%
15.33621	13.96084	8.97%	15.43721	11.48399	25.61%	0.819712	0.88400358	7.84%	224.9104	62.83418	72.06%	0.66183	0.695045	5.02%
27.65391	27.64722	0.02%	23.8127	23.23601	2.42%	0.892732	0.89126492	0.16%	221.438	221.7526	0.14%	0.671482	0.672126	0.10%
57.7323	56.46321	2.20%	41.39632	42.19135	1.92%	0.95112	0.95196979	0.09%	213.044	212.6798	0.17%	0.697273	0.698693	0.20%
Error promedio		1.36%	Error promedio		1.94%	Error promedio		0.52%	Error promedio		3.83%	Error promedio		0.67%

Tabla E-3. Resultados del error en la predicción de las salidas de la columna C1.

Exp	Flujo molar destilado columna C1 (D1)				Fracción molar terbutanol en D1 (x_D1_tb)				Flujo molar fondo columna C1 (B1)			
	DWSIM	Predicción	Error absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual
1	26.7900	44.6498	-11.256	-66.66%	0.5594	0.5684	-0.00899	-1.61%	105.6191	103.0194	2.59965	2.46%
2	106.6569	108.7898	-2.13286	-2.00%	0.5808	0.5923	-0.01141	-1.96%	84.6340	83.8124	0.82153	0.97%
3	124.1527	123.4004	0.75230	0.61%	0.5883	0.5938	-0.00554	-0.94%	75.7673	75.6571	0.11023	0.15%
4	39.8147	36.1155	3.69921	9.29%	0.5736	0.5624	0.01121	1.95%	40.2852	38.6052	1.67998	4.17%
5	88.0658	84.7674	3.29836	3.75%	0.6034	0.5906	0.01281	2.12%	31.5468	29.5312	2.01556	6.39%
6	50.0302	42.8784	7.15176	14.29%	0.5820	0.5901	-0.00802	-1.38%	35.7396	34.5672	1.17238	3.28%
7	147.3988	143.9597	3.43906	2.33%	0.6335	0.6856	-0.05216	-8.23%	33.4762	31.0096	2.46661	7.37%
8	39.8177	32.9596	6.85807	17.22%	0.5393	0.5354	0.0039	0.72%	48.7902	45.3645	3.42574	7.02%
9	29.7289	23.7306	5.99835	20.18%	0.5621	0.5957	-0.03366	-5.99%	56.0928	53.4589	2.63388	4.70%
10	104.6418	99.7137	4.92807	4.71%	0.6116	0.6159	-0.02898	-0.70%	27.9744	24.6387	3.33567	11.92%
11	58.6624	51.6485	7.01393	11.96%	0.5933	0.6224	-0.0043	-4.91%	28.6028	26.8372	1.76564	6.17%
12	115.5048	118.7918	-3.28704	-2.85%	0.5622	0.5649	-0.00270	-0.48%	79.4756	79.7991	-0.32349	-0.41%
13	85.1075	82.7256	2.38195	2.80%	0.6374	0.6293	0.00819	1.28%	4.4543	4.3500	0.1043	14.39%
14	64.3554	67.0653	-2.70983	-4.21%	0.5641	0.5608	0.00334	0.59%	112.5470	111.6440	0.90300	0.80%
15	89.9873	85.4808	4.50659	5.01%	0.6121	0.6118	0.00028	0.05%	23.1286	21.3441	1.78445	7.72%
16	72.1312	76.3193	-4.18810	-5.81%	0.5938	0.5725	0.02128	3.58%	30.1758	29.0257	1.15014	3.81%
17	94.3763	90.1646	4.21172	4.46%	0.6796	0.7004	-0.02082	-3.06%	4.1618	4.2123	-0.05051	-1.21%
18	79.2062	79.4253	-0.21912	-0.28%	0.5944	0.6066	-0.01223	-2.06%	38.9984	37.5364	1.46197	3.75%
19	75.7339	73.7052	2.02876	2.68%	0.5913	0.5980	-0.00662	-1.12%	40.6944	38.6264	2.068	3.10%
20	65.0720	72.3511	-7.27908	-11.19%	0.5785	0.5650	0.01350	2.33%	57.1481	55.5201	1.628	2.85%
	Error promedio		1.260259	0.31%	Error promedio		0.01722	0.99%	Error promedio		1.5615015	4.46%

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla E-4. Resultados del error en la predicción de las salidas de la columna C2.

Exp	Flujo molar destilado columna C2 (D2)				Fracción molar ciclohexano en D2 (x_D2_cy)				Flujo molar fondo columna C2 (B2)			
	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual
1	238.1973	647.5009	-409.30364	-171.83%	0.6221	0.6635	-0.04143	-6.66%	12.4497	15.8400	-3.39032	-27.23%
2	255.4374	298.4179	-42.98055	-16.83%	0.5790	0.5860	-0.00702	-1.21%	61.0555	61.8324	-0.77683	-1.27%
3	255.9079	290.8809	-34.97303	-13.67%	0.5767	0.5839	-0.00717	-1.24%	73.2014	73.9262	-0.72478	-0.99%
4	240.1112	195.0222	45.08894	18.78%	0.6123	0.6082	0.00413	0.68%	20.0121	18.9503	1.06187	5.31%
5	249.5400	247.7500	1.79000	0.72%	0.5880	0.5881	-0.00015	-0.03%	51.4121	47.6824	3.72977	7.25%
6	241.3001	170.4263	70.87383	29.37%	0.6076	0.6006	0.00700	1.15%	27.2068	24.6612	2.54558	9.36%
7	253.8347	360.0154	-106.1807	-41.83%	0.5747	0.5888	-0.01414	-2.46%	92.6344	92.1068	0.52760	0.57%
8	238.9867	275.0929	-36.10623	-15.11%	0.6101	0.6179	-0.00789	-1.29%	18.6954	17.6209	1.07453	5.75%
9	235.2780	140.6532	94.62478	40.22%	0.6197	0.6093	0.01034	1.67%	14.5147	14.1865	0.32820	2.26%
10	249.9194	219.4954	30.42399	12.17%	0.5818	0.5821	-0.00026	-0.04%	62.6841	63.1430	-0.45891	-0.73%
11	240.9162	229.3801	11.53617	4.79%	0.6028	0.6045	-0.00178	-0.30%	32.8651	29.7607	3.10439	9.45%
12	251.4777	326.8048	-75.32707	-29.95%	0.5754	0.5830	-0.00759	-1.32%	63.9117	64.7474	-0.83572	-1.31%
13	243.5029	280.9101	-37.40716	-15.36%	0.5928	0.6005	-0.00773	-1.30%	51.6871	50.3002	1.38685	2.68%
14	241.8080	279.1806	-37.37254	-15.46%	0.5960	0.6000	-0.00408	-0.68%	33.9326	35.1733	-1.24065	-3.66%
15	244.7758	190.4606	54.31519	22.19%	0.5875	0.5838	0.00373	0.64%	53.2032	50.9595	2.24370	4.22%
16	241.1632	339.7585	-98.59528	-40.88%	0.5954	0.6054	-0.00997	-1.68%	41.0960	39.6967	1.39932	3.41%
17	241.3854	263.6531	-22.26764	-9.22%	0.5929	0.5966	-0.00367	-0.62%	61.9862	60.0348	1.95143	3.15%
18	241.9813	311.6281	-69.64684	-28.78%	0.5905	0.6005	-0.01001	-1.70%	44.9237	43.9567	0.96695	2.15%
19	240.9122	233.0212	7.89098	3.28%	0.5918	0.5934	-0.00168	-0.28%	42.8914	41.5681	1.32327	3.09%
20	238.6664	510.9712	-272.3047	-114.09%	0.5963	0.6267	-0.03040	-5.10%	35.2929	35.0029	0.29001	0.82%
	Error promedio		77.95047	32.23%	Error promedio		0.00901	1.50%	Error promedio		1.46803	1.21%

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla E-5. Resultados del error la predicción de las salidas del decantador C3, parte 1.

Exp	Flujo molar acuoso del decantador C3 (AQ)				Fracción molar agua en AQ (x_AQ_w)			
	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual
1	18.4379	27.9719	-9.534	-51.77%	0.7982	0.6471	0.15109	18.93%
2	46.5552	47.1530	-0.60	-1.28%	0.9608	0.9461	0.01468	1.53%
3	50.9401	49.9925	0.95	1.86%	0.9679	0.9641	0.00379	0.39%
4	19.6126	17.2800	2.33	11.89%	0.8658	0.8843	-0.01858	-2.15%
5	37.1316	36.6996	0.43	1.16%	0.9429	0.9389	0.00397	0.42%
6	22.6223	18.2448	4.38	19.35%	0.8876	0.9050	-0.01736	-1.96%
7	55.3865	52.2482	3.14	5.67%	0.9748	0.9252	0.04964	5.09%
8	20.9173	15.1555	5.76	27.55%	0.8771	0.8204	0.05668	6.46%
9	14.9641	9.0003	5.96	39.85%	0.8176	0.8160	0.00166	0.20%
10	42.6428	36.7731	5.87	13.76%	0.9553	0.9453	0.01002	1.05%
11	25.6651	21.4503	4.21	16.42%	0.9054	0.8837	0.02173	2.40%
12	52.0627	54.3868	-2.32	-4.46%	0.9709	0.9505	0.02037	2.10%
13	33.0913	32.5573	0.53	1.61%	0.9340	0.9227	0.01135	1.21%
14	30.3438	31.6616	-1.32	-4.34%	0.9253	0.9145	0.01085	1.17%
15	36.9885	34.2400	2.75	7.43%	0.9444	0.9580	-0.01354	-1.43%
16	30.7972	36.2518	-5.45	-17.71%	0.9273	0.9031	0.02418	2.61%
17	32.4481	30.0431	2.40	7.41%	0.9328	0.9115	0.02130	2.28%
18	34.3109	34.9320	-0.62	-1.81%	0.9382	0.9048	0.03344	3.56%
19	33.0516	31.6322	1.42	4.29%	0.9348	0.9296	0.00526	0.56%
20	29.6998	36.9791	-7.28	-24.51%	0.9244	0.8501	0.07426	8.03%
	Error promedio		3.59	4.34%	Error promedio		0.02819	2.62%

Realizado por: OLEAS D., 2020.

Tabla E-6. Resultados del error la predicción de las salidas del decantador C3, parte 2.

Exp	Flujo molar orgánicos del decantador C3 (OR)				Fracción molar ciclohexano en OR (x_OR_cy)			
	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual	DWSIM	Predicción	Erro absoluto	Error Porcentual
1	224.3072	619.2343	-394.93	-176.07%	0.6606	0.6058	0.05476	8.29%
2	208.8835	250.8662	-41.98	-20.10%	0.7079	0.6949	0.01306	1.85%
3	204.9704	240.8793	-35.91	-17.52%	0.7200	0.7032	0.01672	2.32%
4	220.5018	177.7530	42.75	19.39%	0.6668	0.6753	-0.00851	-1.28%
5	212.4101	211.0877	1.32	0.62%	0.6907	0.6957	-0.00501	-0.72%
6	218.6842	152.3482	66.34	30.33%	0.6704	0.6809	-0.01047	-1.56%
7	198.4581	307.3488	-108.89	-54.87%	0.7350	0.6892	0.04587	6.24%
8	218.0773	259.9693	-41.89	-19.21%	0.6685	0.6587	0.00988	1.48%
9	220.3202	131.7761	88.54	40.19%	0.6617	0.6819	-0.02013	-3.04%
10	207.2783	182.6964	24.58	11.86%	0.7015	0.7007	0.00082	0.12%
11	215.2588	208.1293	7.13	3.31%	0.6746	0.6777	-0.00312	-0.46%
12	199.4227	272.3158	-72.89	-36.55%	0.7256	0.7024	0.02324	3.20%
13	210.4153	248.8655	-38.45	-18.27%	0.6860	0.6769	0.00909	1.32%
14	211.4696	247.5516	-36.08	-17.06%	0.6814	0.6748	0.00669	0.98%
15	207.7954	156.3293	51.47	24.77%	0.6921	0.6994	-0.00734	-1.06%
16	210.3730	303.4903	-93.12	-44.26%	0.6825	0.6734	0.00907	1.33%
17	208.9427	233.2779	-24.34	-11.65%	0.6849	0.6824	0.00259	0.38%
18	207.6755	276.5828	-68.91	-33.18%	0.6881	0.6803	0.00778	1.13%
19	207.8641	201.2828	6.58	3.17%	0.6858	0.6938	-0.00800	-1.17%
20	208.9760	473.8396	-264.86	-126.74%	0.6811	0.6228	0.05828	8.56%
	Error promedio		75.54800	35.46%	Error promedio		0.01602	1.39%

Realizado por: OLEAS D., 2020.

ANEXO F. Aval del trabajo de integración curricular.



GISAI

GRUPO DE INVESTIGACIÓN EN SEGURIDAD AMBIENTE E INGENIERÍA

Riobamba, 26 de Febrero de 2020

Doctor

Bolivar Flores Mg

**PRESIDENTE DE LA UNIDAD DE INTEGRACIÓN CURRICULAR
DE LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

Presente. -

De mi consideración:

Reciba un atento saludo, con la finalidad de realizar nuevos proyectos de investigación enmarcados en la línea de investigación de Procesos, Tecnológico e Industriales de la carrera de Ingeniería Química y del Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, "GISAI", se ha decidido dar el AVAL para la ejecución del Trabajo de Integración Curricular denominado **"MODELO Y SIMULACION DE LA DESTILACIÓN DEL TERC-BUTANOL PARA LA PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE LOS PRODUCTOS MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES"** que realizará la Srta. DANIELA ESTEFANIA OLEAS HINOJOSA con C.I. 0604838169 y Código estudiantil 983541 , quien se integra a trabajar para el Grupo de Investigación desde 01/02/2020 , 31/06/2020 con un tiempo de dedicación semanal de 20 horas.

Por la favorable atención, anticipo mi agradecimiento.

Atentamente,
"Saber para Ser"


Ing. Ramiro Cepeda Godoy

COORDINADOR SUBROGANTE DEL GRUPO DE INVESTIGACIÓN "GISAI"



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE
CHIMBORAZO**

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS PARA EL
APRENDIZAJE Y LA INVESTIGACIÓN**



UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 13 / 10 / 2020

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Daniela Estefanía Oleas Hinojosa
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniera Química
f. Analista de Biblioteca responsable: Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.

**LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**

Firmado digitalmente por
LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Nombre de reconocimiento
(DN): c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2020.10.13 13:03:29
-05'00'



0196-DBRAI-UPT-2020