



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DEL PROCESO DE
ESTERIFICACIÓN NO CATALÍTICA DE ÁCIDOS GRASOS
LIBRES QUE COMPONENTEN EL ACEITE KARANJA”**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: ANA PAULA SANCHO SORIA

DIRECTOR: Ing. NELSON SANTIAGO CHUQUÍN VASCO MSc.

Riobamba - Ecuador

2021

© 2021, Ana Paula Sancho Soria

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

Yo, Ana Paula Sancho Soria, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

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

Riobamba, 24 de agosto del 2021.

ANA
PAULA
SANCHO
SORIA



Firmado
digitalmente por
ANA PAULA
SANCHO SORIA
Fecha: 2021.09.23
22:36:06 -05'00'

Ana Paula Sancho Soria

180387463-3

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

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo Propuesta Tecnológica, **SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DEL PROCESO DE ESTERIFICACIÓN NO CATALÍTICA DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES QUE COMPONEN EL ACEITE KARANJA**, realizado por la señorita: **ANA PAULA SANCHO SORIA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA

Ing. Dario Fernando Guamán Lozada MSc.

PRESIDENTE DEL TRIBUNAL

24 de agosto del 2021

Ing. Nelson Santiago Chuquín Vasco MSc.

**DIRECTOR DEL TRABAJO DE
INTEGRACIÓN CURRICULAR**

24 de agosto del 2021

Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco MSc.

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

24 de agosto del 2021

DEDICATORIA

Sin duda alguna este triunfo es dedicado a las tres mujeres más importantes en mi vida, a la Virgen María, a mi madre Mercedes Soria, y por último pero no menos importante a mi abuela Rebeca Benarroche. Todas han sido mi apoyo incondicional y nada soy sin ellas. Han hecho de mí una mujer de bien, con principios y valores, que lucha por sus sueños pese a toda circunstancia adversa. El amor que depositaron en mi corazón, su ejemplo de superación y fortaleza me han conducido a escalar este peldaño en mi vida profesional, que se los aseguro, no será el último que se los dedique. Les amo.

Ana Paula.

AGRADECIMIENTO

En primer lugar quiero agradecer a Dios por darme la oportunidad de cumplir este sueño de ser una gran profesional. Este anhelo nació en mi corazón desde muy pequeña y sé que cada paso que he dado ha sido con la protección de Dios.

Agradezco a mi familia por apoyarme tanto física, económica y emocionalmente en cada decisión que he tomado, por resguardarme en todo momento, ya que han estado para mí en las buenas y en las malas. Gracias por su confianza, porque sin ustedes esta meta no se hubiera lucidado.

A mi madre, porque con gran valentía cumplió su labor, siendo padre y madre a la vez, sus consejos y sabiduría me han guiado como una luz en el camino. A mi abuela, un Dios le pague porque fue quien permaneció firme cuando por un momento todo parecía derrumbarse, sus cuidados y su cariño incondicional alimentaron mi alma. A Matías, mi hermano, quien es mi inspiración, la persona por la cual lucho día con día, para darle el mejor de los ejemplos y que con ello sepa que somos capaces de lograr todo lo que nos proponemos. Mi reconocimiento de igual forma a Bryan Núñez, quien con su apoyo me alentó a seguir adelante para no desistir en el camino.

Al Ing. Daniel Chuquín, muchas gracias la confianza que depositó en mi persona para hacer posible el desarrollo de este trabajo de titulación. Es un admirable profesional, que con su don para enseñar, su compromiso, disposición y motivación infunde en sus estudiantes el cariño hacia la Ingeniería Química.

También extendo mi agradecimiento a mi querida Institución, en específico a la Facultad de Ciencias, por contribuir con mi formación intelectual y brindarme todas las herramientas para construir mis conocimientos a los largo de todos estos años de estudio. Además al Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería, “GISAI”, quienes posibilitaron la puesta en marcha del proyecto de titulación.

Ana Paula.

TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
SIGLAS / ABREVIACIONES.....	xiii
RESUMEN.....	xvi
ABSTRACT.....	xvii

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Antecedentes.....	1
1.2. Identificación del Problema.....	2
1.3. Justificación del proyecto.....	4
1.4. Objetivos.....	5
1.4.1. <i>Objetivo General</i>	5
1.4.2. <i>Objetivos Específicos</i>	5
1.5. Alcance.....	6

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	7
2.1. Estado del Arte.....	7
2.1.1. <i>Biodiesel</i>	7
2.1.2. <i>Procesos de producción de biodiesel</i>	9
2.1.3. <i>Red Neuronal Artificial (RNA)</i>	13
2.1.3.1. <i>Redes neuronales enfocadas en procesos de obtención de biodiesel</i>	13
2.2. Bases Teóricas.....	15
2.2.1. <i>DWSIM</i>	15

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA.....	17
3.1. Etapas de la metodología.....	17
3.2. Determinación de los parámetros de funcionamiento.....	18

3.2.1.	<i>Generalidades del proceso</i>	18
3.2.2.	<i>Secuencia del proceso estudiado</i>	20
3.2.2.1.	<i>Parámetros de funcionamiento de intercambiador de calor</i>	21
3.3.	Simulación en DWSIM	22
3.4.	Validación de los resultados de la simulación	28
3.5.	Análisis de Sensibilidad	29
3.6.	Especificación de las variables dependientes e independientes	31
3.7.	Creación de la base de datos	32
3.8.	Diseño de la red neuronal artificial	34
3.9.	Entrenamiento de la RNA	35
3.10.	Validación de la RNA	37
3.11.	Análisis Estadístico	38

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	40
4.1.	Presupuesto	40
4.2.	Recursos y Materiales	40
4.3.	Cronograma del proyecto	42
4.4.	Discusión y análisis de resultados	43
4.4.1.	<i>Resultados de la simulación en DWSIM</i>	43
4.5.	Validación de los resultados de la simulación	45
4.6.	Balance de masa del proceso	47
4.6.1.	<i>Balance de materia del proceso de esterificación no catalítica</i>	47
4.7.	Resultados del análisis de sensibilidad	58
4.7.1.	<i>Interpretación gráfica del análisis de sensibilidad</i>	59
4.8.	Informe de los resultados de la RNA	62
4.8.1.	<i>Resultados de los indicadores numéricos en el diseño de la RNA</i>	63
4.8.2.	<i>Codificación de la RNA diseñada en MATLAB</i>	66
4.9.	Gráficos que relacionan las salidas predichas y las salidas simuladas	66
4.9.1.1.	<i>Interpretación gráfica de los resultados obtenidos en la RNA en la fase de diseño y entrenamiento</i>	66
4.9.1.2.	<i>Interpretación gráfica de los resultados obtenidos en la RNA en la fase de validación externa</i>	67
4.10.	Resultados del Análisis estadístico	74
4.10.1.	<i>Prueba ANOVA</i>	74

4.10.2.	<i>Interpretación de los gráficos de medias</i>	76
4.10.3.	<i>Interpretación de los gráficos de caja y bigotes</i>	80
CONCLUSIONES		84
RECOMENDACIONES		86
GLOSARIO		
BIBLIOGRAFÍA		
ANEXOS		

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-3:	Condiciones iniciales operativas de las corrientes de entrada.....	19
Tabla 2-3:	Condiciones operativas del intercambiador de calor.....	21
Tabla 3-3:	Condiciones operativas del reactor.	21
Tabla 4-3:	Parámetros cinéticos del reactor.....	22
Tabla 5-3:	Parámetros operativos ingresados para la simulación en DWSIM	23
Tabla 6-3:	Detalle de las variables independientes del sistema.....	31
Tabla 7-3:	Detalle de las variables dependientes del sistema.....	32
Tabla 8-3:	Parámetros de entrada de la RNA	32
Tabla 9-3:	Parámetros de salida de la RNA.....	33
Tabla 10-3:	Límites operativos de las entradas a la RNA	33
Tabla 1-4:	Matriz de Presupuesto	40
Tabla 2-4:	Cronograma del trabajo de titulación.....	42
Tabla 3-4:	Resultados de la corriente Metanol+Agua 1	44
Tabla 4-4:	Resultados de la corriente Oleato de Metilo	44
Tabla 5-4:	Resultados de la corriente Metanol+Agua 3	45
Tabla 6-4:	Resultado de %E calculados	46
Tabla 7-4:	Cálculo de los flujos molares de la reacción con respecto al RL.....	56
Tabla 8-4:	Comparación de las fracciones molares a la salida del reactor	58
Tabla 9-4:	Resultados de los indicadores MSE y R.....	63
Tabla 10-4:	Datos reales vs predichos provenientes de la corriente líquida dentro de la validación de la RNA	68
Tabla 11-4:	Datos reales vs predichos provenientes de la corriente líquida dentro de la validación de la RNA	70
Tabla 12-4:	Datos reales vs predichos provenientes de la corriente gaseosa dentro de la validación de la RNA	72
Tabla 13-4:	ANOVA.....	75

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2:	Producción mundial de biodiesel por país en 2018.....	8
Figura 1-3:	Diagrama de flujo del proceso de esterificación	19
Figura 2-3:	Flowsheet de la simulación realizada en DWSIM.	22
Figura 3-3:	Panel de creación de nuevos compuestos en DWSIM	24
Figura 4-3:	Panel de selección de compuestos	25
Figura 5-3:	Elección del paquete termodinámico	25
Figura 6-3:	Ingreso de los parámetros de entrada para los flujos de alimentación	26
Figura 7-3:	Especificación de los datos requeridos en el equipo IC	26
Figura 8-3:	Configuración de los parámetros para el equipo Reactor	27
Figura 9-3:	Especificación de los requisitos del fluido que ingresa al equipo IC.....	27
Figura 10-3:	Configuración de la reacción de conversión	28
Figura 11-3:	Panel de configuración de la tabla de propiedades resultantes.....	29
Figura 12-3:	Diagrama de Flujo con tablas de resultados.....	29
Figura 13-3:	Configuración de las condiciones para el análisis de sensibilidad.....	30
Figura 14-3:	Obtención de resultados del análisis de sensibilidad	31
Figura 15-3:	Base de datos normalizada en el programa Excel.	34
Figura 16-3:	Configuración del algoritmo BR.....	35
Figura 17-3:	Ejecución del entrenamiento de la RNA	36
Figura 1-4:	Simulación en DWSIM del proceso de obtención de biodiesel.....	43
Figura 2-4:	Diagrama del proceso de esterificación no catalítica	47
Figura 3-4:	Detalle del Mezclador 1	48
Figura 4-4:	Detalle del Mezclador 2	50
Figura 5-4:	Detalle del Reactor.....	53
Figura 6-4:	Incidencia de la variable $A1- X_a$, sobre la variable $OM-X_{M-O}$	59
Figura 7-4:	Incidencia de la variable $Ac- X_o$, sobre la variable $OM-X_{M-O}$	60
Figura 8-4:	Incidencia de la variable $-p$, frente a la variable $OM-X_{M-O}$	61
Figura 9-4:	Incidencia de la variable $\%C$, sobre la variable $OM-X_{M-O}$	62
Figura 10-4:	Estructura de la RNA configurada en MATLAB	63
Figura 11-4:	Panel de resultados arrojados utilizando el algoritmo BR.	63

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-2:	Características de DWSIM	16
Gráfico 1-3:	Metodología del trabajo de Titulación	17
Gráfico 1-4:	Evolución del MSE en la etapa de entrenamiento y prueba.	64
Gráfico 2-4:	Indicador R, en el entrenamiento y prueba de la RNA.....	65
Gráfico 3-4:	Fracción molar M-O real vs la estimada en la fase de diseño y entrenamiento de la RNA.....	67
Gráfico 4-4:	Fracción molar de M-O de la corriente líquida, en la validación externa	69
Gráfico 5-4:	Fracción molar de metanol de la corriente líquida, en la validación externa	69
Gráfico 6-4:	Fracción molar de OOO de la corriente líquida, en la validación externa	71
Gráfico 7-4:	Fracción molar de LLL de la corriente líquida, en la validación externa	71
Gráfico 8-4:	Fracción molar de metanol de la corriente gaseosa, en la validación externa	73
Gráfico 9-4:	Fracción molar de agua de la corriente gaseosa, en la validación externa	73
Gráfico 10-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM- X_{M-O}	76
Gráfico 11-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM- X_m	77
Gráfico 12-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM- X_{OOO}	77
Gráfico 13-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM- X_{LLL}	78
Gráfico 14-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de MA- X_m	78
Gráfico 15-4:	Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de MA- X_a	79
Gráfico 16-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM- X_{M-O}	80
Gráfico 17-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM- X_m	80
Gráfico 18-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM- X_{OOO}	81
Gráfico 19-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM- X_{LLL}	81
Gráfico 20-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de MA- X_m	82
Gráfico 21-4:	Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de MA- X_a	82

ÍNDICE DE ANEXOS

- ANEXO A:** BASE DE DATOS EMPLEADA PARA EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO B:** BASE DE DATOS EXTERNA PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA
- ANEXO C:** NOMBRES DE LAS VARIABLES EMPLEADAS PARA LA FASE DEL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO D:** NOMBRES DE LAS VARIABLES EMPLEADAS PARA LA FASE DE VALIDACIÓN DE LA RNA
- ANEXO E:** SCRIPT DESARROLLADO PARA EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO F:** SCRIPT DESARROLLADO PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA
- ANEXO G:** GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE METANOL DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO H:** GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE OOO DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO I:** GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE LLL DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO J:** GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE METANOL DE LA CORRIENTE GASEOSA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO K:** GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE AGUA DE LA CORRIENTE GASEOSA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

SIGLAS / ABREVIACIONES

a	Agua.
AAA	Triaraquidina (en inglés, triarachidic).
A1- X_a	Fracción molar de agua (Corriente Alimentación 1, simulación).
Ac- X_o	Fracción molar de ácido oleico (Corriente aceite, simulación).
Al₂O₃	Óxido de Aluminio, alúmina.
Atm	Unidad de presión, atmósfera.
B05	Contenido de biodiesel en el combustible diésel: 5%.
BR	Algoritmo de regularización Bayesiano.
%C	Porcentaje de conversión de la reacción química (Propiedades de la reacción, simulación).
C₁₄-C₂₄	Éster de cadena larga.
CO	Monóxido de carbono.
CO₂	Dióxido de carbono.
CO_x	Óxidos de carbono.
CuO	Monóxido de cobre.
%E	Error porcentual.
E-100,101...	Corrientes (artículo científico).
F-100	Columna Flash (en inglés, flash column, artículo científico).
FAME	Esteres metílicos de ácidos grasos (sus siglas en inglés, Fatty Acid Methyl Esters).
FFA	Ácidos grasos libres (sus siglas en inglés, Free Fatty Acids).
HE-100	Intercambiador de Calor (en inglés, heat exchanger, artículo científico).
HC	Hidrocarburos.
IC	Intercambiador de calor (simulación)
KNO₃	Nitrato de Potasio.
Kmol/s	Unidad de flujo molar, kilomol por segundo.
LM	Algoritmo de Levenberg-Marquardt.
LLL	Trilinoleína (en inglés, trilenolein).
M-100,101	Mezcladores de alimentación (en inglés, feed mixers, artículo científico).

m	Metanol
MA- X_m	Fracción molar de metanol (Corriente Metanol +Agua 1, simulación).
MA- X_a	Fracción molar de agua (Corriente Metanol +Agua 1, simulación).
MPa	Unidad de presión, megapascal.
MSE	Error cuadrático medio.
MW	Unidad de potencia, megawatt o megavatio.
M-O	Oleato de metilo (en inglés, methyl-oleate).
NO_x	Óxidos de nitrógeno.
O	Ácido oleico (en inglés, oleic acid).
OOO	Trioleína (en inglés triolein).
OM-X_{M-O}	Fracción molar de oleato de metilo (Corriente Oleato de Metilo, simulación).
OM-X_m	Fracción molar de metanol (Corriente Oleato de Metilo, simulación).
OM-X_{OOO}	Fracción molar de trioleina (Corriente Oleato de Metilo, simulación).
OM-X_{LLL}	Fracción molar de trilinoleina (Corriente Oleato de Metilo, simulación).
P	Presión (bar).
-p	Caída de presión del Reactor (simulación).
P-100,101	Bombas de alimentación (en inglés, feed pumps, artículo científico).
PAHs	Hidrocarburos policíclicos aromáticos.
PPP	Tripalmitina (en inglés, tripalmitin).
QF1	Servicio de la columna flash (en inglés, flash column duty, artículo científico).
QH	Servicio térmico del intercambiador de calor (en inglés, Heat exchanger heat duty, artículo científico).
QR	Servicio del reactor (en inglés, reactor duty, artículo científico).
R-100	Reactor continuo de tanque agitado (en inglés, continuous stirred tank reactor, artículo científico).

R	Regresión.
r²	Coefficiente de correlación.
RL	Reactivo limitante.
RMSE	Raíz del error cuadrático medio.
RNA	Red Neuronal Artificial (en inglés ANN, artificial neural network)
RSM	Superficie de respuesta.
SO₂	Dióxido de Azufre.
SSS	Triestearina (en inglés, tristearin).
SO_x	Óxidos de azufre.
T	Temperatura.
TG	Triglicérido.
TIC	Trabajo de integración curricular
UE	Unión Europea
p/v	Relación peso/volumen.
v/v	Relación volumen/ volumen.
°C	Unidad de temperatura, grados centígrados

RESUMEN

El presente proyecto de titulación tiene como finalidad simular y validar un proceso de esterificación no catalítica de Ácidos Grasos Libres (FFA) que componen el aceite de karanja (*Pongamia pinnata*,) para así procesar los datos que alimentarán una Red Neuronal Artificial (RNA) que estimará las fracciones molares de los compuestos más relevantes del sistema. La RNA fue diseñada en el programa MATLAB, con base en la muestra de cien datos generados por una simulación ya antes validada y sometida a un análisis de sensibilidad en el Programa DWSIM, el cual dio a conocer las variables independientes y dependientes de la secuencia planteada. Las entradas de la RNA fueron: fracción molar de agua de la corriente Alimentación 1, la fracción molar de ácido oleico de la corriente Aceite, el porcentaje de conversión de la reacción química, y la caída de presión en el reactor; las siguientes variables corresponden a las salidas: la fracción molar de oleato de metilo, la fracción molar de metanol, la fracción molar de trioleína y la fracción molar de trilinoleína de la corriente líquida; la fracción molar de metanol y la fracción molar de agua de la corriente gaseosa. A partir del algoritmo de regularización bayesiana, junto con treinta neuronas ocultas, fue posible visualizar un error cuadrático medio (MSE) y un coeficiente de regresión total (R) de 0,00000411 y 0,99, respectivamente. Un análisis estadístico corroboró con el 95% de confiabilidad, la adecuada capacidad predictiva de la red. De la simulación se produjo 1,21 kmol/h de oleato de metilo y del metanol residual fue posible recolectar en estado gaseoso el 99,75%. Se recomienda extender el aprendizaje de la RNA, inspeccionando nuevas condiciones de entrada y salida para crear una potente y completa herramienta que apueste por el desarrollo de procesos industriales que implementen aceites de origen residual.

Palabras clave: <TECNOLOGÍA Y CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA>, <ÁCIDOS GRASOS LIBRES (FFA)>, <ÁCIDO OLEICO>, <OLEATO DE METILO (M-O)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <MATLAB (SOFTWARE)> <REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)>.



1473-DBRA-UTP-2021

ABSTRACT

The objective of this work is to simulate and validate a non-catalytic esterification process of Free Fatty Acids (FFA), components of karanja oil (*Pongamia pinnata*), in order to process the data that will feed an Artificial Neural Network (ANN) which will estimate the mole fractions of the most relevant compounds in the system. The ANN was designed in the MATLAB program, based on the sample of one hundred data generated by a previously validated simulation and subjected to a sensitivity analysis in the DWSIM Software, which revealed the independent and dependent variables of the proposed sequence. The ANN inputs were: mole fraction of water from Feeding stream 1, the mole fraction of oleic acid from the Oil stream, conversion percentage of chemical reaction, and pressure drop in the reactor; the following variables correspond to the outputs: the mole fraction of methyl oleate, the molar fraction of methanol, the mole fraction of triolein and the mole fraction of trilinolein of the liquid stream; the mole fraction of methanol and the mole fraction of water from the gas stream. By using the Bayesian regularization algorithm, together with thirty hidden neurons, it was possible to visualize a mean square error (MSE) and a total regression coefficient (R) of 0.00000411 and 0.99, respectively. A statistical analysis confirmed a 95% of reliability, the adequate predictive capacity of the network. From the simulation, 1.21 kmol/h of methyl oleate was produced and from the residual methanol it was possible to collect 99.75% in the gaseous state. It is recommended to extend ANN learning, inspecting new input and output conditions to create a powerful and complete tool that supports the development of industrial processes that implement oils of residual origin.

Keywords: <CHEMICAL ENGINEERING SCIENCES AND TECHNOLOGY>, <FREE FATTY ACIDS (FFA)>, <OLEIC ACID>, <METHYL OLEATE (MO)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <MATLAB (SOFTWARE)> <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS (ANN)>.

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

Es notable la superioridad que ejerce el uso de energías no renovables, en este caso el abastecimiento de energía a partir de combustibles fósiles, ante otros métodos mucho más sostenibles y en equilibrio con el medio ambiente. Los países europeos (UE) son importadores de petróleo crudo y su dependencia ha aumentado más del 80% en el 2007. Según estadísticas, en la UE el 30% de la energía sin transformar, es decir, energía primaria es empleada para el transporte y esta depende de hidrocarburos fósiles en un 98% (Luque y Melero, 2012, p.1).

Es así que se han ejecutado normativas que ayudan a contrarrestar estas cifras que son alarmantes, ya que el petróleo no solo se emplea para la obtención de energía sino también para la generación de diversos recursos y sus consecuencias no son las más positivas, siendo el principal causante de la acumulación de gases de efecto invernadero y además su caducidad posee fecha definida. Esto obliga a poner en marcha la búsqueda de diferentes fuentes energéticas.

En el 2009 la UE ha considerado la colaboración objetiva del 20% de energías provenientes de fuentes renovables para el empleo de energías primarias en el año 2020, un 10% del valor citado tendrá que ser destinado a la aplicación que más depende de combustibles fósiles y es el transporte (Luque y Melero, 2012, p.2).

Además aquellos estados que acaten estas disposiciones podrán generar exenciones en el cobro de impuestos a sus mandantes, para así generar conciencia e incentivar el uso de biocombustibles. Este bioenergético es compatible con los motores que funcionan a diésel, no es necesario aplicar alguna modificación a las maquinarias y el efecto que ocasiona en las mismas, es la extensión de la vida útil del motor.

El biodiesel es un conjunto de ésteres metílicos de ácidos grasos, conocido por sus siglas en inglés como FAME, se lo obtiene a partir de fuentes renovables como son aceites y grasas tanto vegetales como animales. Al aprovechar la composición de los aceites vegetales refinados, principalmente se está hablando de la producción de biodiesel de primera generación, al provenir de cultivos alimenticios, cabe recalcar que, es esta materia prima (soja, colza, palma y otros) el punto de partida más empleado dentro del sector industrial para la generación de biocombustibles (Luque y Melero, 2012, p.2).

Existen ciertos inconvenientes en el uso de los aceites vegetales entre ellos, los altos e inestables costos de la materia prima y adicional que representarían un obstáculo para la producción alimentaria, replegando el lugar de esta actividad, por la generación de energía, pero es ahí donde se destinaría ciertas tierras infértiles para esta producción.

Los resultados alcanzados en el país europeo, después de poner en marcha las normativas antes enunciadas detallan que desde el 1 de enero del 2017 se ha observado una disminución de los gases de efecto invernadero del 50%, en consecuencia el año siguiente, 2018 la reducción aumentó hasta un 60%, según la Directiva de la UE. Pero existe un hecho importante, la reducción de las emisiones de los contaminantes es menor al 50%, si tan solo se emplean materias primas de primera generación y este valor aumenta a un 80% al utilizar residuos de aceites no comestibles (Luque y Melero, 2012, p.3).

La disponibilidad de los aceites oleaginosos no comestibles en todo el mundo, ha dejado las puertas abiertas para grandes estudios, en los que revelan la posibilidad de generar biodiesel de segunda generación, aprovechando el contenido de los mismos.

Pongamia pinnata, *karanja*, la semilla oleaginosa se ha convertido en una fuente potencial de biocombustibles, se ha estudiado las metodologías, entre ellas la transesterificación, que es la más común, empleando metanol y como catalizador, el hidróxido de potasio. Considerando su alto contenido en ácidos grasos libres, la práctica más idónea para alcanzar un rendimiento alto de ésteres metílicos, es la esterificación con ácido sulfúrico, en reemplazo del hidróxido de sodio (Luque y Melero, 2012, pp. 3-4).

Se ha convertido en la actualidad en una herramienta imprescindible para las industrias, el modelado y la simulación de procesos, los cuales plasman el comportamiento de un proceso como tal, ejerciendo cierto control sobre ellos, para así abaratar costos de capital, y disminuir las pérdidas de materia o la generación de residuos no deseados que pueden contaminar el ambiente. Significa para una empresa, estar un paso adelante, el tener el control de este tipo de programas, por la facilidad que implica la realización de los cálculos matemáticos de los problemas reales. De esta forma se puede controlar aquellas variables importantes para predecir valores y aumentar el rendimiento de los productos, todo esto, en un corto periodo de tiempo y de manera sencilla. En la ingeniería, el uso del pronóstico de las redes neuronales artificiales se ha convertido en una de las opciones más cotizadas, debido a su valiosa capacidad de aprendizaje y su procesamiento no lineal. Esta técnica requiere de pares de datos para comenzar con el entrenamiento de procesos complejos que su desarrollo no ha podido ser posible con otras metodologías, ya que sus resultados tienden a ser inciertos o poco estables (Lamanna y Gimón, 2007, pp.91-92).

1.2. Identificación del Problema

La degradación del medio ambiente a razón del uso de combustibles fósiles es la problemática que requiere ser tratada en la actualidad, ya que su combustión produce emisiones de gases de efecto invernadero como CO_x, NO_x, SO_x, además de ciertas cantidades de hidrocarburos no quemados y cenizas; mismos que atentan a la calidad del aire. Adicionalmente hay que considerar

que el petróleo tiene una fecha de caducidad a mediano plazo, por estas razones su obtención cada vez es más difícil y costosa (Singh et al., 2021, p.2).

La crisis energética lleva al hombre a la búsqueda de energías limpias, sostenibles y en equilibrio con el ambiente, de ahí que Shellenbergger y Nordhaus, activistas ambientales fueron reconocidos en la revista *Times* en el 2008, por publicar el documento con el título inherentemente controversial “*The death of Environmentalism*” con el objetivo de direccionar todo el trabajo de los investigadores hacia un cambio de actitud para no tomar el calentamiento global como una simple regulación, sino más bien motivando a la creación de una revolución tecnológica para el hallazgo de energías limpias (González et al., 2008, p.72).

Es allí donde aparece el biodiesel, encargado de reemplazar al gasoil por su elevada lubricidad y al representar el mismo rendimiento energético que el gasoil fósil (Loaiza, 2003, p.20). El biocombustible se produce a partir de cualquier aceite vegetal mediante una reacción de esterificación, entre metanol y una cierta cantidad de FFA.

La reacción de transesterificación, es una vía para la obtención de biocombustible, tan solo que esta resulta sensible a la influencia de los ácidos grasos libres al promover la reacción secundaria de saponificación. Además, también inhibe la separación de productos; glicerol y biodiesel, durante la purificación y da como resultado una mala calidad del biodiesel (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

Distintas bibliografías detallan la aplicación de la esterificación considerando algunos parámetros importantes, entre ellos la intervención de catalizadores ácidos y básicos, sin embargo al emplear ácidos homogéneos la corrosión en los equipos, la dificultad de separación de productos y los inconvenientes en la recuperación de catalizadores es palpable. Por otra parte el uso de catalizadores ácidos heterogéneos, como zirconia sulfatada genera un rendimiento de biodiesel, a partir del aceite de karanja, de un 38% y al reutilizar el catalizador el rendimiento disminuye a un 16% (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

La experimentación de la reacción en condiciones supercríticas no catalíticas generan altos costos de capital, además de costos operativos. Varios estudios confirman que existe una práctica en la cual no es necesario recurrir a condiciones supercríticas, la esterificación subcrítica no catalítica, mitigó los problemas expuestos en otros procesos y arrojó una conversión de FFA mayor al 94% a partir del aceite de colza (Hussain y Kumar, 2018, p.630).

Este estudio simulará el proceso de conversión de ácidos grasos libres en condiciones subcríticas no catalíticas para la obtención de una energía limpia, biodiesel (ésteres metílicos), empleando el software libre DWSIM para procesos químicos. Al disponer de los resultados, se procederá a compararlos con los datos expuestos en el artículo de alto impacto.

La validación estadística será necesaria para la comprobación de la veracidad de los resultados, posteriormente se creará una base de datos, proveniente de la simulación llevada a cabo, para desarrollar una RNA, capaz de estimar los valores obtenidos del reactor, como es el oleato de

metilo, las composiciones de agua, metanol, trioleína y trilinoleína. De esta forma se genera un análisis a fondo del proceso con el objetivo de optimizarlo, y así lograr la disminución de costos, conjuntamente con un alto aprovechamiento energético.

1.3. Justificación del proyecto

La obtención de biodiesel por vías no catalíticas de esterificación han demostrado ciertas ventajas delante de los distintos procesos de síntesis, ya que su aplicación garantiza la selectividad de la reacción primaria, minimiza los problemas de corrosión en el sistema y además disminuye los costos de capital y costos operativos en comparación a las distintas técnicas (Hussain y Kumar, 2018, p.630).

El producto de interés resulta prometedor al ser un biocombustible renovable, biodegradable y con una toxicidad menor a la sal de mesa. Posee alta lubricidad, intrínsecamente libre de azufre en comparación con el diésel, es por esto que duplica la vida de los motores, sin requerir modificación alguna en los mismos. Se suele mezclar el gasoil de bajo contenido de azufre con cierta cantidad de biodiesel para mejorar su lubricidad (Loaiza, 2003, pp.20-21).

El biodiesel es un combustible de primera generación, si este se lo produce a partir de aceites comestibles, en el mundo se utilizan en general, aceite de soja (EE.UU.), aceite de colza (Europa), aceite de palma (Malasia). Se emplean los cultivos alimenticios y además se procesan con medios convencionales (Singh et al., 2021, p.2).

Para dar paso a esta propuesta, se requieren suelos dedicados a usos alimenticios. México ha destinado aquellos suelos improductivos para su aprovechamiento. Esto beneficiaría al sector agrícola del Ecuador en gran manera, cultivando aquella vegetación adecuada sin mayor afectación al sector alimenticio.

Se obtienen mejores resultados si se utilizan aceites no comestibles, actividad que no interferirá en la cadena alimenticia. Las materias primas de segunda generación incluyen *Jatropha curcas* (Ratanjyote), *Millettia Pinnata* (Karanja o Mongo), *Madhuca longifolia* (Mahua). Todos estos aceites se destinan para la elaboración de biodiesel en la India (Singh et al., 2021, p.3).

El uso del bioenergético producido reduce la contaminación, al disminuir las emisiones de los productos resultantes de la combustión: dióxido de carbono (CO₂) y dióxido sulfuroso (SO₂) en un 100%, el hollín en un 40-60%, de hidrocarburos (HC) 10-50%, en este mismo porcentaje se reducen las emisiones de monóxido de carbono (CO). Se reduce igualmente la emisión de hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs), y en particular de los siguientes derivados, de comprobada acción cancerígena: Fenantren - 97%; Benzofluorantren - 56%; Benzopirenos - 71%. Finalmente, la emisión de compuestos aromáticos y aldehídos se reduce un 13%, las de NO_x se reducen, o aumentan, 5-10% de acuerdo con el desgaste del motor y la calibración de la bomba

Inyectora (Loaiza, 2003, p.20). Es notable el beneficio que generará el uso del biodiesel al medio ambiente, y a la salud de la población humana.

Debido a todos los beneficios mencionados, el proceso es totalmente viable tanto así que países como Colombia apuestan por estas alternativas ecológicas, amigables con el ambiente y en la actualidad el gobierno ha creado una Ley 939 del 2004, la cual establece que el combustible diésel debe ser inicialmente del tipo B05, es decir, que el contenido de biodiesel en el combustible diésel debe ser del 5%. Para de esta manera regular el uso adecuado de los biocombustibles, adjudicándoles la importancia que merecen (González et al., 2008, p.73).

Para ello este estudio radica en una simulación en el software DWSIM, en el cual se analizará con detenimiento el comportamiento del sistema, hallando aquellos parámetros y variables críticas que controlarán el proceso de forma óptima. Así se hallarán los resultados que serán validados estadísticamente a partir de los valores encontrados en bibliografía.

Cabe recalcar que al ser DWSIM una plataforma de código abierto las personas interesadas en el tema podrán acceder a él para estudios futuros. La idea es plasmar a partir de este proyecto una base sólida que motive al estudio de aceites vegetales no comestibles con similares composiciones, accesibles en el país, ya que de esta técnica no existe mucha información bibliográfica.

Empleando el conjunto de datos provenientes de la simulación, se entrenará la respectiva red neuronal artificial utilizando el Toolbox de MATLAB, como una herramienta didáctica, confiable y rápida para obtener las fracciones molares de los compuestos de interés, mediante ciertas condiciones, como las composiciones de las corrientes de entrada, la presión y el porcentaje de conversión de la reacción. Evidenciando la influencia que cada variable genera en el sistema, se analizará el ciclo para optimizarlo de manera sencilla y directa.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Simular y validar un proceso de esterificación no catalítica de ácidos grasos libres que componen el aceite de karanja.

1.4.2. Objetivos Específicos

-Validar la simulación del proceso obtención de biodiesel comparando los resultados obtenidos con referencias bibliográficas.

-Cuantificar la cantidad de oleato de metilo y de metanol obtenidos del proceso de esterificación no catalítica.

-Realizar un análisis de sensibilidad del proceso para determinar las variables de entrada y salida a la red neuronal artificial (RNA).

-Diseñar una (RNA) capaz de predecir las composiciones molares de oleato de metilo y de los demás productos obtenidos resultantes de la reacción.

1.5. Alcance

En el presente trabajo de titulación se lleva a cabo la simulación de un proceso de esterificación de ácidos grasos libres que componen el aceite karanja, mediante el software libre DWSIM. Una vez validada la simulación, el ciclo será capaz de obtener oleato de metilo, biodiesel, el cual es recuperado por medio de una separación vapor-líquido, en el mismo equipo en el que sucede la reacción, un reactor de conversión. Con la ayuda de este equipo la reacción alcanza una conversión aproximada del 99,85% de ácido oleico.

En el proceso se logra un aprovechamiento energético por parte de la línea de vapor, ya que esta corriente cede su energía para aumentar la temperatura de los reactivos. Por otra parte, con el empleo de la simulación, ya antes validada, se obtiene una base de datos, que alimenta a una RNA, creada en el programa MATLAB, que es capaz de pronosticar las composiciones molares resultantes de la reacción, ingresando aquellas variables independientes significativas, como son; la fracción de agua en la corriente del solvente, la fracción de ácido oleico dentro del aceite, la caída de presión del reactor y el porcentaje de conversión de la reacción.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del Arte

2.1.1. *Biodiesel*

En la actualidad el uso del biodiesel se encuentra en la mira de muchos de los países, como una alternativa completamente viable, ya que varios de los artículos científicos indagados coinciden en que las ventajas que representan son más, en comparación al actual dador energético, diésel, el cual es derivado del petróleo, una fuente de energía no renovable, que a lo largo del tiempo ha cobrado su factura, al afectar de forma irreparable al medio ambiente.

Del biodiesel se puede destacar que posee características físicas y químicas similares al diésel común, entre ellas, el punto de inflamación, la viscosidad y el número de cetano. El biocombustible debido a sus fuentes de origen, posee baja toxicidad, es biodegradable, renovable y es capaz de reducir las emisiones de gases nocivos para el ambiente, los cuales causan daños a la salud de los habitantes (Mofijur et al., 2020, p.5).

Debido a su sostenibilidad y a que cada vez es más asequible en los países, su uso se ha normalizado, beneficiando a los ciudadanos de los lugares en donde han introducido al biodiesel, ya que además las subvenciones y exenciones fiscales se han hecho presentes para captar el interés de este tipo de fuentes energéticas.

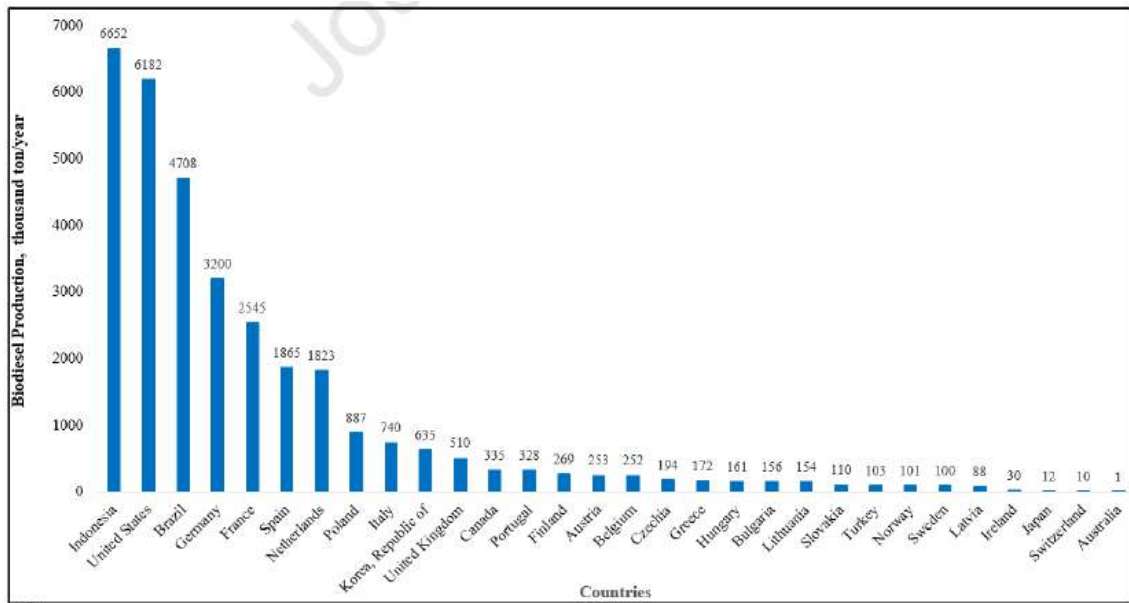


Figura 1-2. Producción mundial de biodiesel por país en 2018

Fuente: Mofijur et al., 2020, p. 5.

El compuesto éster de cadena larga (C14-C24) puede ser de primera, de segunda y de tercera generación. Al citar aquel biocombustible de primera generación, se está haciendo referencia a que el mismo proviene de los aceites vegetales comestibles, permitiendo que escaseen los productos dedicados a la alimentación y que los precios de estos aumenten a nivel mundial (Mofijur et al., 2020, p.5).

Es por ello que según bibliografía aparece el biocombustible de segunda generación que emplea aceites no comestibles para la producción y para ello se utilizan los cultivos, tierras fértiles que puedan dar origen a las fuentes no comestibles, quitando lugar una vez más al cultivo de alimentos, abriendo un gran debate, “alimentos vs combustible” (Mofijur et al., 2020, p.6).

Otras materias primas consideradas dentro de la producción de segunda generación son: la madera, la cascarilla y además los residuos de aceite comerciales o domésticos, que son procesados para aprovechar al máximo su composición, que por obvias razones, no puede ser destinado a fines alimenticios (Mofijur et al., 2020, pp.7-8).

En estudios realizados a la UE, con respecto a los residuos de aceite de cocina, se puede evidenciar las siguientes cifras, 700 000 a 1000 000 t/año. La gran disponibilidad de estos residuos es una gran razón para aprovechar, y generar biodiesel. Eso sin mencionar todas las consecuencias negativas, ya que cierto porcentaje se recolecta para su eliminación adecuada, pero la gran mayoría debe circular por la planta depuradora de aguas residuales que conlleva varios inconvenientes (Luque y Melero, 2012, pp.5-6).

El hecho de brindar a estos lípidos un valor agregado y ubicarlos como materia prima para la generación de biodiesel, colabora en la incrementación de la tasa de recuperación del ciclo de los residuos. Cosa similar ocurre con la grasa animal de bajo grado o desecho, ya que puede ser dedicada a la elaboración de biodiesel (Luque y Melero, 2012, pp.6-7).

Las microalgas son las protagonistas de la obtención de biodiesel de tercera generación, eliminando aquellas barreras, ya mencionadas que producen la primera y segunda generación de biodiesel. Las microalgas y algunos microorganismos oleaginosos tienen el potencial de generar un rendimiento entre 15 a 300 veces más, de lo que se podría resultar el rendimiento haciendo uso de un cultivo, tomando en cuenta el área de plantación (Mofijur et al., 2020, p.7).

Alternativas aún más novedosas han surgido para la obtención del bioenergético, entre ellas, se ha logrado extraer aceite entre 10 y 15% con un disolvente de los posos de café de desecho, además compuestos lipídicos también se han aprovechado al tratar los lodos de depuradoras municipales, ya que estos son abundantes, y su tratamiento ahorraría un tratamiento ambiental (Luque y Melero, 2012, p.75).

Al llevar a cabo el proceso industrial para obtener el biodiesel, el subproducto de la reacción también puede ser aprovechado en gran medida, ya que según algunos estudios, del peso total del volumen de producción, el 10% aproximadamente del peso en glicerol se puede recuperar para darle alguna utilidad y que este represente un beneficio económico a la industria, debido a que el glicerol mejora la combustión entre el diésel y el biodiesel (Mofijur et al., 2020, pp.9-10).

Al estar al tanto las plantas petrolíferas del contexto que el mercado del petróleo está viviendo alrededor del mundo, 350 de las plantas petrolíferas están considerando la posibilidad de crear fuentes renovables, biodiesel (Mofijur et al., 2020, p.9-10).

2.1.2. Procesos de producción de biodiesel

Existen varios métodos para obtener biodiesel, entre ellos el más simple, mezcla y dilución. Consiste en mezclar el aceite vegetal puro extraído con diésel, específicamente en proporciones de 20% y 80%, respectivamente, con el objetivo de disminuir la propiedad de la viscosidad en el aceite. En un estudio realizado con el aceite de jatrofa, se identificó que su viscosidad es muy alta y al añadir directamente la mezcla sugerida (aceite-diésel) al motor de encendido por compresión, puede generar varios inconvenientes, entre ellos: un alto depósito de carbón en la cabeza del pistón, formación de goma o atascamiento de la boquilla del inyector (Singh et al., 2021, p.4).

Craqueo Térmico, pirolisis, es el proceso mediante el cual, es posible obtener biodiesel tomando como base cualquier materia prima de la primera, segunda y tercera generación. Las condiciones necesarias son ausencia de aire y oxígeno, o en forma opcional un catalizador específico.

Con respecto al calor se maneja un intervalo de 400 a 600 °C. Resulta de la pirólisis, carbón, biodiesel y gases (Singh et al., 2021, p.9).

Los valores de las propiedades del biodiesel como producto obtenido, en comparación a los valores del diésel habitual son menores, en las siguientes propiedades como: el punto de fluidez, el punto de inflamación, y la viscosidad. Entre las propiedades del aceite pirolizado que arrojan valores que se encuentran dentro del margen óptimo están: el contenido de agua y sedimentos, contenido de azufre y el valor de corrosión del cobre (Singh et al., 2021, p.9).

Dentro de las desventajas que el autor menciona, es que el biodiesel posee altas cantidades de cenizas y de residuos de carbono, estos valores exceden el margen aceptable. Adicional el requerimiento térmico hace el proceso ineficiente, a esto se le suma que el porcentaje de oxígeno es bajo debido a la falta de oxígeno en el desarrollo (Singh et al., 2021, p.8).

La tecnología actual de obtención de biodiesel, resulta ser la transesterificación de los aceites vegetales no comestibles, conjuntamente con medios catalíticos básicos, entre ellos, hidróxidos de potasio, sodio y compuestos conocidos como alcoholatos. En dependencia de las cantidades existentes de FFA, se adopta la metodología más adecuada. Si la cantidad de ácidos grasos libres es mínima dentro de los aceites no procesados con anterioridad, simplemente estos se convierten en jabones y al final se los extrae con la fase de la glicerina (Luque y Melero, 2012, p.7).

Por otra parte si la cantidad de FFA es muy alta, se procede a la realización de una esterificación ácida y se continúa con la transesterificación alcalina, lo cual produce una conversión aproximada del 100%. Sin embargo el hecho de emplear catalizadores alcalinos homogéneos conlleva ciertos inconvenientes, el más importante, este tipo de catalizador no se puede reutilizar y se separa al final, en la fase del glicerol como jabón, como se mencionó anteriormente (Berrios et al., 2010, pp.474-476).

El producto secundario, glicerol, en algunos casos, se neutraliza con ácidos inorgánicos, formando sales de potasio y de sodio, la primera puede ser usada como fertilizante y esta última requiere ser eliminada de inmediato. Una vez separadas las fases del producto final, mediante ciertos lavados adicionales, se concluye que, si bien es cierto el biodiesel es un producto ecológico, pero el método llevado a cabo no lo es (Luque y Melero, 2012, p.32).

Otra de las dificultades visibles que presenta, es la gran sensibilidad de este tipo de catalizador hacia los FFA, que suscita la presencia de jabón en el producto final, lo que significa una dificultad en la purificación del glicerol y adicional la disminución del rendimiento de FAME. El agua en la materia prima también representa un grado de impureza, ya que el agua y el biodiesel por medio de la hidrólisis generan FFA (Berrios et al., 2010, p.475).

Tomando en cuenta las vías catalíticas de reacción, la producción de biodiesel a escala industrial se la realiza, de preferencia, a partir de catalizadores alcalinos, debido sus velocidades más rápidas de reacción, en relación a los catalizadores ácidos (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

Singh et al. concluye que de igual forma los catalizadores alcalinos heterogéneos son los más ideales en la síntesis de FAME, con respecto a los catalizadores alcalinos homogéneos (Singh et al., 2021, p.10).

De esta manera, para realizar una transesterificación óptima, es relevante mantener los límites de los parámetros, FFA (0,5%) y agua (0,06%) en peso de materia prima. Este proceso es sumamente delicado, ya que no solo estas variables deben controlarse, sino que además algunos otros parámetros como el tipo de alcohol empleado, las relaciones molares, tipos y concentraciones de catalizadores, velocidad de agitación, temperatura, duración de la reactividad, velocidad de mezcla, efecto del co-solvente orgánico, la gravedad específica y la purificación de los productos, pueden influir de gran manera en la reacción, haciendo que esta resulte ineficaz o simplemente que el rendimiento se vea afectado (Mofijur et al., 2020, pp.10-11).

Algunas desventajas más, halladas en bibliografía, es que la separación del glicerol debe ser muy prolija, de otra forma se desencadenarían la formación de gases peligrosos como: acetaldehído y formaldehído. Con obligatoriedad se requiere experiencia y también un equipo complejo para la obtención de biodiesel a partir de este método (Mofijur et al., 2020, pp.10-11).

El nitrato de potasio (KNO_3) sobre alúmina (Al_2O_3) es un catalizador alcalino heterogéneo, capaz de impulsar la reacción de obtención de biodiesel a partir del aceite jatrofa, el cual contiene un alto porcentaje de FFA (5,3%). El resultado fue un rendimiento del 87% en 6 horas, sin embargo en una segunda prueba la actividad del catalizador se ve afectada al disminuir en un 9%, a pesar del pre tratamiento dado al catalizador antes de reutilizarlo (calcinación: 500°C por 4 horas). En una tercera ocasión la velocidad de reacción ha disminuido en un 72% (Singh et al., 2021, p.12).

Lo mencionado anteriormente, significa que el catalizador puede ser utilizado por solo tres veces y que a pesar de que esta alternativa colaboraba con la reducción de los costos para la elaboración de biodiesel, ya que no era necesario invertir en la refinación de la materia prima, los requisitos de separación del producto y el tratamiento de las aguas residuales alcalinas. Se ve comprometido el porcentaje de conversión, al no arrojar valores confiables y comparables con los obtenidos al emplear los catalizadores homogéneos. Se requiere un estudio enfocado a la reutilización de catalizadores (Singh et al., 2021, pp.12-13).

Se ha mencionado con anterioridad que los altos valores de FFA representan una impureza, al igual que el agua dentro de la materia prima, de esta forma se refina los aceites por medio de la esterificación para poder someterlos a la reacción cotidiana, la transesterificación (Chai et al., 2014, pp.106-107).

Pero si dentro de la composición de los aceites vegetales el porcentaje de FFA es muy significativo, como es el caso del aceite karanja, el proceso de la esterificación pasa de ser un pre tratamiento, a un tratamiento principal como tal para la generación de biodiesel (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

Existen diversas técnicas para el procesamiento de la materia prima, entre ellas la esterificación, la destilación y la neutralización, la esterificación es la más eficiente y es la reacción en donde

cantidades equimolares de ácidos grasos libres y alcohol dan como resultado ésteres de alquilo conjuntamente con agua (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

En cierto estudio se ha llevado a cabo la conversión en dos etapas, el refinado del aceite por medio de la esterificación con un catalizador ácido y la segunda etapa la transesterificación por vías catalíticas básicas, esto es ampliamente utilizado en escala industrial y de laboratorio (Chai et al., 2014, p.108).

La esterificación catalizada por ácidos exige un mayor suministro de alcohol y de ácido, sin embargo el metanol es reciclado por el mismo proceso, esta es la tecnología que han adoptado ciertas industrias. Este tipo de práctica conlleva beneficios económicos frente al decapado caustico (Chai et al., 2014, pp.107-108).

Los estudios relacionados a la esterificación informan que, al igual que en la transesterificación, se puede utilizar catalizadores homogéneos, heterogéneos, tanto ácidos como básicos. Sin embargo se denotan ciertas desventajas al someter a los aceites a vías catalíticas ácidas homogéneas, como es la corrosión de los equipos, dificultades en la purificación del producto y la recuperación de los catalizadores, a esto se le añade el alto requerimiento de temperatura y presión en su operación. Acontece también la generación innecesaria de aguas residuales por los lavados al compuesto de interés y la pérdida del mismo (Lou et al., 2012, p.1-2).

Para solventar estos problemas aparecen los catalizadores ácidos heterogéneos, entre ellos están: el fosfato de niobio, resinas orgánicas sulfónicas etc. El inconveniente está en que el rendimiento obtenido disminuye progresivamente a manera que se sigue reutilizando el compuesto. En la esterificación catalizada por la zirconia sulfatada al aceite karanja, arrojó en la primera experimentación, el rendimiento de 38%, en la segunda ocasión el valor disminuyó a un 16% (Hussain y Kumar, 2018, p.630).

De igual manera las condiciones supercríticas no catalíticas han sido indagadas para dar una solución a las limitaciones expuestas por el uso de catalizadores, y es que el resultado ha sido bastante favorable, el rendimiento alcanzado ha sido próximo al 97% en un corto periodo de tiempo. La parte negativa es la parte económica, ya que los costos operativos y de capital resultan excesivos, además en estas condiciones el producto tiende a degradarse térmicamente (Hussain y Kumar, 2018, p.630).

Aprovechando las ventajas que representa el metanol supercrítico (temperatura crítica de 239°C y presión crítica de 8,09 MPa) se han realizado experimentaciones, en las cuales debido al alto producto iónico del metanol en condiciones supercríticas no se necesita catalizador alguno, la transesterificación ocurre a partir de los triglicéridos del aceite y los FFA se esterifican simultáneamente, pero los parámetros resultaron drásticos, 350°C y 20-50 MPa, para evitar la solvatación del metanol presente, esto genera un aumento de gastos operativos (Minami y Saka, 2006, p.2479).

Según investigaciones, la mitigación de los problemas ya citados se ha logrado con la práctica de la esterificación no catalítica en condiciones subcríticas. El aceite de colza fue la base del experimento en el que se logró un 94% de rendimiento, con una relación de aceite de colza y metanol 1:0.9 (v/v), a 270° C y 200 bar. Por otro lado el biodiesel se obtuvo con un porcentaje del 95%, con una relación aceite de jatropha a metanol 1:4 (p/v), a una temperatura de 190°C y 27.1 bar (Hussain y Kumar, 2018, pp.629- 630).

Por lo analizado se puede obtener biodiesel en un buen porcentaje usando la metodología de la esterificación no catalítica en condiciones subcríticas, también se evidencia que lo que afecta a la reacción de transesterificación, en este caso las impurezas, el agua y la cantidad de ácidos, favorecen al proceso de esterificación, hasta el punto de mejorar su eficacia.

2.1.3. Red Neuronal Artificial (RNA)

2.1.3.1. Redes neuronales enfocadas en procesos de obtención de biodiesel

Las redes neuronales artificiales han ayudado de gran forma al avance tecnológico, ya que a partir de datos de entrada se alimenta a este sistema para que el mismo aprenda y sea capaz de modelar el funcionamiento de un proceso no lineal, sin necesidad de estar al tanto de la información detallada del mismo. Encuentra las respuestas de manera eficaz al mapear la relación de los valores de entrada, dotándolo con un ejemplo base.

Es una herramienta que ha vuelto eficaz a muchas técnicas aplicadas en distintos campos, ahorrando tiempo y dinero a las industrias. En el campo de la producción del biodiesel, también las RNA han cumplido un papel predominante, tanto así que en la actualidad se verifica la calidad de este material combustible analizando la composición química del biodiesel. Se sabe que el contenido de los ésteres metílicos de ácidos grasos es muy variado, al depender de la materia prima de la cual es fabricado y de las impurezas adheridas a esta (Jahirul et al., 2020, p.1).

La viscosidad cinemática es una propiedad predicha que pone en manifiesto el estado de la pulverización que tendrá el combustible, la relación aire combustible y la eficiencia de la combustión. El indicador principal de esta propiedad es la longitud de la cadena de carbonos de FAME, al aumentar la cadena de carbonos, en forma directamente proporcional aumentará la viscosidad cinemática (Jahirul et al., 2020, p.1-3).

En otro de los estudios se ha implementado el uso de la RNA, para describir el modelado no lineal en la producción de biodiesel, tomando como punto de partida el sebo de cerdo. Las variables de entrada fueron, en primer lugar el tiempo de ultrasonificación, el cual es un proceso que logró mejorar la emulsificación del aceite en el metanol y de los nanocatalizadores de CuO dentro de la mezcla de ácidos grasos. Esto facilitó la transferencia de masa, acelerando así la velocidad de reacción de la esterificación (Suresh et al., 2020, pp.2-6).

Las variables independientes restantes de entrada fueron la carga adicionada de CuO y la relación molar de metanol-aceite. La variable dependiente fue el rendimiento del biodiesel. Los pares de datos ingresados al sistema fueron divididos para el adecuado funcionamiento de la red, un 70% de la base se empleó para entrenar a la red, un 20% se destinó para la validación y un 10% para las evaluaciones efectuadas, cabe recalcar que fue posible construir la red neuronal a partir de la herramienta Neural Network Toolbox de MATLAB, con el algoritmo Levenberg-Marquardt (Suresh et al., 2020, pp.2-6).

Se analizó la efectividad de la RNA a partir de ciertos parámetros, la raíz del error cuadrático medio y el coeficiente de correlación. Se comprueba la validez, al tener un RMSE más bajo y de forma contraria con el r^2 . Los valores de RMSE para el entrenamiento, validación y prueba de la RNA resultaron ser, 0.0108, 1.7831 y 0.7435, respectivamente. Los valores del r^2 para el entrenamiento, validación, pruebas y el rendimiento general de la RNA fueron, 1.0, 0.9774, 0.9508 y 0.9978 respectivamente (Suresh et al., pp.9-13).

Los parámetros optimizados obtenidos a raíz de la puesta en marcha de la RNA, para obtener el mayor rendimiento de biodiesel (97,82%), fueron de 35 a 36 minutos en la etapa de ultrasonificación, la carga del catalizador fue de 2,07% en peso y la relación molar metanol-aceite resultó ser, 29.87:1 (Suresh et al., pp.19-23).

Con estos resultados se comprueba que la construcción de la RNA fue el método más viable, ya que es un mecanismo adecuado para la predicción cuando se carece de un diseño experimental y las soluciones son obtenidas de una misma simulación, ahorrando tiempo y esfuerzos en lo que respecta a los tediosos cálculos extras.

El siguiente artículo científico ha compilado toda la información necesaria para la optimización de los parámetros de proceso de producción de biodiesel en base a la composición lipídica de las algas. La producción fue modelada utilizando MATLAB y para el entrenamiento, el algoritmo LM. Así se da lugar al procesamiento de las RNA que brindaron una excelente previsibilidad en comparación a la metodología conocida como superficie de respuesta (RSM). El r^2 es el indicador de estos resultados, ya que para las RNA el valor es de 0.999 y para RSM, 0.965 (Garg y Jain, 2020, pp.2-3).

El estudio se desarrolló mediante datos experimentales, comparando los mismos con los predichos, en donde el 88% de los datos se predicen con un error $< 1\%$, con la tecnología RNA. Los parámetros de inicio fueron, el porcentaje de metanol-aceite (v/v), la concentración del catalizador y el tiempo de reacción, manteniendo la temperatura de 50°C estable. Todas estas variables se han establecido como aquellas que poseen alta sensibilidad hacia la variable de salida, el rendimiento del biodiesel (Garg y Jain, 2020, p.6).

Las redes neuronales artificiales RNA también han colaborado con el estudio del rendimiento de biodiesel, en donde se destina el aceite neem, jatrofa y aceites usados de cocina, agregando a esto

la comprobación de la eficiencia de un catalizador reciclado magnéticamente a base de la cáscara de huevo de gallina, el cual es capaz de evitar la saponificación no deseada.

El entrenamiento de la RNA fue posible gracias a los valores del rendimiento experimental y los valores predichos empleando la técnica de diseño del compuesto central. El software usado fue MATLAB R2017a, conjuntamente con la herramienta inmersa en el programa, el algoritmo LM (Oladipo et al., 2018, pp.1-3).

La cantidad de catalizador, la relación molar metanol-aceite, el tiempo de reacción y la temperatura de la reacción son las variables de entrada designadas y es necesario aclarar que se optó por la normalización de datos para disminuir la cantidad de errores y lograr obtener resultados homogéneos al igual que las entradas. Los valores de los términos estadísticos que confieren a la RNA un alto grado de confiabilidad en sus predicciones son, el error cuadrático medio mínimo (0.00256) y el r^2 (0,996) (Oladipo et al., 2018, pp.4-9).

Como resultado a la efectividad de la RNA, se obtuvo un 97% de biodiesel, partiendo del aceite neem en condiciones óptimas, que se detallan a continuación: el peso del catalizador 6%, la relación molar metanol-aceite 15:1, la temperatura de la reacción 65°C, en un tiempo de reacción de 2 horas. Concluyendo que el catalizador sintetizado puede ser aprovechado hasta cinco veces y su recuperación es más del 75% después de haberlo reciclado cinco ocasiones (Oladipo et al., 2018, pp.9-12).

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. DWSIM

Estar familiarizados con programas computacionales como los simuladores (Aspen Plus, Aspen HYSYS, UniSim, CHEMCAD, DWSIM) que son capaces de modelar la situación realista que desencadena una planta a nivel industrial, le da una ventaja a los profesionales en la actualidad, ya que se puede plantear una secuencia de cambios físicos y químicos sin la necesidad de invertir grandes cantidades de dinero, en entrenamiento, configuración u optimización de los mismos (Santos y Van Gerven, 2020, p.2053).

El problema es que no se puede aprovechar los beneficios de estas herramientas sino se posee un previo conocimiento, hay que acotar que estos programas tienen un nivel de complejidad en el diseño, y su uso resulta difícil al tener que codificar los elementos, modelos de cada situación y adecuarlos a otras experimentaciones, ya que son muy específicos, se requiere tiempo y muchos de los software no tienen una licencia libre (Santos y Van Gerven, 2020, pp.2053-2055).

A todo esto la solución más viable es el utilizar el simulador de procesos químicos DWSIM, el cual es un software libre, de código abierto, que le permite al ingeniero químico inspeccionar con plena libertad los cálculos o modelos asignados para la ejecución del diagrama de flujo. En la

actualidad está dotado de muchas de las características observables solo en programas comerciales (Medeiros, 2021, párr.1).

Este simulador que es compatible con CAPE- OPEN, según su creador, Medeiros (2021, párr.4), posee también una interfaz gráfica muy fácil de usar y que logra, no solo simular en estado estable, sino en estado dinámico. Abarca, dentro de sus aplicaciones, un sinnúmero de operaciones unitarias, para no solo plantear una secuencia productiva, sino que también, por este medio, se logre analizar cada variable mediante la opción análisis de sensibilidad, que brinda un conocimiento profundo del comportamiento del mismo, hasta el punto de alcanzar su estado óptimo.

A continuación una compilación de las características que ofrece el simulador DWSIM:

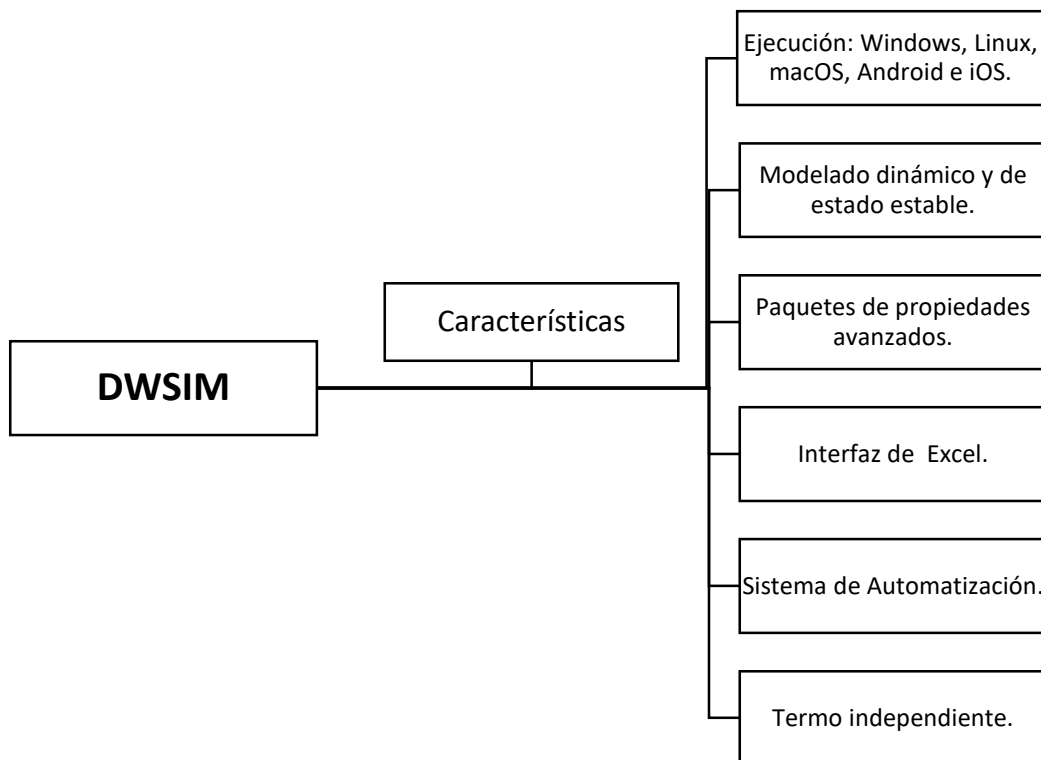


Gráfico 1-2. Características de DWSIM

Fuente: Medeiros, 2021, párr.1.

Otra de las ventajas, es que su creador está al tanto de los errores que se puedan suscitar en el empleo de la herramienta, además de las mejoras que se pueden implementar para brindar un mejor servicio a los usuarios, de esta forma aparecen varias actualizaciones continuamente, sin restringir el uso de DWSIM, ya que su acceso sigue siendo libre en cualquiera de las actualizaciones (Medeiros, 2021, párr.2).

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

3.1. Etapas de la metodología

Para poder llevar a cabo el trabajo de titulación de manera satisfactoria, en base a toda la recopilación bibliográfica minuciosa realizada, se esquematizará los pasos necesarios para cumplir con los objetivos planteados.



Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de Titulación

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

El trabajo de integración curricular, correspondiente a la obtención de biodiesel a partir del proceso de esterificación no catalítica de ácidos grasos libres que componen el aceite de karanja, resulta ser una propuesta tecnológica, al requerir la ejecución de una simulación en DWSIM del desarrollo de las etapas. Una vez validados los resultados de la simulación, se realiza un análisis de sensibilidad, para determinar las entradas y salidas que posibilitarán la construcción de una base de datos numéricos. Seguidamente se realiza el diseño de la RNA, ingresando la base de datos establecida, necesaria para el entrenamiento y validación de la misma.

Adicionalmente, el análisis estadístico llevado a cabo, brindará la certeza de un adecuado funcionamiento de la RNA, ya que se comparará los errores existentes y el grado de confiabilidad entre los resultados obtenidos en la simulación y los arrojados por la red.

Toda la información requerida para el desarrollo del escrito y de las fases necesarias para la cabalidad de esta propuesta, fue obtenida a partir de distintas fuentes:

Fuente Primaria:

El desenvolvimiento y la experiencia adquirida en programas como Excel, MATLAB, y demás simulaciones realizadas en DWSIM, a lo largo de los semestres cursados en la carrera de Ingeniería Química, fueron el medio principal para la puesta en marcha del proyecto.

Fuente Secundaria:

-Artículos científicos de revistas de alto impacto, situadas en los cuartiles más altos, Q1 y Q2, estas revistas se encontraron indexadas en las diversas bases suscritas de la biblioteca virtual de la ESPOCH, entre ellas Science Direct, Taylor & Francis, ASME.

-Libros digitales hallados en la biblioteca virtual de la ESPOCH.

-Sitios web oficiales de los softwares empleados en el proyecto.

3.2. Determinación de los parámetros de funcionamiento:

Cada uno de los parámetros establecidos para el cumplimiento de la simulación en DWSIM, fueron tomados a partir del artículo titulado: *Esterification of free fatty acids: experiments, kinetic modeling, simulation & optimization*, propuesto por los autores, Zakir Hussain & Rakesh Kumar (2018) del Departamento de Ingeniería Química, Instituto Rajiv Gandhi de Tecnología del Petróleo, Jais, Amethi, India.

3.2.1. Generalidades del proceso

Se emplea principalmente aceite de karanja, el cual no representa un aceite comestible, es un aceite oleaginoso obtenido de las semillas del árbol *Millettia Pinnata*, para la generación de biocombustibles de segunda generación, este aceite es rico en FFA, pero en específico posee un alto contenido en ácido oleico (66,80 % p/p), por esta razón y para evitar la complejidad que conlleva la creación de nuevos compuestos en DWSIM, se ha fijado enteramente como ácido oleico la composición de FFA (Hussain y Kumar, 2018, p.637).

La corriente de aceite alimentado también posee ciertas trazas de triglicéridos, TG. Se supone que para este caso, todos los triglicéridos son homogéneos, lo que quiere decir es que cada compuesto tiene un solo tipo de radical de ácido graso, por la naturaleza del aceite karanja, los TG fueron creados en el programa DWSIM.

Tabla 1-3. Condiciones iniciales operativas de las corrientes de entrada.

Parámetro	Karanja Oil	E-108	Make-up
T (°C)	25	64,54	25
P (bar)	1	1	1
Flujo másico (kg/h)	1050	4976,96	90,11
Flujo molar (kmol/h)	2.02	155,33	2,81
Composición molar:			
OOO	0,217	0	0
O	0,607	0	0
Methanol	0	0,99	1
Water	0	1,13E-04	0
M-O	0	0	0
PPP	0,028	0	0
SSS	0,017	0	0
LLL	0,108	0	0
AAA	0,020	0	0

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, p. 637.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

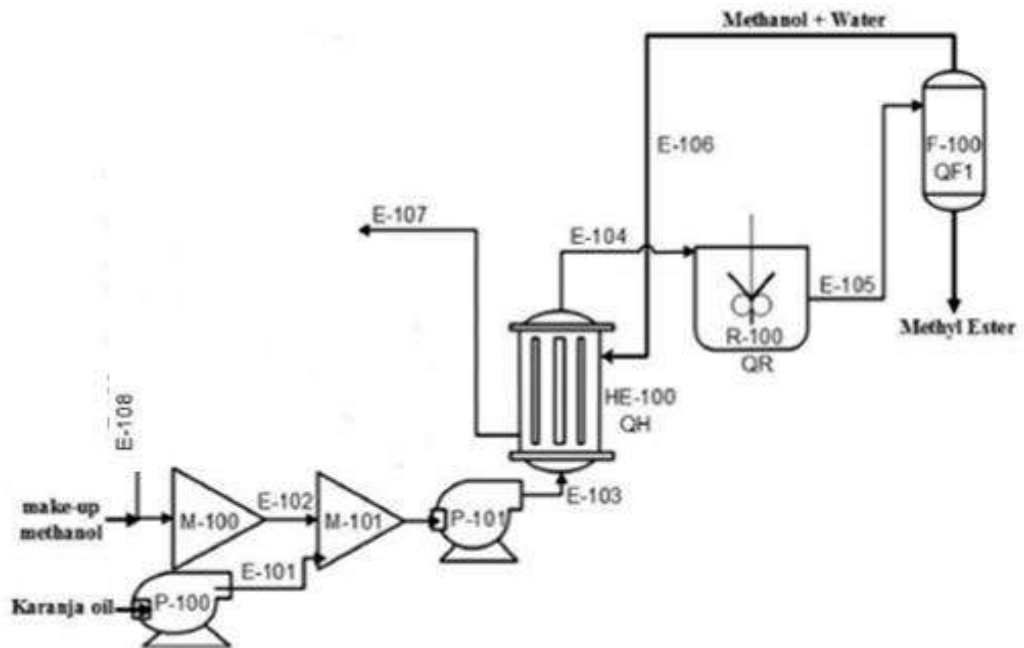


Figura 1-3. Diagrama de flujo del proceso de esterificación

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, p. 637.

La recuperación ideal de las fracciones molares de M-O y OOO, en la corriente ME, es de 0,481 y 0,179, respectivamente. El fin es maximizar todos los componentes de esta corriente, exceptuando a las fracciones molares metanol y agua. Mientras que en la corriente E-106 el

contenido óptimo de sus fracciones molares de metanol y agua, es de 0,99 y 7,85E-03, respectivamente, todo esto se logra con un porcentaje de conversión del ácido oleico de 99,85. Las dos corrientes son separadas a razón de una columna flash. Consecuentemente la corriente E-106 en el proceso citado pasa a una etapa de purificación para que el solvente pueda recircular al ciclo, todo esto mediante una columna de destilación, sin embargo esta fase de recuperación se omite en la simulación ejecutada en DWSIM y la columna flash es reemplazada por el separador que incluye el reactor de conversión o de isomerización.

3.2.2. Secuencia del proceso estudiado

La simulación del ciclo correspondiente a la esterificación no catalítica de FFA, se realizó empleando el software ASPEN PLUS y para ello todos los parámetros requeridos fueron obtenidos del estudio experimental realizado con anticipación. El paquete termodinámico para la estimación de propiedades fue NRTL, el cual se basa en coeficientes de actividad.

La secuencia expuesta se puede observar a detalle en la Figura 1-3. La corriente Karanja Oil, está compuesta por la fracción molar de ácido oleico (0,607) y el contenido restante está dado por ciertos triglicéridos que componen el aceite. Se bombea esta materia prima utilizando una bomba (P-100), la corriente resultante (E-101), entra a un mezclador de alimentación (M-101). (Hussain y Kumar, 2018, p.636).

El equipo (M-100), por otro lado recibe una corriente (E-108), dada por una solución de metanol y agua con fracciones molares de 0,99 y 1,13E-04, respectivamente. Un caudal másico de 90.11 kg/h, (Make-up), con una pureza del 100% de metanol, ingresa también al primer mezclador (M-100). La corriente de salida (E-102), entra al segundo mezclador (M-101) y la salida se bombea a la segunda bomba de alimentación mixta (P-101), la corriente resultante (E-103) se traslada a un intercambiador de calor (HE-100) en el lado del tubo.

El deber del intercambiador de calor fue de 26 kW. Esto con el objetivo de permitir un aprovechamiento energético en el proceso y calentar la corriente (E-104), cabe recalcar que en la corriente no existe una fracción de vapor (Hussain y Kumar, 2018, pp.636-639).

Seguidamente la corriente caliente entra al tanque de agitación continua (R-100). Los parámetros cinéticos son imprescindibles para la elaboración de la simulación y estos fueron obtenidos a partir de experimentos llevados a cabo.

Como especificación principal está la conversión del ácido oleico del 99.85%, mismo compuesto representa al reactivo limitante de la reacción. Una vez completada la reacción, el reactor separa el vapor (E-106) por la parte superior y el líquido (Methyl Ester) por la parte inferior del equipo a la condiciones pre establecidas (Hussain y Kumar, 2018, pp.636-639).

Como vapor se obtuvieron las siguientes fracciones molares, metanol: 0.99, agua: 7.85E-3 y por el fondo las fracciones molares de oleato de metilo, el producto deseado: 0.481, metanol: 0,17, OOO: 0.179 y por último LLL: 0.103. Estos valores corresponden a los datos resultantes más significativos. Por último la línea de materia (E-106) pasa por el intercambiador de calor (IC) para ceder calor hacia los reactivos (E-103).

3.2.2.1. Parámetros de funcionamiento de intercambiador de calor

Tabla 2-3. Condiciones operativas del intercambiador de calor

Parámetro	Cantidad	Unidad
Temperatura de E-103	59,72	°C
Temperatura de E-104	64,52	°C
Temperatura de E-106	220	°C
Temperatura de E-107	210,5	°C
Servicio térmico del HE-100	26	kW
Tipo de HE-100	Contracorriente	

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, p. 637-639.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 3-3. Condiciones operativas del reactor.

Parámetro	Cantidad	Unidad
Temperatura de salida E-105	220	°C
Presión de salida E-105	10	Bar
Porcentaje de Conversión	99,85	%
Volumen de R-100	4547,52	m ³
Alimentación de metanol a R-100	6300	l/h
Relación aceite/ metanol	1:6	(p/v)
Trabajo del R-100	2038	kW
Tipo de R-100	Reactor de agitación continua.	

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, p. 637-639.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 4-3. Parámetros cinéticos del reactor

<div style="display: inline-block; transform: rotate(-45deg);">Tipo de Reacción</div> Parámetro	Reacción de Avance	Reacción Inversa
Constante de Velocidad (k)	86249,54 min ⁻¹	0.039 (g) / (mg KOH min)
Energía de Activación (ΔE)	48,534 kJ/mol	18.744 kJ /mol

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, p. 636-639.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.3. Simulación en DWSIM

Para lograr una simulación del proceso de esterificación no catalítica de ácidos grasos libres que componen el aceite karanja, en la multiplataforma de procesos químicos DWSIM, se estableció como base la información del artículo científico, que se encuentra resumida en las Tablas 1-3, 2-3, 3-3 y 4-3.

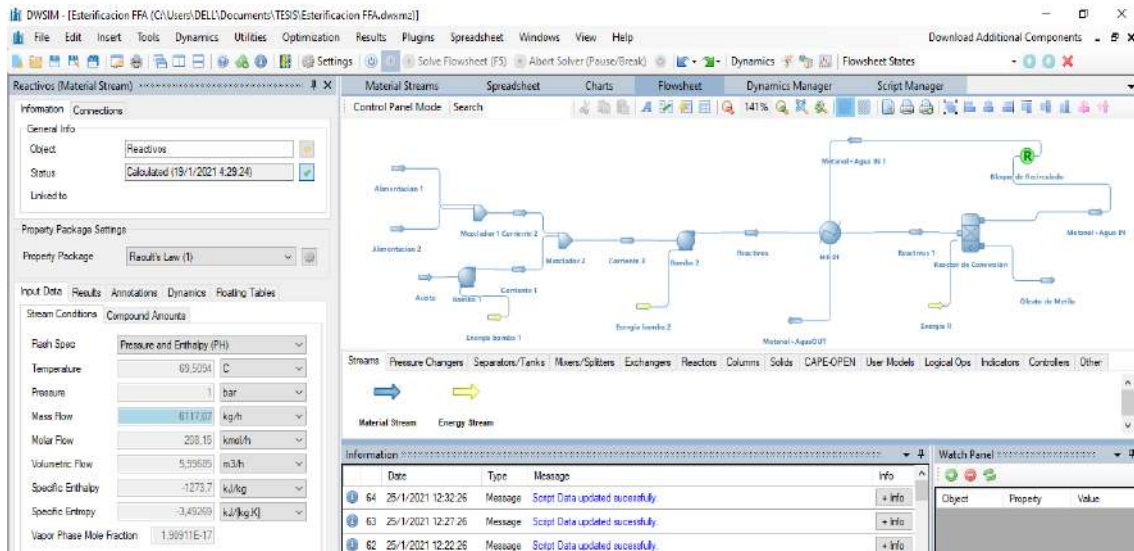


Figura 2-3. Flowsheet de la simulación realizada en DWSIM

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Después de realizar el bosquejo correspondiente de las etapas requeridas para la obtención de biodiesel, el autor de esta propuesta tecnológica, realizó una serie de pruebas para hallar el paquete de propiedades termodinámicas más adecuado y que se adapte de mejor manera a las condiciones del sistema. La Ley de Raoult facilitó la obtención de resultados con el menor error porcentual, comparando los valores de la simulación con los resultados del artículo científico.

A continuación en la Tabla 5-3, se establecen los parámetros de entrada al programa, para llevar a cabo la simulación.

Tabla 5-3. Parámetros operativos ingresados para la simulación en DWSIM

PARÁMETROS	Alimentación 1	Alimentación 2	Aceite	Metanol + Agua 2	IC	Reactor
Presión (bar)	1	1	1	10	-	-
Temperatura (°C)	64,54	25	25	220	-	-
Flujo molar (Kmol/s)	155,33	2,81	2,02	158,03	-	-
Flujo másico (Kmol/s)	4976,96	90,11	1050	5146,63	-	-
Composición molar					-	-
Triolein(OOO)	-	-	0,217	3,53E-04	-	-
Ácido Oleico	-	-	0,607	0	-	-
Methanol	0,99	1	-	0,99	-	-
Water	1,13E-4	-	-	7,85E-03	-	-
MethylOleate	-	-	-	1,26E-03	-	-
Triachidin	-	-	0,020	-	-	-
Tristearine	-	-	0,017	-	-	-
Trilinolein	-	-	0,108	-	-	-
Tripalmitin(PPP)	-	-	0,028	-	-	-
Área de intercambio de calor (m ²)	-	-	-	-	1	-
Calor intercambiado (kW)	-	-	-	-	26	-
Temperatura de salida (°C)	-	-	-	-	-	220
Caída de Presión (bar)	-	-	-	-	-	-13
Trabajo (kW)	-	-	-	-	-	2090,24
% Conversión de Ácido Oleico	-	-	-	-	-	99,85

Nota: Los espacios con guion, demuestran valores que han sido obtenidos gracias a la ejecución del programa, o simplemente no corresponden a ese apartado.

Fuente: Hussain y Kumar, 2018, pp.637-639.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Cabe recalcar que el tanque de agitación continua (CSTR), no alcanzó los resultados deseados, es por esta razón que se optó por reemplazarlo por el tanque de conversión o isomerización, ya que el mismo requiere como dato de ingreso más relevante, el porcentaje de conversión del compuesto base, es decir 99,85% de ácido oleico. Por otra parte la caída de presión del reactor implementado, tuvo que someterse a una serie de ensayos para hallar el valor adecuado, así que el valor que se especificó en las referencias (-10), se modificó a (-13) para asegurar la validez de los resultados

The screenshot shows the DWSIM software interface. The main window is titled 'CompCreator' and displays a table of UNIFAC groups. The table has the following columns: ID, Main Group, Subgroup, Amount, and Ejemplo. The 'Amount' column for ID 44 (COOH) is highlighted in blue and set to 1. A 'Pure Compound Properties' dialog box is open on the right, showing various physical and chemical properties for 'Acido Oleico'.

ID	Main Group	Subgroup	Amount	Ejemplo
ID 38	Pyridine	C5H5N	0	
ID 39	Pyridine	C5H4N	0	
ID 40	Pyridine	C5H3N	0	
ID 41	CCN	CH3CN	0	
ID 42	CCN	CH2CN	0	
ID 43	COOH	COOH	1	
ID 44	COOH	HCDOH	0	
ID 45	CO	CH2O	0	
ID 46	CO	CHO	0	
ID 47	CO	CO	0	

The 'Pure Compound Properties' dialog box shows the following properties for 'Acido Oleico':

Property	Value	Unit
Database	User	
Component Type	Normal	
ID	30264	
CAS Number	112-80-1	
Molecular Weight	282,47	kg/kmol
Critical Temperature	943,11	K
Critical Pressure	1,27097E+06	Pa
Critical Volume	0	m ³ /kmol
Critical Compressibility	0,17	
Acentric Factor	1,05	
Ideal Gas Enthalpy of Formation at 25 °C	-2293,71	kJ/kg
Ideal Gas Gibbs Energy of Formation at 25 °C	-577,09	kJ/kg
Normal Boiling Point	761,11	K
Temperature of Fusion	448,14	K
Enthalpy of Fusion @ TF	52,72	kJ/mol

Figura 3-3. Panel de creación de nuevos compuestos en DWSIM

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

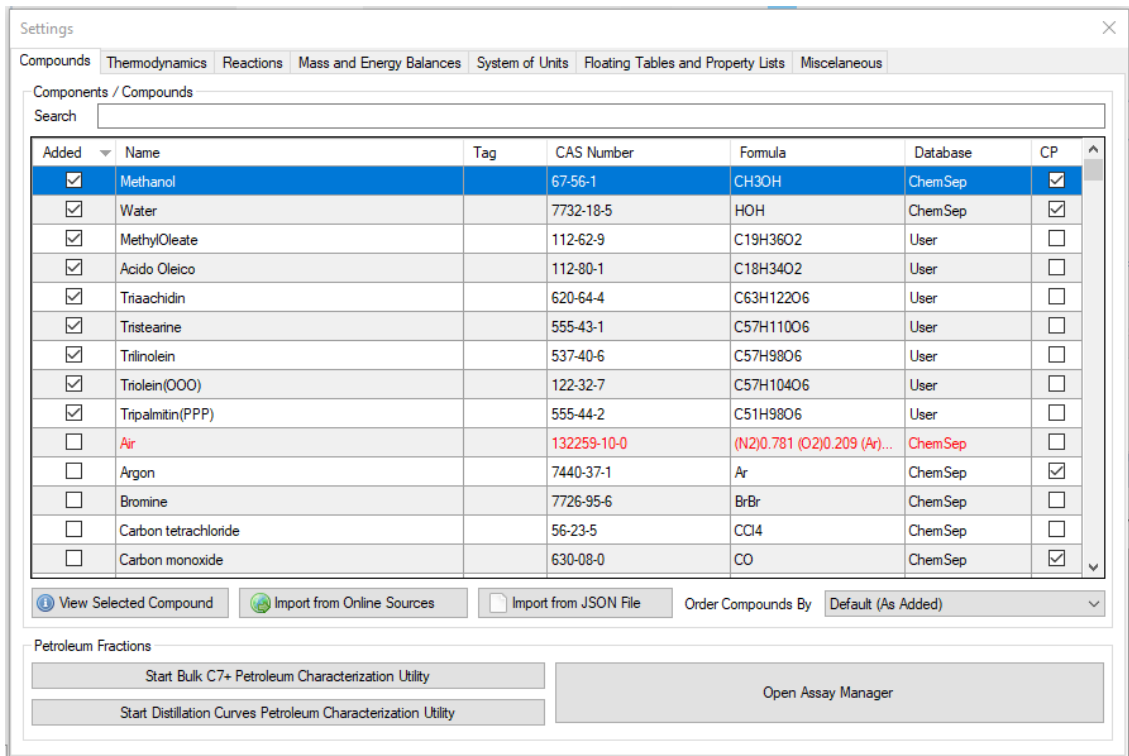


Figura 4-3. Panel de selección de compuestos

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

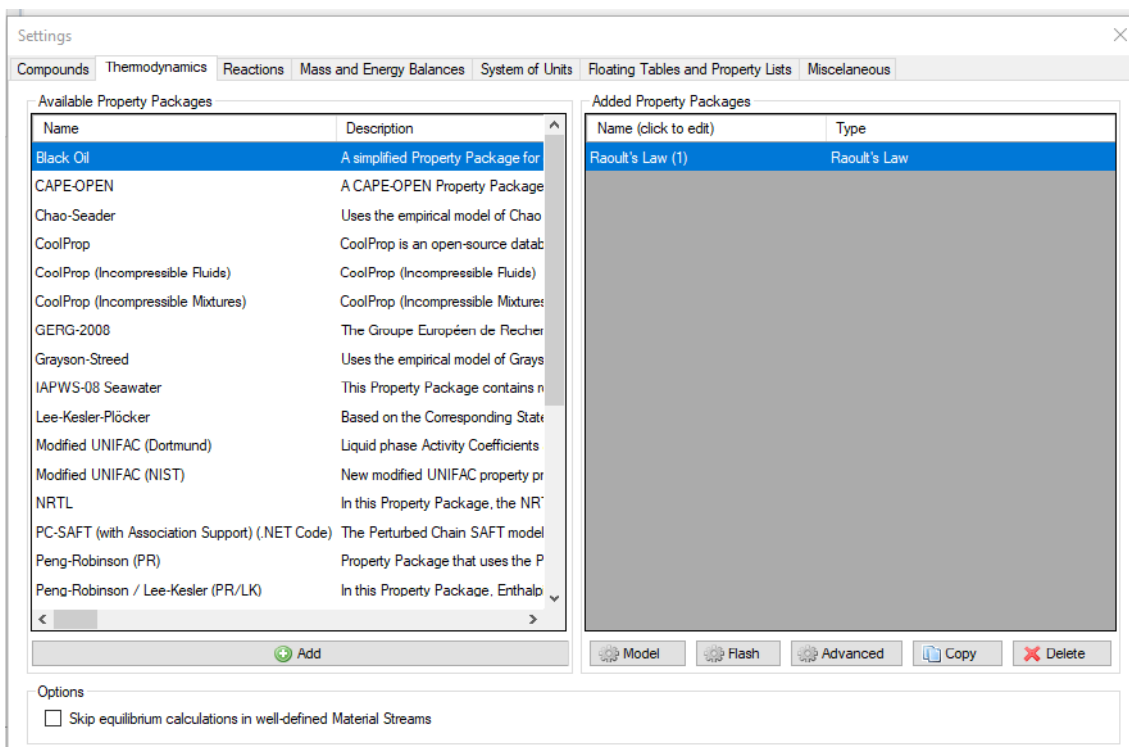


Figura 5-3. Elección del paquete termodinámico

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

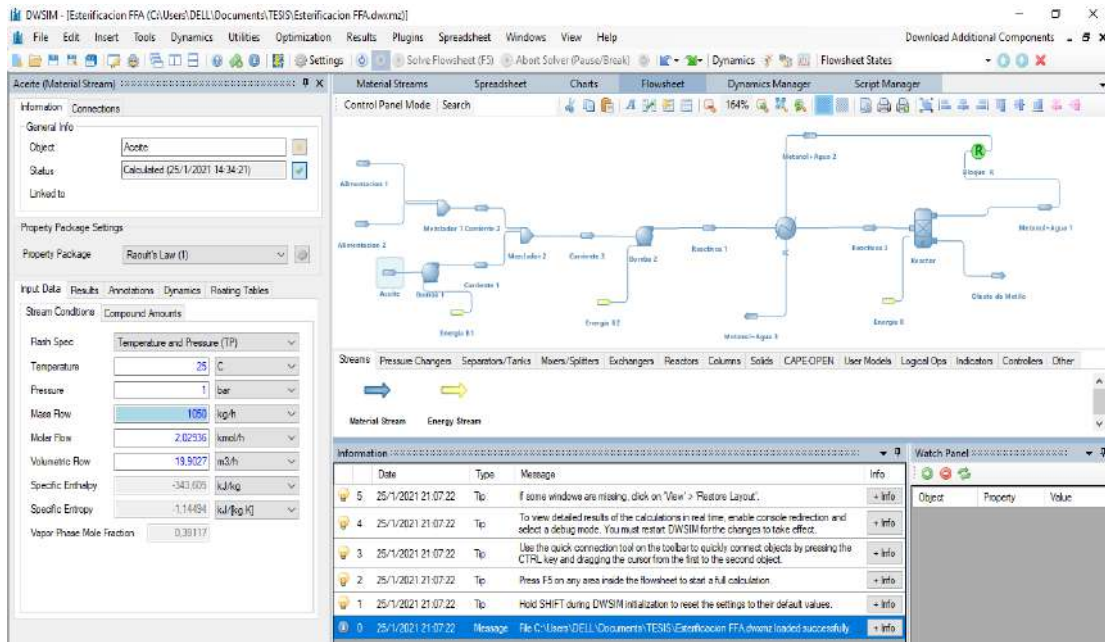


Figura 6-3. Ingreso de los parámetros de entrada para los flujos de alimentación

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

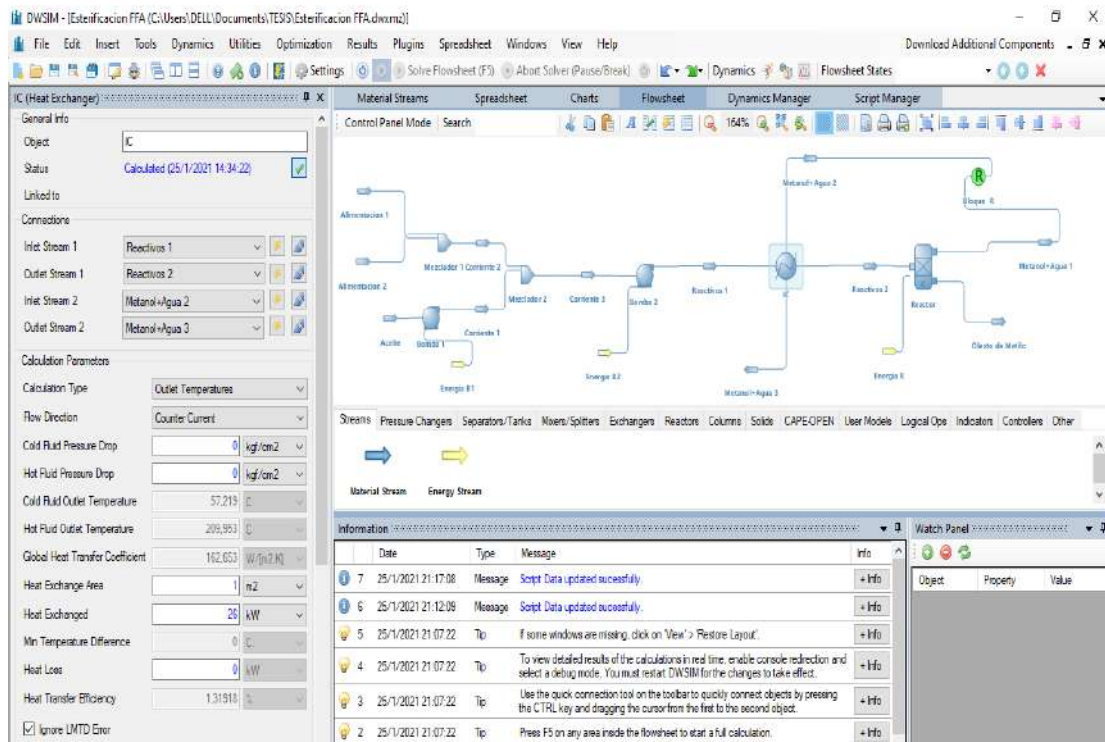


Figura 7-3. Especificación de los datos requeridos en el equipo IC

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

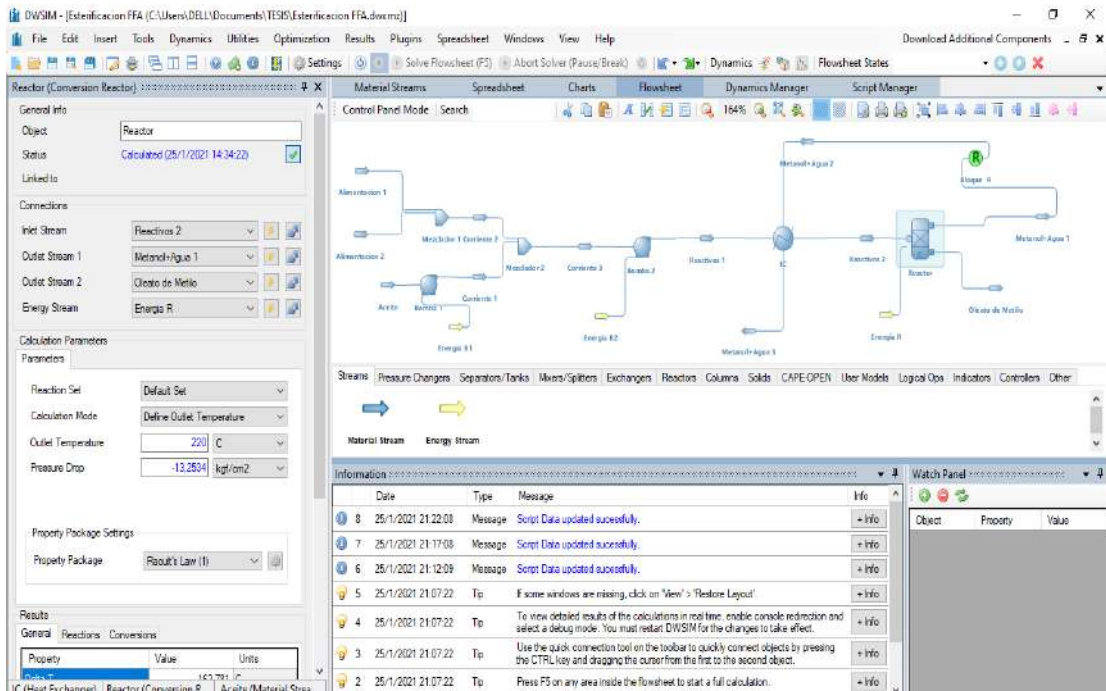


Figura 8-3. Configuración de los parámetros para el equipo Reactor

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

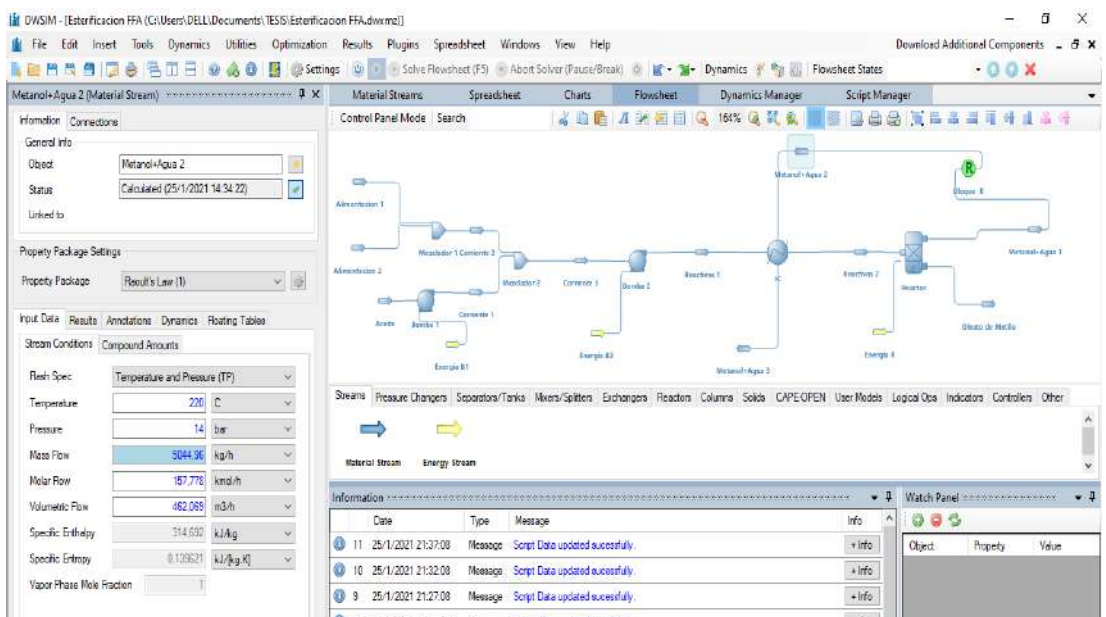


Figura 9-3. Especificación de los requisitos del fluido que ingresa al equipo IC

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

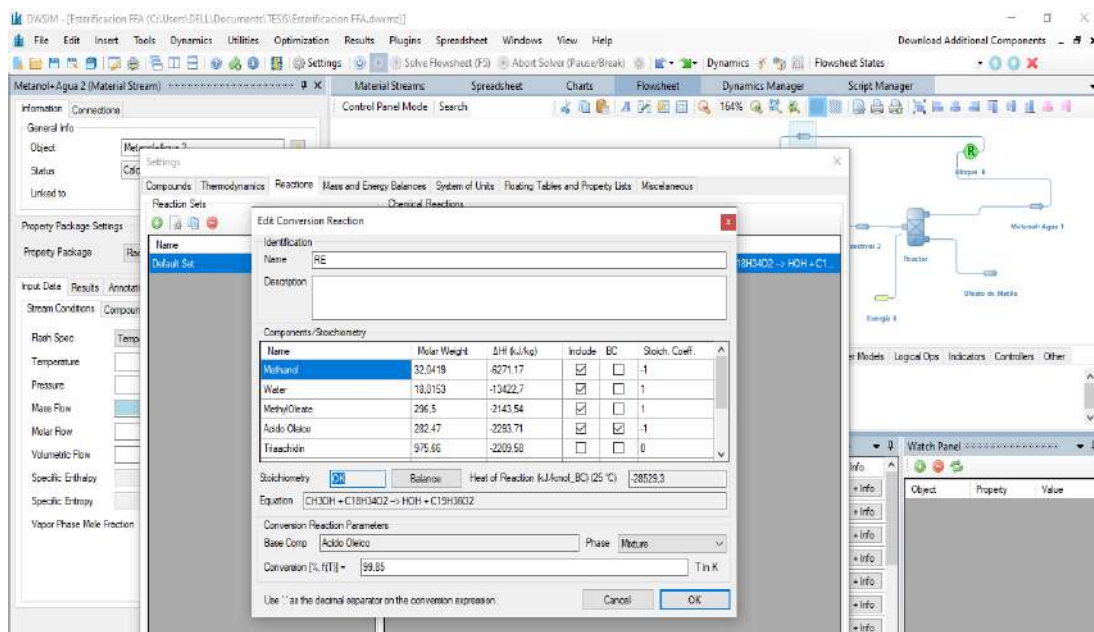


Figura 10-3. Configuración de la reacción de conversión

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.4. Validación de los resultados de la simulación

Una vez ejecutada la simulación en DWSIM, la única manera de determinar la validez de la misma es comparando los valores arrojados por el software, tanto flujo molares, másicos, fracciones molares, temperaturas, presiones y los servicios energéticos de cada equipo, a partir de los datos publicados en el respectivo artículo científico. Para esto DWSIM, posee una herramienta que facilita la exposición de los resultados, mediante una tabla de propiedades como se observa en la Figura 11-3, después de este paso, se calcula el error porcentual para de una manera cuantitativa verificar la fiabilidad del proceso (*Véase las Tablas 6-4 y 7-4 en el apartado de resultados*).

En las tablas de resultados realizadas en DWSIM, se detallan fracciones molares, temperaturas y flujos másicos de las corrientes de interés. En la Figura 12-3 se puede visualizar las tablas de resultados bosquejadas en el diagrama de flujo del programa.

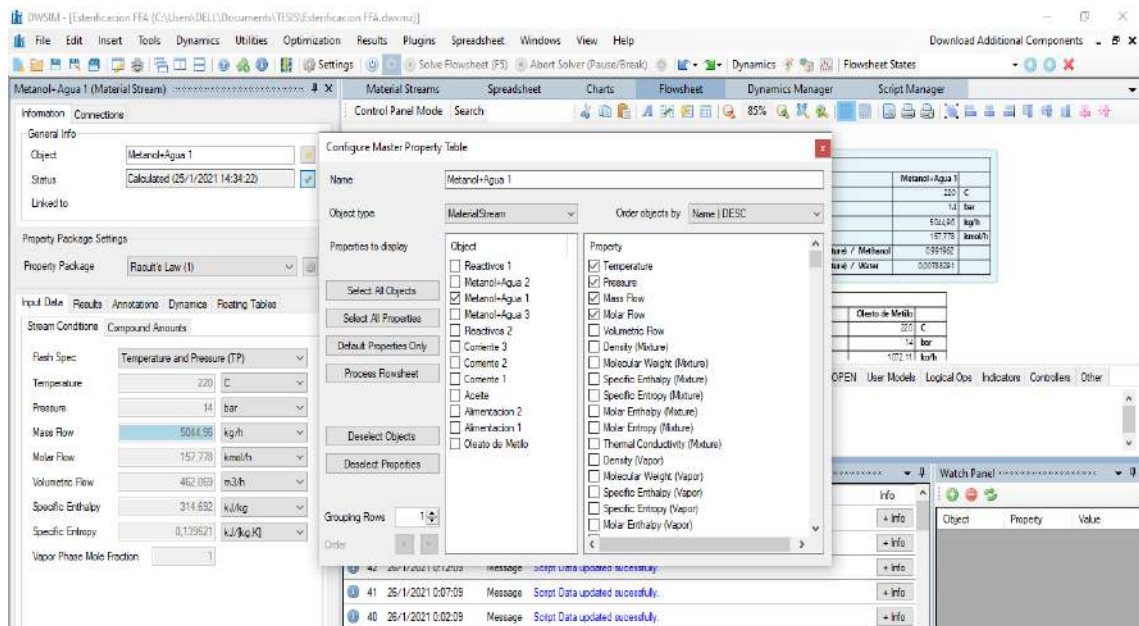


Figura 11-3. Panel de configuración de la tabla de propiedades resultantes

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

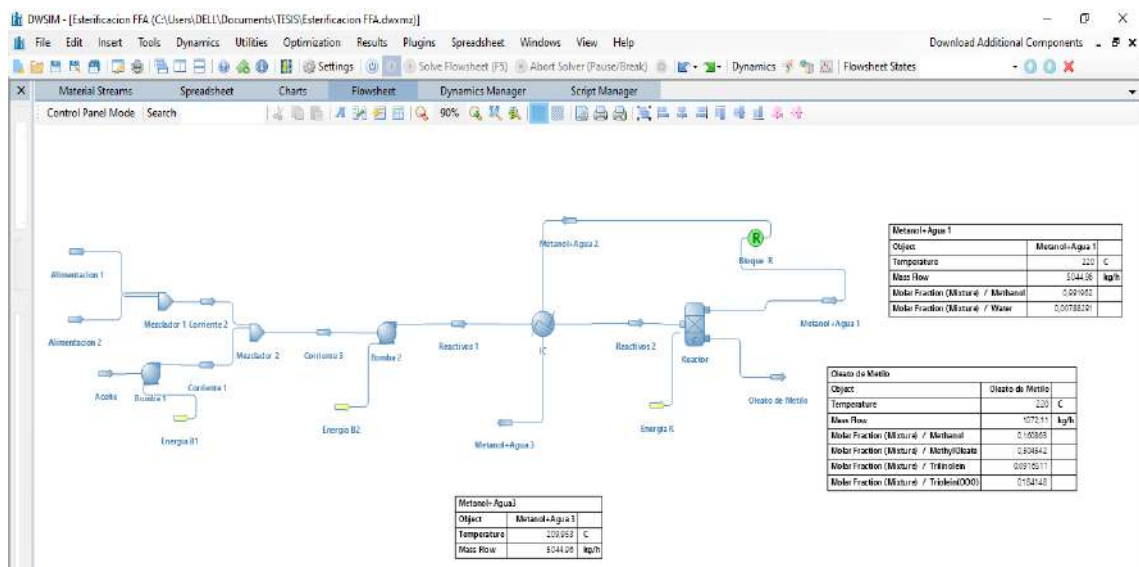


Figura 12-3. Diagrama de Flujo con tablas de resultados

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.5. Análisis de Sensibilidad

Seguidamente de haber comprobado la veracidad de los resultados arrojados por el software libre, es hora de analizar minuciosamente el proceso de esterificación no catalítica para hallar las variables críticas de entrada, en otras palabras determinar cuales son las variables independientes

que mas afectan a la generación de biodiesel y con ello especificar los parámetros óptimos del proceso para asegurar la eficiencia del mismo.

Se requirió de la opción optimización y dentro de ella el análisis de sensibilidad. Se ingresaron como variables independientes la mayoría de parámetros, como fracciones molares, de cada una de las corrientes de alimentación, la temperatura y la presión de las mismas. Además de examinar las condiciones de los distintos equipos como la caída de presión del reactor y el porcentaje de conversión de la reacción. Con respecto al intercambiador de calor del proceso, se estudió la carga térmica del mismo y el área de transferencia de calor.

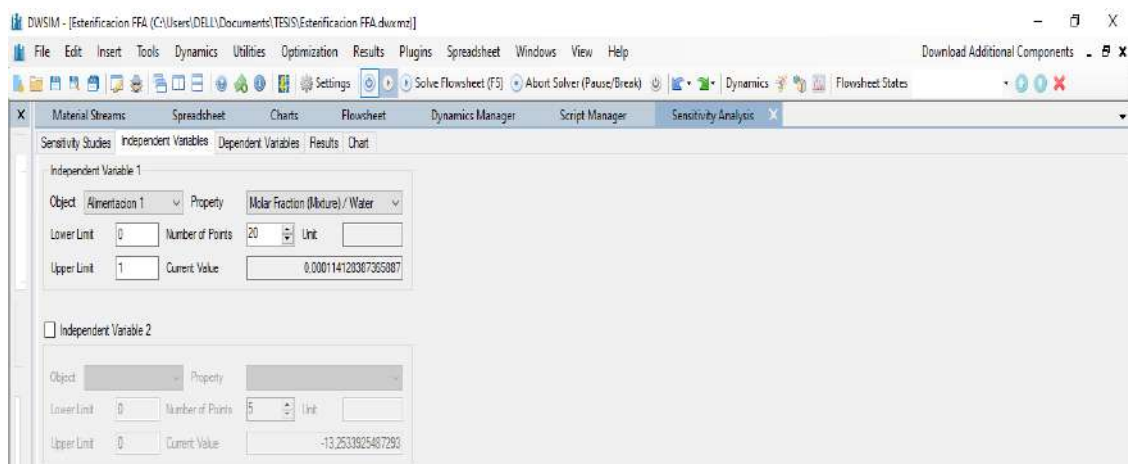


Figura 13-3. Configuración de las condiciones para el análisis de sensibilidad

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Todo lo mencionado se realizó con el único objetivo de aislar aquellas variables de entrada que tengan una incidencia en la composición de las corrientes resultantes. Según bibliografía las variables dependientes son las fracciones molares de: oleato de metilo ($OM-X_{M-O}$), metanol ($OM-X_m$), triolein ($OM-X_{ooo}$) y trilinolein ($OM-X_{LLL}$), esto con respecto a la corriente Oleato de Metilo. Dentro de la línea de materia Metanol+Agua 1, las fracciones molares mas importantes son las de metanol ($MA-X_m$) y agua ($MA-X_a$).

Del extenso grupo de variables independientes mencionadas, cuatro de ellas, la fracción molar de agua en la Alimentación 1 ($A1-X_a$), la fracción molar de ácido oleico en la corriente Aceite ($Ac-X_o$), la caída de presión en el Reactor ($-p$) y por último el porcentaje de conversión ($\%C$) dentro de la configuración de la reacción química, fueron seleccionadas, ya que permitieron la variación significativa de los resultados.

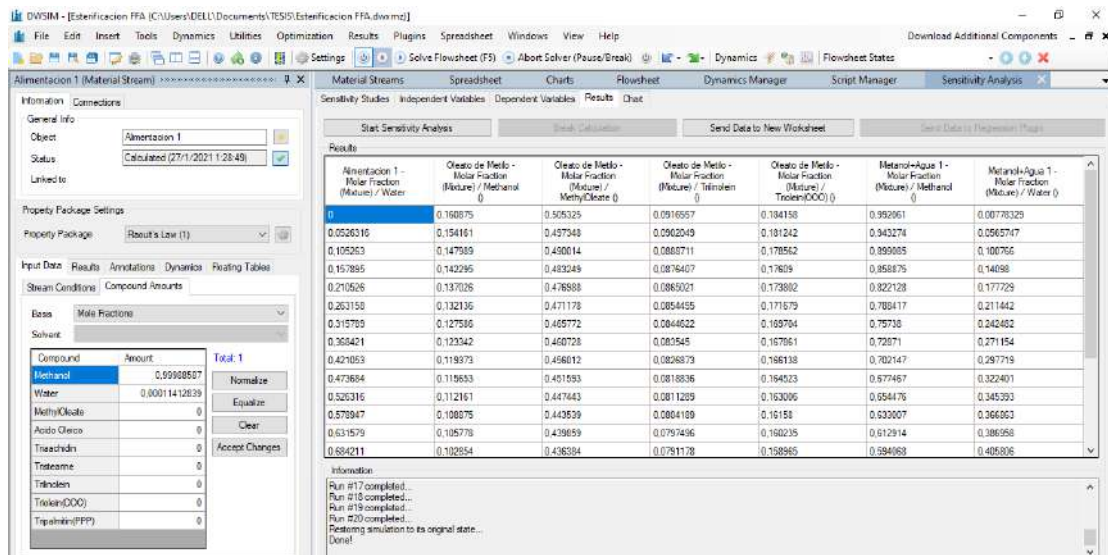


Figura 14-3. Obtención de resultados del análisis de sensibilidad

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.6. Especificación de las variables dependientes e independientes

Gracias al proceso de análisis de sensibilidad se han encontrado las variables dependientes e independientes del sistema, se detallan a continuación en la Tabla 6-3 y 7-3.

Tabla 6-3. Detalle de las variables independientes del sistema

Variables Independientes	
Nomenclatura	Descripción
A1- X_a	Fracción molar de agua de la corriente Alimentación 1
Ac- X_o	Fracción molar de ácido oleico de la corriente Aceite
%C	Porcentaje de conversión de la reacción química
-p	Caída de presión en el Reactor

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 7-3. Detalle de las variables dependientes del sistema

Variables Dependientes	
Nomenclatura	Descripción
OM- X_{M-O}	Fracción molar de oleato de metilo de la corriente Oleato de Metilo
OM- X_m	Fracción molar de metanol de la corriente Oleato de Metilo
OM- X_{ooo}	Fracción molar de triolein de la corriente Oleato de Metilo
OM- X_{LLL}	Fracción molar de trilinoleina de la corriente Oleato de Metilo
MA- X_m	Fracción molar de metanol de la corriente Metanol+Agua 1
MA- X_a	Fracción molar de agua de la corriente Metanol+Agua 1

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.7. Creación de la base de datos

En base a la simulación efectuada, validada e indagada muy a fondo, para establecer las variables independientes y dependientes de la secuencia, que constituirían los parámetros de entrada y de salida de la RNA (análisis de sensibilidad), se puede dar paso a la elaboración de la base de datos, utilizando Excel para la creación aleatoria de los datos de entrada.

Seguidamente con esta información es posible programar la simulación para que arroje las salidas respectivas. La simulación tendrá que converger 100 veces para hallar los resultados y así completar la base numérica para el entrenamiento y aprendizaje de la red, que se puede encontrar en el *Anexo A*. Tendrá que operar el sistema 30 veces más para construir la base de datos para la validación, *Anexo B*.

Tabla 8-3. Parámetros de entrada de la RNA

ENTRADAS				
Parámetro	Fracción molar Water	Fracción molar Acido Oleico	Caída de presión	Conversión
Descripción	Corriente Alimentación 1	Corriente Aceite	(bar) En el Reactor	(%) Propiedades de la reacción química
Identificación	A1- X_a	Ac- X_o	-p	%C

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 9-3. Parámetros de salida de la RNA

SALIDAS						
Ubicación	Reactor (corriente líquida)				Reactor (corriente de vapor)	
	Oleato de Metilo				Metanol+Agua l	
Fracciones molares	Methyl Oleate	Methanol	Triolein	Trilinolein	Methanol	Water
Identificación	OM-X _{M-O}	OM-X _m	OM-X _{ooo}	OM-X _{LLL}	MA- X _m	MA- X _a

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Para lograr el acertado procesamiento de datos se establece lo siguiente:

-Los flujos másicos del sistema permanecen iguales a los mencionados en bibliografía, esto significa que de la simulación no suscitará una modificación en las capacidades que posee cada equipo del proceso.

-El intercambiador de calor planteado funciona ingresando el valor de la energía intercambiada entre los fluidos 26kW, y el área de transferencia de energía es 1 m², este último dato es tomado por defecto del programa DWSIM.

-Los equipos como bombas y mezcladores adecuados en la simulación, no requieren una configuración extra, solo funcionan con los parámetros fijados por defecto en el programa DWSIM.

-La temperatura de salida del reactor es 220°C, la variación de este parámetro no tiene influencia en las variables dependientes.

-La caída de la presión del reactor de conversión se debe ingresar dentro del rango de -1 a -35 bar, dentro de estos límites la simulación encuentra una convergencia, ya que si se extralimita el parámetro de presión, la capacidad operativa del reactor se ve afectada. El signo negativo es primordial, debido a que el sistema solicita un aumento de presión a la salida del reactor, mas no una caída de presión.

-Después de especificar la energía del reactor según los valores del artículo científico 2038 kW, esta cantidad a lo largo de la ejecución de la simulación varía y aumenta a 2090.24 kW.

Tabla 10-3. Límites operativos de las entradas a la RNA

Límites				
Parámetro	Fracción molar Water	Fracción molar Acido Oleico	Caída de presión	Conversión
Descripción	Corriente Alimentación 1	Corriente Aceite	(bar) En el Reactor	(%) Propiedades de la reacción química
Rango	0 a 1	0 a 1	-1 a -35	0 a 100

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.8. Diseño de la red neuronal artificial

Para empezar el diseño de la RNA, es primordial establecer las condiciones de entrada y de salida de la misma, los criterios de entrada son: A1- X_a , Ac- X_o , -p, %C. Los parámetros de salida corresponden a: OM- X_{M-O} , OM- X_m , OM- X_{ooo} , OM- X_{LLL} , MA- X_m , MA- X_a , como se puede detallar en la Tabla 8-3 y 9-3.

Para obtener una mejor predicción de los resultados en la RNA, se puede normalizar los datos de entrada o de salida según lo amerite el proceso. Esta opción se la ejecuta con la ayuda de códigos en MATLAB, u otra alternativa es aplicar la Ec 1.3, que en este caso se sometió en el programa Excel a las variables de entrada.

$$X^* = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \quad (\text{Ec 1.3})$$

Donde:

X^* = Valor Normalizado

X = Valor que se quiere normalizar

X_{min} = Valor mínimo

X_{max} = Valor máximo

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	DATOS PARA LA RED NEURONAL															
2	0,3568	0,7625	0,4835	0,4096	0,4723	0,1617	0,5942	0,6063	0,7706	0,0542	0,1875	0,1616	0,8612	0,55	0,1442	0,3107
3	0,399	0,129	0,879	0,889	0,110	0,309	0,377	0,414	0,546	0,38	0,396	0,211	0,125	0,436	0,153	0,462
4	0,675	0,6	0,1	0,175	0,65	0,95	0,875	0,9	0,675	0,15	0,3	0,35	0,15	0,525	0,275	0,9
5	0,15368768	0,8289553	0,5935396	0,62891419	0,33346889	0,10217568	0,7285148	0,33865392	0,07513217	0,95638471	0,52933196	0,4349329	0,4798697	0,7796868	0,5366004	0,55917049
6	0,051	4,23E-02	0,4401	0,4369	0,026	0,0183	0,905	0,0012	0,0344	0,4926	0,1576	0,0777	0,0392	0,1665	0,068	0,0383
7	0,0341	0,0852	0,0398	0,0741	0,0963	0,5734	0,367	0,3683	0,0694	0,0686	0,0789	0,0602	0,0053	0,1237	0,0325	0,4139
8	0,3265	1,96E-01	0,0595	0,0498	0,3422	4,07E-08	1,74E-07	6,80E-07	0,2324	0,2213	0,3168	0,403	0,4817	0,1801	0,455	0,0449
9	0,1625	5,76E-02	0,0296	0,0248	0,1703	4,49E-08	1,92E-07	7,51E-07	0,1156	0,1101	0,1576	0,2065	0,2397	0,0797	0,2264	0,0223
10	0,8451	0,247	0,5129	0,5885	0,5347	0,8497	0,5892	0,5753	0,238	0,9398	0,814	0,8404	0,3269	0,4563	0,8575	0,7032
11	0,1547	0,7529	0,4837	0,4112	0,6652	0,1484	0,4023	0,3928	0,7618	0,0597	0,1858	0,1595	0,6728	0,5436	0,1423	0,2967
12	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16

Figura 15-3. Base de datos normalizada en el programa Excel

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

3.9. Entrenamiento de la RNA

Los algoritmos por los que está dispuesto el programa MATLAB son: Levenberg- Marquardt (LM), Bayesian Regularization (BR) y Scaled Conjugate Gradient, cada uno de ellos le permite el aprendizaje numérico a la RNA, y estos se encargan de procesar distintos tipos de datos. En esta secuencia la red se va ajustando según el error que se detecte, es por ello que se experimentó con cada uno de los algoritmos para encontrar el que se adapte de mejor manera y sea capaz de lograr una mejor previsibilidad de los datos finales.

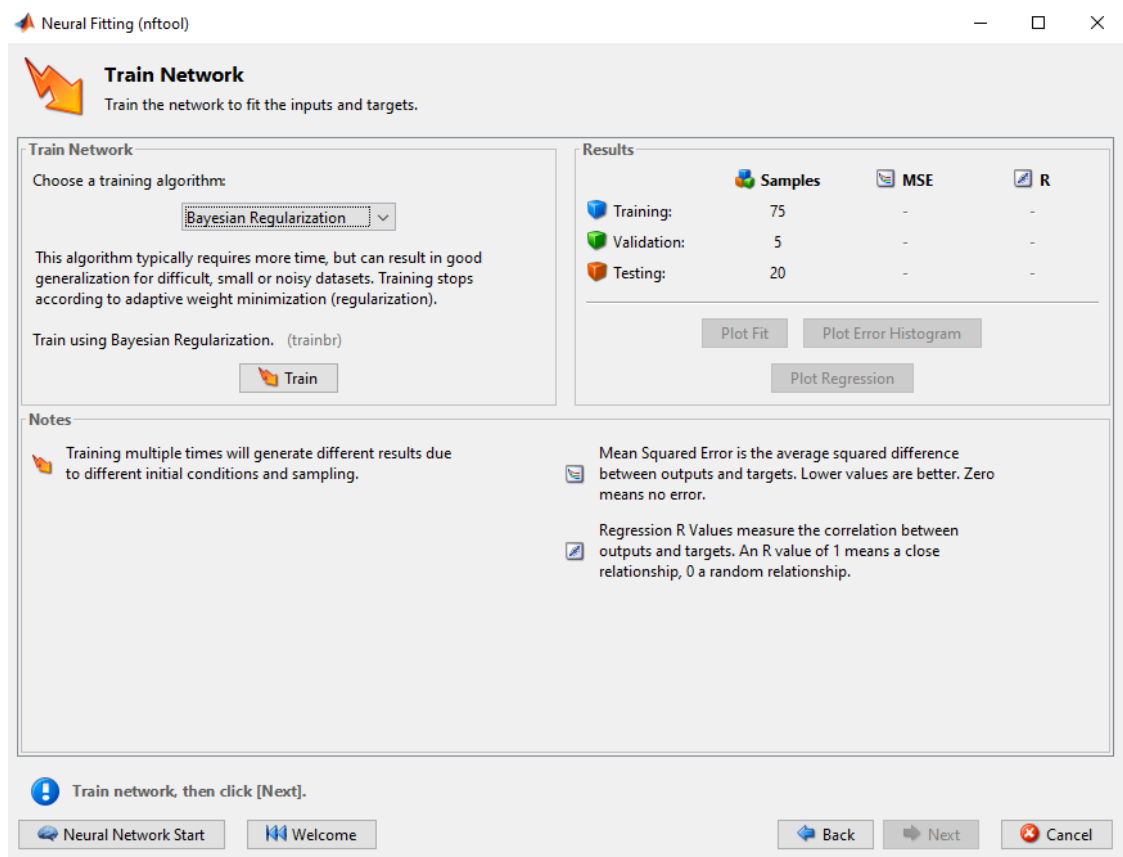


Figura 16-3. Configuración del algoritmo BR

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Se ha determinado que el algoritmo más adecuado fue BR, debido a que el mismo está enfocado en procesar datos mínimos, complicados o muy ruidosos. En esta ocasión se utilizaron 30 neuronas ocultas, y el tiempo que se tardó la red en procesar la información fue de 5 segundos.

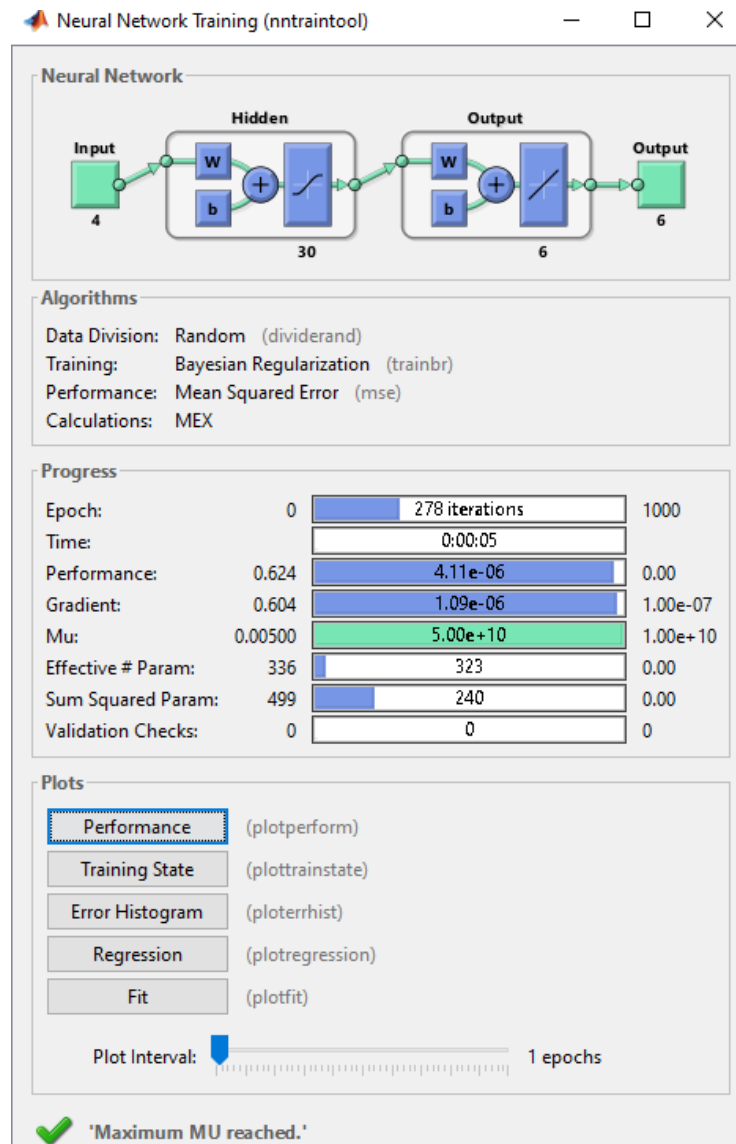


Figura 17-3. Ejecución del entrenamiento de la RNA

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

El funcionamiento general de este algoritmo es a partir del entendimiento de los parámetros en forma de probabilidades, es así que los pesos de la red resultan de un conjunto de probabilidades y por ende los resultados de la misma son una distribución de probabilidades. El concepto convencional que se aplica en el desarrollo de una red neuronal cotidiana, es la asignación de pesos óptimos minimizando los errores suscitados (Kayri, 2016, pp.1-2).

Los algoritmos de retropropagación, entrenan una red feedforward que funcionan de la siguiente forma, en resumen, dispersando la información de las variables independientes hacia una capa oculta, la cual retorna las sensibilidades hacia atrás para así reducir el error y actualizar los pesos. El algoritmo de retropropagación BR posee una función objetivo que incluye una suma de cuadrados residual y una suma de pesos de la red al cuadrado, así se reduce los errores de predicción, ofreciendo un excelente modelo generalizado (Kayri, 2016, pp.3-4).

3.10. Validación de la RNA

La validación se lleva a cabo, para pronosticar la generalización de la red y si esta no posee un avance positivo, el entrenamiento se detiene inmediatamente. Matlab realiza una validación interna de sus resultados, después de haber entrenado correctamente, esto sucede en base a los datos ingresados. El programa sugiere destinar un porcentaje de datos para cada fase que procesa el 70% para el entrenamiento, 15% para el testeo y el restante 15% para la validación.

No obstante para asegurar que se ha diseñado un modelo confiable para la predicción de las fracciones molares del proceso de esterificación no catalítica, se procede a realizar una validación externa. De esta forma, 30 datos adicionales entrarán, específicamente para validar la RNA, se profundizará el tema en el capítulo IV.

Cabe recalcar que las redes bayesianas descartan la fase de la validación, tan solo el entrenamiento y el testeo serán visualizados para analizar el desempeño de la red, esto debido a la robustez que brinda este tipo de redes de retropropagación, que son capaces de descartar los datos designados a la validación y los aprovecha en las etapas que si son relevantes, como en el entrenamiento y en el aprendizaje.

La selección del número de datos empleados para cada criterio puede ser ajustado por el usuario, sin embargo en la práctica del proceso de la esterificación no catalítica se asignaron los porcentajes para potencializar el funcionamiento de la RNA, según el algoritmo escogido. Un 75% (75 datos) fueron destinados para el entrenamiento de la red, 5% (5 datos) para la validación y el 20% (20 datos) restante colocados para el desarrollo del testeo, tomando en cuenta que se ingresaron una lista de 100 datos.

Los parámetros cuantitativos de desempeño que demuestran cuan veraces son los resultados de la red neuronal, son el MSE y el parámetro regresión (R), es esencial tener claro sus conceptos.

-MSE: Sus siglas en inglés, *mean squared error*, que quiere decir el error cuadrático medio. Se calcula relacionando los valores resultantes y los objetivos, matemáticamente es la diferencia cuadrática promedio de los resultados (RNA) y los objetivos (simulados). Si el MSE es mayor, el error es elevado y si es cero no existe error alguno.

-R: Su sigla en inglés, *regression*, que significa regresión. Este criterio estima la correlación que existe entre los resultados y los objetivos, en dependencia a esto, si el valor de R se aproxima a uno, existe una adecuada correlación y si es cero la correlación es aleatoria.

Es muy relevante tomar en cuenta que cada vez que se entrena a la red los valores pueden cambiar y alterar los parámetros antes mencionados, debido a las diversas condiciones iniciales y de muestreo que se forma en el reentrenamiento.

Al igual que en este estudio, la regularización bayesiana representa un sin número de ventajas en los distintos artículos publicados, ya que ha logrado generar una codificación rápida, tiene una velocidad computacional nivelada, a pesar de que este algoritmo es mucho más lento que LM, se aclara que depende de la tipificación que se plantea. En muchos de los casos la obtención de resultados es más veloz que el mismo muestreo. Además es adaptativo, quiere decir que es capaz de identificar las fuerzas suaves o dispersas sin ningún tipo de contextualización inicial. Por último este mecanismo es robusto, se desarrolla sin mayor inconveniente con cualquier tipo de estructuras y en diferentes rangos de ruido (Feng et al., 2021, pp.1-3).

En artículos científicos donde el objetivo ha sido predecir los costos de uranio, se ha detectado una serie de problemas como el sobreajuste o el desajuste de los datos. Un sobreajuste en los datos significa un desequilibrio entre la memorización y la generalización de la red, a causa de sesgos o ponderaciones que generalmente contiene una base de datos experimental. La solución es conocida como decadencia de peso o algoritmo BR, es ideal para disminuir radicalmente esta memorización por parte de la red, concluyendo que por este método se puede calcular el precio del uranio de manera efectiva (Moshkbar, 2020, pp.1-3).

3.11. Análisis Estadístico

Este paso se desarrolla con el objetivo de analizar a fondo las relaciones que existe entre los valores fijos, que en este caso son las respuestas obtenidas a partir de DWSIM y los valores estimados por la red neuronal artificial. Como se especificó con anterioridad las salidas son las fracciones molares de los compuestos más relevantes para la investigación (M-O, m, OOO, LLL), por la corriente gaseosa y por la corriente líquida (m, a). El programa estadístico a emplear es STATGRAPHICS del cual se emplearán tres diferentes pruebas:

-**ANOVA**: Esta prueba estadística ayuda a identificar el aporte porcentual, o la respuesta media que da cada uno de los parámetros en el experimento ortogonal.

El principio básico de esta prueba radica en que al tener la tarea de interpretar varias muestras, se evaluará las medias poblacionales, descartando la hipótesis que no corresponda al comportamiento de las variables (Mustapha et al., 2021, pp.675-676).

Elección de hipótesis:

- Hipótesis nula: $\mu_A = \mu_B = \mu_C = \mu_D$
- Hipótesis alternativa: Las medias no son iguales.

El análisis de las varianzas funciona de tal forma que es capaz de descomponer la variabilidad de los datos en dos partes, una parte entre las distinciones de los grupos y otra entre la diferencias del mismo grupo.

El *Valor-P* es el indicador de la prueba, que brinda la información estadística, si este valor es mayor a 0,05 se da por válida la hipótesis nula con un nivel de confianza del 95% (Technologies, 2010, pp.192-194).

-Gráfico de medias: Esta es una interpretación gráfica que da a conocer la similitud de las medias de cada muestra experimental. Cada media de la muestra se visualiza con su intervalo alrededor, y depende de que intervalo se utilice para la discusión de resultados. Si el *Valor-P* es mínimo en la prueba de ANOVA, es aconsejable realizar este gráfico, ya que se evidenciará la no concordancia de las media con más claridad (Technologies, 2010, pp.194-195).

-Gráfico de caja y bigotes: Generalmente este gráfico se traza para determinar si existe o no la presencia de datos atípicos, al contrastar cierto número de pares de medianas y medias. Este gráfico señala en que intervalo se asocia la mayor parte de datos (caja), también se muestran los límites inferiores y superiores de las muestras (bigotes), añadiendo a ello ciertos cuadrados pequeños en los extremos de los límites inferiores o superiores, lo cual denota la existencia de datos atípicos (Technologies, 2010, pp.156-157).

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Presupuesto

La inversión del proyecto se describe a continuación:

Tabla 1-4. Matriz de Presupuesto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación y Aprendizaje (internet)	\$50	X	-
Impresión del documento final	\$40	X	-
Copias e impresiones adicionales	\$20	X	-
Empastados	\$65	X	-
TOTAL	\$175		

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

4.2. Recursos y Materiales

La propuesta realizada del proceso de esterificación no catalítica empleará los siguientes softwares:

-Software DWSIM, *Versión 6.3 Update 2*: Para la realización de la simulación del proceso de esterificación no catalítica de los ácidos grasos libres que componen el aceite karanja.

-MATLAB, versión R2017b: Sistema de cómputo numérico, encargado de diseñar una red neuronal capaz de predecir las composiciones molares de los productos resultantes de la reacción.

-STATGRAPHICS Centurion XVI, versión 16.1.03 (32 bits): Programa estadístico informático, capaz de analizar los datos arrojados por la (RNA).

Es importante señalar que la serie de procesamientos que se han llevado a cabo, se han desarrollado en una laptop, que consta del sistema operativo Microsoft Windows 10 Home, su versión es 10.0.19041 compilación 19041. El procesador es Intel (R) Core (TM) i5-4200U CPU @ 1.60GHz, 2301 Mhz, consta de 2 procesadores principales y 4 procesadores lógicos. Su memoria RAM es de 4.00 GB. El tipo de sistema de la PC es basado en 64 bits.

Es necesario realizar una inversión para el uso del software DWSIM de \$20 mensuales, tomando en cuenta el costo del internet, debido a que el software es de código abierto y por ende su entrada es gratuita.

4.3. Cronograma del proyecto

Tabla 2-4. Cronograma del trabajo de titulación

Actividad	Octubre		Noviembre		Diciembre		Enero		Febrero		Marzo	
	Semanas		Semanas		Semanas		Semanas		Semanas		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 del proceso de esterificación no catalítica de los ácidos grasos libres que componen el aceite de karanja.												
Obtención de datos experimentales.												
Validación del método y determinación de Eficiencia.												
Estudio técnico y económico.												
Redacción del trabajo final.												
Análisis de costos.												
Revisión del documento final.												
Defensa de los resultados												

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

4.4. Discusión y análisis de resultados

4.4.1. Resultados de la simulación en DWSIM

Se realizó la simulación de la secuencia enfocada a la obtención de biodiesel y el programa DWSIM, fue el encargado de colaborar con esta tarea, la Figura 1-4 representa el proceso de esterificación no catalítica, a partir de FFA.

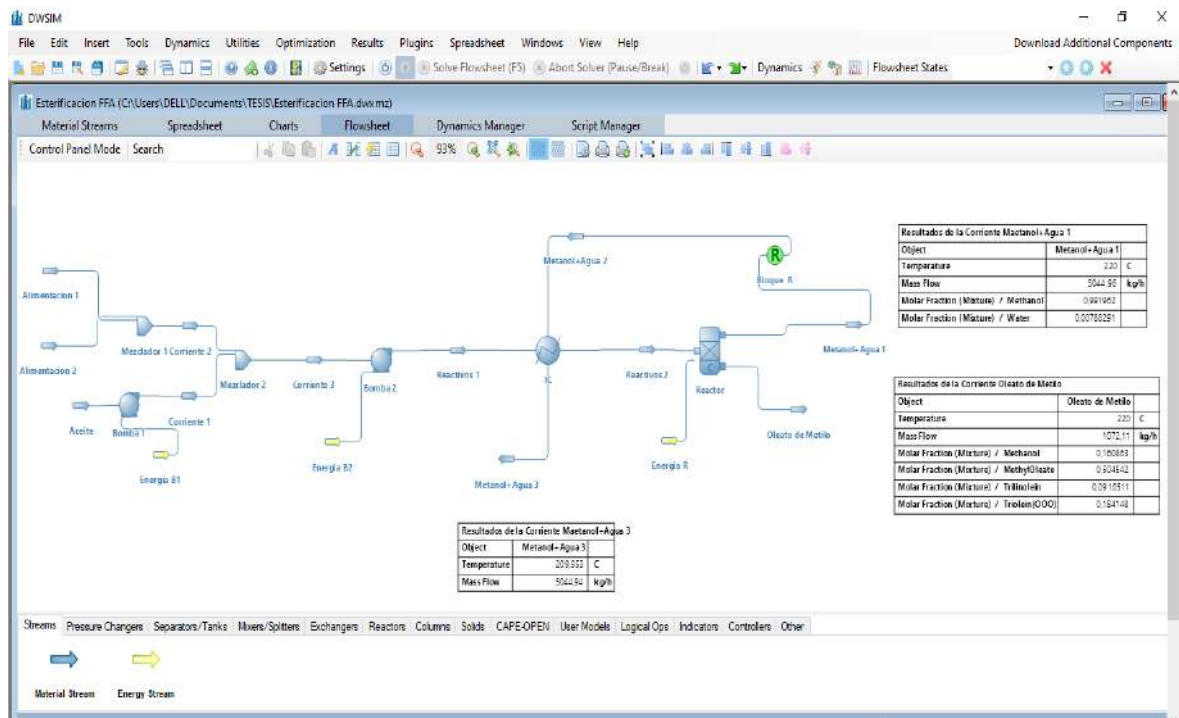


Figura 1-4. Simulación en DWSIM del proceso de obtención de biodiesel

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se mencionó anteriormente, para beneficio de la simulación se bosquejó el ciclo de una manera distinta al proceso original. Los cambios fueron añadir un reactor de conversión o de isomerización en vez del tanque de agitación continua, no se utilizaron los parámetros cinéticos, ya que no fueron necesarios. Fue posible omitir el separador, ya que el reactor añadido cumple ambas tareas, el de convertir FFA y de separar las corrientes gaseosas de las líquidas.

La purificación en una columna de destilación no se aplicó en este caso, ya que el enfoque primordial de este proyecto de titulación fue la obtención de biodiesel aprovechando la composición de FFA. Para observar de manera cuantitativa los resultados de la simulación del proceso de aprovechamiento de las composiciones de FFA, se resumen en las siguientes Tablas 3-4, 4-4 y 5-4 los valores en los cuales se ha enfatizado el presente estudio.

Tabla 3-4. Resultados de la corriente Metanol+Agua 1

Resultados de la corriente Metanol+Agua 1		
Objeto	Metanol+Agua 1	
Parámetros	Cantidades	Unidades
Temperatura	220	°C
Presión	14	bar
Flujo másico	5044,96	kg/h
Flujo molar	157,778	kmol/h
Fración molar de metanol (mezcla)	0,991962	
Fración molar de agua (mezcla)	0,00788291	

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 4-4. Resultados de la corriente Oleato de Metilo

Resultados de la corriente Oleato de Metilo		
Objeto	Oleato de Metilo	
Parámetros	Cantidades	Unidades
Temperatura	220	°C
Presión	14	bar
Flujo másico	1072,11	kg/h
Flujo molar	2,39836	kmol/h
Fración molar de metanol (mezcla)	0,160863	
Fración molar de oleato de metilo (mezcla)	0,504542	
Fración molar de trilinoleina (mezcla)	0,0916511	
Fración molar de trioleina (mezcla)	0,184148	

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 5-4. Resultados de la corriente Metanol+Agua 3

Resultados de la Corriente Metanol+Agua 3		
Objeto	Metanol+Agua 3	
Parámetros	Cantidades	Unidades
Temperatura	209,953	°C
Presión	14	bar
Flujo másico	5044,96	kg/h
Flujo molar	157,778	kmol/h
Fracción molar de metanol (mezcla)	0,99195	
Fracción molar de agua (mezcla)	0,00789458	

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

4.5. Validación de los resultados de la simulación

Es primordial para asegurar la factibilidad de la simulación, realizar una comparación entre los valores que se obtuvieron en la simulación y los que se plantean en el artículo científico. Se debe calcular para ello el error porcentual (%E) para tener en claro que tan alejado de la realidad está la secuencia simulada.

Para este paso pues se tomó en cuenta las salidas de las fracciones molares más relevantes o significativas de la corriente de Oleato de Metilo y de la corriente Metanol+Agua 1. En términos energéticos se calculó adicionalmente el %E del parámetro de la temperatura de la corriente Metanol+Agua 3, con respecto a la temperatura hallada en bibliografía, tan solo para determinar qué tan eficiente era el IC y que cantidad de energía podía ser aprovechada del proceso, mas no es el interés primordial de este proyecto de titulación.

La fórmula para obtener el %E se expresa a continuación:

$$\%E = \frac{V_e - V_r}{V_r} * 100$$

(Ec 1.4)

Donde:

V_r = Valor real.

V_e = Valor experimental.

Tabla 6-4. Resultado de %E calculados

Reactor de Conversión				
Corrientes	Fracciones molares	Hussain y Kumar, 2018, p. 637.	TIC	%E
Metanol + Agua 1	X _m	0,99	0,99	0%
	X _a	7,85E-3	7,88E-3	0,38%
Oleato de Metilo	X _{M-O}	0,481	0,504	4,78%
	X _m	0,17	0,16	5,88%
	X _{OOO}	0,179	0,184	2,79%
	X _{LLL}	0,103	0,091	11,65%
IC				
Corrientes	Temperatura (°C)	Hussain y Kumar, 2018, p. 637.	TIC	%E
Metanol + Agua 3	Fluido Caliente	210,5	209,9	0,28%

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se puede percibir en la Tabla 6-4 el error arrojado es aceptable, el %E más alto le corresponde a la fracción molar de trilinoleína, esto a causa de que todas las composiciones molares aparecen en las corrientes de gas y líquido, es decir Metanol + Agua 1 y Oleato de Metilo respectivamente. A pesar de que las fracciones molares de TG, corresponden a trazas, dentro de la corriente de gas en la simulación, la inexistencia de estas fracciones en la corriente gas del estudio del cual se realiza la comparación de resultados, lleva a la conclusión de que estas trazas son las causantes de la variación representativa de los resultados finales.

Las fracciones molares que son relevantes en el proceso como MA-X_m, OM-X_{M-O} y OM-X_m no superan ni el %6 de error, este es insignificante, la validación resultó exitosa y se puede proceder a un análisis de sensibilidad exhaustivo para la obtención de una base de datos, la cual alimentará a la RNA.

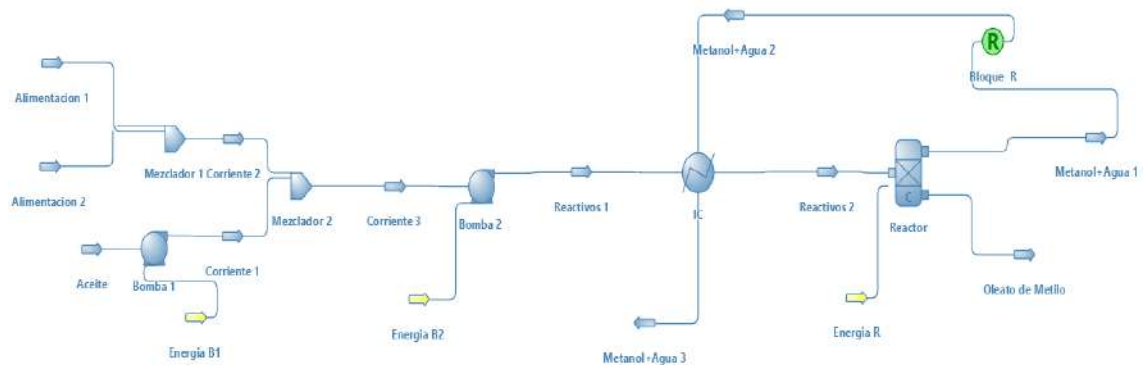
Se comprueba que el modelo planteado posee un alto grado de confiabilidad y puede emplearse a futuro para la generación de biodiesel, empleando materia prima de distinta composición de FFA.

4.6. Balance de masa del proceso

A continuación se expondrá la comprobación del proceso de esterificación no catalítica de FFA, sin ningún tipo de software, se realizarán cálculos a mano para verificar la efectividad de la simulación desarrollada en DWSIM, se calcularán principalmente los flujos molares de las corrientes y las fracciones molares que sean posibles, esto para evitar los prolongados y redundantes pasos que conlleva la comprobación total de parámetros.

4.6.1. Balance de materia del proceso de esterificación no catalítica

Figura 2-4. Diagrama del proceso de esterificación no catalítica



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Balance de masa global del proceso

$$E = S$$

$$F_1 + F_2 + F_{Ac} = F_{M3} + F_{OM}$$

(Ec 2.4)

Donde:

F_1 = Flujo molar de Alimentación 1

F_2 = Flujo molar de Alimentación 2

F_{Ac} = Flujo molar de Aceite

F_{M3} = Flujo molar de Metanol + Agua 3

F_{OM} = Flujo molar de Oleato de metilo

E: Entrada

S: Salida

Datos de entrada (flujos molares)

$$F_1 = 155,33 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$F_2 = 2,81 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$F_{Ac} = 2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$F_{M3} = 158,03 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Obtención de F_{OM} :

Despejando de la (Ec 2-4):

$$F_1 + F_2 + F_{Ac} = F_{M3} + F_{OM}$$

$$F_{OM} = F_1 + F_2 + F_{Ac} - F_{M3}$$

$$F_{OM} = (155,33 + 2,81 + 2,02 - 158,03) \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$F_{OM} = 2,13 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de masa general en el Mezclador 1

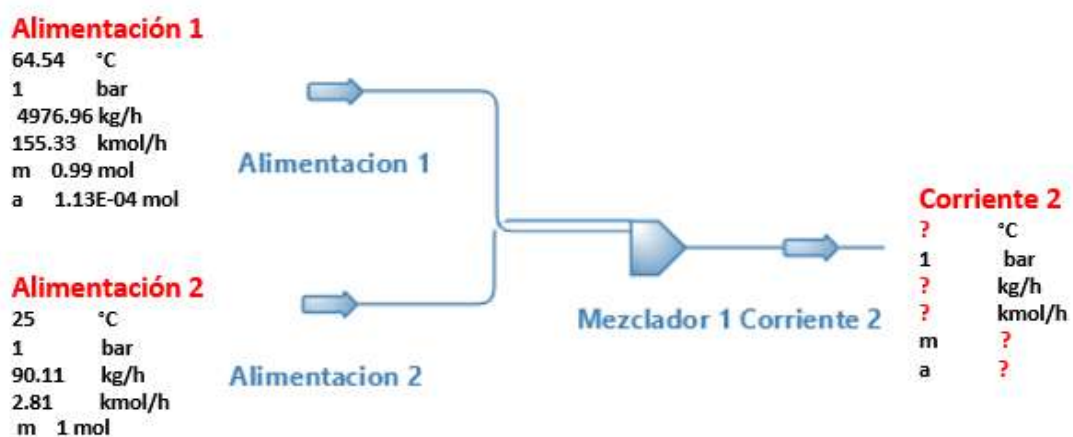


Figura 3-4. Detalle del Mezclador 1

Realizado por: Sancho, Ana, 2021

$$E = S$$

$$F_1 + F_2 = F_{C2}$$

(Ec 3.4)

Donde:

F_{C2} = Flujo molar de la corriente 2

$$(155,33 + 2,81) \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = F_{C2}$$

$$F_{C2} = 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 1 (m)

$$E = S$$

$$(F_1 * X_m) + (F_2 * X_m) = F_{C2} * X_m$$

(Ec 4.4)

Donde:

X_m : Fracción molar de metanol

Despejando de la (Ec 4-4):

$$155,33 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,99) + 2,81 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (1) = 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_m$$

$$X_m = 0,990$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 1 (a)

$$E = S$$

$$(F_1 * X_a) + (F_2 * X_a) = F_{C2} * X_a$$

(Ec 5.4)

Donde:

X_a : Fracción molar de agua

Despejando de la (Ec 5-4):

$$155,33 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (1,13E - 04) + 2,81 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_a$$

$$X_a = 1,10E - 04$$

Balance de masa general en el Mezclador 2

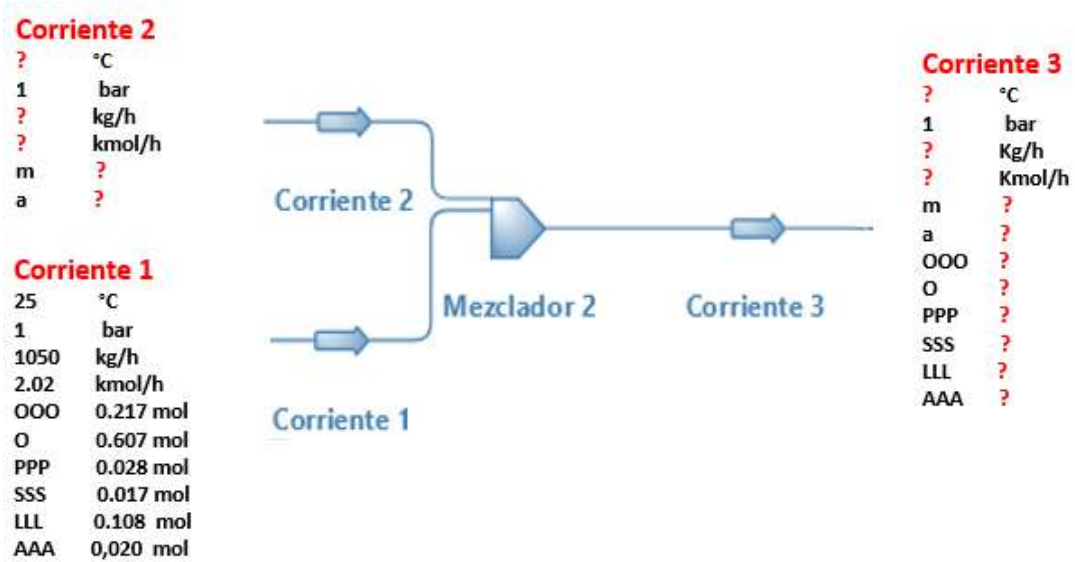


Figura 4-4. Detalle del Mezclador 2

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

$$E = S$$

$$F_{C1} + F_{C2} = F_{C3}$$

(Ec 6.4)

Donde:

F_{C1} = Flujo molar de la corriente 1

F_{C3} = Flujo molar de la corriente 3

$$(2,02 + 158,14) \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = F_{C3}$$

$$F_{C3} = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (m)

$$\text{Entrada} = \text{Salida}$$

$$(F_{C1} * X_m) + (F_{C2} * X_m) = F_{C3} * X_m$$

(Ec 7.4)

Despejando de la (Ec 7-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,990) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_m$$

$$X_m = 0,977$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (a)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_a) + (F_{C2} * X_a) = F_{C3} * X_a$$

(Ec 8.4)

Despejando de la (Ec 8-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (1,10 * E - 04) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_a$$

$$X_a = 1,08 * E - 04$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (O)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_o) + (F_{C2} * X_o) = F_{C3} * X_o$$

(Ec 9.4)

Despejando de la (Ec 9-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,607) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_o$$

$$X_o = 7,65 * E - 03$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (AAA)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_{AAA}) + (F_{C2} * X_{AAA}) = F_{C3} * X_{AAA}$$

(Ec 10.4)

Despejando de la (Ec 10-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,020) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_{AAA}$$

$$X_{AAA} = 2,52 * E - 4$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (SSS)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_{SSS}) + (F_{C2} * X_{SSS}) = F_{C3} * X_{SSS}$$

(Ec 11.4)

Despejando de la (Ec 11-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,017) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_{SSS}$$

$$X_{SSS} = 2,14 * E - 4$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (LLL)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_{LLL}) + (F_{C2} * X_{LLL}) = F_{C3} * X_{LLL}$$

(Ec 12.4)

Despejando de la (Ec 12-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,108) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_{LLL}$$

$$X_{LLL} = 1,36 * E - 3$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (OOO)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_{OOO}) + (F_{C2} * X_{OOO}) = F_{C3} * X_{OOO}$$

(Ec 13.4)

Despejando de la (Ec 13-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,217) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_{OOO}$$

$$X_{OOO} = 2,73 * E - 3$$

Balance de masa por componente en el Mezclador 2 (PPP)

$$E = S$$

$$(F_{C1} * X_{PPP}) + (F_{C2} * X_{PPP}) = F_{C3} * X_{PPP}$$

(Ec 14.4)

Despejando de la (Ec 14-4):

$$2,02 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,028) + 158,14 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0) = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_{PPP}$$

$$X_{PPP} = 3,53 * E - 4$$

Balance de masa general en el Reactor

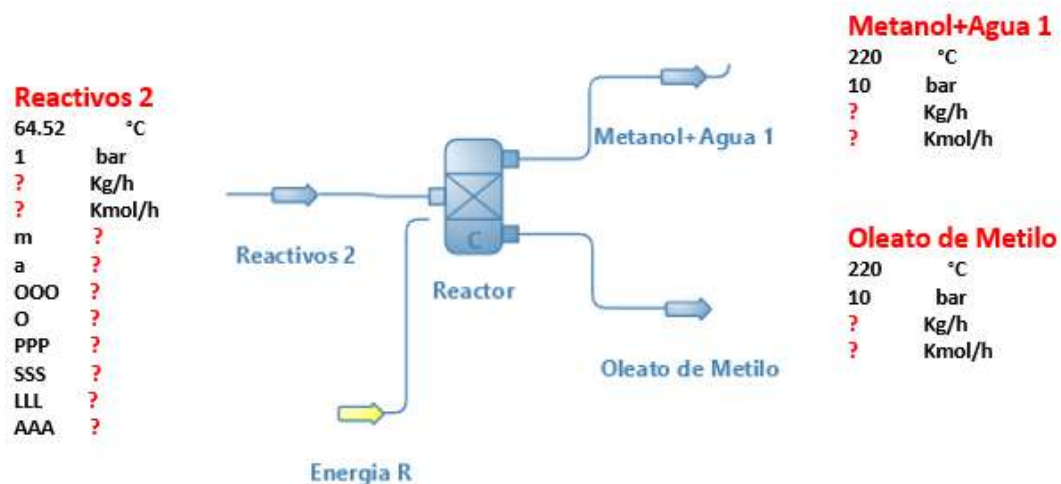


Figura 5-4. Detalle del Reactor

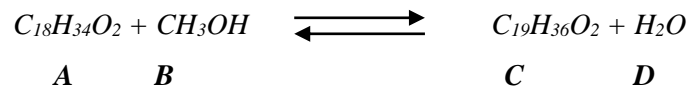
Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

$$E = S$$

$$160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

(Ec 15.4)

Reacción química que sucede en el Reactor:



Fórmula de la conversión de la reacción:

$$X = \frac{F_{AO} - F_A}{F_{AO}}$$

(Ec 16.4)

Donde:

X= Conversión de la reacción

F_{AO} = Flujo molar alimentado del reactivo (kmol/h)

F_A = Flujo molar final del reactivo (kmol/h)

Datos:

X= 0,9985

Cálculo del flujo molar inicial de la especie A:

$$F_{AO} = F_{C3} * X_0$$

(Ec 17.4)

Despejando de la (Ec 17-4):

$$160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * X_0 = F_{AO}$$

$$F_{AO} = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (7,65 * E - 03)$$

$$F_{AO} = 1,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Cálculo del flujo molar inicial de la especie B:

$$F_{BO} = F_{C3} * X_m$$

(Ec 18.4)

Despejando de la (Ec 18-4):

$$F_{BO} = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,977)$$

$$F_{BO} = 156,47 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Cálculo del reactivo limitante (RL):

$$1,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \text{ de A} * \frac{1 \text{ kmol B}}{1 \text{ kmol A}} = 1,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \text{ B}$$

El RL es la especie A

A partir de la (Ec 16-4), despejar F_A :

$$X = \frac{F_{AO} - F_A}{F_{AO}}$$

$$F_A = F_{AO}(1 - X)$$

(Ec 19.4)

Desarrollo de la reacción química, con respecto al RL:

Tabla 7-4. Cálculo de los flujos molares de la reacción con respecto al RL

Especies:	Flujos molares iniciales, F_{AO} (kmol/h)	Conversión de la reacción	Flujos molares finales, F_A (kmol/h)
A	1,22	-1,22(0,9985)	$1,22 (1 - 0,9985) = 1,83E - 03$
B	156,47	-1,22(0,9985)	$1,22 \left(\frac{156,47}{1,22} - \frac{0,9985}{1} \right) = 155,25$
C	0	1,22(0,9985)	$1,22(0 + 0,9985) = 1,21$
D	0	1,22(0,9985)	$1,22(0 + 0,9985) = 1,21$

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Balance de masa en el reactor por componentes (O):

Fracción molar a la salida del reactor

$$E + G = S + C$$
$$F_{C3} * (X_o) + 0 = S * (X_o) + F_{AO} * (X)$$

(Ec 20.4)

Despejando de la (Ec 20-4):

$$160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (7,65 * E - 03) + 0 = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (X_o) + 1,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0,9985)$$

$$X_o = \frac{1,22 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 1,21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}$$

$$X_o = 6,24 * E - 05$$

Donde:

G: Generación

C: Consumo

Balance de masa en el reactor por componentes (m):

Fracción molar a la salida del reactor

$$E + G = S + C$$

$$F_{C3} * (X_m) + 0 = S * (X_m) + C$$

(Ec 21.4)

Despejando de la (Ec 21-4):

$$F_{BO} + 0 = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (X_m) + 1,21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$X_m = \frac{156,47 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 1,21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}$$

$$X_m = 0,969$$

Balance de masa en el reactor por componentes (M-0):

Fracción molar a la salida del reactor

$$E + G = S + C$$

$$0 + G = S * (X_{M-0}) + 0$$

(Ec 22.4)

Despejando de la (Ec 22-4):

$$1,21 = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (X_{M-0})$$

$$X_{M-0} = 7,55 * E - 03$$

Balance de masa en el reactor por componentes (a):

Fracción molar a la salida del reactor

$$E + G = S + C$$

$$0 + G = S * (X_a) + 0$$

(Ec 23.4)

Despejando de la (Ec 23-4):

$$1,21 = 160,16 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (X_a)$$

$$X_a = 7,55 * E - 03$$

Nota: Debido a que el reactor empleado es multifuncional y separa las corrientes de gas y de líquido directamente sin la necesidad de utilizar un separador como tal, se compara los resultados obtenidos a mano, tomando como referencia el artículo científico, ya que el simulador arroja las fracciones molares una vez separadas por su respectiva fase, en la tabla 8-4 se comprueba las fracciones molares de las especies que participaron en la reacción y salen del reactor.

Tabla 8-4. Comparación de las fracciones molares a la salida del reactor

Corriente	Fracciones molares	Hussain y Kumar, 2018, p. 637	Cálculos a mano
Salida del reactor (S) (Antes de la separación gas- líquido)	X_O	1,14E-05	6,24E-05
	X_m	0,98	0,97
	X_{M-O}	7,67E-03	7,55E-03
	X_a	7,78E-03	7,55E-03

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

4.7. Resultados del análisis de sensibilidad

Luego de la realización del análisis de sensibilidad empleando la herramienta de optimización en DWSIM, se han detectado cuatro variables independientes que afectan representativamente a la seis variables dependientes tomadas según, Hussain y Kumar (2018, p. 637). Se ha optado por demostrar el comportamiento de cada una de ellas a partir de gráficas, en las cuales, se ubican las variables dependientes en el eje de las “y”, y las variables independientes en el eje de las “x”.

4.7.1. Interpretación gráfica del análisis de sensibilidad

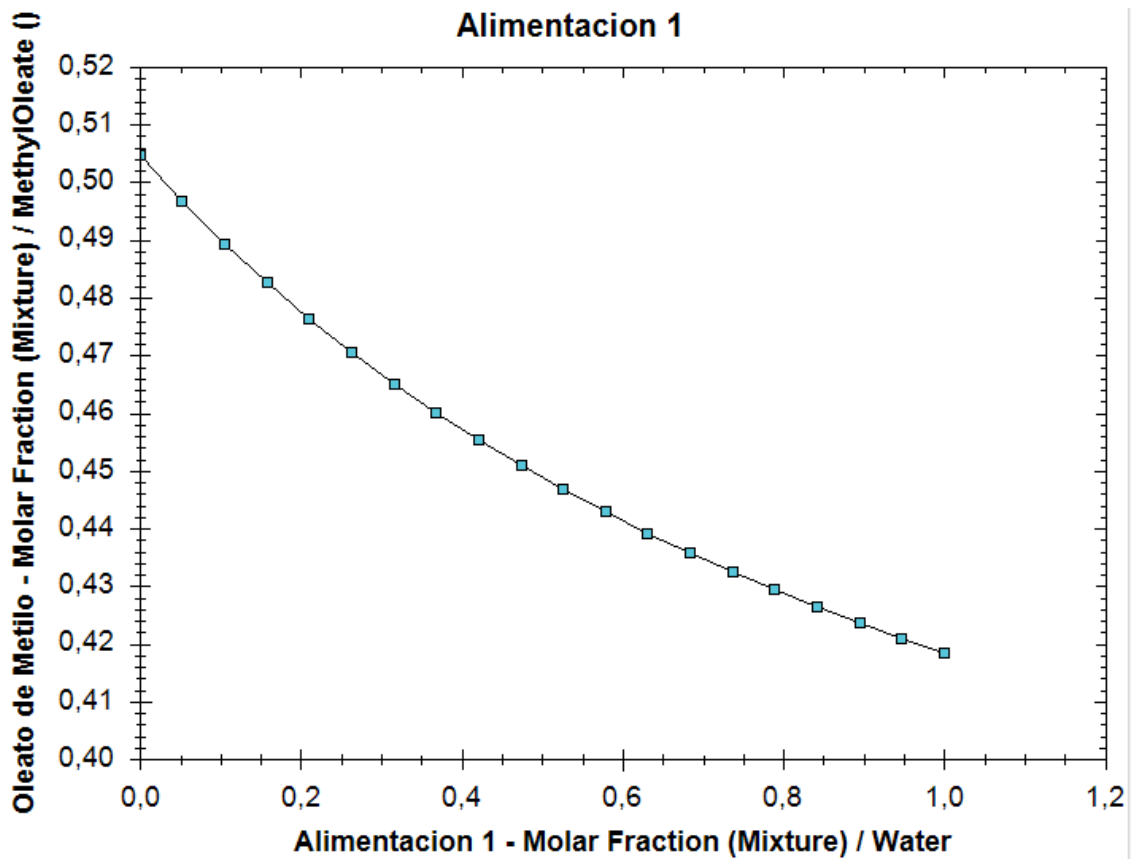


Figura 6-4. Incidencia de la variable A1- X_a , sobre la variable OM- X_{M-O}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Se observa una relación inversamente proporcional entre la variable independiente A1- X_a , y la variable dependiente OM- X_{M-O} . La composición de la corriente Alimentación 1, está dada por agua y metanol, es notable que afecta en gran manera la cantidad de agua que exista en la corriente, ya que de la presencia de metanol depende la reacción de esterificación.

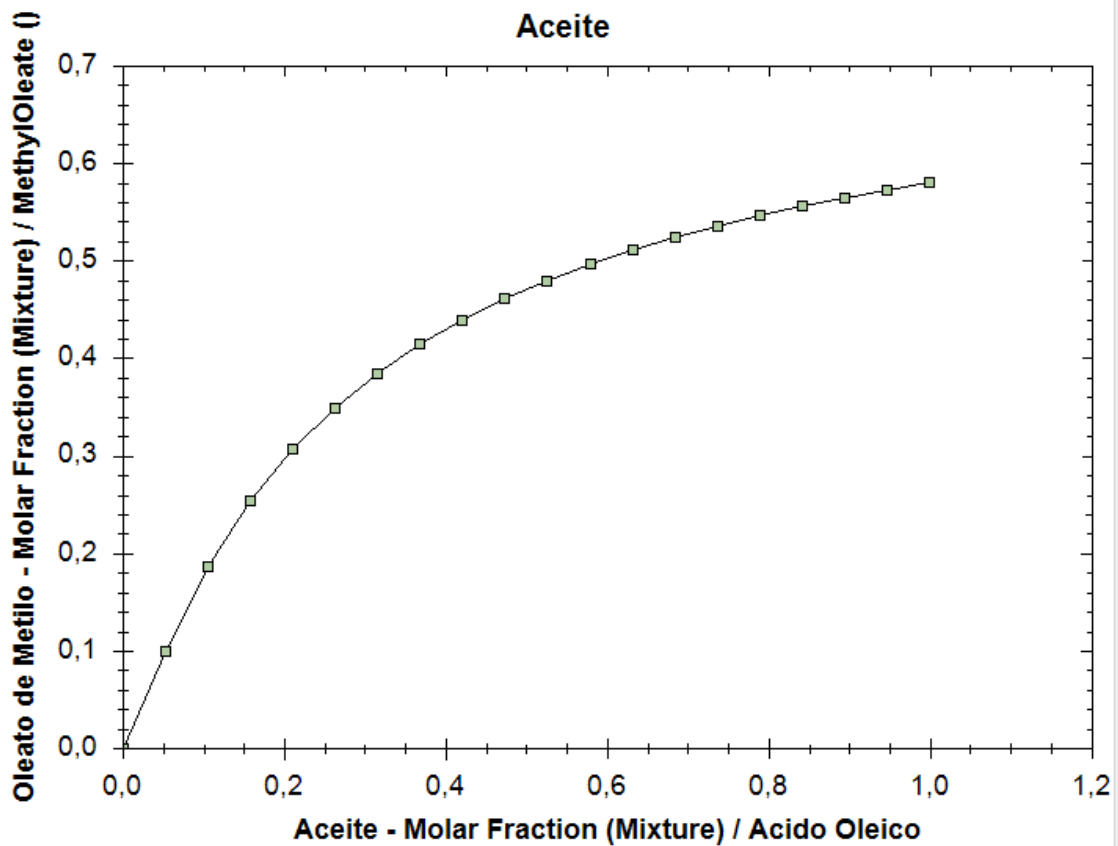


Figura 7-4. Incidencia de la variable Ac- X_o , sobre la variable OM- X_{M-O}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

En esta gráfica se puede visualizar que la variable independiente Ac- X_o , es directamente proporcional a la variable dependiente OM- X_{M-O} . Esto ocurre debido a que el FFA, en este caso el ácido oleico es el compuesto base por el cual se obtiene el oleato de metilo, y si este es representativo en la composición del aceite, pues la cantidad producida de biodiesel aumenta.

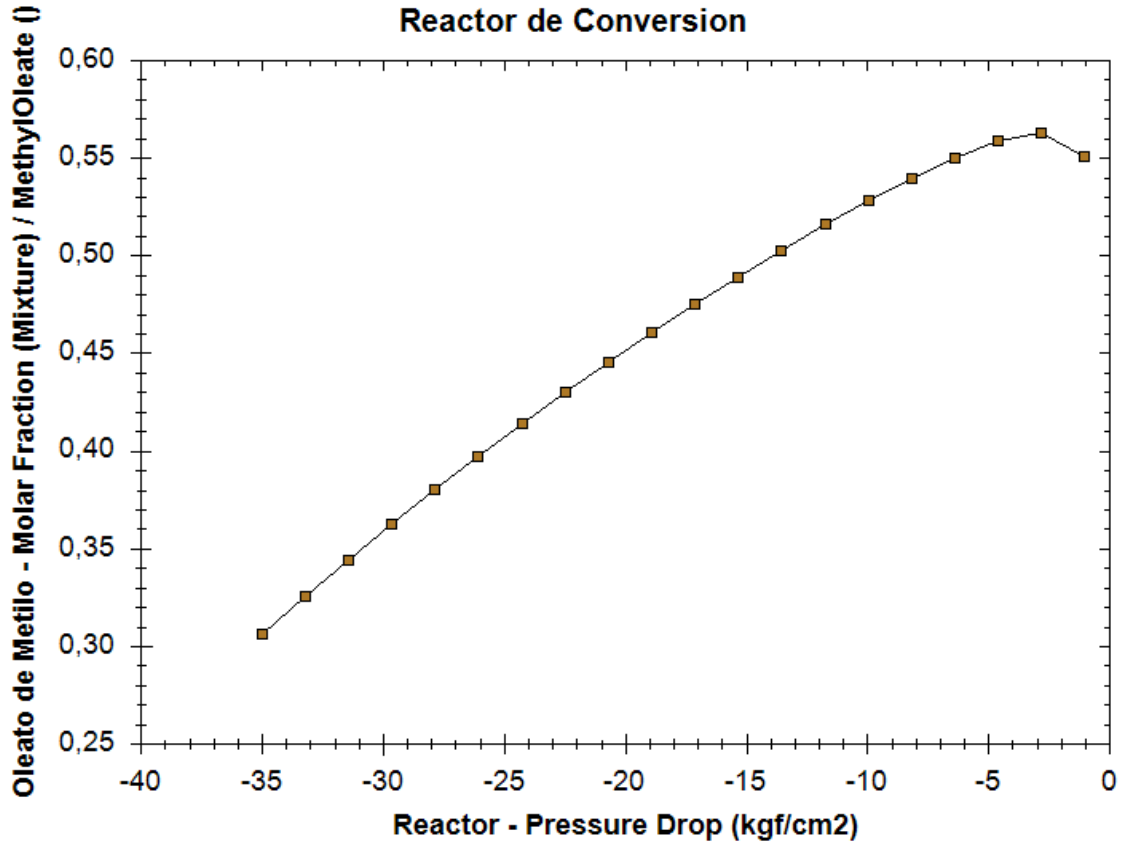


Figura 8-4. Incidencia de la variable -p, frente a la variable OM-X_{M-O}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

La correlación es inversamente proporcional entre las dos variables, variable independiente -p, y la variable dependiente OM-X_{M-O}. Este análisis permitió conocer el comportamiento del proceso y delimitar los rangos de presión óptimos dentro del reactor de conversión para no perjudicar a la cantidad de biodiesel obtenido.

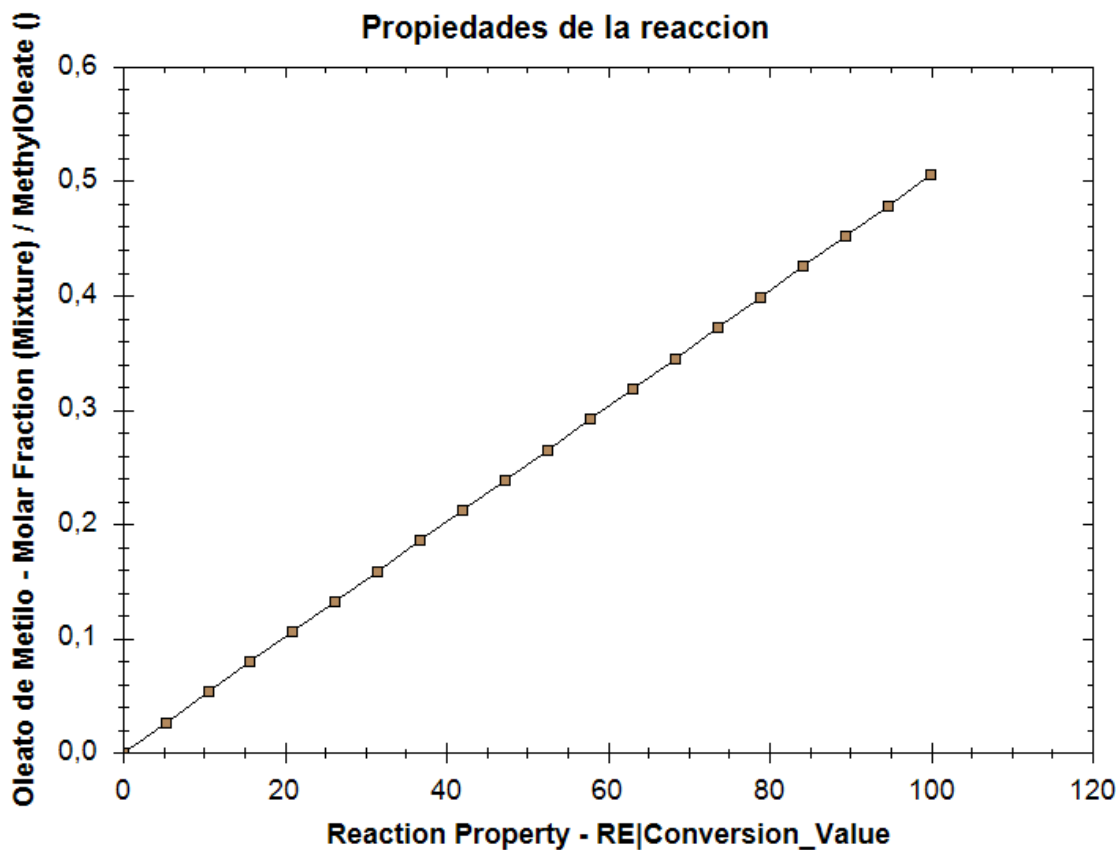


Figura 9-4. Incidencia de la variable %C, sobre la variable OM-X_{M-O}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

La variable independiente %C, que se puede visualizar en el eje de las X, tiene una gran influencia en la reacción de esterificación como tal, es por ello que se analiza la variable dependiente OM-X_{M-O}, situada en el eje de las Y. Corroborando que gracias a este dato el programa, sabe que valor de conversión de ácido oleico se fija para el desarrollo del sistema. La correlación es directamente proporcional.

4.8. Informe de los resultados de la RNA

El diseño de la RNA se llevó a cabo mediante la regularización Bayesian, con 100 datos para el entrenamiento y el testeo interno que ejecuta de por sí el programa, seguidamente se alimentó a la red con 30 datos extras para desarrollar un testeo externo que brindó mucha más confiabilidad al proceso. La red se configuró con 30 neuronas ocultas, las cuales posibilitaron la interacción entre las cuatro variables independientes y las seis dependientes en un lapso de 5 segundos.

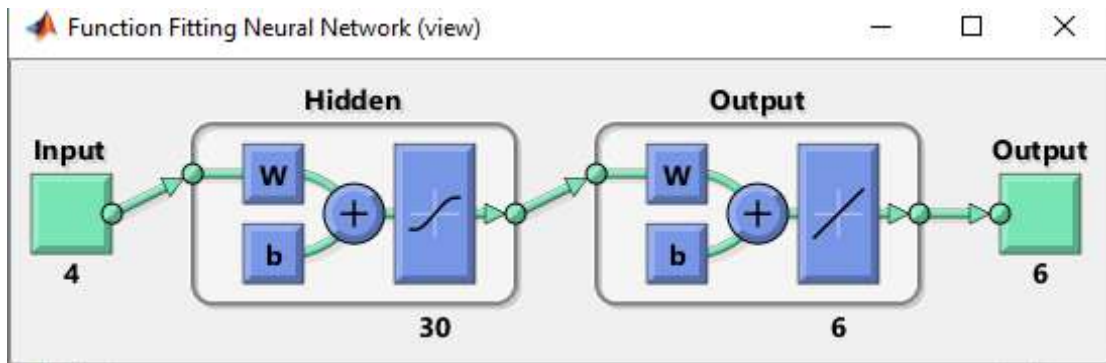


Figura 10-4. Estructura de la RNA configurada en MATLAB

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

4.8.1. Resultados de los indicadores numéricos en el diseño de la RNA

Tabla 9-4. Resultados de los indicadores MSE y R

Indicadores	Entrenamiento:		Testeo:
MSE:	4.11239*E-06		3.56514*E-03
R:	9.99968*E-01		9.76499*E-01

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

The screenshot shows the 'Train Network' panel in the Neural Fitting tool. The training algorithm is set to 'Bayesian Regularization'. The results table shows the following data:

	Samples	MSE	R
Training:	75	4.11239e-6	9.99968e-1
Validation:	5	0.00000e-0	0.00000e-0
Testing:	20	3.56514e-3	9.76499e-1

Additional information includes a 'Retrain' button and a 'Notes' section explaining that training multiple times will generate different results and that Mean Squared Error (MSE) and Regression R Values are used to measure the quality of the fit.

Figura 11-4. Panel de resultados arrojados utilizando el algoritmo BR

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

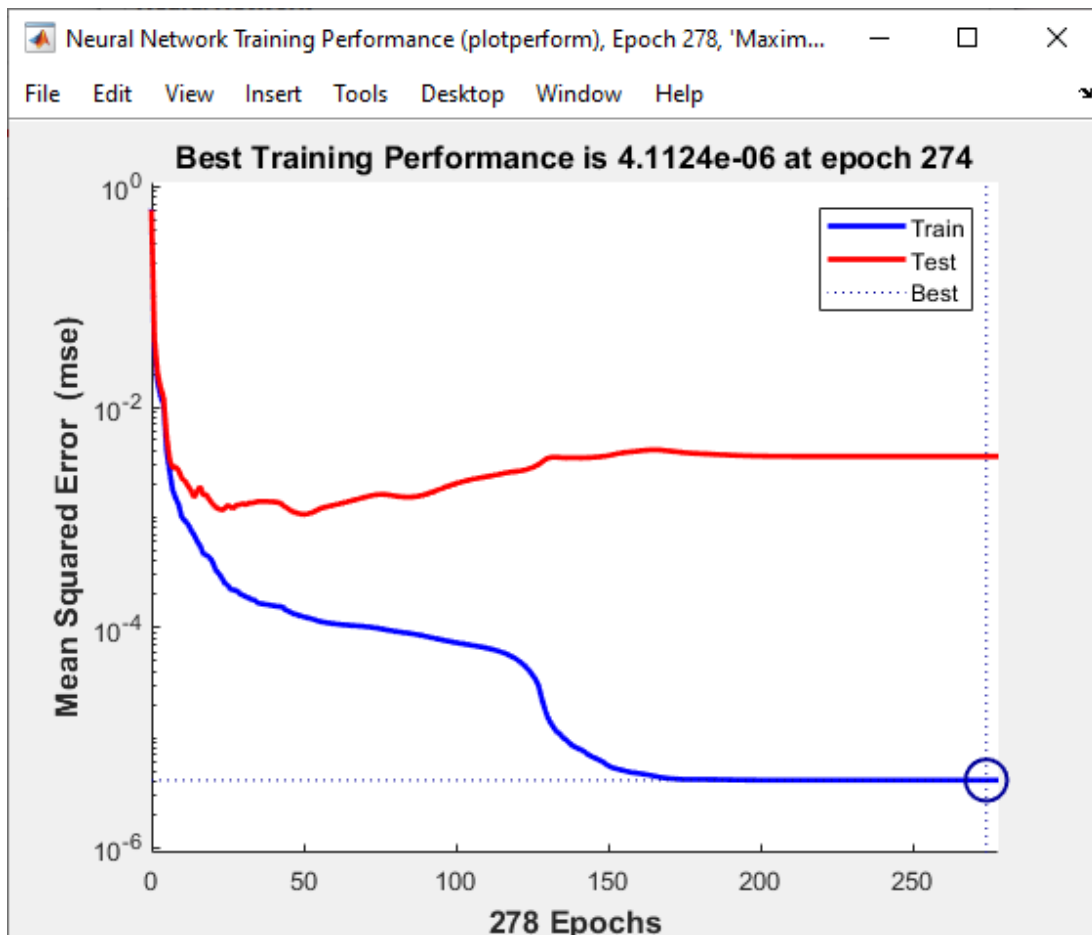


Gráfico 1-4. Evolución del MSE en la etapa de entrenamiento y prueba

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se explicó en el capítulo III, pues el programa cuenta con ciertos conceptos como el MSE y R, que detallan el desenvolvimiento de la red neuronal artificial. Los valores solo se arrojan para el entrenamiento y prueba, como se detalló en la *apartado 3.10 Validación de la RNA*, ya que se está haciendo uso del algoritmo bayesiano. En otros casos, de igual forma el criterio de validación no afecta para nada al entrenamiento, llega a ser una medida extra del rendimiento de la RNA, una vez concluido el entrenamiento.

En la Tabla 9-4 menciona que el MSE para el entrenamiento es, 0.00000411 y para el testeo es, 0,00356, a partir de estos resultados cuantitativos se dice que el error existente entre los valores simulados o teóricos frente a las cifras predichas es mínimo, ya que se acercan a cero en las dos fases realizadas. La RNA tiene un desempeño óptimo.

Con respecto al Gráfico 1-4, se observan dos líneas, una azul que corresponde al patrón que sigue la RNA a lo largo del entrenamiento y una línea roja que marca el comportamiento de la fase de la prueba, mientras estas líneas estén más cercanas la una de la otra, se menciona que la red alcanza altos niveles de estimación de variables.

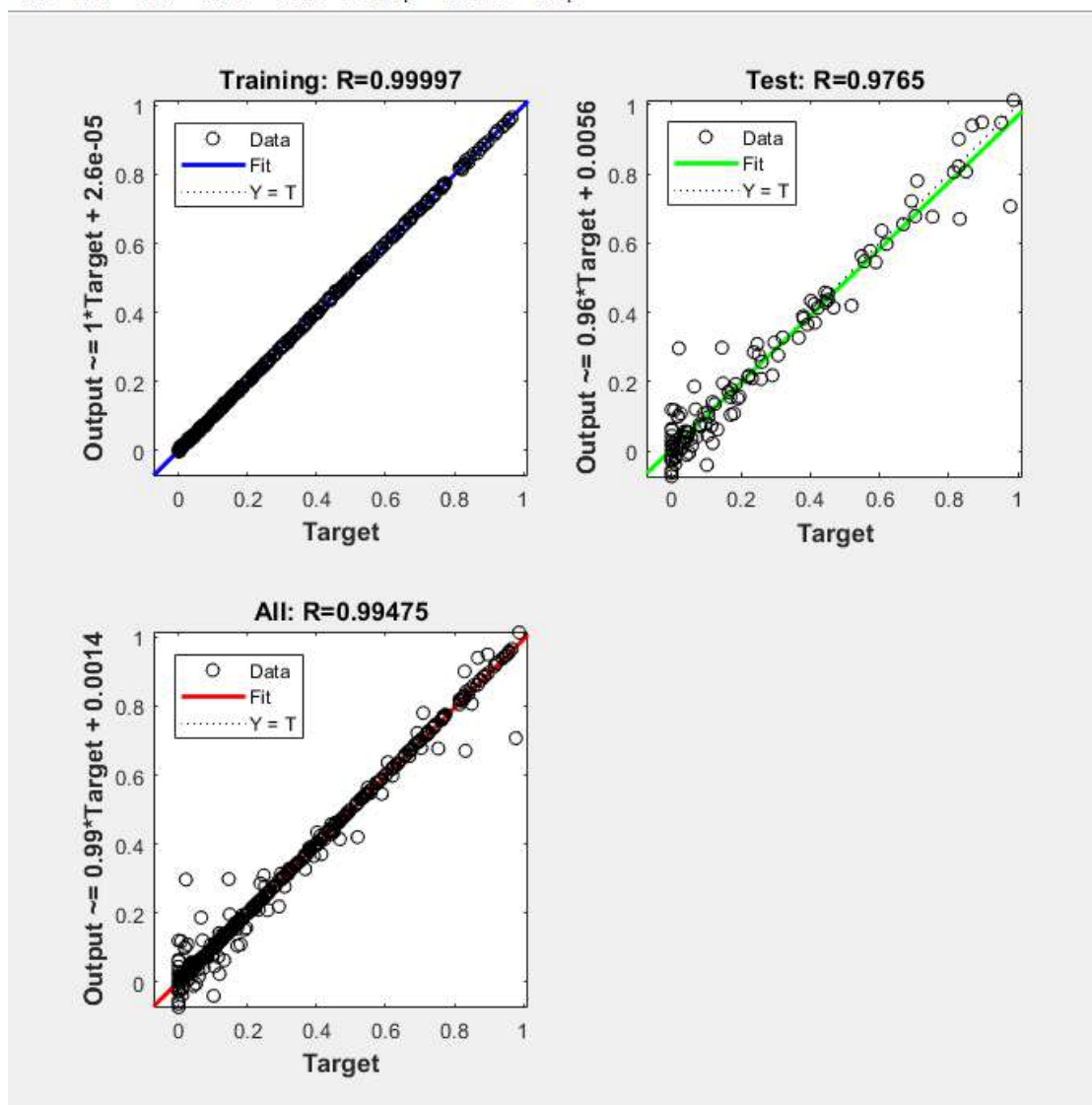


Gráfico 2-4. Indicador R, en el entrenamiento y prueba de la RNA

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

La determinación del coeficiente R, ayuda a recalcar, en este caso la buena predicción que logró la RNA para el proceso de producción de biodiesel a partir de aceites no comestibles, ya que los valores de R para el entrenamiento fueron de 0.99, para el testeo 0.97 y en general se obtiene un 0.99. Este concepto califica la correlación que han tenido las salidas esperadas y las salidas resultantes, recordar que mientras R se acerca a 1 la relación es muy próxima y mientras es 0 la relación es aleatoria, si se analiza detenidamente los resultados, todas las cantidades son cercanas a 1.

4.8.2. Codificación de la RNA diseñada en MATLAB

La RNA se ejecuta con la ayuda de varios comandos, los scripts para llevar a cabo el entrenamiento y la validación, lo contienen los *Anexos E y F*, respectivamente. En ellos se incluyen códigos para cumplir ciertas tareas:

- Entrada de la base de datos
- Creación de una matriz para la base de datos
- Agrupación de valores de entrada y de salida
- Formulación de la RNA
- Asignación de los valores máximos y mínimos de las variables de entrada
- Cálculo para transformar los datos de entrada que ingresaron normalizados.
- Agrupación de los valores predichos
- Agrupación de los valores reales
- Gráfico de comprobación de resultados

4.9. Gráficos que relacionan las salidas predichas y las salidas simuladas

El diseño de la RNA consistió en ingresar una lista de 100 datos iniciales para que la red entrene y aprenda, garantizando mayor seguridad en los resultados, consecuentemente se decidió por alimentar al sistema con una base de datos externa independiente a aquella manipulada en la etapa del entrenamiento, con el fin de verificar el nivel de aprendizaje, y con ello el desenvolvimiento de la RNA y la exactitud que posee al pronosticar un resultado.

4.9.1.1. Interpretación gráfica de los resultados obtenidos en la RNA en la fase de diseño y entrenamiento

El análisis gráfico iniciará con los resultados generados en la etapa de la creación y entrenamiento de la RNA. Se interpretará una sola salida, la más relevante, el contenido de biodiesel (fracción molar de M-O) y los análisis de las restantes salidas serán especificados en los *Anexos G, H, I, J, K*.

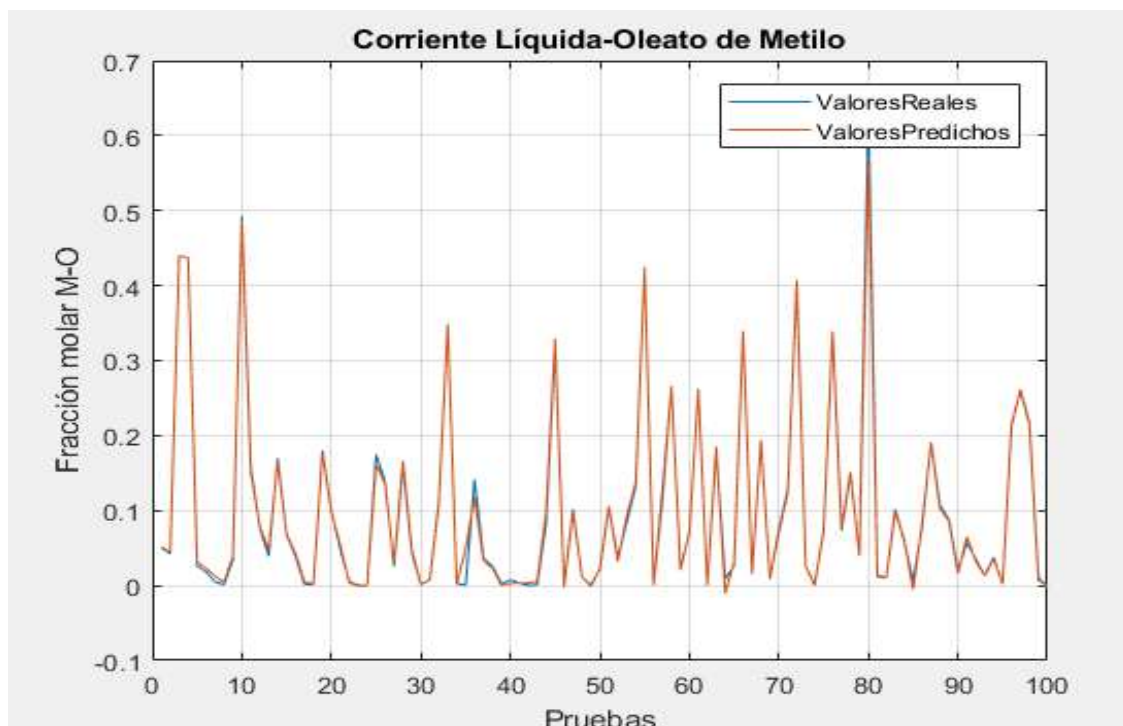


Gráfico 3-4. Fracción molar M-O real vs la estimada en la fase de diseño y entrenamiento de la RNA

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de M-O, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0.00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA.

4.9.1.2. Interpretación gráfica de los resultados obtenidos en la RNA en la fase de validación externa

La validación externa de la RNA, es una práctica ineludible para afirmar que tan exactas pueden ser las respuestas que se adquieren a partir de la red construida, la base de datos estará compuesta por cuatro entradas y seis salidas, que se asemejan a las variables utilizadas en el entrenamiento, así la red será capaz de responder, después de haber asimilado por completo, el comportamiento del sistema que engloba una reacción no catalítica a partir de FFA.

A continuación se expone en la Tabla 10-4, 11-4 y 12-4 los datos de las salidas predichas y las salidas reales. Adicional se calcula el error porcentual entre estas dos variables, para poder ser precisos en la argumentación referente a la relación que poseen las dos curvas.

Tabla 10-4. Datos reales vs predichos provenientes de la corriente líquida dentro de la validación de la RNA

# DATOS	VALOR REAL (OM-XM-O)	VALOR PREDICHO (OM-XM-O)	ERROR (%)	VALOR REAL (OM-Xm)	VALOR PREDICHO (OM-Xm)	ERROR (%)
1	0,0004	0,04293882	10634,7051	0,001	0,026487907	2548,79067
2	0,1759	0,176968447	0,6074172	0,0302	0,035287725	16,8467723
3	0,7817	0,758127484	3,01554508	0,0971	0,127359914	31,1636606
4	0,0794	0,223538686	181,534869	0,0045	-0,029926026	765,02281
5	0,0095	-0,023397817	346,292809	0,057	0,16022781	181,101421
6	0,0835	0,071147704	14,7931687	0,0833	0,106809132	28,2222477
7	0,0683	0,146660798	114,730305	8,37E-05	0,000476267	469,017318
8	0,4306	0,117636777	72,6807298	0,0022	-0,003775805	271,627486
9	0,2101	0,19539519	6,99895758	0,1054	0,127027294	20,519254
10	0,2567	0,239790366	6,58731359	0,0768	0,069931868	8,94288015
11	0,0356	0,001366445	96,1616707	0,2235	0,260010215	16,3356666
12	0,0297	0,013555481	54,3586498	0,0138	0,029480487	113,626719
13	0,0006	-0,036674893	6212,48222	0,0025	0,064874753	2494,99011
14	0,0231	0,026027984	12,6752554	0,0289	0,082478619	185,393147
15	0,0289	0,044725932	54,7610107	0,0079	0,029397092	272,115085
16	0,062	0,053671718	13,4327128	0,0865	0,120973253	39,8534712
17	0,2685	0,245265689	8,65337465	0,0079	0,005566126	29,5427036
18	0,7818	0,755111987	3,41366248	0,1607	0,179917754	11,9587763
19	0,0136	-0,00193176	114,204121	0,2417	0,251555741	4,07767532
20	0,0169	-0,00872519	151,628342	0,0022	-0,007296261	431,648224
21	0,0584	0,060195462	3,07442112	0,028	0,038400017	37,1429181
22	0,7432	0,692077862	6,87865147	0,0655	0,104995315	60,2981905
23	0,1931	0,191202767	0,98251297	0,023	0,025233097	9,70911904
24	0,000001	-0,015979469	1598046,94	0,000001	0,040193311	4019231,14
25	0,0948	0,080294489	15,3011718	0,317	0,348546161	9,95147041
26	0,1103	0,082548559	25,1599649	0,3307	0,392596424	18,7167897
27	0,005	-0,054387382	1187,74764	0,0001	-0,0099653	10065,3004
28	0,000001	-0,08307496	8307595,98	0,000001	0,006363498	636249,798
29	0,0001	0,085560439	85460,4387	0,0683	0,12875797	88,5182572
30	0,1692	0,169400313	0,11838824	0,2499	0,261519786	4,6497742
	Error promedio (%)		54,501876	Error promedio (%)		98,3741262

*Las cantidades que han sido resaltadas, representan datos atípicos que no fueron tomados en cuenta para el cálculo del error porcentual promedio.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

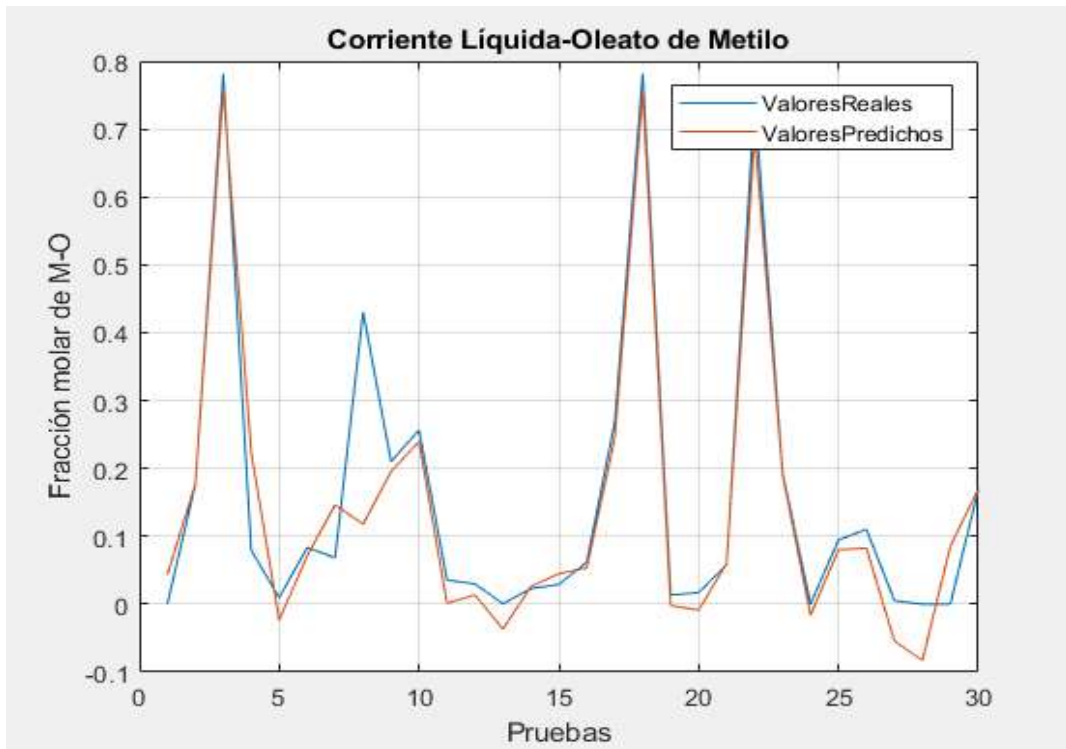


Gráfico 4-4. Fracción molar de M-O de la corriente líquida, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

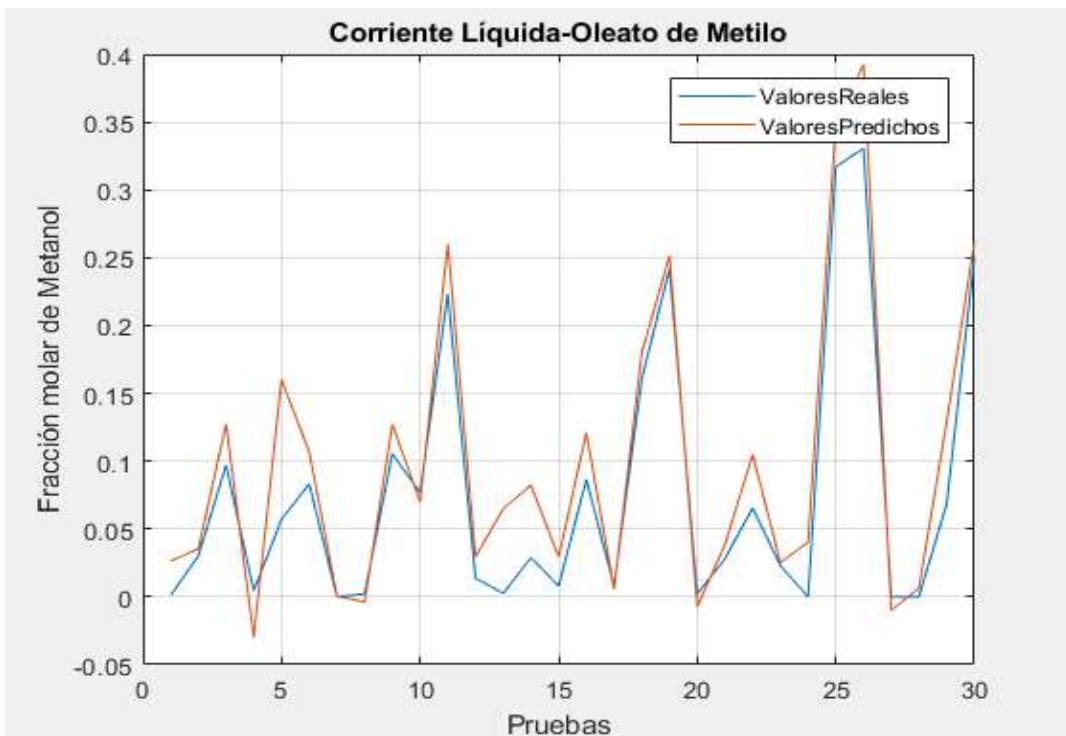


Gráfico 5-4. Fracción molar de metanol de la corriente líquida, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 11-4. Datos reales vs predichos provenientes de la corriente líquida dentro de la validación de la RNA

# DATOS	VALOR REAL (OM-X000)	VALOR PREDICHO (OM-X000)	ERROR (%)	VALOR REAL (OM-XLLL)	VALOR PREDICHO (OM-XLLL)	ERROR (%)
1	0,5491	0,56162389	2,28080322	0,2733	0,278946726	2,06612735
2	0,2036	0,24794795	21,78190245	0,1013	0,121490107	19,9310043
3	0,0087	0,2241566	2476,512601	0,0043	0,104302262	2325,63399
4	3,19E-08	0,39926633	1251618475	3,52E-08	0,194847259	553543249
5	0,4498	0,25553268	43,18971015	0,2238	0,126722642	43,3768355
6	0,4477	0,36921367	17,5310092	0,2228	0,187718319	15,7458174
7	0,486	0,39872819	17,9571619	0,2419	0,198897933	17,7767951
8	0,296	0,59297425	100,3291378	0,1473	0,291070933	97,6041636
9	0,0063	-0,12815007	2134,128144	0,0031	-0,059297854	2012,834
10	0,1862	0,19496798	4,708906417	0,0926	0,09710194	4,8617063
11	0,0652	0,06699097	2,746892475	0,0324	0,033433867	3,19094685
12	0,4482	0,43746576	2,394966312	0,2231	0,215242442	3,52198921
13	0,5543	0,71612228	29,19398944	0,2758	0,342056186	24,0232726
14	0,5245	0,46800373	10,7714529	0,261	0,233065567	10,7028479
15	0,533	0,47534928	10,81627062	0,2653	0,238838145	9,97431397
16	0,0213	-0,04403489	306,7365608	0,0106	-0,021058007	298,660444
17	0,1244	0,16131942	29,67799244	0,0619	0,075255852	21,5764982
18	0,0078	0,22801978	2823,330571	0,0039	0,105975649	2617,32434
19	0,1623	0,03238725	80,04482474	0,0808	0,027986602	65,3631164
20	0,4609	0,51099658	10,8692941	0,2293	0,253652743	10,6204722
21	0,1521	0,10915296	28,23605848	0,0757	0,054811137	27,5942713
22	0,0168	0,12225916	627,7331132	0,0083	0,058755164	607,893542
23	0,2119	0,256433	21,01604612	0,1054	0,126643134	20,1547765
24	0,000001	0,45508818	45508718,47	0,000001	0,226427346	22642634,6
25	0,0151	-0,04609722	405,2795998	0,0075	-0,017324711	330,996151
26	0,0816	-0,02396467	129,3684674	0,0406	-0,005927147	114,598884
27	0,5535	0,39783138	28,12441213	0,2755	0,207616236	24,6402048
28	0,000001	0,39004443	39004343,01	0,000001	0,205798083	20579708,3
29	2,82E-07	0,16128898	57194574,1	3,12E-07	0,077223056	24750879,5
30	0,0009	-0,01992206	2313,562609	0,0004	-0,007264647	1916,16171
	Error promedio (%)		87,76311691	Error promedio (%)		80,6760991

*Las cantidades que han sido resaltadas, representan datos atípicos que no fueron tomados en cuenta para el cálculo del error porcentual promedio.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

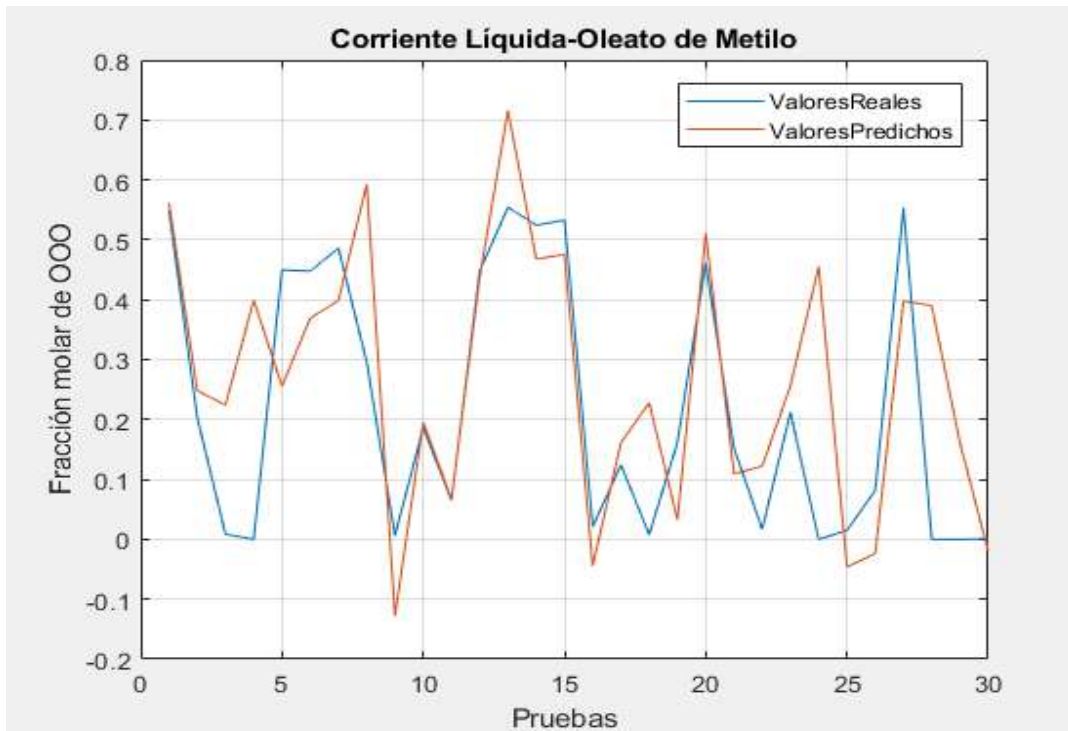


Gráfico 6-4. Fracción molar de OOO de la corriente líquida, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

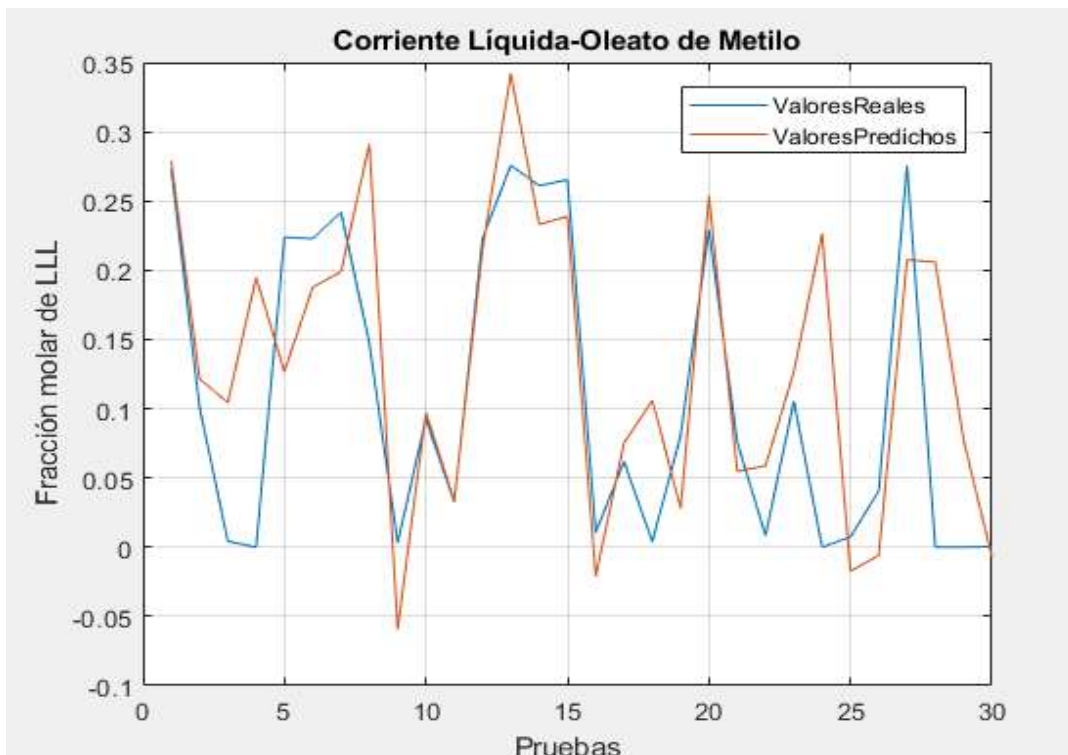


Gráfico 7-4. Fracción molar de LLL de la corriente líquida, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Tabla 12-4. Datos reales vs predichos provenientes de la corriente gaseosa dentro de la validación de la RNA

# DATOS	VALOR REAL (MA-Xm)	VALOR PREDICHO (MA-Xm)	ERROR (%)	VALOR REAL (MA-Xa)	VALOR PREDICHO (MA-Xa)	ERROR (%)
1	0,8861	0,799532954	9,76944433	0,1138	0,206692781	81,6281027
2	0,5512	0,56949643	3,31938128	0,4486	0,428130984	4,562865775
3	0,7131	0,737345635	3,40003302	0,2865	0,26013937	9,200917884
4	0,02	0,030242896	51,2144812	0,9756	0,981103023	0,564065531
5	0,5714	0,562277338	1,59654567	0,4285	0,430173064	0,390446608
6	0,878	0,861392211	1,89154773	0,1219	0,134829313	10,60649149
7	0,0094	0,031102411	230,876718	0,9901	0,963522909	2,684283554
8	0,1378	0,153334963	11,2735582	0,8608	0,858863609	0,224952516
9	0,4248	0,423990168	0,19063846	0,575	0,563811732	1,945785707
10	0,7412	0,734111177	0,9563982	0,2586	0,266392266	3,013250683
11	0,5225	0,486800999	6,83234475	0,4774	0,516152784	8,117466256
12	0,2933	0,300100711	2,31868773	0,7066	0,6979684	1,221568104
13	0,9485	0,905163923	4,56890638	0,0514	0,086405609	68,10429762
14	0,9306	0,881687822	5,25598298	0,0692	0,111317729	60,86376979
15	0,9867	0,937318036	5,00475971	0,013	0,058216922	347,8224802
16	0,3713	0,401047995	8,01184894	0,6286	0,593103901	5,646849931
17	0,0382	0,023340071	38,9003381	0,9616	0,981358763	2,054779833
18	0,9418	0,937386466	0,4686275	0,0579	0,059139862	2,141384827
19	0,9858	1,003043971	1,74923624	0,0141	-0,003927431	127,8541194
20	0,2523	0,236212067	6,37650945	0,7475	0,768378517	2,793112647
21	0,5569	0,584780489	5,00637251	0,4429	0,412634228	6,833545225
22	0,5574	0,594543306	6,66367175	0,4422	0,402040121	9,081836132
23	0,2682	0,279927615	4,37271261	0,7316	0,721538923	1,375215615
24	0,4584	0,473983938	3,39963741	0,5357	0,524466159	2,09703955
25	0,991	1,01389376	2,31016747	0,0089	-0,023615152	365,3387884
26	0,9332	0,969178362	3,8553753	0,0667	0,024564885	63,17108665
27	0,6554	0,651612813	0,57784357	0,3433	0,334806506	2,474073351
28	0,7552	0,765585961	1,37525965	0,238	0,215881868	9,293332882
29	0,1519	0,178748522	17,6751296	0,8291	0,809112665	2,410726657
30	0,9043	0,9047547	0,05028202	0,0956	0,087428124	8,547987624
	Error promedio (%)		14,6420813	Error promedio (%)		40,40215411

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

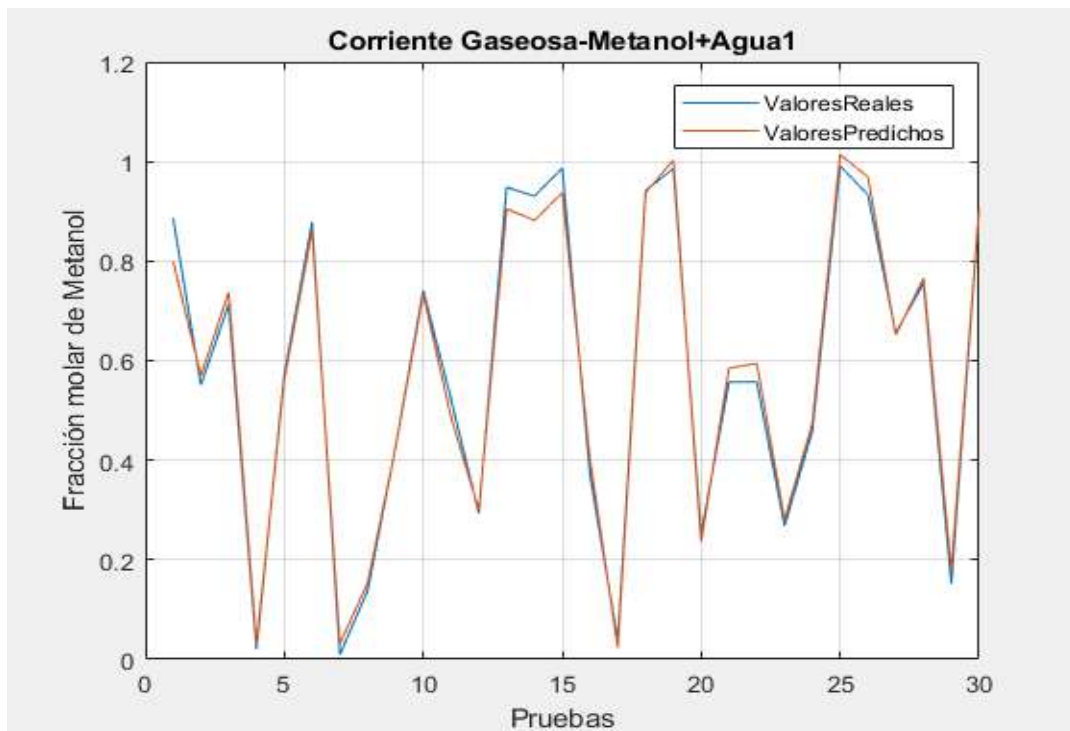


Gráfico 8-4. Fracción molar de metanol de la corriente gaseosa, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

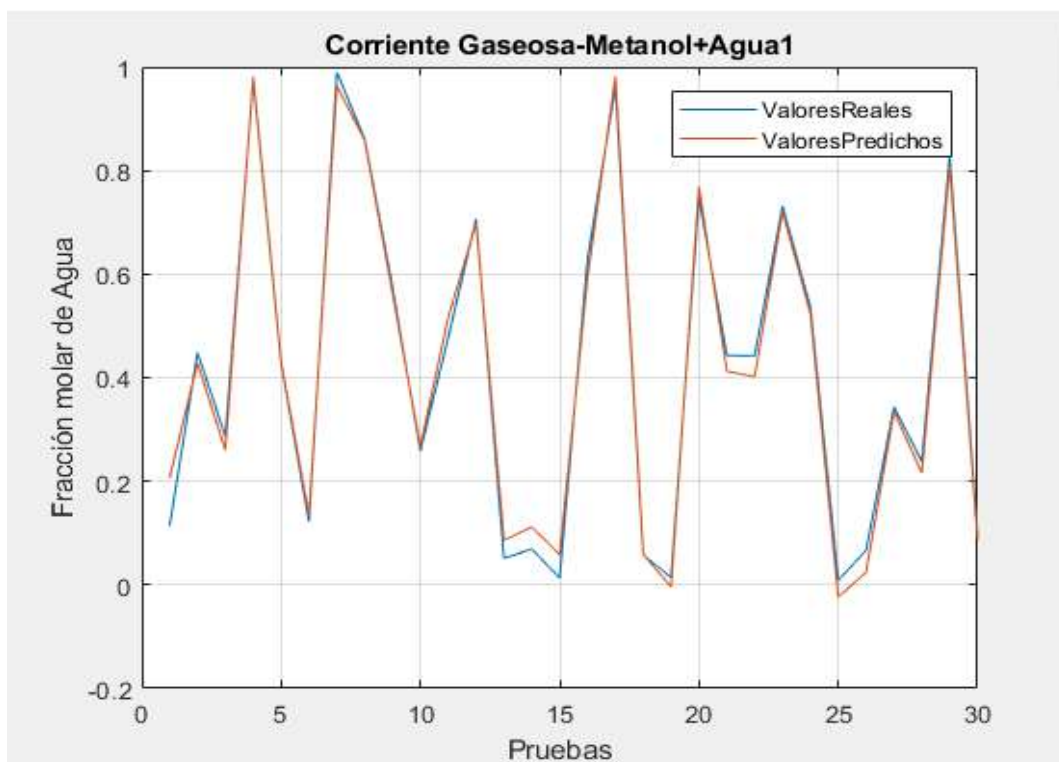


Gráfico 9-4. Fracción molar de agua de la corriente gaseosa, en la validación externa

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Las gráficas que comparan los valores reales con los valores pronosticados por la RNA provenientes de la corriente oleato de metilo, señalan que existe una diferencia entre estas salidas, ya que las dos curvas no coinciden en su ubicación en el plano a pesar de corresponder a la misma variable de interés.

Existe menos concordancia entre las salidas simuladas en DWSIM y las salidas arrojadas por la RNA resultantes de la corriente líquida, los errores porcentuales son elevados en este caso, tanto así que la fracción molar de metanol alcanzó el 98% de error. Adicional la cantidad de cifras atípicas es significativa, de forma contraria ocurre con las salidas de la corriente gaseosa, donde se percibe un menor error porcentual y la inexistencia de valores atípicos.

Por estas razones no se puede elaborar un criterio preciso a cerca de la viabilidad de la RNA, debido a que ciertos errores porcentuales promedios son altos. Se recurre entonces a la elaboración de un análisis estadístico que juzgue el aprendizaje de la misma y certifique el grado de confiabilidad que puede aportar en la predicción de los resultados dentro del proceso de obtención de biodiesel.

4.10. Resultados del Análisis estadístico

En los resultados obtenidos por la RNA en la etapa de la validación, empleando la base de datos externa, se palpó que las magnitudes de los términos correspondientes a los errores porcentuales promedio de las cuatro primeras salidas de la corriente líquida, oleato de metilo, fueron desmesuradamente altas, además se asegura la existencia de datos atípicos. Es por ello que se requiere un análisis estadístico para determinar la funcionalidad y eficacia de la RNA.

Se emplea la herramienta Statgraphics, para contrastar cada una de las variables reales y predichas de las seis salidas importantes, haciendo uso de la muestra aplicada a la validación.

4.10.1. Prueba ANOVA

Tabla 13-4 ANOVA

Fuente	Suma de cuadrados	G1	Cuadrado medio	Razón-F	Valor-P
Fracción molar de (M-O) de la corriente oleato de metilo					
Entre grupos	0,00386988	1	0,00386988	0,08	0,7837
Intra grupos	2,9522	58	0,0509		
Total (Corr.)	2,95607	59			
Fracción molar de (m) de la corriente oleato de metilo					
Entre grupos	0,00721209	1	0,00721209	0,66	0,4196
Intra grupos	0,632883	58	0,0109118		
Total (Corr.)	0,640095	59			
Fracción molar de (OOO) de la corriente oleato de metilo					
Entre grupos	0,0328439	1	0,0328439	0,69	0,4082
Intra grupos	2,74497	58	0,0473271		
Total (Corr.)	2,77782	59			
Fracción molar de (LLL) de la corriente oleato de metilo					
Entre grupos	0,00828621	1	0,00828621	0,72	0,3999
Intra grupos	0,668125	58	0,0115194		
Total (Corr.)	0,676411	59			
Fracción molar de (m) de la corriente metanol+agua1					
Entre grupos	2,61662E-7	1	2,61662E-7	0,00	0,9987
Intra grupos	5,97879	58	0,103083		
Total (Corr.)	5,97879	59			
Fracción molar de (a) de la corriente metanol+agua1					
Entre grupos	0,0000417794	1	0,0000417794	0,00	0,9841
Intra grupos	6,01191	58	0,103654		
Total (Corr.)	6,01196	59			

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

El estudio de la varianza ANOVA, tiene por objeto disociar la muestra en dos partes, de tal forma que se detalle la variabilidad que poseen los datos entre grupos y dentro de los mismos, permitiendo un análisis más profundo. El valor-p (magnitud de probabilidad en la prueba de significación estadística) de la razón-f (relación de varianzas, entre grupos y dentro de los grupos) en este caso es mayor a 0,05 en todos los casos evaluados de las variables dependientes, por ende se dice que no existe una diferencia significativa entre las medias de las muestras, con un nivel del 95% de seguridad, es decir con este nivel de confianza los datos estimados por la RNA son iguales a los datos fijos simulados en DWSIM.

También se puede aludir que este resultado significa que la distinción existente entre grupos es menor a la que existe dentro de los grupos, por ende la hipótesis nula (las medias de las muestras son iguales) describe el verdadero comportamiento de las variables.

Esto afirma que el funcionamiento de la RNA está en perfecto estado y puede generar resultados efectivos al ingresar una base de datos indistinta dentro de los parámetros de entrada establecidos, para la precisa predicción de las fracciones molares que arrojaría el sistema de producción de biodiesel.

4.10.2. Interpretación de los gráficos de medias

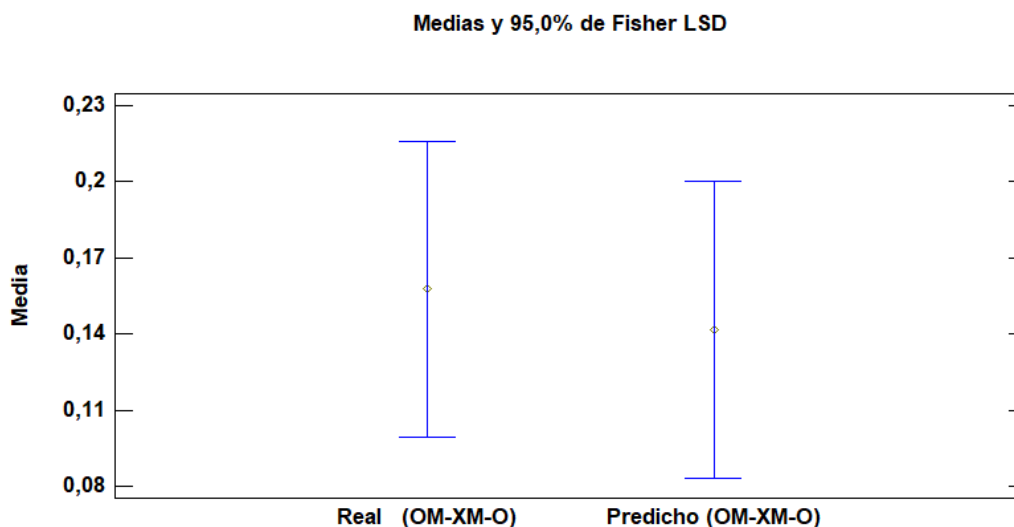


Gráfico 10-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM-X_{M-O}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

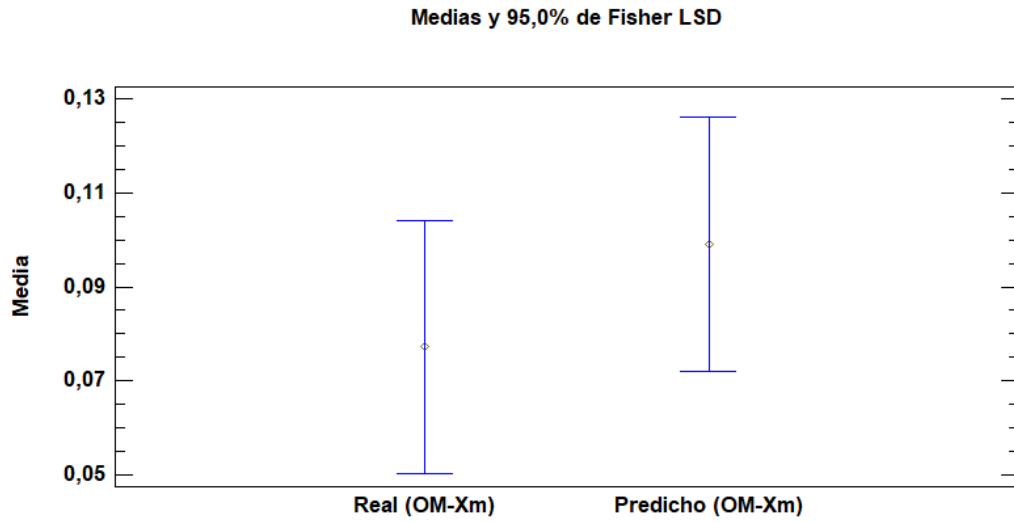


Gráfico 11-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de $OM-X_m$

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

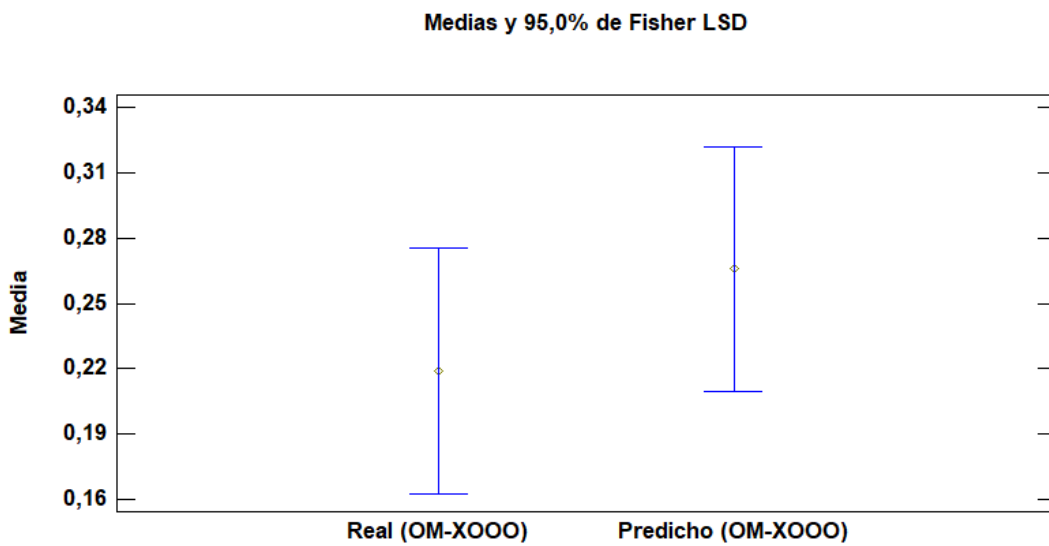


Gráfico 12-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de $OM-X_{000}$

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

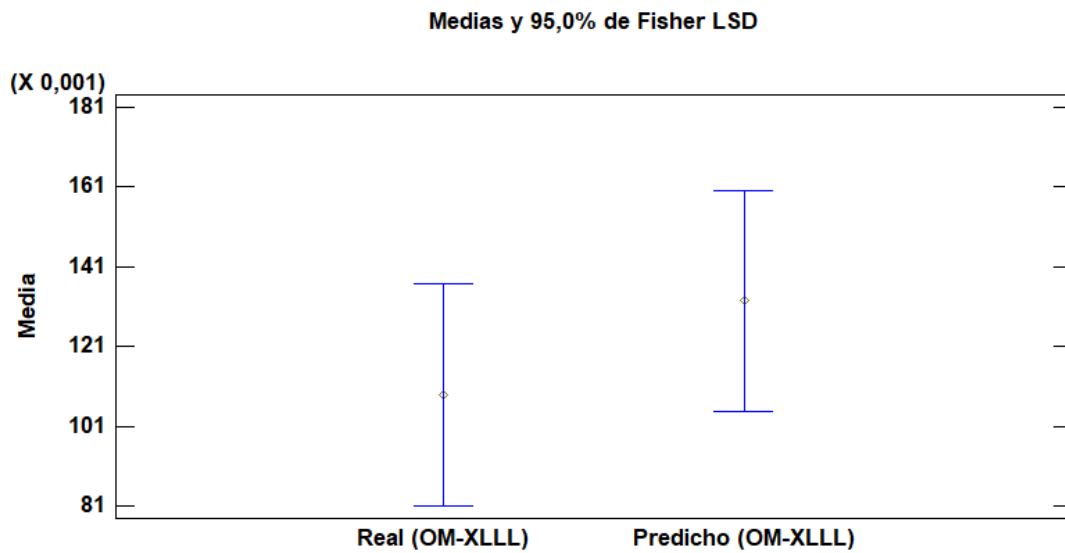


Gráfico 13-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de OM-X_LL

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

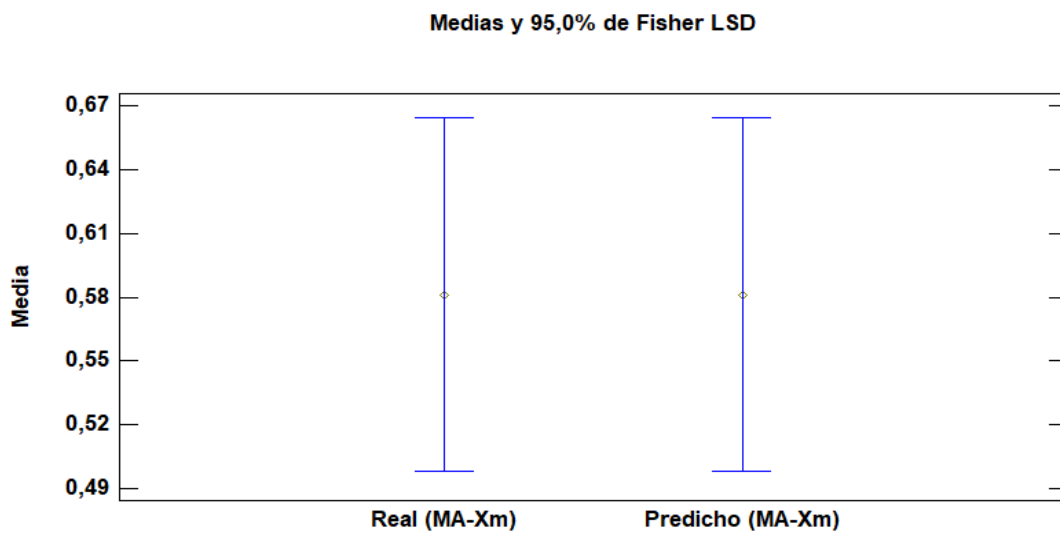


Gráfico 14-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de MA-X_m

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

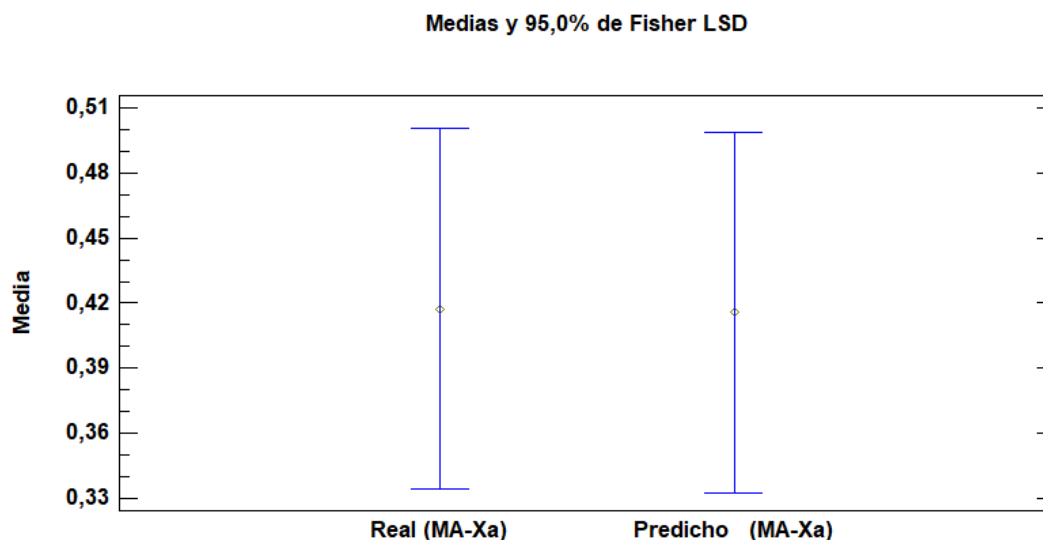


Gráfico 15-4. Gráfico de medias de las muestras reales y predichas de MA-X_a

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Esta representación gráfica demuestra la semejanza entre las medias de dos columnas de datos, correspondientes a los valores reales o simulados y los valores estimados por la RNA. Alrededor del plano se visualizan los intervalos que posee cada muestra, en este caso se empleó el intervalo *LSD de Fisher (Least Significant Difference)*, el cual le atribuye a la comparación entre dos muestras un error del 5%.

Se dice que las medias de los distintos pares de datos son significativamente diferentes si los intervalos no se solapan en dirección vertical, además el rombo que se encuentra en la mitad de las rectas señala la ubicación de la media de cada columna de datos.

Relacionando todas las pruebas realizadas con anterioridad, el error porcentual promedio, y el valor-p de ANOVA, se puede mencionar que hay una concordancia con los resultados, al ser las medias de las salidas de la corriente de oleato de metilo, ligeramente diferentes al no lograr traslapar sus intervalos en su totalidad.

Por otro lado la gráfica de medias corrobora que las salidas predichas y reales de la corriente de metano+agua son iguales, debido a que sus intervalos logran solaparse entre sí con mucha más precisión, esto explica el valor-p tan alto (0,99 y 0,98 de las fracciones molares metanol y agua respectivamente).

4.10.3. Interpretación de los gráficos de caja y bigotes

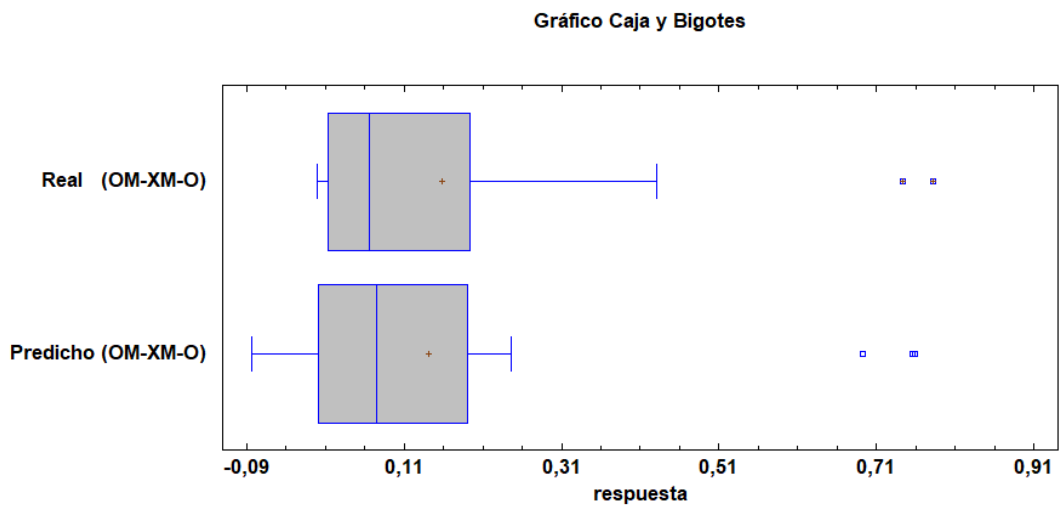


Gráfico 16-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de $OM-X_{M-O}$

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

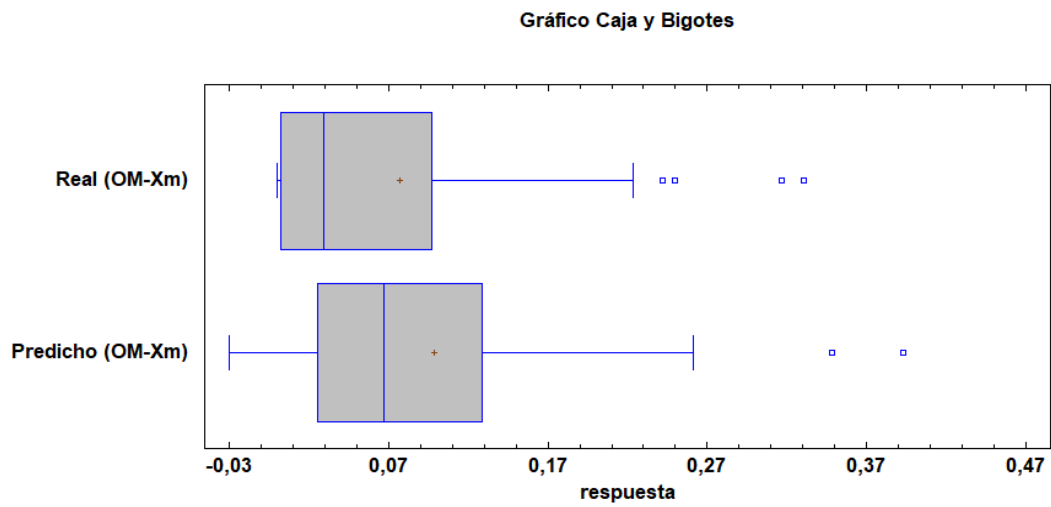


Gráfico 17-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de $OM-X_m$

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

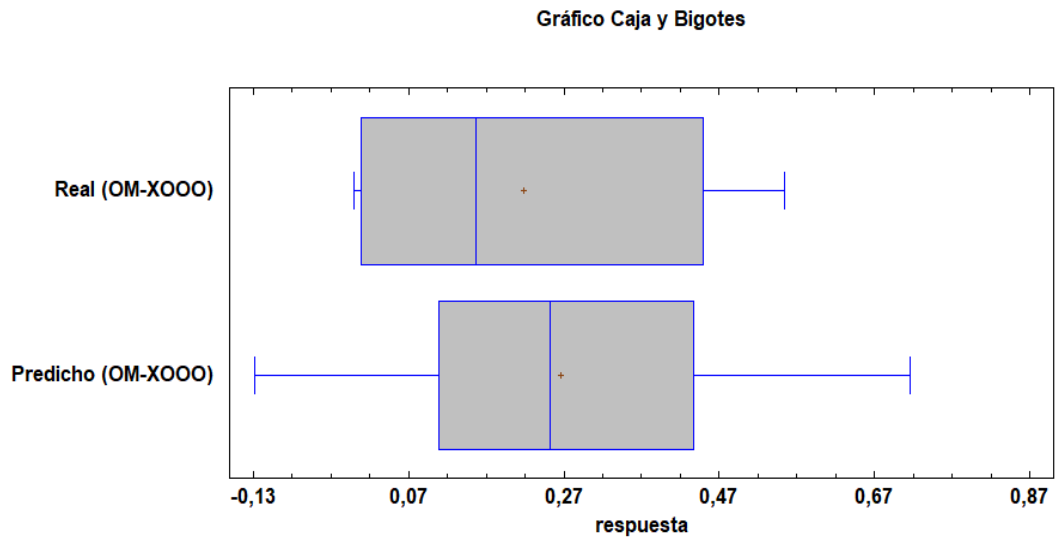


Gráfico 18-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM-X₀₀₀

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

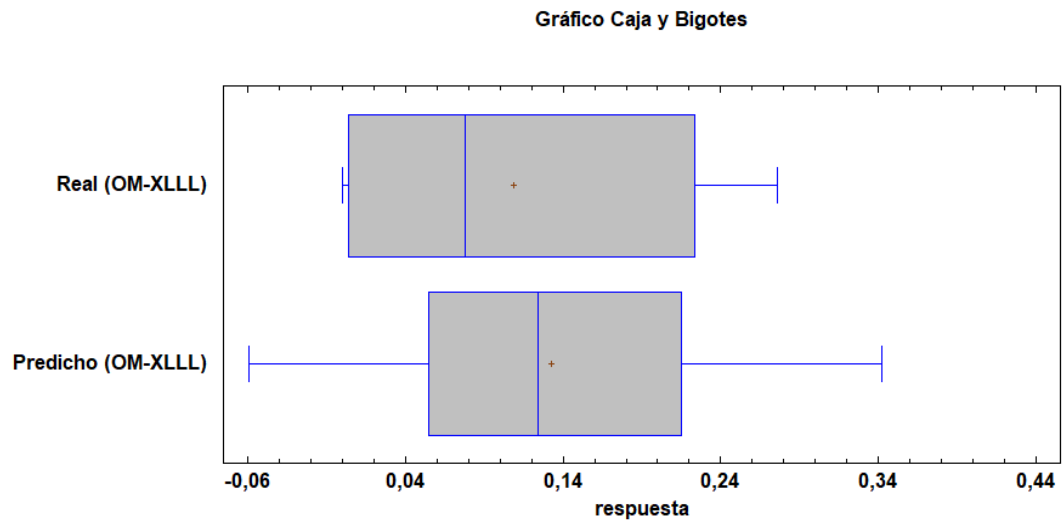


Gráfico 19-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de OM-X_{LLL}

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

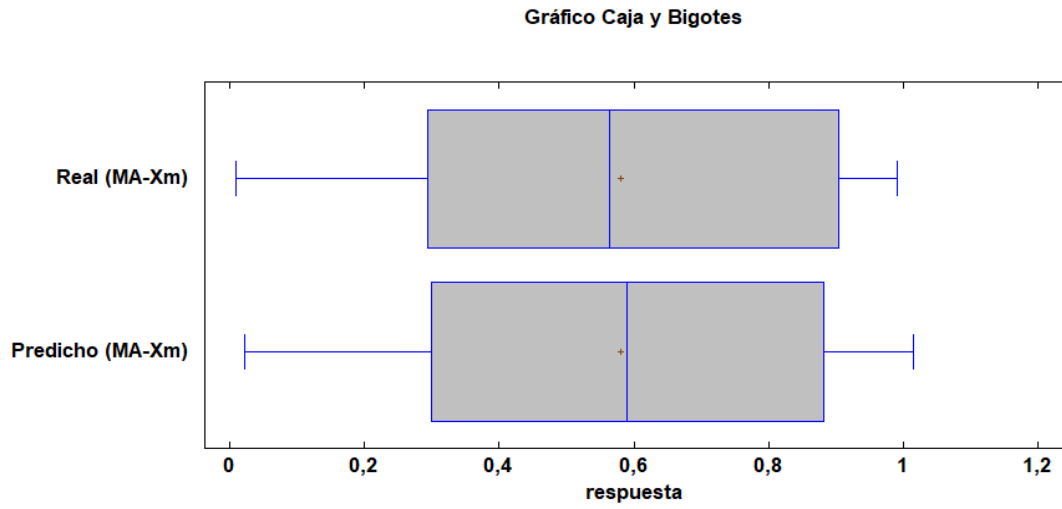


Gráfico 20-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de MA- X_m

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

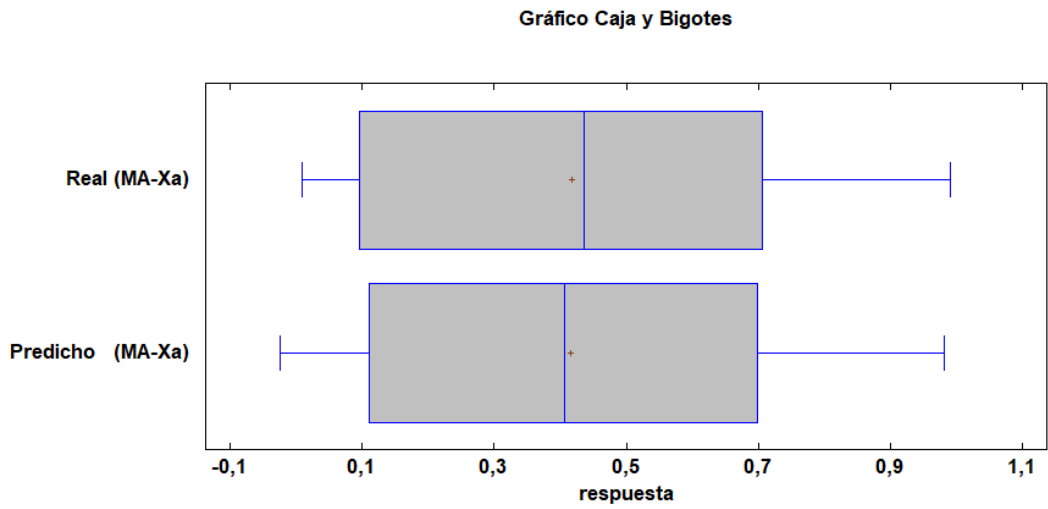


Gráfico 21-4. Gráfico de caja y bigotes de las muestras reales y predichas de MA- X_a

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

El gráfico de caja y bigotes, es una herramienta útil para distinguir el comportamiento de las muestras, ya que la caja abarca el 50% de los datos contenidos en cada conjunto, además la línea vertical que parte la caja, ubica a la mediana de los valores y el signo más (+) la fijación de la media. Los bigotes se extienden desde los cuartiles plasmados hasta las observaciones mínimas y máximas de las cifras, si existen valores atípicos los bigotes serán limitados por el punto más alejado que no se lo considere como atípico.

Los datos atípicos se clasifican en dependencia de si estos están alejados o muy alejados, de tal manera que si se encuentra un valor 1,5 veces el rango intercuartílico por arriba o por debajo de la caja se lo clasifica como alejado y es simbolizado por un pequeño cuadrado. Si se sitúa 3 veces el rango intercuartílico por arriba o por debajo de la caja es un dato muy alejado; se lo denota con un pequeño cuadrado con un signo más en su interior. El rango intercuartílico generalmente coincide con el ancho de la caja.

Ahora con lo explicado se concibe que el Gráfico 16-4 es característico de una distribución sesgada al contener 3 datos alejados y 3 datos muy alejados, estas magnitudes resultan aberrantes dentro del sistema. En el caso del gráfico 17-4 es significativo que existan 6 puntos alejados, sin embargo no existen datos muy alejados. Los restantes gráficos que conforman las salidas de la corriente, oleato de metilo, no poseen más valores alejados, ni muy alejados, pero se puede establecer que existe cierta aleatoriedad en los datos por el dimensionamiento que tiene la caja y los bigotes de cada una de ellas.

Todo lo opuesto se puede dictaminar con respecto a las gráficas que contienen las muestras de las salidas gaseosas (metanol+agua¹), en donde se dice que estas poseen una conducta razonablemente simétrica al visualizar casi la misma longitud de los bigotes, es decir se aproximan los límites inferiores y superiores de los datos simulados con los predichos. El tamaño de la caja es bastante parecido, y la similitud entre la medianas y las medias de las muestras son visibles, al estar fijadas prácticamente en el centro de la caja.

CONCLUSIONES

Se validó la simulación realizada en el software libre DWSIM, del proceso de esterificación no catalítica de FFA que componen el aceite karanja. La presente investigación se realizó en torno al estudio planteado por Hussain y Kumar (2018, pp.629-640), publicado en la revista; *International Journal of Green Energy*. Mediante los valores de respuesta fijados en el artículo científico se compararon los resultados provenientes de la simulación, de lo cual se obtuvieron cantidades mínimas %E, corroborando la adecuada funcionalidad y el alto nivel de precisión que posee el sistema al hallar resultados.

Se alcanzó gracias a la simulación llevada a cabo, una conversión del ácido oleico del 99,85% para producir una cantidad de 1,21 kmol/h de oleato de metilo (biodiesel). Del metanol residual de la reacción, fue posible recolectar en estado líquido, el porcentaje de 0,245 y en estado gaseoso el 99,75 %.

La herramienta del programa DWSIM, análisis de sensibilidad, facilitó el hallazgo de las diferentes variables independientes del proceso, las mismas fueron: la fracción molar de agua de la corriente Alimentación 1 (A1- X_a), la fracción molar de ácido oleico de la corriente Aceite (Ac- X_o), el porcentaje de conversión de la reacción química (%C) y la caída de presión en el Reactor (-p). Las entradas independientes influyeron significativamente en las variables dependientes que se asignaron de acuerdo a la ponderación que especifica el artículo científico del cual se basa el presente proyecto de titulación y son las siguientes: la fracción molar de oleato de metilo (OM-X_{M-O}), fracción molar de metanol (OM-X_m), fracción molar de trioleína (OM-X_{OOO}) y la fracción molar de trilinoleína (OM-X_{LLL}) de la corriente Oleato de Metilo, la fracción molar de metanol (MA-X_m) y la fracción molar de agua (MA- X_a) de la corriente Metanol+Agua 1. Con estos parámetros se construyó la base de datos que alimentó a la RNA.

Se diseñó una red neuronal artificial mediante el sistema de cómputo numérico MATLAB, conjuntamente con una base de datos que resultó del procesamiento de la simulación plasmada en DWSIM. La RNA fue adaptada para la predicción de las fracciones molares más relevantes contenidas en la corriente líquida y en la corriente gaseosa del proceso de esterificación no catalítica de FFA que componen el aceite karanja. La red fue entrenada con el algoritmo *bayesian regularization*, y su estructura consta de 30 neuronas ocultas que permitieron un satisfactorio funcionamiento al percibir un MSE de 0.00000411 y un R de 0,99.

La RNA está dotada de cuatro entradas que son; la fracción molar de agua de la corriente Alimentación 1 (A1- X_a), la fracción molar de ácido oleico de la corriente Aceite (Ac- X_o), el porcentaje de conversión de la reacción química (%C) y la caída de presión en el Reactor (-p), para de esta forma estimar seis variables de salida: la fracción molar de oleato de metilo (OM-X_{M-O}), fracción molar de metanol (OM-X_m), fracción molar de trioleína (OM-X_{OOO}) y la fracción

molar de trilinoleína ($OM-X_{LLL}$) de la corriente Oleato de Metilo, la fracción molar de metanol ($MA-X_m$) y la fracción molar de agua ($MA-X_a$) de la corriente Metanol+Agua 1.

Se corroboró la factibilidad del desenvolvimiento de la red neuronal artificial a partir de un análisis estadístico exhaustivo, contrastando los parámetros de salida reales, simulados en la multiplataforma DWSIM y los valores de salida, predichos por la RNA. Se dio a conocer que la RNA es muy precisa al pronosticar las composiciones de un proceso de obtención de biodiesel, ya que los valores comparados no resaltan una diferencia significativa con un nivel de confiabilidad del 95%.

RECOMENDACIONES

La simulación construida podría alimentarse con distintos tipos de aceites, como por ejemplo, a partir de una considerable composición de FFA hallada en aceites residuales. Sería muy interesante darle un valor agregado a aquella materia reconocida como desecho para convertirla en biodiesel y de esta forma buscar alternativas de fuentes energéticas sustentables en el país, que sean amigables con el medio ambiente.

En el momento de estructurar la base de datos para dar lugar a la creación de la RNA, es necesario estudiar los límites de operación de cada sección de la práctica de la esterificación no catalítica para que el procesamiento de datos sea mucho más exacto y brinde la menor cantidad de datos atípicos, los cuales se ha comprobado generan complicaciones en el entrenamiento, aprendizaje y validación de la red, afectando directamente a los indicadores numéricos como el MSE y el R. Esto es sinónimo de una disminución de la capacidad predictiva de la red.

Sería aconsejable adentrarse un poco más en la predicción de variables del proceso de esterificación, extendiendo el alcance de la RNA al implementar nuevos factores de entrada para el pronóstico de flujos másicos y molares, con ello se ampliaría el estudio obteniendo, no solo fracciones molares, sino que además las magnitudes de cada una de las corrientes que posibiliten el diseño y modelado de equipos para la producción de biodiesel a partir de aceites no comestibles. El empleo de la codificación creada puede beneficiar al campo industrial en gran manera, ya que se podría implementar diversos procesos químicos y optimizar los ya existentes. Esto aportaría un alto conocimiento y control de cualquier proceso, al fijar las condiciones operacionales óptimas.

Dentro de la fase del entrenamiento se requiere examinar con que algoritmo y con cuantas neuronas ocultas la RNA responde adecuadamente, sin embargo si se reentrena numerosas veces es probable que la red no procese correctamente y los valores cambien. Es por ello que cuando se obtengan los resultados y el MSE y el R sean lo más ideales posibles, se procede a cerrar el software y programar nuevamente con los parámetros correspondientes para evitar errores dentro del entrenamiento y el aprendizaje de la RNA.

En base a la RNA diseñada se puede plantear una alternativa de aprendizaje, con la innovación de una plataforma o aplicación computacional para el alumnado o para los ingenieros químicos, que dotará un mejor entendimiento de cualquier proceso químico, para hallar soluciones a muchos inconvenientes prácticos.

GLOSARIO

Aceite Karanja: Proveniente del arbusto mejor conocido como *Pongamia glabra* o *Millettia pinnata* de la familia de las leguminosas. Sus características son favorables para la producción de biodiesel, ya que el contenido de aceite en las semillas varía de 27 a 39% (Naik et al., 2008, p.355).

Ácidos Grasos Libres: Son ácidos grasos que poseen un grupo ácido pero que no están adheridos a un alcohol. Se los encuentra como impurezas, al igual que el agua, en aceites vegetales y grasas, según la Norma Mexicana 101.

Algoritmo de Retropropagación: Entrenan una red neuronal del tipo feedforward, funciona dispersando la información de las variables independientes hacia una capa oculta, la cual retorna las sensibilidades hacia atrás para así reducir el error y actualizar los pesos (Kayri, 2016, pp.3-4).

Biodiesel: Conjunto de ésteres monoalquílicos de ácidos grasos de cadena larga, derivados de lípidos, tales como aceites vegetales o grasas animales (Luque y Melero, 2012, p.2).

Esterificación: Reacción reversible, en donde cantidades equimolares de FFA y alcohol interaccionan para sintetizar cierta cantidad de éster de alquilo y agua, por vías catalíticas o no catalíticas (Hussain y Kumar, 2018, p.629).

Esterificación no Catalítica: Proceso mediante el cual se sintetiza un éster de ácido carboxílico sin la asistencia de un catalizador, generalmente se modifican las condiciones de presión, temperatura y la relación de alimentación para su obtención (Hussain y Kumar, 2018, pp.629-630).

Red Neuronal Artificial (RNA): Es una técnica de modelamiento de procesos con una alta potencialidad en sus resultados, está inspirada en el mecanismo que poseen las redes neuronales biológicas respecto a su capacidad de aprendizaje y memoria. Reconocen el proceder matemático y logran el aprendizaje de las interacciones lineales y no lineales entre las variables dependientes e independientes de un proceso planteado (Nolasco et al., 2015, pp.3-4).

Regularización Bayesiana (BR): Es un algoritmo que convierte una regresión no lineal en un problema planteado de forma estadística, se basa en el entendimiento de los parámetros en forma de probabilidades y por ende los resultados de la misma son una distribución de probabilidades (Kayri, 2016, pp.1-2).

BIBLIOGRAFÍA

BERRIOS, M., MARTÍN, M.A., CHICA, A.F. y MARTÍN, A. 2010. Study of esterification and transesterification in biodiesel production from used frying oils in a closed system. , vol. 160, pp. 473-479. DOI 10.1016/j.cej.2010.03.050.

CHAI, M., TU, Q., LU, M. y YANG, Y.J. 2014. Esterification pretreatment of free fatty acid in biodiesel production , from laboratory to industry. *Fuel Processing Technology* [en línea], vol. 125, pp. 106-113. ISSN 0378-3820. DOI 10.1016/j.fuproc.2014.03.025. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.03.025>.

FENG, W., LI, Q., LU, Q., LI, C. y WANG, B. 2021. Element-wise Bayesian regularization for fast and adaptive force reconstruction. *Journal of Sound and Vibration* [en línea], vol. 490, pp. 115713. ISSN 10958568. DOI 10.1016/j.jsv.2020.115713. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2020.115713>.

GARG, A. y JAIN, S. 2020. Process parameter optimization of biodiesel production from algal oil by response surface methodology and artificial neural networks. *Fuel* [en línea], vol. 277, no. February, pp. 118254. ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2020.118254. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118254>.

GONZÁLEZ, A.F., JIMÉNEZ, I.C., RODRÍGUEZ SUSANA, M., RESTREPO, S. y GÓMEZ, J.M. 2008. Biocombustibles de segunda generación y Biodiesel: Una mirada a la contribución de la Universidad de los Andes. *Revista de Ingeniería* [en línea], vol. 0, no. 28, pp. 70. [Consulta: 22 diciembre 2020]. ISSN 01214993. DOI 10.16924/riua.v0i28.268. Disponible en: <https://revistas.uniandes.edu.co/doi/abs/10.16924/riua.v0i28.268>.

HUSSAIN, Z. y KUMAR, R. 2018. Esterification of free fatty acids: experiments, kinetic modeling, simulation & optimization. *International Journal of Green Energy* [en línea], vol. 15, no. 11, pp. 629-640. ISSN 15435083. DOI 10.1080/15435075.2018.1525736. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15435075.2018.1525736>.

JAHIRUL, M.I., RASUL, M.G., BROWN, R.J., SENADEERA, W., HOSEN, M.A., HAQUE, R., SUVASH, C.S. y MAHLIA, T.M.I. 2020. Journal Paper of. *Renewable Energy* [en línea], ISSN 0960-1481. DOI 10.1016/j.renene.2020.12.078. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.12.078>.

KAYRI, M. 2016. Predictive abilities of Bayesian regularization and levenberg-marquardt algorithms in artificial neural networks: A comparative empirical study on social data. *Mathematical and Computational Applications*, vol. 21, no. 2. ISSN 22978747. DOI 10.3390/mca21020020.

LAMANNA, R. y GIMÓN, R. 2007. Neural predictive control by instantaneous linearization. *RIAI - Revista Iberoamericana de Automatica e Informatica Industrial* [en línea], vol. 4, no. 2, pp. 90-97. ISSN 16977920. DOI 10.1016/s1697-7912(07)70213-3. Disponible en: [http://dx.doi.org/10.1016/S1697-7912\(07\)70213-3](http://dx.doi.org/10.1016/S1697-7912(07)70213-3).

LOAIZA ROMERO, F.E. 2003. Cinética de la reacción de transesterificación del aceite de higuera en la obtención de biodiesel . [en línea], pp. 129. Disponible en: <http://www.bdigital.unal.edu.co/987/>.

LOU, W.Y., GUO, Q., CHEN, W.J., ZONG, M.H., WU, H. y SMITH, T.J. 2012. A highly active bagasse-derived solid acid catalyst with properties suitable for production of biodiesel. *ChemSusChem*, vol. 5, no. 8, pp. 1533-1541. ISSN 1864564X. DOI 10.1002/cssc.201100811.

LUQUE, R. y MELERO, J.A. 2012. Introduction to advanced biodiesel production. *Advances in Biodiesel Production* [en línea]. S.l.: Elsevier, pp. 1-9. [Consulta: 13 diciembre 2020]. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780857091178500010>.

MEDEIROS, D. 2021. DWSIM - El simulador de procesos químicos de código abierto - Solo otro sitio de WordPress. [en línea]. [Consulta: 13 enero 2021]. Disponible en: <https://dwsim.inforside.com.br/new/>.

MINAMI, E. y SAKA, S. 2006. Kinetics of hydrolysis and methyl esterification for biodiesel production in two-step supercritical methanol process. , vol. 85, pp. 2479-2483. DOI 10.1016/j.fuel.2006.04.017.

MOFIJUR, M., SIDDIKI, S.Y.A., SHUVHO, M.B.A., DJAVANROODI, F., FATTAH, I.M.R., ONG, H.C., CHOWDHURY, M.A. y MAHLIA, T.M.I. 2020. Effect of nanocatalysts on the transesterification reaction of first, second and third generation biodiesel sources- A mini-review. *Chemosphere* [en línea], pp. 128642. ISSN 18791298. DOI 10.1016/j.chemosphere.2020.128642. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128642>.

MOSHKBAR-BAKSHAYESH, K. 2020. Performance study of bayesian regularization based

multilayer feed-forward neural network for estimation of the uranium price in comparison with the different supervised learning algorithms. *Progress in Nuclear Energy* [en línea], vol. 127, no. May, pp. 103439. ISSN 01491970. DOI 10.1016/j.pnucene.2020.103439. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2020.103439>.

MUSTAPHA, A.N., ZHANG, Y., ZHANG, Z., DING, Y., YUAN, Q. y LI, Y. 2021. Taguchi and ANOVA analysis for the optimization of the microencapsulation of a volatile phase change material. *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 11, pp. 667-680. ISSN 22387854. DOI 10.1016/j.jmrt.2021.01.025.

NAIK, M., MEHER, L.C., NAIK, S.N. y DAS, L.M. 2008. Production of biodiesel from high free fatty acid Karanja (*Pongamia pinnata*) oil. *Biomass and Bioenergy*, vol. 32, no. 4, pp. 354-357. ISSN 09619534. DOI 10.1016/j.biombioe.2007.10.006.

NOLASCO, S.M., FERNÁNDEZ, M.B. y SÁNCHEZ, R.J. 2015. Aplicación de redes neuronales artificiales (RNA) en la predicción y modelado de la cinética de extracción de aceite de canola. *AAIQ, Asociación Argentina de Ingenieros Químicos - CSPQ*, vol. 8, no. 3.

OLADIPO, A.S., AJAYI, O.A., OLADIPO, A.A., AZARMI, S.L., NURUDEEN, Y., ATTA, A.Y. y OGUNYEMI, S.S. 2018. Magnetic recyclable eggshell-based mesoporous catalyst for biodiesel production from crude neem oil: Process optimization by central composite design and artificial neural network. *Comptes Rendus Chimie* [en línea], vol. 21, no. 7, pp. 684-695. ISSN 16310748. DOI 10.1016/j.crci.2018.03.011. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.crci.2018.03.011>.

SANTOS, P. y VAN GERVEN, T. 2020. Aspen Hysys – Unity Interconnection. An Approach for Rigorous Computer- Based Chemical Engineering Training. *Computer Aided Chemical Engineering*. S.l.: Elsevier B.V., pp. 2053-2058.

SINGH, D., SHARMA, D., SONI, S.L., INDA, C.S., SHARMA, S., SHARMA, P.K. y JHALANI, A. 2021. A comprehensive review of physicochemical properties, production process, performance and emissions characteristics of 2nd generation biodiesel feedstock: *Jatropha curcas*. *Fuel* [en línea], vol. 285, no. April 2020, pp. 119110. ISSN 00162361. DOI 10.1016/j.fuel.2020.119110. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119110>.

SURESH, T., SIVARAJASEKAR, N. y BALASUBRAMANI, K. 2020. Jo ur na l P re of. *Renewable Energy* [en línea], ISSN 0960-1481. DOI 10.1016/j.renene.2020.09.112. Disponible

en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.09.112>.

TECHNOLOGIES, S. 2010. STATGRAPHICS® Centurion XVI Manual de usuario. [en línea].

S.l.: [Consulta: 19 febrero 2021]. Disponible en: www.STATGRAPHICS.com.

ANEXOS

ANEXO A: BASE DE DATOS EMPLEADA PARA EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

N°	Variables Independientes				Variables Dependientes					
	A1- Xa	Ac- Xo	(-p)	%C	OM-Xm-o	OM-Xm	OM-Xooo	OM-XLLL	MA-Xm	MA-Xa
1	0,1568	0,399	3	15,29	0,051	0,0241	0,3265	0,1625	0,8451	0,1547
2	0,7625	0,129	24	81,91	4,23E-02	0,0692	1,96E-01	9,76E-02	0,247	0,7529
3	0,4835	0,879	4	58,75	0,4401	0,0398	0,0595	0,0296	0,5159	0,4837
4	0,4096	0,889	7	62,23	0,4369	0,0741	0,0498	0,0248	0,5885	0,4112
5	0,4723	0,116	26	33,17	0,026	0,0963	0,3422	0,1703	0,5347	0,4652
6	0,1617	0,909	38	10,42	0,0183	0,5734	4,07E-08	4,49E-08	0,8497	0,1484
7	0,5042	0,377	35	71,45	0,005	0,367	1,74E-07	1,92E-07	0,5892	0,4023
8	0,6063	0,414	36	33,68	0,0012	0,3683	6,80E-07	7,51E-07	0,5753	0,3928
9	0,7708	0,548	3	7,76	0,0344	0,0094	0,2324	0,1156	0,238	0,7618
10	0,0542	0,58	6	94,44	0,4926	0,0686	0,2213	0,1101	0,9398	0,0597
11	0,1875	0,356	12	52,44	0,1576	0,0789	0,3168	0,1576	0,814	0,1858
12	0,1616	0,211	14	43,15	0,0777	0,0602	0,403	0,2005	0,8404	0,1595
13	0,6812	0,125	6	47,57	0,0392	0,0053	0,4817	0,2397	0,3269	0,6728
14	0,55	0,436	21	77,06	0,1695	0,1237	0,1601	0,0797	0,4563	0,5436
15	0,1442	0,153	11	53,15	0,068	0,0325	0,455	0,2264	0,8575	0,1423
16	0,3107	0,462	36	55,37	0,0383	0,4139	0,0449	0,0223	0,7032	0,2967
17	0,2694	0,557	7	0,37	0,0017	0,0619	0,2179	0,1084	0,735	0,2648
18	0,8649	0,324	27	63,27	0,0014	0,1215	4,01E-07	4,43E-07	0,2509	0,7242
19	0,1315	0,616	30	61,69	0,18	0,3805	0,1017	0,0506	0,8679	0,1319
20	0,0782	0,767	37	40,72	0,0998	0,5608	0,0415	0,0206	0,9215	0,0784
21	0,6761	0,88	4	6,76	0,0484	0,0257	0,0576	0,0287	0,332	0,6679
22	0,4548	0,546	40	77,69	0,0052	0,4969	4,57E-07	5,05E-07	0,7004	0,2801
23	0,4093	0,769	37	1,33	0,0003	0,4418	1,01E-07	1,12E-07	0,6719	0,3233
24	0,5189	0,004	37	6,81	2,47E-06	0,4106	3,62E-07	4,00E-07	0,6244	0,3589
25	0,933	0,333	2	78,28	0,1745	0,0011	0,3985	0,1983	0,0753	0,924
26	0,4221	0,179	14	93,34	0,1385	0,039	0,4132	0,2056	0,5829	0,4168
27	0,996	0,978	21	9,6	0,0254	0,1446	0,0029	0,0014	0,3818	0,618
28	0,0385	0,804	23	32,65	0,1601	0,3504	0,0665	0,0331	0,9584	0,0415
29	0,9969	0,501	16	20,72	0,0437	0,0029	0,1185	0,0589	0,0125	0,9874
30	0,403	0,047	1	51,38	0,0014	0,0002	0,5489	0,2732	0,6026	0,3971
31	0,5511	0,047	7	37,99	0,0079	0,0029	0,5308	0,2641	0,4562	0,5436
32	0,3491	0,842	6	15,92	0,1103	0,0687	0,0743	0,0369	0,6547	0,3451
33	0,2363	0,602	15	79,33	0,3487	0,149	0,1639	0,0815	0,7627	0,2371
34	0,8838	0,468	26	76,58	0,003	0,0998	2,80E-07	3,09E-07	0,2137	0,7682
35	0,9286	0,04	25	19,44	4,57E-05	0,0654	3,42E-07	3,78E-07	0,1454	0,8317
36	0,7498	0,78	10	28,06	0,1414	0,0418	0,082	0,0408	0,2576	0,7423
37	0,534	0,347	1	16,06	0,0365	0,0055	0,3663	0,1823	0,4728	0,5269
38	0,8985	0,663	3	4,78	0,0256	0,0053	0,1676	0,0834	0,111	0,8887
39	0,7486	0,874	31	22,21	0,0025	0,2417	4,32E-07	4,77E-07	0,4366	0,54
40	0,1731	0,027	28	34,52	0,0075	0,0274	0,5201	0,2588	0,8297	0,1702
41	0,2956	0,017	30	24,14	0,0033	0,0256	0,5192	0,2584	0,709	0,2909

42	0,5791	0,161	37	29,5	0,0003	0,3931	7,28E-07	8,04E-07	0,5979	0,3688
43	0,869	0,481	27	23,08	0,0008	0,1213	4,27E-07	4,71E-07	0,2504	0,7231
44	0,4642	0,411	29	78,5	0,0844	0,2392	0,0859	0,0427	0,5448	0,4551
45	0,723	0,513	9	82,57	0,3222	0,0299	0,2155	0,1072	0,2827	0,717
46	0,5109	0,075	40	27,02	0,0001	0,4668	9,79E-07	1,08E-06	0,6579	0,3006
47	0,749	0,302	18	57,49	0,1017	0,0496	0,2328	0,1158	0,2594	0,7404
48	0,3139	0,778	15	2,26	0,0114	0,1638	0,0809	0,0403	0,6922	0,3077
49	0,7881	0,723	30	12,1	0,0009	0,2034	5,69E-07	6,28E-07	0,3792	0,589
50	0,7828	0,252	9	11,15	0,022	0,0135	0,3641	0,1812	0,2263	0,7736
51	0,535	0,381	19	44,79	0,104	0,1006	0,2137	0,1063	0,47119	0,5279
52	0,4576	0,124	10	38,86	0,0376	0,0167	0,4674	0,2326	0,5486	0,4512
53	0,6209	0,919	24	48,03	0,084	0,1696	1,83E-08	2,02E-08	0,392	0,6066
54	0,1753	0,634	2	23,76	0,1321	0,0275	0,1986	0,0988	0,8256	0,1741
55	0,306	0,847	0	55,39	0,4242	0,0305	0,0823	0,0409	0,6913	0,3081
56	0,4591	0,526	38	7,88	0,0006	0,4513	2,37E-07	2,62E-07	0,6688	0,3206
57	0,6661	0,571	24	98,73	0,1264	0,1338	0,0537	0,0267	0,3425	0,6574
58	0,3667	0,947	3	32,01	0,2656	0,0417	0,027	0,0134	0,6337	0,366
59	0,8373	0,158	6	20,29	0,0225	0,004	0,4493	0,2236	0,172	0,8278
60	0,3324	0,763	28	29,55	0,0697	0,3144	0,0408	0,0203	0,6762	0,3237
61	0,632	0,754	10	50,57	0,2621	0,0587	0,0954	0,0475	0,3727	0,6271
62	0,7511	0,006	10	45,01	0,0001	0,0001	0,5552	0,2763	0,2578	0,742
63	0,2301	0,569	12	40,01	0,1796	0,1131	0,1939	0,0965	0,7715	0,2283
64	0,5644	0,895	36	58,71	0,0087	0,3983	2,32E-07	2,56E-07	0,622	0,367
65	0,6504	0,815	29	93,18	0,0266	0,214	5,80E-08	6,41E-08	0,4122	0,5843
66	0,7451	0,948	16	91,83	0,3395	0,0733	0,0114	0,0056	0,2543	0,7455
67	0,9857	0,961	22	88,64	0,0178	0,0083	1,61E-08	1,77E-08	0,021	0,9777
68	0,2359	0,43	17	59,54	0,1923	0,1341	0,03648	0,03649	0,766	0,2339
69	0,3869	0,976	11	1,41	0,0092	0,1267	0,0032	0,0032	0,6205	0,3794
70	0,1177	0,81	32	24,21	0,074	0,4686	0,0402	0,02	0,8845	0,1154
71	0,133	0,55	3	26,39	0,1286	0,0341	0,2399	0,1194	0,8674	0,1323
72	0,1784	0,508	5	88,64	0,4024	0,0448	0,2632	0,131	0,8195	0,18
73	0,6293	0,139	25	36,05	0,0259	0,0936	0,2513	0,1251	0,3795	0,6204
74	0,6976	0,203	33	85,43	0,0012	0,2806	6,73E-07	7,44E-07	0,4769	0,4887
75	0,7365	0,807	23	53	0,0723	0,1143	3,21E-08	3,55E-08	0,2752	0,7224
76	0,1234	0,645	19	76,08	0,3371	0,2281	0,1364	0,0679	0,8731	0,1267
77	0,1259	0,103	32	88,58	0,0731	0,1284	0,4137	0,2059	0,8757	0,1242
78	0,1	0,206	8	85,76	0,1492	0,0303	0,436	0,217	0,8974	0,1023
79	0,5189	0,271	0	85,91	0,0395	0,0006	0,5143	0,256	0,4858	0,5126
80	0,228	0,821	1	83,47	0,6367	0,0215	0,1034	0,0514	0,7644	0,2344
81	0,4497	0,099	19	17,1	0,0137	0,0391	0,4436	0,2208	0,5568	0,4431
82	0,1887	0,49	12	2,65	0,0105	0,1051	0,2374	0,1181	0,8145	0,1853
83	0,716	0,904	8	16,27	0,1016	0,0423	0,0375	0,0187	0,2916	0,7082
84	0,9648	0,52	21	85,59	0,0595	0,0154	0,035	0,0174	0,0432	0,9567
85	0,8057	0,955	28	36,83	0,0055	0,1748	1,70E-08	3,78E-08	0,3483	0,6465
86	0,4181	0,693	10	15,04	0,0782	0,0855	0,131	0,0652	0,5875	0,4124
87	0,1707	0,654	32	77,59	0,1909	0,4119	0,0724	0,036	0,8292	0,1707

88	0,9049	0,423	19	71,17	0,1068	0,0284	0,1148	0,0571	0,1036	0,8963
89	0,2353	0,119	27	92,79	0,0877	0,1015	0,4048	0,2014	0,7679	0,232
90	0,5687	0,601	15	5,55	0,0202	0,0918	0,1369	0,0681	0,4397	0,5601
91	0,976	0,337	0	82,85	0,0574	6,72E-05	0,4903	0,244	0,0323	0,9661
92	0,727	0,251	16	20,2	0,0351	0,0382	0,3004	0,1495	0,2818	0,718
93	0,8464	0,646	24	36,12	0,0132	0,0754	5,04E-08	5,57E-08	0,1744	0,822
94	0,7141	0,823	22	21,16	0,0375	0,1145	0,0212	0,0105	0,2991	0,7007
95	0,9866	0,401	23	63,31	0,0019	0,0163	2,07E-07	2,28E-07	0,0394	0,9456
96	0,3159	0,743	28	89,52	0,2153	0,3156	0,0464	0,0231	0,6861	0,3137
97	0,0421	0,84	27	59,24	0,2601	0,4221	0,0467	0,0232	0,951	0,0489
98	0,0826	0,428	17	62,47	0,2141	0,1518	0,2605	0,1296	0,9162	0,0836
99	0,3093	0,098	15	8,87	0,007	0,0291	0,4724	0,2351	0,6954	0,3044
100	0,9406	0,413	25	44,24	0,0012	0,0597	4,91E-07	5,42E-07	0,1327	0,8345

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

ANEXO B: BASE DE DATOS EXTERNA PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

N°	Variables Independientes				Variables Dependientes					
	A1- Xa	Ac- Xo	(-p)	%C	OM-XM-o	OM-Xm	OM-Xooo	OM-XLLL	MA-Xm	MA-Xa
1	0,1158	0,017	5	13,9	0,0004	0,001	0,5491	0,2733	0,8861	0,1138
2	0,4533	0,604	4	34	0,1759	0,0302	0,2036	0,1013	0,5512	0,4486
3	0,2726	0,98	7	99	0,7817	0,0971	0,0087	0,0043	0,7131	0,2865
4	0,9899	0,005	12	77,5	0,0794	0,0045	3,19E-08	3,52E-08	0,02	0,9756
5	0,435	0,034	29	34,99	0,0095	0,057	0,4498	0,2238	0,5714	0,4285
6	0,1234	0,099	27	99,86	0,0835	0,0833	0,4477	0,2228	0,878	0,1219
7	0,9999	0,178	3	78,94	0,0683	8,37E-05	0,486	0,2419	0,0094	0,9901
8	0,8676	0,542	1	99,85	0,4306	0,0022	0,296	0,1473	0,1378	0,8608
9	0,5791	0,978	13,5	40	0,2101	0,1054	0,0063	0,0031	0,4248	0,575
10	0,2596	0,613	8	50	0,2567	0,0768	0,1862	0,0926	0,7412	0,2586
11	0,4888	0,56	27	23,89	0,0356	0,2235	0,0652	0,0324	0,5225	0,4774
12	0,7153	0,113	13	33,45	0,0297	0,0138	0,4482	0,2231	0,2933	0,7066
13	0,0523	0,003	35	67,98	0,0006	0,0025	0,5543	0,2758	0,9485	0,0514
14	0,0703	0,029	30	98,23	0,0231	0,0289	0,5245	0,261	0,9306	0,0692
15	0,0129	0,056	10	90,12	0,0289	0,0079	0,533	0,2653	0,9867	0,013
16	0,6374	0,929	13	12,25	0,062	0,0865	0,0213	0,0106	0,3713	0,6286
17	0,968	0,549	14,5	100	0,2685	0,0079	0,1244	0,0619	0,0382	0,9616
18	0,0376	0,983	9	97,67	0,7818	0,1607	0,0078	0,0039	0,9418	0,0579
19	0,0142	0,611	19	3	0,0136	0,2417	0,1623	0,0808	0,9858	0,0141
20	0,7565	0,176	2	18,56	0,0169	0,0022	0,4609	0,2293	0,2523	0,7475
21	0,4489	0,704	3	9,67	0,0584	0,028	0,1521	0,0757	0,5569	0,4429
22	0,4332	0,963	6	96	0,7432	0,0655	0,0168	0,0083	0,5574	0,4422
23	0,7389	0,542	7	45,2	0,1931	0,023	0,2119	0,1054	0,2682	0,7316
24	0,5463	0,001	16	38,99	0	0	0	0	0,4584	0,5357
25	0,0061	0,959	18	14,67	0,0948	0,317	0,0151	0,0075	0,991	0,0089
26	0,0659	0,759	23	23,9	0,1103	0,3307	0,0816	0,0406	0,9332	0,0667
27	0,3478	0,169	1	99	0,005	0,0001	0,5535	0,2755	0,6554	0,3433
28	0,2435	0,002	2	100	0	0	0	0	0,7552	0,238
29	0,9212	0,026	25	97,34	0,0001	0,0683	2,82E-07	3,12E-07	0,1519	0,8291
30	0,0928	0,997	15	24,89	0,1692	0,2499	0,0009	0,0004	0,9043	0,0956

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

ANEXO C: NOMBRES DE LAS VARIABLES EMPLEADAS PARA LA FASE DEL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

DISEÑO Y ENTRENAMIENTO	
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
DATOS FFA	Vincula MATLAB y el archivo de Excel con dicho nombre.
DATOS1	Vincula MATLAB y la hoja específica del archivo de Excel que contiene los valores a ingresar.
Matriz	Valores extraídos del Excel en forma de matriz numérica.
E	Valores correspondientes a las variables independientes del proceso de esterificación (ingresan valores ya normalizados en Excel de las variables caída de presión en el reactor y porcentaje de conversión de la reacción).
S	Valores correspondientes a las variables dependientes del proceso de esterificación (no normalizados en Excel).
ValoresPred	Valores estimados por la RNA.
ValoresReales	Valores reales, fracciones molares de salida simuladas en DWSIM.
P_max	Cifra máxima correspondiente a la entrada caída de presión en el reactor (no normalizada)
P_min	Cifra mínima correspondiente a la entrada, caída presión en el reactor (no normalizada)
P	Valores sin normalizar de la variable de entrada caída presión en el reactor.
C_max	Cifra máxima correspondiente a la entrada conversión de la reacción química (no normalizada)
C_min	Cifra mínima correspondiente a la entrada conversión de la reacción química (no normalizada)
C	Valores sin normalizar de la variable de entrada conversión de la reacción química.
E_SinN	Compilación de las variables de entrada sin normalizar (P y C).
ValoresPredichos	Valores estimados por la RNA, fracciones molares de las seis variables dependientes para graficar.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

ANEXO D: NOMBRES DE LAS VARIABLES EMPLEADAS PARA LA FASE DE VALIDACIÓN DE LA RNA

VALIDACIÓN	
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
DATOS FFA	Vincula MATLAB y el archivo de Excel con dicho nombre.
DATOSIVAL	Vincula MATLAB y la hoja específica del archivo de Excel que contiene los valores a ingresar.
Matriz	Valores extraídos del Excel en forma de matriz numérica.
EVAL	Valores correspondientes a las variables independientes del proceso de esterificación, base de datos distinta a la utilizada en el entrenamiento (ingresan valores ya normalizados en Excel de las variables caída de presión en el reactor y porcentaje de conversión de la reacción).
SVAL	Valores correspondientes a las variables dependientes del proceso de esterificación, base de datos distinta a la utilizada en el entrenamiento (no normalizados en Excel).
ValoresPred	Valores estimados por la RNA para la fase de la validación.
ValoresReales	Valores reales de la base de datos para la validación, fracciones molares de salida simuladas en DWSIM.
P_max	Cifra máxima correspondiente a la entrada caída de presión en el reactor, para la validación (no normalizada)
P_min	Cifra mínima correspondiente a la entrada, caída presión en el reactor, para la validación (no normalizada)
PVAL	Valores sin normalizar de la variable de entrada caída presión en el reactor, para la validación.
C_max	Cifra máxima correspondiente a la entrada conversión de la reacción química, para la validación (no normalizada)
C_min	Cifra mínima correspondiente a la entrada conversión de la reacción química, para la validación (no normalizada)
CVAL	Valores sin normalizar de la variable de entrada conversión de la reacción química, para la validación.
E_SinN_VAL	Compilación de las variables de entrada para la validación sin normalizar (PVAL y CVAL).
ValoresPredichos	Valores estimados por la RNA para la validación, fracciones molares de las seis variables dependientes para graficar.

Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

ANEXO E: SCRIPT DESARROLLADO PARA EL DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA

```
%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Tabla=readtable('DATOS FFA.xlsx','Sheet','DATOS1');

%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Matriz= table2array(Tabla);

%Parámetros de Entrada
E=Matriz(1:4,:);

%Parámetros de Salida
S=Matriz(5:10,:);

% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 09-Feb-2021 02:04:03
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% E - input data.
% S - target data.

x = E;
t = S;

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 30;
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

ValoresPred = net(E(1:end,:))
ValoresReales = S

```

```

%-----Valores sin Normalizar-----

%-----Presión -----
P_max= 40
P_min= 0

P = E(3, :).*(P_max-P_min)+P_min;

%-----Conversión-----
C_max= 98.73
C_min= 0.37

C = E(4, :).*(C_max-C_min)+C_min;

%-----Valores de Entrada Sin Normalizar-----

E_SinN=[P;C];

%----- GRÁFICOS -----
%Parámetros de salida
S=Matriz(5:10, :);

%Valores reales (simulación en DWSIM) y valores predichos por la red
neuronal
ValoresReales = S;
ValoresPredichos= ValoresPred(1:6, :);

%----- SALIDA 1 -----
%FRACCION MOLAR M-0
figure;
plot(ValoresReales(1, :))
hold on
plot(ValoresPredichos(1, :));grid;legend('ValoresReales', 'ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de M-0')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 2 -----
%FRACCION MOLAR METANOL
figure;
plot(ValoresReales(2, :))
hold on
plot(ValoresPredichos(2, :));grid;legend('ValoresReales', 'ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Metanol')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 3 -----
%FRACCION MOLAR OOO
figure;
plot(ValoresReales(3, :))
hold on
plot(ValoresPredichos(3, :));grid;legend('ValoresReales', 'ValoresPredic
hos')

```

```

xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de OOO')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 4 -----
%FRACCION MOLAR LLL
figure;
plot(ValoresReales(4,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(4,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredichos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de LLL')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 5 -----
%FRACCION MOLAR METANOL
figure;
plot(ValoresReales(5,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(5,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredichos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Metanol')
title('Corriente Gaseosa-Metanol+Agua1')

%----- SALIDA 6 -----
%FRACCION MOLAR AGUA
figure;
plot(ValoresReales(6,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(6,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredichos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Agua')
title('Corriente Gaseosa-Metanol+Agua1')

```

ANEXO F: SCRIPT DESARROLLADO PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

```
%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Tabla=readtable('DATOS FFA.xlsx','Sheet','DATOS1VAL');

%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Matriz= table2array(Tabla);

%Parámetros de Entrada
EVAL = Matriz(11:14,1:30);

%Parámetros de Salida
SVAL = Matriz(15:20,1:30);

%-----RED NEURONAL-----
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 17-Dec-2020 17:05:27
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% E - input data.
% S - target data.

x = E;
t = S;

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 30;
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

%-----

ValoresPred = net(EVAL(1:end,:))
ValoresReales = SVAL

```

```

%-----Valores sin Normalizar-----

%-----Presión -----
P_max= 35
P_min= 1

PVAL = EVAL(3,1:30).*(P_max-P_min)+P_min;

%-----Conversión-----
C_max= 100
C_min= 3

CVAL = EVAL(4,1:30).*(C_max-C_min)+C_min;

%-----Valores de Entrada Sin Normalizar-----

E_SinN_VAL=[PVAL;CVAL];

%----- GRÁFICOS -----
%Parámetros de salida
SVAL = Matriz(15:20,1:30);

%Valores reales (simulación en DWSIM) y valores predichos por la red
neuronal
ValoresReales = SVAL;
ValoresPredichos= ValoresPred(1:6,1:30);

%----- SALIDA 1 -----
%FRACCION MOLAR M-0
figure;
plot(ValoresReales(1,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(1,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de M-O')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 2 -----
%FRACCION MOLAR METANOL
figure;
plot(ValoresReales(2,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(2,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Metanol')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')

%----- SALIDA 3 -----
%FRACCION MOLAR OOO
figure;
plot(ValoresReales(3,:))

```

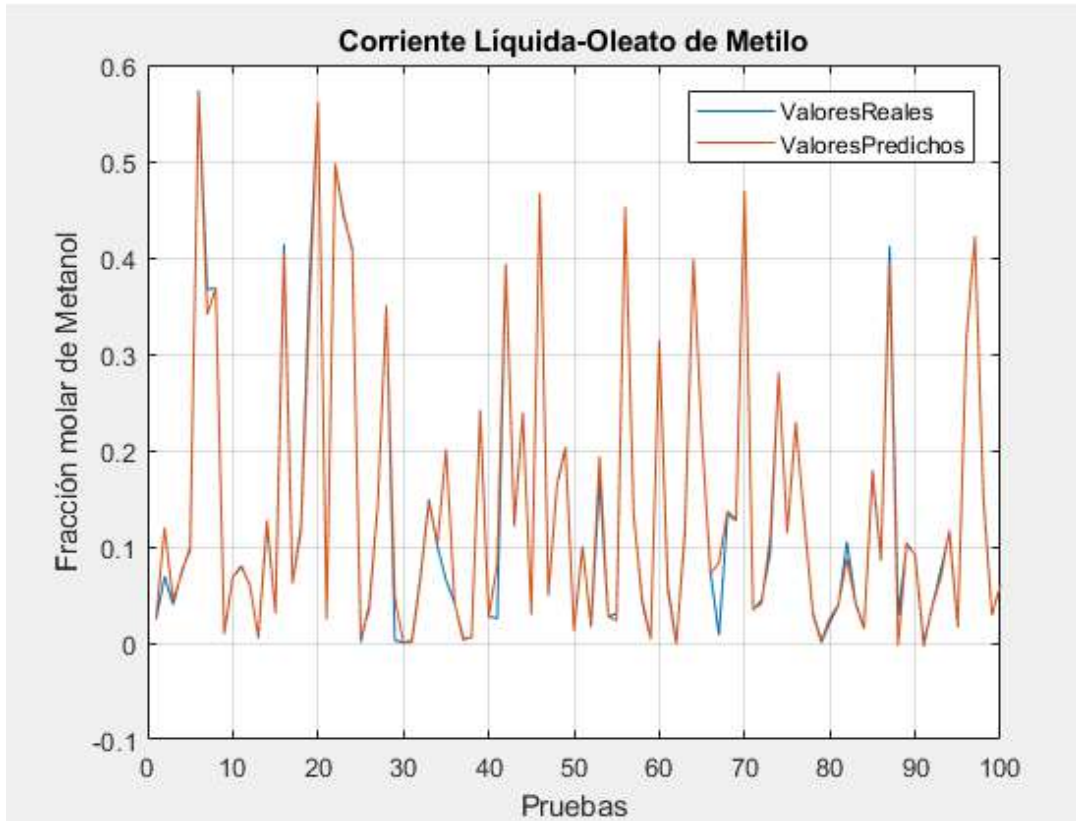
```
hold on
plot(ValoresPredichos(3,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de OOO')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')
```

```
%----- SALIDA 4 -----
%FRACCION MOLAR LLL
figure;
plot(ValoresReales(4,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(4,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de LLL')
title('Corriente Líquida-Oleato de Metilo')
```

```
%----- SALIDA 5 -----
%FRACCION MOLAR METANOL
figure;
plot(ValoresReales(5,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(5,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Metanol')
title('Corriente Gaseosa-Metanol+Agua1')
```

```
%----- SALIDA 6 -----
%FRACCION MOLAR AGUA
figure;
plot(ValoresReales(6,:))
hold on
plot(ValoresPredichos(6,:));grid;legend('ValoresReales','ValoresPredic
hos')
xlabel('Pruebas')
ylabel('Fracción molar de Agua')
title('Corriente Gaseosa-Metanol+Agua1')
```

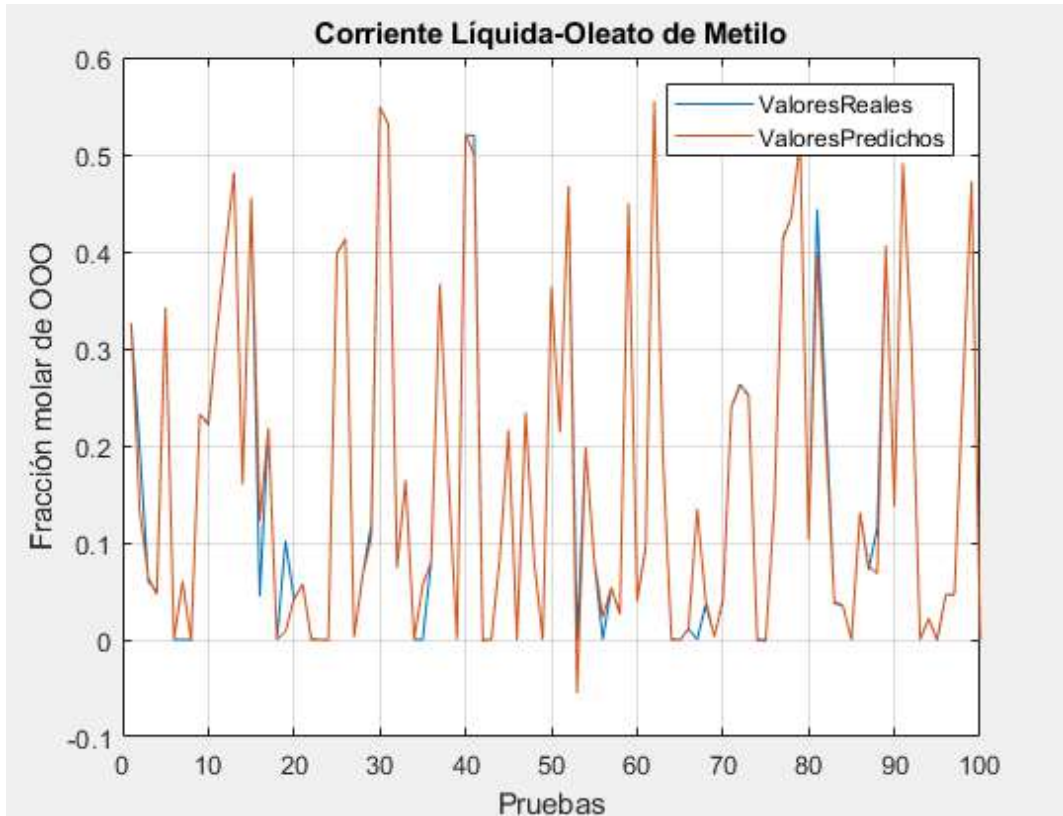
ANEXO G: GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE METANOL DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de metanol, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0,00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA.

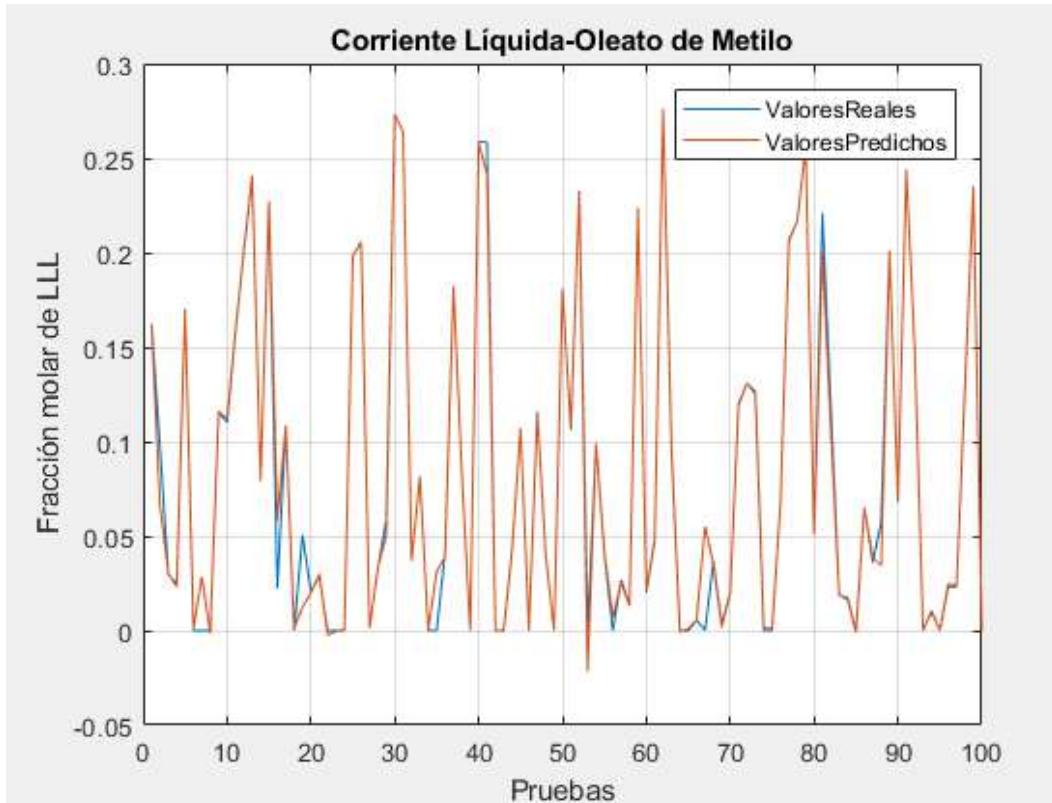
ANEXO H: GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE OOO DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de OOO, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0,00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA.

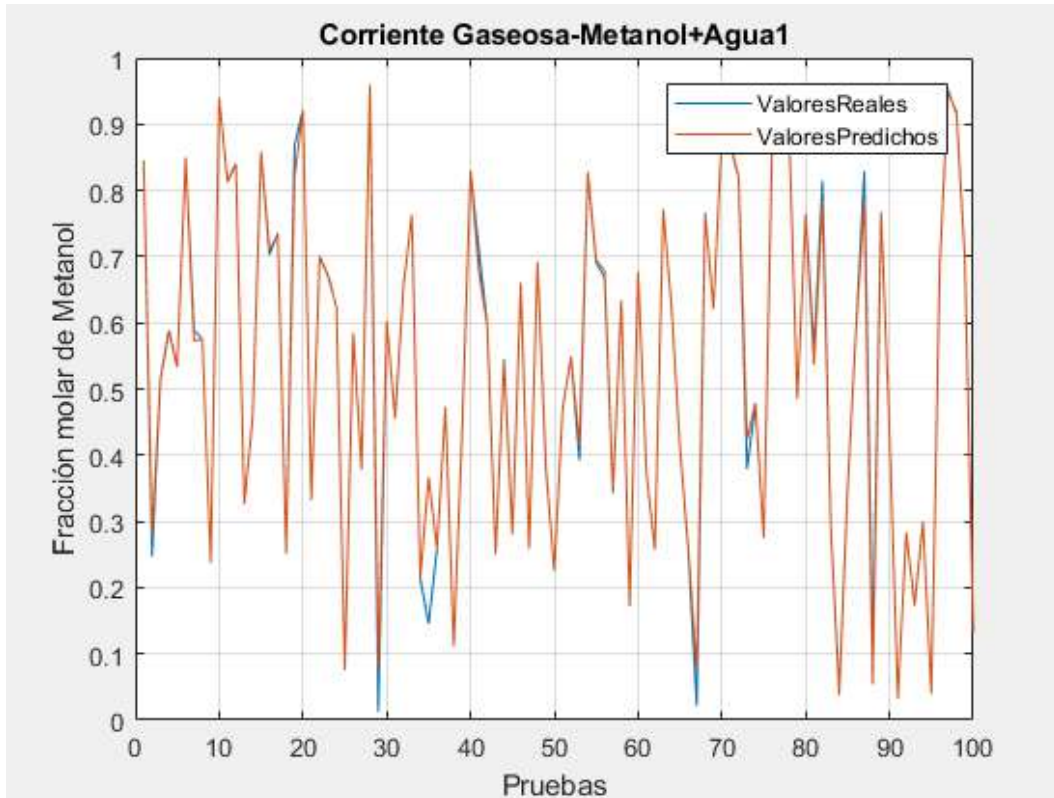
ANEXO I: GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE LLL DE LA CORRIENTE LÍQUIDA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de LLL, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0,00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA. Gráfico de comparación entre valores reales y predichos de la fracción molar de metanol de la corriente gaseosa, en la fase de diseño y entrenamiento de la RNA.

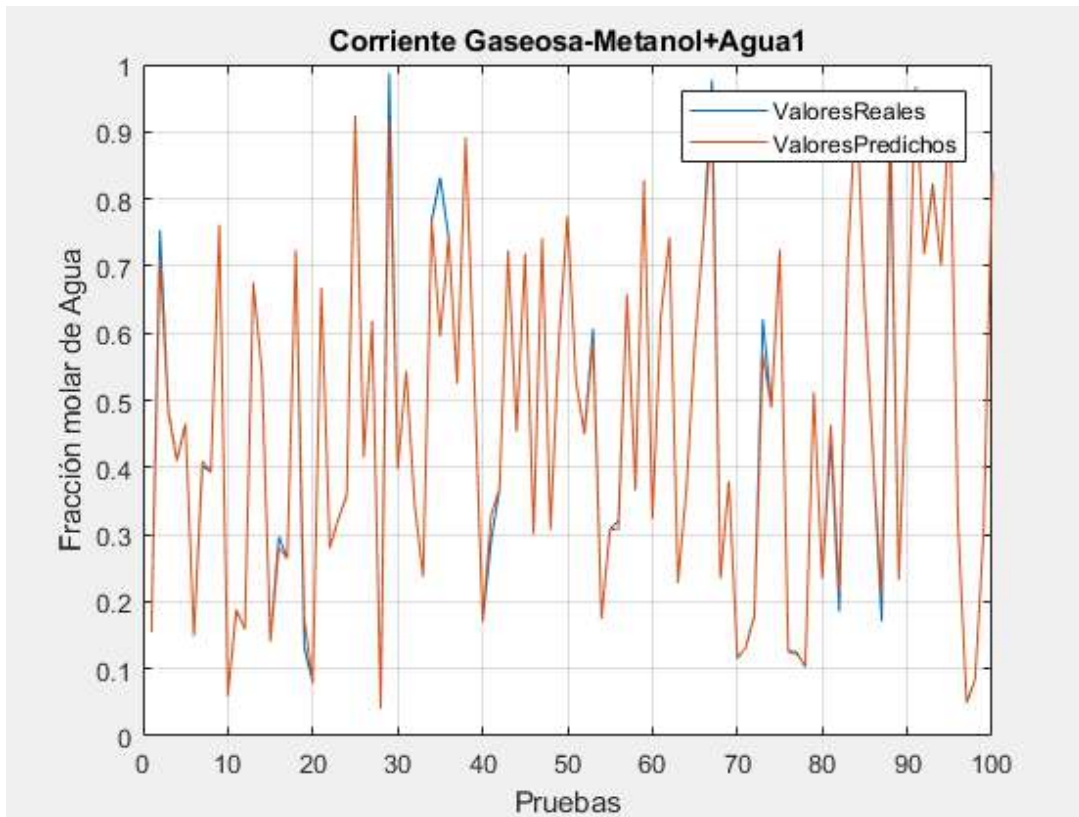
ANEXO J: GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE METANOL DE LA CORRIENTE GASEOSA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de metanol en la corriente gaseosa, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0,00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA.

ANEXO K: GRÁFICO DE COMPARACIÓN ENTRE VALORES REALES Y PREDICHOS DE LA FRACCIÓN MOLAR DE AGUA DE LA CORRIENTE GASEOSA EN LA FASE DE DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA



Realizado por: Sancho, Ana, 2021.

Como se visualiza en la leyenda del gráfico, se comparan los datos resultantes de una simulación en DWSIM, valores reales (línea azul), entre los datos arrojados por la RNA o valores predichos (línea roja). Mediante lo cual se puede interpretar que no existe una representativa diferencia entre los datos obtenidos y esperados de la variable, fracción molar de agua en la corriente gaseosa, ya que el desfase entre las dos curvas es mínimo. Esto es congruente con el MSE calculado en el entrenamiento, que se aproxima a cero, 0,00000411, brindando así la certeza de una adecuada facultad predictiva de la RNA.



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

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

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 22 / 09 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Ana Paula Sancho Soria</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniera Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO FABIO
MEDINA NUSTE**

Firmado digitalmente por LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Nombre de reconocimiento (DN): c=EC, o=BANCO CENTRAL
DEL ECUADOR, ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE
INFORMACION-ECIBCE, l=QUITO, serialNumber=0000621485,
cn=LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Fecha: 2021.09.22 10:07:43 -05'00'



1473-DBRA-UTP-2021