



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

“SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO FÓRMICO MEDIANTE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA EN DWSIM”

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: CRISTIAN ANDRÉS GARCÍA MEJÍA

DIRECTOR: ING. JUAN PABLO CHUQUÍN VASCO.

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Cristian Andrés García Mejía.

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 Cristian Andrés García Mejía, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

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

Riobamba, 13 de abril del 2021

**CRISTIAN
ANDRES
GARCIA
MEJIA**

Firmado digitalmente por CRISTIAN
ANDRES GARCIA MEJIA
DN: CN=CRISTIAN ANDRES GARCIA
MEJIA,
SERIALNUMBER=2300223308,
OU=AUTORIDAD DE CERTIFICACION
ESPOCH DTIC, O=ESPOCH DTIC,
L=RIOBAMBA, C=EC
Razón: Soy el autor de este documento
Ubicación:
Fecha: 2021-04-15 06:17:39
Foxit Reader Version: 9.4.1

Cristian Andrés García Mejía

230022330-8

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo: Propuesta Tecnológica. **SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO FÓRMICO MEDIANTE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA EN DWSIM**, realizado por el señor: **Cristian Andrés García Mejía**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA

Ing. Adrián Rodríguez
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL



2021-04-13

Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco
**DIRECTOR DE TRABAJO DE
TITULACIÓN**



2021-04-13

Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco
MIEMBRO DEL TRIBUNAL



2021-04-13

DEDICATORIA

Con mucho amor, dedico este trabajo de titulación a mi Mama quien ha sido una madre y un padre a la vez y me ha formado con un gran carácter y principios gracias a ella soy la persona que soy hoy en día. A mi novia Stefany la que me ha brindado un apoyo incondicional y ha estado en mis momentos difíciles. Y por último a todos aquellos grandiosos amigos que fueron parte de mi vida Universitaria.

Cristian.

AGRADECIMIENTO

Agradezco a todas las personas que me ayudaron con esta Tesis de grado y que de una u otra manera estuvieron conmigo en los momentos difíciles, tristes y alegres que te brinda la vida. Agradezco a mi Madre que ha sabido darme apoyo económico y amor incondicional para finalizar la Universidad, para que su hijo siga adelante cumpliendo sus metas.

Agradezco al amor de mi vida, mi novia Stefany que ha sabido apoyarme en las diferentes dificultades que he tenido y de igual manera me ha ayudado a realizar el Trabajo de Titulación de diferentes formas.

Agradezco a mis amigos incondicionales Patricio, July, Brayan y Diego con los que he pasado diferentes experiencias en estos 5 años en Riobamba y que los he llegado a considerar como mis hermanos, gracias por todo, espero verlos pronto.

Agradezco a los coautores de este trabajo al Ing. Juan Chuquin e Ing. Daniel Chuquin que han sabido ayudarme y motivarme de varias maneras, y han depositado confianza en mí para culminar esta meta Universitaria, los considero unos grandiosos ingenieros dignos de admirar.

Te amo Madre

Te amo Stefany

Cristian.

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xiv
RESUMEN	xv
SUMMARY	xvi
CAPÍTULO I	
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 Antecedentes	1
1.2 Planteamiento del problema	1
1.3 Objetivos.....	2
1.3.1 Objetivo General.....	2
1.3.2 Objetivos Específicos	2
1.4 Justificación del proyecto.....	3
1.5 Alcance.....	3
CAPÍTULO II	
2 MARCO TEÓRICO.....	4
2.1 Estado del Arte.....	4
2.1.1 Ácido fórmico	4
2.1.2 Proceso de producción de ácido fórmico	5
2.1.3 Redes neuronales en la industria química	7
2.2 Bases Teóricas	13
2.2.1 Reactor de agitación continua	13
2.2.2 Separador flash	14

2.2.3	Columnas de destilación.....	15
2.2.4	Destilación reactiva.....	16
2.2.5	Descripción del proceso estudiado.....	16
2.2.6	DWSIM – Simulador de procesos químicos.	18
2.2.7	Redes neuronales artificiales.....	22

CAPÍTULO III

3	METODOLOGÍA.....	25
3.1	Establecimiento de parámetros	26
3.1.1	Operacionalización de variables.....	26
3.2	Simulación en DWSIM.....	29
3.3	Validación de la simulación	37
3.4	Base de datos	37
3.4.1	Consideraciones en la base de datos.....	40
3.5	Diseño de la red neuronal.....	41
3.6	Validación de la Red Neuronal Artificial.....	44
3.7	Análisis Estadístico	45

CAPÍTULO IV

4	GESTIÓN DEL PROYECTO	46
4.1	Presupuesto	46
4.2	Cronograma	47
4.3	Recursos materiales	48
4.4	Resultados de la simulación de DWSIM.....	48
4.5	Validación de los resultados obtenidos	51
4.6	Balance de masa	51
4.6.1	Balance de reactor de agitación continua	52
4.6.2	Balance de la Columna C-1.....	53
4.6.3	Balance de la columna RD	54
4.6.4	Balance de la Columna C2	56

4.7	Resultados de la red neuronal artificial (RNA)	57
4.7.1	Análisis de las gráficas obtenidas de la RNA	57
4.7.2	Análisis gráfico entre los datos DWSIM y RNA	61
4.8	Análisis estadístico en SPSS	67

CONCLUSIONES

RECOMENDACIONES

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2:	Unidades de operaciones de DWSIM.....	19
Tabla 1-3:	Condiciones operativas del reactor de agitación continua.....	27
Tabla 2-3:	Condiciones operativas de Columna de destilación C-1	27
Tabla 3-3:	Condiciones operativas de la Columna reactiva de destilación RD	28
Tabla 4-3:	Condiciones operativas de la Columna de destilación C-2	28
Tabla 5-3:	Variables operativas utilizadas en la simulación	30
Tabla 6-3:	Base de datos usada en la RNA	38
Tabla 1-4:	Cronograma de actividades	47
Tabla 2-4:	Matriz de presupuesto.....	46
Tabla 3-4:	Resultados del reactor CSTR.....	49
Tabla 4-4:	Resultados de la torre de destilación C-1	50
Tabla 5-4:	Resultados de la torre de destilación RD.....	50
Tabla 6-4:	Resultados de la torre de destilación C-2	50
Tabla 7-4:	Errores porcentuales obtenidos del proceso	51
Tabla 8-4:	Valores del flujo 1	52
Tabla 9-4:	Valores de los flujos 5,6 y 7	53
Tabla 10-4:	Valores de los flujos 6, Agua, 9 y 8.....	54
Tabla 11-4:	Valores de los flujos 8,10 y 11	56
Tabla 12-4:	Valores de DWSIM vs RNA (Flujos molares).....	63
Tabla 13-4:	Valores de DWSIM vs RNA (Fracciones molares).....	65
Tabla 14-4:	Resumen estadístico	67
Tabla 15-4:	ANOVA.....	67
Tabla 16-4:	Medias con intervalos de confianza 95%	68
Tabla 17-4:	Prueba de Kruskal-Wallis.....	68

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2:	Reactor CSTR.....	14
Figura 2-2:	Funcionamiento general de una columna de platos	15
Figura 3-2:	Interfaz DWSIM	20
Figura 4-2:	Unidades de operación DWSIM	21
Figura 5-2:	Reacción catalítica heterogénea DWSIM	22
Figura 6-2:	Red neuronal monocapa.....	23
Figura 7-2:	Red neuronal multicapa	23
Figura 1-3:	Selección de compuestos químicos en DWSIM	31
Figura 2-3:	Implementación de paquetes termodinámicas	31
Figura 3-3:	Aplicación Neural Fitting	41
Figura 4-3:	Ingreso de variables de entrada y salida, Matlab	42
Figura 5-3:	Configuración de “Validación y datos de prueba”.....	43
Figura 6-3:	Selección de algoritmos de entrenamiento.....	44
Figura 1-4:	Simulación completa del sistema de producción de ácido fórmico.	48
Figura 2-4:	Reactor de agitación continua	52
Figura 3-4:	Torre destilación C-1	53
Figura 4-4:	Torre de destilación reactiva	54
Figura 5-4:	Torre de destilación C-2.....	56
Figura 6-4:	Esquema de la Red Neuronal Artificial en Matlab	57

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3:	Metodología del trabajo de titulación.....	25
Gráfico 2-3:	Diagrama del proceso de producción de ácido fórmico	26
Gráfico 3-3:	Variables definidas en el reactor de agitación continua	32
Gráfico 4-3:	Diseño de la columna de destilación C-1	33
Gráfico 5-3:	Especificaciones de la columna C-1	33
Gráfico 6-3:	Diseño de la columna de destilación RD.....	34
Gráfico 7-3:	Especificaciones de la columna RD	34
Gráfico 8-3:	Definición de reacción química en la columna RD.....	35
Gráfico 9-3:	Diseño de la columna de destilación C-2	36
Gráfico 10-3:	Especificaciones de la columna C-2.....	36
Gráfico 11-3:	Tablas de resultados en DWSIM.....	37
Gráfico 1-4:	Resultados obtenidos de la simulación en DWSIM	49
Gráfico 2-4:	Error cuadrático medio obtenido.....	58
Gráfica 3-4:	Histograma de error de la RNA.....	59
Gráfico 4-4:	Regresión lineal de la fase de entrenamiento y prueba	60
Gráfico 5-4:	Flujo molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA.....	61
Gráfico 6-4:	Flujo molar de CH ₃ OH DWSIM vs RNA	62
Gráfica 7-4:	Fracción molar de formiato de metilo DWSIM vs RNA.....	62
Gráfica 8-4:	Fracción molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA	63
Gráfica 9-4:	Flujo molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA.....	64
Gráfica 10-4:	Flujo molar de metanol DWSIM vs RNA	65
Gráfica 11-4:	Fracción molar de formiato de metilo DWSIM vs RNA.....	66
Gráfica 12-4:	Fracción molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA	66

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. Script para el diseño y entrenamiento de la RNA

ANEXO B. Valores DWSIM vs RNA (Flujos molares)

ANEXO C. Valores DWSIM vs RNA (Fracciones molares)

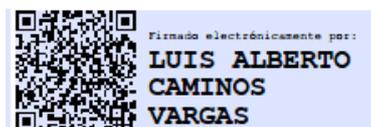
ÍNDICE DE ABREVIATURAS

AF	Ácido fórmico
C-1	Columna de separación 1
C-2	Columna de separación 2
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
CSTR	Reactor de agitación continua
DFAFC	Pila de combustible de ácido fórmico directo
FDH	Formiato deshidrogenasa
HCOOH	Ácido fórmico
kmol/h	Unidad de flujo molar, kilomol por hora
RD	Columna de separación reactiva
RNA	Red neuronal artificial
HCOOCH ₃	Formiato de metilo
HCOOH	Ácido fórmico
H ₂ O	Agua
CH ₃ OH	Metanol
R	Regresión lineal
MSE	Error cuadrático medio

RESUMEN

El objetivo fue simular y validar el proceso mejorado de la producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva, siendo la base para el diseño de una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir flujos molares y fracciones molares de los principales compuestos del proceso. Para el diseño de la RNA se elaboró una base de datos a partir de la simulación del proceso en el programa gratuito DWSIM, cuya base de datos se encuentra conformada por 101 datos con tres entradas: flujo molar de metanol, flujo molar de monóxido de carbono y presión de la columna C-1, con sus cuatro salidas respectivas: flujo molar y fracción molar del ácido fórmico separado en la columna de separación C-2 como residuo, fracción molar del formiato de metilo producido en el reactor de agitación continua (CSTR) y el flujo molar del metanol de alimentación en el reactor CSTR. La red se diseñó en el software Matlab utilizando 20 neuronas ocultas y el algoritmo matemático “Regularización Bayesiana” para la fase de entrenamiento y prueba, además se realizó una validación externa con 16 datos con sus respectivas entradas y salidas, para asegurar la confiabilidad y exactitud de la red ante nuevos datos predichos. Se obtuvo un error cuadrático medio de 0.001312 y una regresión lineal total de $R=1$. La RNA se la validó con la ayuda de un análisis estadístico comparativo en el cual se obtuvo un 95% de confiabilidad. La simulación logró obtener 68.38 kmol/h de ácido fórmico a partir de 70.30 kmol/h de monóxido de carbono, además en dicha simulación y validación se obtuvo un error porcentual máximo de 1.81% en las variables de interés. Se recomienda ampliar la base de datos con nuevos experimentos o variables de entrada y salida que no se tomaron en consideración.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA>, <RED NEURONAL ARTIFICIAL (RNA)> <DESTILACIÓN REACTIVA> <DWSIM (SOFTWARE)> <BASE DE DATOS> <NEURONAS> <ERROR PORCENTUAL>



0658-DBRAI-UPT-2021

SUMMARY

The objective of this study was to simulate and validate the improved process of formic acid production using a reactive distillation column, being the basis for the design of an artificial neural network (ANN) capable of predicting molar fluxes and molar fractions of the main compounds of the process. For the design of the ANN, a database was created from the simulation of the process in the free DWSIM program. This database is made up of 101 data with three entries: methanol molar flow, carbon monoxide molar flow, and column pressure C-1, with their four respective outputs: Molar flow and mole fraction of formic acid separated in the separation column C-2 as residue, the mole fraction of methyl format produced in the continuous stirring reactor (CSTR) and the molar flow of feed methanol in the CSTR reactor. The network was designed in MATLAB, using 20 hidden neurons and the mathematical algorithm "Bayesian Regularization", for the training and testing phase, external validation was also carried out with 16 data with their respective inputs and outputs, to ensure the reliability and accuracy of the network in the face of new predicted data. A mean square error of 0.001312 and total linear regression of $R = 1$ was obtained. The ANN was validated with the help of a comparative statistical analysis in which 95% reliability was obtained, the simulation managed to obtain 68.38 kmol / h of formic acid from 70.30 kmol / h of carbon monoxide. Furthermore, in said simulation and validation, a maximum percentage error of 1.81% was obtained in the variables of interest. It is recommended to expand the database with new experiments or input and output variables that were not considered.

Keywords: <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK (ANN)> <REACTIVE DISTILLATION> <DWSIM (SOFTWARE)> <DATABASE> <NEURONS> <PERCENTAGE ERROR>

CAPÍTULO I

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

El ácido fórmico (AF) se encuentra de forma natural en la mayoría de las hormigas, algunas especies de abejas y en la atmósfera debido a las emisiones de los bosques. De hecho, el nombre “fórmico” proviene del latín formica, cuya traducción es hormigas porque inicialmente fue aislado por destilación de hormigas (Overpeck & Conde, 2019 citados en Chen et al,2019, p.1)

Entre los 100 compuestos químicos más importantes, el ácido fórmico (AF) es el ácido orgánico más simple pero más fuerte al presentar grandes ventajas al ser más ecológico, no corrosivo, fácilmente biodegradable, en comparación a otros ácidos orgánicos e inorgánicos, y se aplica ampliamente en las industrias agrícola, gomosa, farmacéutica, del cuero y textiles. Además, es un disolvente verde reductor de uso frecuente, así como un componente básico en varias síntesis químicas (Xi; et al, 2019, p.1)

En 2019, el mercado global anual de AF es de aproximadamente US \$ 620 millones, demostrando un aumento constante en el futuro. No sólo es un producto químico importante, sino que también es un medio/portador de energía clave que puede aportar soluciones a la crisis energética y contribuir al establecimiento de estructuras de energía renovable. Puede producir directamente o actualizarse en una variedad de combustibles de alta calidad que incluyen hidrógeno (H₂), monóxido de carbono (CO), metanol, bioaceites, etc (Xi; et al, 2019, p.1).

1.2 Planteamiento del problema

El ácido fórmico es un ácido orgánico fuerte el cual es utilizado en diversas industrias, como química, farmacéutica, caucho, textil y cuero, existen varios procesos comerciales para la producción de ácido fórmico como la acidólisis de sales de formiato, oxidación de hidrocarburos, hidrólisis de formamida y la hidrólisis de alquilos de formiatos. La hidrólisis del formiato de metilo es atractiva ya que incluye:

- Una velocidad de reacción rápida
- No se tiene productos secundarios indeseados
- Bajo costo de inversión

Este proceso de obtención de ácido fórmico se lo realiza con la ayuda de un reactor CSTR, una columna de destilación reactiva y dos columnas de separación convencionales, y requiere compuestos químicos como metanol, monóxido de carbono y agua, intervienen dos reacciones en el proceso una de ellas es la reacción de carbonilación del metanol en el reactor CSTR para producir formiato de metilo, mientras que la segunda reacción es la de hidrolisis del formiato de metilo para obtener finalmente ácido fórmico.

Con la finalidad de simplificar costos de operación y optimizar el proceso, este trabajo de titulación propone la simulación y validación del proceso de producción de ácido fórmico mediante una columna de separación reactiva empleando el software DWSIM.

Se generará una base de datos obtenida de DWSIM, la cual será utilizada para el diseño de la Red Neuronal Artificial (RNA) mediante el programa Matlab, con la finalidad de predecir flujos molares y fracciones molares de los principales compuestos químicos del proceso producción.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Simular y validar el proceso mejorado de la producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Simular el proceso de producción de ácido fórmico mediante el uso del software de código abierto DWSIM.
- Determinar la cantidad de ácido fórmico producido y el monóxido de carbono requerido en el proceso de obtención de ácido fórmico mediante la destilación reactiva.
- Validar el proceso de producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva en DWSIM con el uso de resultados obtenidos en artículos científicos de gran relevancia e impacto.
- Diseñar una Red Neuronal Artificial que permita predecir la cantidad de ácido fórmico y la cantidad de CO requerida en el proceso propuesto.

1.4 Justificación del proyecto

El proceso de producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva presenta varias ventajas en comparación al proceso convencional, como la reducción significativa de costos operativos y de capital, además requiere de un espacio físico más pequeño y se hace un mejor uso de energía, sin embargo todo este estudio requiere de un alto capital para llevarlo a cabo y encontrar las variables adecuadas para el proceso, por lo cual se opta por simular la producción del ácido fórmico en el software DWSIM de código abierto ahorrándose grandes cantidades de dinero en ensayos físicos y a su vez comparando los resultados con los valores calculados en artículos de gran impacto científico.

DWSIM es un software de simulación de procesos industriales que permite desarrollar procesos químicos virtualmente, ayudando de esta manera a estudiar el comportamiento de las diferentes variables que intervienen en el proceso y simultáneamente se llega a analizar la optimización de dicho proceso de estudio con el fin de reducir costos de operación y aumentar el rendimiento en la obtención del producto deseado por medio de este software, para así llevarlo a cabo con mayor seguridad en plantas pilotos sin desperdiciar grandes cantidades de dinero en pruebas.

El presente proyecto de titulación se enmarca en la línea de investigación de Procesos, Tecnológico e Industrial de la carrera de Ingeniería Química y del Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, "GISAI".

1.5 Alcance

En este trabajo se simula y valida un proceso de producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva, a partir de reactivos químicos como monóxido de carbono y metanol que son convertidos en formiato de metilo en un reactor de agitación continua, además dicho proceso está conformado por dos columnas de separación C-1 y C-3 cuya finalidad es eliminar el metanol del flujo principal del proceso y tiene una columna de separación reactiva RD la cual funciona como reactor y columna de separación al mismo tiempo, reduciendo el requerimiento de un mayor espacio físico.

La simulación se la lleva a cabo en el software libre DWSIM para procesos químicos. Gracias a la simulación del proceso se genera una base de datos la cual es usada para el diseño de la Red Neuronal Artificial (RNA) en Matlab la cual permite predecir los flujos molares y fracciones molares de los principales compuestos químicos, mediante la manipulación de variables de entrada y salida del proceso de producción de ácido fórmico.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Estado del Arte

2.1.1 *Ácido fórmico*

El ácido fórmico (FA) es un ácido orgánico fuerte el cual se lo utiliza en diversas industrias, como la química, farmacéutica, caucho, textil, agricultura y cuero. El ácido fórmico es fácilmente biodegradable, por lo que es ambientalmente sustentable, lo cual lo convierte en un material básico popular en el sector industrial para la elaboración de varios productos deseados (Felicja; et al, 2015, pp.144-152).

El ácido fórmico es el ácido carboxílico más simple que se puede obtener como subproducto industrial, es incoloro, de baja toxicidad y fácil de transportar y almacenar a temperatura ambiente, presenta un punto de ignición y precio bajo, es considerado un líquido de fácil transporte, manipulación y almacenamiento a temperatura ambiente, por tal motivo se le ha dado más y más atención por parte de muchos investigadores del sector industrial (Shixiang; et al, 2019, p.21804).

El ácido fórmico es uno de los productos iniciales que se obtienen de la biomasa y los procesos químicos a partir de la hidrólisis del formiato de metilo y la hidrogenación de CO₂. El ácido fórmico tiene 4,4% en peso de hidrógeno en condiciones ambientales, por lo cual se convierte en un donante de hidrógeno en reacciones de hidrogenación catalítica, siendo menos tóxico y produciendo solo productos gaseosos deseados. La descomposición catalítica heterogénea del AF, es un método para la obtención de hidrógeno. Se ha estudiado la descomposición del ácido fórmico en catalizadores heterogéneos tales como Pt, Pd, Au, Ag, Rh y Ni (Marzieh & Bashiri, 2019, p.720)

Las pilas de combustible de ácido fórmico directo (DFAFC) se han convertido en el interés de muchos investigadores debido a las ventajas de presentar una alta densidad de energía, una cinética de oxidación rápida y densidades de potencia a baja temperatura. Es un material muy importante para el almacenamiento de hidrógeno, con una gran capacidad para liberar hidrógeno. Para los DFAFC, la reacción de oxidación del ácido fórmico ocurre en la reacción del ánodo a una baja temperatura con la generación de CO_x (Zhao; et al, 2020, p.1) .

La cinética y el mecanismo de producción de hidrógeno mediante la descomposición del ácido fórmico usando una simulación dinámica de Monte Carlo, haciendo uso de evidencias experimentales relativas a la descomposición del ácido fórmico en la superficie de Ni tales como: adsorción, desorción, producción de H₂ y CO₂ y disociación del ácido fórmico. El modelo tiene como finalidad predecir las variaciones en las velocidades de reacción y las coberturas de adsorción al cambiar la presión del ácido fórmico en la fase gaseosa a temperatura constante (Ra & Bashiri, 2019, p.720).

2.1.2 Proceso de producción de ácido fórmico

El formiato deshidrogenasa (FDH) es un biocatalizador atractivo para convertir CO₂ en ácido fórmico en condiciones ambientales. La FDH se aplica al catalizador para el sistema de conversión de ácido fórmico-CO₂ inducido por luz visible que consta de un donante de electrones, un fotosensibilizador y un portador de electrones. Para mejorar la eficiencia de producción de ácido fórmico, se debe tomar a consideración la mejora de los procesos de retransmisión de electrones entre un fotosensibilizador, un portador de electrones y FDH (Shusaku; et al, 2018, pp. 362-364).

Para la conversión del glicerol residual de la producción de biodiesel se recomienda utilizar una sílice bifuncional libre de metales con alta porosidad como catalizador. La sílice mesoporosa (SiO₂ sintético) con alta superficie específica de 1489 m².g⁻¹ se utiliza en la conversión del glicerol residual (suministrado sin ninguna purificación) mediante reactor de flujo continuo (PBR). Sorprendentemente, esta sílice libre de metales muestra una alta selectividad por el producto de escisión oxidativa (ácido fórmico), alcanzando el 83% en flujo continuo (Poliane; et al, 2019, pp. 1102-1103).

Actualmente, existe un interés creciente en la oxidación del glicerol para la producción de ácido fórmico debido a su considerable eficiencia como portador de hidrógeno y aplicación directa en pilas de combustible. Cabe mencionar que la producción industrial de ácido fórmico ocurre principalmente a través de la oxidación del gas metano de origen fósil. Por tanto, la conversión de glicerol en ácido fórmico sería de gran interés desde el punto de vista económico y medioambiental (Poliane; et al, 2019, pp. 1102-1103).

La celulosa y la hemicelulosa por lo general son consideradas como fuentes de ácidos fórmico y acético que se obtienen con la aplicación de etanol, mientras que en una investigación se reveló que la lignina es otra fuente crítica de ácidos en el proceso, consta de factores que influyen en los rendimientos de ácidos como la relación de etanol (0-100%), tiempo de residencia (30-210 min), temperatura de reacción (150-200 ° C) y el efecto del oxígeno residual en el recipiente (Chao et; al, 2019, pp. 329-330).

La biomasa representa el recurso de carbono más grande de la Tierra, y se han desarrollado varias estrategias que incluyen la hidrólisis ácida, la oxidación húmeda y la oxidación catalítica para transformar los recursos de biomasa en AF con un rendimiento y selectividad relativamente altos. Mientras tanto, el dióxido de carbono (CO_2) como un compuesto económico y ampliamente disponible, también es un recurso potencial para producir AF a través de deshidrogenación mediante diferentes estrategias como catálisis química, fotoquímica y electroquímica (Xi; et al, 2019 pp. 329-330) .

La producción industrial actual de AF implica un método de dos pasos donde primero reacciona metanol con monóxido de carbono para producir formiato de metilo que posteriormente se hidroliza para formar ácido fórmico. La producción de AF a gran escala a partir de recursos renovables es más preferible para mitigar las emisiones de carbono y luchar contra el calentamiento global, como parte de una sociedad humana más sostenible (Overpeck & Conde, 2019 citados en Chen et al.,2019, p.1)

El proceso novedoso mediante la implementación de un reactor y una columna de destilación convencional basado en hidrólisis MF en una sola columna de destilación reactiva (RD) combina las operaciones de reacción y separación en un solo recipiente puede tener muchas ventajas: se mejoran el rendimiento y la selectividad, los requerimientos de energía son menores y se evitan los puntos calientes en el equipo. La aplicación de un RD ha permitido la producción de AF con la pureza deseada con costos operativos y de capital significativamente reducidos (Felicia; et al, 2018, p.926) .

Propone una mejora en la eficiencia energética del proceso de destilación en la producción de AF basado en la hidrólisis del proceso de formiato de metilo, mediante la integración y el acoplamiento térmico entre RD y columnas convencionales, con lo que se obtiene una incorporación de una columna de pared divisoria, con la finalidad de aprovechar sinérgicamente estructuras acopladas e integradas térmicamente (Felicia; et al, 2018, p.926) .

La operación de destilación en la producción de ácido fórmico (AF) implica una gran cantidad de inversión y tiene altos requisitos de energía por tal motivo se ha estudiado una columna de destilación reactiva de pared divisoria (DWRDC) con precompresión de vapor en la producción de ácido fórmico en cambio de la secuencia de destilación reactiva normal-destilación, cuyo desempeño supone un ahorro impresionante del 18,33% en el costo de servicios públicos, el 8,4% en el costo anual total, el 2,55% en el costo de fabricación y el 17,68% en las emisiones de carbono (Swapnil; et al, 2018, pp.204-205).

2.1.3 *Redes neuronales en la industria química*

El modelo de diagnóstico y detección de fallas basado en redes neuronales para la destilación reactiva compleja utilizada como una opción intensificada para la producción de ácido fórmico mediante hidrólisis de formiato de metilo, donde se capacitaron varias redes neuronales utilizando 16 variable medidas como flujo molar de agua y formiato de metilo, flujo de destilado, fracciones másicas de los compuestos químicos entre otras variables, se utiliza un software para la simulación siendo Aspen Dynamics y otro programa para la red neuronal que es Matlab. Se diseñaron varias redes neuronales artificiales con diferentes estructuras, donde se obtuvo una RNA con 91,31% de precisión, la cual se encuentra compuesta por tres capas convolucionales apiladas, capas de normalización por lotes, una activación capas, dos capas agrupadas, una capa de abandono, dos capas completamente conectadas y una capa de salida (Xiaolong et al, 2020, pp. 1-12).

Producción de biogás a partir de desechos florales mediante técnica de optimización y pretratamiento donde se realiza una mejora en la producción de biogás con la ayuda de la metodología de superficie de respuesta y la red neuronal artificial, donde el tiempo de agitación, concentración del sustrato, temperatura y el pH son consideradas como variables modelos predictivos. Donde la estructura de la red neuronal está conformada por una primera capa que consiste en la capa de entrada, la segunda es una capa oculta y la tercera capa es para la salida. Se eligieron cuatro entradas, como tiempo de agitación (AT), concentración de sustrato (SC), pH y temperatura (T), obteniendo ciento veinte entradas para la red neuronal artificial. Se identificaron los errores medios absolutos para la metodología de superficie de respuesta y red neuronal artificial con 1.98% y 1.01% respectivamente. Los resultados de la RNA fueron los que mejor se ajustaron a los valores experimentales con una correlación lineal de 0.999 (Lakshmi; et al, 2020, pp.1-16).

La eficiencia de la degradación del fenol a través de la reacción de Fenton mediante una mezcla de catalizador de goethita heterogéneo con iones ferrosos homogéneos ha resultado de interés realizar una red neuronal artificial para predecir variables importantes que se ven involucradas, el fenol es un contaminante orgánico, el cual se puede encontrar en varias aguas residuales industriales (petroquímica, fabricación de papel, refinación de petróleo, fabricación de resinas, coquización y fundición de hierro), el proceso biológico no puede eliminar compuestos aromáticos como el fenol y el benceno en muchos efluentes industriales. Por lo tanto, existe un interés creciente en tratamientos alternativos. La red neuronal fue diseñada con 5 entradas siendo concentración de fenol (mg/L), concentración de hierro (mg/L), catalizador (g/L), concentración de peróxido (mg/L) y tiempo consta de dos salidas conversión del fenol (%) y conversión de TOC (%), usando el algoritmo de Levenberg-Marquardt con 10 neuronas en la capa oculta, con lo cual

se tiene una concordancia satisfactoria entre los datos de prueba y los valores predichos con una $R:0.9214$ (Farhana; et al, 2015, pp.1-17).

El dióxido de carbono es un subproducto de desperdicio de energía con graves consecuencias ambientales sin embargo se puede utilizar y convertir en varios productos químicos como formaldehído, metanol o metano y ácido fórmico sin embargo para aquello se requiere más energía y procesos catalíticos, por lo cual se requiere seleccionar una adecuada zeolita porosa para la doble absorción de hidrógeno y dióxido de carbono como base del entorno catalítico. El modelo de la red neuronal QSPR se utiliza para seleccionar un conjunto inteligente y beneficioso del total de 300 000 zeolitas hipotéticas con características estructurales que maximicen la absorción, utilizando variables de entrada como densidad, tamaño de cavidad máxima, área de superficie, calor de absorción de monóxido de carbono e hidrogeno y entre otras más (Thornton; et al, 2015, p. 1).

Los compuestos orgánicos volátiles son trazas de gases atmosféricos de diversos orígenes (por ejemplo, biogénico, antropogénico y quema de biomasa). Para muchos de ellos, sus fuentes, la eliminación los procesos y los impactos en la atmósfera y el clima no se comprenden bien. Una de las principales razones de esto es la escasez de mediciones de su concentración. Por lo cual se desarrolla una ANNI (Red neuronal artificial para interferómetro de sondeo atmosférico infrarrojo, IASI) destinado al cálculo y predicción de compuestos orgánicos volátiles como ácido fórmico, metanol y nitrato de peroxiacetilo (PAN), las variables de entrada son temperatura, presión, perfil del agua y temperatura de la superficie, seleccionando 250 000 datos en el año 2013 los cuales han sido muestreados regularmente en el espacio y el tiempo para asegurar un conjunto de datos completos y representativos. La finalidad de la ANNI es facilitar todas las mediciones (1.200.000/día) registradas desde el lanzamiento del Instrumento satelital IASI en 2006, dando como resultado una imagen global diaria de los tres compuestos orgánicos volátiles de interés (Franco; et al, 2018, pp. 13963-13972).

La descomposición termo catalítica de metano es una ruta prospectiva para producir hidrógeno libre de CO_x, por lo cual se ha desarrollado redes neuronales multicapa diseñadas con el algoritmo Levenberg-Marquardt, utilizando variables de entradas como temperatura de reacción, peso de los catalizadores, temperatura de calcinación, tiempo de calcinación, volumen específico entre otros, la red neuronal tiene una topología de 7-16-1 lo cual representa las entradas, número de neurona y la salida, con lo cual se tiene una correlación lineal de 0.953 y un error cuadrático medio de 0.03, con lo cual se tiene un rendimiento de hidrógeno previsto de 86.56 % en volumen a la temperatura de reacción de 700 °C, 0.5 g de peso del catalizador, temperatura de calcinación de 600 °C, tiempo de calcinación de 240 min, área superficial específica del catalizador de 24.1 m²/g, volumen del poro de 0,03 cm³/g y 160 min de tiempo (May; et al, 2021, p.1).

TAME (Tert-amil metil éter) es uno de los aditivos antidetonantes más importantes para la gasolina. Cuya finalidad es mejorar el índice de octano reemplazando el tetraetilo de plomo el cual se encuentra prohibido de utilizar. La destilación reactiva TAME es un proceso de eterificación similar al éter metil tert-butílico. TAME se produce por reacción de isoamilenos, que proviene de una corriente de la refinería, con metanol (MeOH) en presencia de componentes inertes (isopentano). Se simuló en bucle abierto con la finalidad de conseguir dos conjuntos de datos numéricos aleatorios, los conjuntos de datos de entrenamiento contenían 5000 muestras y el conjunto de datos de prueba contenía 2001 muestras con un intervalo de muestreo de 100 s, conformado por una variable de entrada y una de salida siendo la fracción molar de TAME y el rendimiento térmico del hervidor respectivamente, utilizando el algoritmo Levenberg-Marquardt con regularización bayesiana en una sola capa oculta con 30 neuronas obteniendo una regresión lineal de 0.9979 y un error cuadrático medio de 8.2745×10^{-4} (Sharma & Singh, 2014, pp. 512-522).

El tiempo consumido en la puesta en marcha de la unidad con retenciones adecuadas puede formar una parte importante del tiempo total de destilación, para sistemas de destilación reactiva con grandes retenciones. Los productos formados durante el tiempo de puesta en marcha están fuera de especificación y no se reciclan fácilmente como en la destilación tradicional, lo que puede resultar muy costoso, por lo cual se desarrolla una red neuronal artificial a partir del proceso de producción de ester usando ácido acético y etanol obteniendo como producto secundario agua, cuyo proceso es simulado en el software CHEMCAD, la red cuenta con una arquitectura 4-14-1 es decir cuatro variables de entradas, 14 neuronas y una variable de salida, las entradas son las composiciones molares de etanol, ácido acético, acetato de etilo y la temperatura de operación mientras que la salida es el tiempo de inicio, la red pudo predecir la hora de inicio teniendo un error promedio de 2.833% (Hui; et al, 2006, p.744).

Los reactores biológicos han sido utilizados ampliamente en el tratamiento de gases residuales. La implementación de disolventes orgánicos no biodegradables (aceite de silicona) a estos reactores es una forma de mejorar/potenciar la capacidad de eliminación de los sistemas biológicos. Por lo cual se evalúa el rendimiento del biorreactor de tanque agitado continuo de dos fases (CSTB) para la eliminación de tricloroetileno (TCE) por *Rhodococcus opacus*. La red neuronal artificial predice con éxito el rendimiento del biorreactor utilizando el algoritmo matemático Levenberg-Marquardt obteniendo una regresión lineal $R^2=0.9923$ y $MSE=0.002412$ a partir de una base de datos de 77 experimentos y 15 neuronas en la capa oculta, sus variables de entradas son flujo de aceite de silicona, concentración TCE de entrada y días, la salida es la concentración de TCE al finalizar el proceso (Divya; et al, 2019, p. 2).

La producción de hidrógeno biológico es una gran área de investigación debido a la importancia del gas como portador de energía y las ventajas de utilizar sistemas biológicos para producirlo. Se desea una determinación de hidrógeno en línea barata y práctica. Se desarrolla una red neuronal artificial (ANN) para estimar la producción de hidrógeno en los procesos de fermentación. Se utiliza una red neuronal de retro propagación (BPNN), mediante el algoritmo de gradiente conjugado, con una base de datos de variables de entrada como de CO₂ disuelto, pH y potencial de reducción de oxidación durante las fermentaciones de suero de queso por cepa de *Escherichia coli* y consta de 12 neuronas en la capa oculta. El coeficiente de correlación entre la producción de hidrógeno determinada por cromatografía de gases y la producción de hidrógeno estimada fue de 0,955 (Luis; et al, 2010, p. 2).

Se investiga la aplicabilidad del algoritmo de Leven-Marquardt, la regularización bayesiana y un algoritmo de gradiente conjugado escalado como algoritmos de entrenamiento para una red neuronal artificial (RNA) que modela de manera predictiva la tasa de producción de CO y H₂ por reformado seco de metano sobre un Co/Pr₂O₃. Los parámetros de entrada consistieron en presión parcial de CH₄, presión parcial de CO₂ y temperatura de reacción, mientras que los parámetros de salida son la tasa de producción de CO y H₂. Una arquitectura de red neuronal de (3 13 2), (3 15 2) y (3 15 2) que representan la capa de entrada, la capa de neuronas ocultas y la capa de destino (salida) para cada uno de los algoritmos antes mencionados. El algoritmo regularización bayesiana es aquel que se tiene un menor error estándar de estimaciones y un coeficiente de correlación siendo 2.0526×10^{-17} y 0.9726 respectivamente (Víctor; et al, 2019, p.1).

El desarrollo del algoritmo de recuperación Red neuronal artificial (ANNI), versión 3, para el Interferómetro de sondeo atmosférico infrarrojo IASI, permitió recientemente recuperaciones flexibles para un conjunto de compuestos orgánicos volátiles oxigenados (OVOC) compuestos de las observaciones con distribuciones globales diarias nuevas y sólidas de columnas de HCOOH elaborado de dos métodos siendo el método – A (desde 2007) el índice de rango de hiperspectral (HRI), que cuantifica para cada espectro la magnitud de la absorción del gas objetivo en un rango espectral dado y –B (desde 2013) la red neuronal de alimentación (NN), que se utiliza para convertir el HRI sin unidades en una abundancia de columna de gas, presentando mapas diarios a gran escala de columnas totales de CH₃COOH desde el espacio, para caracterizar las fuentes regionales y la variabilidad estacional de este compuesto. Un análisis conjunto del producto IASI HCOOH revela que las dos especies exhiben distribuciones, estacionalidad y carga atmosférica similares, mostrando que su abundancia está altamente correlacionada con las emisiones de isopreno y monoterpenos, así como con la quema de biomasa. Las NN se utilizan cada vez más para la inversión de datos satelitales como una alternativa sólida y computacionalmente eficiente a los enfoques físicos, tienen la capacidad de aproximar con precisión sistemas complejos a una fracción del costo computacional original. Por esta razón, pueden reemplazar los modelos

atmosféricos y los modelos de transferencia radiactiva, además, la eficiencia informática NN permite el procesamiento de toda la serie de tiempo observacional (Franco; et al, 2020, pp. 1-12).

Se desarrolló un modelo de red neuronal artificial (RNA) simple para simular metanol a partir de gas de síntesis derivado del reformado con vapor de gas natural, donde se investigó el impacto de las condiciones operativas, como las temperaturas de reacción en la concentración de metanol. Esta red incluye una capa de entrada, que introduce los datos de entrada a una red, una capa oculta y una de salida. Como otros modelos se utilizó una función de transferencia sigmoidea para todos los nodos en capas ocultas y de salida. El algoritmo de Levenberg Marquardt (LM), funcionó con vectores de gradiente y matriz jacobiana, permitiendo probar las redes neuronales. Los datos para el entrenamiento del modelo RNA se extrajeron de mediciones experimentales de los datos cuyos resultados mostraron que al aumentar la presión de 10 a 30 bar de metanol la concentración y la conversión de CO aumentan de 21,1% a 22,3% y de 34,0% a 36,2%, respectivamente (Ye, 2019, pp. 1-2).

En los últimos tiempos, surgieron varios usos exitosos de RNA en catálisis, meteorología, biología, química, física, física nuclear, física de altas energías y otras áreas de la ciencia, asegurando eficacia, eficiencia y el uso exitoso de recursos naturales finitos, previene los desechos y la contaminación del aire, y brinda seguridad al sector industrial, recientemente, se aplicó una representación de entrada ML generalizada mediante cuantificación y concentraciones de soluciones mezcladas para abordar el problema de determinar tendencias intrínsecas en la solubilidad del CO₂ bajo una condición específica, con el algoritmo de regresión general NN (GRNN) para adaptarse a las tendencias intrínsecas o al movimiento de la solubilidad del CO₂ con una cantidad mínima de datos experimentales. Lo que resultó en el RMSE promedio (error cuadrático medio) menos de 0,038 mol de CO₂/mol de solución, demostrando que la representación de entrada generalizada aplicada podría proporcionar una mejor comprensión de los aspectos inherentes tendencias de la solubilidad del CO₂ en una cantidad mezclada de soluciones (Oludare; et al, 2018, pp. 1-14).

El propionato de propilo es un compuesto químico muy utilizado como solvente de polimerización, pintura para automóviles y revestimientos para electrodomésticos. Este compuesto se encuentra considerado como un contaminante del aire no peligroso. Es producido por la fase líquida del equilibrio de reacción de esterificación de 1-propanol y ácido propiónico. Se utiliza el algoritmo Feed Forward Neural Network entrenado con Back Propagation (FBPNN) para controlar la composición del producto de destilación reactiva (propionato de propilo). El FBPNN se modifica utilizando el método de descenso más empinado. Los pesos que conectan la capa de entrada y la capa oculta, la capa oculta y la de salida se optimizan utilizando el método de descenso más pronunciado que minimiza el error cuadrático medio y, por lo tanto, mejora la

respuesta del sistema. FBPNN, como sensor suave inferencial, se utiliza para la estimación de la composición de la destilación reactiva utilizando la temperatura como variable secundaria del proceso, además la red se encuentra conformada por 12 neuronas en la capa oculta y tiene un error cuadrático medio de 0.0060659 (Vandana; et al, 2016, p. 111).

La aplicación del modelo de red neuronal artificial (RNA) en las industrias químicas ha crecido debido a su capacidad para resolver modelos complejos y problemas de aplicaciones en línea. El modelo RNA es bueno para predecir datos dentro del rango de entrenamiento, pero es limitado al predecir datos extrapolados. Por tal motivo se selecciona los modelos de múltiples entradas y múltiples salidas (MIMO) y de múltiples entradas y salidas únicas (MISO), el cual es aplicado en el proceso de transesterificación de metilo miristato e isopropanol en destilación reactiva semidiscontinua a escala industrial, la simulación se la llevo a cabo en el simulador comercial Batchfrac para lograr una pureza del destilado del 98% y la conversión completa del miristato de metilo. Los modelos MIMO y MISO lograron predecir los datos extrapolados con valores de MSE de 0.0078 y 0.0063 y con valores R^2 de 0.9986 y 0.9975 respectivamente, las cuales tienen una estructura de 12-12-2 número de entradas, neuronas y salidas (Nur; et al, 2015, p. 59).

Las redes neuronales artificiales han cumplido un gran papel en la predicción de tres temperaturas de fusión de cenizas de biomasa: temperatura de deformación inicial IDT, temperatura hemisférica HT y temperatura de flujo FT basada en la composición química de la ceniza. Se verificó estadísticamente la aplicabilidad de 400 configuraciones de redes neuronales (de tipo lineal, MLP, RBF y GRNN), el perceptrón multicapa con 12 entradas que representan fracciones de los compuestos de cenizas, 11 neuronas ocultas y tres salidas (IDT, HT, FT). El análisis de la sensibilidad del modelo neuronal con respecto a las variables de entrada demostró que los factores más importantes que afectan todas las temperaturas de transición de cenizas en el modelo IDT HT-FT de 3 salidas fueron: fracciones de K_2O , SiO_2 , CaO y Al_2O_3 . Además, la sensibilidad individual con respecto a las temperaturas IDT, HT y FT varió ligeramente. La red neuronal puede aplicarse en diversas tareas computacionales en el sector de la energía de los biocombustibles requeridos por los principios de la Industria 4.0, así como en los problemas seleccionados de Economía Circular (Piotr; et al, 2020, pp. 743-744)

El reformador de metano a vapor (SMR) se ha vuelto más atractivo debido a la creciente importancia de la producción de hidrógeno utilizando gas natural, mediante una simulación determinística y estocástica. El modelo SMR desarrollado se validó con un pequeño error (inferior al 4%) utilizando datos de referencia como temperatura, presión, fracción molar y flujo de calor promedio. La red neuronal artificial (ANN) entrenada a través de 81 conjuntos de datos, que predijo las salidas (temperatura, velocidad, presión y fracción molar de los componentes) con una

precisión superior al 98,91%. Además, el tiempo de cálculo se redujo significativamente de 1200 s (simulación dinámica) a 2 s (RNA) (Nguyen; et al, 2019, p.1).

La producción de biodiésel a partir de aceite de sebo de cerdo mediante un proceso de esterificación de dos pasos asistido por ultrasonidos y catalizado por CuO, se modela mediante el diseño de Box-Behnken (BBD) y la red neuronal artificial (RNA), en el rango de variables de tiempo de ultrasonidos (20-40 min), carga de nanocatalizador de CuO (1-3% en peso) y relación molar de metanol a PTO pretratado (10: 1–30: 1) El análisis estadístico demuestra que el modelo RNA es mejor que el BBD, con un rendimiento óptimo del 97,82% obtenido al usar el Algoritmo Genético (GA) a la hora de 35-36 min, carga de catalizador de CuO: 2,07% en peso y relación molar: 29,87: 1(Suresh; et al, 2021, pp.897-898).

El proceso secundario de fundición de plomo constó de una optimización no lineal basada en una red neuronal de BP o mejor dicho modelo de red BPNLP de dos etapas con restricción formalmente unificada combinada con un método de optimización global aproximado para obtener los parámetros óptimos de fundición. En comparación con el nivel promedio de prevención de la contaminación y la eficiencia de recuperación de plomo de la tecnología pirometalúrgica en China, la carga de contaminación azufre, plomo, arsénico y cadmio en los gases de combustión de fundición por unidad de producto de plomo secundario se ha reducido en un 78,40%, 52,00%, 72,63% y 16,00% respectivamente, y la eficiencia de recuperación de plomo aumentó en 8,85% (Yanping; et al, 2020, p.1).

Se aplica un modelo de optimización y predicción energética en los sistemas de producción de etileno en la industria petroquímica, con un modelo de optimización y predicción energética basado en la red neuronal convolucional mejorada (CNN) que integra la característica cruzada (CF) (CF-CNN). El CF puede combinar la correlación entre características para obtener la entrada de CNN, lo que puede evitar problemas de sobreajuste causados por menos características. Atestiguando la capacidad del método con el error de generalización relativo promedio de 2.86% y eficiencia de utilización de energía que aumenta en 6.38%, lo que conduce a una reducción de las emisiones de carbono en 5.29% (Zhiqiang; et al, 2020, p.1).

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Reactor de agitación continua

En los procesos industriales principalmente para productos químicos orgánicos, se utilizan reactores que cuentan con un tanque con agitación continua, conocidos como “Reactores continuos tipo tanque agitado”. Estos reactores son muy importantes ya que tiene varias aplicaciones industriales, tales como la polimerización en la producción de plásticos y pinturas, obtención de acetato de sodio para fabricar jabones, producción de nitrobenzono al cual se lo

conoce como un compuesto activo de los explosivos y la hidrolización de anhídrido acético para producir ácido acético (Eliana; et al, 2008, p.110).

Las ventajas del reactor CSTR son:

- a) Son operados en condiciones isotérmicas.
- b) Son usados a pesar que el calor de reacción sea elevado.

La operación del reactor CSTR se da en un estado estacionario en el cual las propiedades no cambian produciendo de esta manera una mezcla perfecta, lo cual representa una gran ventaja ya que se modela sin cambios significativos en la concentración, temperatura o velocidad de reacción en cada uno de los diferentes puntos del recipiente, motivo por lo cual la construcción del reactor es fácil ya que se tiene estos factores controlados (Carrera, 2014, p.121).

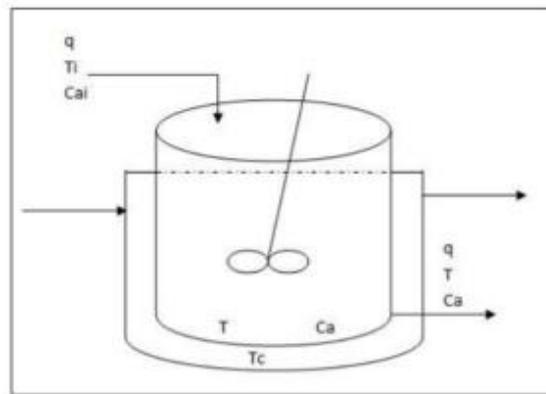


Figura 1-2: Reactor continuo

Fuente: Carrera. 2014

2.2.2 Separador flash

La destilación flash es un tipo de operación unitaria que sucede en el momento que un líquido saturado se divide en un tanque a una baja presión en dos estados, donde uno es vapor y el otro líquido. Lo más importante en un tanque separador es conocer la presión y temperatura donde se llegara a tener dos componentes, un líquido y un vapor (Tito, 2016, p.20).

Existen dos tipos de separadores flash en función de las fases que separen, son bifásicos aquellos que separan gas y líquidos, los trifásicos son aquellos separadores que se encargan de separar gas, petróleo y agua, cuya aplicación recae en el proceso de los crudos livianos que no presenten emulsiones (Tito, 2016, p.20).

2.2.3 Columnas de destilación

La destilación es una operación unitaria física la cual es controlada por la transferencia de materia y además es el método más usado para la separación de mezclas, las ventajas que presenta la destilación en comparación a otras formas de separación son:

- Es aquella operación que permite una mayor velocidad de transferencia de materia.
- Su eficiencia es mucho más alta en comparación a otras operaciones unitarias existentes.

La destilación de manera práctica se puede realizar de dos métodos, en el primer caso se trata de una destilación flash la cual es utilizada principalmente para la separación de componentes con temperaturas de ebullición con un rango de diferencia significativo, sin embargo, este método tiene una eficiencia muy inferior en las destilaciones industriales ya que se desea obtener componentes casi puros con temperaturas de ebullición muy similares. El segundo método consiste en una recirculación del condensado a la columna, por lo cual el líquido que regresa a la columna estará en un contacto directo con los vapores los cuales suben hacia el condensador. Este método se lo conoce como destilación continua con reflujo (Pérez Sanchez, 2007, p. 1692).

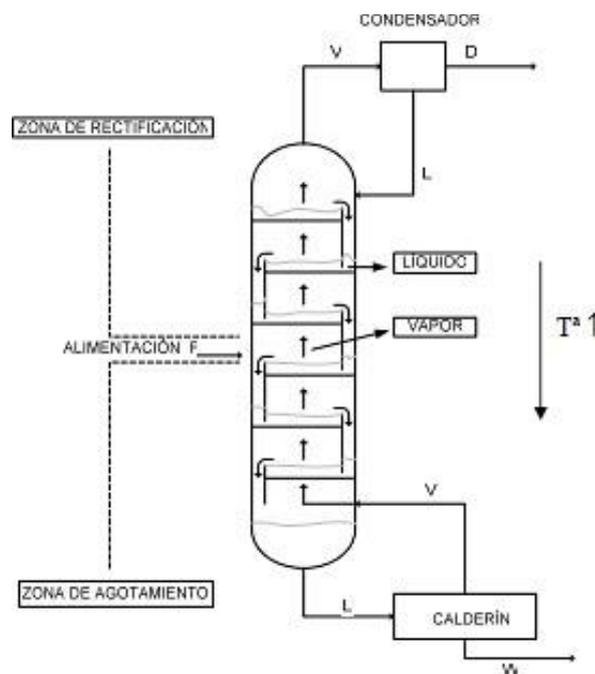


Figura 2-2: Funcionamiento general de una columna

Fuente: Pérez Sanchez. 2007

En el interior de la columna de destilación continua con reflujo y con platos se producen dos corrientes una ascendente de vapor y otra descendente de líquido las cuales estarán en íntimo contacto entre sí, donde el flujo del líquido desciende por la gravedad mientras que el flujo de vapor sube por efecto de la diferencia de presiones en los platos (Pérez Sanchez, 2007, p. 1692).

La zona por encima de la alimentación se la conoce como zona de enriquecimiento por lo que enriquece el vapor con los componentes más volátiles de la mezcla, mientras que la otra zona por debajo de la alimentación se la conoce como zona de agotamiento ya que agota al líquido de los compuestos más volátiles (Pérez Sanchez, 2007, p. 1692).

2.2.4 Destilación reactiva

Es aquel proceso en el cual se da una reacción química y una separación de productos en una sola unidad de proceso, este tipo de destilación es muy útil ya que permite realizar la transformación química dentro de la torre por lo tanto no es necesario un reactor químico, lo cual genera una disminución en la inversión de capital y en costos de operación de equipos. Otras ventajas que presenta la destilación reactiva son la mejora en el grado de conversión de reactivos y la selectividad hacia los productos deseados, su eficiencia de conversión es comparable con un reactor con recirculación ya que permite la reconcentración de reactivos y el retiro constante de los productos (Carlos; et al, 2004, p.42).

Cabe mencionar que esta tecnología es considerada ambientalmente amigable debido a que genera un menor impacto ambiental en comparación a los reactores cotidianos de los procesos industriales (Carlos; et al, 2004, p.42).

2.2.5 Descripción del proceso estudiado

Para la producción de ácido fórmico se hace uso del reactor CSTR donde se lleva a cabo la reacción de carbonilación del metanol, el reactor funciona a altas presiones (40 atm), a una temperatura de 350 K y trabaja de forma adiabática, se cuenta con un volumen de reactor de 4.053 m³ y 0.5 kg de catalizador.

La reacción consiste en la carbonilación de metanol a partir de monóxido de carbono utilizando metóxido de sodio (CH₃ONa) como catalizador heterogéneo, en esta reacción el metanol debe entrar en exceso ya que así lo requiere la reacción y alrededor del 15% del metanol que entra se transforma, cabe mencionar que sin la ayuda del catalizador esta reacción no se pudiera llevar a cabo ya que no se produjera nada de formiato de metilo (Felicia; et al, 2015, pp. 144-152).

Reacción de carbonilación



Velocidad de reacción

$$r = (1.414 \times 10^9) \exp\left(\frac{-70748}{8.31451T}\right) [MeOH][cat][CO] - (2.507 \times 10^{12}) \exp\left(-\frac{92059}{8.31451T}\right) [cat][MF]$$

Donde:

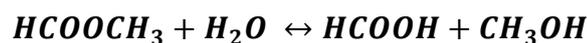
- $r = \text{mol/L min}$
- $[] = \text{mol/L}$
- $T = \text{°K}$

El producto del CSTR que es el formiato de metilo y metanol entra a un separador flash para separar las dos fases, la una líquida y el otro vapor, donde esta última recirculara al CSTR, el separador Flash funciona a una temperatura de 366 K y 4 atm (Swapnil; et al, 2018, pp. 204-205).

La mezcla de formiato de metilo y metanol que salió del separador Flash ingresa a una torre de destilación conformada por 10 platos, donde la alimentación entra por el plato número 3, la torre funciona a una presión de 4 atm y no se produce caída de presión en ningún plato, las especificaciones del destilado son 0.67 en fracción molar de formiato de metilo y en el caso del residuo 0.99 en fracción molar de metanol, la función de esta torre de destilación es reducir el exceso de metanol que se tiene en la mezcla (Felicja; et al, 2015, pp. 144-152).

La mezcla que sale de la columna de destilación C-1 ingresa a la torre de destilación reactiva por el plato número 33 mientras que el agua entra por el plato número 2, el número total de platos es 35, en esta columna se da la reacción de hidrólisis de formiato de metilo para transformarse en ácido fórmico y metanol. La sección reactiva corresponde desde el plato 1 al plato 19 con un volumen de catalizador de 0.15 m^3 y con una alta actividad de catalizador, toda la torre funciona con una presión de 4 atm la cual permanece constante en cada uno de los platos de la torre de destilación, en esta se eliminará el formiato de metilo que no se ha logrado convertir en ácido fórmico, sin embargo, se da una conversión muy cercana al 100 % (Felicja; et al, 2015, pp. 144-152).

Reacción de hidrólisis



Velocidad de reacción

$$r = \frac{6.530 \times 10^6}{1 + 0.869[\text{H}_2\text{O}]^2} \exp\left(\frac{-63100}{8.31451T}\right) \left(\frac{[\text{H}_2\text{O}][\text{MF}] - [\text{MeOH}][\text{FA}]}{0.4492 \exp\left(-\frac{251}{T}\right)}\right)$$

Donde:

$r = \text{mol/L.min}$

$[] = \text{mol/L}$

$T = \text{°K}$

El ácido fórmico y metanol que sale de la columna reactiva entra a otra columna de destilación C-3 para eliminar totalmente el metanol de la mezcla, cuya torre está conformada por 13 platos donde la alimentación entra por el plato número 8 y trabaja a una presión de 4 atm donde no existe caída de presión en ningún plato, el destilado está conformado por 0.97 fracción molar de metanol y el resto agua mientras que el residuo conformado por 0.67 en fracción molar de ácido fórmico

y 0.33 en fracción molar de agua. Cabe mencionar que todo este proceso está basado en 70.30 kmol/h de CO de alimentación el cual es el reactivo limitante, toda la simulación trabaja con el paquete termodinámico UNIQUAC el cual es el indicado para este tipo de condiciones y compuestos (Felicja; et al, 2018, p. 926).

2.2.6 DWSIM – Simulador de procesos químicos.

El trabajo de titulación se llevará a cabo en el simulador DWSIM, el cual es un simulador de procesos químicos de código abierto y gratuito por lo cual se lo puede usar sin la necesidad de una licencia, el software cubre temas en diferentes áreas de la Ingeniería Química tales como mezclas, reacciones, equilibrio de fases, transferencia de calor y masa. Por lo cual se logra tener una simulación optima ya que el simulador dispone de todos los componentes del proceso, así como los paquetes termodinámicos de los fluidos empleados (Naren, 2017, p.5)

2.2.6.1 Características.

DWSIM dispone de una serie de paquetes termodinámicos para los procesos químicos los cuales son:

- PC-SAFT, FPROPS
- CoolProp
- Peng–Robinson
- Peng–Robinson–Strýjek–Vera (PRSV2)
- Soave–Redlich–Kwong
- Lee-Kesler • Lee-Kesler–Plöcker
- UNIFAC(-LL)
- Modified UNIFAC (Dortmund)
- Modified UNIFAC (NIST) • UNIQUAC
- NRTL
- COSMO-SAC
- Chao-Seader
- Grayson-Streed
- Extended UNIQUAC
- Raoult’s Law
- IAPWS-IF97 Steam Tables
- IAPWS-08 Seawater
- Black-Oil
- Sour Water

(Naren, 2017, p.5)

De la misma manera DWSIM dispone de una serie de unidades de operaciones las cuales son clasificadas de la siguiente manera:

Tabla 1-2: Unidades de operaciones de DWSIM

Corriente	Corriente de masa Corriente de energía
Cambiadores de presión	Compresor Bomba Válvula Turbina Placa de orificio Segmento de tubería
Tanques/ Separadores	Separador de componente Tanque Separador gas- líquido
Mezcladores/ Separadores	Mezclador Separador
Intercambiadores	Calentador Intercambiador de calor Enfriador
Reactores	Reactor de conversión Reactor CSTR Reactor de equilibrio Reactor Gibbs Reactor Flujo Pistón
Columnas	Columna Chemsep Columna de destilación Columna de absorción Columna Shortcut
Equipos de sólidos	Filtro Separador de sólidos
Operaciones lógicas	Switch Bloque de recicle de energía Bloque de reciclaje de flujo Bloque de especificación Bloque de control
Indicador	Manómetro analógico Medidor digital Indicador de nivel
Controlador	Controlador PID

Fuente: Naren. 2017

Realizado por: García, Cristian, 2021

2.2.6.2 Interfaz de DWSIM

Al iniciar DWSIM en Windows y seleccionar “simulación nueva” se genera automáticamente una lista de compuestos químicos disponibles en la plataforma, después se presenta una serie de paquetes termodinámicos donde se puede seleccionar varios paquetes deseados a la misma vez, por último se presentara una lista de propiedades físicas y químicas para seleccionar las unidades que se requieren para cada propiedad, una vez seleccionado aquello se presentara una pantalla donde se puede seleccionar cada una de las operaciones que se requieren para la simulación y las corrientes de masa se deben especificar las condiciones y composición de la mezcla (Hugo Rodríguez, 2016, p.15).

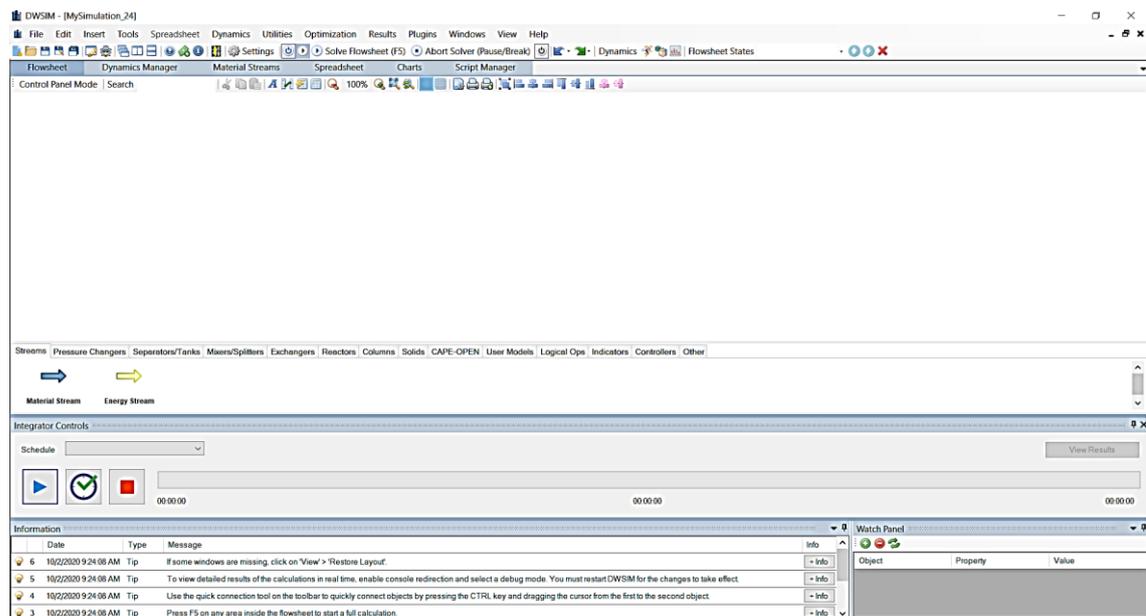


Figura 3-2: Interfaz DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

Cuando ya se haya colocado cada una de las operaciones y flujos correspondientes a la simulación estas se encontrarán de color rojo, sin embargo, cuando se hace clic en “Solve Flowsheet” el simulador va a resolver cada una de las operaciones y una vez que finalice estas se colocarán de un color azul lo cual recalca que la simulación se ha llevado con éxito (Hugo Rodríguez, 2016, p.15).

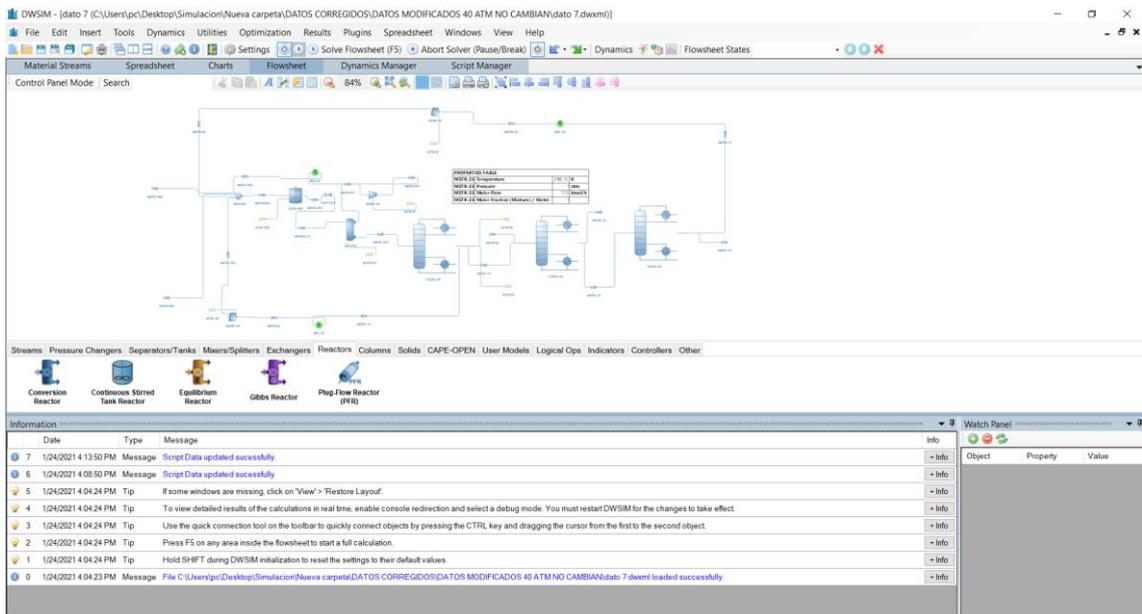


Figura 4-2: Unidades de operación DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

Cabe mencionar que en “DWSIM” se puede crear 4 tipos de reacciones las cuales son:

- Reacción de conversión
- Reacción de equilibrio
- Reacción de cinética
- Reacción catalítica heterogénea

En esta simulación se hará uso de la reacción catalítica heterogénea para llevar a cabo la reacción de carbonilación de metanol, en la cual se debe especificar tanto la velocidad de reacción, el balance de la ecuación química, el componente base que sería el reactivo limitante y la especificación de las unidades con las que se trabaja en la velocidad de reacción (Hugo Rodríguez, 2016, p.15).

Heterogeneous Catalytic Reaction

Identification

Name: Producto metil formato

Description: Obtencion

Components and Stoichiometry

Name	Molar Weight	ΔH_f (kJ/kg)	Include	BC	SC
Methanol	32.0419	-6271.17	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-1
Methyl formate	60.052	-5868.25	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1
Carbon monoxide	28.0101	-3946.08	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	-1
Methanoic Acid	46.0254	-8226.98	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0
Water	18.0153	-13422.7	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0

Stoichiometry: OK Balance Heat of Reaction (kJ/kmol_BC): -40930

Equation: $\text{CH}_3\text{OH} + \text{CO} \leftrightarrow \text{HCOOCH}_3$ Base Component: Carbon monoxide

Heterogeneous Kinetic Reaction Parameters

Basis: Molar Fractions Phase: Liquid Tmin (K): 273 Tmax (K): 500

Reaction Rate (Base Component) = Numerator / Denominator

Numerator: $1414000000 \cdot \exp(-70748/(8.31451 \cdot T)) \cdot R_1^{0.23} \cdot 2507000000000 \cdot \exp(-92059/(8.31451 \cdot T)) \cdot P_1$

Denominator: 1

Expression Variables: Temperature (T) in K, reactant amounts (R1, R2, ..., Rn) and product amounts (P1, P2, ..., Pn) in the selected amount unit, reaction rate (r) in the selected velocity unit.

Amount Unit: Velocity Unit: kmol/[kg.s]

Use '.' as the decimal separator on math expressions.

Cancel OK

Figura 5-2: Reacción catalítica heterogénea DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

2.2.7 Redes neuronales artificiales

Se considera a las Redes Neuronales Artificiales una familia de técnicas de procesamiento de información, construida en base de como procesan las neuronas datos del sistema nervioso biológico, las Redes Neuronales Artificiales son capaces de resolver problemas lineales, no lineales e impredecibles de tal manera se lo consiga de una forma rápida y eficaz gracias a la utilización de una gran cantidad de datos. Estas RNA disponen de unidades procesadoras las cuales poseen varias entradas donde estas son combinadas y procesadas por una función de transferencia y los valores finales obtenidos son reflejados en las salidas respectivas de la Red Neuronal Artificial (Rivas Asanza & Manzón Olivio, 2017, pp. 16-26).

A continuación, se describen características fundamentales de una red neuronal:

- La topología de red: es aquella que representa la capacidad de la red, es decir el número de neuronas que se encontraran en las diferentes capas de la RNA, la topología dependerá mucho de la complejidad del problema a resolver.

- La red neuronal se encuentra constituida por muchos sistemas de aprendizaje, lo cual le ayuda a la facilidad de ser entrenada y ser efectiva en los datos predichos de salida.
- Existen dos tipos de entrenamientos para una red neuronal, la primera trata en entrenarla en la fase de aprendizaje con la finalidad de que aquellos pesos sinápticos se adecuen y se modifiquen a la red (Rivas Asanza & Manzón Olivio, 2017, pp. 16-26).

Ventajas

- Presentan un aprendizaje adaptativo por lo que aprenden tareas en base a conjuntos de datos los cuales son representados como entradas y pesos.
- Son capaces de auto-organización de la información que reciben en el periodo de aprendizaje mediante métodos matemáticos como Adeline, Perceptron entre otros.
- La operación se la realiza en tiempo real mediante el uso de computadoras o dispositivos de hardware especial (Rivas Asanza y Manzón Olivio, 2017, pp. 16-26).

Desventajas

- Son complejas para el aprendizaje de grandes tareas debido a la naturaleza que estas presentan ante la resolución.
- Requieren de un elevado tiempo de aprendizaje, lo cual se ve relacionado con encontrar el número de patrones requeridos y la flexibilidad para reconocerlos a los mismos.
- Necesitan de un gran tiempo de convergencia por tal motivo requieren de un gran conjunto de datos mínimo 100 datos en la etapa de entrenamiento (Rivas Asanza & Manzón Olivio, 2017, pp. 16-26).

2.2.7.1 Redes neuronales monocapa

Es la red neuronal más simple, se encuentra conformada por solo una capa cuya finalidad es proyectar la capa de entrada a una capa de salida en la cual se realizan los respectivos cálculos mediante la función de transferencia, es muy usada en casos que se tiene distorsiones de señal en los datos (Rivas Asanza & Manzón Olivio, 2017, pp. 16-26).

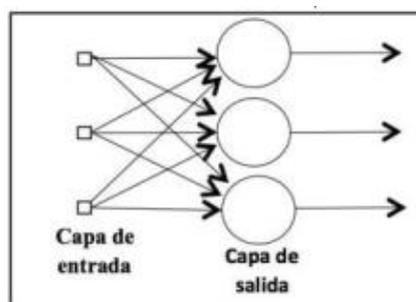


Figura 6-2: Red neuronal monocapa

Fuente: Rivas,A .; Manzón O. 2017

2.2.7.2 *Redes neuronales multicapa*

En este tipo de redes neuronales se encuentran conformadas por un conjunto de capas intermedias entre la entrada y la salida a las cuales se les conoce como capas ocultas donde se realizan los diferentes cálculos matemáticos, una característica importante es que estas redes pueden estar total o parciamente conectadas.

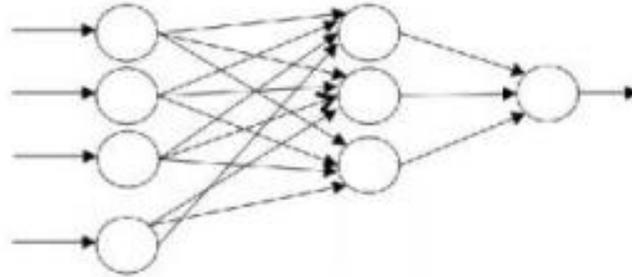


Figura 7-2: Red neuronal multicapa

Fuente: Rivas,A .; Manzón O. 2017

CAPÍTULO III

3 METODOLOGÍA

El presente trabajo de integración curricular es una propuesta tecnológica, que está destinada a la simulación del proceso de producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva y redes neuronales, cuya metodología propuesta es la siguiente:

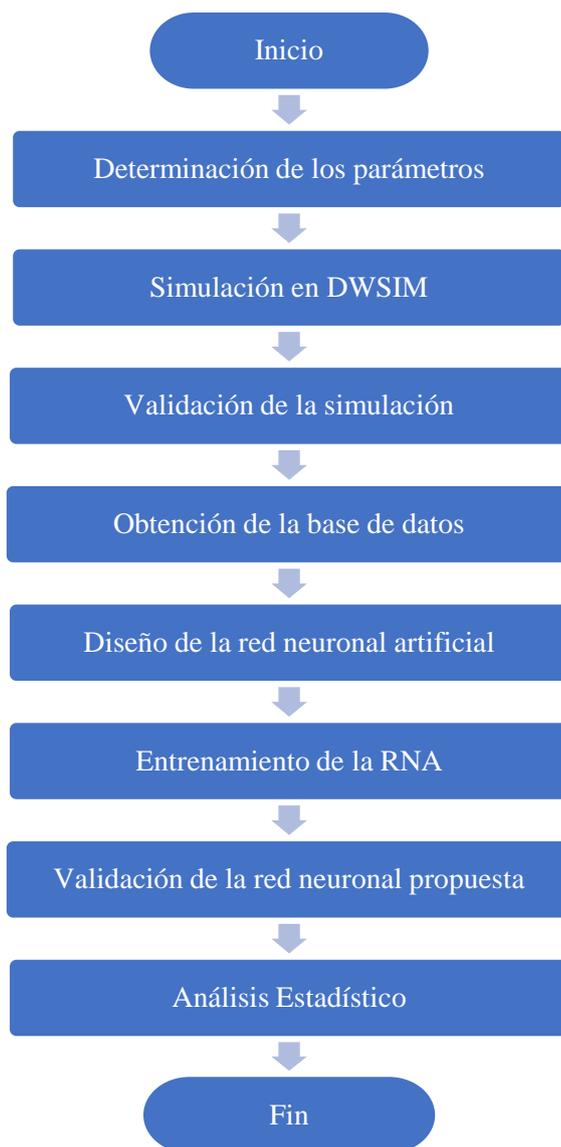


Gráfico 1-3: Metodología del trabajo de titulación

Realizado por: García, Cristian, 2021

Donde se utilizó el software DWSIM, que genera una base de datos a partir de la manipulación de variables necesaria para el modelado de la red neuronal artificial (RNA), cuyo propósito es predecir los flujos y fracciones molares más significativos del proceso, tomando en consideración

lo antes mencionado la investigación posee un enfoque cuantitativo debido a que emplea una base de datos numérica.

Por último, se llevó a cabo el respectivo análisis estadístico de los resultados obtenidos tanto de la simulación como de la red neuronal diseñada, para las respectivas validaciones y conclusiones del trabajo de titulación mediante el uso del grado de error cuadrático y eficiencia que ofrecen.

La información recopilada para el trabajo ha sido obtenida de varias fuentes bibliográficas como:

- Artículos científicos de alto impacto conseguidos del sitio web “ScienceDirect”.
- Sitios webs de ayuda de DWSIM y Matlab
- Documentos digitales de la web

3.1 Establecimiento de parámetros

Se utilizó la información del artículo científico “Self-heat recuperative dividing wall column for enhancing the energy efficiency of the reactive distillation process in the formic acid production process”, realizado por Felicia; et al, 2015, pp. 144-152 del Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Ciencia y Tecnología de Taiwán para la simulación del proceso de producción de ácido fórmico en el software DWSIM para su posterior generación de base de datos.

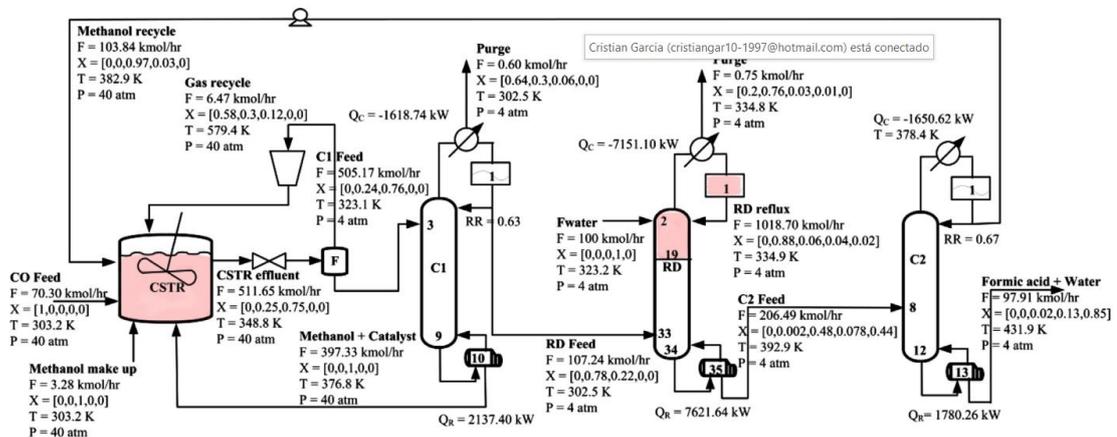


Gráfico 2-3: Diagrama del proceso de producción de ácido fórmico

Fuente: Felicia; et al. 2015

3.1.1 Operacionalización de variables

La primera reacción química sucede en el reactor de agitación continua donde ingresa monóxido de carbono y una pequeña cantidad de agua, todo el monóxido de carbono se transforma en formiato de metilo, mientras que el metanol es el reactivo en exceso, por lo cual se hace presente

en el flujo de salida del reactor. Cabe mencionar que al reactor ingresan dos recirculaciones que son provenientes de las columnas de destilación posteriores.

Tabla 1-3: Condiciones operativas del reactor de agitación continua

VARIABLES	CANTIDAD	UNIDAD
<i>Temperatura</i>	348.8	K
<i>Presión</i>	40	atm
<i>Volumen del reactor</i>	4.053	m ³
<i>Flujo molar de CO</i>	70.3	kmol/h
<i>Flujo molar de recirculado C-1</i>	397.33	kmol/h
<i>Flujo molar de recirculado C-2</i>	103.84	kmol/h
<i>Flujo molar de Metanol</i>	3.28	kmol/h
<i>Flujo de salida del reactor</i>	511.65	kmol/h
<i>Fracción másica de formiato metilo</i>	25	%

Fuente: Felicia; et al. 2015

Realizado por: García, Cristian, 2021

El flujo de formiato de metilo y metanol ingresa a la torre de destilación C-1, cuya torre tiene como finalidad separar una parte significativa de metanol para ser recirculado hacia el reactor CSTR siendo este el flujo de residuo, mientras que el destilado se dirige hacia la columna reactiva, las variables que intervienen en la columna son descritas a continuación.

Tabla 2-3: Condiciones operativas de Columna de destilación C-1

VARIABLES	CANTIDAD	UNIDAD
<i>Presión</i>	4	atm
<i>N° de platos</i>	10	-
<i>N° de plato de entrada de la alimentación</i>	3	-
<i>Relación de reflujo</i>	0.63	-
<i>Flujo de alimentación</i>	505.17	kmol/h
<i>Flujo de destilado</i>	107.24	kmol/h
<i>Flujo de residuo</i>	397.33	kmol/h
<i>Fracción másica de C₃H₆O₂ en la alimentación</i>	25	%
<i>Fracción másica de C₃H₆O₂ en el destilado</i>	78	%

Fuente: Felicia; et al. 2015

Realizado por: García, Cristian, 2021

La columna reactiva tiene como objeto realizar la reacción de hidrólisis, cuyos reactivos son formiato de metilo y agua que son transformados para obtener ácido fórmico y metanol, donde el formiato de metilo es el reactivo limitante de la reacción. El agua ingresa por el plato número 2 mientras que el flujo de formiato de metilo ingresa por el plato número 33, la zona reactiva de la torre se encuentra desde el plato 1 al 19 donde ocurre dicha reacción.

Tabla 3-3: Condiciones operativas de la Columna reactiva de destilación RD

VARIABLES	CANTIDAD	UNIDAD
<i>Presión</i>	4	atm
<i>N° de platos</i>	35	-
<i>N° de plato de entrada de la alimentación</i>	2, 33	-
<i>Zona reactiva</i>	1 a 19	-
<i>Reflujo</i>	1018.7	kmol/h
<i>Flujo de alimentación (C₃H₆O₂, CH₃OH)</i>	107.24	kmol/h
<i>Fracción másica de C₃H₆O₂ en la alimentación</i>	78	%
<i>Flujo de alimentación (H₂O)</i>	100	kmol/h
<i>Flujo de destilado</i>	0.75	kmol/h
<i>Flujo de residuo</i>	206.49	kmol/h
<i>Fracción másica de CH₂O₂ en el residuo</i>	44	%

Fuente: Felicia; et al. 2015

Realizador por: García, Cristian, 2021

La columna de destilación C-2 está destinada a la eliminación total de metanol el cual es el destilado de la torre que será recirculado hacia el reactor CSTR, mientras que el residuo estará formado solo por ácido fórmico y agua. Cabe destacar que la finalidad de la recirculación es mantener circulando al metanol por todo el proceso, ya que se necesita una cantidad mínima para que funcione dicho proceso, por lo tanto, se tiene una alimentación de metanol para recuperar las pérdidas que se tengan en el proceso.

Tabla 4-3: Condiciones operativas de la Columna de destilación C-2

VARIABLES	CANTIDAD	UNIDAD
<i>Presión</i>	4	atm
<i>N° de platos</i>	13	-
<i>N° de plato de entrada de la alimentación</i>	8	-
<i>Relación de reflujo</i>	0.67	-
<i>Flujo de alimentación (CH₂O₂)</i>	206.49	kmol/h
<i>Fracción másica de CH₂O₂ en la alimentación</i>	78	%
<i>Flujo de destilado (CH₃OH, H₂O)</i>	103.84	kmol/h
<i>Fracción másica de CH₃OH en el destilado</i>	97	%
<i>Flujo de residuo (CH₂O₂, H₂O)</i>	97.91	kmol/h
<i>Fracción másica de CH₂O₂ en el residuo</i>	85	%

Fuente: Felicia; et al. 2015

Realizado por: García, Cristian, 2021

3.2 Simulación en DWSIM

La simulación se la llevó a cabo con el paquete termodinámico “UNIQAC” y el paquete “Raoult's Law”, donde este último es utilizado para la línea de flujo de agua, mientras que las torres de destilación se encuentran diseñadas con “Chao Seader”, “RAOULT LAW” y “DECHEMA” para C-1, RD y C-2 respectivamente. Las columnas son llevadas a cabo con CHEMSEP que se encuentra incorporada en el Software DWSIM.

A continuación, se estableció las variables de operación que han sido ingresadas en el simulador, sin embargo, algunas variables pueden ser cambiadas con otras para encontrar un error mínimo en la validación del proceso de ácido fórmico.

Tabla 5-3: Variables operativas utilizadas en la simulación

Variables	Alimentación 1	Alimentación 2	Recirculación 1	Recirculación 2	Recirculación 2	Reactor	Columna C-1	Columna C-2	Columna C-3
Temperatura (°K)	303.2	303.2	579.4	397.33	382.9	348.8	302.5	334.8	
Presión (atm)	40	40	40	40	40	40	4	4	4
Volumen (m3)	-	-	-	-	-	4.053	-	-	-
# de platos	-	-	-	-	-	-	10	35	13
# platos de alimentación	-	-	-	-	-	-	3	2,33	8
Flujo molar (kmol/h)	70.3	3.28	6.47	397.33	103.84	-	-	100	-
Fracción másica de CH ₂ O ₂	0	0	0	0	0	-	0	0	-
Fracción másica de C ₃ H ₆ O ₂	0	0	0.3	0	0	-	0	0	-
Fracción másica de CH ₃ OH	0	1	0.12	1	0.97	-	0	0	-
Fracción másica H ₂ O	0	0	0	0	0.03	-	0	1	-
Fracción másica CO	1	0	0.58	0	0	-	0	0	-
Flujo molar del destilado (kmol/h)	-	-	-	-	-	-	107.24	1018.7	103.84
Flujo molar del residuo (kmol/h)	-	-	-	-	-	-	397.33	206.49	97.91

Fuente: Felicia; et al. 2015

Realizador por: García, Cristian, 202

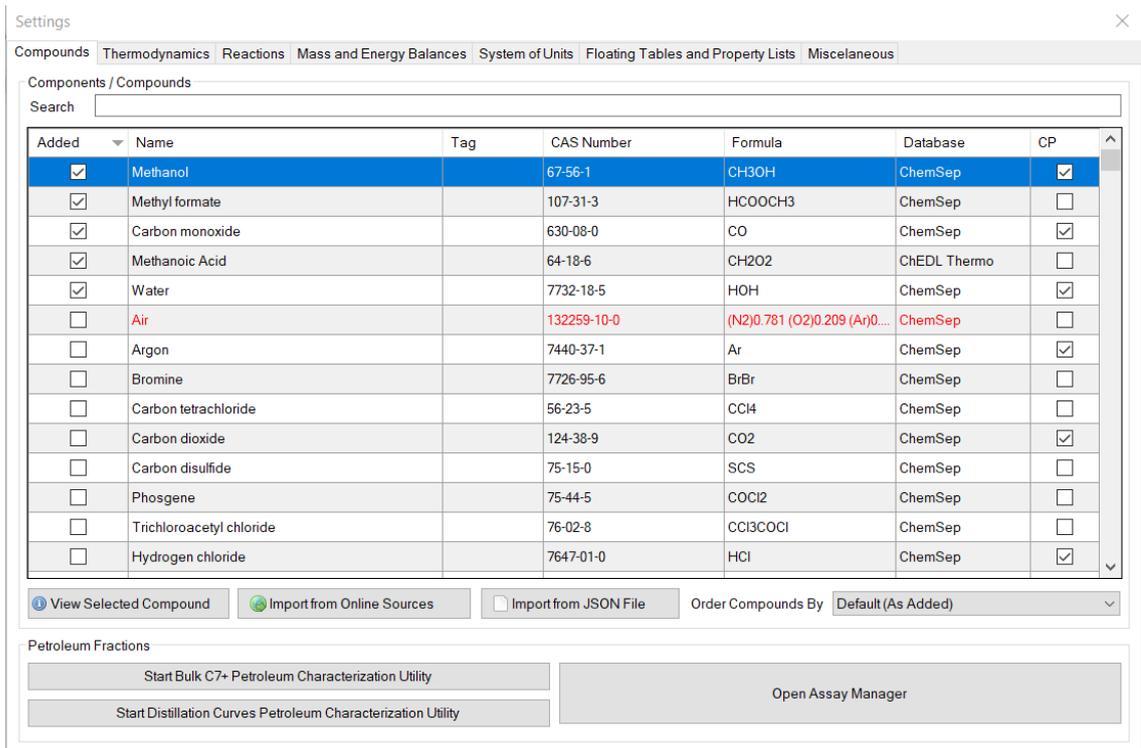


Figura 1-3: Selección de compuestos químicos en DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

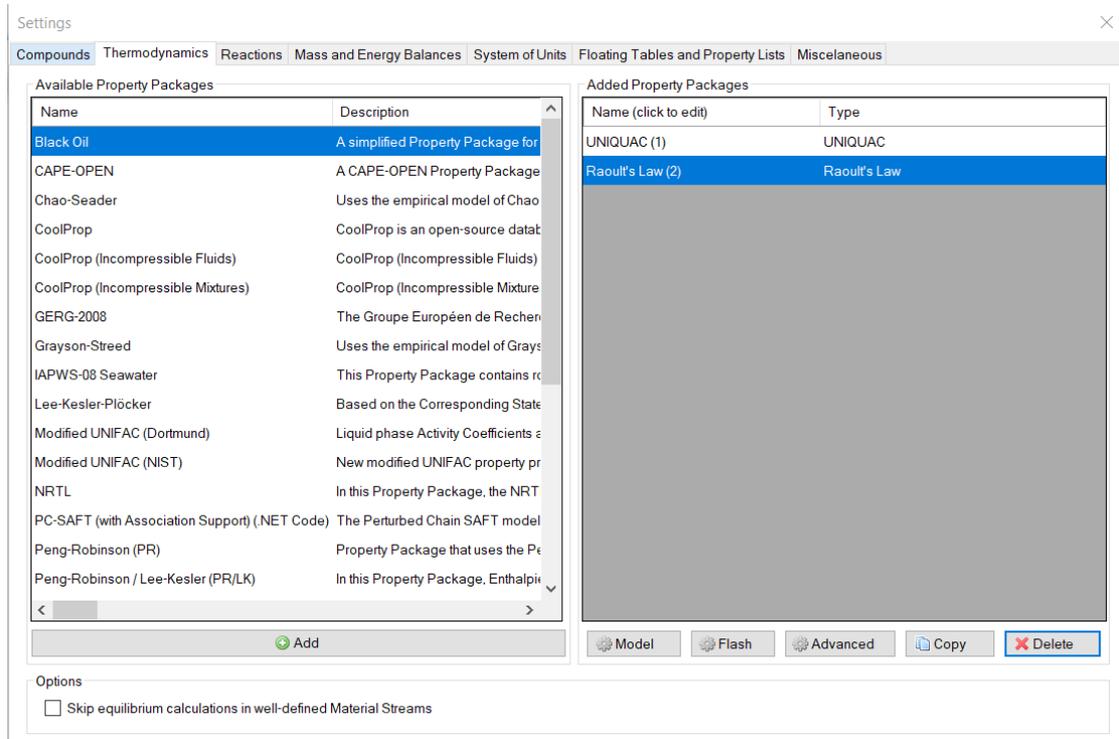


Figura 2-3: Implementación de paquetes termodinámicas

Realizado por: García, Cristian, 2021

CSTR-003 (Continuous Stirred Tank Reactor (CSTR))

General Info

Object: CSTR-003

Status: Calculated (10/29/2020 2:51:57 PM)

Linked to:

Connections

Inlet Stream: MSTR-006

Outlet Stream 1: MSTR-001

Outlet Stream 2:

Energy Stream: ESTR-002

Calculation Parameters

Reaction Set: Cristian

Calculation Mode: Define Outlet Temperature

Outlet Temperature: 350 K

Reactor Volume: 4.053 m³

Headspace: 0 m³

Reactor Pressure Drop: 0 Pa

Catalyst Amount: 0.5 kg

Results

General Reactions Conversions

Property	Value	Units
Delta-T	-1.96716	K
Heat Load	-75217.3	kW
Residence time	562.841	s

Property Package Settings

Property Package: UNIQUAC (1)

Notes

Gráfico 3-3: Variables definidas en el reactor de agitación continua

Realizado por: García, Cristian, 2021

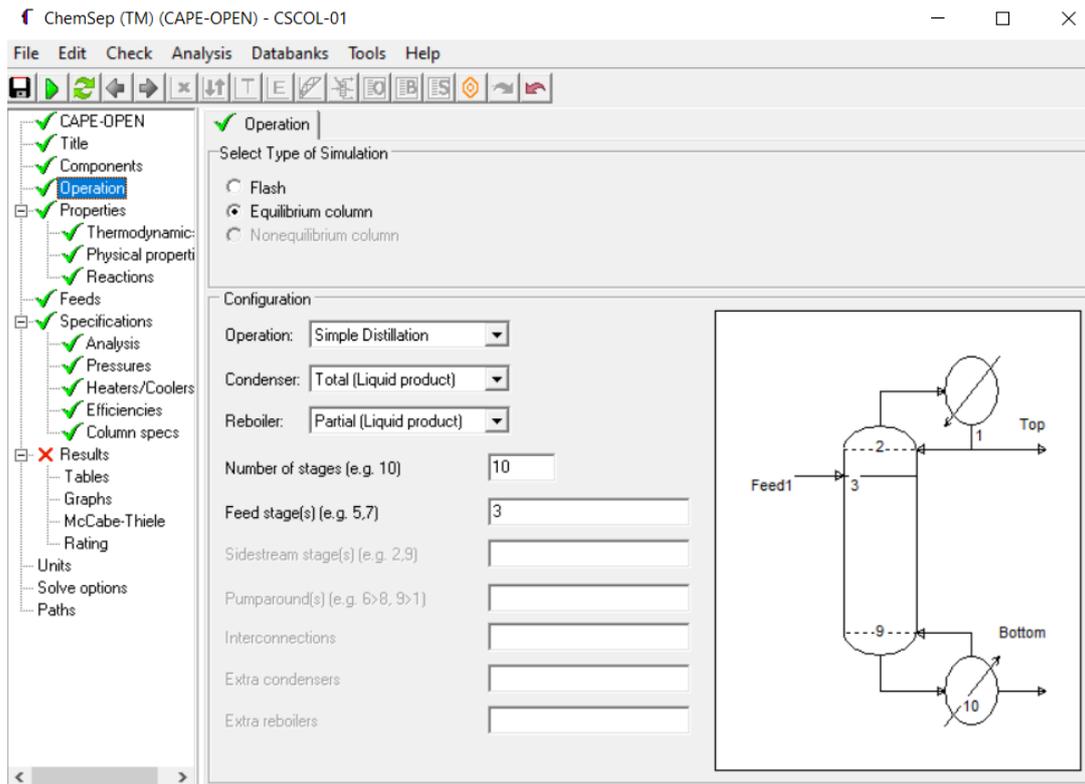


Gráfico 4-3: Diseño de la columna de destilación C-1

Realizado por: García, Cristian, 2021

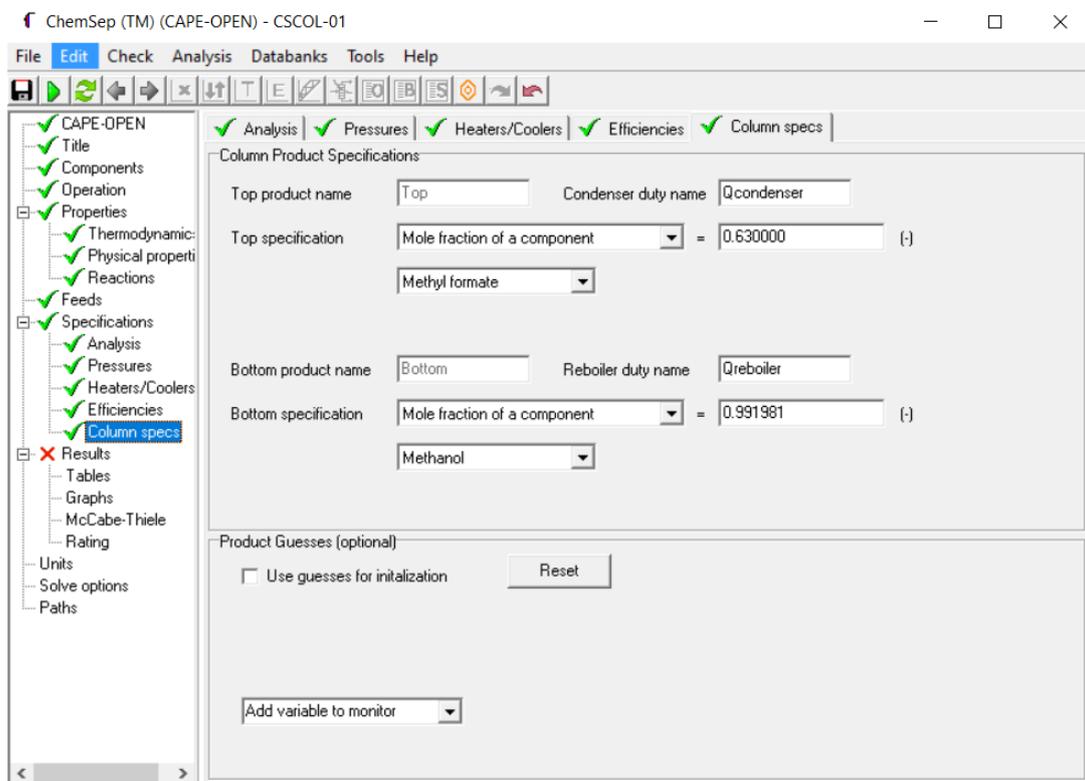


Gráfico 5-3: Especificaciones de la columna C-1

Realizado por: García, Cristian, 2021

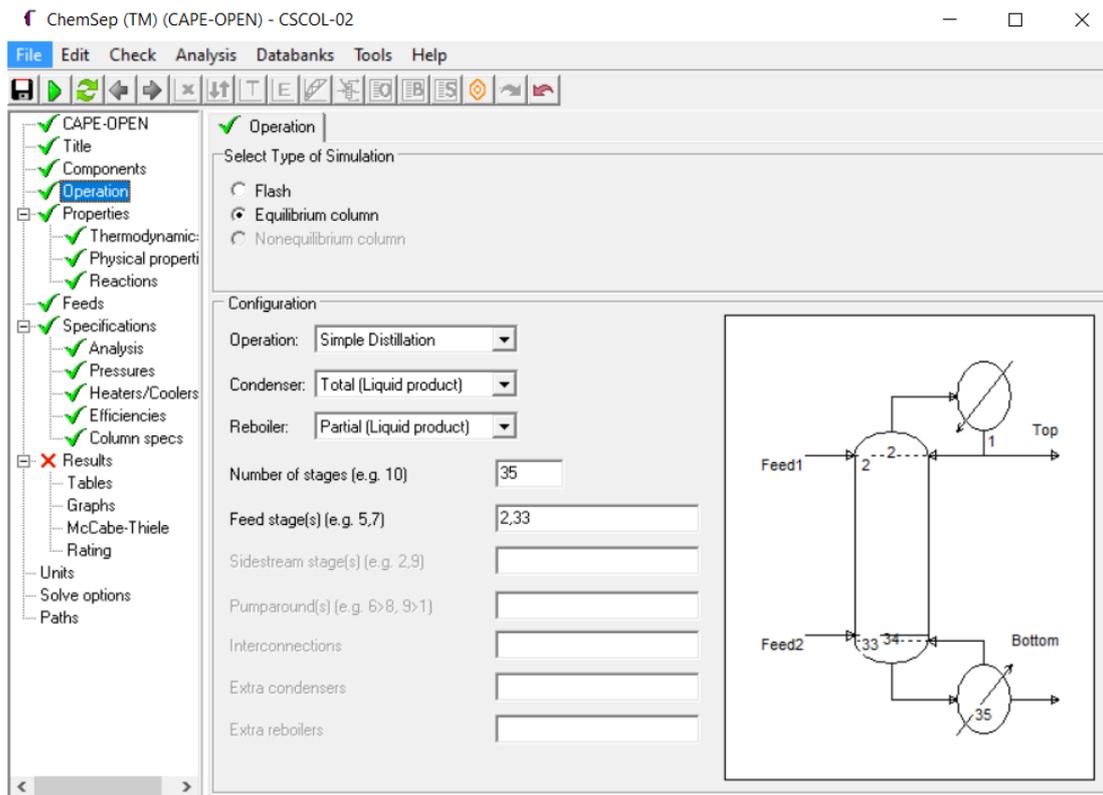


Gráfico 6-3: Diseño de la columna de destilación RD

Realizado por: García, Cristian, 2021

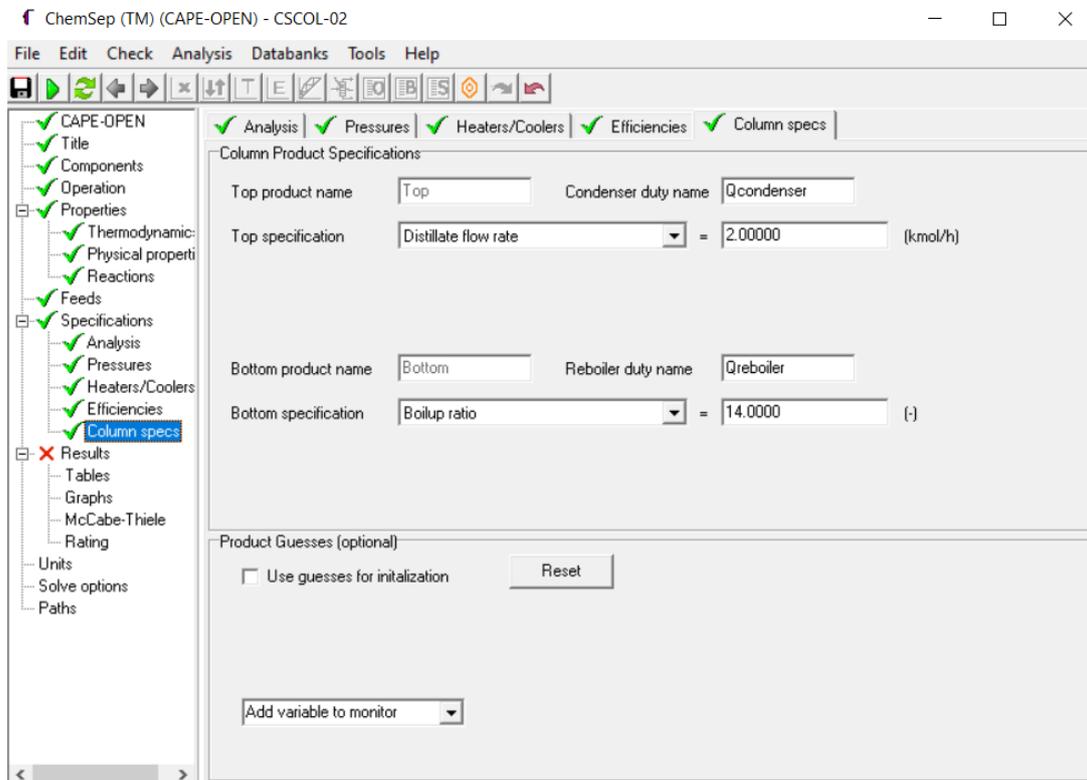


Gráfico 7-3: Especificaciones de la columna RD

Realizado por: García, Cristian, 2021

En la siguiente gráfica se establecen los criterios necesarios de la reacción química en la columna de destilación reactiva tales como los productos y reactivos (formiato de metilo, agua, metanol y ácido metanoico), la ecuación estequiométrica, el tipo de reacción, la base cinética de la ecuación, la ecuación cinética, el volumen de los platos y la zona reactiva de la torre de destilación.

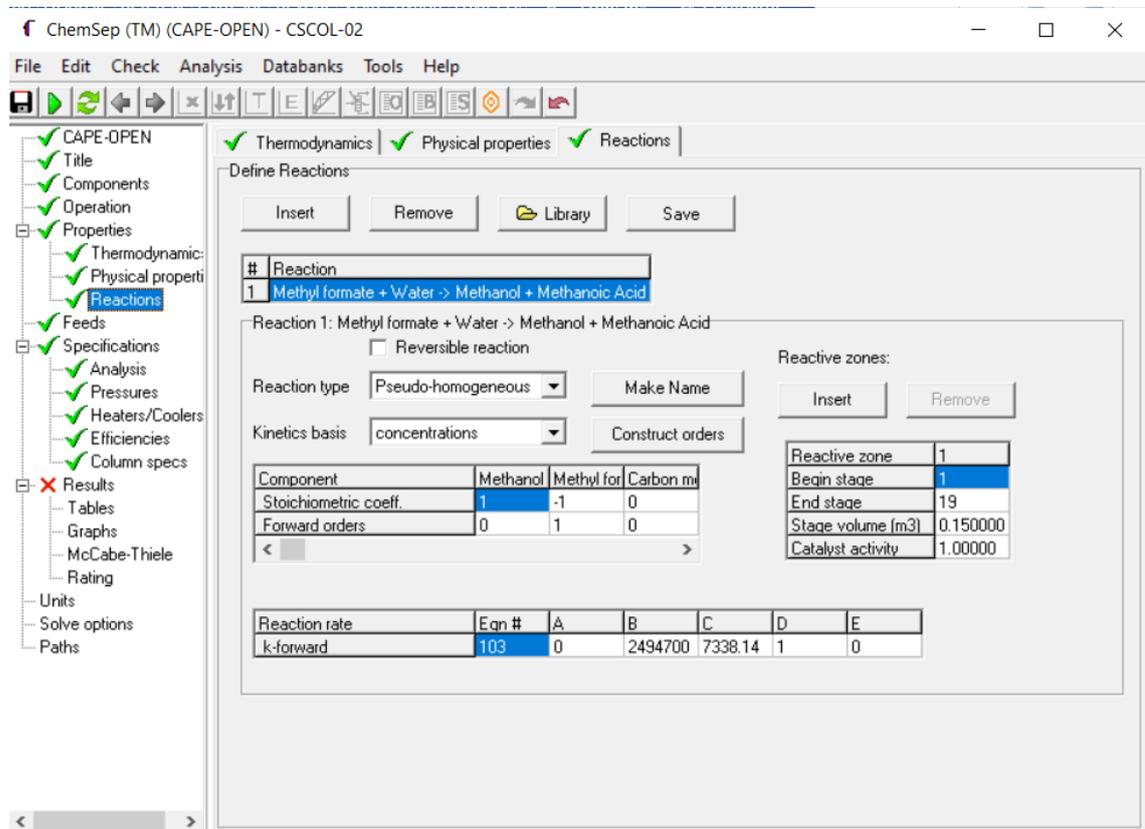


Gráfico 8-3: Definición de reacción química en la columna RD

Realizado por: García, Cristian, 2020

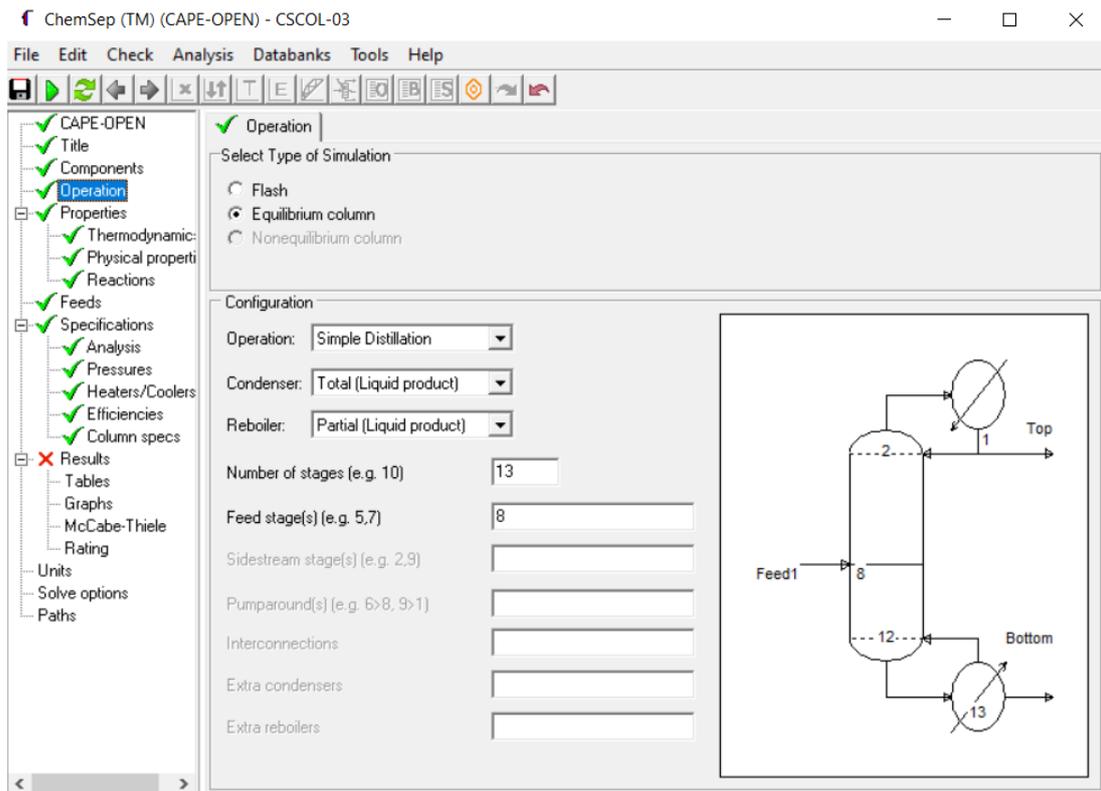


Gráfico 9-3: Diseño de la columna de destilación C-2

Realizado por: García, Cristian, 2021

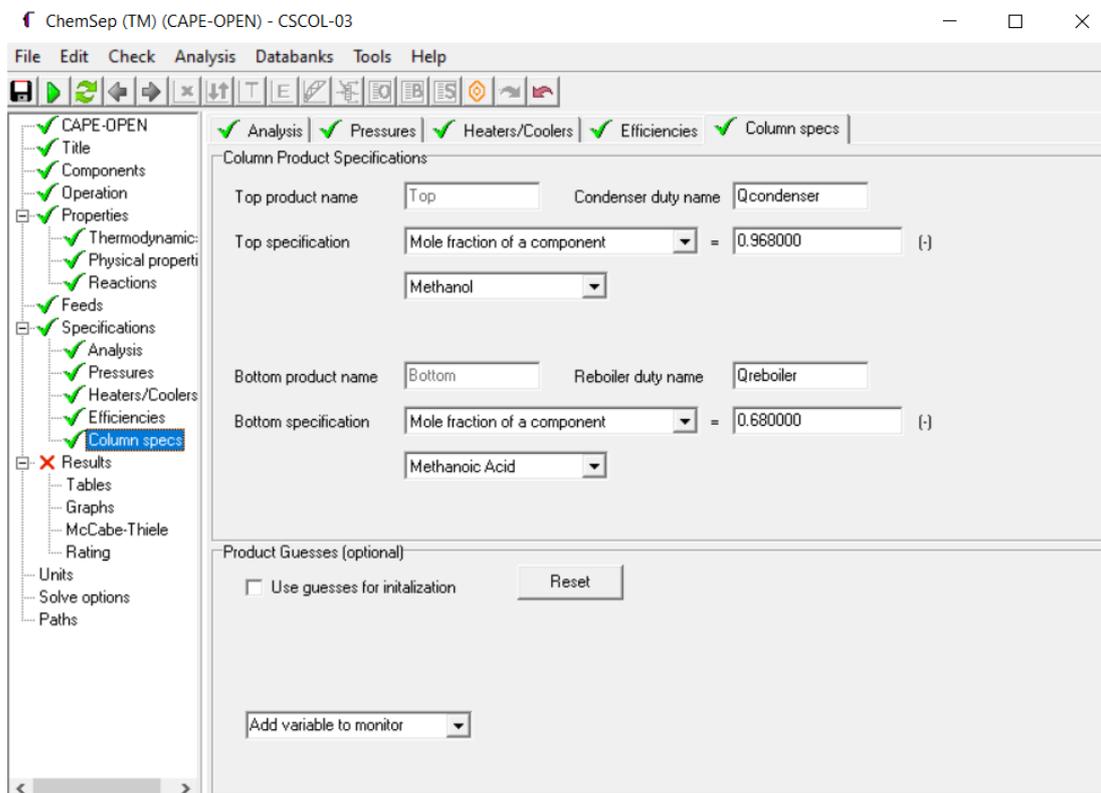


Gráfico 10-3: Especificaciones de la columna C-2

Realizado por: García, Cristian, 2021

3.3 Validación de la simulación

Los resultados obtenidos de la simulación son detallados mediante el uso de tablas de propiedades que ofrece el simulador DWSIM, donde las variables de interés para la validación son flujo molar y fracción másica del residuo de la columna C-2 debido que aquello hace referencia al ácido fórmico producido.

Para poder validar la simulación se debe tener un error porcentual menor al 5% en las variables de interés entre el valor definido en bibliografía y el valor obtenido de DWSIM, de esta manera se asegura la confiabilidad del proceso de producción de ácido fórmico.

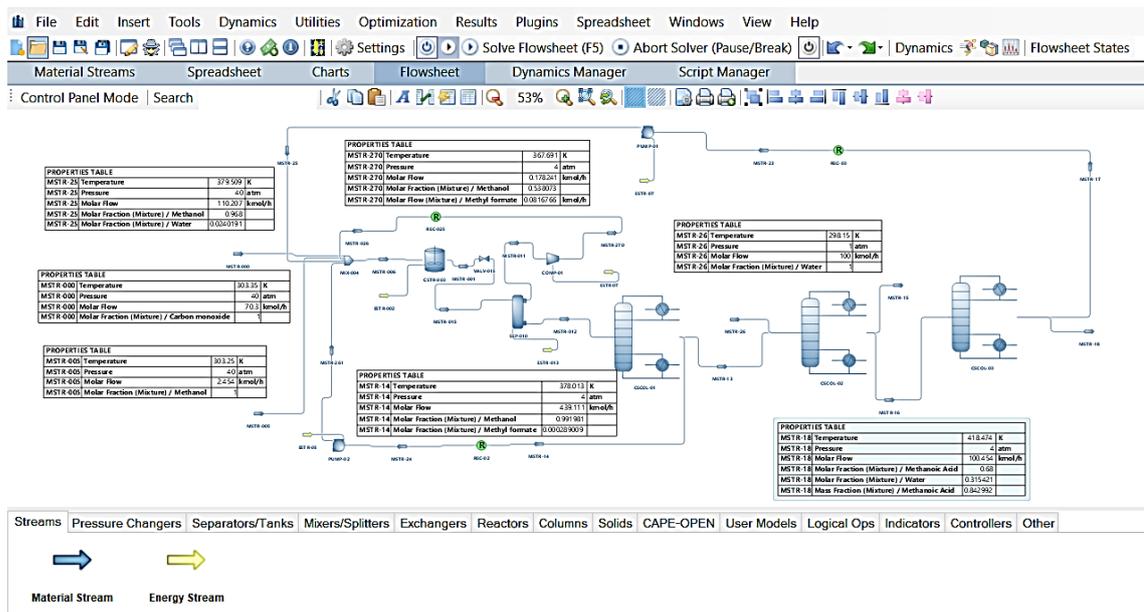


Gráfico 11-3: Tablas de resultados en DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

3.4 Base de datos

Después de validar el proceso de ácido fórmico se prosiguió a realizar la base de datos para diseñar la red neuronal en Matlab, la cual consiste en alterar las diferentes variables de operación para obtener varios resultados, donde aquellos funcionaran como entradas y salidas respectivamente en el diseño de la Red Neuronal Artificial, la base de datos se encuentra conformada por 117 pares de datos, donde los variables de entrada son “Flujo molar de CO”, “Flujo molar de H₂O” y “Presión de columna C-1” mientras que los datos de salida son “Flujo de ácido fórmico”, “Fracción molar de AF”, “Fracción molar FM” y “Flujo molar de CH₃OH”.

Tabla 6–3: Base de datos usada en la RNA

Flujo molar de CO	Flujo molar de H2O	Presión de columna C-1	Flujo de ácido fórmico	Fracción molar AF	Fracción molar MF	Flujo molar de METANOL
70.3	100	4	100.454	0.67503	0.12893	2.45400
70.3	100	5	100.599	0.67902	0.13110	2.59906
70.3	110	4	110.171	0.62014	0.12751	2.17224
70.3	110	5	110.172	0.62013	0.12749	2.17218
70.3	115	4	115.094	0.59164	0.12750	2.09425
70.3	115	5	115.094	0.59164	0.12739	2.09419
75.3	105	4	105.645	0.69391	0.13694	2.64498
75.3	105	5	105.645	0.69391	0.13693	2.64499
75.3	110	4	110.311	0.66456	0.13692	2.31075
75.3	115	4	115.155	0.63673	0.13699	2.15534
75.3	120	4	120.030	0.61105	0.13693	2.03023
75.3	120	5	120.030	0.60749	0.13687	2.03015
80.3	110	4	110.839	0.70656	0.14510	2.83909
80.3	110	5	110.839	0.70656	0.14508	2.83907
80.3	115	4	115.498	0.67821	0.14506	2.49794
80.3	120	5	120.176	0.65215	0.14505	2.17586
80.3	125	4	125.044	0.62731	0.14498	2.04424
80.3	125	5	125.044	0.62728	0.14493	2.04393
85.3	115	4	116.037	0.71796	0.15279	3.03676
85.3	115	5	116.037	0.71797	0.15315	3.03659
85.3	125	4	125.354	0.66463	0.15272	2.35357
85.3	125	5	125.354	0.66463	0.15272	2.35352
85.3	130	4	130.036	0.64076	0.15268	2.03615
85.3	130	5	130.036	0.64075	0.15277	2.03612
90.3	120	4	121.237	0.72840	0.16043	3.23735
90.3	120	5	121.237	0.72840	0.16056	3.23741
90.3	125	4	125.880	0.70154	0.16045	2.87981
90.3	130	4	130.539	0.67651	0.16042	2.53936
90.3	135	4	135.214	0.65313	0.16038	2.21419
90.3	135	5	135.214	0.65313	0.16033	2.14190
95.3	130	4	131.076	0.71188	0.17606	3.07607
95.3	130	5	131.076	0.71188	0.17624	3.07608
95.3	140	4	140.396	0.66463	0.17596	2.39647
95.3	140	5	140.396	0.66463	0.17593	2.39647
95.3	145	4	145.078	0.64320	0.17592	2.07785
95.3	145	5	145.078	0.64320	0.17866	2.07785
100.3	130	4	131.645	0.74680	0.18410	3.64513
100.3	130	5	131.645	0.74680	0.18419	3.64514
100.3	140	4	140.703	0.69751	0.18399	2.70273
100.3	145	4	145.403	0.67527	0.18394	2.40260
100.3	145	5	145.583	0.67542	0.18394	2.58300
105.3	135	4	136.616	0.75622	0.19244	3.61602

105.3	135	5	136.871	0.75636	0.19238	3.87101
105.3	140	4	141.511	0.73290	0.19231	3.29679
105.3	150	4	150.829	0.68982	0.19219	2.83071
105.3	150	5	150.829	0.68974	0.19209	2.82968
110.3	140	4	142.071	0.76322	0.19969	4.07131
110.3	140	5	142.061	0.76244	0.19902	4.06104
110.3	145	4	146.703	0.74033	0.19963	3.70480
110.3	150	4	150.996	0.71935	0.19966	3.15541
110.3	155	4	156.015	0.69833	0.19950	3.01478
110.3	155	5	156.014	0.69826	0.19939	3.01376
115.3	140	4	142.677	0.79424	0.20701	4.67700
115.3	140	5	142.677	0.79423	0.20703	4.67700
115.3	150	4	151.893	0.74683	0.20685	3.89432
115.3	150	5	151.893	0.74677	0.20675	3.89342
115.3	155	4	156.535	0.72567	0.20678	3.52559
115.3	155	5	156.535	0.72559	0.20667	3.53515
120.3	145	4	147.894	0.80001	0.21405	4.89371
120.3	145	5	147.894	0.80001	0.21404	4.89372
120.3	150	4	152.482	0.77596	0.21395	4.48331
120.3	155	5	157.093	0.75335	0.21376	4.09253
120.3	160	4	161.724	0.73232	0.21383	3.72374
120.3	160	5	161.723	0.73227	0.21371	3.72295
125.3	155	4	157.696	0.78199	0.22087	4.69631
125.3	155	5	157.696	0.78199	0.22078	4.69633
125.3	160	4	162.298	0.75985	0.22080	4.29906
125.3	165	4	166.920	0.73897	0.22073	3.91964
125.3	170	4	171.558	0.71940	0.22067	3.55867
125.3	170	5	171.558	0.71936	0.22057	3.55799
130.3	160	4	162.911	0.78765	0.22779	4.91069
130.3	160	5	162.911	0.78765	0.22767	4.91071
130.3	165	4	167.509	0.76605	0.22759	4.50865
130.3	170	4	172.123	0.74561	0.22752	4.12374
130.3	170	5	172.222	0.74517	0.22740	4.22156
130.3	175	4	176.757	0.72638	0.22761	3.75663
130.3	175	5	176.757	0.72635	0.22751	3.75608
135.3	165	4	167.800	0.79304	0.23500	4.79971
135.3	165	5	168.126	0.79297	0.23474	5.12590
135.3	170	5	172.721	0.77196	0.23468	4.72057
135.3	175	4	177.336	0.75226	0.23476	4.33594
135.3	180	4	181.970	0.73380	0.23469	3.97061
135.3	180	5	181.969	0.73373	0.23456	3.96932
140.3	170	4	173.342	0.79797	0.24173	5.34248
140.3	170	5	173.342	0.79796	0.24156	5.34223
140.3	175	4	177.934	0.77753	0.24164	4.93406
140.3	180	4	182.548	0.75841	0.24156	4.54776
140.3	185	4	187.180	0.74045	0.24148	4.17938

140.3	185	5	187.178	0.74037	0.24133	4.17851
145.3	175	4	178.310	0.80264	0.24825	5.55958
145.3	175	5	178.310	0.80264	0.24809	5.55960
145.3	180	4	183.145	0.78257	0.24817	5.14501
145.3	185	4	187.749	0.76354	0.24815	4.74892
145.3	190	4	192.372	0.74567	0.24794	4.37185
145.3	190	5	192.371	0.74561	0.24779	4.37065
150.3	180	4	183.831	0.80982	0.25634	5.83067
150.3	180	5	183.828	0.80969	0.25613	5.82819
150.3	185	4	188.433	0.79125	0.25616	5.43265
150.3	185	5	188.431	0.79115	0.25596	5.43060
150.3	195	4	197.660	0.75583	0.25596	4.66118
150.3	195	5	197.660	0.75575	0.25575	4.65999
70.3	105	4	107.374	0.644028	0.1288436	2.24135
75.3	115	5	115.155	0.636729	0.1370021	2.15527
80.3	120	4	120.176	0.652166	0.1450198	2.17603
85.3	120	4	120.686	0.69033	0.152839	2.68648
90.3	130	5	130.539	0.676507	0.1604511	2.53938
95.3	135	4	135.729	0.687476	0.1760424	2.72869
100.3	135	4	136.023	0.721281	0.1840454	3.02296
105.3	145	4	145.972	0.710698	0.1923005	2.97363
110.3	150	5	151.353	0.718706	0.1994547	3.35288
115.3	145	4	147.273	0.769611	0.2069250	4.27324
120.3	155	4	157.092	0.753369	0.2138884	4.0929
125.3	165	5	166.919	0.738948	0.2206337	3.91938
135.3	170	4	172.721	0.771968	0.2348324	4.72076
140.3	180	5	182.547	0.758346	0.2414184	4.54672
145.3	185	5	187.749	0.763519	0.247977	4.74851
150.3	190	4	193.043	0.773240	0.2560602	5.04244

Realizado por: García, Cristian, 2021

La base de datos se dividió en dos subconjuntos donde los primeros 101 datos son designados para el entrenamiento y aprendizaje de la red neuronal mientras que los 16 datos restantes son utilizados para la validación externa de la red neuronal logrando con aquello una mayor confiabilidad en la RNA.

3.4.1 Consideraciones en la base de datos

- La variable de entrada “Flujo molar de CO” tiene como valor mínimo 70.30 kmol/h y un valor máximo de 150.3 kmol/h.
- Las presiones de entrada de la columna C-1 fluctúan entre 4 y 5 atm.
- El flujo molar de agua está relacionado con el flujo molar de ácido fórmico, cuya base consiste en 100 kmol/h de Agua que aumentara 5 kmol/h en función del flujo de ácido fórmico

3.5 Diseño de la red neuronal

La red neuronal propuesta consta de variables de entrada como “Flujo molar CO”, “Flujo molar de H₂O” y “Presión de columna C-1” donde las dos primeras son provenientes de flujos de alimentación del reactor de agitación continua (CSTR), mientras que las variables de salida son “Flujo de ácido fórmico”, “Fracción molar AF”, “Fracción molar MF” y “Flujo molar de Metanol”, las dos primeras son datos obtenidos del fondo de la torre de destilación C-2, la siguiente es la fracción molar del flujo de salida del reactor (CSTR) mientras que la última corresponde a una línea de alimentación de entrada del reactor.

Matlab dispone de una aplicación directa llamada “Neuronal Net Fitting”, la cual es una herramienta capaz de seleccionar variables de entrada y salida, crear y entrenar una red neuronal y evaluar su rendimiento con la ayuda de análisis como de regresión lineal, error cuadrático medio e histograma.

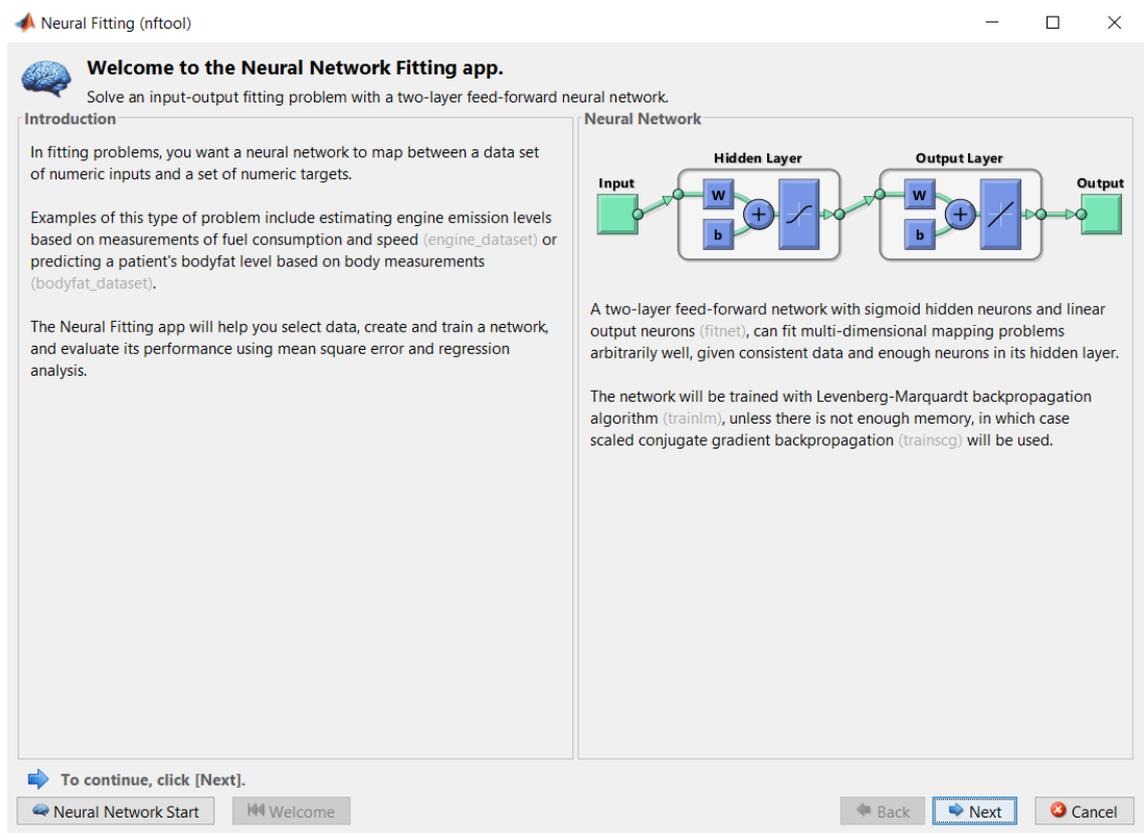


Figura 3-3: Aplicación Neural Fitting

Realizado por: García, Cristian, 2021

Los valores de las variables de entrada y salida de los diferentes experimentos son ingresados en un libro de Excel separadas por hojas las entradas y salidas, en disposición de una matriz en forma de columna ya que así se lo requiere en el software, la base de datos no debe contener ningún carácter alfabético para una mayor facilidad de control.

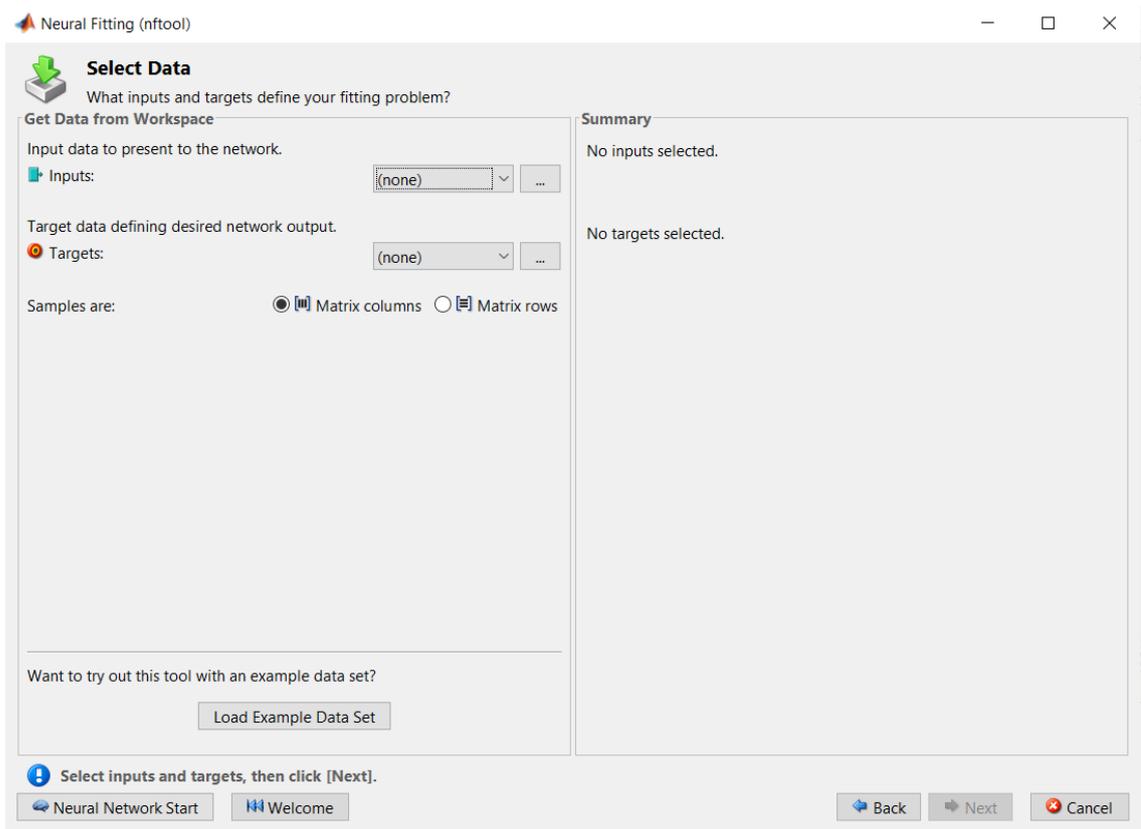


Figura 4-3: Ingreso de variables de entrada y salida, Matlab

Realizado por: García, Cristian, 2021

Matlab nos da la facilidad de poder distribuir el porcentaje de datos que queremos destinar a cada una de las fases de “Entrenamiento”, “Validación” y “Prueba” las cuales serán definidas a continuación:

Entrenamiento: Esta es la fase donde se entrena a la red y se ajusta en función del error que presente.

Validación: Cuya finalidad es para medir la generalización de la red y para detener el entrenamiento en el instante que la generalización deja de mejorar.

Prueba: No presenta ningún efecto en la fase de entrenamiento simplemente se encarga de proporcionar una medida cuantificativa del rendimiento de la red durante y después del entrenamiento de la red neuronal.

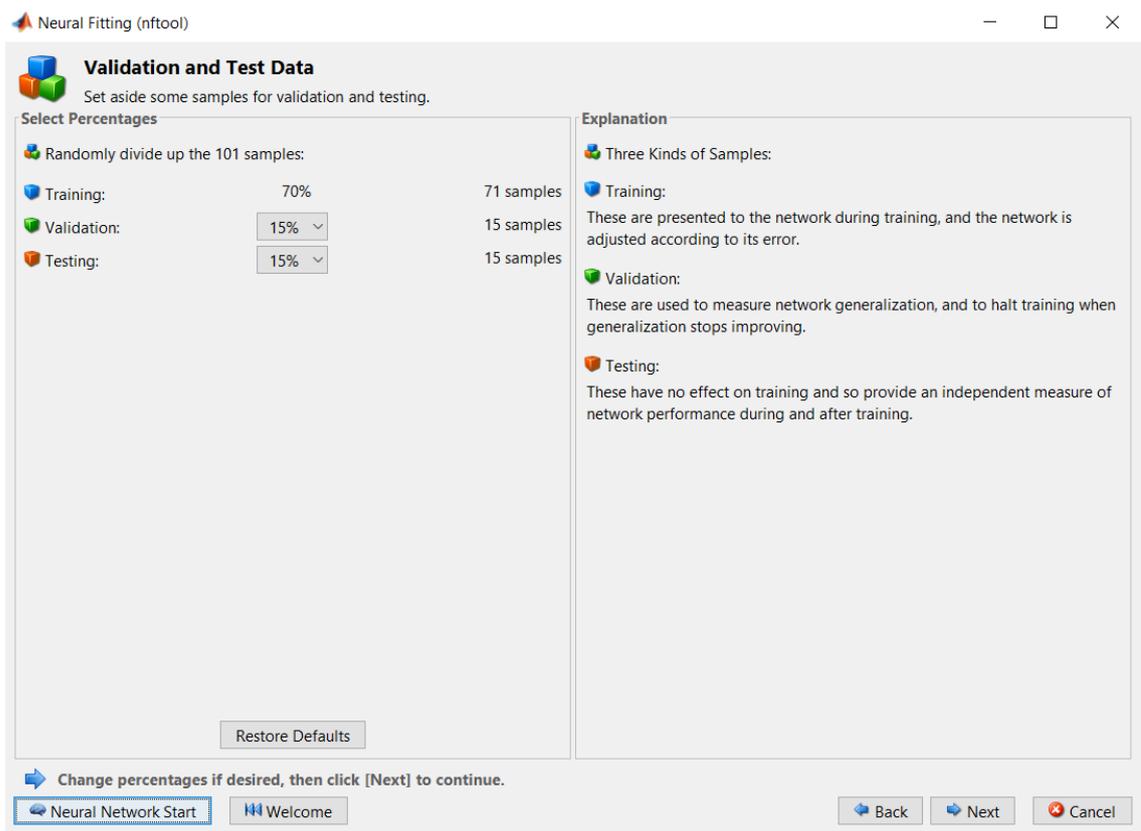


Figura 5-3: Configuración de “Validación y datos de prueba”

Fuente: Mark; et al. 2010

El número de neuronas ocultas y el algoritmo de entrenamiento son parámetros importantes para el diseño de la red neuronal artificial, siendo de gran importancia encontrar el número y el algoritmo correcto para tener un error cuadrático inferior y por consiguiente una red óptima del proceso. Matlab dispone de tres algoritmos de entrenamiento “Levenberg- Marquardt”, “Bayesian Regularization” y “Scaled Conjugate Gradient”, los cuales serán descritos a continuación:

- **Levenberg- Marquardt:** Este tipo de algoritmo necesita más memoria, pero requiere de un menor tiempo de procesamiento. La fase de entrenamiento se finaliza automáticamente cuando la generalización deja de presentar una mejoría, cuyo indicador es el error cuadrático medio.
- **Bayesian Regularization:** Este algoritmo resulta muy útil para la generalización de conjuntos de datos pequeños y ruidosos que son difíciles de procesar, sin embargo, se requiere un mayor tiempo. Se basa en la minimización adaptativa de los pesos.
- **Scaled Conjugate Gradient:** Este es un algoritmo con requerimiento de baja memoria y cuyo entrenamiento finaliza cuando la generalización deja de mejorar, en otras palabras cuando el error cuadrático aumenta en las muestras de validación (Mark; et al, 2010, pp. 44-55)

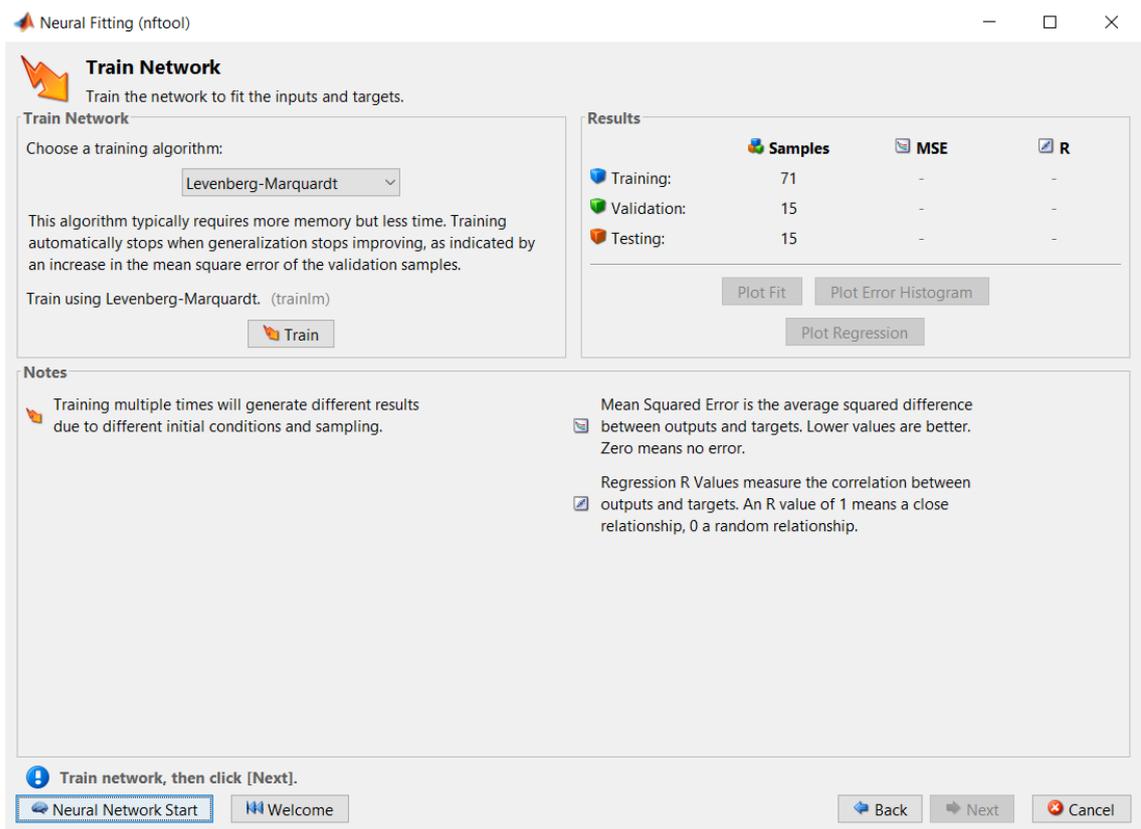


Figura 6-3: Selección de algoritmos de entrenamiento

Realizado por: García, Cristian, 2021

3.6 Validación de la Red Neuronal Artificial

La finalidad de la validación de la red neuronal es asegurar la confiabilidad de la misma, mediante herramientas estadísticas como la regresión lineal la cual investiga la relación entre dos o más variables con la finalidad de predecir una de ellas, el error cuadrático medio representa el error que existe entre cada uno de los datos predichos y los datos obtenidos de la simulación, el histograma de error tiene como propósito mostrar la dispersión de los datos predichos con su respectivo error, estas herramientas fueron obtenidas mediante el procesamiento de datos en MATLAB (Mark; et al, 2010, pp. 44-55).

Consideraciones a tomar para la validación:

- La regresión lineal (R) debe tener un valor de 1 o muy cercano a este para tener una adecuada correlación de datos mientras que si se obtiene un número inferior o cercano a 0 se dice que se tiene una relación aleatoria e inadecuada.
- El error cuadrático medio (MSE) debe tener un valor muy cercano a 0, mientras más inferior sea existirá un error menor entre los datos de salida.
- El histograma de error debe contener errores pequeños y no tan dispersos para asegurar que no exista una dispersión significativa de los errores y no presentar datos atípicos.

Cabe mencionar que la base de datos se ha dividido en dos partes una de ellas con 101 datos de los cuales son divididos en entrenamiento (70%), validación (15%) y prueba (15%) que forman parte del proceso del diseño de la red neuronal, los 16 datos restantes fueron utilizados para realizar una validación externa y verificar el rendimiento de la red ante nuevos datos de entrada que no se encuentra en la base de datos ingresada.

3.7 Análisis Estadístico

Para el presente trabajo de titulación se realizó un análisis estadístico el cual se basa en la comparación de los resultados de la simulación con los datos de salida de la red neuronal diseñada mediante el uso de variables como presión, flujos molares y fracciones molares de los diferentes compuestos químicos.

CAPÍTULO IV

4 GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1 Presupuesto

Tabla 2-4: Matriz de presupuesto

Presupuesto			
Actividad	Monto	Fuente de financiamiento	
		Interna	Externa
<i>Investigación y cursos de capacitación</i>	\$ 80	X	
<i>Impresión del documento</i>	\$ 35	X	
<i>Copias e impresiones</i>	\$ 30	X	
<i>Empastados</i>	\$ 55	X	
<i>Total</i>		\$ 200	

Realizado por: García, Cristian, 2021

4.2 Cronograma

Tabla 1-4: Cronograma de actividades

<i>Actividad</i>	<i>Meses</i>																			
	<i>Diciembre</i>				<i>Enero</i>				<i>Febrero</i>				<i>Marzo</i>				<i>Abril</i>			
	<i>Semanas</i>																			
	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>	<i>10</i>	<i>11</i>	<i>12</i>	<i>13</i>	<i>14</i>	<i>15</i>	<i>16</i>	<i>17</i>	<i>18</i>	<i>19</i>	<i>20</i>
<i>Revisión bibliográfica</i>																				
<i>Elaboración del anteproyecto</i>																				
<i>Identificación de variables</i>																				
<i>Simulación del sistema de producción de ácido fórmico</i>																				
<i>Obtención de datos experimentales</i>																				
<i>Validación de la simulación y la comparación de su eficiencia</i>																				
<i>Desarrollo del trabajo final</i>																				
<i>Análisis de costos</i>																				
<i>Revisión de trabajo final</i>																				
<i>Defensa de los resultados obtenidos</i>																				

Realizado por: García, Cristian, 2021

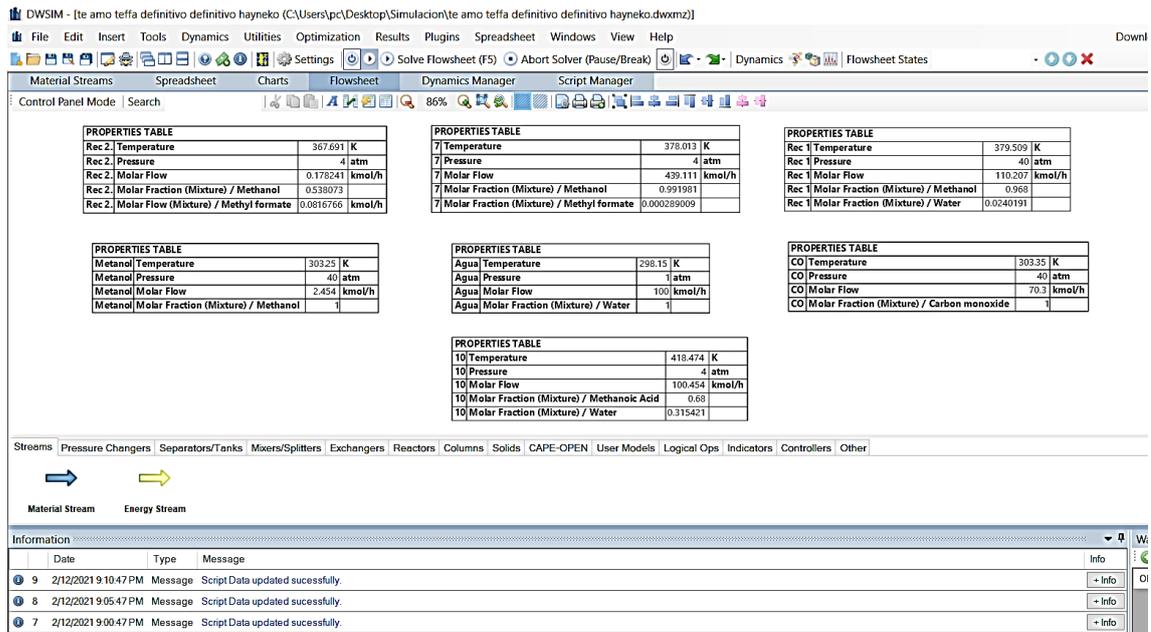


Gráfico 1-4: Resultados obtenidos de la simulación en DWSIM

Realizado por: García, Cristian, 2021

A continuación, se presentan los datos obtenidos de DWSIM de los diferentes flujos del reactor de agitación continua (CSTR) y las diferentes torres de destilación que se ven involucradas en el proceso de producción de ácido fórmico.

Tabla 3-4: Resultados del reactor CSTR

Reactor de agitación continua		
Flujos	Entrada	Salida
Presión (atm)	40	40
Flujo molar (kmol/h)	622.25	551.95
Fracción molar		
X _{CO}	0.113	6.52E-08
X _{H2O}	0.0097	0.0109
X _{HCCOCH3}	0.0014	0.129
X _{HCCOOH}	0.0003	0.0004
X _{CH3OH}	0.8755	0.8597

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 4-4: Resultados de la torre de destilación C-1

Torre de destilación C-1			
Flujos	Destilado	Residuo	Unidades
Presión	4	4	Atm
Flujo molar	112.812	438.96	kmol/h
Fracción molar			
X _{CO}	4.30E-10	3.99E-09	
X _{H2O}	0.0226	0.0079	
X _{HCOOCH3}	0.63	7.40E-05	
X _{HCOOH}	0.0017	3.57E-24	
X _{CH3OH}	0.3456	0.9919	

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 5-4: Resultados de la torre de destilación RD

Torre de destilación RD			
Flujos	Destilado	Residuo	Unidades
Presión	4	4	Atm
Flujo molar	2	210.812	kmol/h
Fracción molar			
X _{CO}	2.43E-08	6.56E-19	
X _{H2O}	0.0025	0.1619	
X _{HCOOCH3}	0.9951	0.0032	
X _{HCOOH}	0.0003	0.3253	
X _{CH3OH}	0.001955	0.5094	

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 6-4: Resultados de la torre de destilación C-2

Torre de destilación C-2			
Flujos	Destilado	Residuo	Unidades
Presión	4	4	Atm
Flujo molar	110.252	100.56	kmol/h
Fracción molar			
X _{CO}	1.26E-18	6.38E-16	
X _{H2O}	0.0238	0.3134	
X _{HCOOCH3}	0.0062	8.80E-07	
X _{HCOOH}	0.002	0.68	
X _{CH3OH}	0.968	0.0066	

Realizado por: García, Cristian, 2021

4.5 Validación de los resultados obtenidos

Se validó la presente simulación con los resultados existentes en bibliografía la cual es Felicia; et al, 2015 para demostrar su precisión en el software DWSIM mediante el uso del error porcentual obtenido, para dicho análisis se toma en cuenta variables significativas del proceso de producción de ácido fórmico como flujo molar (kmol/h) de ácido fórmico y formiato de metilo, fracciones en peso del ácido fórmico y formiato de metilo, cuyos valores son tomados en la entrada y salida de las torres de destilación C-1 y C-2. No se escogieron flujos molares ni fracciones de metanol debido a que el compuesto existe en exceso en el proceso para mantener un equilibrio químico en la producción de ácido fórmico.

Tabla 7-4: Errores porcentuales obtenidos del proceso

Variables	Torre de destilación C-1			Torre de destilación C-2		
	Entrada	Destilado	Residuo	Entrada	Destilado	Residuo
Flujo molar _{HCOOCH₃} (Deseado)	72.8448	70.1551	0	0.2379	0	0
Flujo molar _{HCOOCH₃} (DWSIM)	71.1035	71.0715	0.0325	0.6784	0.6783	0
Error (%)	0.0239	0.0131	-	1.8516	-	-
Flujo molar _{HCOOH} (Deseado)	0	0	0	68.2978	0	68.7314
Flujo molar _{HCOOH} (DWSIM)	0.203	0.1946	0	68.5967	0.2161	68.3806
Error (%)	-	-	-	0.0044	-	0.0051
X _{HCOOCH₃} (Deseado)	0.24	0.78	0	0.002	0	0
X _{HCOOCH₃} (DWSIM)	0.2118	0.7659	0.0001	0.0056	0.0115	0
Error (%)	0.1175	0.0181	-	1.8	-	-
X _{HCOOH} (Deseado)	0	0	0	0.44	0	0.85
X _{HCOOH} (DWSIM)	0.0004	0.0016	0.00013	0.4352	0.0028	0.8423
Error (%)	-	-	-	0.0109	-	0.0091

Realizado por: García, Cristian, 2021

En la tabla 7-4 se observa los diferentes errores porcentuales obtenidos entre la simulación y el trabajo expuesto por Felicia; et al, 2015 para la producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva en DWSIM cuyos errores en su mayoría no llegan a superar ni el 1% por lo cual se puede validar exitosamente la presente simulación. El error porcentual más importante del proceso es 0.0051% ya que representa el error del flujo molar de ácido fórmico el cual es la finalidad de dicho proceso propuesto.

4.6 Balance de masa

Como un mecanismo de comprobación manual se recurre a un balance de masa para el reactor CSTR, torre de destilación C-1, torre de destilación RD y torre de destilación C-2 con la finalidad de mostrar la validez del sistema de ácido fórmico mediante el uso de cálculos matemáticos sin

recurrir al simulador DWSIM. Para dicho proceso se calculó variables significativas como el flujo molar de los diferentes equipos involucrados en el proceso.

4.6.1 Balance de reactor de agitación continua

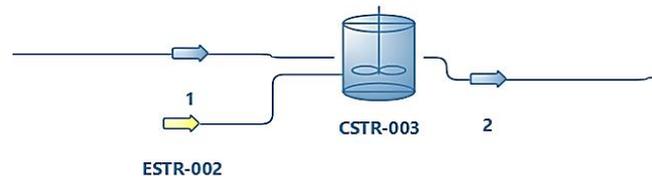


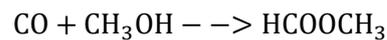
Figura 2-4: Reactor de agitación continua

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 8-4: Valores del flujo 1

Datos de Flujo 1	
Flujo molar (kmol/h)	622.25
Fración molar	
X _{CH₃OH}	0.8755
X _{CO}	0.1129
X _{H₂O}	0.0097
X _{HCOOCH₃}	0.0014
X _{HCOOH}	0.0003

Realizado por: García, Cristian, 2021



Reacción química

$$622.25 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} (0.112977) \frac{1 \text{Kmol HCOOCH}_3/\text{h}}{1 \text{Kmol CO}/\text{h}} = 70.299 \text{Kmol}/\text{h} \text{ producido}$$

Flujo de salida del reactor de HCOOCH₃

$$F_2 \text{HCOOCH}_3 = F_{\text{producido HCOOCH}_3} + F_1 * (X_{\text{HCOOCH}_3}) \quad (\text{Ec 1-4})$$

$$F_2 = 70.299 \text{Kmol}/\text{h} + 622.25 \text{Kmol}/\text{h} (0.0014)$$

$$F_2 = 71.17 \text{kmol}/\text{h}$$

Balance específico de CH₃OH

El reactivo limitante es el CO ya que es el primero que se acaba en la reacción química, por lo que el CH₃OH se consume la misma cantidad.

$$F_{2 \text{ CH}_3\text{OH}} = F_{1 \text{ CH}_3\text{OH}} * X_{\text{CH}_3\text{OH}} * -F_{\text{CH}_3\text{OH Cons}}$$

$$F_{2 \text{ CH}_3\text{OH}} = 622.25 \text{ Kmol/h} (0.8755) - 70.299 \text{ Kmol/h}$$

$$F_{2 \text{ CH}_3\text{OH}} = 474.4809 \text{ Kmol/h}$$

4.6.2 Balance de la Columna C-1

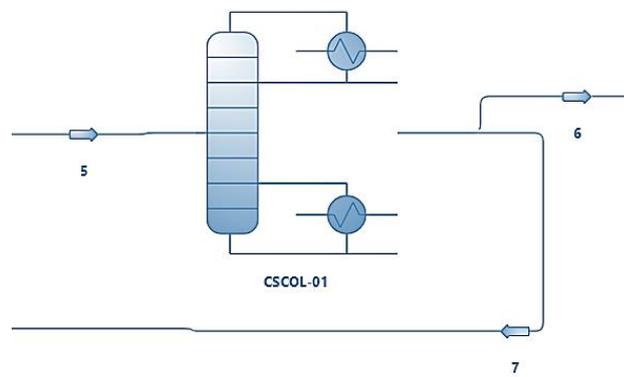


Figura 3-4: Torre destilación C-1

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 9-4: Valores de los flujos 5,6 y 7

Datos	Flujo 5	Flujo 6	Flujo 7
Flujo molar (kmol/h)	551.772	?	?
Fracción molar			
X _{CH₃OH}	0.8598	0.3447	0.992
X _{CO}	0	0	0
X _{H₂O}	0.011	0.0235	0.0077
X _{HCOOCH₃}	0.1288	0.63	0.0003
X _{HCOOH}	0	0.0018	0

Realizado por: García, Cristian, 2021

Balance general

$$F_5 = F_6 + F_7$$

$$551.772 \text{ Kmol/h} = F_6 + F_7$$

$$F_6 = 551.772 \text{ Kmol/h} - F_7$$

$$F_6 = 551.772 \text{ Kmol/h} - 439.83 \text{ Kmol/h}$$

$$F_6 = 112.689 \text{ Kmol/h}$$

Balance por compuesto CH₃OH

$$F_5 X_{\text{CH}_3\text{OH}} = F_6 X_{\text{CH}_3\text{OH}} + F_7 X_{\text{CH}_3\text{OH}}$$

$$551.772 \text{ Kmol/h} (0.8598) = F_6 (0.3447) + F_7 (0.9920)$$

$$474.4136 \text{ Kmol/h} = (551.772 \text{ Kmol/h} - F_7) (0.3447) + F_7 (0.9920)$$

$$474.4136 \text{ Kmol/h} = 190.1958 \text{ Kmol/h} - 0.3447 F_7 + 0.9920 F_7$$

$$248.2186 \text{ Kmol/h} = 0.6473 F_7$$

$$F_7 = 439.083 \text{ Kmol/h}$$

4.6.3 Balance de la columna RD

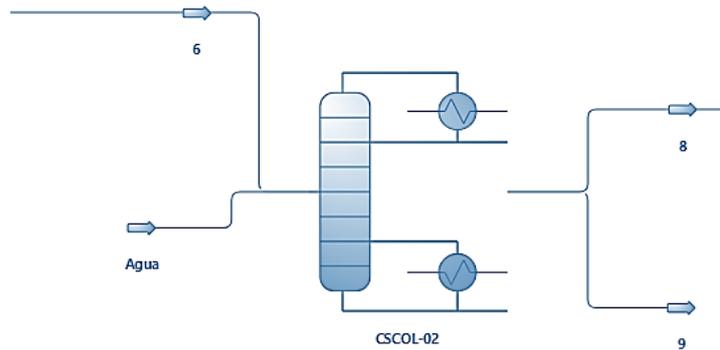


Figura 4-4: Torre de destilación reactiva

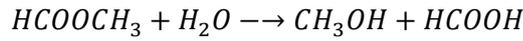
Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 10-4: Valores de los flujos 6, Agua, 9 y 8

Dato	Flujo 6	Flujo Agua	Flujo 9	Flujo 8
Flujo molar	112.661	100	?	?
Fracción molar				
X _{CH₃OH}	0.3447	0	0.9951	0.5086
X _{CO}	0	0	0	0
X _{H₂O}	0.0235	1	0.0025	0.163
X _{HCOOCH₃}	0.63	0	0.0039	0.0032
X _{HCOOH}	0.0018	0	0.004	0.3252

Realizado por: García, Cristian, 2021

Reacción química



$$112.661 \text{ Km ol/h} (0.605) \frac{1 \text{ Km ol HCOOH}}{1 \text{ Km ol HCOOCH}_3} = 68.159 \text{ Km ol/h HCOOH producido}$$

$$68.159 \text{ Km ol/h H}_2\text{O consumida}$$

$$F_{H_2O} = F_{\text{agua}} - F_{H_2O \text{ consumida}} + F_6 X_{H_2O}$$

$$F_{H_2O} = (100 - 68.159 + 112.687 \times 0.0235) \text{ Km ol/h}$$

$$F_{H_2O} = 34.488 \text{ Km ol/h}$$

$$F_{HCOOCH_3} = F_6 X_{HCOOCH_3} - F_{HCOOH \text{ consumido}}$$

$$F_{HCOOCH_3} = (112.661 \times 0.63 - 112.661 \times 0.605) \text{ Km ol/h}$$

$$F_{HCOOCH_3} = 2.817 \text{ Km ol/h}$$

$$F_{CH_3OH} = F_6 X_{CH_3OH} + F_{CH_3OH \text{ producido}}$$

$$F_{CH_3OH} = (112.681 \times 0.3447) \text{ Km ol/h} + 68.159 \text{ Km ol/h}$$

$$F_{CH_3OH} = 106.993 \text{ Km ol/h}$$

Balance general

$$F_6 + F_{H_2O} = F_9 + F_8$$

$$112.661 \text{ Km ol/h} + 100 \text{ Km ol/h} = F_9 + F_8$$

$$F_9 + F_8 = 212.661 \text{ Km ol/h} - F_8$$

$$F_9 = 212.661 \text{ Km ol/h} - 210.359 \text{ Km ol/h}$$

$$F_9 = 2.3018 \text{ Km ol/h}$$

Balance específico CH₃OH

$$FX_{CH_3OH} - F_{H_2O}X = F_9X_{CH_3OH} + F_8X_{CH_3OH}$$

$$106.993 + 0 = F_9 * (0.0019) + F_8 * (0.5086)$$

$$106.993 + 0 = (212.661 - F_8) * (0.0019) + F_8(0.5086)$$

$$106.589 = 0.5067F_8$$

$$F_8 = 210\text{pf.}359 \text{ Kmol/h}$$

4.6.4 Balance de la Columna C2

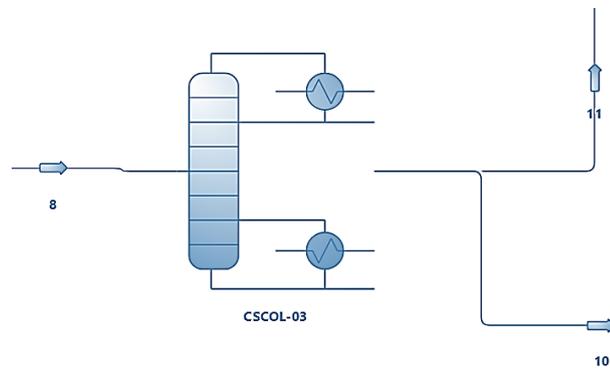


Figura 5-4: Torre de destilación C-2

Realizado por: García, Cristian, 2021

Tabla 11-4: Valores de los flujos 8,10 y 11

Dato	Flujo 8	Flujo 10	Flujo 11
Flujo molar	210.661	100.454	110.207
Fracción molar			
X _{CH₃OH}	0.5086	0.5086	0.968
X _{CO}	0	0	0
X _{H₂O}	0.1629	0.3154	0.024
X _{HCOOCH₃}	0.0032	0	0.006
X _{HCOOH}	0.3252	0.68	0.002

Realizado por: García, Cristian, 2021

4.7 Resultados de la red neuronal artificial (RNA)

La presente Red Neuronal se encuentra diseñada con 20 neuronas en la capa oculta, con el algoritmo “Bayesian Regularization” mediante el uso de 101 pares de datos con 3 variables de entrada y 4 variables de salida, la base de datos fue dividida en tres fases como entrenamiento, validación y prueba, además se realizó una validación externa con 16 pares de datos con lo cual se aseguró la eficiencia de la red diseñada en el trabajo.

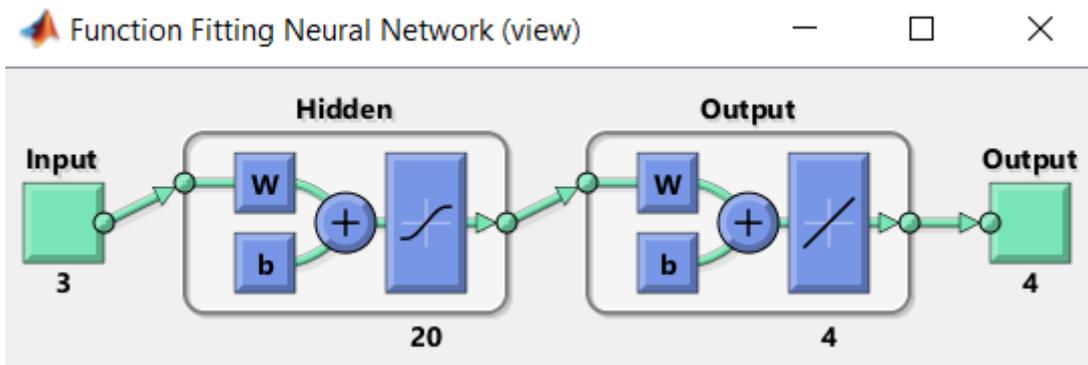


Figura 6-4: Esquema de la Red Neuronal Artificial en Matlab

Realizado por: García, Cristian, 2021

4.7.1 Análisis de las gráficas obtenidas de la RNA

A continuación, se analiza gráficas muy importantes para el diseño de la red neuronal artificial como error cuadrático medio, error de histograma y regresión lineal para asegurar el diseño previsto.

4.7.1.1 Error cuadrático medio

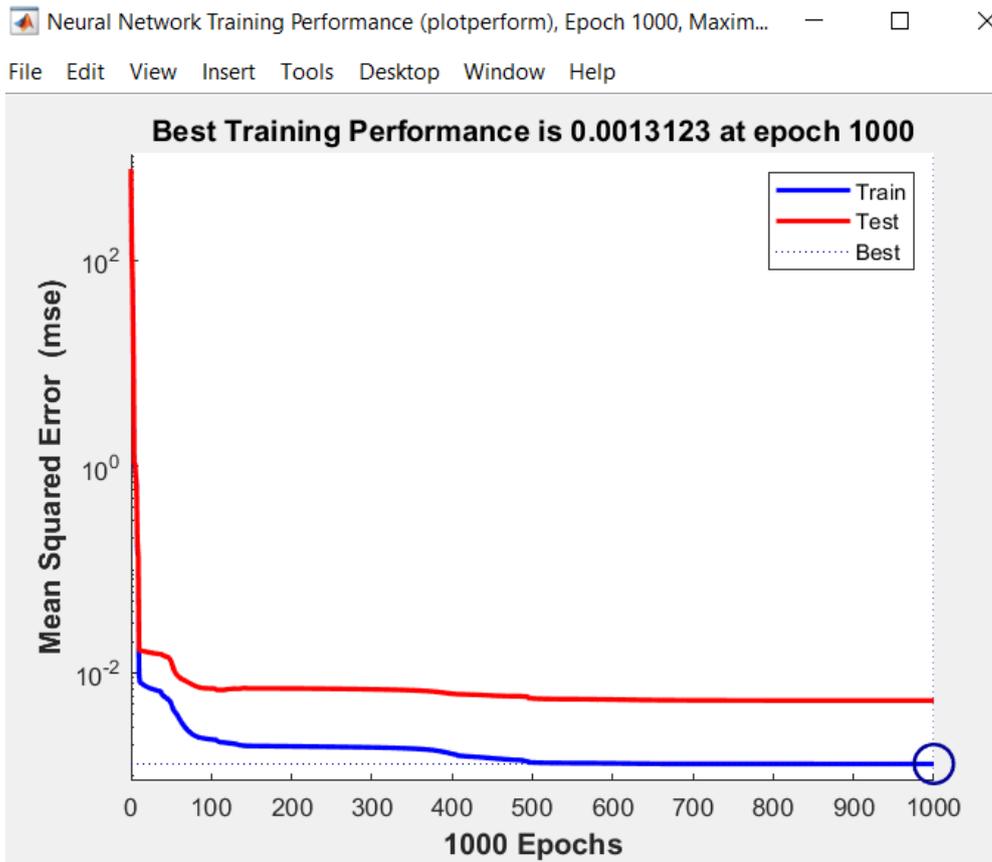
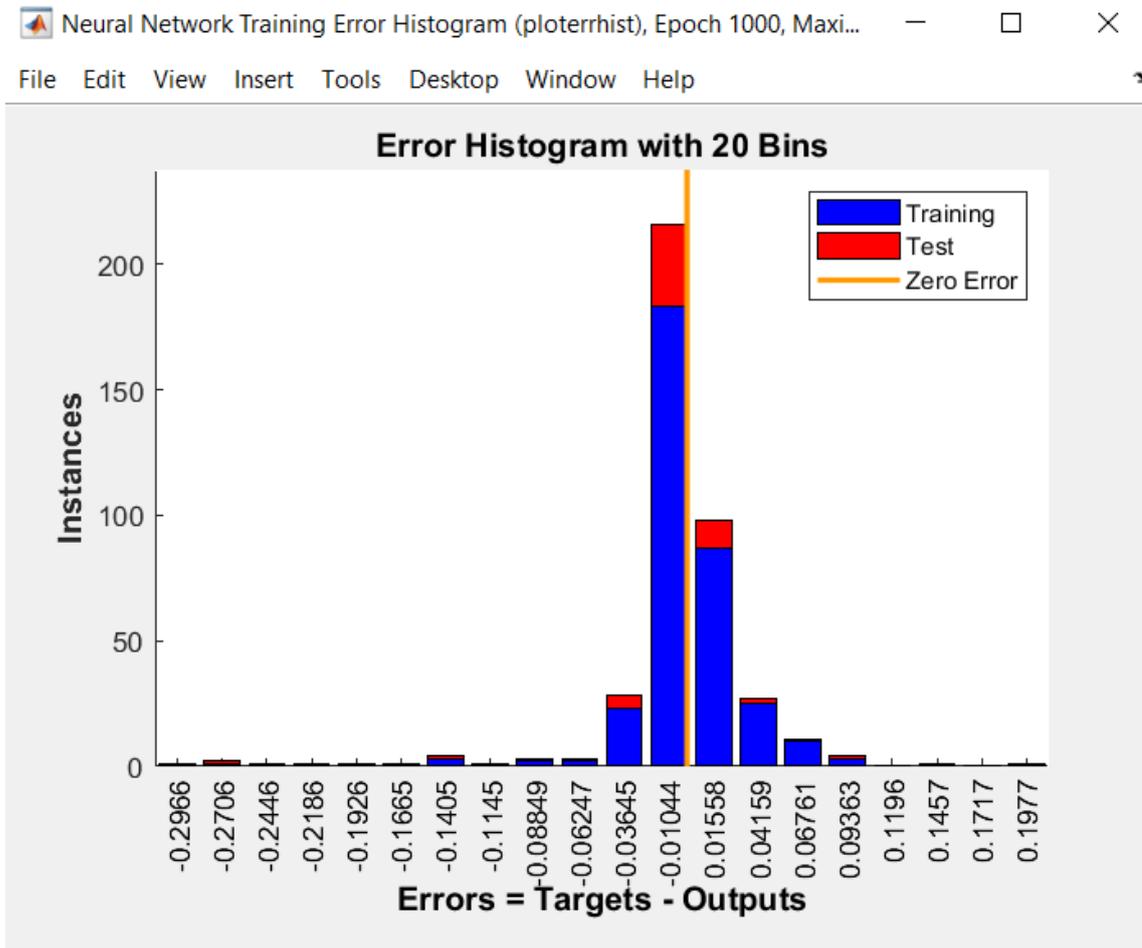


Gráfico 2-4: Error cuadrático medio obtenido

Realizado por: García, Cristian, 2021

En el Gráfico 2-4 se muestra el desarrollo del error cuadrático medio hasta obtener un error cuadrático mínimo alcanzando el número máximo de épocas, con lo cual se obtuvo un MSE de 0.0013123 cuyo valor es un valor muy cercano a 0, con lo cual se puede asegurar que los datos de la RNA con los de la base de datos son muy similares.

4.7.1.2 Histograma del error



Gráfica 3-4: Histograma de error de la RNA

Realizado por: García, Cristina, 2021

En la Gráfica 3-4 se muestra el histograma de error que presenta los valores de errores máximos, mínimos y la frecuencia que presenta cada error, como se puede observar se tiene una mayor frecuencia en los valores pequeños, mientras que los errores máximos que llega a presentar son relativamente mínimos como 0.1977 y -0.2966.

4.7.1.3 Regresión lineal

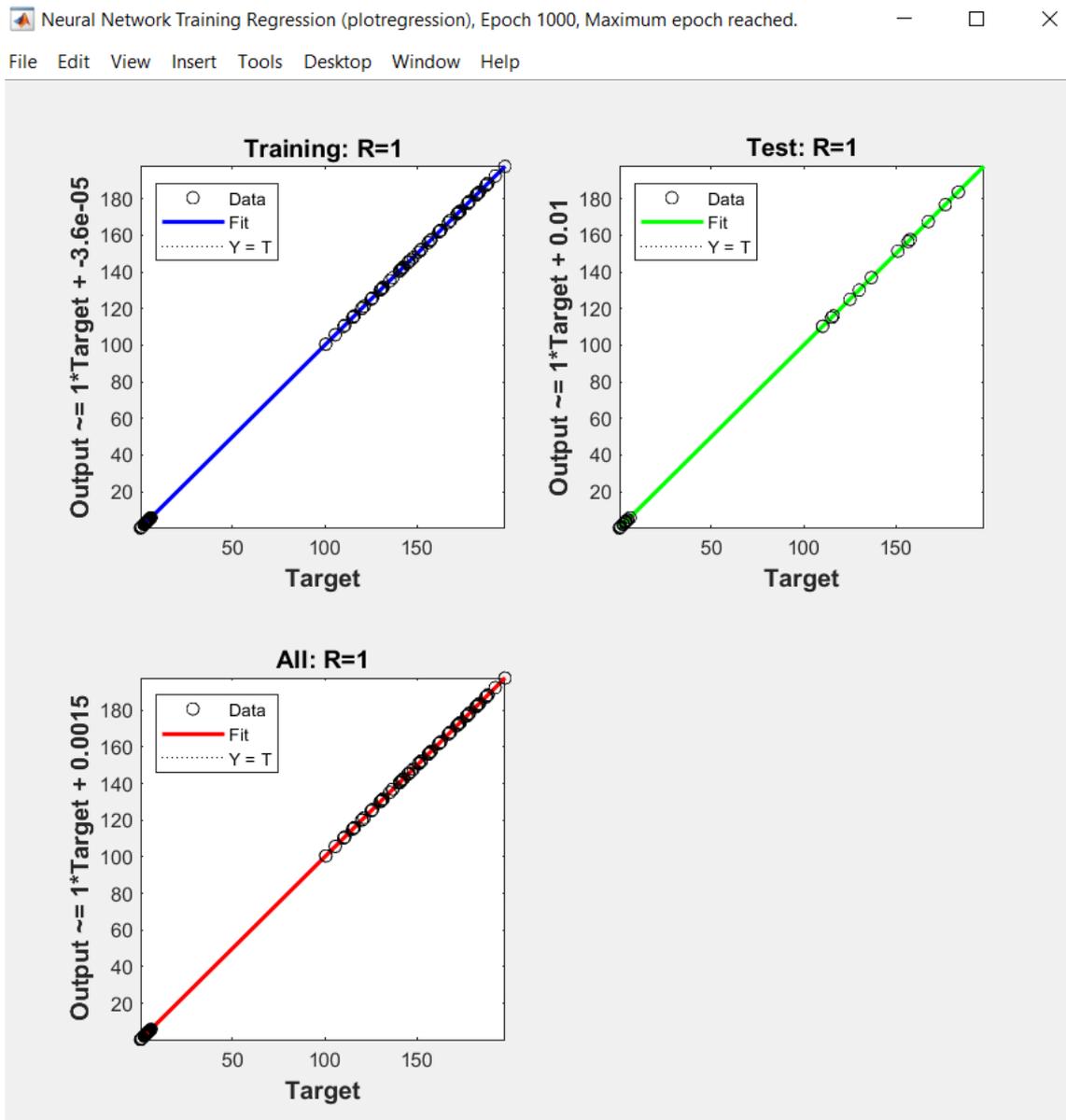


Gráfico 4-4: Regresión lineal de la fase de entrenamiento y prueba

Realizado por: García, Cristian, 2021

La regresión lineal es un aspecto muy importante en el diseño de la Red Neuronal Artificial donde tener un valor R igual 1 significa que los datos se encuentran correlacionados de una óptima manera el cual sería el caso que se aprecia en la Gráfica 4-4 para la fase de entrenamiento, prueba y General, con lo cual se asegura mucho más la eficiencia de la presente Red Neuronal Artificial diseñada.

4.7.2 Análisis gráfico entre los datos DWSIM y RNA

4.7.2.1 Análisis gráfico de la fase de entrenamiento y prueba

En la siguiente tabla se puede apreciar los valores obtenidos de DWSIM y los valores de la Red Neuronal Artificial con la finalidad de observar la diferencia que se presentan entre estos dos y comprobar que tan exacta puede ser la RNA diseñada en Matlab, cuyos resultados se encuentran en el ANEXO B.

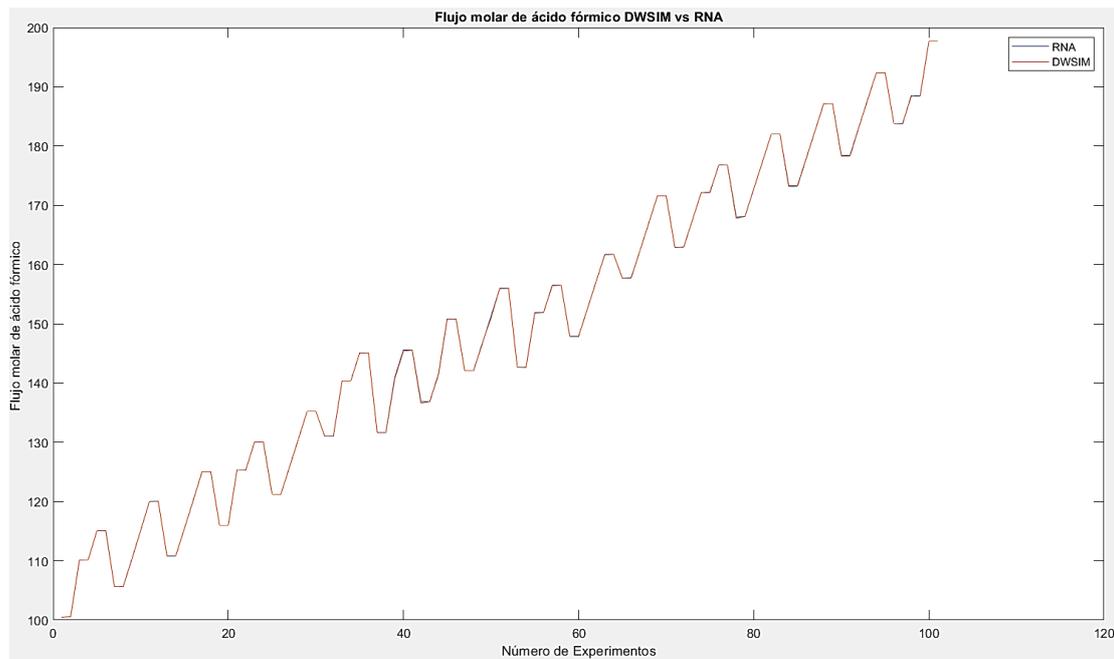


Gráfico 5-4: Flujo molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual promedio para el caso del flujo molar de ácido fórmico en el destilado de la columna de destilación C-2 es 0.02% lo cual es un error muy pequeño y satisfactorio de obtener, se puede apreciar en la Gráfica 5-4 donde la línea de DWSIM y RNA son prácticamente superpuestas una con la otra con lo cual se asegura que se presenta una diferencia mínima en los datos obtenidos de la red.

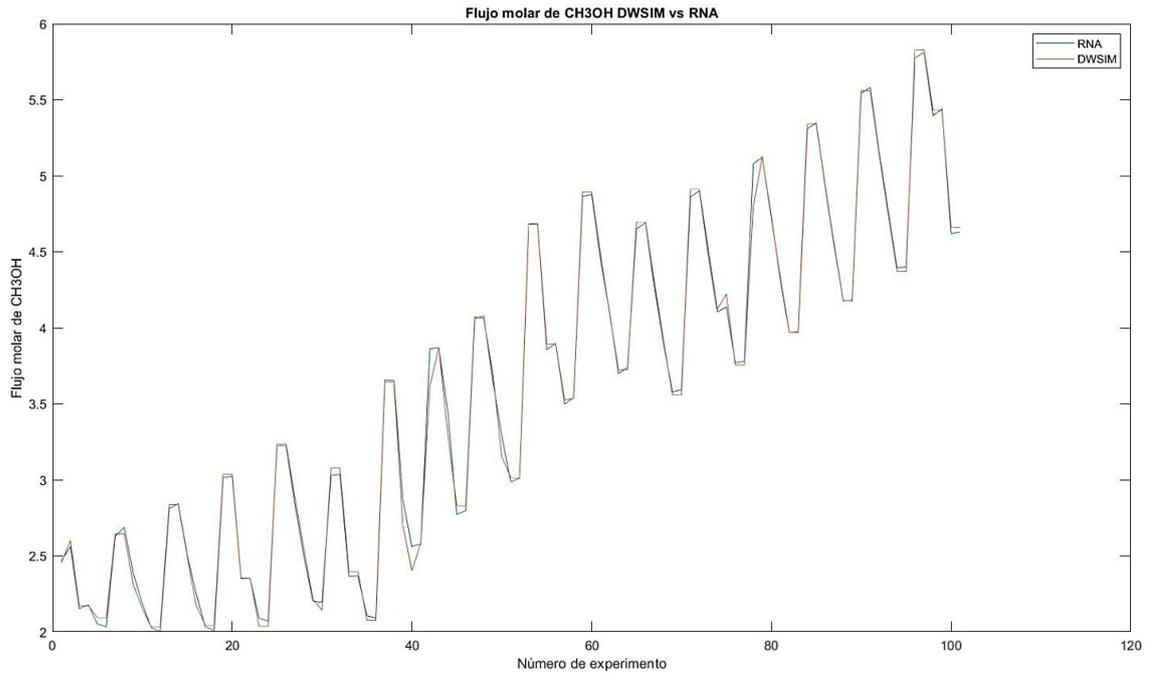
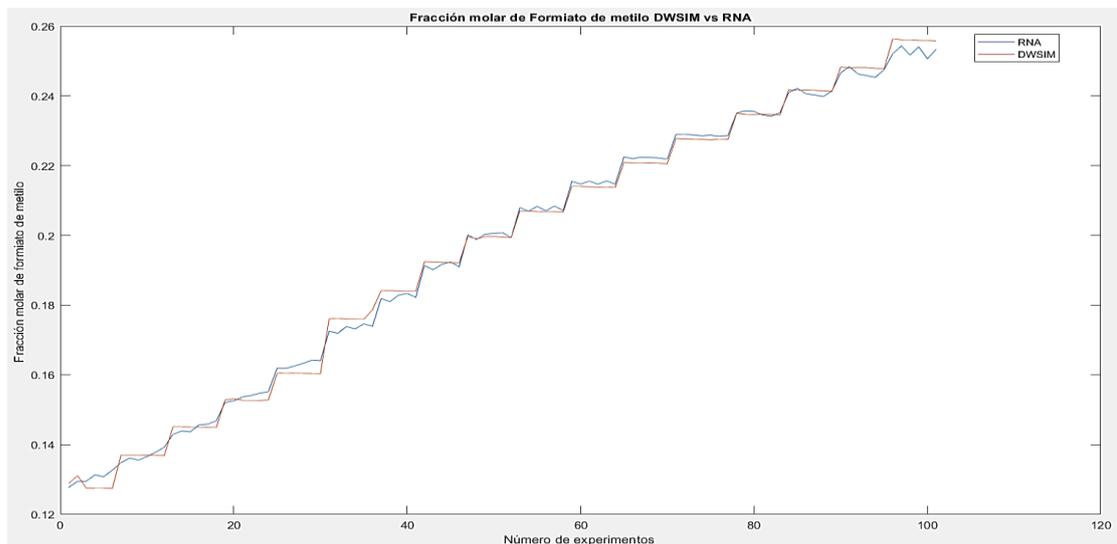


Gráfico 6-4: Flujo molar de CH_3OH DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

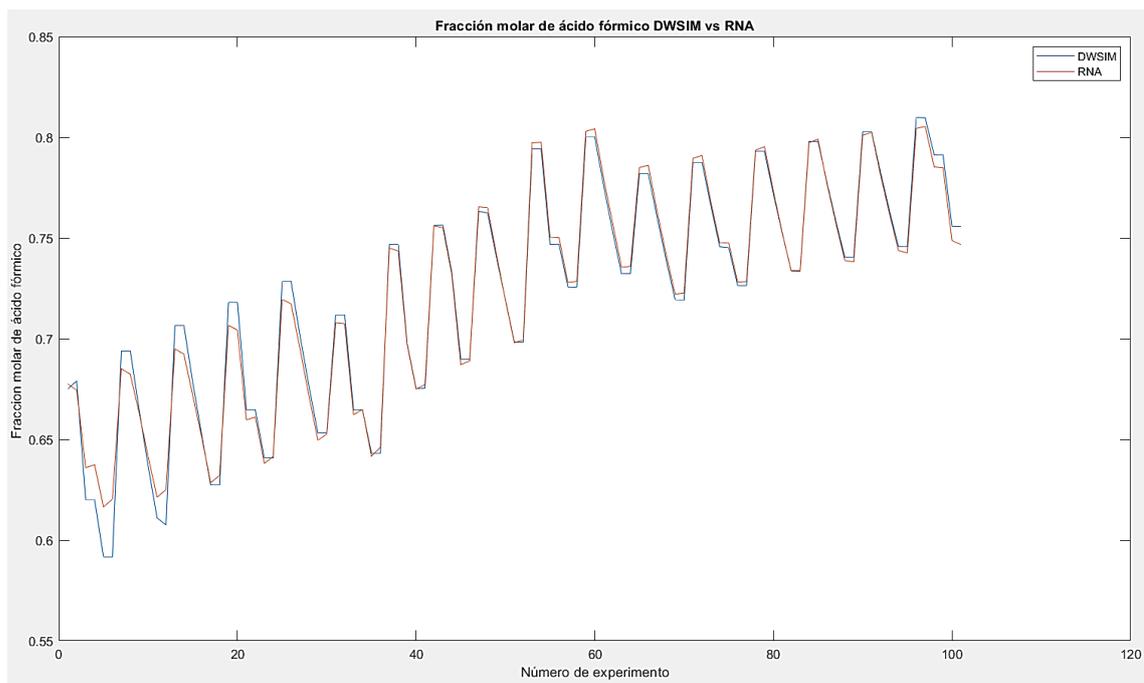
El error porcentual promedio que se obtuvo para el flujo molar de metanol que es una de las alimentaciones del reactor CSTR es 1.08%. En la Gráfica 6-4 se puede apreciar que la línea de RNA sigue la misma tendencia que la línea DWSIM con pequeñas variaciones, con lo cual se logra obtener un error relativamente pequeño.



Gráfica 7-4: Fracción molar de formiato de metilo DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual promedio para la fracción molar de formiato de metilo producido en el Reactor de Agitación Continua es 0.87%, el cual es un valor muy satisfactorio ya que presente errores muy cercanos a 0%.



Gráfica 8-4: Fracción molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual que se obtiene en la fracción molar de ácido fórmico destilado de la columna de separación C-2 es 0.62.

Como se pudo apreciar en las dos tablas presentadas los valores de la Red Neuronal Artificial son muy similares a los valores de DWSIM de la base de datos establecida, por tal motivo en las gráficas de dispersión casi las dos líneas forman una sola con pequeñas diferencias insignificantes en cuyos valores.

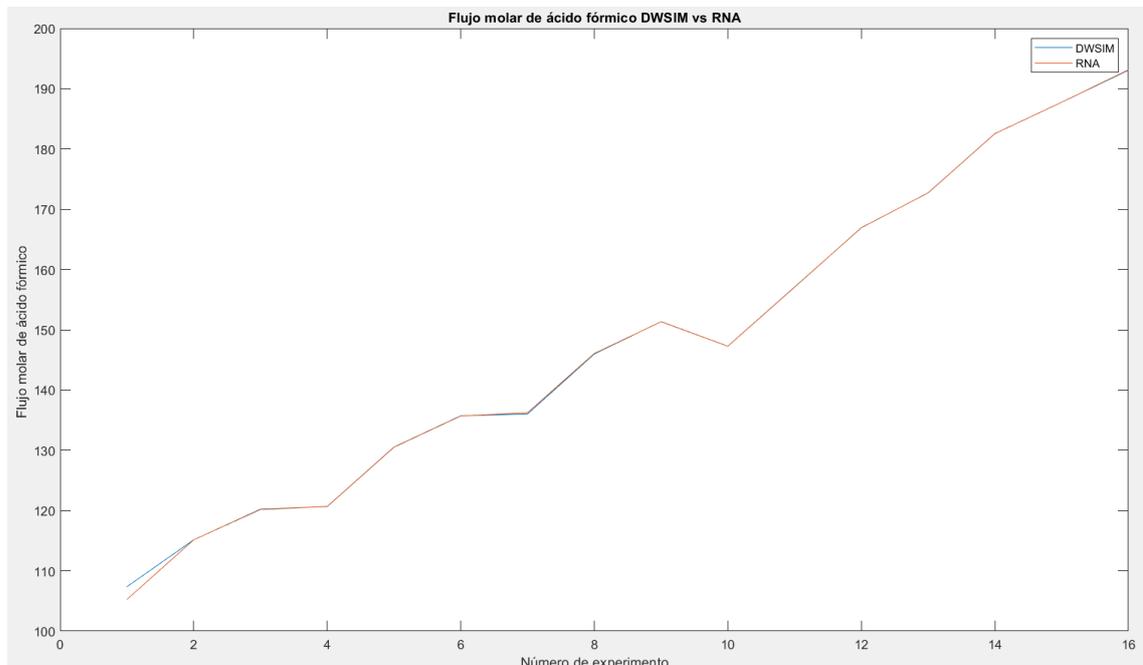
4.7.2.2 Análisis gráfico de la fase de validación externa

Tabla 12-4: Valores de DWSIM vs RNA (Flujos molares)

N.- Datos	Flujo molar (kmol/h)					
	F_{HCOOH} (DWSIM)	F_{HCOOH} (RNA)	ERROR (%)	F_{CO} (DWSIM)	F_{CO} (RNA)	ERROR (%)
1	107.374	105.25517	1.97	2.24135	2.285848	1.99
2	115.155	115.14435	0.01	2.15527	2.198310	2.00
3	120.176	120.24223	0.06	2.17603	2.250368	3.42
4	120.686	120.66424	0.02	2.68648	2.656836	1.10
5	130.539	130.50705	0.02	2.53938	2.495422	1.73
6	135.729	135.69624	0.02	2.72869	2.670405	2.14
7	136.023	136.24128	0.16	3.02296	3.237240	7.09
8	145.972	146.06483	0.06	2.97363	3.083096	3.68
9	151.353	151.33099	0.01	3.35288	3.331792	0.63
10	147.273	147.26646	0.00	4.27324	4.254738	0.43
11	157.092	157.06522	0.02	4.09290	4.057275	0.87

12	166.919	166.94249	0.01	3.91938	3.937043	0.45
13	172.721	172.70310	0.01	4.72076	4.692901	0.59
14	182.547	182.53453	0.01	4.54672	4.566548	0.44
15	187.749	187.74510	0.00	4.74851	4.797930	1.04
16	193.043	193.13504	0.05	5.04244	5.004699	0.75
	Error promedio		0.15	Error promedio		1.77

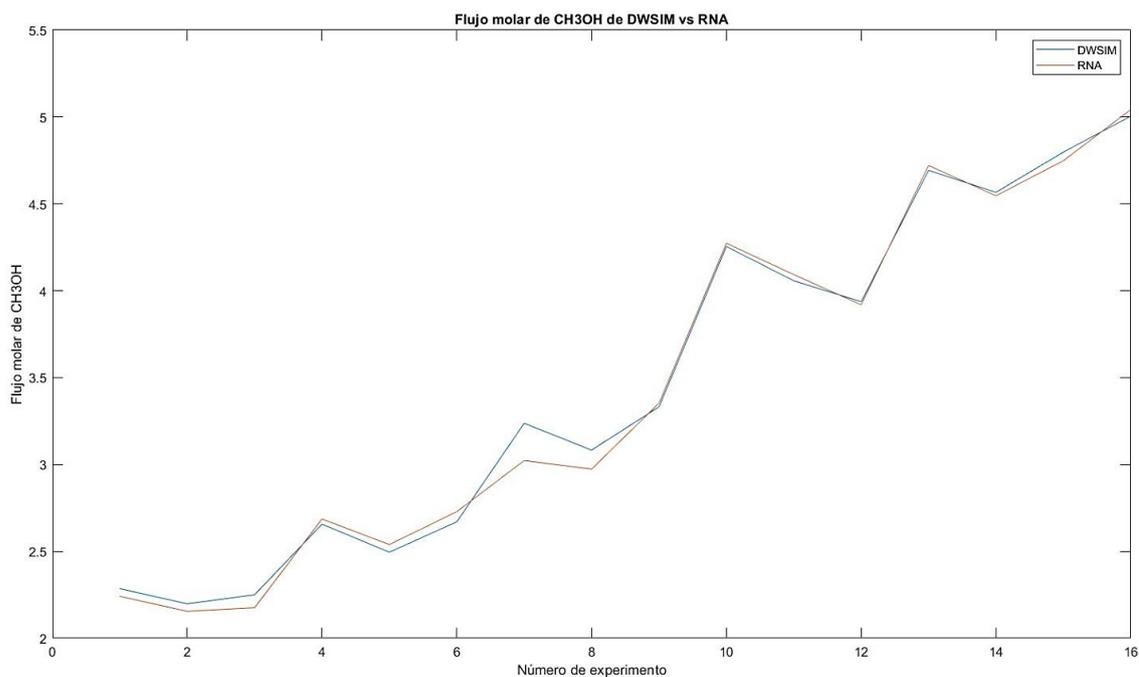
Realizado por: García, Cristian, 2021



Gráfica 9-4: Flujo molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

Se realizó una validación externa con 16 pares de datos para observar cómo reaccionaba la Red Neuronal Artificial establecida para valores que no se encontraban en la base de datos inicial, se encontró con grandes resultados ya que se tiene un error porcentual promedio de 0.15% en el caso del flujo molar de ácido fórmico destilado de la columna C-2.



Gráfica 10-4: Flujo molar de metanol DWSIM vs RNA

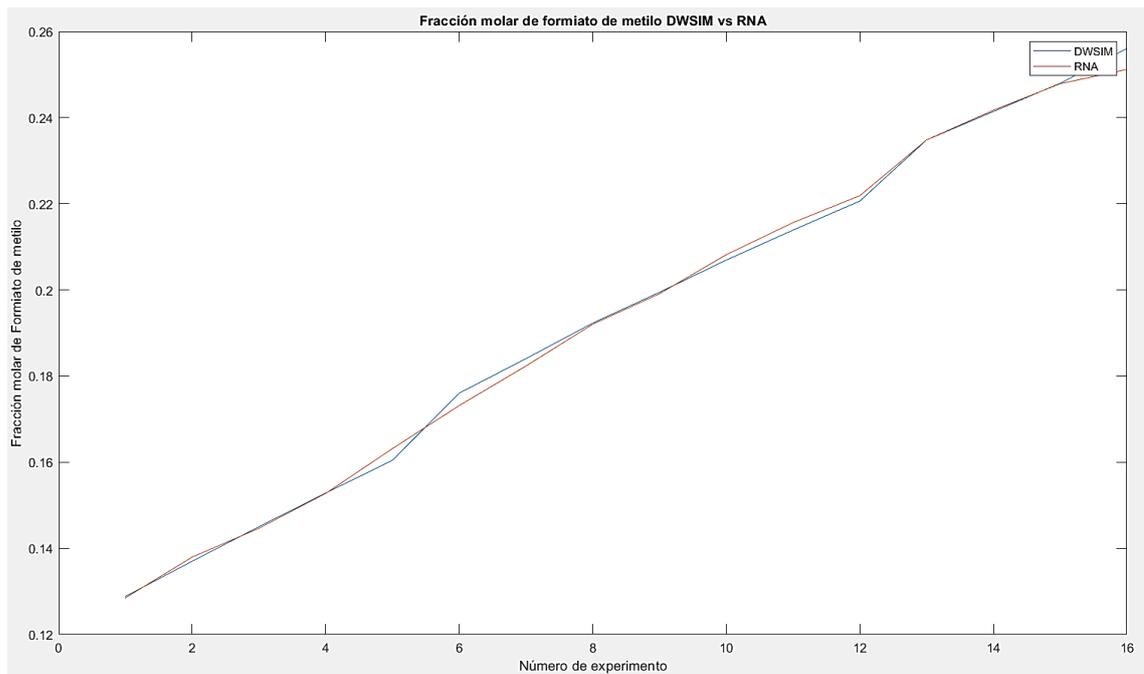
Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual promedio que se tiene para el caso del flujo molar de metanol en la alimentación del reactor es 1.77%.

Tabla 13-4: Valores de DWSIM vs RNA (Fracciones molares)

N.- Datos	Fracción molar					
	X_{HCOOCH_3} (DWSIM)	X_{HCOOCH_3} (RNA)	ERROR (%)	X_{HCOOH} (DWSIM)	X_{HCOOH} (RNA)	ERROR
1	0.12884	0.1284965	0.27	0.64403	0.6563691	1.92
2	0.13700	0.1379647	0.70	0.63673	0.6430971	1.00
3	0.14502	0.1446485	0.26	0.65217	0.6495040	0.41
4	0.15284	0.1527627	0.05	0.69033	0.6826043	1.12
5	0.16045	0.1631678	1.69	0.67651	0.6728394	0.54
6	0.17604	0.1731512	1.64	0.68748	0.6843376	0.46
7	0.18405	0.1823410	0.93	0.72128	0.7204013	0.12
8	0.19230	0.1920282	0.14	0.71070	0.7087434	0.28
9	0.19945	0.1991195	0.17	0.71871	0.7196847	0.14
10	0.20693	0.2081742	0.60	0.76961	0.7732505	0.47
11	0.21389	0.2156344	0.82	0.75337	0.7569738	0.48
12	0.22063	0.2218787	0.56	0.73895	0.7422440	0.45
13	0.23483	0.2348307	0.00	0.77197	0.7726206	0.08
14	0.24142	0.2417325	0.13	0.75835	0.7570395	0.17
15	0.24798	0.2478689	0.04	0.76352	0.7611966	0.30
16	0.25606	0.2511894	1.90	0.77324	0.7666229	0.86
	Error promedio		0.62	Error promedio		0.55

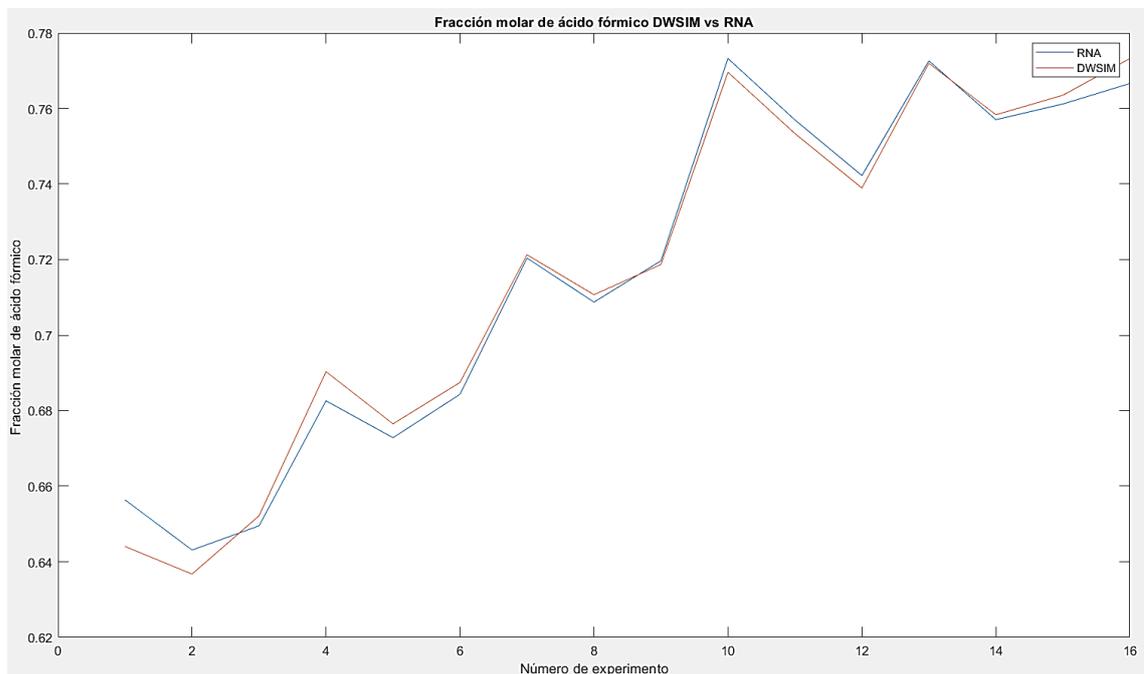
Realizado por: García, Cristian, 2021



Gráfica 11-4: Fracción molar de formiato de metilo DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual promedio para el caso de fracción molar de formiato de metilo es 0.62 %.



Gráfica 12-4: Fracción molar de ácido fórmico DWSIM vs RNA

Realizado por: García, Cristian, 2021

El error porcentual promedio que se tiene para el caso fracción molar de ácido fórmico es 0.55%. el cuál es el error más alto que se ha obtenido, sin embargo, este pertenece a los datos de validación externa por lo cual el error es un poco más grande.

4.8 Análisis estadístico en SPSS

Tabla 14-4: Resumen estadístico

VARIABLES	Recuento	Promedio	Desviación Estándar	Coefficiente de Variación	Mínimo	Máximo	Rango	Sesgo estandarizado
Flujo molar A.F (DWSIM)	16	148.147	26.7308	18.04%	107.374	193.043	85.669	0.391254
Flujo molar A.F (RNA)	16	148.034	26.9519	18.21%	105.255	193.135	87.8799	0.3386
Total	32	148.09	26.4052	17.83%	105.255	193.135	87.8799	0.48892
Flujo molar Metanol (DWSIM)	16	3.45129	1.01529	29.42%	2.15527	5.04244	2.88717	0.320985
Flujo molar Metanol (RNA)	16	3.47003	0.99919	28.79%	2.19831	5.0047	2.80639	0.288249
Total	32	3.46066	0.99094	28.63%	2.15527	5.04244	2.88717	0.408112
Fracción molar F.M (DWSIM)	16	0.193608	0.0409213	21.14%	0.12884	0.25606	0.12722	-0.116236
Fracción molar F.M (RNA)	16	0.193437	0.0405604	20.97%	0.12849	0.25118	0.122693	-0.168988
Total	32	0.193522	0.0400788	20.71%	0.12849	0.25606	0.127564	-0.190744
Fracción molar A.F (DWSIM)	16	0.716684	0.0475277	6.63%	0.63673	0.77324	0.13651	-0.623151
Fracción molar A.F (RNA)	16	0.716721	0.0465411	6.49%	0.64309	0.77325	0.130153	-0.451957
Total	32	0.716702	0.0462721	6.46%	0.63673	0.77325	0.13652	-0.725057

Realizado por: García, Cristian, 2021

Como se observa en la Tabla 16-4 el sesgo estandarizado se encuentra dentro del rango -2 a +2 para todas las variables analizadas, lo cual nos quiere decir que no se presenta datos atípicos tanto en los valores de DWSIM como de la Red Neuronal Artificial diseñada.

Tabla 15-4: ANOVA

VARIABLES	Fuente	Suma de cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón F	Valor-P
Flujo molar A.F	Entre grupos	0.102682	1	0.102682	0	0.9906
	Intra grupos	21614.1	30	720.47		
	Total	21614.2	31 +			
Flujo molar Metanol	Entre grupos	0.00280933	1	0.00280933	0	0.9584
	Intra grupos	30.438	30	1.0146		
	Total	30.4408	31			
Fracción molar F.M	Entre grupos	2.35E-07	1	2.35E-07	0	0.9906
	Intra grupos	0.0497955	30	0.00165985		
	Total	0.0497957	31			
Fracción molar A.F	Entre grupos	1.05E-08	1	1.05E-08	0	0.9983
	Intra grupos	0.0663744	30	0.00221248		
	Total	0.0663744	31			

Realizado por: García, Cristian, 2021

La tabla ANOVA divide la varianza de los datos en dos partes; una de ellas entre-grupos y otra dentro-de-grupos. El valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0.05 en todas las variables analizadas por lo cual no se presenta una diferencia estadística significativa en los presentes datos de validación externa, manejando un nivel de 95% de confianza.

Tabla 16-4: Medias con intervalos de confianza 95%

Variables	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Flujo molar A.F (DWSIM)	16	148.147	6.71039	138.456	157.837
Flujo molar A.F (RNA)	16	148.034	6.71039	138.343	157.724
Total	32	148.09			
Flujo molar Metanol (DWSIM)	16	3.45129	0.251819	3.08764	3.81494
Flujo molar Metanol (RNA)	16	3.47003	0.251819	3.10638	3.83368
Total	32	3.46066			
Fracción molar F.M (DWSIM)	16	0.193608	0.0101853	0.178899	0.208317
Fracción molar F.M (RNA)	16	0.193437	0.0101853	0.178728	0.208145
Total	32	0.193522			
Fracción molar A.F (DWSIM)	16	0.716684	0.0117592	0.699703	0.733666
Fracción molar A.F (RNA)	16	0.716721	0.0117592	0.699739	0.733702
Total	32	0.716702			

Realizado por: García, Cristian, 2021

Los intervalos mostrados en la Tabla 18-4 se encuentran basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa de Fisher, donde aquellos intervalos se traslaparán un 95% de las veces. Lo cual sirve como una medida de confiabilidad de los valores obtenidos de la Red Neuronal Artificial.

Tabla 17-4: Prueba de Kruskal-Wallis

Variables	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
Flujo molar A.F (DWSIM)	16	16.6875
Flujo molar A.F (RNA)	16	16.3125
Estadístico = 0.0127841 Valor-P = 0.909978		
Flujo molar Metanol (DWSIM)	16	16.375
Flujo molar Metanol (RNA)	16	16.625
Estadístico = 0.00568182 Valor-P = 0.939914		
Fracción molar F.M (DWSIM)	16	16.5625
Fracción molar F.M (RNA)	16	16.4375
Estadístico = 0.00142045 Valor-P = 0.969936		
Fracción molar A.F (DWSIM)	16	16.5625
Fracción molar A.F (RNA)	16	16.4375
Estadístico = 0.00142045 Valor-P = 0.969936		

Realizado por: García, Cristian, 2021

La prueba de Kruskal-Wallis sirve como método para recalcar la falta de datos atípicos en la base de datos de DWSIM y la RNA, como se observa se tiene un valor-P superior o igual a 0.05 en todos los casos de las variables analizadas, lo cual significa que no existe una diferencia estadística significativa en las medianas con un nivel del 95% de confianza.

CONCLUSIONES

- Se validó el proceso mejorado de producción de ácido fórmico mediante una columna de destilación reactiva, con la ayuda de su respectiva simulación en el software DWSIM. Cuyo proceso fue propuesto por Novita et al. (2015), donde su trabajo fue tomado como información para establecer las bases de diseño, condiciones y variables de operación.
- La simulación realizada en el programa DWSIM fue satisfactoria ya que se logró valores muy similares a las referencias bibliográficas seleccionado como base del proceso de producción de ácido fórmico, tal es el caso del flujo de residuo de la columna de destilación C-2 con un valor de 100.56 kmol/h, la fracción másica de ácido fórmico es 0.8423 y el flujo de formiato de metilo producido es 71.185 kmol/h los cuales son prácticamente iguales.
- Con la simulación realizada se determinó la cantidad de ácido fórmico obtenido en el proceso cuyo valor es 68.38 kmol/h, mientras que para producir aquella cantidad se necesitó 2.454 kmol/h de metanol en el reactor de agitación continua (CSTR) como compuesto de equilibrio químico, y se consumió totalmente 70.30 kmol/h de monóxido de carbono.
- Se validaron los resultados obtenidos del proceso de producción de ácido fórmico en DWSIM con la ayuda del cálculo del error porcentual de las diferentes variables de operación significativas como flujo molar y fracción másica de ácido fórmico, flujo molar de formiato de metilo y fracción másica del formiato de metilo, obteniendo valores como 0.51%, 0.91%, 1.31% y 1.81% respectivamente, donde se resalta que los errores obtenidos son bastantes pequeños y satisfactorios.
- Con la ayuda del software Matlab y su herramienta Neural Net Fitting se diseñó la Red Neuronal Artificial con 20 neuronas en la capa oculta, usando el algoritmo matemático “Regularizacion Bayesian”, con una base de datos de 101 pares para el entrenamiento y 16 para una validación externa, teniendo 3 variables de entrada y 4 variables de salida, la finalidad de la RNA es predecir el flujo molar y fracción molar de ácido fórmico, flujo molar del CO requerido y fracción molar del formiato de metilo producido.
- Los resultados que se consiguió de la RNA fueron un error cuadrático medio de 0.001312, una regresión lineal $R=1$ y un histograma de error con errores máximos y mínimos relativamente pequeños, además con la ayuda de un análisis estadístico se validó dicha Red Neuronal Artificial, debido a que se tiene un valor de confiabilidad general del 95% con lo cual no existen diferencias significativas en los datos obtenidos.

RECOMENDACIONES

- Ampliar la base de datos del proceso de producción de ácido fórmico sea el número de experimentos realizados o la implementación de nuevas variables de entrada y salida que no se tomaron en cuenta en el presente trabajo de titulación, con la finalidad de aumentar la confiabilidad en la red y tener un error porcentual menor.
- Intentar con diferentes versiones de DWSIM cuando se quiera simular y validar un proceso químico, debido a que es un software relativamente nuevo y gratuito en comparación a otros programas comerciales, se encuentra todavía con errores en la programación de este que son solucionadas con las diferentes actualizaciones.
- Verificar que los datos obtenidos de la Red Neuronal Artificial no sean datos atípicos para cada una de las variables ya que aquello resulta en una menor confiabilidad, por lo cual se sugiere revisar cada uno de los valores y realizar las gráficas de comparación entre valores de DWSIM y RNA.
- Utilizar la Red Neuronal Artificial diseñada para la creación de alguna aplicación computacional didáctica, con la finalidad ser una herramienta académica para profesores y estudiantes al momento de estudiar procesos químicos industriales.

BIBLIOGRAFÍA

CARLOS; et al, 2004. Separación de ácido láctico por destilación reactiva. *Revista Universidad EAFIT*, vol. 40, no. 135, pp. 42. ISSN 0120-341X.

CARRERA, I.E., 2014. *Diseño de sistemas de control para procesos aplicados a reactores continuos tipo tanque agitado (CSTR)*. [en línea]. S.l.: Escuela Politécnica Nacional. Disponible en: <http://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/55/1/CD-0024.pdf>.

CHAO et; al, 2019. Investigation on the production of formic and acetic acids from lignin by ethanol organosolv treatment at mild conditions. *International Journal of Biological Macromolecules* [en línea], vol. 131, pp. 329-330. ISSN 18790003. DOI 10.1016/j.ijbiomac.2019.03.070. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2019.03.070>.

ELIANA; ET AL, 2008. Modelado de un reactor químico tipo CSTR y evaluación del control predictivo aplicando Matlab-Simulink Modeling to a CSTR reactor and evaluation of a predictive control using Matlab-Simulink. *Ingeniería Uc*, vol. 15, no. 3, pp. 110.

FELICIA; ET AL, 2015. Self-heat recuperative dividing wall column for enhancing the energy efficiency of the reactive distillation process in the formic acid production process. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], vol. 97, pp. 144-152. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2015.09.007. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2015.09.007>.

FELICIA; ET AL, 2018. Plantwide design for high-purity formic acid reactive distillation process with dividing wall column and external heat integration arrangements. *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 35, pp. 926. ISSN 02561115. DOI 10.1007/s11814-017-0342-4.

LMARZIEH, R. y & BASHIRI, H., 2019. Applied Surface Science Dynamic Monte Carlo simulations of the reaction mechanism of hydrogen production from formic acid on Ni (1 0 0). *Dynamic Monte Carlo simulations of the reaction mechanism of hydrogen production from formic acid on Ni(1 0 0)* [en línea], vol. 475, pp. 720. DOI 10.1016/j.apsusc.2018.12.294. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.12.294>.

MARK; ET AL, 2010. *Neural Network Toolbox™ 7 User's Guide*. S.l.: s.n. ISBN 0971732108.

NAREN, R., 2017. PROCESS SIMULATION USING DWSIM: A Free and Open Source Chemical Process Simulator. , vol. 2, no. December, pp. 5.

NGUYEN; ET AL, 2019. Combined approach using mathematical modelling and artificial neural network for chemical industries: Steam methane reformer. *Applied Energy* [en línea], vol. 255, pp. 1. ISSN 03062619. DOI 10.1016/j.apenergy.2019.113809. Disponible en:

<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113809>.

OVERPECK, J. y CONDE, C., 2019. A call to climate action. *Science* [en línea], vol. 364, no. 6443, pp. 807. ISSN 10959203. DOI 10.1126/science.aay1525. Disponible en: 10.1126/science.aay1525.

PÉREZ SANCHESZ, J.L., 2007. *Diseño de una planta para la separación de parafinas lineales procedentes de queroseno* [en línea]. S.l.: UniversidaddeCádiz. Disponible en: <https://rodin.uca.es/xmlui/bitstream/handle/10498/6599/33287193.pdf?sequence=1>.

PIOTR; ET AL, 2020. Neural network prediction of parameters of biomass ashes, reused within the circular economy frame. *Renewable Energy* [en línea], vol. 162, pp. 743-744. ISSN 18790682. DOI 10.1016/j.renene.2020.08.088. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.08.088>.

POLIANE; ET AL, 2019. Metal-free bifunctional silica for conversion of waste glycerol from biodiesel: Sustainable production of formic acid. *Chemical Engineering Journal* [en línea], vol. 369, pp. 1102-1103. ISSN 13858947. DOI 10.1016/j.cej.2019.03.068. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.03.068>.

RA, M. y BASHIRI, H., 2019. Applied Surface Science Dynamic Monte Carlo simulations of the reaction mechanism of hydrogen production from formic acid on Ni (100). *Dynamic Monte Carlo simulations of the reaction mechanism of hydrogen production from formic acid on Ni(100)*, vol. 475, pp. 720. DOI 10.1016/j.apsusc.2018.12.294.

RIVAS ASANZA, W. y MANZÓN OLIVIO, B., 2017. *Redes neuronales artificiales aplicadas al reconocimiento de patrones* [en línea]. Primera. Machala: s.n. ISBN 9788578110796. Disponible en: <http://www.elsevier.com/locate/scp>.

RODRÍGUEZ, H.N., 2016. *DWSIM Chemical Process Simulator*. S.l.: Universidad Tecnológica Nacional.

SHIXIANG; ET AL, 2019. Efficient photocatalytic hydrogen production from formic acid on inexpensive and stable phosphide/Zn₃In₂S₆ composite photocatalysts under mild conditions. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, pp. 21804. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2019.06.179.

SHUSAKU; ET AL, 2018. The improvement of formic acid production from CO₂ with visible-light energy and formate dehydrogenase by the function of the viologen derivative with carbamoylmethyl group as an electron carrier. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* [en línea], vol. 358, pp. 362-364. ISSN 10106030. DOI 10.1016/j.jphotochem.2017.09.044. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jphotochem.2017.09.044>.

SURESH; ET AL, 2021. Enhanced ultrasonic assisted biodiesel production from meat industry waste (pig tallow) using green copper oxide nanocatalyst: Comparison of response surface and neural network modelling. *Renewable Energy* [en línea], vol. 164, pp. 897-898. ISSN 18790682. DOI 10.1016/j.renene.2020.09.112. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.09.112>.

SWAPNIL; ET AL, 2018. Intensification and performance assessment of the formic acid production process through a dividing wall reactive distillation column with vapor recompression. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 123, pp. 204-205. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2017.11.016.

TITO, C., 2016. *Simulación Hysis Flash Separator*. S.l.: Universidad mayor de San Andres.

XI; ET AL, 2019. Sustainable production of formic acid from biomass and carbon dioxide. *Molecular Catalysis* [en línea], vol. 483, pp. 1. ISSN 24688231. DOI 10.1016/j.mcat.2019.110716. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2019.110716>.

YANPING; ET AL, 2020. Synergic optimization of pollution prevention and resource recovery of secondary lead smelting industry based on two-stage BPNLP network model. *Journal of Cleaner Production* [en línea], vol. 284, pp. 1. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2020.124717. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.124717>.

ZHAO; ET AL, 2020. Theoretical investigation on the effect of doped Pd on the Cu(1 1 1) surface for formic acid oxidation: Competing formation of CO₂ and CO. *Chemical Physics Letters* [en línea], vol. 751, pp. 1. ISSN 00092614. DOI 10.1016/j.cplett.2020.137509. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009261420304243>.

ZHIQIANG; ET AL, 2020. Energy optimization and prediction modeling of petrochemical industries: An improved convolutional neural network based on cross-feature. *Energy* [en línea], vol. 194, pp. 1. ISSN 03605442. DOI 10.1016/j.energy.2019.116851. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116851>.

DIVYA; ET AL, 2019. Performance evaluation and neural network modeling of trichloroethylene removal using a continuously operated two-phase partitioning bioreactor. S.l.: Elsevier B.V. ISBN 0414423828.

FARHANA; ET AL, 2015. Degradation and mineralization of phenol compounds with goethite catalyst and mineralization prediction using artificial intelligence. *PLoS ONE*, vol. 10, no. 4, pp. 1-17. ISSN 19326203. DOI 10.1371/journal.pone.0119933.

FRANCO; ET AL, 2018. A General Framework for Global Retrievals of Trace Gases From IASI: Application to Methanol, Formic Acid, and PAN. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 123, no. 24, pp. 13963-13972. ISSN 21698996. DOI 10.1029/2018JD029633.

FRANCO; ET AL, 2020. Spaceborne Measurements of Formic and Acetic Acids: A Global View of the Regional Sources. *Geophysical Research Letters*, vol. 47, no. 4, pp. 2-11. ISSN 19448007. DOI 10.1029/2019GL086239.

HUI; ET AL, 2006. Predictions for start-up processes of reactive distillation column via artificial neural network. *Chemical Engineering and Technology*, vol. 29, no. 6, pp. 744. ISSN 09307516. DOI 10.1002/ceat.200500345.

LAKSHMI; ET AL, 2020. Optimization strategies for improved biogas production by recycling of waste through response surface methodology and artificial neural network: Sustainable energy perspective research. *Journal of King Saud University - Science*, vol. 33, no. 1, pp. 1-16. ISSN 10183647. DOI 10.1016/j.jksus.2020.101241.

LUIS; ET AL, 2010. Estimation of hydrogen production in genetically modified *E. coli* fermentations using an artificial neural network. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 24, pp. 2. ISSN 03603199. DOI 10.1016/j.ijhydene.2010.08.137.

MAY;ET AL, 2021. Artificial Neural Network Modeling of Thermo-catalytic Methane Decomposition for Hydrogen Production. *Topics in Catalysis*, pp. 1. DOI 10.1007/s11244-020-01409-6.

NUR; ET AL, 2015. Feed Forward Neural Network Model for Isopropyl Myristate Production in Industrial-scale Semi-batch Reactive Distillation Columns. *Journal of Engineering Science and Technology*, vol. 11, pp. 59. ISSN 1823-4690.

OLUDARE; ET AL, 2018. State-of-the-art in artificial neural network applications: A survey. *Heliyon*, vol. 4, no. 11, pp. 1-14. ISSN 24058440. DOI 10.1016/j.heliyon.2018.e00938.

SHARMA, N. y & SINGH, K., 2014. Neural network and support vector machine predictive control of tert-amyl methyl ether reactive distillation column. *Systems Science and Control Engineering*, vol. 2, no. 1, pp. 512-522. ISSN 21642583. DOI 10.1080/21642583.2014.924082.

THORNTON; ET AL, 2015. Total iron measurement in human serum with a smartphone. *RSC Advances*, vol. 5, pp. 1. DOI 10.1039/x0xx00000x.

VANDANA ; ET AL, 2016. Modified neural network based cascaded control for product composition of reactive distillation. *Polish Journal of Chemical Technology*, vol. 18, no. 2, pp. 111. ISSN 18994741. DOI 10.1515/pjct-2016-0037.

VICTOR ;ET AL, 2019. Artificial intelligence modelling approach for the prediction of CO-rich hydrogen production rate from methane dry reforming. *Catalysts*, vol. 9, no. 9, pp. 1. ISSN 20734344. DOI 10.3390/catal9090738.

XIAOLONG; ET AL, 2020. Fault detection and diagnosis for reactive distillation based on convolutional neural network. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 145, pp. 1-12. ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2020.107172.

YE, J., 2019. Artificial neural network modeling of methanol production from syngas. *Petroleum Science and Technology*, vol. 37, no. 6, pp. 1-2. ISSN 15322459. DOI 10.1080/10916466.2018.1560321.

ANEXOS

ANEXO A. Script para el diseño y entrenamiento de la RNA

```
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural
Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 15-Feb-2021 21:55:14
%
% This script assumes these variables are defined:
%
%   Entrada - input data.
%   Salida  - target data.

x = Entrada;
t = Salida;

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 20;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

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

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

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

```
performance = perform(net,t,y)

% View the Network
view(net)

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

ANEXO B. Valores DWSIM vs RNA (Flujos molares)

N.- Datos	Flujo molar (kmol/h)					
	F_{HCOOH} (DWSIM)	F_{HCOOH} (RNA)	ERROR (%)	$F_{\text{CH}_3\text{OH}}$ (DWSIM)	$F_{\text{CH}_3\text{OH}}$ (RNA)	ERROR (%)
1	100.454	100.46813	0.01	2.45400	2.4673524	0.54
2	100.599	100.58608	0.01	2.59906	2.5594063	1.53
3	110.171	110.15816	0.01	2.17224	2.1520872	0.93
4	110.172	110.16325	0.01	2.17218	2.1787393	0.30
5	115.094	115.09496	0.00	2.09425	2.0521547	2.01
6	115.094	115.15829	0.06	2.09419	2.0337326	2.89
7	105.645	105.61736	0.03	2.64498	2.6291488	0.60
8	105.645	105.67412	0.03	2.64499	2.6889726	1.66
9	110.311	110.34741	0.03	2.31075	2.3841808	3.18
10	115.155	115.17273	0.02	2.15534	2.1873611	1.49
11	120.030	120.02034	0.01	2.03023	2.0270009	0.16
12	120.030	120.04943	0.02	2.03015	2.0016216	1.41
13	110.839	110.81603	0.02	2.83909	2.8128464	0.92
14	110.839	110.82895	0.01	2.83907	2.8438559	0.17
15	115.498	115.48885	0.01	2.49794	2.5067332	0.35
16	120.176	120.19832	0.02	2.17586	2.2513126	3.47
17	125.044	125.01448	0.02	2.04424	2.0346937	0.47
18	125.044	125.02035	0.02	2.04393	2.0087700	1.72
19	116.037	116.03984	0.00	3.03676	3.0149727	0.72
20	116.037	116.02885	0.01	3.03659	3.0236654	0.43
21	125.354	125.36104	0.01	2.35357	2.3509091	0.11
22	125.354	125.32395	0.02	2.35352	2.3492282	0.18
23	130.036	130.08094	0.03	2.03615	2.0907310	2.68
24	130.036	130.08006	0.03	2.03612	2.0711939	1.72
25	121.237	121.26556	0.02	3.23735	3.2286110	0.27
26	121.237	121.24829	0.01	3.23741	3.2239245	0.42
27	125.880	125.85686	0.02	2.87981	2.8333212	1.61
28	130.539	130.51791	0.02	2.53936	2.4926502	1.84
29	135.214	135.21197	0.00	2.21419	2.2023516	0.53
30	135.214	135.21964	0.00	2.14190	2.1943402	2.45
31	131.076	131.05173	0.02	3.07607	3.0298977	1.50
32	131.076	131.05553	0.02	3.07608	3.0367501	1.28
33	140.396	140.38664	0.01	2.39647	2.3643688	1.34
34	140.396	140.41078	0.01	2.39647	2.3695846	1.12
35	145.078	145.09427	0.01	2.07785	2.1054923	1.33
36	145.078	145.07137	0.00	2.07785	2.0912949	0.65
37	131.645	131.67304	0.02	3.64513	3.6577603	0.35
38	131.645	131.66748	0.02	3.64514	3.6536855	0.23
39	140.703	140.88060	0.13	2.70273	2.8718905	6.26

40	145.403	145.57899	0.12	2.40260	2.5610897	6.60
41	145.583	145.61756	0.02	2.58300	2.5777159	0.20
42	136.616	136.86181	0.18	3.61602	3.8626567	6.82
43	136.871	136.86112	0.01	3.87101	3.8681078	0.07
44	141.511	141.42871	0.06	3.29679	3.4466815	4.55
45	150.829	150.77092	0.04	2.83071	2.7733321	2.03
46	150.829	150.81411	0.01	2.82968	2.7972725	1.15
47	142.071	142.05746	0.01	4.07131	4.0605026	0.27
48	142.061	142.06039	0.00	4.06104	4.0772730	0.40
49	146.703	146.62450	0.05	3.70480	3.6531305	1.39
50	150.996	151.25388	0.17	3.15541	3.2935764	4.38
51	156.015	155.95939	0.04	3.01478	2.9857463	0.96
52	156.014	155.99527	0.01	3.01376	3.0122419	0.05
53	142.677	142.70422	0.02	4.67700	4.6833718	0.14
54	142.677	142.65152	0.02	4.67700	4.6851748	0.17
55	151.893	151.83725	0.04	3.89432	3.8558216	0.99
56	151.893	151.89429	0.00	3.89342	3.8967880	0.09
57	156.535	156.45690	0.05	3.52559	3.4988237	0.76
58	156.535	156.52286	0.01	3.53515	3.5396245	0.13
59	147.894	147.87541	0.01	4.89371	4.8632810	0.62
60	147.894	147.86403	0.02	4.89372	4.8768010	0.35
61	152.482	152.48162	0.00	4.48331	4.4500324	0.74
62	157.093	157.11883	0.02	4.09253	4.1017514	0.23
63	161.724	161.67720	0.03	3.72374	3.6996049	0.65
64	161.723	161.72717	0.00	3.72295	3.7397545	0.45
65	157.696	157.68482	0.01	4.69631	4.6508759	0.97
66	157.696	157.73964	0.03	4.69633	4.6903327	0.13
67	162.298	162.29499	0.00	4.29906	4.2615566	0.87
68	166.920	166.90686	0.01	3.91964	3.8998222	0.51
69	171.558	171.57032	0.01	3.55867	3.5783173	0.55
70	171.558	171.56720	0.01	3.55799	3.5928529	0.98
71	162.911	162.85910	0.03	4.91069	4.8605292	1.02
72	162.911	162.94124	0.02	4.91071	4.9016480	0.18
73	167.509	167.50950	0.00	4.50865	4.4726037	0.80
74	172.123	172.13061	0.00	4.12374	4.1042452	0.47
75	172.222	172.15500	0.04	4.22156	4.1375232	1.99
76	176.757	176.78170	0.01	3.75663	3.7708314	0.38
77	176.757	176.77873	0.01	3.75608	3.7797304	0.63
78	167.800	168.00573	0.12	4.79971	5.0802427	5.84
79	168.126	168.10288	0.01	5.12590	5.1209963	0.10
80	172.721	172.74668	0.01	4.72057	4.7342928	0.29
81	177.336	177.33831	0.00	4.33594	4.3167014	0.44
82	181.970	181.97822	0.00	3.97061	3.9694084	0.03

83	181.969	181.98116	0.01	3.96932	3.9742934	0.13
84	173.342	173.15945	0.11	5.34248	5.3087350	0.63
85	173.342	173.24588	0.06	5.34223	5.3482759	0.11
86	177.934	177.89745	0.02	4.93406	4.9225680	0.23
87	182.548	182.54076	0.00	4.54776	4.5388358	0.20
88	187.180	187.16211	0.01	4.17938	4.1772300	0.05
89	187.178	187.17090	0.00	4.17851	4.1808865	0.06
90	178.310	178.39377	0.05	5.55958	5.5420943	0.31
91	178.310	178.43474	0.07	5.55960	5.5808626	0.38
92	183.145	183.15026	0.00	5.14501	5.1589775	0.27
93	187.749	187.78125	0.02	4.74892	4.7694770	0.43
94	192.372	192.36368	0.00	4.37185	4.3946687	0.52
95	192.371	192.37326	0.00	4.37065	4.4007340	0.69
96	183.831	183.81060	0.01	5.83067	5.7742870	0.97
97	183.828	183.76900	0.03	5.82819	5.8139936	0.24
98	188.433	188.55008	0.06	5.43265	5.3970331	0.66
99	188.431	188.45729	0.01	5.43060	5.4388624	0.15
100	197.660	197.64517	0.01	4.66118	4.6191438	0.90
101	197.660	197.64866	0.01	4.65999	4.6318047	0.60
	Error promedio		0.02	Error promedio		1.08

Realizado por: García, Cristian, 2021

ANEXO C. Valores DWSIM vs RNA (Fracciones molares)

N.- Datos	Fracción molar					
	X_{HCOOCH_3} (DWSIM)	X_{HCOOCH_3} (RNA)	ERROR	X_{HCOOH} (DWSIM)	X_{HCOOH} (RNA)	ERROR
1	0.12893	0.1277708	0.90	0.67503	0.6775358	0.37
2	0.13110	0.1294652	1.24	0.67902	0.6744449	0.67
3	0.12751	0.1295135	1.57	0.62014	0.6359407	2.55
4	0.12749	0.1313199	3.01	0.62013	0.6374539	2.79
5	0.12750	0.1307948	2.58	0.59164	0.6164347	4.19
6	0.12739	0.1326542	4.13	0.59164	0.6203250	4.85
7	0.13694	0.1347883	1.57	0.69391	0.6851052	1.27
8	0.13693	0.1361286	0.59	0.69391	0.6823029	1.67
9	0.13692	0.1355243	1.02	0.66456	0.6628922	0.25
10	0.13699	0.1365456	0.33	0.63673	0.6415455	0.76
11	0.13693	0.1378208	0.65	0.61105	0.6212642	1.67
12	0.13687	0.1392750	1.76	0.60749	0.6250802	2.90
13	0.14510	0.1429361	1.49	0.70656	0.6948980	1.65
14	0.14508	0.1438693	0.84	0.70656	0.6923452	2.01
15	0.14506	0.1436631	0.96	0.67821	0.6717128	0.96
16	0.14505	0.1456069	0.38	0.65215	0.6510232	0.17
17	0.14498	0.1458578	0.60	0.62731	0.6284869	0.19
18	0.14493	0.1468274	1.31	0.62728	0.6321484	0.78
19	0.15279	0.1520701	0.47	0.71796	0.7065822	1.58
20	0.15315	0.1525457	0.39	0.71797	0.7042565	1.91
21	0.15272	0.1536663	0.62	0.66463	0.6596882	0.74
22	0.15272	0.1540975	0.90	0.66463	0.6611065	0.53
23	0.15268	0.1547469	1.35	0.64076	0.6380649	0.42
24	0.15277	0.1551655	1.57	0.64075	0.6414859	0.12
25	0.16043	0.1618849	0.91	0.72840	0.7194508	1.23
26	0.16056	0.1618710	0.82	0.72840	0.7173581	1.52
27	0.16045	0.1625163	1.29	0.70154	0.6949559	0.94
28	0.16042	0.1632984	1.79	0.67651	0.6715816	0.73
29	0.16038	0.1642030	2.38	0.65313	0.6495716	0.55
30	0.16033	0.1640434	2.32	0.65313	0.6526653	0.07
31	0.17606	0.1725136	2.01	0.71188	0.7078705	0.56
32	0.17624	0.1719142	2.45	0.71188	0.7074109	0.63
33	0.17596	0.1738606	1.19	0.66463	0.6622143	0.36
34	0.17593	0.1731585	1.58	0.66463	0.6649077	0.04
35	0.17592	0.1746180	0.74	0.64320	0.6416333	0.24
36	0.17866	0.1739182	2.65	0.64320	0.6460349	0.44
37	0.18410	0.1818914	1.20	0.74680	0.7449834	0.24
38	0.18419	0.1809883	1.74	0.74680	0.7435232	0.44

39	0.18399	0.1828300	0.63	0.69751	0.6969945	0.07
40	0.18394	0.1833522	0.32	0.67527	0.6750239	0.04
41	0.18394	0.1822164	0.94	0.67542	0.6772773	0.27
42	0.19244	0.1913327	0.58	0.75622	0.7560544	0.02
43	0.19238	0.1901538	1.16	0.75636	0.7550503	0.17
44	0.19231	0.1916787	0.33	0.73290	0.7318080	0.15
45	0.19219	0.1923868	0.10	0.68982	0.6871289	0.39
46	0.19209	0.1909917	0.57	0.68974	0.6889483	0.11
47	0.19969	0.2001076	0.21	0.76322	0.7654694	0.30
48	0.19902	0.1988323	0.09	0.76244	0.7650114	0.34
49	0.19963	0.2003503	0.36	0.74033	0.7416996	0.19
50	0.19966	0.2005740	0.46	0.71935	0.7191051	0.03
51	0.19950	0.2007947	0.65	0.69833	0.6979635	0.05
52	0.19939	0.1993559	0.02	0.69826	0.6993942	0.16
53	0.20701	0.2079641	0.46	0.79424	0.7971904	0.37
54	0.20703	0.2069705	0.03	0.79423	0.7975328	0.42
55	0.20685	0.2083163	0.71	0.74683	0.7500257	0.43
56	0.20675	0.2070402	0.14	0.74677	0.7502227	0.46
57	0.20678	0.2084260	0.80	0.72567	0.7279534	0.32
58	0.20667	0.2071255	0.22	0.72559	0.7284780	0.40
59	0.21405	0.2154627	0.66	0.80001	0.8029590	0.37
60	0.21404	0.2147133	0.32	0.80001	0.8042234	0.53
61	0.21395	0.2155904	0.77	0.77596	0.7796314	0.47
62	0.21376	0.2146790	0.43	0.75335	0.7574290	0.54
63	0.21383	0.2156373	0.85	0.73232	0.7354261	0.42
64	0.21371	0.2146916	0.46	0.73227	0.7359203	0.50
65	0.22087	0.2224658	0.72	0.78199	0.7849374	0.38
66	0.22078	0.2220044	0.56	0.78199	0.7861510	0.53
67	0.22080	0.2224138	0.73	0.75985	0.7628475	0.39
68	0.22073	0.2223128	0.72	0.73897	0.7418027	0.38
69	0.22067	0.2222018	0.70	0.71940	0.7221184	0.38
70	0.22057	0.2218690	0.59	0.71936	0.7226738	0.46
71	0.22779	0.2289215	0.50	0.78765	0.7894953	0.23
72	0.22767	0.2289910	0.58	0.78765	0.7910608	0.43
73	0.22759	0.2287766	0.52	0.76605	0.7679700	0.25
74	0.22752	0.2285736	0.46	0.74561	0.7474017	0.24
75	0.22740	0.2287509	0.59	0.74517	0.7477170	0.34
76	0.22761	0.2283581	0.33	0.72638	0.7281181	0.24
77	0.22751	0.2286635	0.51	0.72635	0.7283697	0.28
78	0.23500	0.2350617	0.02	0.79304	0.7935772	0.07
79	0.23474	0.2357108	0.41	0.79297	0.7953076	0.29
80	0.23468	0.2355458	0.37	0.77196	0.7733166	0.18
81	0.23476	0.2345302	0.10	0.75226	0.7525106	0.03

82	0.23469	0.2342113	0.20	0.73380	0.7335845	0.03
83	0.23456	0.2351915	0.27	0.73373	0.7334538	0.04
84	0.24173	0.2409560	0.32	0.79797	0.7973710	0.07
85	0.24156	0.2421858	0.26	0.79796	0.7990580	0.14
86	0.24164	0.2406518	0.41	0.77753	0.7770005	0.07
87	0.24156	0.2402638	0.54	0.75841	0.7573459	0.14
88	0.24148	0.2398478	0.68	0.74045	0.7387509	0.23
89	0.24133	0.2414841	0.06	0.74037	0.7381274	0.30
90	0.24825	0.2466321	0.65	0.80264	0.8009735	0.21
91	0.24809	0.2484045	0.13	0.80264	0.8024067	0.03
92	0.24817	0.2462747	0.76	0.78257	0.7812199	0.17
93	0.24815	0.2458165	0.94	0.76354	0.7620361	0.20
94	0.24794	0.2453168	1.06	0.74567	0.7437665	0.25
95	0.24779	0.2475469	0.10	0.74561	0.7425225	0.41
96	0.25634	0.2520797	1.66	0.80982	0.8044007	0.67
97	0.25613	0.2543287	0.70	0.80969	0.8053856	0.53
98	0.25616	0.2516941	1.74	0.79125	0.7853049	0.75
99	0.25596	0.2540823	0.73	0.79115	0.7847830	0.80
100	0.25596	0.2506265	2.08	0.75583	0.7486937	0.94
101	0.25575	0.2533583	0.94	0.75575	0.7466990	1.20
	Error promedio		0.87	Error promedio		0.62

Realizado por: García, Cristian, 2021



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

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

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 16/04/2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Cristian Andrés García Mejía
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
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, l=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.04.16 07:33:06
-05'00'



0658-DBRAI-UPT-2021