



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE
DESTILACIÓN BINARIA BENCENO-TOLUENO PARA LA
PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE LOS PRODUCTOS
MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES.**

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: BRYAN EDUARDO OROZCO MOROCHO

DIRECTOR: Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO

Riobamba - Ecuador

2019

©2019, Bryan Eduardo Orozco Morocho.

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

Yo, Bryan Eduardo Orozco Morocho declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y que los resultados del mismo son auténticos y originales. Los textos constantes en el documento que provienen de otra fuente están debidamente citados y referenciados.

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

Riobamba, 11 de diciembre de 2019

Bryan Eduardo Orozco Morocho

060405906-3

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

El tribunal del trabajo de titulación certifica que: La propuesta tecnológica “**MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE DESTILACIÓN BINARIA BENCENO-TOLUENO PARA LA PREDICCIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE LOS PRODUCTOS MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES.**” de responsabilidad del señor Bryan Eduardo Orozco Morocho, ha sido prolijamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de titulación, quedando autorizada su presentación.

	Firma	Fecha
Dr. Bolivar Edmundo Flores Humanante PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	_____	2019-12-11
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco DIRECTOR DEL TRABAJO DE TITULACIÓN	_____	2019-12-11
Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco MIEMBRO DEL TRIBUNAL	_____	2019-12-11

DEDICATORIA

Dedico esta tesis a mis padres quienes me apoyaron durante cada actividad en la universidad, siempre me dieron con su ejemplo un espíritu de lucha y responsabilidad.

A mis hermanos quienes han sido mi fuente de energía para dar lo máximo de mí.

A mi familia, en especial a mis abuelitas Carmen y Luz; quienes me han consentido con sus consejos y visión de vida.

A mi novia, Jehnnyfer quien con su amor ha estado pendiente de mí en cada decisión tomada, apoyándome en todas las dificultades y brindándome su hombro cuando las cosas no iban según lo esperado.

A mis amigos scouts quienes forjaron en mí un ánimo de liderazgo y obediencia y a mis amigos compañeros de estudio por demostrarme el valor de la amistad.

Bryan

AGRADECIMIENTO

La vida nos ofrece un camino de retos y oportunidades, por tanto, agradezco a todos quienes estuvieron durante mi desarrollo profesional y personal. De manera especial a mi familia y pareja quienes estuvieron siempre pendientes de mi salud, turnándose día a día para cuidarme para que pronto pueda mejorar, sintiéndome respaldado en las dificultades.

De igual manera, expreso un profundo agradecimiento a los buenos profesores que tuve durante mis estudios; y a mi tutor de tesis quien es un profesional incomparable, considerándolo mi amigo ya que me orientó en mi vida profesional desde el ingreso hasta mi hora de salida.

Bryan

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	viii
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
RESUMEN.....	xiii
ABSTRACT.....	xiv
CAPÍTULO I	
1	INTRODUCCIÓN..... 15
1.1	Antecedentes..... 15
1.2	Justificación del proyecto..... 16
1.3	Beneficiarios directos e indirectos..... 17
1.3.1	<i>Beneficiarios Directos.....</i> 17
1.3.2	<i>Beneficiarios Indirectos.....</i> 17
CAPÍTULO II	
2	MARCO TEÓRICO REFERENCIAL..... 19
2.1	Estado del arte..... 19
2.1.1	<i>Antecedentes.....</i> 19
2.2	Bases teóricas..... 20
2.2.1	<i>Destilación.....</i> 20
2.2.1.1	<i>Componentes principales de una columna de destilación.....</i> 21
2.2.1.2	<i>Tipos de columnas de destilación.....</i> 22
2.2.2	DWSIM - Chemical Process Simulator..... 24
2.2.2.1	<i>Interfaz plataforma DWSIM.....</i> 24
2.2.2.2	<i>Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos.....</i> 25
2.2.3	Neurona artificial..... 27
2.2.3.1	<i>Redes Neuronales.....</i> 28
2.2.3.2	<i>Selección de un modelo de red neuronal.....</i> 29
2.2.3.3	<i>Redes Neuronales en MATLAB.....</i> 32
CAPÍTULO III	
3	METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN..... 35
3.1	Establecimiento de parámetros..... 36
3.2	Simulación DWSIM..... 38
3.3	Pre-procesamiento de datos..... 40
3.4	Diseño de la red neuronal artificial..... 41
3.5	Entrenamiento..... 44
3.6	Validación..... 45

3.7	Análisis Estadístico	47
3.8	Gestión del proyecto	50
3.8.1	<i>Cronograma</i>	50
3.8.2	<i>Presupuesto</i>	51
CAPÍTULO IV		
4	RESULTADOS, DISCUSIÓN Y ANÁLISIS DE RESULTADOS	52
4.1	Sistema de destilación	52
4.1.1	<i>Balance de masa del sistema de destilación</i>	57
4.2	Análisis de los datos generados en DWSIM	60
4.3	Programación de la Red Neuronal Artificial en Matlab	64
4.3.1	<i>Normalización de los datos</i>	65
4.3.2	<i>Código de la Red Neuronal Artificial</i>	66
4.4	Determinación de la idoneidad de la RNA	77
4.4.1	<i>Análisis estadístico de la fracción molar de benceno en el destilado</i>	77
4.4.2	<i>Análisis estadístico de la fracción molar de benceno en el residuo</i>	81
4.5	Predicción de valores con la Red Neuronal Artificial	85
CONCLUSIONES		88
RECOMENDACIONES		90
GLOSARIO		
BIBLIOGRAFÍA		
ANEXOS		

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-3: Condiciones de operación de la columna de destilación.	37
Tabla 2-3: Condiciones de operación de la columna de destilación.	38
Tabla 3-3: Condiciones de la corriente de alimentación de la columna de destilación.	39
Tabla 4-3: Especificaciones del condensador y caldera.	40
Tabla 5-3: Rango de especificaciones de la corriente de alimentación.	40
Tabla 6-3: Cronograma del proyecto.....	50
Tabla 7-3: Presupuesto del proyecto.	51
Tabla 1-4: Corrientes en el residuo	53
Tabla 2-4: Fase líquida en el residuo.....	53
Tabla 3-4: Fracción molar de benceno y tolueno en el residuo	53
Tabla 4-4: Fracción másica de benceno y tolueno en el residuo.....	53
Tabla 5-4: Flujo molar de benceno y tolueno en el residuo	53
Tabla 6-4: Flujo másico de benceno y tolueno en el residuo.....	54
Tabla 7-4: Corrientes en el destilado.....	54
Tabla 8-4: Fase líquida en el destilado	54
Tabla 9-4: Fracción molar de benceno y tolueno en el destilado.....	55
Tabla 10-4: Fracción másica de benceno y tolueno en el destilado	55
Tabla 11-4: Flujo molar de benceno y tolueno en el destilado	55
Tabla 12-4: Flujo másico de benceno y tolueno en el destilado	55
Tabla 13-4: Condiciones en la alimentación	56
Tabla 14-4: Fase líquida en la alimentación	56
Tabla 15-4: Fracción molar de benceno y tolueno en la alimentación.....	56
Tabla 16-4: Fracción másica de benceno y tolueno en la alimentación	56
Tabla 17-4: Flujo molar de benceno y tolueno en la alimentación	56
Tabla 18-4: Flujo másico de benceno y tolueno en la alimentación	57
Tabla 19-4: Datos de concentración en la alimentación, destilado y residuo.....	57
Tabla 20-4: Base de datos de la destilación Benceno-Tolueno generada en DWSIM	60
Tabla 21-4: Variables propuestas en Matlab	65
Tabla 22-4: Resumen Regresión lineal de RNA con 1000 capas ocultas.	70
Tabla 23-4: Resumen Regresión lineal de RNA con 18 capas ocultas.	76
Tabla 24-4: Comparación entre Redes Neuronales Artificiales.....	77
Tabla 25-4: Resumen tabla ANOVA para fracción de benceno en el destilado.	77
Tabla 26-4: Medias para la fracción de benceno en el destilado.	78

Tabla 27-4: Método: 95.0 porcentaje LSD	79
Tabla 28-4: Contraste entre muestras	79
Tabla 29-4: Resumen de Prueba de Kruskal-Wallis.....	80
Tabla 30-4: Resumen tabla ANOVA para fracción de benceno en el residuo.	81
Tabla 31-4: Medias para la fracción de benceno en el residuo.	82
Tabla 32-4: Método: 95.0 porcentaje LSD	83
Tabla 33-4: Contraste entre muestras	83
Tabla 34-4: Resumen de Prueba de Kruskal-Wallis.....	84
Tabla 35-4: Comparación de los resultados del sistema de destilación benceno-tolueno.	86
Tabla 36-4: Porcentaje error de los resultados del sistema de destilación benceno-tolueno.	86

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de titulación.....	35
Gráfico 1-4. Fracción molar de benceno en el destilado.....	63
Gráfico 2-4. Fracción molar de benceno en el residuo	64
Gráfico 3-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en los productos.....	67
Gráfico 4-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en el residuo.....	68
Gráfico 5-4. Error cuadrático medio para la RNA con 1000 capas ocultas.	69
Gráfico 6-4. Regresión lineal para la RNA con 1000 capas ocultas.	69
Gráfico 7-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en los productos.....	74
Gráfico 8-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en el residuo.....	75
Gráfico 9-4. Error cuadrático medio para la RNA con 18 capas ocultas.	75
Gráfico 10-4. Regresión lineal para la RNA con 18 capas ocultas.	76
Gráfico 11-4. Gráfico ANOVA para la fracción de benceno en el destilado.	78
Gráfico 12-4. Gráfico de medias para la fracción de benceno en el destilado.	79
Gráfico 13-4. Gráfico de caja y bigote para la fracción de benceno en el destilado.....	80
Gráfico 14-4. Gráfico ANOVA para la fracción de benceno en el residuo.....	82
Gráfico 15-4. Gráfico de medias para la fracción de benceno en el destilado.	83
Gráfico 16-4. Gráfico de caja y bigote para la fracción de benceno en el residuo.	85

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Componentes principales de un destilador.....	22
Figura 2-2. Interfaz DWSIM.....	24
Figura 3-2. Paquete de propiedades	26
Figura 4-2. Paquete de propiedades	27
Figura 5-2. Estructura base de una RNA.....	28
Figura 6-2. Diseño base de una RNA.....	29
Figura 7-2. Interfaz gráfica de usuario MATLAB.....	33
Figura 1-3. Diagrama de la columna de destilación en HYSYS.....	37
Figura 2-3. Torre de destilación benceno-tolueno DWSIM	39
Figura 3-3. Herramienta Neural Fitting en MATLAB.....	42
Figura 4-3. Selección de datos de entrada y salida.	42
Figura 5-3. Arquitectura de la Red Neuronal Artificial.....	43
Figura 6-3. Entrenamiento de la Red Neuronal Artificial.....	45
Figura 7-3. Validación de la Red Neuronal Artificial.....	47
Figura 8-3. Estadística en Statgraphics Centurion.....	48
Figura 1-4. Condiciones de Torre de destilación benceno-tolueno.....	58
Figura 2-4. Arquitectura de la red neuronal con 1000 capas ocultas.	67
Figura 3-4. Arquitectura de la red neuronal con 18 capas ocultas.	74

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. ARTÍCULO CIENTÍFICO DE IMPACTO MEDIO.

ANEXO B. REPORTE DE SIMULACIÓN EN DWSIM

ANEXO C. BASE DE DATOS PARA USUARIO

RESUMEN

La finalidad de esta investigación fue modelar y simular un sistema de destilación binaria benceno-tolueno para la predicción de la composición de los productos mediante redes neuronales artificiales. Para el diseño de la RNA se utilizó datos obtenidos de la simulación en el software de acceso libre DWSIM con condiciones de operación propuestas en un artículo científico de medio impacto publicado por el departamento de Ingeniería Química del Instituto Nacional de tecnología de Calcuta. Mediante el pre procesamiento de datos se corrigió datos atípicos aplicando la prueba de Grubbs, por lo tanto, se utilizó una base de datos con 100 variables de proceso como entradas para el modelado en Matlab. De los cuales se utilizó un 15% para la validación, el 15 % para la prueba y un 70% en el entrenamiento de la RNA. Para el entrenamiento del modelo se utilizó el algoritmo de Levenberg-Marquardt. La arquitectura del modelado de tipo FeedForward Backpropagation contó con 2 capas de entrada, 18 capas ocultas y 2 capas de salida. Se concluye que el diseño de la red neuronal artificial tiene un óptimo rendimiento de predicción ya que, estadísticamente presentó un coeficiente de correlación igual a 0.94076 y un error cuadrático medio igual a 0.0049875. En adición, los valores registrados de $-P$ para la fracción molar de benceno en el destilado y en el residuo como productos reales y predichos son 0.9030 y 0.7926 respectivamente, indicando que no existen diferencias significativas entre los datos analizados. Sin embargo se recomienda la implementación de un sensor suave para los vectores pesos que influyen en el entrenamiento de la RNA.

PALABRAS CLAVE: <TECNOLOGIA Y CIENCIAS DE LA INGENIERÍA>, <CONTROL AUTOMÁTICO>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <DESTILACIÓN BINARIA>

ABSTRACT

The purpose of this research was to model and simulate a benzene-toluene binary distillation system for the prediction of product composition through artificial neural networks. For the desing of the Artificial Neural Network (RNA), data obtained from the simulation in the DWSIM free access software with operating conditions proposed in a medium-impact scientific article published by the Department of Chemical Engineering of the Instituto Nacional de Tecnología de Calcuta was used. By pre-processing data, outliers were corrected by applying the Grubbs test, therefore, a database with 100 process variables was used as inputs for modelling in Matlab. Of which 15% was used for validation, 15% for testing and 70% for RNA training. The Levenberg-Marquardt was used for model training. The modelling architecture of the FeedForward Backpropagation type had 2 input layers, 18 hidden layers, and 2 output layers. It is concluded that the desing of the artificial neural network has an optimal prediction performance since, statistically, it presents a correlation coefficient equal to 0.94076 and an average square error equal to 0.0049875. Besides, the registered values of $-P$ for the molar fraction of benzene in the distillate and the residue as actual and predicted products are 0.9030 and 0.7926 respectively, indicating that there are no significant differences between the analyzed data. However, the implementation of a soft sensor is recommended for vector weights that influence RNA training.

KEYWORDS: ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY, PROCESS CONTROL, AUTOMATIC CONTROL, ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS (RNA), MATLAB (SOFTWARE), DWSIM (SOFTWARE), BINARY DISTILLATION.

CAPÍTULO I

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes.

En el modelado de procesos, diseño y simulación de operaciones unitarias como es la destilación, es necesario disponer de datos precisos sobre las propiedades físicas del sistema en estudio, en especial la temperatura, presión y flujo másico como parámetros de entrada. Si se analiza superficialmente la destilación, una operación de transferencia de masa, en la cual están muy perfilados los ingenieros químicos, requiere para su método de cálculo datos de equilibrio de mezclas binarias, ternarias o múltiples. Obtener estos datos resulta muy tedioso y hace demorado el proceso. Por lo tanto, se busca el apoyo de herramientas interactivas aplicando inteligencia artificial. Cabe mencionar que más del 95% de líquidos en la industria son separados por destilación, de manera que se requiere un producto de alta pureza. De manera que, es necesaria la medición de la composición de los productos que se entregan, y es sabido que los parámetros de interacción binaria son funciones tanto de la temperatura como de la presión, donde se utilizan ecuaciones de estado haciendo de este procedimiento no adecuado para el control en tiempo real por su gran retraso de medición y alto costo de inversión.

La utilización de un Software computacional para la realización de análisis y optimizaciones de diferentes procesos de flujo no se pueden solamente describir de manera analítica, por lo que se debe hacer uso de nuevos métodos los cuales proporcionan una perspectiva minuciosa del proceso dentro de equipos que trabajan esencialmente con flujos de fluidos puros y mezclas. En vista a lo anterior, se crea un interés en las redes neuronales artificiales para la estimación de estos datos.

En concordancia con el problema descrito, se pretende simular redes neuronales utilizando el Toolbox de MATLAB, así como también se utilizará el software para

procesos químicos de código abierto DWSIM para el modelado de la destilación binaria Benceno Tolueno.

1.2 Justificación del proyecto.

La utilización de herramientas tecnológicas como software especializado para la solución de cálculos matemáticos, es una de las habilidades de un Ingeniero Químico, el cual mediante un simulador es capaz de desarrollar cálculos termodinámicos permitiéndole así controlar y simular procesos químicos de manera óptima. Por ello, las herramientas tecnológicas cumplen un papel fundamental dentro del desarrollo de la industria y de manera especial aumenta la eficiencia de procesos industriales.

Diseñar una red neuronal en MATLAB para las estimaciones de los datos y cálculos presentes en la destilación binaria es una forma de aportar al desarrollo tecnológico para la industria y educación. En efecto, éste es un campo de desempeño de un Ingeniero Químico de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, el cual está capacitado para diseñar, controlar y evaluar procesos industriales en general, mediante la aplicación de simuladores computacionales.

Este proyecto viene vinculado a la línea de investigación de Ingeniería de procesos, del programa de Ingeniería Química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, la cual se apoya en disciplinas como Operaciones Unitarias, Control de procesos e Ingeniería de plantas; cuyo enfoque se basa en la optimización, control y simulación de los procesos.

Se hace necesario resaltar que, Ésta investigación va dirigida a los estudiantes y profesionales pertenecientes a la carrera de Ingeniería Química y afines, quienes serán los principales beneficiarios del uso del simulador de código abierto DWSIM, así como también de futuros desarrollos de procesos complejos a través del diseño de redes neuronales.

1.3 Beneficiarios directos e indirectos

1.3.1 *Beneficiarios Directos*

Los beneficiarios directos del presente trabajo de titulación planteado son los estudiantes de la Carrera de Ingeniería Química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, permitiéndoles afianzar sus conocimientos de procesos industriales a través de simulación mediante software de código abierto, y la posible aplicación de redes neuronales como inteligencia artificial.

1.3.2 *Beneficiarios Indirectos*

El sector de manufactura del país, ya que al simular procesos industriales reales y mediante redes neuronales se pueden optimizar los procesos de la mano con un óptimo rendimiento.

OBJETIVOS

Objetivo general

Modelar un sistema de destilación binaria Benceno-Tolueno para la predicción de la composición de los productos mediante redes neuronales artificiales.

Objetivo específico

- Diseñar un proceso de destilación binaria con base en un artículo de mediano o alto impacto.
- Diseñar una red neuronal utilizando el toolbox nftool de MATLAB.
- Validar las variables del proceso obtenidas por la red neuronal, DWSIM con base en referencias bibliográficas.
- Crear una base de datos del modelado artificial para facilitar el manejo de la información al usuario.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO REFERENCIAL

2.1 Estado del arte

2.1.1 *Antecedentes*

La naturaleza humana ha hecho que se busque nuevas vías para la mejora continua de la vida, donde es fundamental la investigación para limitar los esfuerzos hacia aquellas actividades complejas, cuyo ejemplo básico es la construcción de máquinas inteligentes que realicen operaciones matemáticas de manera instantánea; dejando de lado el lápiz y papel para para incursionar en la automatización.

“No fue hasta la Segunda Guerra Mundial, cuando ya se disponía de instrumentos electrónicos, que se empezaron a recoger los primeros frutos. En 1946 se construyó la primera computadora electrónica, ENIAC. Desde entonces los desarrollos en este campo han tenido un auge espectacular.” (Matich Damián 2001). Si bien es cierto estos equipos nos ayudan a resolver problemas un tanto engorrosos, pero no es suficiente acorde a la evolución técnica del hombre, existen problemas versátiles más complejos que requieren de manipulación de datos. Así, la inteligencia artificial es un intento por descubrir y describir aspectos de la inteligencia humana que pueden ser simulados mediante máquinas. “Esta disciplina se ha desarrollado fuertemente en los últimos años teniendo aplicación en algunos campos como visión artificial, demostración de teoremas, procesamiento de información expresada mediante lenguajes humanos... etc.” (Matich Damián 2001).

Históricamente en 1957 Frank Rosenblatt comenzó el desarrollo del Perceptrón. Esta es la red neuronal más antigua; utilizándose hoy en día para aplicación como identificador de patrones. Posteriormente, David Rumelhart/G. Hinton. Redescubrieron el algoritmo de aprendizaje de propagación hacia atrás (backpropagation). (Matich Damián 2001)

Dejando así, un amplio panorama para futuras investigaciones con el desarrollo de redes neuronales y su especial aplicación al área de control y producción.

Se citan algunas de las investigaciones realizadas en el Ecuador al respecto:

En el 2013, Marcia M. Lastre Valdes, realizó un estudio de las principales teorías y modelos que abordan la predicción de la insolvencia y quiebra empresarial, utilizando redes neuronales artificiales como cambio a las herramientas tradicionales de prácticas empresariales. Esto desarrollado en la Universidad Tecnológica Equinoccial.

De igual manera, el Departamento de Ciencias de la Computación de la Universidad de Cuenca, en base a redes neuronales artificiales para la predicción de caudales bajo periodos de tiempo Subdiarios. Estudio que tiene como peculiaridad la utilización del algoritmo OWO-HWO que requiere de un tiempo mayor para realizar el mismo número de iteraciones que con el algoritmo Backpropagation. De igual manera, el error medio cuadrático es menor con el Algoritmo Backpropagation que con el OWO-HWO. (Veintimilla Jaime; Cisneros Felipe 2015) Dando como resultado de la investigación que el algoritmo propuesto muestra una error cuadrático medio menor al algoritmo Backpropagation.

Es meritorio destacar que en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo Iván Fernando Sinaluisa dentro del Proyecto de Investigación y desarrollo, presentado ante el Instituto de Postgrado y Educación Continua de la ESPOCH propone la aplicación de la red neuronal artificial Feedforward backpropagation para la predicción de demanda de energía eléctrica en la empresa eléctrica riobamba s.a. Con lo cual se pretende contribuir con la planificación de operación y mantenimiento de las centrales eléctricas y a su vez servir de modelo para otras instituciones con similares características. (Sinaluisa 2015)

2.2 Bases teóricas

2.2.1 Destilación

La destilación es una operación unitaria de separación ampliamente utilizada en la industria. “La destilación utiliza un principio de separación muy simple: un contacto íntimo se da entre la mezcla inicial y una segunda fase para mejorar una transferencia de masa efectiva entre esas dos fases.” (Otiniano, 2004, p 217). De igual manera, las condiciones termodinámicas están sujetas al componente de la fase inicial a ser separado consecuente de la segunda fase o final. Estas fases están compuestas de dos fases simples con distinta composición, así como también de tres etapas para el proceso de separación.

- Creación de un sistema de dos fases
- Transferencia de masa entre las fases
- Separación de las fases

“En la destilación la segunda fase es generada por vaporización parcial de la alimentación líquida, por lo cual dicha segunda fase difiere de la mezcla original. Por esto la destilación requiere energía en la forma de calor que puede subsecuentemente, fácilmente removida del sistema.” (Otiniano, 2004, p 218)

Supongamos una sustancia como alimentación a la columna a una determinada temperatura y presión. Parte de las moléculas rompen la atracción de las moléculas del líquido de esta sustancia debido a que no todas tienen la misma velocidad, y pueden pasar a la fase gaseosa. “En la fase gas no todas las moléculas van a tener la misma energía. Aquellas moléculas de la fase gaseosa con menor energía podrán ser atrapadas por el líquido y tendremos una situación de equilibrio entre el líquido y el gas.” (Cahuana, 2014, p 42)

“La presión de vapor depende de la temperatura a que trabaje, de la naturaleza de la sustancia. Las sustancias con menor tendencia a pasar a gas son menos volátiles. La cantidad máxima de moléculas en fase gas viene dada por la presión de vapor.” (GEANKOPLIS, 1998)

Como menciona en el documento cálculos en destilación continua para sistemas binarios ideales utilizando hoja de cálculo:

La destilación continua o fraccionamiento, es una operación de destilación de múltiples etapas y en contracorriente. Para una mezcla de dos componentes volátiles llamada binaria, con ciertas excepciones, es posible separar, mediante este método, dicha mezcla en sus componentes, recuperando cada uno en el estado de pureza que se desee. (Otiniano, 2004, p 218)

2.2.1.1 Componentes principales de una columna de destilación

Para la operación unitaria de destilación se cuenta con varios componentes, mismos que permiten la transferencia de calor y masa de las sustancias a destilar. Las partes de una columna típica son:

- Un recipiente vertical en la cual se aloja la sustancia a destilar
- En el interior de la columna se utilizan platos o relleno que permiten un mejor contacto entre el líquido y el vapor.
- En la parte inferior un reboiler o caldera para la vaporización del producto en el fondo.
- En la parte superior se utiliza un condensador para enfriar y condensar el vapor.

- “Un tambor de reflujo para recibir el vapor condensado del tope de la columna para que el líquido (reflujo) pueda reciclarse a la columna.” (Cahuana, 2014, p 42)

El esquema siguiente representa una unidad de destilación típica con una sola alimentación y dos corrientes de producto:

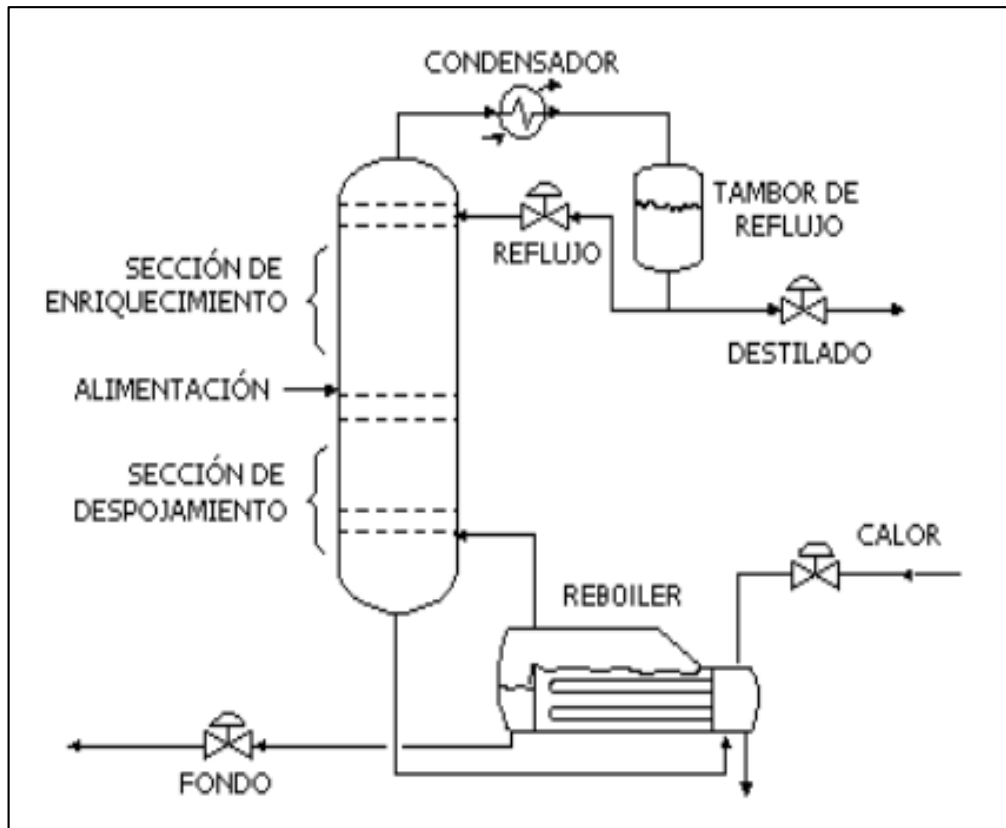


Figura 1-2. Componentes principales de un destilador.
Fuente: (Cahuana 2014, p. 43)

2.2.1.2 Tipos de columnas de destilación

En base al tipo de separación específica y el diseño en base a su complejidad se indican los siguientes tipos de columnas de destilación en función de su operación:

- Continuas
- Discontinuas o batch

- *Columnas continuas*

“Las columnas continuas procesan una corriente de alimentación ininterrumpida. No existen interrupciones a menos que existan problemas con la columna o las unidades de proceso contiguas. Son capaces de manejar altas producciones y son el tipo más común.” (Cahuana 2014, p. 44)

Existe una subclasificación de las columnas continuas siendo estas:

La naturaleza de la alimentación que están procesando

- Columna binaria: la alimentación contiene solamente dos componentes.
- Columna multicomponente: la alimentación contiene más de dos componentes.

La cantidad de corrientes de producto que tenga

- Columna multi-producto: la columna tiene más de dos corrientes de producto.

El tipo de interiores de columna

- Columna de platos: cuando se utilizan platos de distintos diseños para retener el líquido y proveer un mejor contacto entre éste y el vapor, y por lo tanto mejor separación
- Columna rellena: “cuando en lugar de platos, se utilizan rellenos de distinto tipo para mejorar el contacto entre líquido y vapor.” (Cahuana 2014, p. 44)

- *Columnas continuas*

Un gran porcentaje de separaciones industriales se realiza en columnas de destilación tipo Batch. “La razón de esta técnica de separación de la mezcla líquida es que la operación Batch es muy adecuado para tratar pequeñas cantidades de alimentación o cuando en forma ocasional se requiere obtener un producto puro a partir de diferentes cargas de alimentación con composición variable.” (Cahuana 2014, p. 44). Cabe destacar que en este tipo de columnas se recomienda la utilización de rellenos para optimización en costos y de infraestructura.

Para comprender teóricamente el proceso dentro de una rectificación continua se menciona:

En la rectificación discontinua, la mezcla a rectificar se carga una sola vez en el rehervidor, y a medida que transcurre el proceso de destilación la composición de la carga se modifica continuamente al ir separando del sistema un destilado más rico en componente más volátil que la carga inicial. la composición de todas las corrientes y la mezcla en el rehervidor en general cambia con el tiempo. (Cahuana 2014, p. 45)

Se consideran dos métodos por los que se puede llevar a cabo la rectificación:

- Rectificación a reflujo constante.
- Rectificación a producto constante.

2.2.2 DWSIM - Chemical Process Simulator

Como punto de partida en el desarrollo del trabajo se utilizará el software DWSIM, el cual es un simulador de procesos químicos, con una rica interfaz gráfica de usuario; DWSIM permite a los estudiantes de ingeniería química e ingenieros químicos comprender mejor el comportamiento de sus sistemas químicos mediante el uso de rigurosos modelos de operaciones unitarias y termodinámicas sin costo alguno.(Medeiros 2019). Mismo que nos permitirá establecer un conjunto de datos necesarios para el diseño de la red neuronal como inteligencia artificial.

2.2.2.1 Interfaz plataforma DWSIM

Al ejecutar DWSIM en Windows, tiene la opción de dos interfaces gráficas de usuario (GUI): Classic y multiplataforma, esta última también conocida como IU "Nueva". La interfaz de usuario clásica es la basada en Windows Forms, con todas las funciones.

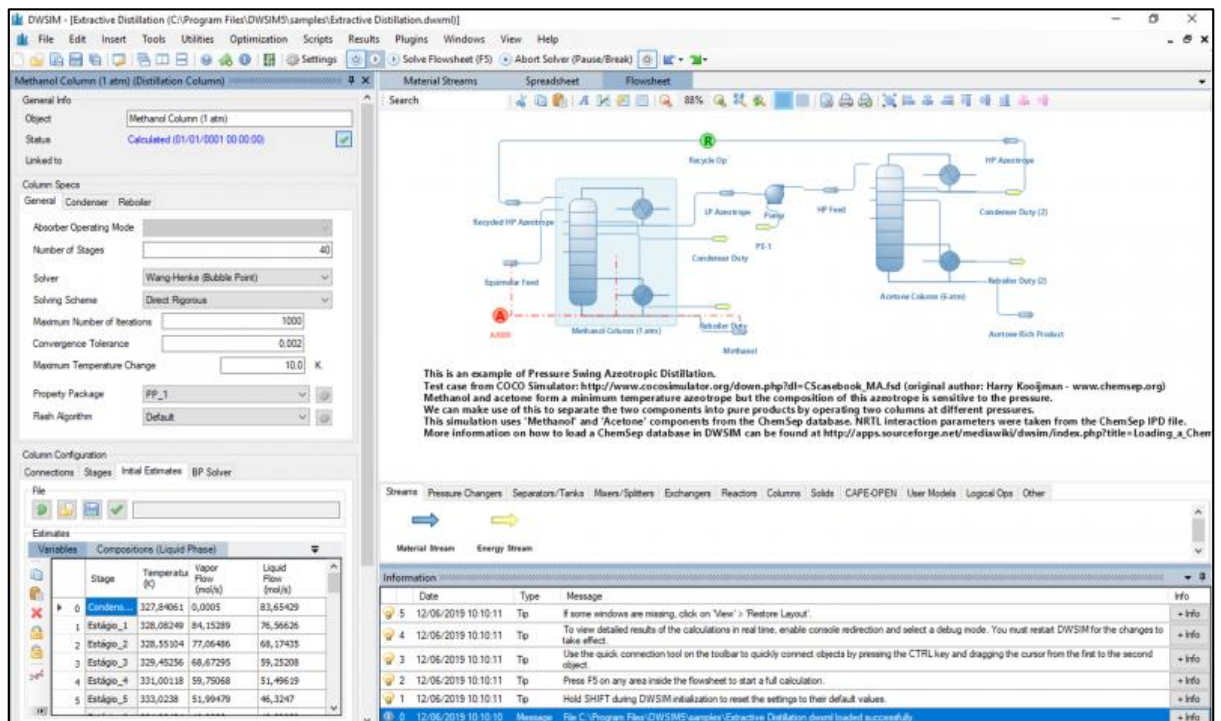


Figura 2-2. Interfaz DWSIM

Realizado por: Orozco, Bryan. 2019

Como menciona Daniel Medeiros (2019, p. 1). A partir de la versión 4.1 en adelante, DWSIM puede simular procesos de equilibrio de electrolitos vapor-líquido, vapor-líquido-líquido, sólido-líquido y acuoso en estado estacionario con los siguientes modelos termodinámicos y operaciones de unidades:

- Modelos termodinámicos: Peng-Robinson, Peng-Robinson-Stryjek-Vera 2, Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler, Lee-Kesler-Plöcker, UNIFAC (-LL), UNIFAC modificado (Dortmund), UNIQUAC, NRTL, COSMO-SAC, Chao-Seader, Grayson-Streed, LIQUAC, Extended UNIQUAC, Raoult's Law, IAPWS-97 Steam Tables, IAPWS-08 Seawater, Black-Oil and Sour Water.
- Operaciones de la unidad: Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores (conversión, PFR, CSTR, equilibrio y Gibbs), columna de destilación, Absorbentes simples, refluidos y rebobinados, separador de componentes, placa de orificio, separador de sólidos, filtro de torta continuo; Operaciones de la Unidad Excel, Script y Flowsheet.
- Utilidades: envolvente de fase, hidratos de gas natural, propiedades de componentes puros, punto crítico verdadero, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de vasos, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.
- Herramientas: Creador compuesto, Bulk C7 + / Curvas de destilación Caracterización de petróleo, Gerente de análisis de petróleo, Gerente de reacciones.
- Análisis y optimización de procesos: Utilidad de análisis de sensibilidad, optimizador multivariante con restricciones limitadas.
- Extras: Regresión de datos binarios VLE / LLE / SLE, soporte para scripts de tiempo de ejecución, complementos y objetos de monitoreo de hoja de flujo CAPE-OPEN.

2.2.2.2 *Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos*

De acuerdo con Leino (2016, p. 2), el modelado y la simulación de procesos químicos pueden usarse como una herramienta de diseño en el desarrollo de plantas químicas, y se utilizan como un medio para evaluar diferentes opciones de diseño. Los estándares de interfaz CAPEOPEN se desarrollaron para permitir la implementación y utilización de componentes de modelado de procesos en cualquier entorno de modelado de procesos compatible.

Los estándares CAPE-OPEN son estándares uniformes para la interfaz de componentes de software de modelado de procesos desarrollados específicamente para el diseño y operación de procesos químicos. “Los estándares CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y

están disponibles de forma gratuita. Se describen en un conjunto de documentación formal.” (Medeiros, 2019, p. 1)

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

- *Paquetes de propiedades (Thermo Specs 1.0 y 1.1):* puede utilizar el equilibrio termodinámico externo CAPE-OPEN y las calculadoras de propiedades como paquetes de propiedades en DWSIM. Solo tendrá que asignar los componentes y las fases del paquete de propiedades externas a los de las bases de datos internas de DWSIM. (Medeiros, 2019, p. 1)

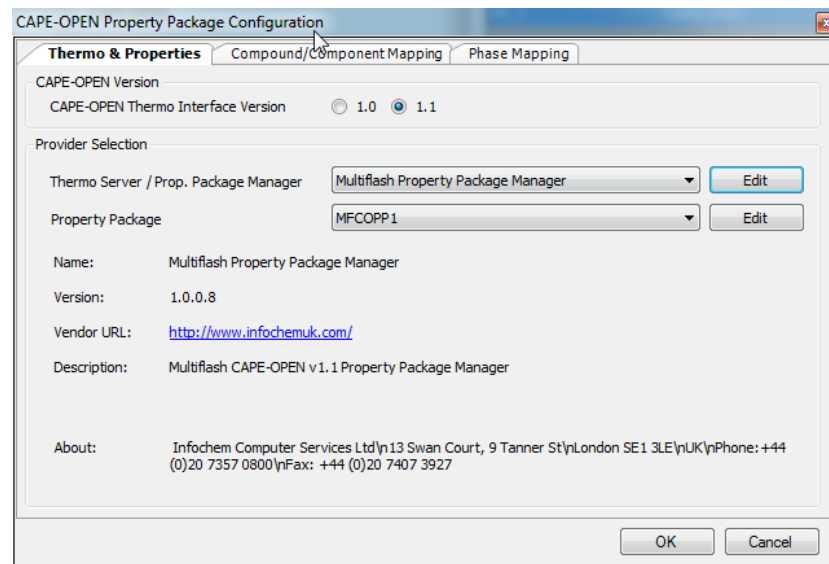


Figura 3-2. Paquete de propiedades

Fuente: (Medeiros 2019)

- *Operaciones de la unidad:* las operaciones de la unidad CAPE-OPEN se pueden agregar a los diagramas de flujo DWSIM y conectarse a / desde las corrientes de energía y material al igual que las operaciones normales de la unidad DWSIM. DWSIM también implementa las interfaces de reacción CAPE-OPEN para que pueda usar su modelo de reactor CAPE-OPEN junto con DWSIM y gestionar sus reacciones utilizando el Administrador de reacciones como de costumbre.

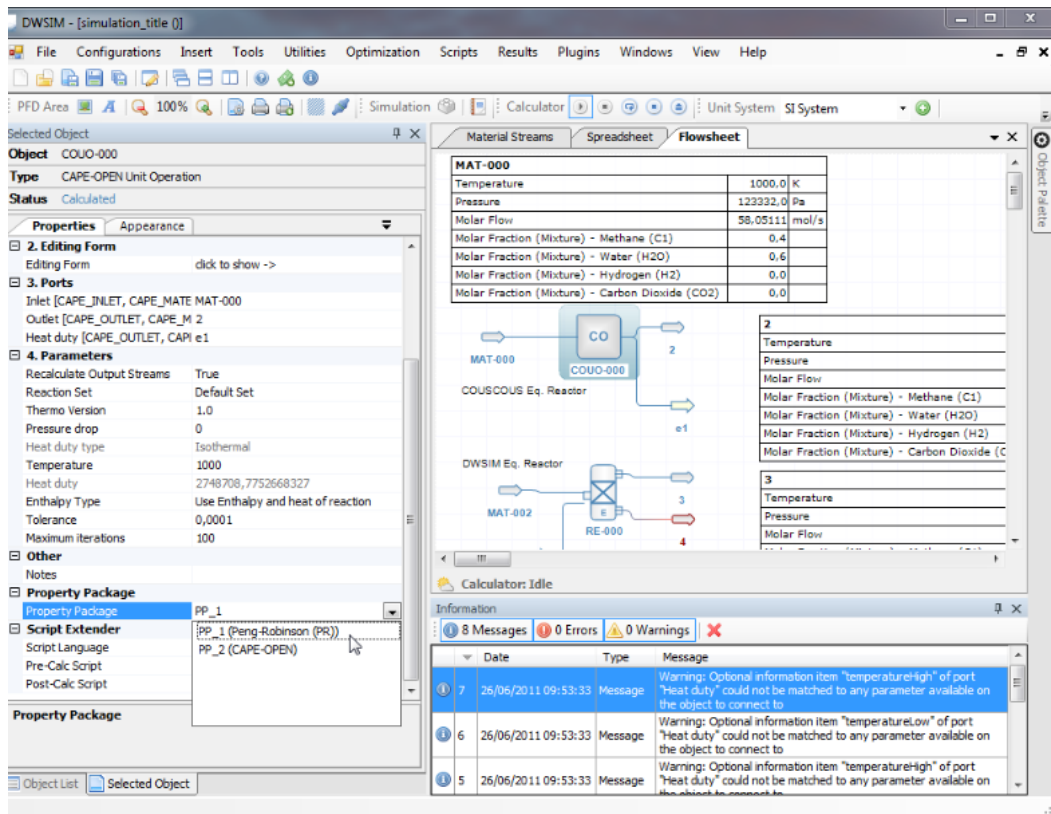


Figura 4-2. Paquete de propiedades

Fuente: (Medeiros 2019)

2.2.3 *Neurona artificial*

Según (Diego Andina, A Vega-Corona, J Seijas, & J Torres, 2007, pág. 57), “las RNA actuales se basan en el modelo matemático de neurona, propuesto por McCulloch y Pitts en 1943. Se denomina neurona a un modelo simple de cálculo que a partir de un vector de entrada que procede del exterior o de otras neuronas, que proporciona una única respuesta o salida.”

Dentro de una RNA existen numerosas conexiones entre las distintas neuronas que la forman y en argumento:

Estas conexiones simulan las conexiones neuronales del cerebro y al igual que estas pueden establecerse con mayor o menor intensidad. En el caso de las RNA estas intensidades son llamadas pesos sinápticos, de modo que cada entrada x_i de una neurona se encuentra afectada por un peso w_i , (Sinaluisa, 2015, p. 23)

Para una mejor comprensión se muestra la figura a continuación:

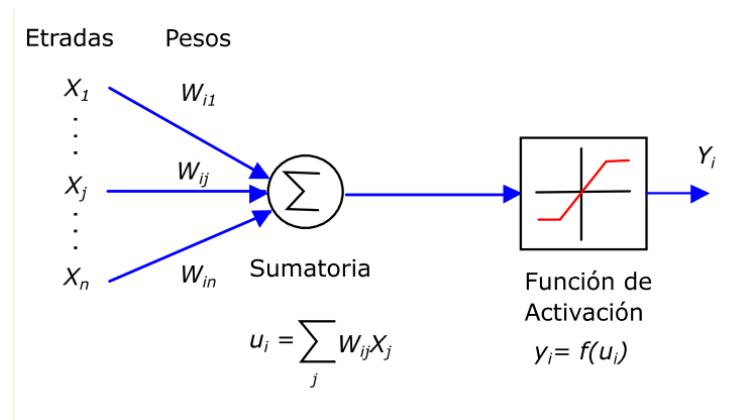


Figura 5-2. Estructura base de una RNA

Fuente: (Sinaluisa 2015)

Comúnmente, una neurona artificial presenta más de una entrada, de manera que, “las entradas son multiplicadas por los pesos pertenecientes a la matriz de pesos. La neurona tiene una ganancia o umbral que llega al mismo sumador al que llegan las entradas multiplicadas por los pesos para formar la salida.” (Quintana, 2015, p. 19). Cabe mencionar que se le denomina también sesgo al umbral de la neurona.

2.2.3.1 Redes Neuronales

Las Redes Neuronales Artificiales “son modelos matemáticos y computacionales basados en el complejo comportamiento del cerebro humano, específicamente de las neuronas biológicas. La capacidad que tienen para aprender por medio de algoritmos de entrenamiento, han permitido su uso y aplicación en todas las ciencias.” (Isasi & Galván León, 2004; citado en Chafla 2015, p. 13)

Al igual, que como, en el cerebro humano, “una neurona artificial cuenta con un diseño de red o de conectividad. La RNA está conformada de varias capas, la más común es la red multicapa, conocida también como retropropagación, ya que el entrenamiento se realiza de adelante hacia atrás.” (Quintana, 2015, p. 13). Se puede considerar que el diseño base presenta tres niveles detallados a continuación:

Nivel I: Capa de entrada, donde almacenamos los datos de entrada o patrones de entrada

Nivel II: Capa oculta, donde se realizan todas las funciones de la red neuronal siendo una o varias.

Nivel III: Capa de salida, donde se visualizan los datos de salida.

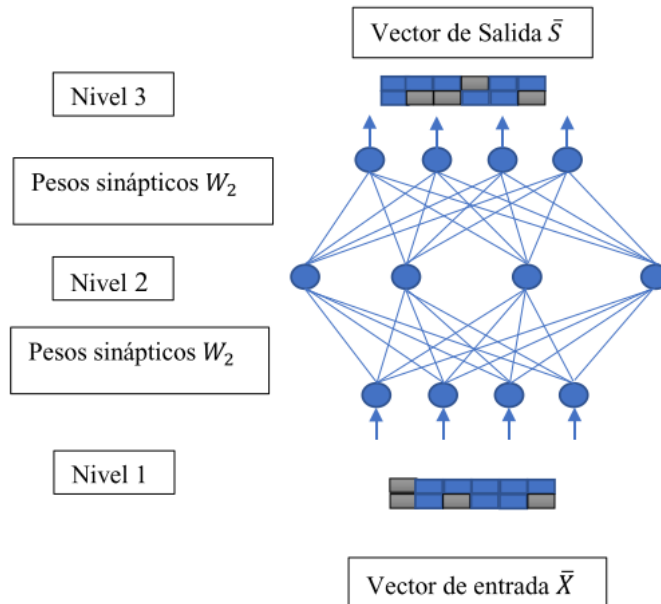


Figura 6-2. Diseño base de una RNA

Fuente: (Chafra, 2015)

2.2.3.2 Selección de un modelo de red neuronal

“Aunque hay un debate permanente sobre las estrategias de selección de modelos, es evidente que la aplicación exitosa de redes neuronales artificiales en problemas de modelado de ingeniería se ve muy afectada por cuatro factores principales.” (Quintana, 2015, p. 20):

- Tipo de red (redes recurrentes, backpropagation feedforward, la redes Neuronales wavelets, funciones de base radial, etc.),
- Estructura de la red (número de capas ocultas, número de neuronas por capa oculta),
- Funciones de activación o función de transferencia,
- Algoritmos de entrenamiento

- *Tipos de red neuronal*

“En función de cómo está constituido el mecanismo de aprendizaje, se clasifican como: redes supervisadas, redes no supervisadas e híbridas.” (Sinaluisa, 2015, p. 25). La tabla 1-2 muestra la clasificación de las RNA:

Tabla 1-2: Tipos de Redes Neuronales Artificiales

SUPERVISADO	UNIDIRECCIONAL	Perceptrón	Rosenblatt	1958
		Adaline	Widrow y Hoff	1960
		Perceptrón Multicapa Backpropagation	Rumelhart, Hinton y Wilians	1986
		Correlación en cascada	Fahiman y Lebeire	1990
		Máquina de Bolzman	Ackel, Hinton y Sejnowski	1985
		Learning Vector Quantinzation	Kohonen	1988
		General Regreción Neural Network	Specht	1991
	RECURRENTES	Recurrent bacpropagation	Pineda	1989
		Brian Sate in a Box	Andersan, Silverstein, Titz y Jones	1977
		Jordan	Jordan	1986
NO SUPERVISADO	UNIDIRECCIONALES	Neocognitrón	Fukushima, Miyake e Ito, Fukushima	1983; 1988
		Principal Component Analysis	Oja; Hertz	1982; 1991
		Mapa autoorganizado	Kohonen	1982; 1995
		Red de Hopfield	Holfield	1982
	RECURRENTES	Resonancia Adaptativa(ART)	Carpenter, Grossberg y Rosen	1987; 1990 1991
		Bidirectional Associative Memory	Kosko	1992
	HIBRIDO	Radial Bassic Fuction	Bromheard y Love; Moody y Darken	1988; 1989
		Contrapropagación	Hetcht - Nielsen	1990

Fuente: (P. López Álvarez, R.Velo Sabín, & F. Maseda Eimil, 2007: citado en Sinaluisa, 2015)

Arquitectura de una red neuronal Feedforward

Como arquitectura de una red neuronal Feedforward Ivan Sinaluisa (2015, p. 25) hace referencia a la organización y disposición de las neuronas en la red formando capas de procesadores interconectados entre sí dependiendo de cuatro parámetros principales: Número de capas del sistema, número de neuronas por capa, grado de conectividad entre las neuronas y el tipo de conexiones neuronales.

“Las redes alimentadas hacia delante o “feedforward” como su nombre lo indica las conexiones siempre están dirigidas hacia delante, es decir las neuronas de una capa se conectan con las neuronas de la siguiente capa.” (Sinaluisa, 2015, p. 26)

- *Estructura de la red neuronal*

“El Perceptrón multicapa es una red de alimentación hacia adelante (feed-forward) compuesta por una capa de unidades de entrada (sensores), otra capa de unidades de salida y un número determinado de capas intermedias, también llamadas capas ocultas porque no tienen conexiones con el exterior.” (Quintana, 2015, p. 20)

Capa de entrada: Esta capa recibe los datos o señales procedentes del entorno, recibe los vectores de entrada y los redistribuye a las neuronas de la capa intermedia sin realizar ningún tipo de procesamiento sobre los datos, es sólo una receptora de información. (Sinaluisa, 2015, p. 27)

Capas intermedias u ocultas: Pueden ser más de una dependiendo del problema, estas capas no tienen conexión directa con el entorno y mediante el tratamiento adecuado de estas capas se consigue la extracción de características, adaptabilidad, generalización. Transforma los vectores de entrada en vectores intermedios, que caracterizan los patrones de entrenamiento. (Sinaluisa, 2015, p. 27)

Capa de salida: “El número de neuronas de esta capa depende de la salida de la red, es decir, sus neuronas proporcionan la respuesta de la red neuronal a partir de un estímulo de la capa intermedia.” (Sinaluisa, 2015, p. 27)

Así de acuerdo a su estructura en capas se tendrían:

- Redes mono capa constituidas por una única capa de neuronas
- Redes multicapa.

- Función de transferencia

Como función de transferencia, un requisito indispensable es que para el perceptrón multicapa ésta debe ser derivable en todo su dominio; por tal motivo se propone 3 funciones de transferencia:

- Función de transferencia Hyperbolic tangent sigmoid (tansig):

$$y = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

(Ec 1-2)

- Función de transferencia Logarithmic sigmoid (logsig):

$$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

(Ec 2-2)

- Función de transferencia Pure linear (purelin):

$$y = x$$

Vale mencionar que en comandos de MATLAB estos son registrados como: `purelin`, `logsig` y `tansig`.

- Algoritmos de entrenamiento

Algoritmo Backpropagation

Como su nombre lo indica, “consiste en la propagación del error hacia atrás, es un tipo de aprendizaje supervisado y está basado en la generalización de la regla delta. Una vez que se ha utilizado un patrón como entrada, éste se propaga desde la capa de entrada a las capas intermedias hasta obtener una salida.” (Veintimilla Jaime; Cisneros Felipe 2015, p. 3) Es importante calcular el error de toda la capa de salida en función de las salidas deseadas con la salida obtenida.

De igual manera (Veintimilla Jaime; Cisneros Felipe 2015, p. 3) menciona que el error se propaga hacia atrás, partiendo de la salida pasando por cada una de las neuronas que aportan a la capa de salida. Mediante esta distribución del error, se pueden manipular los pesos de conexión de cada neurona, con el fin de que el error disminuya, y obtener una correcta aproximación de los patrones en el entrenamiento.

2.2.3.3 *Redes Neuronales en MATLAB*

“Para implementar en MATLAB una Red Neuronal Artificial se lo puede realizar a través de tres funciones.” (Quintana, 2015, p. 24):

- Mediante código desde la línea de comandos o desde el espacio de trabajo de MATLAB (workspace).
- Utilizando el conjunto de bloques incluidos en el toolbox de Control Systems de Neural Networks Blockset en Simulink.
- “Empleando la Interfaz Gráfica de Usuario (GUI por sus siglas en inglés) de Redes Neuronales Artificiales, la cual se puede desplegar empleando el comando `nntool` (Neural Network Toolbox).” (Quintana 2015, p. 25). Siendo esta última la que se va a utilizar en este trabajo.

Por lo tanto, al digitar el comando *nntool* en el espacio de trabajo de MATLAB se abre la ventana Administradora de Redes Neuronales Artificiales. Por lo tanto, cuando se utiliza la GUI, es posible exportar los resultados al espacio de trabajo. Del mismo modo, es posible importar resultados del área de trabajo para la GUI. (Quintana, 2015, p. 25)

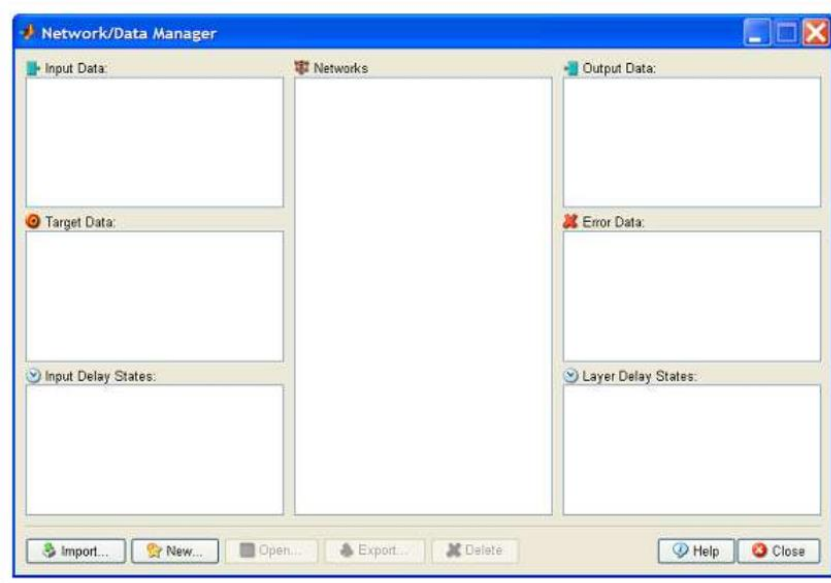


Figura 7-2. Interfaz gráfica de usuario MATLAB

Fuente: (Demuth, Howard; Beale, Mark Y Hagan, Martin. Neural Network Toolbox 5 User's Guide citado en: Quintana, 2015, p. 25)

“Una vez que la ventana Network/Data Manager está en funcionamiento se puede crear una red, entrenarla, simularla y exportar los resultados al workspace.” (Quintana 2015, p. 25)

Flujo de trabajo típico para diseñar redes neuronales

Cada aplicación de red neuronal es única, pero el desarrollo de la red suele implicar los pasos siguientes (MathWorks, 2019, p. 1):

1. Acceder a los datos y prepararlos
2. Crear la red neuronal
3. Configurar las entradas y salidas de la red
4. Ajustar los parámetros de la red (las ponderaciones y tendencias) para optimizar el rendimiento
5. Entrenar la red
6. Validar los resultados de la red

7. Integrar la red en un sistema de producción

Clasificación y clustering de redes superficiales

“MATLAB y Deep Learning Toolbox facilitan el desarrollo de redes neuronales para tareas como la clasificación, la regresión y el clustering. Tras crear las redes con estas herramientas, es posible generar automáticamente código de MATLAB para capturar el trabajo y automatizar las tareas.” (MathWorks, 2019, p. 1)

CAPÍTULO III

3 METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

En este caso de estudio, el proyecto es de tipo Predictivo, ya que con la utilización de redes neuronales artificiales se busca predecir la composición de los productos de la destilación benceno tolueno. Basado en el marco teórico propuesto en el Capítulo I, se desarrollará la metodología en función de las siguientes etapas: Simulación de la columna de destilación benceno-tolueno, procesamiento de datos, entrenamiento de la red neuronal artificial, validación de los datos predichos; mismos que visualizan en la figura 1-3.

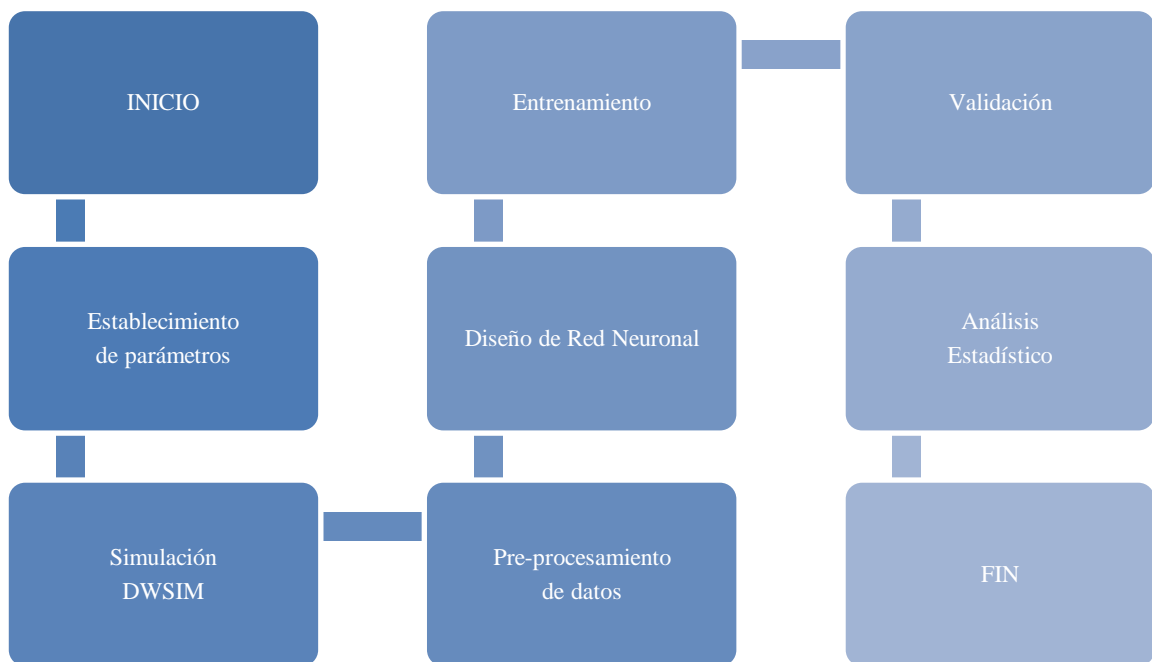


Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de titulación.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Por otra parte, este trabajo de titulación como modelado y simulación de una red neuronal tiene un enfoque cuantitativo esto debido a que, como punto de partida se utilizan los datos de la simulación de la torre de destilación en DWSIM como medidas numéricas para alimentar la red y así obtener datos predichos de la composición de los productos de esta operación unitaria.

Así también, se implementará un análisis estadístico como técnica para analizar, interpretar y validar los datos cuantitativos obtenidos de la simulación y se comparará las composiciones de los productos en función del porcentaje de error.

Las principales fuentes bibliográficas que se utilizaron en este documento son:

Primaria:

- Información y datos obtenidos por el autor del escrito mediante trabajo experimental con simulaciones.

Secundaria:

- Tesis de posgrados publicadas a nivel nacional e internacional.
- Artículos de alto y mediano impacto publicados en revistas científicas indexadas y no indexadas.
- Páginas de internet de sitios oficiales de programas computacionales utilizados en la investigación.
- Libros de autores reconocidos y afines al tema.

3.1 Establecimiento de parámetros

La información utilizada como referencia proviene de un artículo científico de nombre Neuro-Fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column propuesto por Abdul Jalee E, Aparna K del departamento de Ingeniería Química del Instituto Nacional de Tecnología en la ciudad de Calcuta, India. Dicho documento se tomó como base para la simulación de la destilación benceno tolueno en el software de acceso libre DWSIM y así obtener el conjunto de datos para el entrenamiento de la red neuronal artificial.

En el documento anteriormente nombrado se menciona que: Para la medición precisa de la composición de los componentes separados es necesaria estimar la pureza de los productos. La medición de la composición utilizando analizadores en línea provoca un retraso en el proceso y requiere una gran inversión inicial. Como solución a este problema, se pueden usar estimadores de inteligencia artificial para determinar la composición del producto separado. (Abdul, Jalee; Aparna 2016, p. 1)

Por otra parte, la torre de destilación propuesta fue diseñada en el software HYSYS, como se muestra en la siguiente figura:

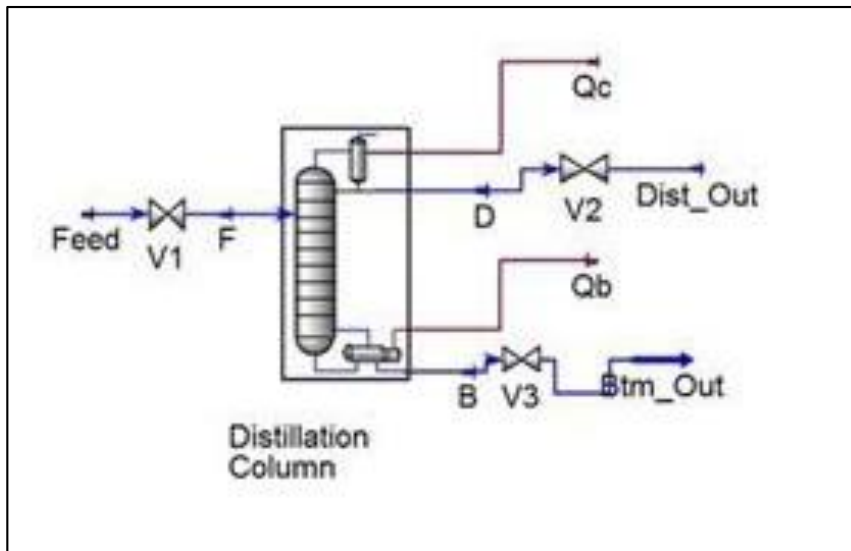


Figura 1-3. Diagrama de la columna de destilación en HYSYS.

Fuente: (Abdul, Jalec; Aparna 2016, p. 7)

Posterior en el artículo se presentan las condiciones de operación de la columna de destilación, mismo que serán ordenados en la Tabla 1-3:

Tabla 1-3: Condiciones de operación de la columna de destilación.

Número de platos	30
Plato de alimentación	16
Fraccion molar de benceno en la alimentación	0.5
Fraccion molar de tolueno en la alimentación	0.5
Velocidad de alimentación	100 kgmol/h
Temperatura de alimentación	42 C
Presion de alimentación	1 atm

Fuente: (Abdul, Jalec; Aparna 2016, p. 7)

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Selección de variables

Variables Independientes

- Presión
- Temperatura

- Velocidad de alimentación

Variables Dependientes

- Fracción molar de benceno en el destilado
- Fracción molar de tolueno en el destilado

Operación de variables

Tabla 2-3: Condiciones de operación de la columna de destilación.

	Variable		Unidad de medida
Independiente	Presión	P	Atm (Atmosfera)
	Temperatura	T	C (Celsius)
	Alimentación	K	kgmol/h (Kilogramo mol/hora)
Dependiente	Fracción molar de benceno en el destilado	X_i	Adimensional
	Fracción molar de tolueno en el destilado	Y_i	Adimensional

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

3.2 Simulación DWSIM

En este apartado se analizó los datos propuestos (Tabla 1-3), por el artículo científico base el diseño la torre de destilación benceno-tolueno. Llevándose a cabo la simulación de la operación unitaria en el software de acceso libre DWSIM.

Dentro del simulador se utilizó la herramienta Rigorous model for simulation of distillation columns, el cual nos permite interconectar la torre con la corriente de alimentación y las corrientes de salida del destilado y del residuo, así como también con las corrientes de energía del condensador y de la caldera; como se puede apreciar en la gráfica 3-3:

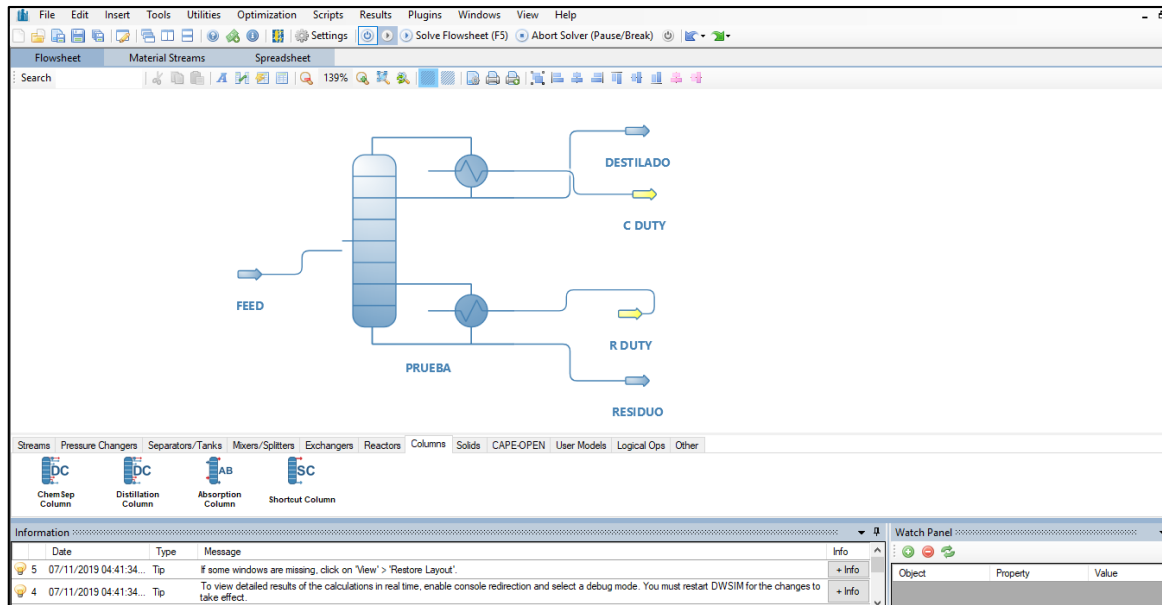


Figura 2-3. Torre de destilación benceno-tolueno DWSIM

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En la simulación de la destilación la corriente de entrada FEED es la velocidad de alimentación igual a 100kgmol/h conectada a una torre de 30 platos ingresando por el plato 16. Corriente que presenta las siguientes condiciones:

Tabla 3-3: Condiciones de la corriente de alimentación de la columna de destilación.

Temperatura	42 C
Presión	1 atm
Flujo másico	8172.01 kg/h
Flujo molar	100 kgmol/h
Flujo Volumétrico	9.6404 m ³ /h
Fraccion molar de benceno en la alimentación	0.5
Fraccion molar de tolueno en la alimentación	0.5
Entalpía Específica	-384.782 kJ/kg
Entropía Específica	-1.1456 kJ/kgK

Fuente: DWSIM , 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Así también, el paquete de propiedades utilizado en la simulación está sujetas a la ley de Raoult.

Por otro lado, las especificaciones generales de la columna de destilación están definidas por el modelo Wang-Henke (Bubble Point) y un esquema de resolución Direct Rigorous. Las especificaciones del condensador y caldera serán presentadas a continuación:

Tabla 4-3: Especificaciones del condensador y caldera.

Presión en el condensador	1 atm
Potencia en el condensador	2605.16 kW
Presión en la caldera	1.099 atm
Potencia en la caldera	-2801.84 kW

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Una vez realizada y optimizada la simulación de la columna de destilación benceno-tolueno se procede a ejecutar el programa cien veces para obtener el conjunto de datos de la Fracción molar de benceno en el destilado y la Fracción molar de tolueno en el destilado. Y los rangos propuestos para las especificaciones de la corriente de alimentación son:

Tabla 5-3: Rango de especificaciones de la corriente de alimentación.

Presión	0.95-1.5 atm
Temperatura	40-50 C
Flujo molar	100 kgmol/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

3.3 Pre-procesamiento de datos

Los datos fueron recolectados con la ejecución de la simulación en el programa DWSIM con una repetición de 100 veces a través de la generación de números aleatorios en los rangos establecidos en la tabla 5-3.

Por lo tanto, esta sección se analizó el conjunto de datos obtenidos en la ejecución de las simulaciones para posterior utilizar como datos de entrada en el desarrollo de la red neuronal, así también, se verificó la posible existencia de datos atípicos a través de métodos estadístico como la prueba de Grubbs donde se representa el valor absoluto de la diferencia de la media y el valor atípico, utilizando la herramienta Microsoft Excel. De igual manera en base a recomendaciones bibliográficas, a los datos pre-procesados se aplica un suavizado y discretización para un correcto entrenamiento de la red neuronal.

3.4 Diseño de la red neuronal artificial

Como se describió en los apartados anteriores para el diseño de la red neuronal primero se determinó los parámetros de entrada siendo estos, la presión y la temperatura en el rango establecido en la tabla 5-3. Mientras que los parámetros de salida esperados con la fracción molar de benceno en el destilado y la fracción molar de benceno en el residuo. No obstante, cabe destacar que tanto en el destilado como en el residuo se encuentra la fracción molar de tolueno, misma que será calculada por diferencia.

De igual manera, matemáticamente se normalizaron los datos de entrada y los datos de salida con el fin de reducir la redundancia de datos. La ecuación utilizada es la siguiente:

$$X' = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}$$

(Ec 1-3)

Donde:

X' = valor normalizado

X = valor que se desea normalizar

X_{max} = valor máximo

X_{min} = valor mínimo

Posterior a la normalización, utilizamos la herramienta Neural Fitting (nftool) del toolbox de MATLAB representada en la siguiente imagen:

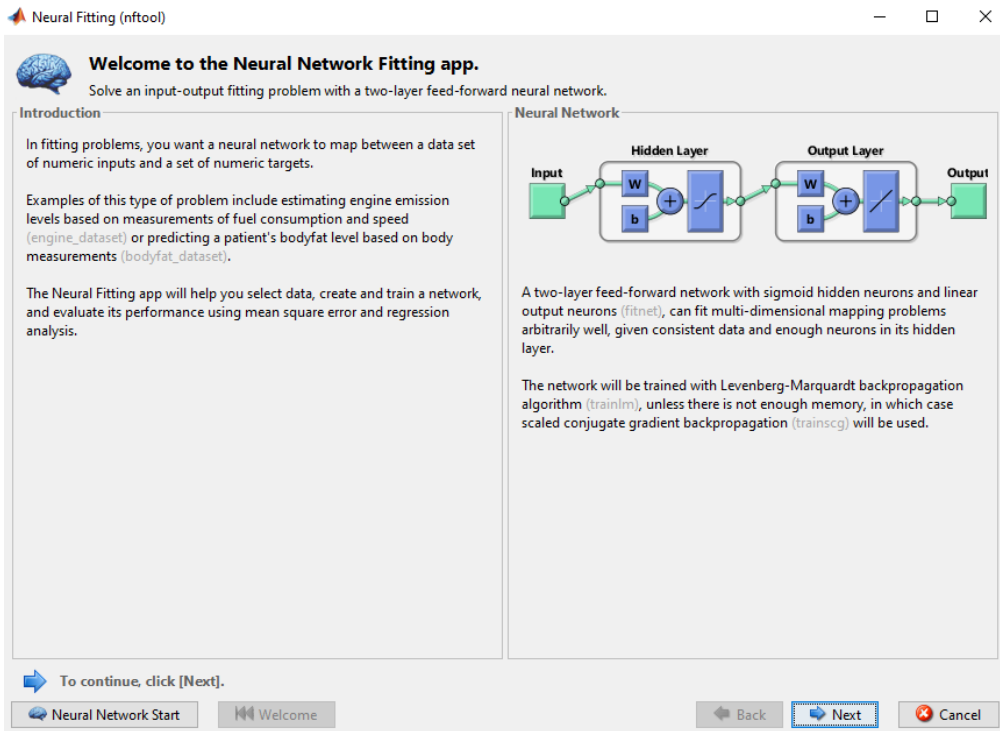


Figura 3-3. Herramienta Neural Fitting en MATLAB

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

El paso siguiente es la identificación y selección las variables de los datos de entrada y de salida planteadas en la codificación de MATLAB como se puede observar en el gráfico 5-3.

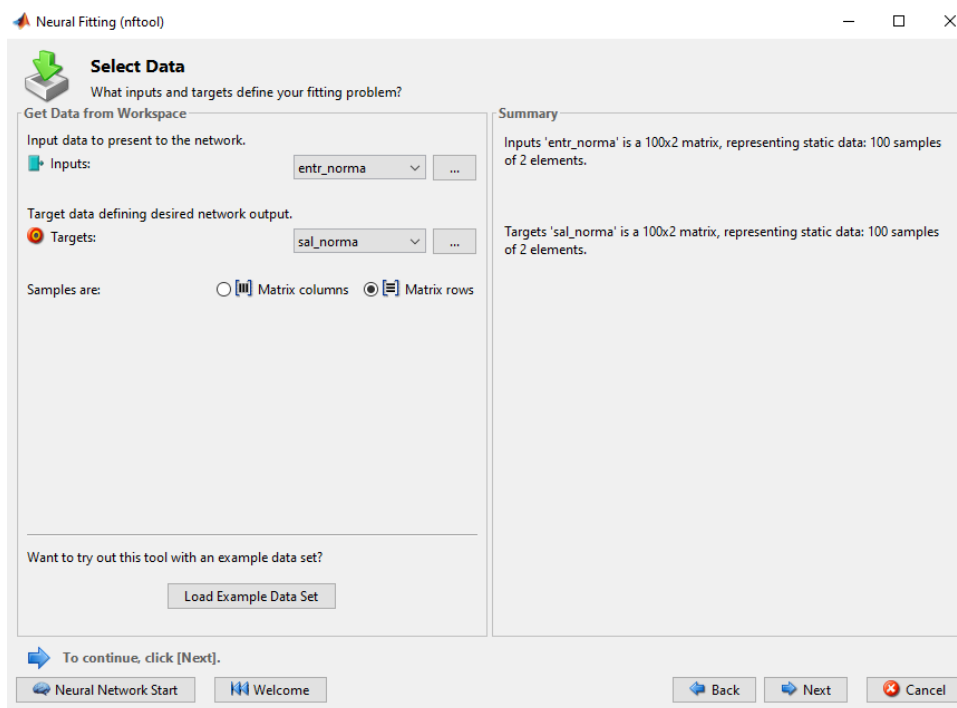


Figura 4-3. Selección de datos de entrada y salida.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

De la gráfica 5-3, la variable de los datos de entrada para el diseño de la red neuronal artificial tiene el nombre de `entr_norma` mientras que los datos de salida u objetivos están definidos como la variable `sal_norma`. Para poder seguir al siguiente punto, tanto las muestras de entrada y salida deben estar definidas como Matrix rows y en efecto las dos variables vinculadas con Microsoft Excel, deben tener el mismo número de filas y columnas.

En la arquitectura de la red neuronal artificial se dimensionó el número idóneo de capas ocultas y el número de neuronas, siguiendo lo propuesto por (Sinaluisa 2015, p. 69): “complementar la técnica propuesta por Ash y Hirose que consiste en la búsqueda dinámica y forzada de los mejores mínimos locales, es decir si el valor está por debajo del valor esperado una nueva neurona es incorporada, pero si el error es cero o muy cercano a cero una neurona será retirada con el fin que no memorice.”

Para el diseño propuesto se estableció las condiciones siguientes:

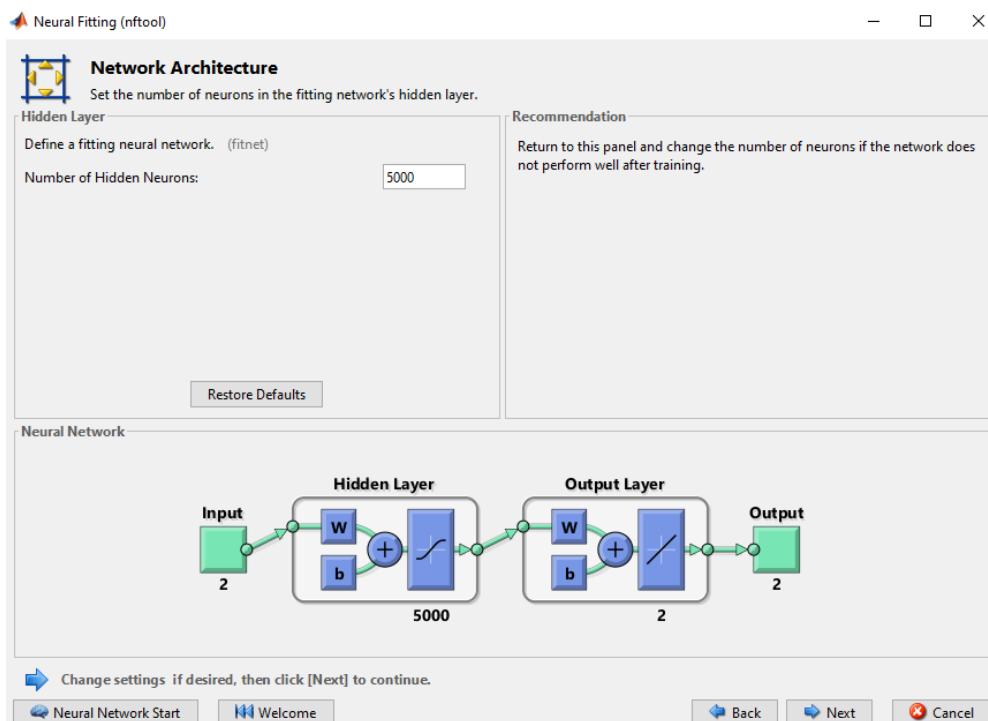


Figura 5-3. Arquitectura de la Red Neuronal Artificial.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

De manera que, aplicando la teoría anteriormente expuesta los elementos que conforman la red neuronal artificial son:

- 2 capas de entradas como variables predictoras.

- 5000 capas ocultas propuestas para experimentación.
- 2 capas de salida correspondientes a las fracciones molares de benceno pronosticadas.

3.5 Entrenamiento

El algoritmo de entrenamiento seleccionado para el diseño de esta red neuronal artificial es el algoritmo de Levenberg-Marquardt, “denotando la matriz Jacobiana m - por n de $f(x)$ como $J(x)$, el gradiente del vector $f(x)$ como $G(x)$, la matriz Hessiana de $f(x)$ como $H(x)$. La matriz Hessiana de cada $f(x)$ como $H(x)$ ” (Quintana 2015, p. 23). Se tiene:

$$G(x) = 2J(x)^T F(x) \tag{Ec 2-3}$$

$$H(x) = 2J(x)^T J(x) + 2Q(x) \tag{Ec 3-3}$$

Donde:

$J(x)^T$ = Matriz jacobiana traspuesta.

Por supuesto, MATLAB dentro de su codificación, identifica a este algoritmo como el comando `trainlm`, como se puede identificar en la gráfica 9-3:

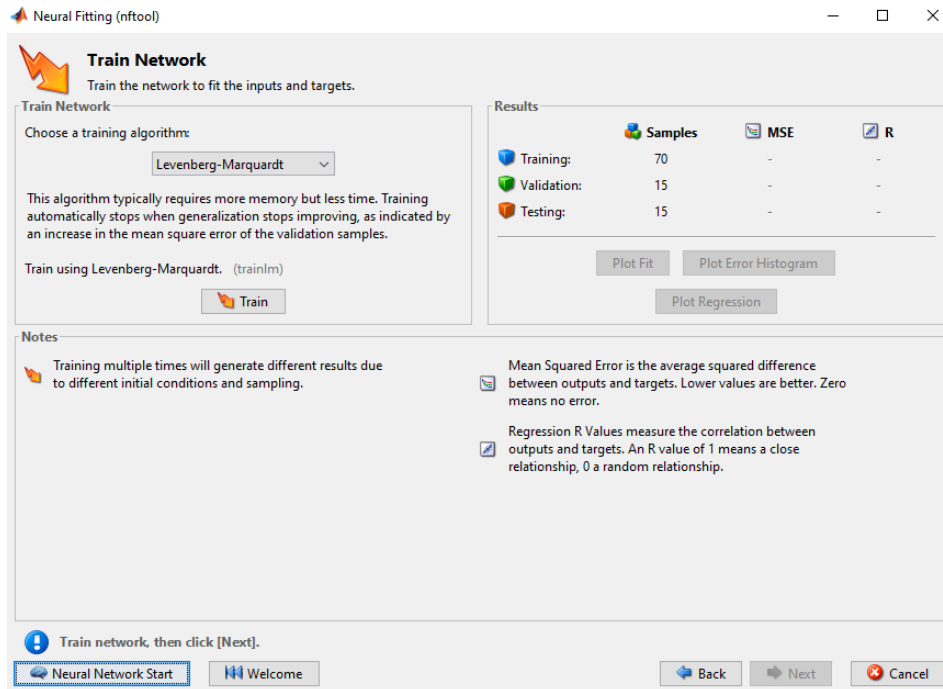


Figura 6-3. Entrenamiento de la Red Neuronal Artificial.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Cabe mencionar que también existen otros dos algoritmos de entrenamiento dentro de una Neural Fitting como lo son Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient, pero se utilizó el algoritmo de Levenberg-Marquardt por la confiabilidad de optimización y utiliza un menor tiempo en su entrenamiento.

En adición esta red neuronal artificial cuenta también con las siguientes consideraciones:

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

3.6 Validación

Para la validación de la red neuronal artificial y demostrar la exactitud del modelo de predicción de los productos en la torre de destilación benceno tolueno se utilizará los indicadores de desempeño generados en el programa denominado Error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de correlación de Pearson, sujetos a las ecuaciones siguientes:

$$r = \frac{n \sum_{i=1}^n (y' y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2]}}$$

(Ec 4-3)

Donde:

r = correlación de Pearson.

y = fracción de benceno real.

y' = fracción de benceno predicha.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2$$

(Ec 5-3)

Donde:

n = número de observaciones.

y_t = fracción de benceno real.

y'_t = fracción de benceno predicha.

Estos fundamentos matemáticos estuvieron también son correspondidos a una fase en el diseño de la red neuronal donde se puede manipular en porcentaje los datos de entrada para el entrenamiento validación, y prueba de la simulación.

Por lo tanto, el porcentaje del número total de datos elegidos para el entrenamiento es del 70% siendo estos cuales se presentan a la red durante el entrenamiento y la red se ajusta de acuerdo a su error. El porcentaje elegido para la validación es del 15% ayudándonos a medir la generalización de la red y para detener el entrenamiento cuando la generalización deja de mejorar. En efecto, para la validación utilizamos el 15% de los datos destacando que, éstos no tienen ningún efecto sobre el entrenamiento y, por lo tanto, proporcionan una medida independiente del rendimiento de la red durante y después del entrenamiento.

Lo expuesto anteriormente se puede evidenciar en la siguiente gráfica generada en MATLAB:

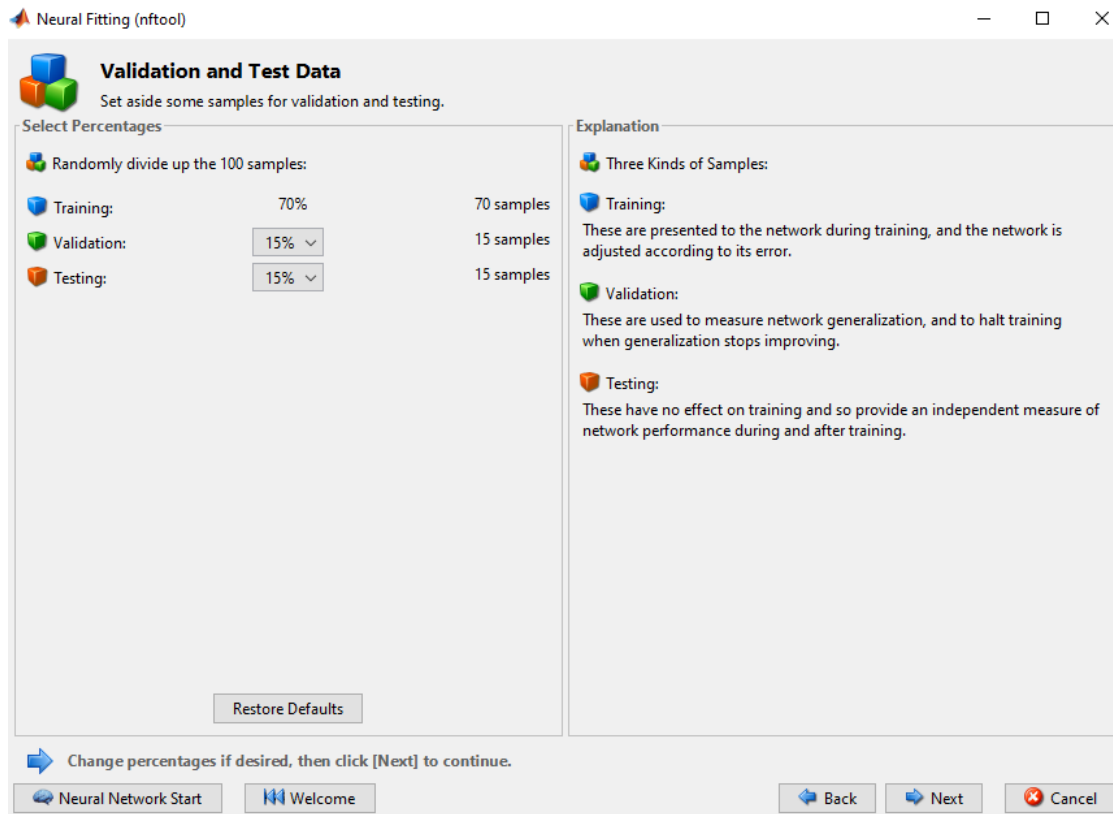


Figura 7-3. Validación de la Red Neuronal Artificial.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Por supuesto, para sustentar la validación de la red neuronal artificial se generará una interfaz gráfica en MATLAB ingresando 5 datos a azar dentro de los rangos establecidos en la tabla 5-3. Realizando un análisis comparativo entre el resultado creado en el simulador DWSIM y el resultado predicho por la Red Neuronal Artificial diseñada.

3.7 Análisis Estadístico

Para el análisis estadístico del trabajo de titulación se plantea la utilización de los datos de la fracción molar de benceno en el destilado y la fracción molar de benceno en el residuo correspondientes a las simulaciones en el software de acceso libre DWSIM y así compararlos con las fracciones molares de benceno del destilado y del residuo predichas por la red neuronal artificial en MATLAB.

De manera que, se implementará una evaluación de los resultados a través del programa estadístico Statgraphics Centurion donde se comparará de varias muestras donde:

La primera caja de diálogo especifica la estructura de los datos; por un lado, las Columnas de Datos Múltiples son aquellas que indican que cada muestra ha sido colocada en una columna separada y por otro lado las columnas de datos y código indican que todas las observaciones han sido colocadas en una sola columna, con una segunda columna indicando a qué muestra pertenece cada observación.

De igual manera, las estadísticas muestrales indican que las observaciones originales no están disponibles. Sin embargo, se han colocado los tamaños de muestra, las medias muestrales y las desviaciones estándar de las muestras en 3 columnas de la hoja de datos. En este caso, algunas opciones no estarán disponibles. Posterior se genera una segunda caja de dialogo donde se reflejan las variables involucradas en el proceso similar a como se observar en la gráfica 9-3.

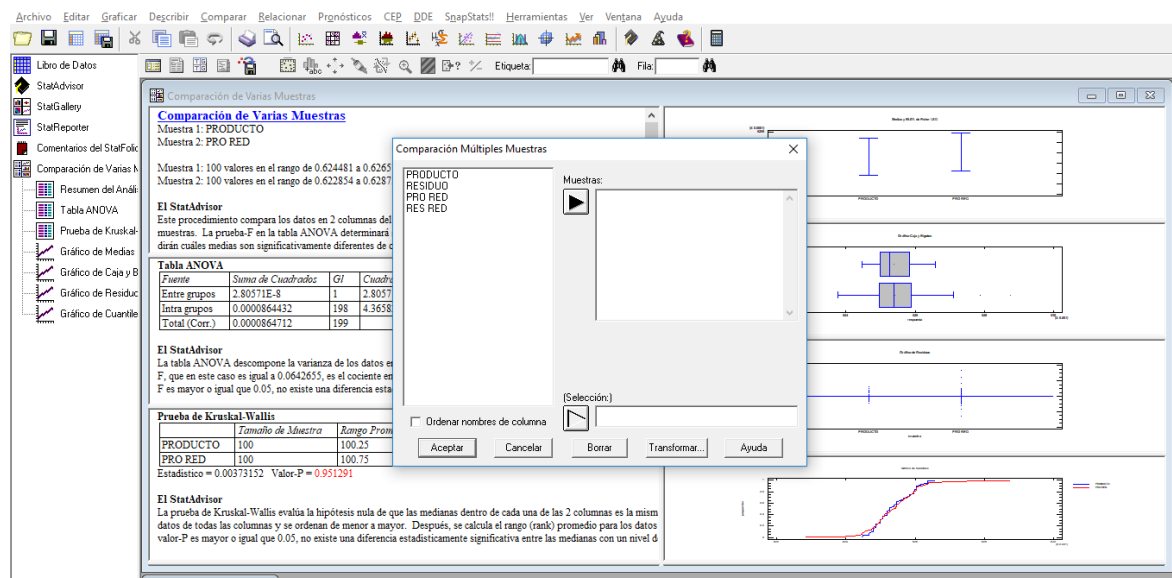


Figura 8-3. Estadística en Statgraphics Centurion.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Dentro de este análisis estadístico se va a tener en cuenta las siguientes pruebas respecto a la generación de tablas:

- Tabla ANOVA: la cual descompone la varianza de los datos insertados en dos componentes un componente entre grupos y un componente dentro de los grupos.

- Tabla de medias: muestra las medias de cada una de las columnas de los datos a comparar, tanto de las fracciones de benceno generadas en DWSIM como las fracciones de benceno predichas en la red neuronal artificial, con su respectivo error estándar.
- Pruebas de múltiples rangos: aplica un procedimiento para determinar cuáles de las medias generadas son significativamente diferentes a otras.
- Prueba de Kruskal-Wallis: por último, esta prueba evaluará la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las columnas de fracciones de benceno en el destilado y el residuo es la misma. Combinándose los datos de las dos columnas y ordenándose de menor a mayor.

En complemento, se analizarán las gráficas siguientes:

- Gráfico de dispersión
- Gráfico ANOVA
- Gráfico de medias
- Gráfico de caja y bigotes
- Gráfico de residuos
- Gráfico de cuartiles

3.8 Gestión del proyecto

3.8.1 Cronograma

Tabla 6-3: Cronograma del proyecto

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

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

3.8.2 *Presupuesto*

Para iniciar con el proyecto se debe analizar la inversión que se tendría que hacer para llevar a cabo el mismo. En la siguiente tabla se detallan los costos para cada actividad.

Tabla 7-3: Presupuesto del proyecto.

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Curso DWSIM	\$200	X	
Curso MATLAB	\$250	X	
Papel de impresión	\$20	X	
Copias e Impresiones	\$100	X	
Empastados	\$60	X	
Imprevistos	\$20	X	
TOTAL	\$650		

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

CAPÍTULO IV

4 RESULTADOS, DISCUSIÓN Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

4.1 Sistema de destilación

El sistema de destilación propuesto en este proyecto está basado en un artículo científico de título Neuro-Fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column propuesto por Abdul Jalee E, Aparna K del departamento de Ingeniería Química del Instituto Nacional de Tecnología en la ciudad de Calcuta, India. Por lo tanto, al simular este sistema en el software DWSIM se obtiene el siguiente reporte de resultados:

DWSIM Simulation Results Report

Energy Stream: R DUTY

Heat Flow: 0 kW

Energy Stream: C DUTY

Heat Flow: 2713.38 kW

Material Stream: RESIDUO

Calculation results for Material Stream RESIDUO

Compounds: {Tolueno, Benzene,}

Specification: Pressure and Enthalpy

- Pressure: 1.1 atm
- Enthalpy: -321.87549027177 kJ/kg
- Property Package: Raoult's Law

Tabla 1-4: Corrientes en el residuo

Stream Temperature	83.6242	C
Stream Pressure	1.1	atm
Stream Enthalpy	-0.321875	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.000887277	kJ/[kmol.K]

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 2-4: Fase líquida en el residuo

[Liquid Phase] Mass Flow	4802.27292	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	56.4143	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	0.000965921	m3/h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 3-4: Fracción molar de benceno y tolueno en el residuo

[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.0163473
[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.983653

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 4-4: Fracción másica de benceno y tolueno en el residuo

[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.0192264
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.980774

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 5-4: Flujo molar de benceno y tolueno en el residuo

[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	0.000163473	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	0.00983653	kmol/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 6-4: Flujo másico de benceno y tolueno en el residuo

[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	0.0150622	kg/h
[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	0.768349	kg/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Material Stream: DESTILADO

Calculation results for Material Stream DESTILADO

Compounds: {Toluene, Benzene, }

Specification: Pressure and Enthalpy

- Pressure: 1 atm
- Enthalpy: -304.47151772523 kJ/kg
- Property Package: Raoult's Law

Tabla 7-4: Corrientes en el destilado

Stream Temperature	88.7259	C
Stream Pressure	1	atm
Stream Enthalpy	-0.304472	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.000756375	kJ/[kmol.K]

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 8-4: Fase líquida en el destilado

[Liquid Phase] Mass Flow	3710.23707	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	43.5857	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	10.3648	m ³ /h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 9-4: Fracción molar de benceno y tolueno en el destilado

[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.373634
[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.626366

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 10-4: Fracción másica de benceno y tolueno en el destilado

[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.413017
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.586983

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 11-4: Flujo molar de benceno y tolueno en el destilado

[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	37.3634	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	62.6366	kmol/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 12-4: Flujo másico de benceno y tolueno en el destilado

[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	3442.6	kg/h
[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	4892.66	kg/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Material Stream: FEED

Calculation results for Material Stream FEED

- Compounds: {Toluene, Benzene,}
- Specification: Temperature and Pressure
- Temperature: 42 C
- Pressure: 1 atm
- Property Package: Raoult's Law

Tabla 13-4: Condiciones en la alimentación

Stream Temperature	42	C
Stream Pressure	1	atm
Stream Enthalpy	-0.392076	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.00117424	kJ/[kmol.K]

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 14-4: Fase liquida en la alimentación

[Liquid Phase] Mass Flow	8512.51	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	100	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	9.99591	m ³ /h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 15-4: Fracción molar de benceno tolueno en la alimentación

[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.5
[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.5

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 16-4: Fracción másica de benceno y tolueno en la alimentación

[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.541194
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.458806

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 17-4: Flujo molar de benceno y tolueno en la alimentación

[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	50	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	50	kmol/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 18-4: Flujo másico de benceno y tolueno en la alimentación

[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	4606.92	kg/h
[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	3905.59	kg/h

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Distillation Column: PRUEBA

Property Package: Raoult's Law

Calculation parameters

- Condenser type: Total_Condenser
 - Condenser Pressure: 1 atm
 - Reboiler Pressure: 1.1 atm
 - Number of Stages: 32
- Results
 - Condenser heat duty: 2713.38 kW
 - Reboiler heat duty: -2935.46 kW

4.1.1 Balance de masa del sistema de destilación

De manera que, el diseño de la columna de destilación se basa en la tabla de condiciones de concentración en la alimentación, destilado y residuos propuesta a continuación:

Tabla 19-4: Datos de concentración en la alimentación, destilado y residuo

Representación	Parametro	Valor	Unidades
F	Flujo molar de alimentación	100	kgmol/h
X_{BF}	Fraccion molar de benceno en la alimentación	0.5	
X_D	Fraccion molar de benceno en el destilado	0.983653	
X_R	Fraccion molar de benceno en el residuo	0.126366	

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

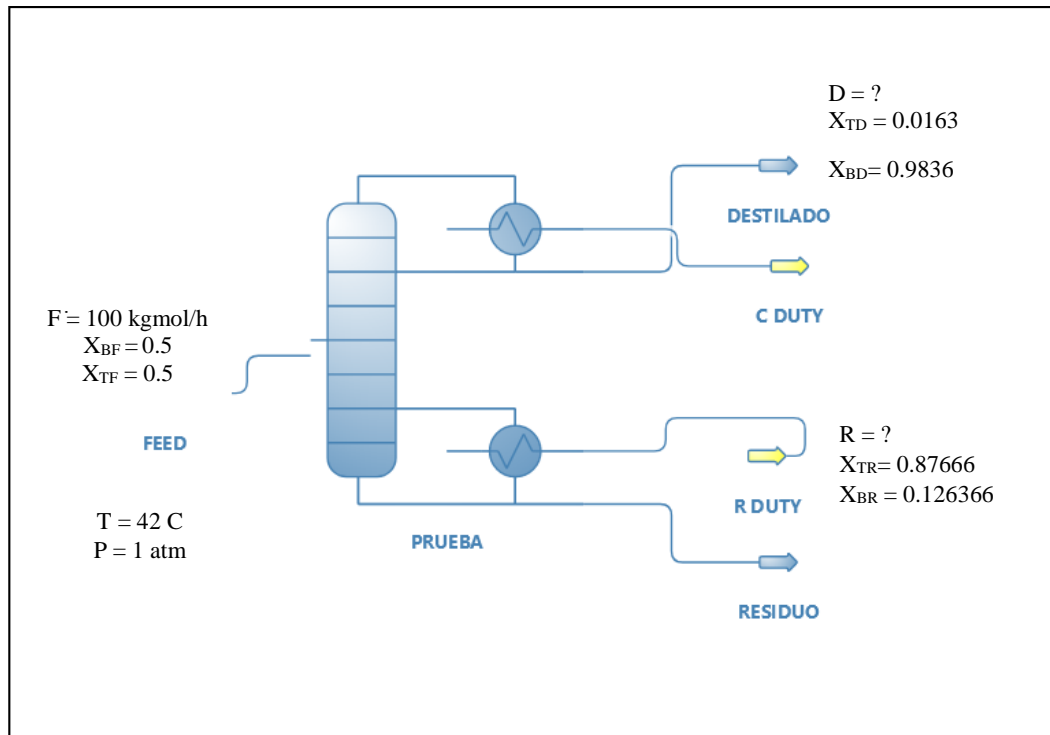


Figura 1-4. Condiciones de Torre de destilación benceno-tolueno

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Balance global de materia

$$F = D + R$$

(Ec 1-4)

Donde:

F = Flujo de alimentación

D = Flujo de destilado

R = Flujo de residuo

Flujo de alimentación

$$\dot{F} = 100 \text{ kgmol/h}$$

(4)

Donde:

\dot{F} = flujo másico de alimentación (kg/h)

Balance al benceno

$$\dot{F} * X_{BF} = \dot{D} * X_{BD} + \dot{R} * X_{BR}$$

(Ec 3-4)

Donde:

\dot{D} = flujo de destilado (kmol/h)

\dot{R} = flujo de residuo (kmol/h)

X_{BD} = Fracción molar de benceno en el destilado

X_{BR} = Fracción molar de benceno en el residuo

$$100 \frac{\text{kgmol}}{\text{h}} * 0.5 = \dot{D} * 0.9836 + \dot{R} * 0.126366$$

$$50 \frac{\text{kgmol}}{\text{h}} = \dot{D} * 0.9836 + \dot{R} * 0.126366$$

$$\dot{D} = \dot{F} * \frac{X_{BF} - X_{BR}}{X_{BD} - X_{BR}}$$

$$\dot{D} = 100 \frac{\text{kgmol}}{\text{h}} * \frac{0.5 - 0.126366}{0.9836 - 0.126366}$$

Flujo molar en el destilado

$$\dot{D} = 43.5857 \text{ kgmol/h}$$

Flujo molar en el residuo

$$\dot{R} = 100 - \dot{D}$$

$$\dot{R} = 100 \text{ kgmol/h} - 43.5857 \text{ kgmol/h}$$

$$\dot{R} = 56.4143 \text{ kgmol/h}$$

Donde:

\dot{D} = flujo de destilado (kmol/h)

\dot{R} = flujo de residuo (kmol/h)

4.2 Análisis de los datos generados en DWSIM

Una vez ejecutado y analizado los reportes de resultados generados en DWSIM, se procedió a generar una tabla recopilando las entradas al ingreso de la columna de destilación, el flujo de alimentación que se mantuvo constante y la fracción molar de benceno en el destilado y en el residuo como datos de salida.

De manera que, los datos presentados a continuación serán utilizados como datos de entrenamiento a la red neuronal artificial.

Tabla 20-4: Base de datos de la destilación Benceno-Tolueno generada en DWSIM

N°	Temperatura °C	Presión atm	Alimentación kmol/h	Fracción molar de benceno en el destilado	Fracción molar de benceno en el residuo
1	44	1.451	100	0.983644	0.125973
2	44	1.433	100	0.983644	0.126576
3	49	1.378	100	0.983621	0.124997
4	48	1.213	100	0.983626	0.125195
5	42	1.167	100	0.983653	0.125973
6	50	1.297	100	0.983617	0.124801

Continúa

Continúa

7	48	1.247	100	0.983626	0.125195
8	44	1.370	100	0.983644	0.125195
9	48	1.149	100	0.983626	0.125196
10	50	1.378	100	0.983617	0.1248
11	47	1.086	100	0.98363	0.125393
12	47	1.341	100	0.98363	0.12539
13	42	1.200	100	0.983653	0.126363
14	50	1.273	100	0.983617	0.124801
15	50	1.091	100	0.983617	0.124803
16	50	1.394	100	0.983617	0.124799
17	47	0.953	100	0.98363	0.125395
18	49	1.066	100	0.983621	0.125001
19	42	1.063	100	0.983653	0.126365
20	47	1.293	100	0.98363	0.12539
21	44	1.261	100	0.983644	0.125975
22	49	1.056	100	0.983621	0.125001
23	42	1.233	100	0.983653	0.126363
24	43	1.259	100	0.983648	0.126169
25	48	1.215	100	0.983626	0.125195
26	49	1.444	100	0.983621	0.124996
27	50	1.382	100	0.983617	0.124799
28	45	1.244	100	0.983639	0.125781
29	50	1.303	100	0.983617	0.1248
30	42	1.376	100	0.983653	0.126361
31	44	1.306	100	0.983644	0.125974
32	43	1.481	100	0.983648	0.126166
33	46	1.007	100	0.983635	0.12559
34	48	1.401	100	0.983626	0.125193
35	46	1.225	100	0.983635	0.125587
36	47	1.059	100	0.98363	0.125393
37	48	1.258	100	0.983626	0.125195
38	49	1.038	100	0.983621	0.125001
39	44	1.136	100	0.983644	0.125977
40	49	1.195	100	0.983621	0.124999
41	44	1.246	100	0.983644	0.125975
42	50	1.076	100	0.983617	0.124803
43	48	1.192	100	0.983626	0.125195
44	49	1.295	100	0.983621	0.124998

Continúa

Continúa

45	43	0.983	100	0.983648	0.126173
46	49	1.442	100	0.983621	0.124996
47	48	1.079	100	0.983626	0.125197
48	44	1.386	100	0.983644	0.125973
49	48	1.203	100	0.983626	0.125195
50	44	1.123	100	0.983644	0.125977
51	47	1.309	100	0.983621	0.12507
52	43	1.396	100	0.983638	0.125844
53	45	1.059	100	0.98363	0.125462
54	42	1.288	100	0.983643	0.126038
55	42	0.992	100	0.983643	0.126042
56	49	1.467	100	0.983612	0.124678
57	47	1.220	100	0.983621	0.125071
58	45	1.144	100	0.98363	0.125461
59	47	1.401	100	0.983621	0.125069
60	44	1.255	100	0.983634	0.125653
61	48	1.187	100	0.983616	0.124877
62	48	1.083	100	0.983616	0.124878
63	50	1.456	100	0.983607	0.124482
64	43	1.304	100	0.983638	0.125845
65	44	1.174	100	0.983634	0.125654
66	45	1.214	100	0.98363	0.12546
67	43	1.085	100	0.983638	0.125848
68	48	0.959	100	0.983616	0.12488
69	46	1.368	100	0.983625	0.125264
70	46	0.981	100	0.983625	0.125269
71	46	1.305	100	0.983625	0.125265
72	48	0.962	100	0.983616	0.12488
73	47	1.203	100	0.983636	0.125072
74	49	0.971	100	0.983612	0.124684
75	46	1.436	100	0.983625	0.125263
76	47	1.137	100	0.983621	0.125073
77	47	1.114	100	0.983621	0.125073
78	46	1.246	100	0.983625	0.125266
79	45	1.092	100	0.98363	0.125462
80	50	1.096	100	0.983607	0.124486
81	42	1.166	100	0.983643	0.126039
82	50	1.482	100	0.983607	0.124481

Continúa

Continúa

83	48	1.051	100	0.983616	0.124879
84	45	1.408	100	0.98363	0.125458
85	49	1.420	100	0.983612	0.124678
86	42	1.124	100	0.983643	0.12604
87	42	1.402	100	0.983643	0.126036
88	42	1.184	100	0.983643	0.126039
89	44	1.105	100	0.983634	0.125654
90	50	1.107	100	0.983607	0.124486
91	49	1.470	100	0.983612	0.124678
92	43	1.467	100	0.983638	0.125843
93	44	1.309	100	0.983634	0.125652
94	45	1.309	100	0.98363	0.125459
95	42	1.188	100	0.983643	0.126039
96	49	1.378	100	0.983612	0.124679
97	48	1.239	100	0.983616	0.124876
98	48	1.339	100	0.983616	0.124875
99	43	1.257	100	0.983638	0.125846
100	46	1.116	100	0.983625	0.125267

Fuente: DWSIM, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

De esta manera, se genera la gráfica 2-4 donde se evidencia la fracción molar de benceno en el destilado como resultado de la ejecución de la simulación.

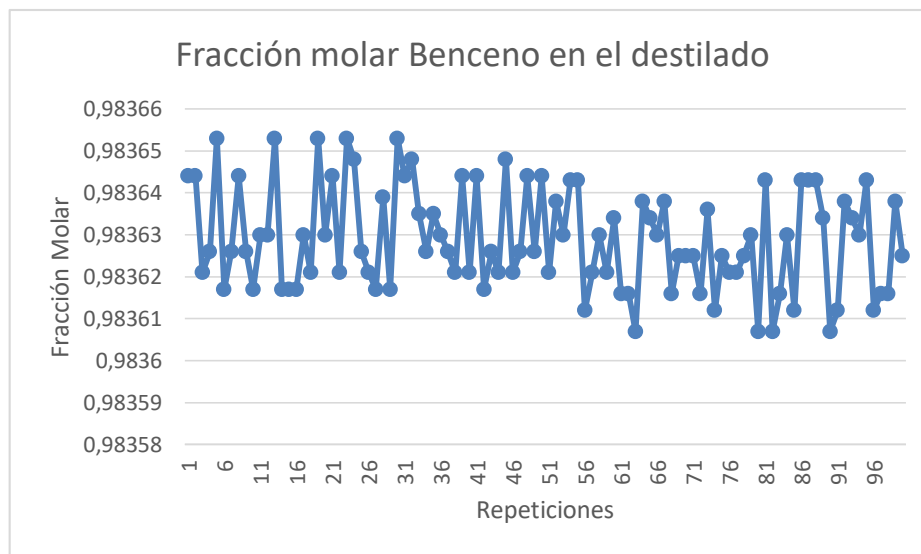


Gráfico 1-4. Fracción molar de benceno en el destilado

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Así también, se representa gráficamente los datos de fracción molar de benceno en el residuo.

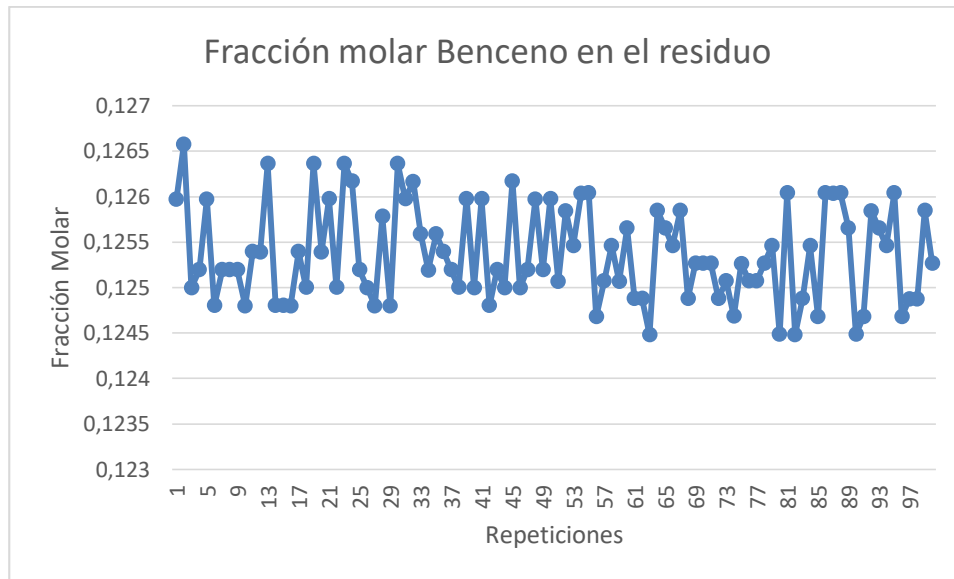


Gráfico 2-4. Fracción molar de benceno en el residuo

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Al observar las gráficas 2-4 y 3-4, se denota que tienen tendencias delimitadas en puntos convergentes y con un rango bastante estrecho, dándonos los resultados óptimos esperados en función de los rangos propuestos a las variables.

4.3 Programación de la Red Neuronal Artificial en Matlab

Para desarrollar la Red Neuronal Artificial en Matlab, es necesario utilizar variables que representan los datos de entrada, desarrollo y salida. Así como también es preciso implementar argumentos matemáticos extras para que nuestra red sea codificada de mejor manera, en especial es el uso de la normalización.

Por lo tanto, en la siguiente tabla se evidencia las variables utilizadas en la codificación de la red neuronal artificial y la descripción de cada una para una mejor comprensión de las líneas de código a analizar.

Tabla 21-4: Variables propuestas en Matlab

Variable	Descripción
Datos	Vincula Matlab con la base de datos en Excel
Entrada	Presión y Temperatura sin normalizar
Temp	Temperatura sin normalizar
Temp_Norm	Temperatura normalizada
Pres	Presión sin normalizar
Pres_Norm	Presión normalizada
entr_norma	Une a la presión y temperatura normalizada
Salidas	Fracción molar de benceno y tolueno sin normalizar.
fd_norm	Fracción molar de benceno en el destilado normalizada.
fr_norm	Fracción molar de benceno en el residuo normalizada.
sal_norma	Une a la Fracción molar de benceno y tolueno normalizada.
entr_norma'	Traspuesta de entr_norma
sal_norma'	Traspuesta de sal_norma
PropPredi	Ingreso de las entradas a la red neuronal
fd_pred	Fracción molar de benceno en el destilado predicha.
fr_pred	Fracción molar de benceno en el residuo predicha.
Valor_Real	Une a la Fracción molar de benceno y tolueno predicha.

Fuente: MATLAB, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

4.3.1 Normalización de los datos

En el apartado del diseño de la red neuronal artificial se dio a conocer la ecuación (1-3) que rige la normalización de los datos de entrada, tanto para la Presión como la Temperatura. Sin embargo, dentro de Matlab, se puede normalizar los datos con el comando “normalize”.

Tanto la presión y la temperatura de entrada como las fracciones molares de benceno a la salida de la red neuronal están codificados de la siguiente manera:

```
%Normalización de la Temperatura de entrada  
Temp=Datos(1,:)  
Temp_Norm=normalize(Temp(1,1:end),'range');
```

```

% Normalización de la Presión de entrada
Pres=Datos(2,:)
Pres_Norm=normalize(Pres(1,1:end),'range');

%-----Temperatura y Presión Normalizada-----

entr_norma=[Temp_Norm,Pres_Norm];

%Fracción molar de benceno en el destilado y residuo
salidas=Datos(4:5,:);

% Normalización de la Fracción Molar de Benceno en el destilado
fd_norm =normalize(salidas(1,1:end),'range');
    fd_max=max(salidas(1,:));
    fd_min=min(salidas(1,:));

% Normalización de la Fracción Molar de Benceno en el residuo

fr_norm =normalize(salidas(2,1:end),'range');
    fr_max = max(salidas(2,:));
    fr_min = min(salidas(2,:));

%-----SALIDAS NORMALIZADAS -----
sal_norma=[fd_norm;fr_norm]';

```

4.3.2 Código de la Red Neuronal Artificial

Con los datos normalizados anteriormente, se genera el script de la Red Neuronal Artificial que presentará los valores de las fracciones molares de benceno con el entrenamiento propuesto.

Dentro del código se tiene la variable “hiddenLayerSize” siendo fundamental para la determinación del número de capas ocultas en la RNA. Por lo tanto, en base a la comparación de un número elevado de capas ocultas, específicamente 1000 vs un número de capas ocultas determinado por la

técnica propuesta por Ash y Hirose en base a los mejores mínimos cuadrados. Siendo así que, los resultados obtenidos son los siguientes:

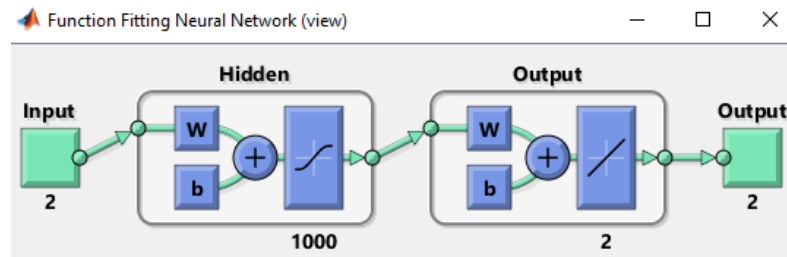


Figura 2-4. Arquitectura de la red neuronal con 1000 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

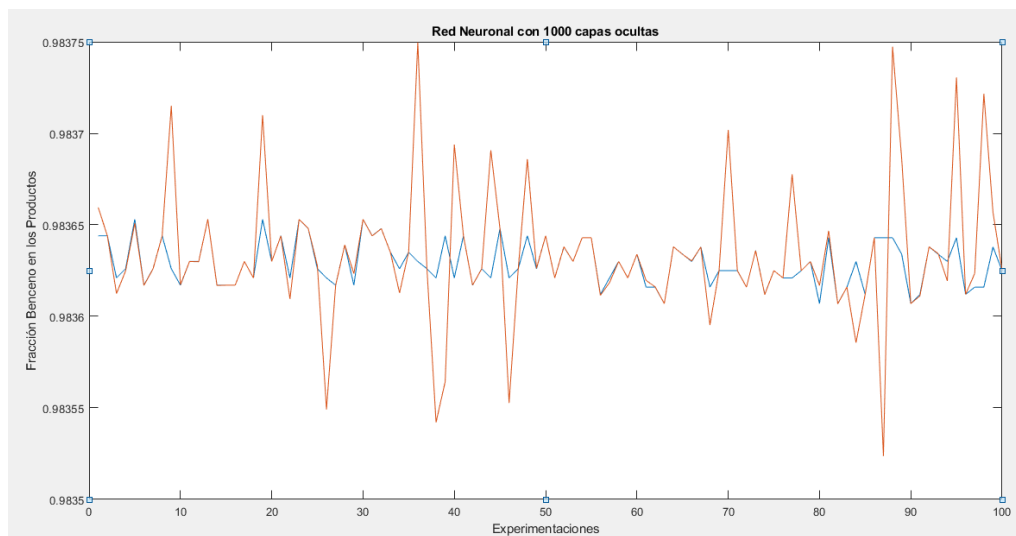


Gráfico 3-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en los productos.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

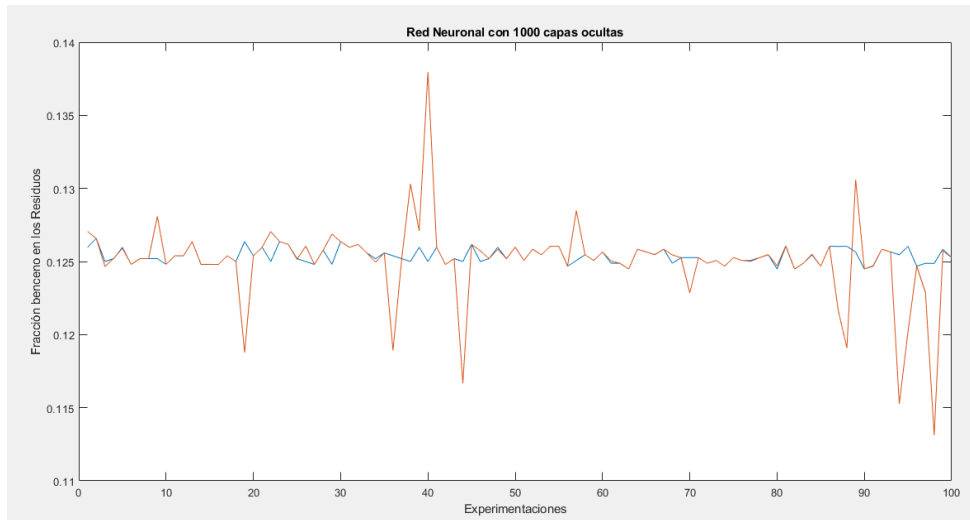


Gráfico 4-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en el residuo.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

De estos gráficos, visualmente se argumenta que, al utilizar 1000 capas ocultas en la Red Neuronal Artificial; los datos predichos de color rojo presentan una variación significativa en comparación a los datos fijos de color azul.

Por consiguiente, mediante análisis estadístico se comprueba que no se pueden utilizar 1000 capas ocultas dentro de esta RNA, ya que, en la gráfica 7-4 se evidencia un error cuadrático media (MSE) igual a 4.3279 cuantificando cuán grande es la diferencia entre los valores comparados.

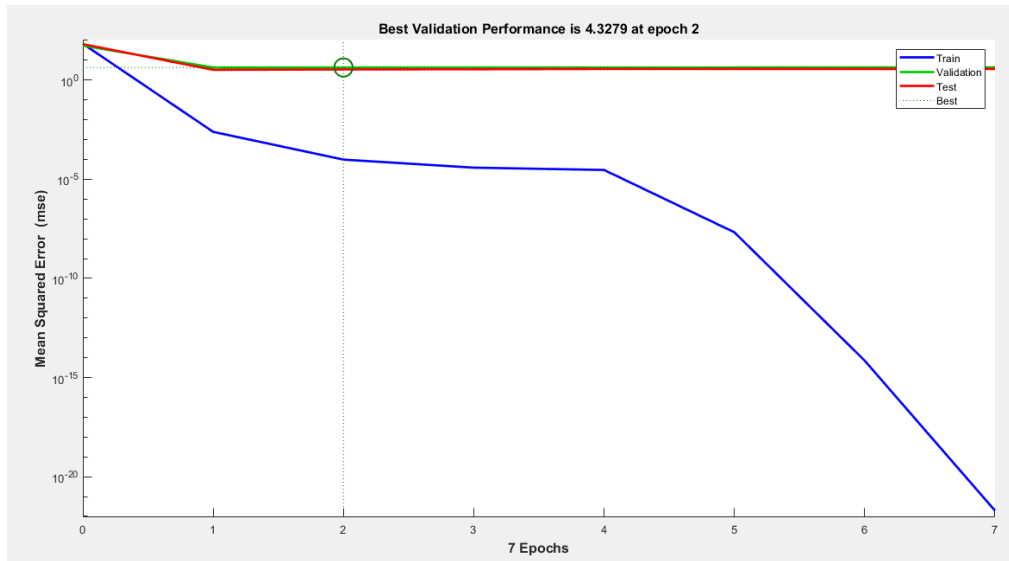


Gráfico 5-4. Error cuadrático medio para la RNA con 1000 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Asi también, la RNA en funcion de su regresion lineal, tanto para el entrenamiento, validacion y prueba; muestra un valor total de 0.17852. Este valor nos da entender la poca relacion que existe entre las variables comparadas.

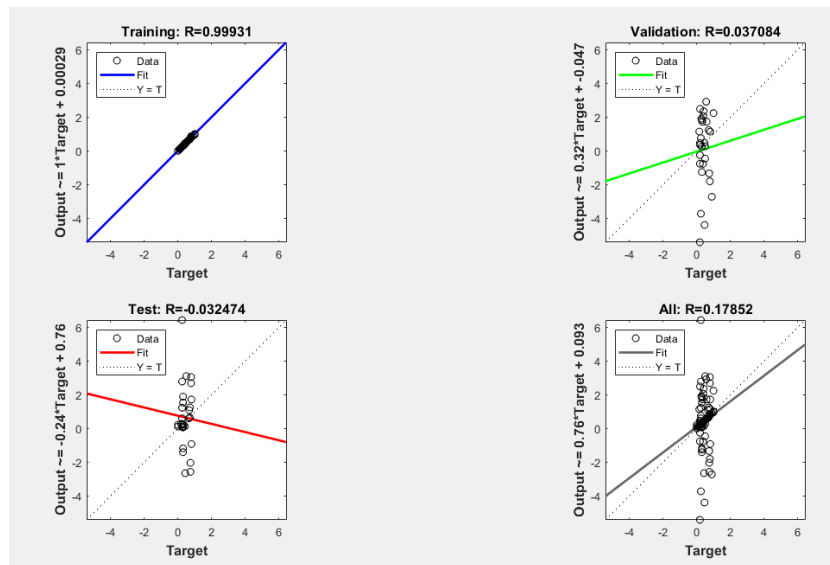


Gráfico 6-4. Regresión lineal para la RNA con 1000 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En resumen, sintetizando los valores obtenidos en la simulacion de la RNA con 1000 capas ocultas se tiene lo siguiente:

Tabla 22-4: Resumen Regresión lineal de RNA con 1000 capas ocultas.

	Entrenamiento	Prueba	Validación	Total
R	0.9931	-0.032474	0.037084	0.17852

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Es así que, en base al mejor mínimo cuadrado sustentado con el algoritmo de Levenberg-Marquardt en Matlab y a su vez en base al mejor coeficiente de correlación R en la regresión lineal se determinó la utilización de 18 capas ocultas para la codificación de la Red Neuronal Artificial. Presentando el siguiente script:

```
%-----RED NEURONAL -----
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 23-Oct-2019 21:37:51
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% entr_norma - input data.
% sal_norma - target data.

x = entr_norma';
t = sal_norma';

% 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 = 'trainlm'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.
```

```

% Create a Fitting Network 17 32 41 48
hiddenLayerSize = 16;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

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

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

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

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

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

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

```



```

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

% View the Network
view(net)

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

% Deployment
% Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
% See the help for each generation function for more information.
if (false)
    % Generate MATLAB function for neural network for application
    % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
    % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
    % network performs.
    genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
    % generation with MATLAB Coder tools.
    genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');

```

```

    y = myNeuralNetworkFunction(x);
end
if (false)
    % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
    % Simulink Coder tools.
    gensim(net);
end

%-----
PropPredi = net(entr_norma(1:end,:))
Prop_Real= sal_norma'

% VALORES ESCALADOS REALES - SIN NORMALIZAR

%-----Fracción Molar de Benceno en el destilado-----

fd_pred = PropPredi(1,:).*(fd_max-fd_min)+fd_min;

%-----Fracción Molar de Benceno en el residuo-----

fr_pred = PropPredi(2,:).*(fr_max-fr_min)+fr_min;

%-----RESULTADOS FINALES-----

Valor_Real=[fd_pred;fr_pred]';

```

Al ejecutar la Red Neuronal Artificial nos presenta en un diagrama la siguiente arquitectura: 2 capas de entrada, 18 capas ocultas y 2 capas de salida.

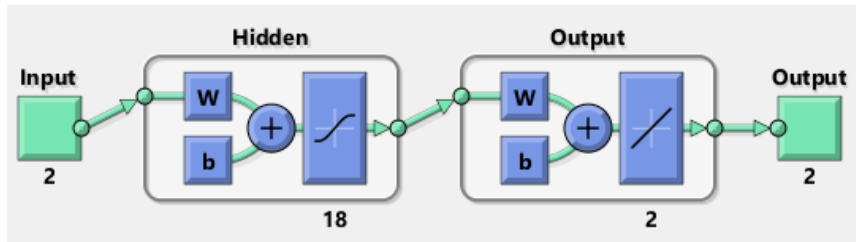


Figura 3-4. Arquitectura de la red neuronal con 18 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En la comparación entre la fracción de benceno en los productos predichos y fijos, visualmente se denota que no existe una variación marcada ya que existe una diferencia alrededor de 0.00001. Mientras que en la comparación de la fracción de benceno en los residuos existe una diferencia visual de 0.0005 entre los datos fijos respecto a los datos predichos.

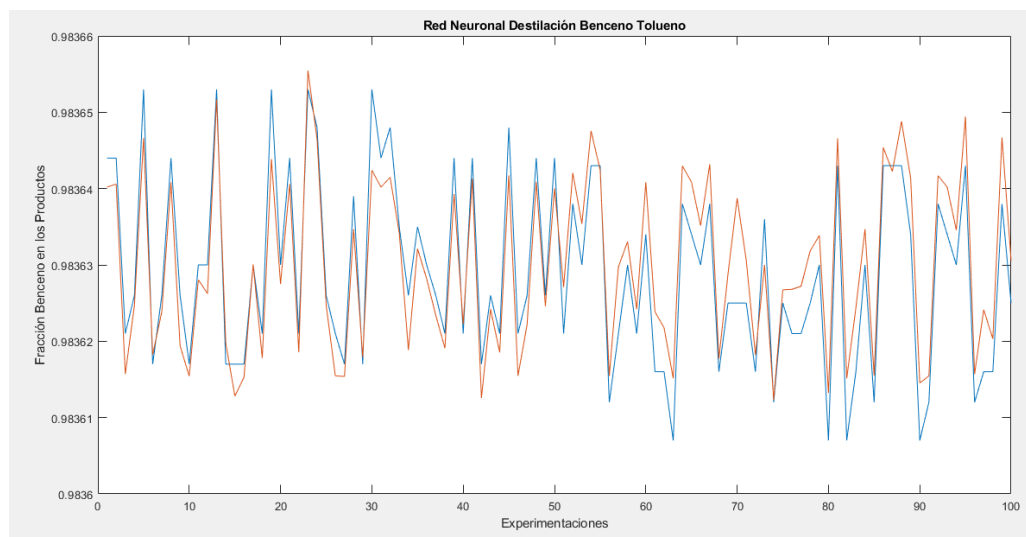


Gráfico 7-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en los productos.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

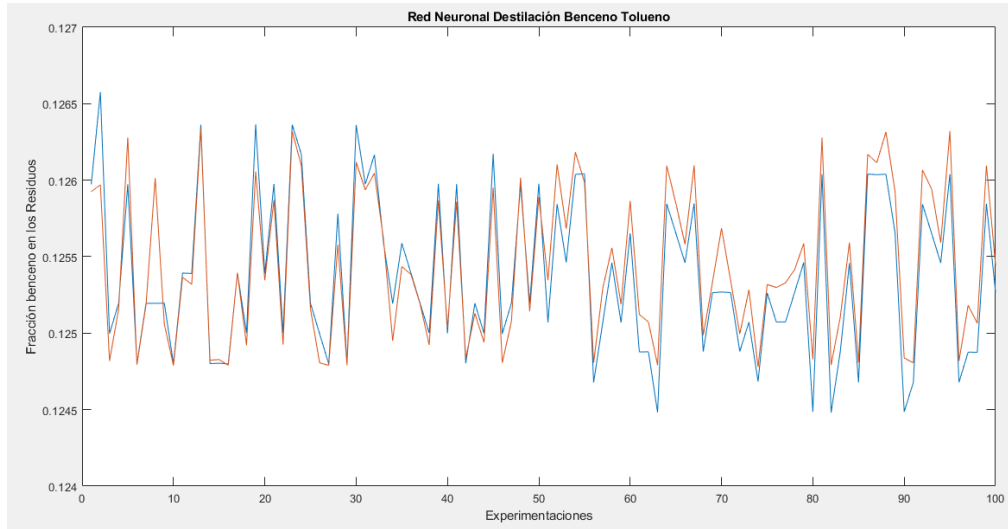


Gráfico 8-4. Comparación entre los datos de salida predichos vs los datos de salida fijos en el residuo.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Por supuesto, es necesario analizar estadísticamente los resultados de la RNA. En función del Error cuadrático medio igual a 0.011354, al ser una diferencia entre los valores reales y estimados; este valor al estar cercano a 0 nos demuestra la viabilidad del proceso de aprendizaje supervisado. Y si verificamos este valor está por debajo del estimado en el artículo científico base en el cual se demuestra un error cuadrático medio igual a 0.0049875.

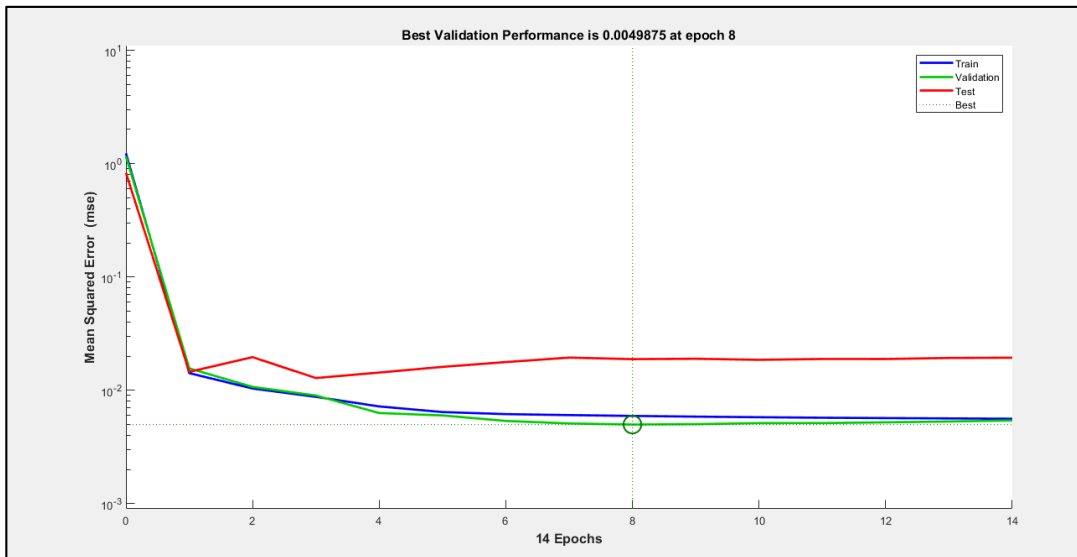


Gráfico 9-4. Error cuadrático medio para la RNA con 18 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En adición, la RNA presenta un coeficiente de correlación igual a 0.94076 que garantiza la validez del modelo ya que estadísticamente se aproxima a la perfección que es 1. No obstante, el coeficiente de correlación expuesto en el artículo científico base es igual a 0.9825, esta diferencia es debido a que, los datos de entrada provienen de una base de datos generada por simulaciones en un programa diferente al señalado en el artículo científico.

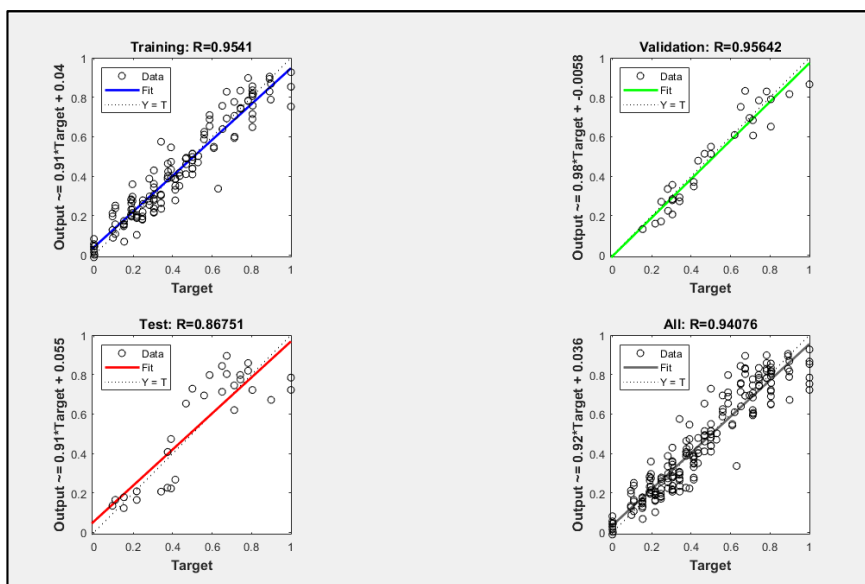


Gráfico 10-4. Regresión lineal para la RNA con 18 capas ocultas.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

De igual forma, al reconocer que la RNA debe contar con 18 capas ocultas se sintetizan los datos obtenidos de la regresión lineal, así como también se genera la tabla 23-4 donde se visualiza la comparación entre los datos del artículo científico base y los datos obtenidos por la RNA de este proyecto.

Tabla 23-4: Resumen Regresión lineal de RNA con 18 capas ocultas.

	Entrenamiento	Prueba	Validación	Total
R	0.9541	0.86751	0.95642	0.94076

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 24-4: Comparación entre Redes Neuronales Artificiales

	RNA Base	RNA Diseñada
MSE	0.0172	0.0049875
R ²	0.96537	0.88502

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

4.4 Determinación de la idoneidad de la RNA

Para la determinación de la idoneidad de la Red Neuronal Artificial se llevó a cabo un análisis estadístico utilizando STATGRAPHICS tomando en cuenta los siguientes factores:

4.4.1 Análisis estadístico de la fracción molar de benceno en el destilado

a) Análisis ANOVA

Tabla 25-4: Resumen tabla ANOVA para fracción de benceno en el destilado.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	2.13149E-12	1	2.13149E-12	0.01	0.9030
Intra grupos	2.83306E-8	198	1.43084E-10		
Total (Corr.)	2.83328E-8	199			

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Con respecto a tabla ANOVA se observa la razón-F, que en este caso es igual a 0.01, como cociente entre el estimado entre grupos y el estimado dentro de grupos. Así también, puesto que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables de fracción de benceno reales y predichas en el destilado, con un nivel del 95.0% de confianza. Esto también se puede evidenciar en el gráfico ANOVA siguiente.

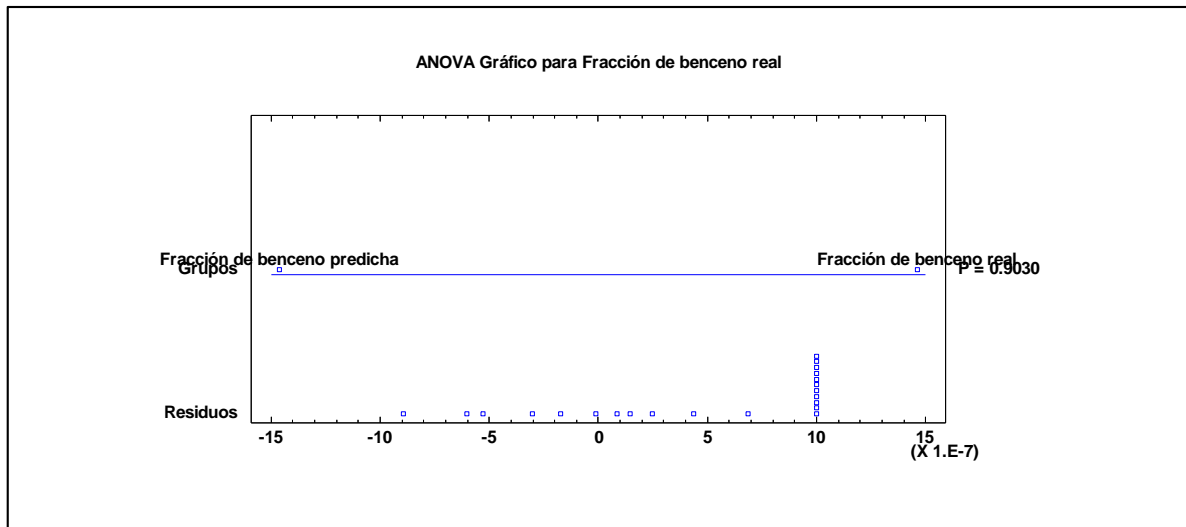


Gráfico 11-4. Gráfico ANOVA para la fracción de benceno en el destilado.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

b) Análisis de medias

Tabla 26-4: Medias para la fracción de benceno en el destilado.

			<i>Error Est.</i>		
	<i>Casos</i>	<i>Media</i>	<i>(s agrupada)</i>	<i>Límite Inferior</i>	<i>Límite Superior</i>
Fracción de benceno real	100	0.983629	0.00000119618	0.983627	0.983631
Fracción de benceno predicha	100	0.983629	0.00000119618	0.983627	0.983630
Total	200	0.983629			

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Esta tabla muestra la media para cada columna de datos. También muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. La tabla también muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, en este caso 0.983629, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces. De igual manera, a continuación, se puede observar gráficamente.

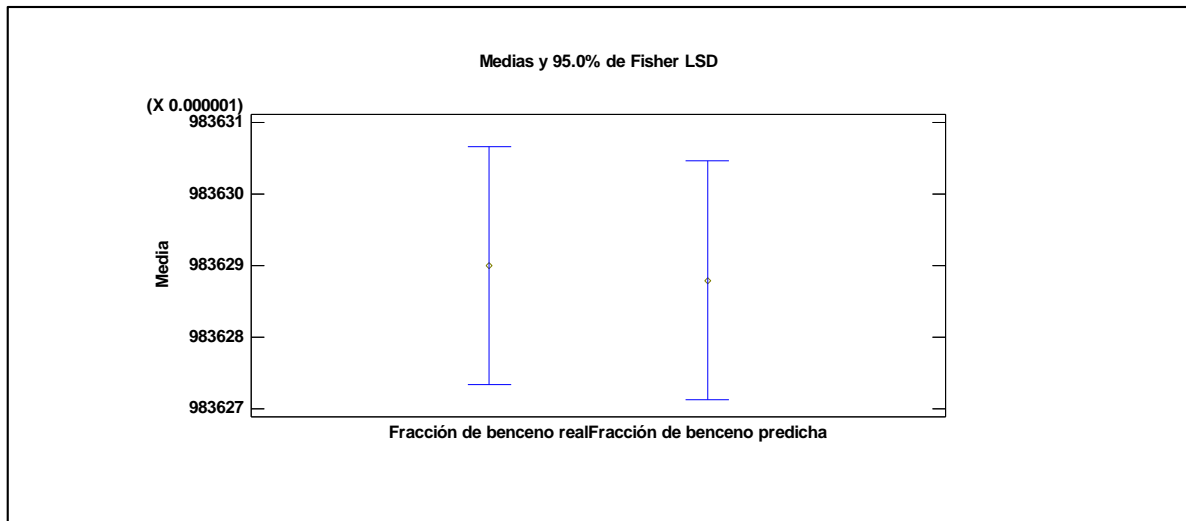


Gráfico 12-4. Gráfico de medias para la fracción de benceno en el destilado.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

c) Prueba de múltiples rangos

Tabla 27-4: Método: 95.0 porcentaje LSD

	Casos	Media	Grupos Homogéneos
Fracción de benceno predicha	100	0.983629	X
Fracción de benceno real	100	0.983629	X

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 28-4: Contraste entre muestras

Contraste	Sig.	Diferencia	+/- Límites
Fracción de benceno real - Fracción de benceno predicha		2.0647E-7	0.00000333597

* indica una diferencia significativa.

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Esta tabla aplica un procedimiento de comparación múltiple para determinar cuáles medias son significativamente diferentes de otras. La mitad inferior de la salida muestra las diferencias estimadas entre cada par de medias. No hay diferencias estadísticamente significativas entre cualquier par de medias, con un nivel del 95.0% de confianza. En la tabla 27-4, se ha identificado un grupo homogéneo, según la alineación de las X's en columna. Es decir, no existen diferencias

estadísticamente significativas entre aquellos niveles que compartan una misma columna de X's. De igual manera la tabla 28-4 refleja que no existe una diferencia significativa en el contraste entre muestras.

d) Prueba de Kruskal-Wallis

Tabla 29-4: Resumen de Prueba de Kruskal-Wallis

	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
Fracción de benceno real	100	101.86
Fracción de benceno predicha	100	99.14

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

La prueba de Kruskal-Wallis evalúa la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las muestras en las columnas sea la misma. Calculándose también el rango promedio para la fracción de benceno real en los productos igual a 101.86 mientras que el rango promedio para la fracción de benceno predicha en los productos es igual a 99.14.

Cabe destacar que con esta prueba el valor de $-P$ es igual a 0.739 siendo este mayor o igual que 0.05, por lo tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel del 95.0% de confianza.

e) Gráfico de caja y bigotes para las fracciones de benceno en el destilado

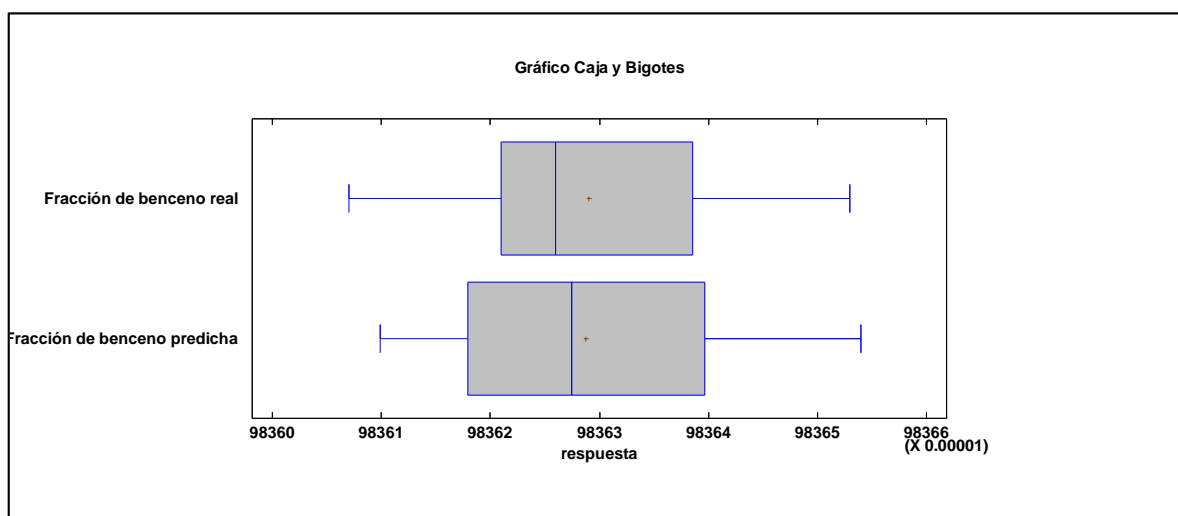


Gráfico 13-4. Gráfico de caja y bigote para la fracción de benceno en el destilado.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Respecto al diagrama de caja y bigote para la fracción de benceno en el destilado se denota que el bigote de la parte izquierda es más corto que el bigote de la parte derecha, si tomamos como referencia a la fracción de benceno real, el valor mínimo es igual a 0.983607 mientras que el valor máximo es igual a 0.983653. Y esto en comparación con el valor mínimo y máximo de la fracción de benceno predicha en el destilado es 0.98361 y 0.983654 respectivamente; demostrándose una ínfima diferencia entre los datos.

En función del rango intercuartílico el 50% de las muestras de la fracción de benceno real se encuentran comprendidas en un rango de 0.98362 a 0.983639.

Cabe destacar que la parte derecha de la caja en ambos casos es mayor que de la izquierda, ello quiere decir que las fracciones entre el 50% y 75% de la población está más dispersa que entre el 25% y 50%.

4.4.2 *Análisis estadístico de la fracción molar de benceno en el residuo.*

a) Análisis ANOVA

Tabla 30-4: Resumen tabla ANOVA para fracción de benceno en el residuo.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	1.83477E-8	1	1.83477E-8	0.07	0.7926
Intra grupos	0.0000523872	198	2.64582E-7		
Total (Corr.)	0.0000524055	199			

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En el análisis ANOVA se observa la razón-F, que en este caso es igual a 0.07, como cociente entre el estimado entre grupos y el estimado dentro de grupos. Y puesto que el valor-P igual a 0.7926 es mayor o igual que 0.05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables de fracción de benceno reales y predichas en el destilado, con un nivel del 95.0% de confianza. Demostrado en el siguiente gráfico:

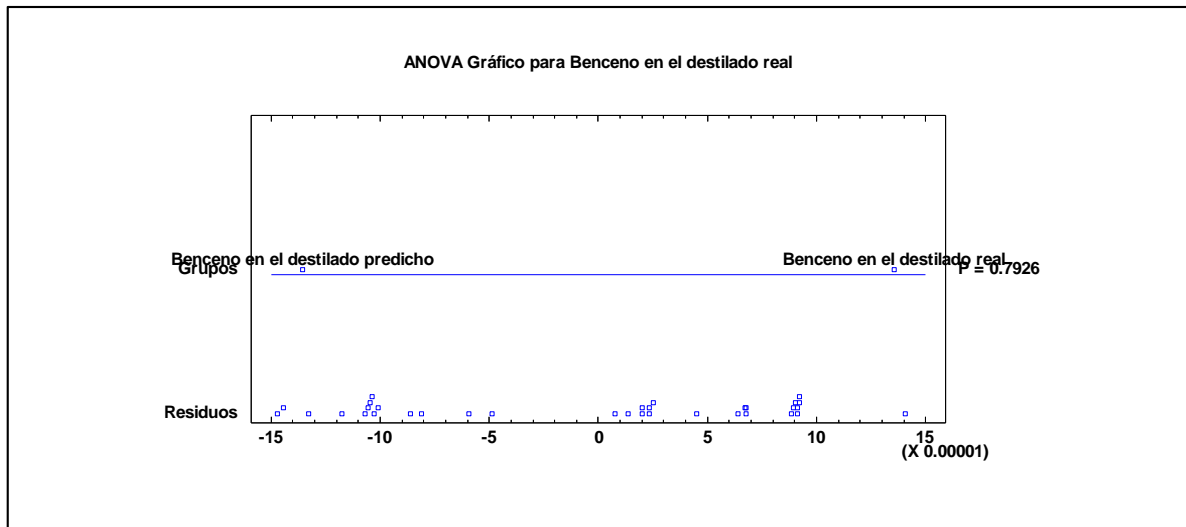


Gráfico 14-4. Gráfico ANOVA para la fracción de benceno en el residuo.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

b) Análisis de medias

Tabla 31-4: Medias para la fracción de benceno en el residuo.

			Error Est.		
	Casos	Media	(s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Benceno en el destilado real	100	0.12537	0.0000514375	0.125298	0.125441
Benceno en el destilado predicho	100	0.125351	0.0000514375	0.125279	0.125422
Total	200	0.12536			

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Esta tabla refleja la media para cada columna de datos. De igual forma, muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. La tabla 31-4 también muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, en este caso 0.12536, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces. A continuación, se puede observar los resultados gráficamente.

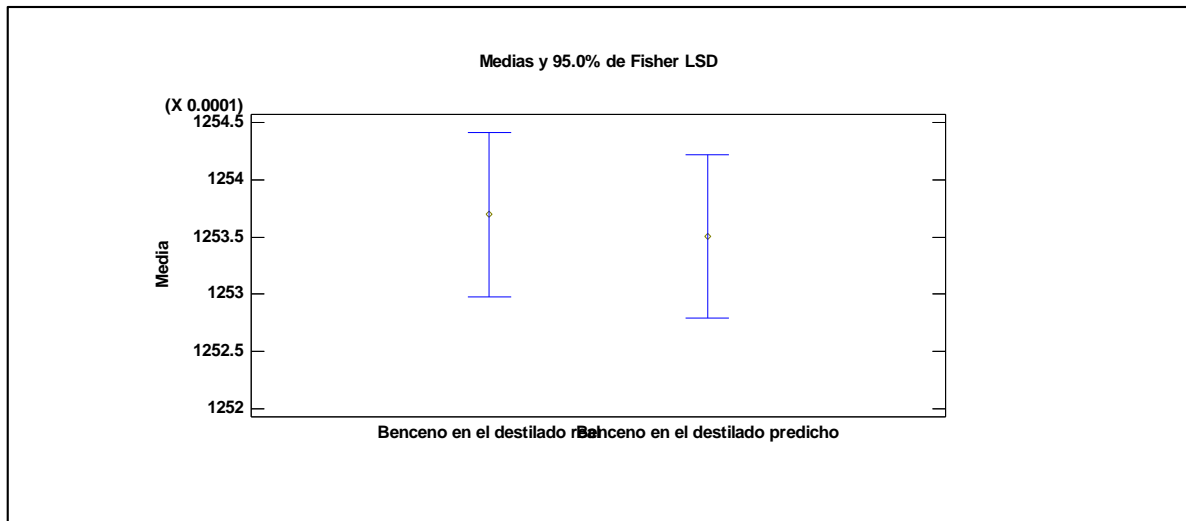


Gráfico 15-4. Gráfico de medias para la fracción de benceno en el destilado.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

c) Prueba de múltiples rangos

Tabla 32-4: Método: 95.0 porcentaje LSD

	Casos	Media	Grupos Homogéneos
Benceno en el destilado predicho	100	0.125351	X
Benceno en el destilado real	100	0.12537	X

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 33-4: Contraste entre muestras

Contraste	Sig.	Diferencia	+/- Límites
Benceno en el destilado real - Benceno en el destilado predicho		0.000019156	0.000143452

* indica una diferencia significativa.

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

La prueba de múltiples rangos aplica un procedimiento de comparación múltiple para determinar cuáles medias son significativamente diferentes de otras. La mitad inferior de la salida muestra las diferencias estimadas entre cada par de medias. No hay diferencias estadísticamente significativas entre cualquier par de medias, con un nivel del 95.0% de confianza. En la tabla 32-4, se ha

identificado un grupo homogéneo, según la alineación de las X's en columna. Es decir, estadísticamente al compartir una misma columna no existen diferencias significativas. De igual manera la tabla 33-4 refleja que no existe una diferencia significativa en el contraste entre la fracción de benceno en el residuo real con la fracción de benceno en residuo predicha.

d) Prueba de Kruskal-Wallis

Tabla 34-4: Resumen de Prueba de Kruskal-Wallis

	Tamaño de Muestra	Rango Promedio
Benceno en el destilado real	100	101.56
Benceno en el destilado predicho	100	99.44

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Por otro lado, la prueba de Kruskal-Wallis evalúa la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las muestras en las columnas sea la misma. Calculándose también el rango promedio para la fracción de benceno real en el residuo igual a 101.56 mientras que el rango promedio para la fracción de benceno predicha en el residuo es igual a 99.44.

Cabe destacar que con esta prueba el valor de $-P$ es igual a 0.795 siendo este mayor o igual que 0.05, por lo tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel del 95.0% de confianza.

e) Gráfico de caja y bigotes para las fracciones de benceno en el residuo.

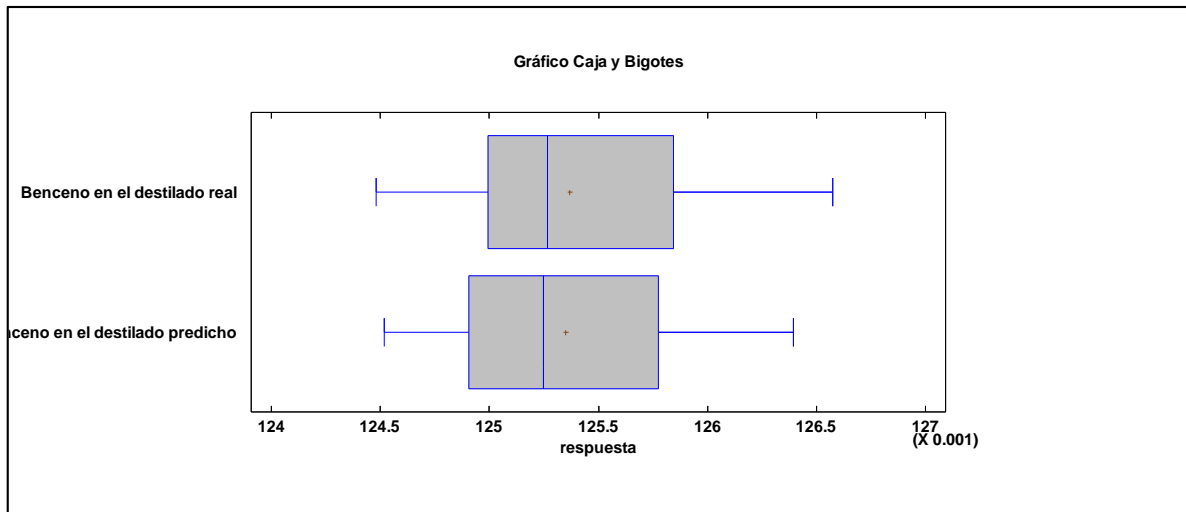


Gráfico 16-4. Gráfico de caja y bigote para la fracción de benceno en el residuo.

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

En función al diagrama de caja y bigote para la fracción de benceno en el residuo se denota que el bigote de la parte derecha es más amplio que el bigote de la parte izquierda, si tomamos como referencia a la fracción de benceno real, el valor mínimo es igual a 0.124481 mientras que el valor máximo es igual a 0.126576. Y esto en comparación con el valor mínimo y máximo de la fracción de benceno predicha en el destilado es 0.12452 y 0.126393 respectivamente; demostrándose una ínfima diferencia entre los datos.

En función del rango intercuartílico el 50% de las muestras de la fracción de benceno real se encuentran comprendidas en un rango de 0.124994 a 0.125844.

Cabe destacar que la parte derecha de la caja en ambos casos es mayor que de la izquierda, ello quiere decir que las fracciones entre el 50% y 75% de la población está más dispersa que entre el 25% y 50%.

4.5 Predicción de valores con la Red Neuronal Artificial

Para culminar con la validación de la RNA se ha propuesto generar una tabla de resultados donde se reflejan 10 datos de entrada de presión y temperatura dentro del rango establecido anteriormente y así compararlos con los resultados o datos de salida obtenidos en la simulación en DWSIM y los datos predichos con la RNA en MATLAB.

Cabe destacar que al conocer el valor de la fracción molar de benceno en el destilado y en el residuo, se puede determinar el valor de la fracción molar de tolueno en el destilado y en el residuo por medio de una diferencia.

Tabla 35-4: Comparación de los resultados del sistema de destilación benceno-tolueno.

T (C)	P (atm)	Fracción benceno en el destilado DWSIM	Fracción tolueno en el destilado DWSIM	Fracción benceno en el residuo DWSIM	Fracción tolueno en el residuo DWSIM	Fracción benceno en el destilado RNA	Fracción tolueno en el destilado RNA	Fracción benceno en el residuo RNA	Fracción tolueno en el residuo RNA
44	1.188	0.983634	0.016366	0.125653	0.874347	0.983630	0.016370	0.125483	0.874517
43	1.137	0.983638	0.016361	0.125847	0.874153	0.983640	0.016360	0.125842	0.874158
44	1.148	0.983634	0.016366	0.125654	0.874346	0.983639	0.016361	0.125840	0.874160
46	1.231	0.983625	0.016375	0.125266	0.874734	0.983638	0.016362	0.125801	0.874199
41	1.475	0.983647	0.016353	0.126228	0.873772	0.983631	0.016369	0.125426	0.874574
40	1.313	0.983652	0.016348	0.126421	0.873579	0.983649	0.016351	0.126444	0.873556
45	1.133	0.983630	0.016370	0.125461	0.874539	0.983645	0.016355	0.126286	0.873714
42	1.020	0.983643	0.016357	0.126041	0.873959	0.983635	0.016365	0.125695	0.874305
44	1.470	0.983634	0.016366	0.125650	0.874350	0.983648	0.016352	0.126270	0.873730
48	0.962	0.983616	0.016384	0.124880	0.875120	0.983644	0.016356	0.126020	0.873980

Fuente: Statgraphics Centurion, 2019

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tabla 36-4: Porcentaje error de los resultados del sistema de destilación benceno-tolueno.

Muestra	% error fracción molar de benceno en el destilado	% error fracción molar de tolueno en el destilado	% error fracción molar de benceno en el residuo	% error fracción molar de tolueno en el residuo	
1		0.00041	0.02444	0.13529	0.01944
2		0.00020	0.00611	0.00397	0.00057
3		0.00051	0.03055	0.14802	0.02127
4		0.00132	0.07938	0.42709	0.06116
5		0.00162	0.09784	0.63535	0.09178
6		0.00030	0.01835	0.01819	0.00263
7		0.00152	0.09163	0.65757	0.09433
8		0.00081	0.04890	0.27451	0.03958
9		0.00142	0.08554	0.49343	0.07090
10		0.00284	0.17089	0.91287	0.13026
Media		0.00109	0.06536	0.37062	0.05319

Realizado por: Orozco, Bryan, 2019

Tal como se muestra en la tabla 36-4, la precisión en la predicción de los productos de la destilación benceno-tolueno presenta porcentajes de errores ínfimos siendo 0.00109 para la predicción de la fracción molar de benceno en el destilado, 0.06536 para la predicción de la fracción molar de tolueno en el destilado, 0.37062 para la predicción de la fracción molar de benceno en el residuo y por último 0.05319 en la predicción de la fracción molar de tolueno en el residuo. Demostrándose así, la vialidad en la utilización de la red neuronal artificial diseñada.

CONCLUSIONES

- Para el diseño del proceso de destilación binaria se utilizó un artículo de mediano impacto de nombre Neuro-Fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column, publicado por la editorial Elsevier; mismo que permitió establecer las bases del sistema de destilación benceno tolueno desarrollado en el software de acceso libre DWSIM, en particular se estableció una condición de operación de la fracción molar de benceno en la alimentación de 0.5, de manera que, la fracción molar de tolueno en la alimentación es igual a 0.5.
- Con la utilización del software matemático Matlab se diseñó una red neuronal artificial de tipo feedforward backpropagation utilizando la herramienta Neural Fitting (nftool) del toolbox con la implementación del algoritmo de Levenberg-Marquardt; el diseño cuenta con 2 capas de entrada, 18 capas ocultas y 2 capas de salida; dando como resultados de la simulación un coeficiente de correlación igual a 0.94076 y un error cuadrático medio igual a 0.0049875.
- Se validó las variables del proceso obtenidas por la red neuronal artificial mediante un análisis estadístico comparativo entre los valores reales de la fracción molar de benceno en el destilado y en el residuo propuestos por el Software DWSIM y los valores predichos de la fracción molar de benceno en el destilado y residuo donde se obtuvo como resultado un valor de $-P$ igual a 0.9030 y 0.7926 respectivamente, siendo estos mayores a 0.005 demuestra que no existen diferencias significativas entre los datos analizados.
- Los resultados presentados en el artículo científico base tiene un MSE igual a 0.0172 y un coeficiente de correlación igual a 0.98168 reflejando una diferencia con respecto a los valores obtenidos con la red neuronal artificial diseñada ya que el MSE es igual a 0.0049875 y el coeficiente de correlación igual a 0.94076, esto debido a la arquitectura de la RNA ya que en la publicación no se muestra cuantas capas ocultas fueron utilizadas mientras que experimentalmente se implementó a la RNA 18 capas ocultas. Esta diferencia también es debido a la implementación de un sensor suave a la RNA del documento base.
- Se creó una base de datos del modelado artificial misma que facilita el manejo de la información al usuario. Esta base de datos fue generada en Excel donde se puede apreciar las variables de proceso ingresadas en DWSIM, tablas de resultados obtenidos de la simulación de la torre de destilación que sirven como entradas para la codificación de la RNA y en especial

se puede ingresar más datos de Presión y temperatura para que la RNA genere nuevos resultados de predicción de la composición de los productos.

RECOMENDACIONES

- Realizar un correcto pre-procesamiento de datos para evitar la utilización de datos atípicos o mal recolectados y que puedan influir en el entrenamiento de la Red Neuronal Artificial lo que provocaría valores más elevados de error cuadrático medio y de coeficiente de correlación.
- El trabajo fue desarrollado con parámetros exclusivos para la codificación de la RNA, por tanto, sería importante comparar estos resultados con la utilización de otro tipo de red neuronal artificial y a su vez con otro algoritmo de entrenamiento.
- Se recomienda la utilización de este modelo tecnológico para la predicción de productos de destilaciones de tres o múltiples componentes.
- Para disminuir la diferencia entre los datos reales y predichos por la Red Neuronal Artificial sería viable la implementación de un sensor suave para los vectores pesos que influyen en el entrenamiento.

GLOSARIO

Razón análisis ANOVA: “es un índice que mide el grado de covariación entre distintas variables relacionadas linealmente. Adviértase que decimos "variables relacionadas linealmente". (Quintana, 2015 pág. 21)

LSD: Diferencia mínima significativa de Fisher, “esta es la mejor opción para realizar un análisis explotario de las diferencias entre tratamientos. Entre sus ventajas están: simpleza, es consistente, se puede utilizar en diseños no balanceados y con desigualdad de varianzas; su potencia es excelente y su error tipo I es conocido y constante”. (Quintana, 2015 pág. 45)

MSE: Error cuadrático medio, “otro criterio razonable para escoger un determinado estimador de un parámetro θ es tomar aquel que cometa, en promedio, el menor error en la estimación.” (Medeiros, 2019 pág. 12)

Coefficiente de correlación de Pearson: es un índice que mide el grado de covariación entre distintas variables relacionadas linealmente. Adviértase que decimos "variables relacionadas linealmente". (Quintana, 2015 pág. 33)

BIBLIOGRAFÍA

ABDUL, Jalee; & APARNA, K. "Neuro-Fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column." A: *Procedia Technology* [en línea]. 2016, Vol. 25, núm. Raerest, pp. 92-99. [Consulta: 04 noviembre 2019] ISSN 2212-0173. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.protcy.2016.08.085>.

CAHUANA, J.C.F.. "Obtención de etanol absoluto por destilación y adsorción." A: [en línea], 2014, pp. 8-76. [Consulta: 04 noviembre 2019] Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S113205591500006X>.

CHAFLA YAMBAY, Edison Xavier. Análisis del rendimiento de algoritmos de entrenamiento de redes neuronales artificiales, aplicadas al modelamiento dinámico de represas hidroeléctricas, mediante el error de predicción del nivel de embalse de agua. (Trabajo de titulación) (Maestría) Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. Riobamba-Ecuador. 2015. pp. 7-61.

LEINO, Marko. Process simulation unit operation models – review of open and hsc chemistry i / o interfaces (Trabajo de titulación) (Maestría) Tampere University of Technology. Tampere, Finlandia. 2016. pp. 50-68.

THE MATHWORKS INC. *¿Qué es una red neuronal?* - MATLAB & Simulink. © 1994-2019 A: [en línea]. [Consulta: 3 noviembre 2019]. Disponible en: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html>.

MATICH, D. *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones.* A: *Historia* [en línea]. Rosario-Argentina. 2001. p. 55. [Consulta: 8 noviembre 2019]. Disponible en: <ftp://decsai.ugr.es/pub/usuarios/castro/Material-Redes-Neuronales/Libros/matich-redesneuronales.pdf>.

MEDEIROS, D. *DWSIM - Simulador de procesos químicos.* A: [en línea]. [Consulta: 3 noviembre 2019]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>.

OTINIANO, M., 2004. "Cálculos en destilación continua para sistemas binarios ideales utilizando hoja de cálculo. *Rev. Soc. Quím.* [en línea], 2004, (Perú) 70 N° 4, pp. 217-226. [Consulta: 8 noviembre 2019]. Disponible en: http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/rsqp/n4_2004/a06.pdf

QUINTANA BLANCO, Asnaldo. Implementación de un sistema de redes neuronales en matlab para la predicción del equilibrio líquido – vapor de mezclas binarias selectas. (Trabajo de titulación) (Grado). Universidad de San Buenaventura Seccional Cartagena. Cartagena, Colombia. 2015. pp. 10-56. [Consulta: 14 noviembre 2019]. Disponible en: http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/bitstream/10819/2611/1/Implementaci%C3%B3n%20de%20un%20sistema%20de%20redes_Asnaldo%20Quintana_USBCTG_2015.pdf

SINALUISA LOZANO, Iván Fernando. Aplicación de la red neuronal artificial feedforward backpropagation para la predicción de demanda de energía eléctrica en la Empresa Eléctrica Riobamba S.A (Trabajo de titulación) (Maestría) Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. Riobamba-Ecuador. 2017. pp. 22-76.

VEINTIMILLA JAIME; & CISNEROS FELIPE. "Predicción de Caudales Basados en Redes Neuronales Artificiales (RNA) para Períodos de Tiempo Sub Diarios." A: *Revista Politécnica*. [en línea], 2015, (Ecuador) Vol. 35, núm. 3, pp. 42-49.

ANEXOS

ANEXO A. Artículo científico de impacto medio.



Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

Procedia Technology 25 (2016) 92 – 99

Procedia
Technology

Global Colloquium in Recent Advancement and Effectual Researches in Engineering, Science and Technology (RAEREST 2016)

Neuro-Fuzzy Soft Sensor Estimator for Benzene Toluene Distillation Column

Abdul Jalce E^{1*}, Aparna K²

Chemical Engineering Department, National Institute of Technology, Calicut, 673601, India

Abstract

The distillation is widely used separation technique in oil and gas refineries. Accurate measurement of the composition of separated constituents is necessary to estimate the purity of the products. Composition measurement using online analysers causes process delay and requires large initial investment. As a solution to this problem, soft sensor estimators can be used to determine the composition of separated product. In this work soft sensor estimators are used for predicting top and bottom compositions in benzene toluene distillation column. More sensitive tray temperatures, re-boiler duty and reflux rate (measured variables) of distillation column were used to predict top and bottom composition (unmeasured). Data used for soft sensor based estimation are generated using process simulation software HYSYS. NARX based ANFIS algorithm was proposed for soft sensor modelling. In this method, most influential inputs for soft sensor modelling were selected using exhaustive search. Neural network model and ANFIS model are also compared using statistical criteria like root mean square error and correlation coefficient (R^2) values. It has been shown by the results that ANFIS performs better while comparing neural network method and ANFIS with the same number of iteration.

© 2016 The Authors. Published by Elsevier Ltd. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).
Peer-review under responsibility of the organizing committee of RAEREST 2016

Keywords: Distillation; ANFIS; NARX; Soft Sensor; HYSYS

1. Introduction

More than 95% of liquids in the industry are separated by distillation [1]. High purity of the separated product is required for delivering good quality products. Moreover, distillation column product composition should be kept near the set point. Moreover, distillation column product composition should be kept near the set point of product composition even though in the face of upsets due to disturbances in the feed or change in feed composition [2]. Hence, composition measurement of delivering products is necessary. The real time measurement of the composition measurement is a challenging, difficult problem in distillation [3]. This can be done using online product analyzers or offline analyzers in laboratory [4]. But this method is rarely used because it results in large measurement delay, sampling delay and high investment cost of online analyzers [2]-[5]. Control action also delayed due to delay in measurement and product quality is also affected subsequently [6]. Delays in order of hours often are acquired, and information regarding the composition cannot be used as the feedback signal in laboratory measurement [4]. Proper maintenance and calibration of the equipment like chromatograph are also required for measurement of this type [6]. These limitations affect the quality of the products. Large numbers of this type of expensive analyzers are also to be used if many processes streams are involved in distillation [7].

Nomenclature			
$u_1(t)$	Reboiler Temperature	$u_4(t-1)$	Delayed Condenser Temperature
$u_1(t-1)$	Delayed Reboiler Temperature	$u_5(t)$	Reflux rate
$u_2(t)$	Second Tray's Temperature	$u_5(t-1)$	Delayed reflux Rate
$u_2(t-1)$	Delayed Second Tray's Temperature	$y_1(t)$	Top Composition
$u_3(t)$	Tenth Tray's Temperature	$y_1(t-1)$	Delayed top composition
$u_3(t-1)$	Delayed Tenth tray's Temperature	$y_2(t)$	Bottom Composition
$u_4(t)$	Condenser Temperature	$y_2(t-1)$	Delayed Bottom Composition

As a solution to the expensive online measurement or offline laboratory measurement, the soft sensors (an association between sensor hardware and estimator software) can be used as an alternate for composition measurement [2]-[7]. Soft sensors were derived from two words "software" and "sensors". The word "software" means that soft sensor models are developed using computer program whereas the word "sensor" means that model was used for giving the same information as their hard ware counter parts were used [8]. Soft sensors are used to measure the unmeasured quantity (primary variable) from measured quantity (secondary variable). Temperature, pressure, and liquid levels etc. are used as the sensing variable in process or chemical industry [5]. Two types of soft sensors are used, i.e., model driven and data driven soft sensor. Model-driven soft sensors also called as a phenomenological model are based on first principle model whereas data-driven soft sensors are based on measured data within plants [4], [8]. Data-driven soft sensors achieved popularity comparing with model driven since it is mainly depended on actual process and can represent the actual process more accurately [8]. Product qualities (primary variable) such as compositions are predicted from the linear combination of process inputs and outputs (secondary variables) [2] using the soft sensor. In the distillation column, composition measurement can be achieved modeling a soft sensor using the primary variable as trays, reboiler and condenser temperatures, heat duty and reflux rate [6].

Data-driven or empirical soft sensor models usually used to estimate product composition in distillation columns are artificial neural network models, Kalman filters, fuzzy models, adaptive network-based fuzzy inference system (ANFIS) models and support vector machine (SVM) models. In [9], 11 tray temperatures were used to estimate the dual composition using partial least square (PLS) method. Artificial neural network models were used as soft sensor estimators in [2], [5], [10], [11]. In [2], [5], [11], distillation column top and bottom product compositions were predicted using artificial neural network. Compositions were predicted in [11] using empirical neural network model based on the steepest descent algorithm where tray temperatures were used as the primary variable whereas in [2], Leven-Berg Marquardt based neural network model was used as soft sensor model where tray temperatures along with reflux rate and heat duty were used as the primary variable. Better performance was achieved using soft sensor model in [2] comparing with software sensor model [11]. Support vector machine based

neural network model was used as soft sensor estimator in [4]. Fuzzy logic with genetic learning was used for composition prediction in [12]. ANFIS algorithm based soft sensor estimator for predicting composition was discussed in [13].

In this paper, a new method, nonlinear auto regressive with exogenous input (NARX) based ANFIS is used for soft sensor modeling. The objective of this paper is to propose a more accurate and predictive model combining the advantages of the neural network, fuzzy inference mechanism, and NARX structure predictability. In this method out of several inputs, most selective six inputs that are affecting compositions are also extracted using a search algorithm

2. System Description

The distillation column is used in petrochemical industry to separate the mixtures consisting of both heavy and light component. A typical distillation column diagram is shown in figure 1. It consists of a condenser, re-boiler and number of trays. In the figure 1, x_f , x_d , x_b represents the mole fraction of light component i.e. benzene in feed, distillate product and bottom product respectively. Feed entering the column (with composition x_f) consists of both heavy and light component. Light component is separated in top where as heavy component is separated at the bottom. In this work distillation column considered is benzene toluene distillation column. In this benzene is light and low boiling component whereas toluene is heavy and high boiling point component. Boiling point of benzene is 80.10C whereas boiling point of toluene is 110.60C at atmospheric pressure

Mass transfer is carried out inside the distillation column between the vapors flowing up and liquid coming down. Vapor flowing up is condensed at the top, and part of the liquid is returned to the column (reflux RR) at the top. Remaining liquid is considered as distillate with composition x_d . Vaporization is carried out in the liquid flowing out of the column in re-boiler and some part of the liquid is taken as the bottom product with composition x_b . Usually, the top and bottom composition in the distillation column is controlled by manipulating reflux flow and vapor flow.

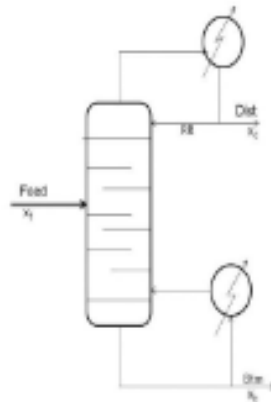


Figure 1. Diagram of Distillation Column

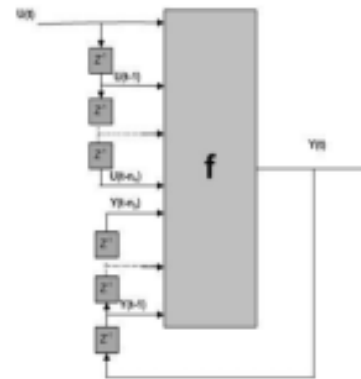


Figure 2. NARX Structure

3. NARX Structure

Nonlinear auto regressive with exogenous input (NARX) network is used for nonlinear mapping of inputs to outputs. NARX is represented by the following equation 1

$$y = f(u(k - n_u), \dots, u(k - 1), u(k), y(k - n_y), \dots, y(k - 1)) \quad (1)$$

Where $u(k)$ and $y(k)$ are input and output of the system at the time interval k , where $k = 1, 2, \dots, N$, and N is the size of training data. In the equation 1, n_u and n_y represent the input and output order of the system. The letter 'f' used in equation 1 is a nonlinear function. A typical NARX structure is given in figure 2. Proper choice of nonlinear function f and arguments are required for better performance of NARX. Neural network, fuzzy, ANFIS etc. are generally used in the place of nonlinear function.

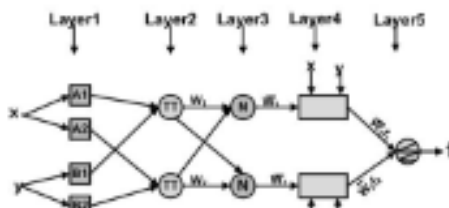


Figure 3. ANFIS structure

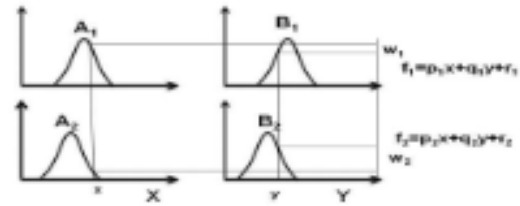


Figure 4. ANFIS reasoning

4. Adaptive Network-Based Fuzzy Inference System (ANFIS)

ANFIS structure is provided with learning parameters of the structure using neural network or least square and fuzzy inference mechanism. It consists of two passes. In the forward pass, signals are passed to the nodes and nodes calculate the outputs and consequent parameters of ANFIS structure are updated using least square. In the backward pass, error rate are back propagated from output to input and premise parameters of the ANFIS structure are updated to reduce the output error [14]. Fuzzy inference mechanism used in ANFIS is Takagi-Sugeno type.

4.1 Training of ANFIS parameters

Different nodes represented by squares and circles in the architecture of ANFIS as in figure 3 are used for specific functions. Square nodes are used for the parameters or adaptive node while circle nodes are used as fixed node which has no parameters. During the training of the network, these parameters are updated to achieve input-output mapping with the desired accuracy. Learning parameters using gradient descent is described below as described by [14], [15].

Suppose the network has L layers and k^{th} layer consists of $\#(k)$ nodes. Nodes in the i^{th} position of the k^{th} layer are represented by (k, i) and its node output by O_i^k . The output of this node depends mainly on the incoming input signals to the node and parameters of the node O_i^k is denoted by

$$O_i^k = O_i^k(O_1^{k-1}, \dots, O_{\#k-1}, f, g, h, \dots) \tag{2}$$

Where $f, g, h \dots$ are parameters of the corresponding node. (Node output and node function are represented by O_i^k)

If P entries of training data are supplied to the network, measure of the error for p^{th} entry of training data can be represented regarding target output and ANFIS network output as the sum of the squared differences (error) between the target output and network output as given by equation 3. In equation 3, $T_{m,p}$ is m^{th} number of component of p^{th} number of target vector, and $O_{m,p}$ is the ANFIS network output when the p^{th} input is applied to the network. Total error measure is given by equation 4. According to learning through gradient descent algorithm, the error rate for the output node is given by equation 5. The error rate can be developed using the chain rule for the internal node as given by equation 6. Where $1 < k < L - 1$. From equation 6, it is understood that error rate of nodes can be calculated concerning the error rate of next layer. If α is a parameter about the network, error rate regarding parameter can be expressed as given below equation 7.

$$E_p = \sum_{m=1}^{n(L)} (T_{m,p} - O_{m,p}^L)^2 \quad (3)$$

$$E = \sum_{p=1}^P E_p \quad (4)$$

$$\frac{\partial E_p}{\partial O_{i,p}^L} = -2(T_{i,p} - O_{i,p}^L) \quad (5)$$

$$\frac{\partial E_p}{\partial O_{i,p}^k} = \sum_{m=1}^{n(k+1)} \frac{\partial E_p}{\partial O_{m,p}^{k+1}} \frac{\partial O_{m,p}^{k+1}}{\partial O_{i,p}^k} \quad (6)$$

$$\frac{\partial E_p}{\partial \alpha} = \sum_{O' \in S} \frac{\partial E_p}{\partial O'} \frac{\partial O'}{\partial \alpha} \quad (7)$$

Where S is the node whose output depends on parameter α . The error rate of total error concerning parameter α is given by

$$\frac{\partial E^p}{\partial \alpha} = \sum_{p=1}^P \frac{\partial E_p}{\partial \alpha} \quad (8)$$

The parameter α is updated by equation 9.

$$\Delta \alpha = \mu \frac{\partial E}{\partial \alpha} \quad (9)$$

Consequent parameters of the ANFIS can be learned using following procedure. Apply P training data set into the ANFIS network, and then a matrix equation 10 of the form can be obtained.

$$AX = B \quad (10)$$

In equation 10, X is unknown parameters or consequent parameters. X can be calculated using the pseudo inverse formula given by equation 12.

$$X = (A^T A^{-1})B \quad (11)$$

4.2. ANFIS Inference System

Fuzzy method used in ANFIS is Takagi Sugeno's type [16]-[17]. ANFIS structure with two inputs and one output is shown in figure 3 and corresponding ANFIS reasoning is given in figure 4. If the structure contains two rules, (1): if x has a value of A_1 and y has a value of B_1 , then $f_1 = p_1 \cdot x + q_1 \cdot y + r_1$

(2): if x has a value of A_2 and y has a value of B_2 , then $f_2 = p_2 \cdot x + q_2 \cdot y + r_2$

ANFIS structure in figure has five layer. Each layer is described shortly.

Layer 1: Compute the membership function for inputs, $O_{1,i} = \mu_{A_i}$

Layer 2: Compute the product of membership functions, $O_{2,i} = \mu_{A_i} \times \mu_{B_i}$

Layer 3: Calculates the ratio of i^{th} rule's firing strength, $\bar{w}_i = \frac{w_i}{w_1+w_2}$

Layer 4: Node calculation is given as $O_{4,i} = \bar{w}_i f_i$

Layer 5: Calculate overall output $O_{5,i} = \sum_i \bar{w}_i f_i$

In this work NARX structure is used for soft sensor modeling. The nonlinear function f used in equation 1 is ANFIS.i.e NARX based ANFIS is used as soft sensor estimator of top and bottom compositions in distillation column. $y_1(t-1), y_2(t-1), u_1(t), u_1(t-1), u_2(t), u_2(t-1), u_3(t), u_3(t-1), u_4(t), u_4(t-1), u_5(t)$ and $u_5(t-1)$ are used the arguments of NARX based ANFIS structure. .But instead of using 12 candidates as arguments of the model, most influential six candidates out of twelve are selected according to the procedures explained in [18]. 924 (C_6^{12}).models are used for selecting best one model with minimum training as well testing error. $u_2(t), u_2(t-1), u_3(t-1), u_5(t), u_5(t-1), y_1(t-1)$ are selected as the arguments of the model for top composition with minimum training error whereas $u_2(t), u_2(t-1), u_3(t-1), u_5(t), u_5(t-1), y_1(t-1)$ are selected as the arguments of the model for bottom composition.

4. Data Generation

Process simulation software HYSYS is used for creating data for identification. Operating condition of the distillation column considered in the simulation is shown in table 3. Peng-Robinson fluid package was used in the simulation. Diagram of distillation created in the simulation is shown in figure 5. 35 samples of top and bottom composition between in the range of 0.7 to 0.95 are generated randomly in Matlab using system identification toolbox. These random values are used to get corresponding ten tray temperatures, reboiler temperature, condenser temperature, and reflux rate and reboiler duty. Among these secondary variables, more deviations due to the change in compositions are observed in reboiler temperature, second tray temperature, tenth tray temperature, reflux rate and reboiler duty. Hence, these secondary variables are used for developing soft sensor model.

Table 1.Rules for predicting top compositions

Number of rules	Rule description
1	If $u_2(t)$ is A_1 and $u_2(t-1)$ is B_1 and $u_3(t-1)$ is C_1 $u_5(t)$ is D_1 and $u_5(t-1)$ is E_1 and $y_1(t-1)$ is F_1 Then $x_D = a_{11}u_2(t) + a_{12}u_2(t-1) + a_{13}u_3(t-1) + a_{14}u_5(t) + a_{15}u_5(t-1) + a_{16}y_1(t-1) + a_{17}$
2	If $u_2(t)$ is A_2 and $u_2(t-1)$ is B_2 and $u_3(t-1)$ is C_2 and $u_5(t)$ is D_2 and $u_5(t-1)$ is E_2 and $y_1(t-1)$ is F_2 Then $x_D = a_{21}u_2(t) + a_{22}u_2(t-1) + a_{23}u_3(t-1) + a_{24}u_5(t) + a_{25}u_5(t-1) + a_{26}y_1(t-1) + a_{27}$

Table 2.Rules for predicting bottom compositions

Number of rules	Rule description
1	If $y_2(t-1)$ is A_1 and $u_1(t)$ is B_1 and $u_2(t)$ is C_1 $u_2(t-1)$ is D_1 and $u_3(t)$ is E_1 and $u_3(t-1)$ is F_1 Then $f_{1b} = a_{11}y_2(t-1) + a_{12}u_1(t) + a_{13}u_2(t) + a_{14}u_2(t-1) + a_{15}u_3(t) + a_{16}u_3(t-1) + a_{17}$
2	If $y_2(t-1)$ is A_2 and $u_1(t)$ is B_2 and $u_2(t)$ is C_2 $u_2(t-1)$ is D_2 and $u_3(t)$ is E_2 and $u_3(t-1)$ is F_2 Then $f_{2b} = a_{21}y_2(t-1) + a_{22}u_1(t) + a_{23}u_2(t) + a_{24}u_2(t-1) + a_{25}u_3(t) + a_{26}u_3(t-1) + a_{27}$

6. Results and Discussions

In this paper, a soft sensor estimator for predicting the top and bottom composition is developed using NARX based ANFIS structure. Results as shown in figures 6-7 shows that NARX based ANFIS has better ability to estimate the compositions from the secondary variables such as temperatures that can be easily and cheaply measured. Performance of the NARX based ANFIS soft sensor model shows superior performance over NARX based neural network as it is clear from figures 6-9 and tables 4-5.

Neural network and ANFIS models are also compared using statistical criteria like root mean square error (RMSE) and correlation coefficient (R²). RMSE value of zero indicates that soft sensor model is predicting actual value. More deviation from RMSE value of zero represents that the model is less accurate. As the deviation from zero increases accuracy is also decreased. The correlation coefficient of one represents that predicted output from soft sensor model and actual value of the primary variable are perfectly matching. Correlation coefficient value lies in the range of zero to one. As correlation coefficient value deviates from one, the soft sensor predicted output value also deviates from the actual value. From tables 4-5, results show that NARX based ANFIS has good capability to perform as an estimator of top and bottom composition of the distillation column.

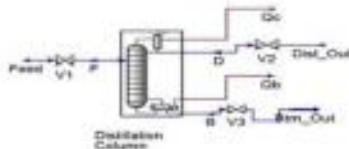


Figure 5. Hysys Diagram of distillation column

Table 3. Operating Conditions of Distillation Column

Number of Stages	30
Feed Stage	16
Mole fraction of benzene in feed	0.5
Mole fraction of toluene in feed	0.5
Feed rate	100 kgmol /hr
Feed temperature	42° C
Feed pressure	1 atm

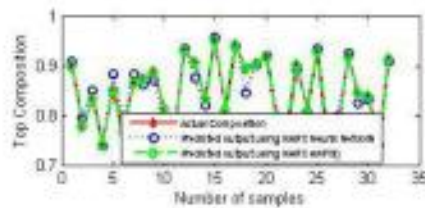


Figure 6. Top Composition response

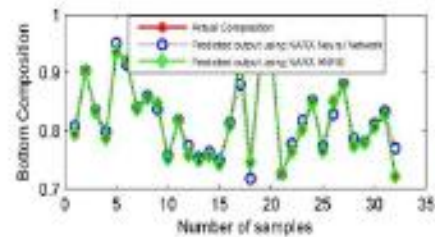


Figure 7. Bottom composition response

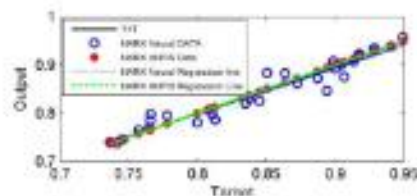


Figure 8. Regression plot for top composition

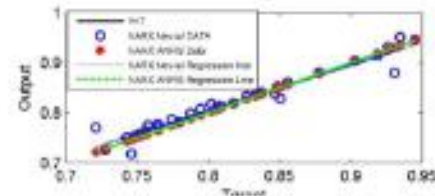


Figure 9. Regression plot for bottom composition

Table 4. RMSE and R² for top composition

Soft sensor model	RMSE	R ²
Neural network	1.72×10^{-2}	0.96537
ANFIS	3.83×10^{-7}	1

Table 5. RMSE and R² for bottom composition

Soft sensor model	RMSE	R ²
Neural network	1.6×10^{-2}	0.9714
ANFIS	5.14×10^{-7}	1

Conclusions

In this work, a soft sensor using a new method based on NARX based ANFIS is proposed. The result showed it has good predictability than neural network method. The result also showed that a computer program developed using proposed method can be used to estimate the compositions of products from the secondary variables such as temperatures instead of using costly online analyzers. This work can be extended to the real plant condition. Since many types of data acquisition cards are available nowadays, secondary variables such as temperatures can be easily acquired into the computer and then they can be programmed using software like LabVIEW or Mat lab and so that primary variables which are difficult to measure can be predicted.

References

1. Osulale, F., Zhang, J.: Distillation control structure selection for energy-efficient operation. *Chem. Eng. Technol.* 2015, 38, 907-916. doi:10.1002/ceat.201400707
2. Singh, V., Gupta, J., Gupta, H.O.: ANN-based estimator for distillation using LevenbergMarquardt approach. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 2007, 20, 249-259. doi:10.1016/j.engappai.2006.06.017
3. Jana, A.K., Samanta, A.N., Ganguly, S.: Nonlinear model-based control algorithm for a distillation column using software sensor. *ISA Trans.* 2005, 44, 259-271. doi:10.1016/S0019-0578(07)60179-7
4. Yan, W., Shao, H., Wang, X.: Soft sensing modeling based on support vector machine and Bayesian model selection. *Comput. Chem. Eng.* 2004, 28, 1489-1498. doi:10.1016/j.compchemeng.2003.11.004
5. De Canete, J. F., del Saz-Orozco, P., Gonzalez, S., Garcia-Moral, I.: Dual composition control and soft estimation for a pilot distillation column using a neurogenetic design. *Comput. Chem. Eng.* 2012, 40, 157-170. doi:10.1016/j.compchemeng.2012.01.003
6. Rani, A., Singh, V., Gupta, J.R.P.: Development of soft sensor for neural network based control of distillation column. *ISA Trans.* 2013, 52, 438449. doi:10.1016/j.isatra.2012.12.009
7. Luo, R.F., Shao, H.H., Zhang, Z.J.: Fuzzy-neural-net-based inferential control for high-purity distillation column. *Control Eng. Pract.* 1995, 3, 31-40. doi:10.1016/0967-0661(94)00061-K
8. Kadlec, P., Gabrys, B., Strandt, S.: Data-driven Soft Sensors in the process industry. *Comput. Chem. Eng.* 2009, 33, 795-814. doi:10.1016/j.compchemeng.2008.12.012
9. Mejdell, T., Skogestad, S.: Composition Estimator in a Pilot-Plant Distillation Column Using Multiple Temperatures. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1991, 30, 2555-2564
10. Jos, A., Assis, D., Maciel, R.: Engineering Soft sensors development for on-line bioreactor state estimation. *Comput. Chem. Eng.* 2000, 24, 10991-103
11. Singh, V., Gupta, J., Gupta, H.O.: ANN based estimator for distillation inferential control. *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 2005, 44, 785-795. doi:10.1016/j.ccep.2004.08.010
12. Delgado, M. R., Nagai, E. Y., de Arruda, L. V. R.: A neuro-coevolutionary genetic fuzzy system to design soft sensors. *Soft Comput.* 2008, 13, 481-495. doi:10.1007/s00500-008-0363-3
13. Khazraee, S.M., Jahanmiri, A.H.: Composition Estimation of Reactive Batch Distillation by Using Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System. *Chinese J. Chem. Eng.* 2010, 18, 703-710. doi:10.1016/S1004-9541(10)60278-9
14. Jang, Jyh-shing Roger.: ANFIS: Adaptive-Ne network-Based Fuzzy Inference System. *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.* 1993, 23, 665-685
15. Akyilmaz, O., Kutterer, H.: Prediction of Earth rotation parameters by fuzzy inference system. *J. Geod.* 2004, 78, 82-93. doi:10.1007/s00190004-0374-5
16. Takagi, T., Sugeno, M.: Fuzzy Identification of Systems and Its Applications to Modeling and Control. *IEEE Trans. Syst. Man Cybern.* 1985, 15, 116-132
17. Sugeno, M., Kang, G.T.: Structure Identification of Fuzzy models. *Fuzzy. Set. Syst.* 1988, 28, 15-33
18. Jang, J.R.: Input Selection for ANFIS Learning. In: *Proceedings of 1996 IEEE International Conference on Fuzzy Systems*, 1996, 1493-1499

ANEXO B. Reporte de simulación en DWSIM

DWSIM Simulation Results Report

Simulation Name:

Date created: 19/11/2019 12:06:39 a. m.

Energy Stream: R DUTY

Energy Stream : R DUTY

Heat Flow: 0 kW

Energy Stream: C DUTY

Energy Stream : C DUTY

Heat Flow: 2713.38 kW

Material Stream: RESIDUO

Calculation results for Material Stream RESIDUO

Compounds: { Toluene, Benzene, }

Specification: Pressure and Enthalpy

Pressure: 1.1 atm

Enthalpy: -321.87549027177 kJ/kg

Property Package: Raoult's Law

Stream Temperature	83.6242	C
Stream Pressure	1.1	atm
Stream Enthalpy	-0.321875	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.000887277	kJ/[kmol.K]

Vapor Phase Molar Fraction	0
Liquid Phase 1 Molar Fraction	1
Liquid Phase 2 Molar Fraction	0
Solid Phase Molar Fraction	0

[Liquid Phase] Mass Flow	0.783411	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	0.01	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	0.000965921	m3/h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	

[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.0163473
----------------------------------	-----------

[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.983653	
[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.0192264	
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.980774	
[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	0.000163473	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	0.00983653	kmol/h
[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	0.0150622	kg/h
[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	0.768349	kg/h
[Liquid Phase] Molecular Weight	78.3411	kg/kmol
[Liquid Phase] Compressibility Facto...	0	
[Liquid Phase] Isothermal Compressib...	0	1/Pa
[Liquid Phase] Bulk Modulus	0	atm
[Liquid Phase] Joule Thomson Coeffic...	-3.01139E-10	K/Pa
[Liquid Phase] Speed of Sound	0	m/s
[Liquid Phase] Volume	0.0965921	m ³ /kmol
[Liquid Phase] Density	811.051	kg/m ³
[Liquid Phase] Viscosity	876.206	cP
[Liquid Phase] Thermal Conductivity	0.125044	W/[m.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cp	1.92402	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cv	1.92402	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Enthalpy	-321.875	kJ/kg
[Liquid Phase] Entropy	-0.887277	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Internal Energy	-321.875	kJ/kg
[Liquid Phase] Helmholtz Free Energy	-5.31813	kJ/kg
[Liquid Phase] Gibbs Free Energy	-5.31813	kJ/kg
[Liquid Phase] Fugacity	{0.00701439; 1.09298}	atm
[Liquid Phase] Fugacity Coefficient	{0.390076; 1.01014}	
[Liquid Phase] Activity Coefficient	{1; 1}	
[Liquid Phase] Log Fugacity Coeffici...	{-0.941412; 0.0100843}	

Material Stream: DESTILADO

Calculation results for Material Stream DESTILADO
 Compounds: { Toluene, Benzene, }
 Specification: Pressure and Enthalpy
 Pressure: 1 atm
 Enthalpy: -304.47151772523 kJ/kg
 Property Package: Raoult's Law

Stream Temperature	88.7259	C
Stream Pressure	1	atm
Stream Enthalpy	-0.304472	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.000756375	kJ/[kmol.K]
Vapor Phase Molar Fraction	0	
Liquid Phase 1 Molar Fraction	1	
Liquid Phase 2 Molar Fraction	0	
Solid Phase Molar Fraction	0	
[Liquid Phase] Mass Flow	8335.27	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	100	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	10.3648	m ³ /h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	
[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.373634	
[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.626366	
[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.413017	
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.586983	
[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	37.3634	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	62.6366	kmol/h
[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	3442.6	kg/h
[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	4892.66	kg/h
[Liquid Phase] Molecular Weight	83.3527	kg/kmol
[Liquid Phase] Compressibility Facto...	0	
[Liquid Phase] Isothermal Compressib...	0	1/Pa
[Liquid Phase] Bulk Modulus	0	atm
[Liquid Phase] Joule Thomson Coeffic...	-3.03001E-10	K/Pa
[Liquid Phase] Speed of Sound	0	m/s
[Liquid Phase] Volume	0.103648	m ³ /kmol
[Liquid Phase] Density	804.188	kg/m ³
[Liquid Phase] Viscosity	47.8824	cP
[Liquid Phase] Thermal Conductivity	0.120773	W/[m.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cp	1.92852	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cv	1.92852	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Enthalpy	-304.472	kJ/kg
[Liquid Phase] Entropy	-0.756375	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Internal Energy	-304.472	kJ/kg

[Liquid Phase] Helmholtz Free Energy	-30.7577	kJ/kg
[Liquid Phase] Gibbs Free Energy	-30.7577	kJ/kg
[Liquid Phase] Fugacity	{0.19043; 0.80957}	atm
[Liquid Phase] Fugacity Coefficient	{0.509671; 1.29249}	
[Liquid Phase] Activity Coefficient	{1; 1}	
[Liquid Phase] Log Fugacity Coeffici...	{-0.67399; 0.256568}	

Material Stream: FEED

Calculation results for Material Stream FEED

Compounds: { Toluene, Benzene, }

Specification: Temperature and Pressure

Temperature: 42 C

Pressure: 1 atm

Property Package: Raoult's Law

Stream Temperature	42	C
Stream Pressure	1	atm
Stream Enthalpy	-0.392076	kJ/kmol
Stream Entropy	-0.00117424	kJ/[kmol.K]
Vapor Phase Molar Fraction	0	
Liquid Phase 1 Molar Fraction	1	
Liquid Phase 2 Molar Fraction	0	
Solid Phase Molar Fraction	0	
[Liquid Phase] Mass Flow	8512.51	kg/h
[Liquid Phase] Molar Flow	100	kmol/h
[Liquid Phase] Volumetric Flow	9.99591	m3/h
[Liquid Phase] Phase Mole Fraction	1	
[Liquid Phase] Phase Mass Fraction	1	
[Liquid Phase] Toluene Mole Frac	0.5	
[Liquid Phase] Benzene Mole Frac	0.5	
[Liquid Phase] Toluene Mass Frac	0.541194	
[Liquid Phase] Benzene Mass Frac	0.458806	
[Liquid Phase] Toluene Mole Flow	50	kmol/h
[Liquid Phase] Benzene Mole Flow	50	kmol/h
[Liquid Phase] Toluene Mass Flow	4606.92	kg/h

[Liquid Phase] Benzene Mass Flow	3905.59	kg/h
[Liquid Phase] Molecular Weight	85.1251	kg/kmol
[Liquid Phase] Compressibility Facto...	0	
[Liquid Phase] Isothermal Compressib...	0	1/Pa
[Liquid Phase] Bulk Modulus	0	atm
[Liquid Phase] Joule Thomson Coeffic...	-3.11135E-10	K/Pa
[Liquid Phase] Speed of Sound	0	m/s
[Liquid Phase] Volume	0.0999591	m3/kmol
[Liquid Phase] Density	851.6	kg/m3
[Liquid Phase] Viscosity	0.472832	cP
[Liquid Phase] Thermal Conductivity	0.132883	W/[m.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cp	1.77354	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Heat Capacity Cv	1.77354	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Enthalpy	-392.076	kJ/kg
[Liquid Phase] Entropy	-1.17424	kJ/[kg.K]
[Liquid Phase] Internal Energy	-392.076	kJ/kg
[Liquid Phase] Helmholtz Free Energy	-22.0147	kJ/kg
[Liquid Phase] Gibbs Free Energy	-22.0147	kJ/kg
[Liquid Phase] Fugacity	{0.0417641; 0.129409}	atm
[Liquid Phase] Fugacity Coefficient	{0.0835282; 0.258818}	
[Liquid Phase] Activity Coefficient	{1; 1}	
[Liquid Phase] Log Fugacity Coeffici...	{-2.48257; -1.35163}	

Distillation Column: PRUEBA

Distillation Column: PRUEBA
Property Package: Raoult's Law

Calculation parameters

Condenser type: Total_Condenser
Condenser Pressure: 1 atm
Reboiler Pressure: 1.1 atm
Number of Stages: 32

Results

Condenser heat duty: 2713.38 kW
Reboiler heat duty: -2935.46 kW

Column Profiles

Stage	Temperature (C)
0	88.7259
1	95.1964
2	99.6005
3	101.955
4	103.089
5	103.637
6	103.927
7	107.34
8	109.336
9	110.424
10	111.019
11	111.363
12	111.585
13	111.749
14	111.883
15	112.004
16	112.117
17	112.226
18	112.331
19	82.4055
20	82.5081
21	82.6103
22	82.7126
23	82.8144
24	82.9163
25	83.0181
26	83.1194
27	83.2208
28	83.3217
29	83.4228
30	83.5235
31	83.6242

Stage	Pressure (atm)
0	1
1	1.00323
2	1.00645
3	1.00968
4	1.0129
5	1.01613
6	1.01935
7	1.02258

8	1.02581
9	1.02903
10	1.03226
11	1.03548
12	1.03871
13	1.04194
14	1.04516
15	1.04839
16	1.05161
17	1.05484
18	1.05806
19	1.06129
20	1.06452
21	1.06774
22	1.07097
23	1.07419
24	1.07742
25	1.08065
26	1.08387
27	1.0871
28	1.09032
29	1.09355
30	1.09677
31	1.1

Stage	Vapor Flow (kmol/h)
0	0.0018
1	300.002
2	296.266
3	295.118
4	294.866
5	294.823
6	294.82
7	317.474
8	317.646
9	318.044
10	318.349
11	318.547
12	318.677
13	318.773
14	318.852
15	318.922
16	318.99

17	319.055
18	319.125
19	379.426
20	344.518
21	344.582
22	344.644
23	344.707
24	344.77
25	344.832
26	344.895
27	344.957
28	345.019
29	345.08
30	345.142
31	345.203

stage	Liquid Flow (kmol/h)
0	200
1	196.265
2	195.116
3	194.865
4	194.821
5	194.818
6	317.473
7	317.644
8	318.042
9	318.347
10	318.545
11	318.676
12	318.771
13	318.851
14	318.92
15	318.988
16	319.053
17	319.123
18	379.425
19	344.516
20	344.58
21	344.642
22	344.706
23	344.768
24	344.83
25	344.893

26	344.955
27	345.017
28	345.078
29	345.141
30	345.201
31	0.01

