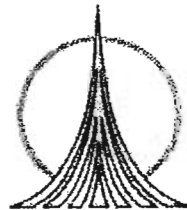




UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO.



FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
ZARAGOZA.

DESARROLLO DE UN MODELO DE RED  
NEURONAL PARA LA SIMULACIÓN DE LA  
DESTILACIÓN REACTIVA.

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
LICENCIATURA EN INGENIERÍA QUÍMICA  
P R E S E N T A :  
JAIME ISLAS TRINIDAD

DIRECTOR DE LA TESIS:

ING. QUÍM. EDUARDO VÁZQUEZ ZAMORA.



MÉXICO, D. F.

2005

m 345396



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
\*ZARAGOZA\*

CARRERA DE INGENIERIA QUIMICA

**ASUNTO:** Revisión Oficial del  
Trabajo de Tesis

**AL JEFE DE LA CARRERA  
DE INGENIERIA QUIMICA  
P R E S E N T E**

Por medio del presente, hacemos de su conocimiento la aprobación al trabajo recepcional, desarrollado bajo mi asesoría por parte del alumno (a):  
**JAIIME ISLAS TRINIDAD.**

pasante de la carrera de Ingeniería Química, bajo el título:  
DESARROLLO DE UN MODELO DE RED NEURONAL PARA LA SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN REACTIVA.

**A T E N T A M E N T E**  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"

**México D. F. a 27 de Noviembre del 2004.**

Nombre y firma del Asesor del  
Trabajo Escrito

Vo. Bo. 7

**M. EN C. ANDRES AQUINO CANCHOLA**  
**JEFE DE LA CARRERA**

c. c. p. Unidad de Administración Escolar  
c. c. p. Interesado

**NOTA:** La impresión definitiva del trabajo, no se podrá efectuar hasta obtenida la aprobación por parte de los Sinodales para Examen Profesional.



**FACULTAD DE ESTUDIOS  
SUPERIORES ZARAGOZA**

**JEFATURA DE LA CARRERA  
DE INGENIERIA QUIMICA**

**OFICIO: FESZ/JCIQ/060/04**

**ASUNTO: Asignación de Jurado**

**ALUMNO: ISLAS TRINIDAD JAIME**

**P r e s e n t e .**

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, la jefatura a mi cargo, ha propuesto a los siguientes sinodales:

<b>PRESIDENTE</b>	<b>Quim. Miki Otani Imura</b>
<b>VOCAL</b>	<b>I.Q. Eduardo Vázquez Zamora</b>
<b>SECRETARIO</b>	<b>Q.F.B. Maria de los Angeles Torres Castellanos</b>
<b>SUPLENTE</b>	<b>I.Q. Antonio Zamora Plata</b>
<b>SUPLENTE</b>	<b>I.Q. Juan Carlos Prieto López</b>

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

**A t e n t a m e n t e**

**“POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU”**

México, D.F., 02 de Diciembre del 2004.

**EL JEFE DE LA CARRERA**

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'M. En C. Andrés Aquino Canchola', written over a circular scribble.

**M. EN C. ANDRES AQUINO CANCHOLA**

## **AGRADECIMIENTOS.**

Al termino de esta etapa de mi vida, quiero expresar un profundo agradecimiento a quienes con su ayuda, apoyo y comprensión me alentaron a lograr este hermosa realidad.

Agradezco a la máxima casa de estudios por haberme albergado y por haberme enseñado que siempre debo elegir por mi mismo y a hacer frente a cualquier obstáculo que la vida me presente, siendo claro a la hora de elegir y a la hora de dar una solución.

Agradezco a mi facultad ya que siempre me brindo apoyo y siempre me dio buenos consejos.

Agradezco a mi asesor, el Ing. Químico Eduardo Vázquez Zamora quien hizo posible el desarrollo de este trabajo y a quien considero un gran amigo y compañero.

Agradezco a mi padre el Ing. Mecánico Electricista José Fdo. Rafael Islas Aguirre quien siempre me brindo consejo y apoyo cuando lo necesite y a quien le estaré eternamente agradecido.

Agradezco a mi madre la Sra. Mariana Trinidad Cantellano, quien supo orientarme, alentarme y estimularme a lo largo de mis estudios por lo cual también le estaré eternamente agradecido.

Agradezco a mis hermanos José, Jesús e Iván Islas Trinidad quienes supieron brindarme consejos y sonrisas en los momentos difíciles de mi trayectoria estudiantil.

Agradezco a todos mis profesores y autoridades escolares, a esas personas en quienes siempre encontré el apoyo necesario para aprender todo el conocimiento del que ahora soy poseedor.

Agradezco a mis amigos y compañeros ya que sin ellos mi vida estudiantil hubiese sido muy aburrida y desinteresada.

A si mismo, en testimonio de gratitud ilimitada por su apoyo, aliento y estímulo mismos que posibilitaron la conquista de esta meta: mi *formación profesional*.

Agradezco el apoyo otorgado para la realización de este trabajo a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) en el Programa de Apoyo Proyectos Institucionales para el Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME) en el proyecto EN108103.

*“Lo humano eje de nuestra reflexión.”*

*FES – Zaragoza.*

*“Tu mismo eliges tu destino y eliges también a quienes te ayudaran a alcanzarlo.”*

*R. G. D. G.*

## ÍNDICE.

Oficio De Asignación De Jurado.	i
Agradecimientos.	ii
Índice.	iv
Objetivos.	viii
Resumen.	ix

### CAPITULO I. DESTILACIÓN.

1.	Introducción.	1
1.1	¿Qué Es La Destilación?	1
1.1.1	Partes Que Conforman Un Sistema De Destilación.	2
1.2	Tipos De Columnas.	3
1.2.1	Columnas De Platos.	3
1.2.2	Columnas De Relleno.	5
1.3	Funcionamiento De Los Equipos De Destilación.	7
1.4	Aplicaciones.	8
1.5	Clasificación De Los Diferentes Tipos De Destilación.	11
1.5.1	Destilación Diferencial.	11
1.5.2	Destilación Extractiva.	12
1.5.3	Destilación Azeotrópica.	14
1.5.3.1	Destilación Azeotrópica Heterogénea.	15
1.5.4	Destilación Al Vacío.	17
1.5.5	Destilación Sensible A La Presión (Pressure Swing Distillation).	18
1.5.5.1	Recuperación De Un Componente Puro.	19
1.5.6	Destilación Molecular.	21
1.5.7	Destilación Reactiva.	24
1.5.7.1	¿Por Qué Considerar La Destilación Reactiva?	26
1.5.7.2	Aspectos De Diseño Para La Destilación Reactiva.	27
1.5.7.2.1	Desarrollo De Los Procesos De Destilación Reactiva En La Industria De Procesos Químicos.	28
1.5.7.3	Síntesis De Procesos.	30
1.5.7.4	Diseño De Proceso Y Optimización.	35
1.5.7.5	Limitaciones De Los Métodos Para La Síntesis Y El Diseño: El Problema Del Escalamiento.	37
1.5.7.6	Elección Del Equipo.	40
1.5.7.7	Algunas Observaciones Sobre El Desempeño Del Catalizador.	50
1.5.8	Notación.	51

### CAPITULO II. REDES NEURONALES.

2.	Desarrollo Histórico.	52
2.1	Redes Neuronales Artificiales.	52
2.2	¿Qué Es Una Red Neuronal Artificial?	55
2.3	Estructura De Un Sistema Neuronal Artificial.	55
2.4	Modelo General De Una Red Neuronal Artificial.	56
2.4.1	Entradas Y Salidas.	58
2.4.2	Factores De Peso.	58
2.4.3	Umbral Internos.	58

2.4.4	<b>Función De Transferencia.</b>	59
2.5	<b>Topología De Una Red Neuronal.</b>	61
2.6	<b>Opciones De Conexión.</b>	62
2.7	<b>Múltiples Capas Ocultas.</b>	63
2.8	<b>El Proceso De Aprendizaje.</b>	64
2.8.1	<b>Estabilidad Y Convergencia.</b>	67
2.9	<b>Alcances Y Limitaciones De Las Redes Neuronales.</b>	67
2.10	<b>Algoritmos Para El Desarrollo De Redes Neuronales.</b>	68
2.10.1	<b>La Red Hopfield.</b>	68
2.10.2	<b>La Red Hamming.</b>	70
2.10.3	<b>El Clasificador Carpenter / Grossberg.</b>	71
2.10.4	<b>Perceptron De Capa Simple.</b>	72
2.10.5	<b>Mapas De Rasgos Similares Autoorganizados De Kohonen.</b>	74
2.10.6	<b>Fundamentos Del Aprendizaje De Propagación Hacia Atrás.</b>	75
2.10.6.1	<b>Algoritmo De La Propagación Hacia Atrás(Backpropagation).</b>	75
2.10.7	<b>Requerimientos Para El Aprendizaje De Propagación Hacia Atrás.</b>	76
2.10.8	<b>Algoritmo De Propagación Hacia Atrás Vanilla.</b>	78
2.10.9	<b>Limitaciones Del Algoritmo De Propagación Hacia Atrás Vanilla.</b>	85
2.10.10	<b>Algoritmo De La Regla Delta Generalizado.</b>	87
2.11	<b>Formulación Alternativa Del Algoritmo De La Propagación Hacia Atrás.</b>	96
2.12	<b>Aspectos Prácticos Del Calculo De Redes Neuronales.</b>	99
2.13	<b>Selección Del Numero De Capas Ocultas.</b>	100
2.14	<b>Normalización Del Set De Datos De Entrada Y De Salida.</b>	101
2.15	<b>Inicializando La Distribución De Las Factores De Peso.</b>	106
2.16	<b>Colocando El Rango De Aprendizaje Y El Coeficiente De Momentum.</b>	107
2.17	<b>Importancia De La Cinética De La Reacción Para Los Procesos De Destilación Reactiva.</b>	109
2.17.1	<b>Mezclas Reactivas Binarias Ideales.</b>	110
2.17.2	<b>Columna De Destilación Reactiva Completa.</b>	112
2.17.3	<b>Efecto De La Cinética En El Producto Disponible.</b>	117
2.17.4	<b>Análisis De Punto Singular.</b>	118
2.17.5	<b>Determinación Y Análisis De La Cinética De La Reacción.</b>	120
2.17.6	<b>Fenómenos De Transporte Fisicoquímicos.</b>	120
2.17.7	<b>Modelado De Los Procesos De Destilación Reactiva Homogéneos Y Heterogéneos.</b>	123
2.17.7.1	<b>Modelo De Etapas En Equilibrio.</b>	123
2.17.7.2	<b>Modelo De Etapas En No Equilibrio.</b>	126
2.17.7.2.1	<b>El Modelo Convencional NEQ.</b>	126
2.17.7.2.2	<b>Modelado NEQ De La Destilación Reactiva.</b>	130
2.17.7.2.2.1	<b>Sistemas Homogéneos.</b>	130
2.17.7.2.2.2	<b>Sistemas Heterogéneos.</b>	131
2.17.8	<b>Notación.</b>	134



### CAPITULO III. SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS.

3.	Introducción.	137
3.1	Simuladores De Procesos Comerciales.	139
3.2	Introducción De La Información Del Problema Para Proceder A Su Ejecución.	140
3.3	Algoritmos De Solución De Los Modelos Matemáticos.	141
3.3.1	Método Modular Secuencial.	141
3.3.2	Método Orientado A Ecuaciones.	142
3.3.3	Método Modular Simultáneo.	142
3.3.4	Comparación De Los Simuladores De Proceso Químico.	142
3.4	Aspen Plus.	144
3.5	Chemcad.	145
3.6	Design II, Winsim.	147
3.7	Pro II.	148
3.8	Synthesiser, Designer Y Predictor.	149
3.8.1	Synthesiser.	150
3.8.2	Designer.	153
3.8.3	Predictor.	153

### CAPITULO IV. DESARROLLO DEL MODELO DE RED NEURONAL PARA LA SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN REACTIVA MEDIANTE EL USO DEL PROGRAMA NEUROSHELL 2.

4.	Introducción.	154
4.1	Aplicaciones Industriales De La Destilación Reactiva.	155
4.1.1	Reacciones De Eterificación.	155
4.1.1.1	Caso I. Producción De MTBE.	159
4.1.2	Reacciones De Esterificación Con Alcoholes / Olefinas.	164
4.1.2.1	Caso II. Producción De Acetato De Etilo.	166
4.1.3	Condensación Aldólica Seguida Por Una Deshidratación.	170
4.1.3.1	Caso III. Producción De DAA.	172
4.1.4	Neutralización (Protonación De Bases Orgánicas).	175
4.1.4.1	Caso IV. Separación De Piridinas.	176
4.1.5	Hidrólisis De Esteres.	179
4.1.6	Hidratación / Deshidratación.	181
4.1.7	Hidrogenación / Hidrodesulfuración / Deshidrogenación.	181
4.1.7.1	Benceno A Ciclohexano.	181
4.1.7.2	Hidrogenación Selectiva De Corrientes De C <sub>4</sub> .	182
4.1.7.3	Hidrogenación De Pentadieno.	183
4.1.7.4	Hidrodesulfuración, Hidrodenitrógenación E Hidrocrqueo.	183
4.1.8	Cloración.	184
4.1.9	Acetalización Y Ketalización.	184
4.1.10	Nitración.	185

### CAPITULO V. RESULTADOS OBTENIDOS.

5.1	Reacciones De Eterificación.	187
5.2	Reacciones De Esterificación Con Alcoholes / Olefinas.	196

5.3	Condensación Aldólica Seguida Por Una Deshidratación.	207
5.4	Neutralización (Protonación De Bases Orgánicas).	216
	<b>CONCLUSIONES.</b>	<b>224</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA.</b>	<b>227</b>
	<b>GLOSARIO.</b>	<b>230</b>

## **OBJETIVOS.**

El presente trabajo tiene como objetivo principal desarrollar un modelo de red neuronal para la simulación de la destilación reactiva.

## **OBJETIVOS PARTICULARES.**

- Describir la implementación de las estrategias utilizadas por las redes neuronales para simular un proceso químico.
- Mostrar como las redes neuronales pueden simular un proceso químico a partir del entrenamiento de la misma.
- Mostrar como el uso de las redes neuronales puede evitar la necesidad de realizar trabajos piloto o simulaciones para la implementación de la destilación reactiva en sus diferentes aplicaciones.

## RESUMEN.

El capítulo I comprende los conceptos básicos de la destilación, así como una breve descripción de cada uno de los diferentes tipos de destilación existentes y desde luego se hace una explicación más detallada sobre el tema de la destilación reactiva.

El capítulo II comprende una introducción general de los conceptos básicos de las redes neuronales como son: una breve explicación de su historia, los diferentes tipos de algoritmos que existen, así como también las diferencias que existen entre cada uno de ellos, desde luego sus ventajas – desventajas y la selección del modelo que mejor describirá el comportamiento de la destilación reactiva.

El capítulo III comprende lo relacionado con los simuladores de procesos químicos más comunes, incluyendo una breve descripción de su funcionamiento así como de sus ventajas – desventajas y se profundizará en el hecho de que si son capaces o no de realizar simulaciones de columnas de destilación reactiva.

El capítulo IV abarca el desarrollo del modelo de red neuronal mediante el uso del programa Neuroshell 2, además también se explicaran cada una de las aplicaciones de la destilación reactiva y se les desarrollara su modelo de red neuronal a los casos para: reacciones de eterificación, reacciones de esterificación con alcoholes / olefinas, condensación aldólica seguida por una deshidratación y neutralización (protonación de bases orgánicas).

El capítulo V comprende los resultados obtenidos durante el desarrollo del modelo de red neuronal donde se hace hincapié en el hecho de que si las redes neuronales son o no una buena herramienta para la simulación de la destilación reactiva en sus diferentes aplicaciones.

Finalmente se puede concluir que:

- Las redes neuronales no aprenden por si solas.

- Es necesario tener amplios conocimientos del análisis y comprensión de procesos industriales.
- Para que una red neuronal sea precisa y exacta es necesario que el número de casos de entrenamiento sea mayor a 13 y el número de nodos de entrada sea mayor que el número de nodos de salida.
- El número de eventos que requiere una red neuronal para que sea adecuada está entre 4,000 y 100,000 eventos.

## CAPITULO I.

### 1. INTRODUCCIÓN.

El objetivo general de la destilación consiste en separar los compuestos que tienen diferentes presiones de vapor a una temperatura determinada. La palabra destilación se refiere a la separación física de una mezcla en dos o más fracciones que tienen distintos puntos de ebullición.

La destilación consta de múltiples contactos entre las fases de líquido y vapor. Cada contacto consiste en la mezcla de dos fases para producir la distribución de las especies, seguida por la separación de las fases. Los contactos se realizan frecuentemente sobre platos horizontales (generalmente llamados *etapas*) dispuestos en una columna vertical. A medida que el vapor avanza hacia la cabeza de la columna se enriquece progresivamente en las especies más volátiles.

#### 1.1 ¿QUÉ ES LA DESTILACIÓN?

Es el proceso de separación más utilizado en la industria química. Esta operación unitaria también es conocida como fraccionamiento o destilación fraccionada. La separación de los constituyentes se basa en las diferencias de volatilidad. En la destilación, una fase vapor se pone en contacto con una fase líquida, transfiriéndose masa del líquido al vapor y del vapor al líquido en etapas de equilibrio físico – termodinámico.

Por lo general, el líquido y el vapor contienen los mismos componentes aunque en distintas proporciones. El líquido se encuentra a su temperatura de burbuja, mientras que el vapor en equilibrio está a su temperatura de rocío. En forma simultánea, se transfiere masa desde el líquido por evaporación y desde el vapor por condensación. El efecto neto es un incremento en la concentración de los componentes más volátiles en la fase vapor y de los menos volátiles en el líquido. La evaporación y condensación involucran calores latentes de vaporización de cada componente y por ello, al calcular una destilación deben

considerarse los efectos del calor. En una solución ideal (por ejemplo; una mezcla de benceno y tolueno), la volatilidad puede relacionarse directamente con la presión de vapor que tiene cada componente puro. En las soluciones no ideales (tales como una mezcla de etanol y agua) no existen relaciones simples. La destilación se utiliza mucho para separar mezclas líquidas en componentes mas o menos puros. Debido a que la destilación implica evaporación y condensación de la mezcla, es una operación que necesita grandes cantidades de energía (Seider y col., 1999).

### 1.1.1 PARTES QUE CONFORMAN UN SISTEMA DE DESTILACIÓN.

Un sistema de destilación está formada habitualmente por una carcasa cilíndrica (columna), un condensador y un hervidor. En el interior de la carcasa se suele disponer un relleno o una serie de platos para que la separación se lleve a cabo de la mejor manera posible y de esta manera se aumenta la eficiencia del sistema (ver figura 1).

- El **hervidor** proporciona la energía necesaria para llevar a cabo la separación.
- El **condensador** del domo enfría el vapor para condensarlo y mejorar la eficiencia de la destilación, mientras que el **acumulador de reflujo** almacena el condensado para introducir una parte de éste de nuevo a la columna como **reflujo** y la otra parte se obtiene como **destilado**.
- La **alimentación** se suele introducir en una de las etapas intermedias y a partir de ahí se divide la columna en una **sección de rectificación o enriquecimiento** y en una **sección de agotamiento**.

Normalmente es necesario realizar más de una etapa de destilación para alcanzar la pureza requerida en los componentes destilados.

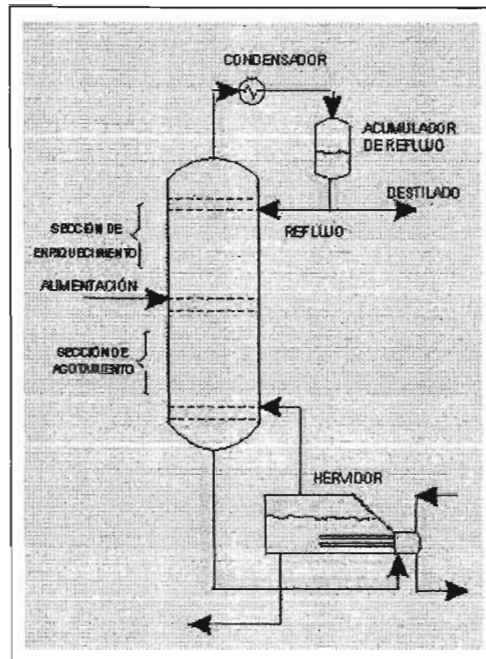


Figura 1. Esquema típico de un sistema de destilación.

## 1.2 TIPOS DE COLUMNAS.

El proceso de destilación se puede realizar en diferentes tipos de columnas que pueden clasificarse, con relación a sus dispositivos internos en:

### 1.2.1 COLUMNAS DE PLATOS.

En las columnas de platos la operación se lleva a cabo en etapas. El plato va a proporcionar una mezcla íntima entre las corrientes de líquido y vapor. El líquido pasa de un plato a otro por gravedad en sentido descendente, mientras que el vapor fluye en sentido ascendente a través de las ranuras de cada plato, burbujearlo a través del líquido.



Al plato se le exige que sea capaz de tratar las cantidades adecuadas de líquido y vapor sin una inundación o un arrastre excesivo, que sea estable en su funcionamiento y resulte relativamente simple en cuanto a su instalación y mantenimiento. También es importante conseguir que la caída de presión en el plato sea mínima. Por lo general cuanto mayor sea el número de platos de la torre, mayor será la separación conseguida.

Se pueden encontrar diferentes tipos de platos:

- **Platos de campanas de borboteo:** ha sido el plato más ampliamente utilizado, las campanas están colocadas sobre unos conductos de subida (figura 2).

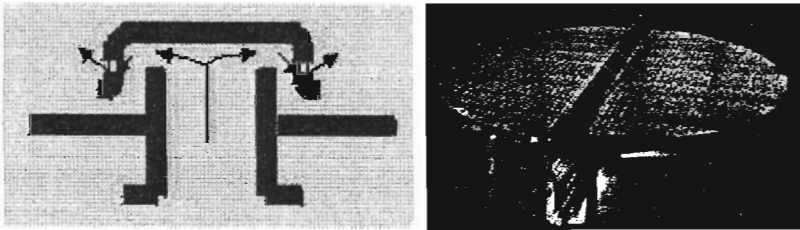


Figura 2. Platos de campana de borboteo.

- **Platos perforados:** su construcción es mucho más sencilla, requiriendo la perforación de pequeños agujeros en la bandeja (figura 3).

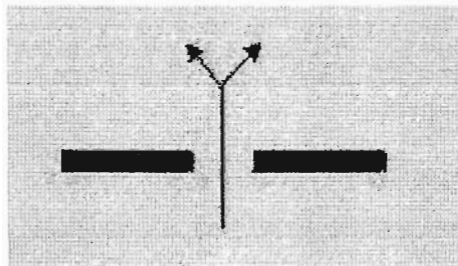


Figura 3. Platos perforados.

- **Platos de válvulas:** es un intermedio entre los de campanas de borbotado y los platos perforados. La construcción es similar a los de campanas, cada agujero tiene por encima una válvula que se eleva ante el paso del vapor (figura 4).



Figura 4. Platos de válvulas.

Normalmente el tipo de plato más empleado es el plato perforado, debido principalmente a su economía. Si se requiere una mayor flexibilidad entonces se hará uso de los platos de válvulas. Actualmente los platos de borbotado se emplean cuando es necesario controlar el tiempo de residencia para que se dé una determinada reacción química o si el flujo de vapor es insuficiente y se produce un goteo del líquido.

### 1.2.2 COLUMNAS DE RELLENO.

En las columnas de relleno la operación de transferencia de masa se lleva a cabo de manera continua. La función principal del relleno consiste en aumentar la superficie de contacto entre el líquido y el vapor, aumentar la turbulencia y por tanto mejorar la eficiencia. A medida que aumenta el tamaño del relleno disminuye la eficiencia de la transferencia de materia y aumenta la pérdida de carga, por tanto para determinar el tamaño óptimo de relleno habrá que llegar a un compromiso entre estos dos factores.

La selección del material de relleno se basa en criterios como resistencia a la corrosión, resistencia mecánica, resistencia térmica y características de mojado. Además, es necesario disponer un distribuidor de líquido en la parte superior de la columna para asegurar que el líquido moje de manera uniforme todo el relleno y no se desplace hacia las paredes.

Se tienen varios tipos de relleno:

- **Al azar:** este tipo de relleno es bastante económico y suelen ser de materiales resistentes a la corrosión (metálicos, cerámicos o de plástico.) Los rellenos más empleados eran los Anillos Rashig y las sillas o monturas Berl, pero ahora han sido reemplazados por otros más eficientes como los anillos Pall, las monturas Intalox y los anillos Bialecki (figura 5).

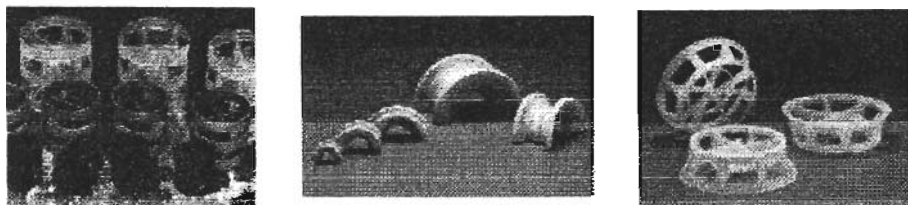


Figura 5. Relleno al azar; anillo Pall, monturas Intalox y anillos Bialecki.

- **Estructurado:** es bastante más caro por unidad de volumen que el relleno al azar, pero ofrece mucha menos pérdida de carga por etapa y tiene mayor eficiencia y capacidad (figura 6).

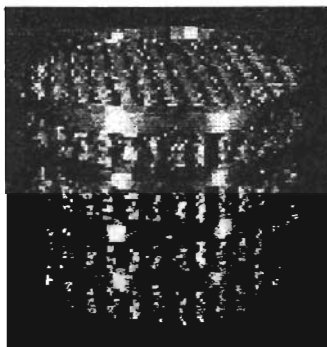


Figura 6. Relleno estructurado.

El empleo de columnas de relleno frente a las de platos se ve favorecido en los siguientes casos:

- Cuando las columnas son de pequeñas dimensiones (menos de 0.6 m de diámetro y una altura de relleno inferior a 6 m).
- Si se tienen sustancias corrosivas o se forma mucha espuma.
- Si se requiere que la pérdida de carga en la columna sea pequeña.
- Si la velocidad del líquido es elevada.

### 1.3 FUNCIONAMIENTO DE LOS EQUIPOS DE DESTILACIÓN.

El funcionamiento de toda columna de destilación se basa en que existe un vapor que asciende por la columna el cual se encuentra con un líquido que desciende, entonces se produce una transferencia de materia y energía en cada etapa. Aunque la alimentación sea un líquido subenfriado, el vapor aparece como consecuencia del hervidor situado en la parte inferior de la columna. Hay que tener en cuenta que los únicos aportes de calor a lo largo de la columna se realizan en el hervidor. El vapor, a medida que se aproxima a la parte superior de la columna, se enriquece en los componentes volátiles de la mezcla, mientras que el líquido que circula en contracorriente arrastra los componentes más pesados.

Las corrientes que salen de cada etapa se encuentran en equilibrio pero las que entran no lo están. Las corrientes de líquido están en sus puntos de burbuja y las corrientes de vapor en sus puntos de rocío, por tanto se produce un intercambio calorífico entre ambas corrientes.

La facilidad de la separación va a depender del valor de la volatilidad relativa:

$$\alpha_{12} = \frac{K_1}{K_2} \dots\dots\dots(1.1)$$

Donde  $K_i$  son las constantes de equilibrio ( $K_i = y_i / x_i$ .)

En el caso de una solución ideal:

$$K_1 = \frac{P_1^{SAT}}{P} \dots\dots\dots(1.2)$$

$$K_2 = \frac{P_2^{SAT}}{P} \dots\dots\dots(1.3)$$

$$\alpha_{12} = \frac{y_1/x_1}{y_2/x_2} \dots\dots\dots(1.4)$$

Cuanto mayor sea la volatilidad relativa, mayor será la separación.

Por otro lado hay que destacar la importancia del reflujo en una columna de destilación ya que si no resultaría imposible conseguir una concentración en el destilado mayor que en la alimentación. Se tiene un reflujo mínimo que es la cantidad mínima necesaria que se debe retornar a la columna para que se verifique la separación y un reflujo máximo o reflujo total para el cual todo el destilado se recicla a la columna. Normalmente existe un reflujo óptimo para el cual la eficiencia es máxima. La mayoría de las columnas están diseñadas para trabajar con una relación entre el reflujo mínimo y el óptimo de 1.1 a 1.5 (Geankoplis, 2002; Welty y col., 2001; Seider y col., 1999; Foust y col., 1998; Ulrich, 1992).

Se puede emplear un condensador parcial o uno total para la destilación. La elección depende de la pérdida de carga del acumulador de reflujo, así como de otras características del proceso. Se recomienda el uso de un condensador total si la pérdida de carga es aproximadamente de 1.48 MPa y si ésta es superior, entre 1.48 y 2.52 MPa, se usará un condensador parcial.

#### **1.4 APLICACIONES DE LA DESTILACIÓN.**

Existen infinidad de aplicaciones de la operación de destilación. Se emplean en numerosas industrias desde la industria petroquímica a la farmacéutica. Se puede afirmar que prácticamente en cualquier proceso químico va a aparecer una destilación debido a la necesidad de separación de ciertos componentes de otros menos valiosos.

Algunos ejemplos de aplicación son:

- Uno de los procesos más empleados es el de separación del aire con el fin de obtener nitrógeno y oxígeno puros para su empleo en la industria electrónica.
- En las refinerías de petróleo aparecen numerosas unidades de destilación que separan diversos productos según su aplicación:
  - En primer lugar aparece la torre de destilación atmosférica a partir de la cual el petróleo crudo se separa en diferentes fracciones en función de su punto de ebullición.
  - Después el residuo atmosférico pasa a una torre de destilación a vacío (figura 7).

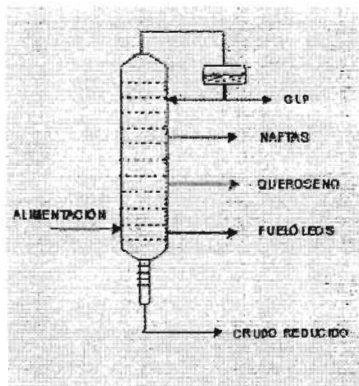


Figura 7. Columna de destilación atmosférica.

- Otras destilaciones asociadas al proceso son:
  - En las unidades de fraccionamiento catalítico para la posterior separación de las diferentes fracciones.

- Para la separación de los compuestos aromáticos (figura 8).

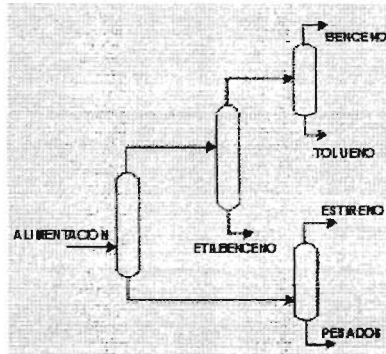


Figura 8. Secuencia de separacion de aromaticos.

- En plantas petroquímicas, por ejemplo en la producción de etileno. El etileno se produce principalmente por craqueo con vapor de naftas, etileno o GLP y es necesario efectuar una destilación para la obtención del producto final (figura 9).



Figura 9. Planta de procesos quimicos.

- Otras áreas en las que se emplea la destilación son:
  - Plantas productoras de bebidas alcohólicas (destilerías.)
  - Plantas que procesan gas natural.
  - Obtención de aceites esenciales a partir de materias aromáticas.

## 1.5 CLASIFICACIÓN DE LOS DIFERENTES TIPOS DE DESTILACIÓN.

### 1.5.1 DESTILACIÓN DIFERENCIAL.

Si durante un número infinito de evaporaciones instantáneas sucesivas de un líquido, solo se evapora instantáneamente una porción infinitesimal del líquido cada vez, el resultado neto sería equivalente a una destilación diferencial o sencilla.

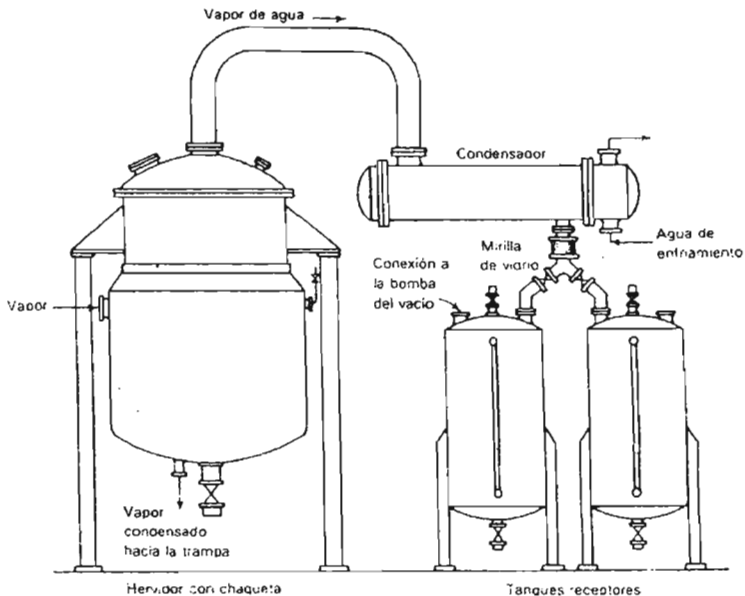


Figura 10. Olla de destilación diferencial.

En la práctica, esto solo puede ser aproximado. Un lote de líquido se carga en una caldera o destilador equipado con algún tipo de dispositivo de calentamiento; por ejemplo, con una chaqueta de vapor como el de la figura 10. La carga se hierve lentamente y los vapores se descargan en un condensador tan pronto como se forman, aquí se licúan y el condensado (destilado) se almacena en el colector. El aparato es básicamente una réplica a gran escala del matraz y refrigerante de destilación ordinario de laboratorio. La primera porción del destilado será la más rica en la sustancia más volátil,



conforme continúa la destilación el producto evaporado se va empobreciendo. Por lo tanto, el destilado puede recolectarse en varios lotes separados, llamados “fracciones”, se obtiene así una serie de productos destilados de diferente pureza.

Si con una operación de este tipo se quiere lograr, aun cuando sea aproximadamente, las características teóricas de una destilación diferencial, se tendrá que proceder en forma infinitamente lenta, para que el valor desprendido del líquido este en cualquier momento en equilibrio con dicho líquido. Debe eliminarse todo arrastre y no debe existir enfriamiento ni condensación del vapor antes de que entre en el condensador.

### 1.5.2 DESTILACIÓN EXTRACTIVA.

Este es un método de rectificación de multicomponentes cuyo propósito es similar a la destilación azeotrópica. A una mezcla binaria que es difícil o imposible de separar por los métodos ordinarios, se le agrega un tercer componente, conocido como “disolvente”, el cual altera la volatilidad relativa de los componentes originales y permite; de esa forma, la separación. Sin embargo; el disolvente agregado es de baja volatilidad, ni siquiera se evapora de modo apreciable en el fraccionador.

Como ejemplo de esta operación, considérese el proceso de la figura 11. La separación de tolueno ( $p_e = 110.8\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) de hidrocarburos parafínicos del mismo peso molecular aproximadamente, es o bien muy difícil o bien imposible debido a la volatilidad relativamente bajo o azeotropismo; sin embargo, esta separación es necesaria para recuperar tolueno a partir de ciertas mezclas de hidrocarburos del petróleo. Utilizando isooctano ( $p_e = 93\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) como ejemplo de un hidrocarburo parafínico, en la figura 11a se muestra que el isooctano es el más volátil en esta mezcla, pero la separación es obviamente difícil. Sin embargo, en presencia de fenol ( $p_e = 181.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), la volatilidad relativa del isooctano aumenta, de forma que la separación del tolueno es relativamente sencilla con aproximadamente 83 % en mol de fenol en el líquido. En la figura 11b se muestra un diagrama de flujo para lograr la separación. En ese diagrama, la mezcla binaria se introduce más o menos en el centro de la torre de destilación extractiva (1); el

fenol, como disolvente, se introduce cerca de la parte superior, a fin de que posea concentraciones elevadas en la mayoría de los platos en la torre. En estas condiciones, el isooctano se destila fácilmente como producto principal, mientras que el tolueno y el fenol se separan como residuo. Aunque el fenol tiene un punto de ebullición relativamente elevado, su presión de vapor es suficiente para que pueda evitarse su presencia en el producto principal. La sección de recuperación del disolvente en la torre, que puede ser relativamente corta, sirve para separar el fenol del isooctano. El residuo de la torre debe rectificarse en una torre auxiliar (2), para separar el tolueno del fenol que se recircula; esta es una separación relativamente sencilla. En la práctica, el hidrocarburo parafínico es una mezcla y no isooctano puro, pero el principio de la separación es el mismo.

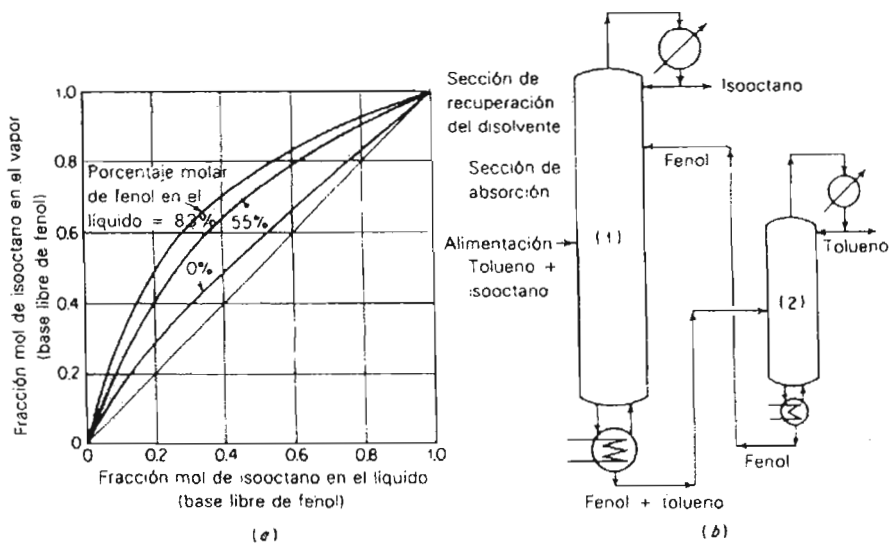


Figura 11. Destilación extractiva de tolueno – isooctano con fenol.

Un proceso de este tipo depende de la diferencia del alejamiento del ideal entre el disolvente y los componentes de la mezcla binaria que se va a separar. En el ejemplo dado, tanto el tolueno como el isooctano por separado forman soluciones líquidas no ideales con el fenol, pero la no – idealidad es mayor con el isooctano que con el tolueno. Por lo tanto, con las tres sustancias presentes, el tolueno y el isooctano se comportan

como una mezcla no ideal y su volatilidad relativa se vuelve mas alta. Las consideraciones de este tipo forman las bases para la elección de un disolvente para la destilación extractiva. Por ejemplo, si una mezcla de acetona ( $p_e = 56.4\text{ }^\circ\text{C}$ ) y metanol ( $p_e = 64.7\text{ }^\circ\text{C}$ ), los cuales forman un azeótropo binario, se van a separar por destilación extractiva, probablemente se puede escoger un disolvente adecuado entre el grupo de alcoholes alifáticos. El butanol ( $p_e = 117.8\text{ }^\circ\text{C}$ ), puesto que es un miembro ideal con el metanol, forma soluciones básicamente ideales con él, las cuales se separan muy fácilmente. Sin embargo, formaran soluciones que se desvían positivamente del ideal con la acetona; por lo tanto, los equilibrios vapor – líquido acetona – metanol se alterarán sustancialmente en mezclas ternarias. Si el butanol no forma un azeótropo con la acetona y si altera el equilibrio vapor – líquido de la mezcla acetona – metanol lo suficiente para destruir el azeótropo en este sistema, servirá como un disolvente para la destilación extractiva. Cuando los 2 sustancias de la mezcla binaria que se va a separar son muy parecidas químicamente, será necesario un disolvente de naturaleza química completamente distinta. Por ejemplo, la acetona y el furfural son útiles como disolventes en la destilación extractiva para separar los hidrocarburos: 2 – butano y n – butano (Seider y col., 1999).

### 1.5.3 DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA.

Este es un caso especial de destilación de multicomponentes, que se utiliza en la separación de aquellas mezclas binarias muy difíciles o imposibles de separar mediante el fraccionamiento ordinario. Si la volatilidad relativa de una mezcla binaria es muy baja, la rectificación continua de la mezcla para obtener productos casi puros exigirá relaciones de reflujo elevadas y requerimientos caloríficos correspondientes elevados, torres de sección transversal grande y gran número de platos. En otros casos, la formación de un azeótropo binario puede imposibilitar la producción de productos casi puros mediante fraccionamiento ordinario. En estas condiciones, un tercer componente, algunas veces llamado “arrastrador”, puede agregarse a la mezcla binaria, para formar un nuevo azeótropo de bajo punto de ebullición con aquel componente original.

Un azeótropo es una mezcla líquida que tiene un máximo o un mínimo en los puntos de ebullición, con relación a los puntos de ebullición de las composiciones de las mezclas a su alrededor. Los puntos de ebullición de los componentes puros presentes en la mezcla deben ser lo suficientemente cercanos para permitir la formación de un azeótropo. Una mezcla cuyos componentes tienen puntos de ebullición cercanos puede formar un azeótropo. Una mezcla de cuyos componentes tiene puntos de ebullición cercanos puede formar un azeótropo cuando ocurren pequeñas desviaciones de las soluciones líquidas ideales. Una mezcla con puntos de ebullición distantes de sus componentes puede no formar un azeótropo, aun cuando no constituya una mezcla líquida, con características considerablemente no ideales. Los azeótropos se presentan raras veces en las mezclas constituidas por componentes cuyos puntos de ebullición difieren en más de 30 °C (54 °F).

Un azeótropo es homogéneo solo si está presente una fase líquida. El punto de ebullición máximo de un azeótropo homogéneo puede presentarse, si las desviaciones de la ley de Raoult, son negativas ( $\gamma_i^L < 1.0$ ). Para que un azeótropo sea de punto de ebullición mínimo, es necesario que las desviaciones de la ley de Raoult sean positivas ( $\gamma_i^L > 1.0$ ). Si las desviaciones positivas son lo suficientemente grandes puede ocurrir la separación de las fases y se formará un azeótropo heterogéneo, con un punto de ebullición mínimo y con una fase vapor en equilibrio con las dos fases líquidas (Seider y col., 1999).

### 1.5.3.1 DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA HETEROGÉNEA.

La destilación azeotrópica heterogénea es un proceso practicado ampliamente para la deshidratación de un amplio rango de materiales incluyendo ácido acético, cloroformo, etanol y muchos alcoholes mas grandes. La técnica envuelve la separación de componentes de puntos de ebullición cercanos por adición de un tercer componente llamado *entrainer*, para formar un punto de ebullición mínimo, normalmente el azeótropo ternario el cual se lleva el agua al domo llevándose un poco de los otros disolventes y estos salen en mayor proporción por los fondos. El destilado es condensado en dos fases

líquidas; la orgánica, “rica en el entrainer” que es la fase que se refluye a la columna, mientras la fase acuosa es decantada. Dado el comportamiento no – ideal, la separación de las fases, la composición del destilado final y la posible existencia de múltiples estados estáticos en tales sistemas, las columnas como estas pueden ser extremadamente difíciles de simular y operar. Una aproximación sistemática al problema puede en ocasiones salvar a los operadores de muchos dolores de cabeza.

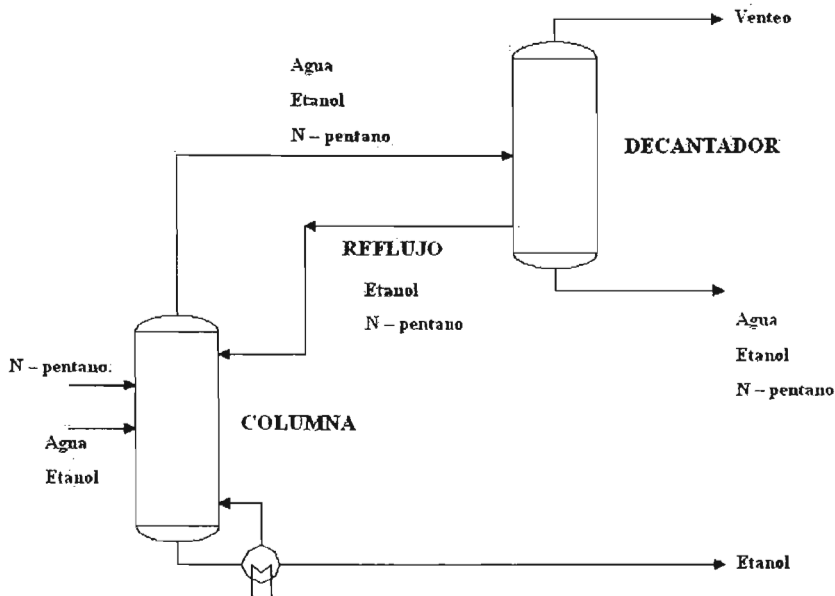


Figura 12. Destilación azeotrópica de etanol –agua con n – pentano.

En la figura 12 podemos observar una representación de una destilación azeotrópica heterogénea de etanol – agua con n – pentano, la mezcla agua – etanol se alimenta a la columna y esta se pone en contacto con el entrainer, n – pentano, en la columna se forma el azeótropo ternario etanol / agua / n – pentano, y esta es enviada al decantador donde la fase orgánica rica en el entrainer; n – pentano, es recirculada a la columna y la fase acuosa; rica en agua es retirada del sistema. El etanol parcialmente puro es obtenido por los fondos de la columna.

#### **1.5.4 DESTILACIÓN AL VACÍO.**

Muchas sustancias orgánicas no pueden calentarse ni siquiera a temperaturas próximas a sus puntos normales de ebullición, porque se descompondrían químicamente. Entonces, si estas sustancias se van a separar por destilación, se deben mantener bajas las temperaturas correspondientes y la presión. El tiempo de exposición de las sustancias a la temperatura de destilación también debe mantenerse en el mínimo, puesto que de esta forma se reducirá la descomposición térmica. Para destilaciones a presiones absolutas del orden de 7 a 35 kN/m<sup>2</sup> (1 a 5 lb<sub>f</sub>/in<sup>2</sup>), se deben utilizar torres empacadas, se pueden diseñar platos de capucha y perforados con caídas de presión cercanas a 350 N / m<sup>2</sup> (0.05 lb<sub>f</sub>/in<sup>2</sup>, o 2.6 mmHg); también se utilizan diseños más sencillos, para los cuales las caídas de presión son del orden de 0.015 psi (0.75 mmHg). Las columnas de aspersión agitadas mecánicamente y las de paredes mojadas proporcionan caídas de presión aun más pequeñas.

En la destilación de muchos productos naturales, como en la separación de vitaminas a partir de aceites animales y de pescado, lo mismo que en la separación de muchos productos sintéticos industriales (como plastificantes), la temperatura no puede exceder los 200 a 300 °C, aproximadamente; a estas temperaturas, las presiones de vapor de las sustancias pueden ser de una fracción de milímetro de mercurio. Por supuesto, el equipo tradicional es completamente inadecuado para estas separaciones, no – solo porque la caída de presión provocaría temperaturas elevadas en el fondo de las columnas, sino también porque el largo tiempo de exposición a las temperaturas predominantes induciría una elevada retención.

#### **1.5.5 DESTILACIÓN SENSIBLE A LA PRESIÓN (PRESSURE SWING DISTILLATION).**

La recuperación de solventes en los procesos industriales esta recibiendo una buena parte de la atención recientemente, tanto de ingenieros y químicos esforzándose para reducir los altos costos y minimizar la contaminación. La destilación frecuentemente

es considerada para manejar estas corrientes de recuperación porque esta es una unidad de operación robusta y familiar, y porque el equipo requerido quizás existe en el sitio. La presencia de un azeótropo; sin embargo, limita severamente el uso de la destilación estándar.

Un azeótropo de punto mínimo limita la habilidad de una columna de destilación para separar completamente los componentes de una mezcla binaria por la limitación de la composición de las corrientes salientes. La separación es particularmente un reto si el azeótropo es homogéneo; que significa esto, si el azeótropo no forma una separación de fases al momento de ser condensado. En muchos casos, la separación de las fases no ocurre con un enfriamiento significativo, así, la decantación no puede ser utilizada para facilitar el proceso. La separación puede llevarse a cabo algunas veces por adición de un agente que altera la volatilidad de los componentes de la alimentación, pero esto complica los procesos por la introducción de un tercer componente.

En ocasiones un simple cambio en la presión altera la volatilidad relativa; en algunos casos esto resulta en un cambio significativo en la composición azeotrópica y permite la recuperación de los componentes alimentados sin adición de un agente de separación.

Aquí solo se consideran los azeótropos de punto mínimo porque muchos de los azeótropos encontrados en las operaciones de reciclado caen dentro de esta categoría. Dependiendo de si uno o ambos componentes necesitan ser recuperados, la destilación sensible a la presión puede envolver tanto una o 2 columnas. Los procesos que implican columnas duales son comúnmente llamados; ***pressure swing distillation*** o como aquí los denominamos sistemas de destilación sensible a la presión.

Los procesos más comunes que son comercialmente viables y conocidos y donde se muestran aplicaciones de los procesos de destilación sensible a la presión (PSD) incluyen la separación de THF – agua, acetonitrilo – agua, metanol – MEK y acetona – metanol.

Desdichadamente, los datos azeotrópicos frecuentemente no están disponibles a presiones no atmosféricas, y la generación de estos datos es costosa, así los diseñadores de procesos no consideran rutinariamente la PSD.

#### **1.5.5.1 RECUPERACIÓN DE UN COMPONENTE PURO.**

Si solamente uno de los componentes es el que se quiere recuperar quizás una sola columna sea capaz de proporcionar los resultados requeridos. La columna de la figura 13a produce esencialmente un producto puro en los fondos y una corriente en los destilados es recirculada si la alimentación esta suficientemente concentrada en el componente de interés y el azeótropo es suficientemente rico en el componente de interés. Hay que tener en cuenta que aun si el azeótropo no esta concentrado en la impureza a presión atmosférica, este quizás se concentre a una presión diferente.



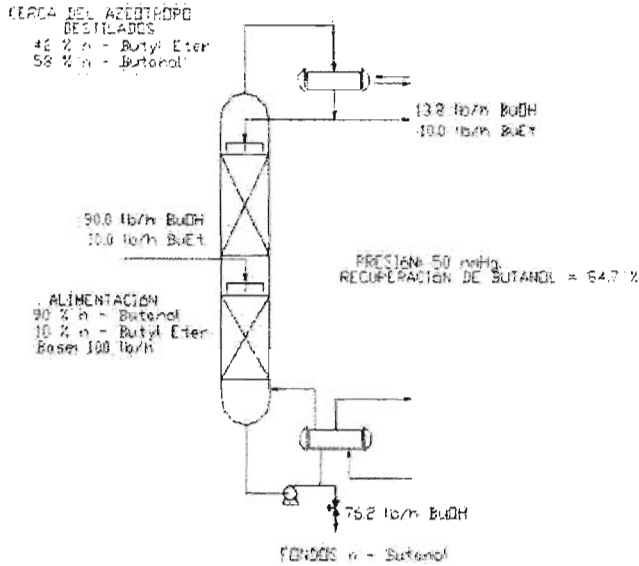


Figura 13a. Destilación de una alimentación rica en butanol relativa al azeótropo de Butanol / Éter butílico.

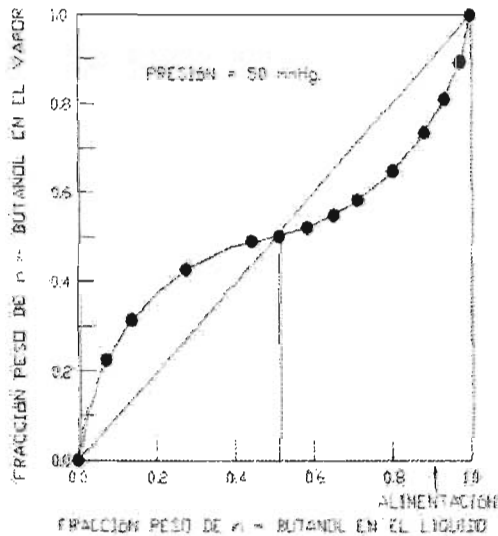


Figura 13b. Destilación de una alimentación rica en butanol relativa al azeótropo de Butanol / Éter butílico. Curva de equilibrio líquido - vapor para un sistema n - Butanol / n - Éter Butílico.

En el ejemplo de la figura 13a y 13b el componente con el punto de ebullición normal bajo es producido como un componente puro en los fondos (punto de ebullición normal = 117 °C para el n – butanol contra 142 °C para el n – Éter butílico.) Aunque esto quizás pareciera contrario, esto ocurre porque la volatilidad relativa es invertida a composiciones cercanas al punto azeotrópico en la curva de equilibrio liquido – vapor (VLE). El azeótropo forma una mezcla con un punto de ebullición mínimo que puede ser considerado como un seudo componente “ligero.” El azeótropo ligero va hacia los domos o destilados, forzando al n – butanol puro a ir hacia los fondos.

### 1.5.6 DESTILACIÓN MOLECULAR.

Esta es una forma de destilación a presión muy baja, que se lleva a cabo industrialmente a presiones absolutas del orden de 0.3 a 3 N / m<sup>2</sup> (0.003 a 0.3 mmHg); es adecuada para las sustancias sensibles al calor.

La rapidez a la cual ocurre la evaporación en una superficie líquida esta dada por la ecuación de Langmuir,

$$N_A = 1006 \bar{p}_A \left( \frac{1}{2\pi M_A R' T} \right)^{0.5} \dots\dots\dots(1.5)$$

en donde  $R'$  es la constante gaseosa. A presiones ordinarias; sin embargo, la rapidez neta de evaporación es mucho mas que esta, debido a que las moléculas evaporadas regresan al liquido después de que ocurren choques en el vapor. Reduciendo la presión absoluta a valores utilizados en la destilación molecular, la trayectoria media libre de las moléculas se vuelve muy grande, del orden de 1 cm. Entonces, si la superficie de condensación se coloca tan solo a unos cuantos centímetros de la superficie líquida que se esta evaporando, muy pocas moléculas regresaran al liquido y la rapidez neta de evaporación de cada sustancia en una mezcla binaria se aproximara a la dada por la ecuación (1.5). Ahora, la composición del vapor, o la combinación del destilado, será diferente de la proporcionada por una evaporación ordinaria en el equilibrio y la relación de los componentes en el destilado se aproximara a:

$$\frac{N_A}{N_B} = \frac{\text{moles de A}}{\text{moles de B}} = \frac{\bar{P}_A / M_A^{0.5}}{\bar{P}_B / M_B^{0.5}} \dots\dots\dots(1.6)$$

Sin embargo, si esta relación se va a mantener, la superficie del líquido debe renovarse rápidamente, porque de lo contrario la relación de los componentes en la superficie cambiará al continuar la evaporación. La agitación o ebullición vigorosas durante las destilaciones ordinarias no ocurren en las condiciones de la destilación molecular; en muchos aparatos se obliga al líquido a fluir a manera de una delgada película sobre una superficie sólida; de esta forma se renueva continuamente la superficie y al mismo tiempo se mantiene una baja retención del líquido.

En la figura 14 se muestra un aparato utilizado industrialmente para lograr una destilación molecular. El líquido desgasificado que se va a destilar se introduce continuamente en el fondo de la superficie interna de un rotor, una superficie cónica giratoria. El diámetro del rotor puede ser de 1.5 m en la parte superior y puede girar a velocidades de 400 y 500 r.p.m. Entonces, una película muy delgada del líquido que se va a destilar, de 0.05 a 0.1 mm de espesor, se extiende sobre la superficie interna y viaja rápidamente hasta la parte periférica superior bajo la acción de la fuerza centrífuga.

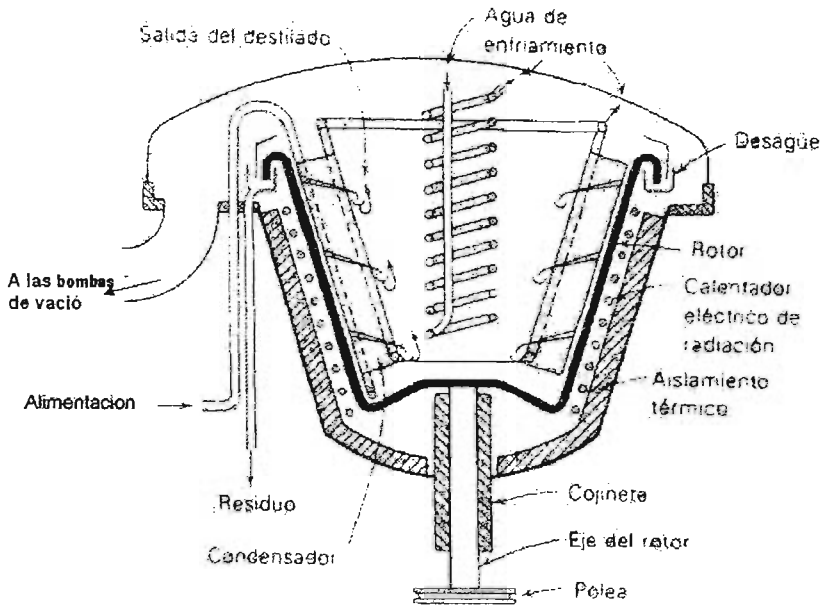


Figura 14. Sección esquemática, caldera centrífuga molecular de Hickman.

Se proporciona calor al líquido a través del rotor mediante calentadores eléctricos y el material evaporado se condensa sobre el condensador con forma de persiana y enfriado con agua. Este se mantiene a temperaturas lo suficientemente bajas para evitar la reevaporación o el retorno al líquido de las moléculas evaporadas. El residuo líquido se recoge en la trampa de recolección en la parte superior del rotor; el destilado se deja escurrir por los canales de recolección en el condensador. Cada producto se bombea desde el cuerpo de la caldera, que esta evacuada a las presiones bajas necesarias para la destilación molecular; el tiempo que las sustancias permanecen en la caldera es muy corto, del orden de un segundo o menos. Un aparato de este tipo es capaz de manejar de  $5(10^{-5})$  a  $25(10^{-5})$   $m^3/s$  del líquido que se va a destilar y da una separación del 80 al 95 % de la indicada en la ecuación (1.6). Se requieren de destilaciones múltiples para las separaciones de varias etapas.

Las calderas de película descendente están formadas por dos tubos verticales concéntricos. El tubo interior se calienta internamente y el líquido que se va a destilar

fluye como una película delgada y en forma descendente por la pared exterior del tubo interior. El tubo exterior es el condensador, y el espacio anular está al vacío. Algunos arreglos de este tipo requieren la limpieza continua de la película mediante una hoja giratoria.

### 1.5.7 DESTILACIÓN REACTIVA.

En la industria de procesos químicos, las reacciones químicas y la purificación de los productos deseados por destilación son de manera usual llevados a cabo secuencialmente. En muchos casos, el funcionamiento de esta estructura clásica de proceso químico puede ser significativamente mejorada por la integración de la reacción y la destilación en una unidad multifuncional simple de proceso. Esta integración de concepto es llamado “destilación reactiva” (RD) (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Seider y col., 1999; Fair, 1998).

Como ventajas de esta integración, las limitaciones del equilibrio químico se pueden dominar, se pueden conseguir altas selectividades, el calor de reacción puede ser aprovechado para la destilación, se puede evitar el uso de disolventes auxiliares, y se pueden separar mezclas azeotrópicas mas fácilmente que en las operaciones que no incluyen RD. Se incrementa la eficiencia del proceso y se reducen los costos capitales de inversión y los costos operacionales como un resultado directo de este tipo de acercamiento. Algunas de estas ventajas son alcanzadas usando la reacción para mejorar la separación, otras son alcanzadas al usar la separación para mejorar la reacción.

Debido a la interacción de la reacción y la destilación en un aparato simple, el estado estático y el comportamiento dinámico operacional de la RD puede ser muy complejo. Por tanto, las estrategias de control de proceso convenientes tienen que ser desarrolladas y aplicadas, asegurando una operación óptima y segura. Esta es una muy importante área de investigación y desarrollo actual y futuro.

No obstante el hecho de que la idea básica de combinar la reacción química y la destilación es vieja, ha habido un enorme interés creciente en el diseño y operación de los procesos RD en recientes años. La figura 15 muestra el número de artículos que han aparecido sobre el tema durante los últimos 30 años. De una manera análoga, el interés industrial de aplicar esta tecnología de proceso atractiva ha incrementado continuamente. Esto está reflejado por el firme y creciente número de patentes aplicadas desde 1970 (Sundmacher y col., 2003; Fair, 1998).

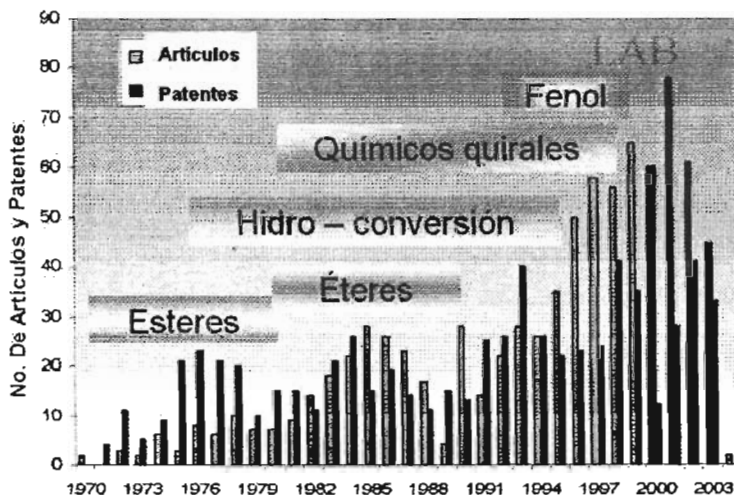


Figura 15. Publicaciones y patentes sobre destilación reactiva en las últimas tres décadas.

Esta técnica ofrece una opción prometedora para las reacciones de equilibrio limitado usando catalizadores sólidos. La destilación reactiva es un proceso donde una reacción química y una destilación multi – etapas pueden ser llevados a cabo de manera simultánea. El concepto de la destilación reactiva no es un concepto nuevo. La técnica fue aplicada primero en el año de 1920 a los procesos de esterificación usando catalizador homogéneo y fue redescubierta por Keyes en 1932. Una columna de destilación reactiva, típica consiste de tres zonas principales (ver figura 16) la *zona de destilación reactiva* contiene el catalizador muy a menudo en forma de empaque estructurado. La separación de los inertes toma lugar en la *sección de rectificación* de la columna, y la purificación de los productos toma lugar en la *sección de agotamiento*.

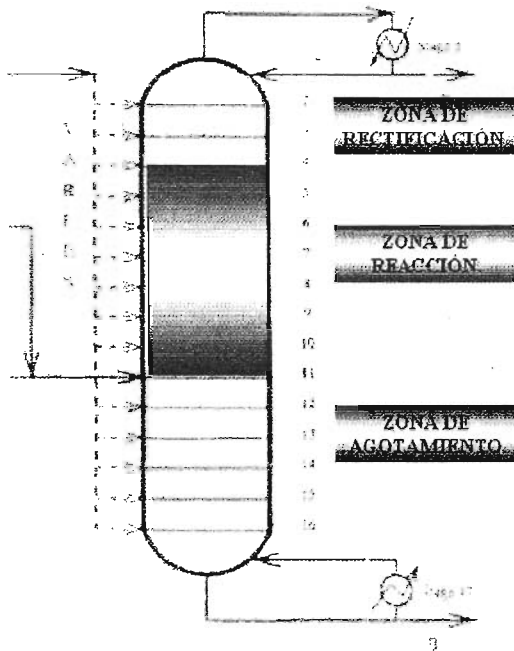


Figura 16. Configuración de una columna de destilación reactiva.

### 1.5.7.1 ¿POR QUÉ CONSIDERAR LA DESTILACIÓN REACTIVA?

El beneficio más importante de la destilación reactiva es la reducción en el capital de inversión. Al llevar a cabo la reacción química y la destilación en el mismo equipo, un paso del proceso es eliminado así como sus correspondientes bombas, tubería e instrumentación (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Seider y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998).

Otro beneficio depende de la reacción química específica. Las reacciones químicas que están caracterizadas por un desfavorable equilibrio de reacción, un elevado calor de reacción y elevados intervalos de reacción a temperaturas de destilación, son particularmente buenos candidatos para la RD.

Otras ventajas que presenta esta clase de operaciones es la eliminación de la complicada recuperación de productos y, la separación de los reactivos no convertidos, todos los cuales guían al ahorro de energía y de equipo. Comparado con los acercamientos convencionales, la RD quizás también mejora otros factores como la conversión de los reactivos, la selectividad y la transferencia de masa.

#### **1.5.7.2 ASPECTOS DE DISEÑO PARA LA DESTILACIÓN REACTIVA.**

Diseñar una columna de destilación reactiva requiere de los conocimientos de la cinética de la reacción y el equilibrio, el comportamiento de la fase, y los elementos característicos. Al mismo tiempo uno debe estar seguro que la destilación reactiva es la mejor elección para el proceso. Los aspectos económicos son el punto final; ¿Acortará la RD los costos de la síntesis de los productos?, o ¿no lo hará? (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998; Degarmo y col., 1992).

Para ayudar a resolver estas preguntas, los siguientes criterios deben tomarse en cuenta:

- Hay necesidad de tener una ventaja en mover el equilibrio de la reacción química. Si la conversión en el equilibrio es alta – por así decirlo 69 % o más – hay un pequeño incentivo por usar la RD para poner esta conversión en un valor más lejano.
- Los productos de la reacción deben hervir en un intervalo apropiado y ser separables por destilación. Si los puntos de ebullición de los productos deseados en cambio caen en un intervalo de otros productos, serán necesarias más columnas de destilación.
- Las condiciones de presión y temperatura para la separación deben ser compatibles con las condiciones de la reacción ya que ambas operaciones son llevadas a cabo juntas. Las condiciones óptimas de presión y temperatura para la reacción necesitan ser las mismas que las requeridas para la separación.



- Solamente una fase líquida deberá estar presente. Una segunda fase líquida puede introducir algunos problemas en el entendimiento y el diseño de las características hidráulicas de la columna.
- Si el catalizador es un sólido, este debe ser acomodado desde un punto de vista económico y razonable. La colocación del catalizador dentro de la columna no debe crear una excesiva presión de servicio, y no deberá requerir un diámetro de columna excesivo.
- Un modelo adecuado debe estar disponible para poder determinar el comportamiento de la concentración a través de la columna y para juzgar las necesidades del reflujo y de calentamiento.

#### **1.5.7.2.1 DESARROLLO DE LOS PROCESOS DE DESTILACIÓN REACTIVA EN LA INDUSTRIA DE PROCESOS QUÍMICOS.**

La combinación de la destilación y la reacción es posible; por supuesto, solo si las condiciones de ambas operaciones pueden ser combinadas. Esto significa que la reacción tiene que mostrar datos para conversiones razonables a niveles de presión y temperatura que son compatibles con las condiciones de destilación. El tipo de catalizador es también muy importante. Los catalizadores homogéneos son útiles en muchas situaciones pero necesitan un paso adicional de separación para recircular el catalizador. Esto se puede evitar con los catalizadores heterogéneos, pero con ellos son necesarias construcciones especiales para fijar los catalizadores en la zona de reacción. Si todo armoniza; surgen considerables ventajas: como en el caso de la producción de acetato de metilo. Si utilizamos el proceso de destilación reactiva, por ejemplo, solo es necesaria una columna en comparación de nueve más un reactor mediante el proceso Eastman Kodak, figura 17. (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Degarmo y col., 1992)

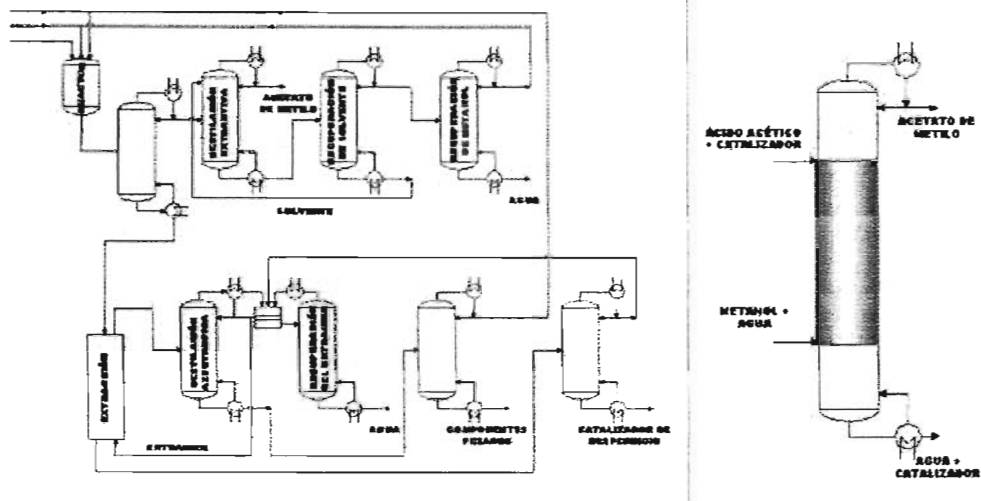


Figura 17. Proceso de Eastman Kodak para la producción de acetato de metilo contra el proceso de destilación reactiva.

¿Es esta una excepción? o ¿acaso esto representa un tipo de proceso con un potencial considerable para llevarlo acabo?

Las preguntas comunes son:

- Cómo los procesos pueden ser identificados y exhiban que pueden ser potenciales para la aplicación de la destilación reactiva.
- Cómo tales procesos pueden ser desarrollados y,
- Cómo puede ser diseñado el equipo.

Algunas de estas respuestas serán ofrecidas desde un punto de vista industrial. La primera pregunta se refiere a la fase de la síntesis del proceso, la segunda al desarrollo del proceso por simulación y validación experimental, y la tercera a la elección y diseño del equipo adecuado.

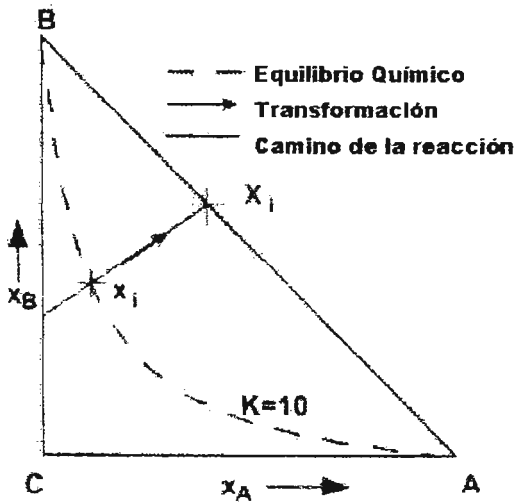
### 1.5.7.3 SÍNTESIS DE PROCESOS.

En la destilación reactiva, la reacción química es súper impuesta en la separación de destilación. Por el otro lado, esto resulta en efectos sinérgicos, tales como un traslado en el equilibrio químico como resultado de que los productos están siendo removidos y los límites de la destilación están siendo excedidos debido a la reacción, mientras; por el otro lado, son precisamente estas fuerzas sinérgicas las cuales hacen a la destilación reactiva tan extraordinariamente compleja. Se tiene en mente que hasta hoy el proceso Eastman Kodak no fue patentado hasta 60 años después de la primera patente del acetato de metilo (Sundmacher y col., 2003; Degarmo y col., 1992).

Una trayectoria vital de la síntesis de procesos es por consiguiente reducir la complejidad de la destilación reactiva para habilitar soluciones simples de esta clase para ser reconocidas rápidamente. Para analizar los procesos envolviendo reacciones reversibles sistemáticamente, una estrategia de síntesis de procesos menos compleja ha sido desarrollada. Un elemento de esta estrategia es el análisis de líneas de destilación reactiva. Las líneas de destilación reactiva permiten la posibilidad de que los procesos de destilación reactiva puedan ser examinados de una manera simple. La simplificación esta basada en el hecho de que, de acuerdo a la regla de fase de Gibbs (figura 18), el número de grados de libertad de un sistema en equilibrio físico y químico es reducido por el número de reacciones de equilibrio independientes. Así, en el caso de un sistema líquido ebuliente compuesto de 3 componentes A, B y C, los cuales reaccionan de acuerdo a  $A + B \rightleftharpoons C$ , solamente una concentración tiene que ser definida para fijar la composición, diferente del caso de un sistema sin reacción donde 2 concentraciones tienen que ser definidas.

# Transformación del sistema A + B ↔ C

Regla de fase de Gibbs:  $F = C - Ph - R + 2$



$$\sum_{i=1}^{nc} v_i A_i = 0$$

$$X_i = \frac{x_i - \frac{v_i x_P}{v_P}}{1 - \frac{v_T x_P}{v_P}}$$

$$Y_i = \frac{y_i - \frac{v_i y_P}{v_P}}{1 - \frac{v_T y_P}{v_P}}$$

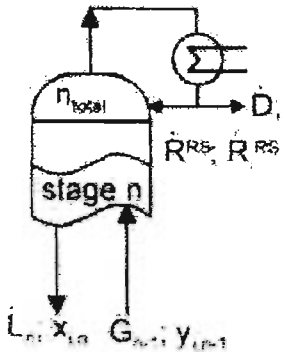
Figura 18. Regla de Gibbs.

Para ser capaces de manejar estos parámetros de concentraciones apropiadamente, varios autores han desarrollado métodos de transformación. Estos métodos de transformación habilitan a la destilación reactiva para ser descritos por un sistema de ecuaciones que es conocido por la destilación convencional. La transformación convierte los parámetros de concentración  $x$  y  $y$ , para las concentraciones en las fases líquida y gaseosa en los parámetros de concentración  $X$  y  $Y$ , figura 19.

Al mismo tiempo, la transformación elimina el término de reacción en la ecuación de balance. La línea de operación para la sección de rectificación de una columna de reacción es formalmente idéntico a la línea de operación de una columna de destilación no reactiva. Un rango de reflujo infinito da una expresión que es formalmente idéntico a la que se utiliza para el cálculo de las líneas de la destilación convencional. Por lo tanto, nosotros nos referimos a las líneas que han sido calculadas por este procedimiento como

líneas de destilación reactiva. Estas analogías son encontradas por todas las relaciones que son importantes en destilación.

**BALANCE: LÍNEA DE OPERACIÓN EN LA SECCIÓN DE RECTIFICACIÓN DE UNA COLUMNA RD**



$$G_{n-1} = D + L_n - R^{RS}$$

$$G_{n-1} y_{i,n-1} = D x_{i,D} + L_n x_{i,n} - R_i^{RS}$$

$$\bar{G}_{n-1} = \bar{D} + \bar{L}_n$$

$$\bar{G}_{n-1} Y_{i,n-1} = \bar{D} X_{i,D} + \bar{L}_n X_{i,n}$$

$$Y_{i,n-1} = \frac{v_n}{v_n + 1} X_{i,n} + \frac{1}{v_n + 1} X_{i,D}$$

$$v \rightarrow \infty; Y_{i,n-1} = X_{i,n}$$

Figura 19. Transformación de variables.

Estas analogías se vuelven particularmente claras si nosotros miramos la síntesis del acetato de metilo (AcOMe) a partir de metanol (MeOH) y ácido acético (HAC) como un ejemplo. Esencialmente nosotros vemos diagramas que son similares a los diagramas de líneas de destilación de los sistemas no reactivos. Como un resultado de las transformaciones, las configuraciones de las cuatro sustancias puras aparecerán en las esquinas de un cuadrado y las configuraciones de los sistemas binarios no reactivos a lo largo de las orillas.

El punto de ebullición mas alto en el sistema es el ácido acético, mientras el punto de ebullición mas bajo es mostrado por el azeótropo MeOH – AcOMe (figura 20). El diagrama de líneas de destilación reactiva hace esto posible para determinar las regiones de producto de destilación reactiva a reflujo infinito.

## Líneas de destilación reactiva: $\text{HAC} + \text{MeOH} \rightleftharpoons \text{AcOMe} + \text{H}_2\text{O}$

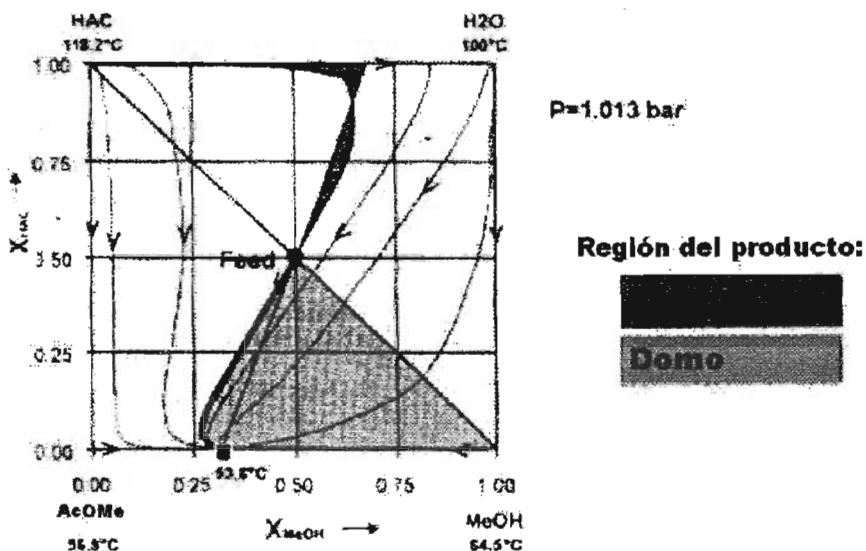


Figura 20. Líneas de destilación reactiva con una alimentación.

Análogamente a la destilación convencional, los productos de los domos y los fondos tienen que descender sobre una línea de destilación reactiva y sobre la línea de balance. Puede ser visto que los productos deseados, llamados AcOMe y agua, no caen en la región de producto.

Pero por analogía con la destilación extractiva, puede ser esperado que un segundo punto debería drásticamente ensanchar la región del producto a un rango de reflujo finito y así también incrementar la conversión. Entre los dos puntos de alimentación, el comportamiento de la columna es perpendicular a las líneas de destilación (figura 21). Desde que este efecto está basado en la naturaleza finita del rango de reflujo empleado, nosotros podemos esperar primero incrementar la pureza del producto y la conversión con un incremento en el rango de reflujo y luego lentamente lo disminuimos de nuevo. El valor limitado que es establecido para un reflujo infinito es determinado por la concentración azeotrópica en el sistema acetato de metilo – metanol.

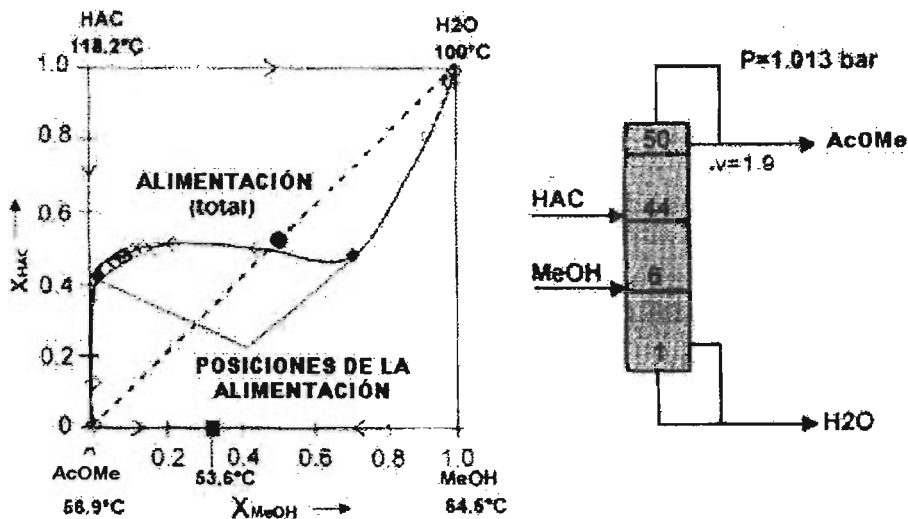


Figura 21. Líneas de destilación reactiva con dos alimentaciones.

Los cálculos hechos usando un modelo de etapas en equilibrio se ajustaron bien con los datos experimentales sobre las mediciones del comportamiento usando anillos catalíticos como internos (figura 22). Sobre la base de estos resultados, se pueden contradecir varias publicaciones que atribuyen al decrecimiento por efecto de la cinética de la reacción. El primer efecto es el carácter primario del punto silla de los productos y la selección asociada de un segundo punto de alimentación (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Fair, 1998; Güttinger, 1998).

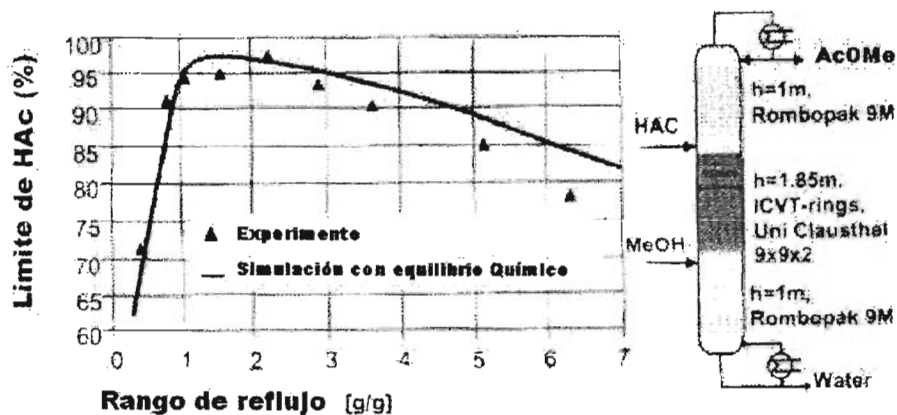


Figura 22. Comparación de una simulación: experimentos para un modelo de etapas en equilibrio.

#### 1.5.7.4 DISEÑO DE PROCESO Y OPTIMIZACIÓN.

Mientras la síntesis de procesos da muy buenos puntos de referencia, para una implementación industrial es necesario obtener resultados cuantitativos, los cuales deberán ser tan exactos como sea posible.

Primeramente, la síntesis de procesos es usada para determinar si la destilación reactiva es aplicable, y si es posible la configuración requerida (segundo punto de alimentación, combinación de las zonas reactiva y no reactiva). Esto provee los primeros valores iniciales y así un buen punto de inicio para derivar en un diseño cero o ideal usando el modelo de etapas. El resultado del modelo de etapa en turno da valores útiles de inicio para su refinamiento usando el modelo de transferencia de masa. Aparte de los cambios en el nivel de detalle del modelo, también es posible sistemáticamente encontrar las herramientas de solución de una a otra (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Kenig y col., 1999; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998; Degarmo y col., 1992).



Después de los estimados iniciales, un primer perfil puede ser determinado por el método de relajación que nos da valores iniciales suficientemente buenos para el uso subsiguiente de un método riguroso de solución (figura 23).

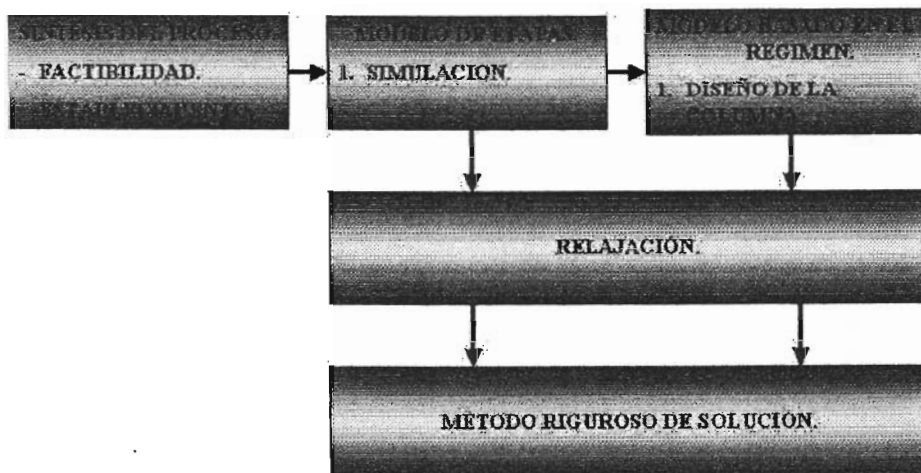


Figura 23. Convergencia con Designer.

La figura 24 muestra un ejemplo de la simulación de un proceso usando el modelo de transferencia de masa y algunos puntos iniciales cinéticos para la reacción. Los resultados de la simulación y los experimentos son mostrados para la preparación del MTBE a partir del isobuteno y del metanol. Este es un ejemplo de una reacción en la cual el número de moles de los productos es diferente del número de moles de los reactivos. El calor de reacción es del mismo orden de magnitud de los calores de vaporización molar de los componentes participantes. Así se puede observar que los puntos simulados y los puntos experimentales se adecuan bien.

SIMULACION DE LA UNIVERSIDAD DE HELSINKI/FINLANDIA.

EXPERIMENTOS CON ANILLOS CATALIZADOS DE LA UNIVERSIDAD CLAUSTHAL/ALEMANIA.

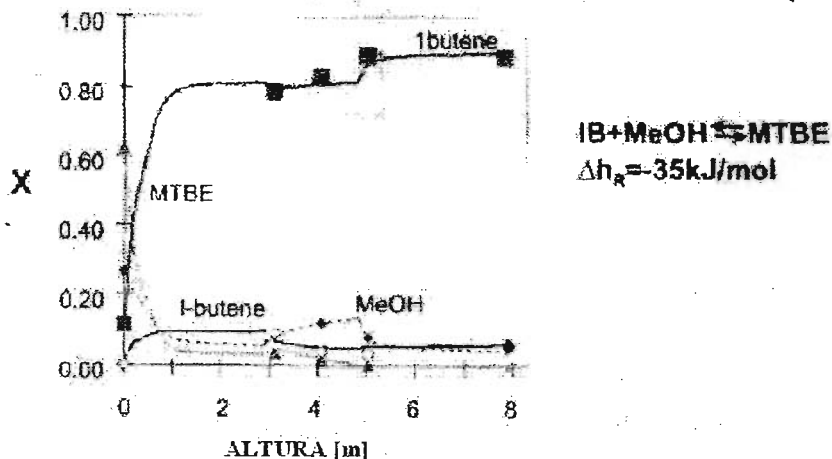


Figura 24. Comparación de un experimento realizado por la Universidad Clausthal / Alemania con una simulación realizado por la Universidad de Helsinki / Finlandia.

#### 1.5.7.5 LIMITACIONES DE LOS MÉTODOS PARA LA SÍNTESIS Y EL DISEÑO: EL PROBLEMA DEL ESCALAMIENTO.

Una pregunta que es por lo menos muy interesante es que puede y que no puede ser conseguido al usar las herramientas y métodos desarrollados en los últimos años. En este sentido, se debe poner atención en la reacción principal y las reacciones secundarias de una esterificación simple, ver la figura 25.

## **Esterificación, reacción principal y reacciones laterales.**

**1. Alcohol + Acido  $\rightleftharpoons$  Ester + Agua**

**2. 2 Alcoholes  $\rightleftharpoons$  Eter + Agua**

**3. Alcohol  $\rightleftharpoons$  Alqueno + Agua**

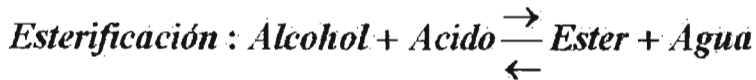
**4. ....**

**5. ....**

Figura 25. Reacción principal y reacciones laterales para la esterificación.

Para un sistema reactivo como este, es muy frecuentemente el caso que por tiempo y razones de costos, un modelo cinético completo no puede ser desarrollado.

Esto quizás sea de poca consecuencia si el químico o el ingeniero de desarrollo de procesos carece de un entendimiento de las reacciones secundarias por el hecho de no estar acostumbrado en los estudios cinéticos, aunque ellos juegan un papel tan grande como para que la destilación no alcance el equilibrio. Sin embargo, el cuidadoso ingeniero de procesos llevara a cabo experimentos en una columna de reacción para verificar las purezas alcanzadas y los productos, y con los resultados de estos experimentos existe un problema de escalamiento. La razón es que en estos experimentos, la reacción y la transferencia de masa interactúan uno con el otro. Esta interacción puede ser explicada con referencia a la reacción principal, figura 26. Si un proceso de separación es impuesto o adherido a esta reacción, los productos agua y ester (solo como ejemplo, debe notarse que no para todos los esteres es el mismo caso) son separados como componentes de bajo punto de ebullición y alto punto de ebullición respectivamente. Sin embargo, la remoción de los productos acelera la reacción hacia delante y si esto sucede al elevar la temperatura o al incrementar la cantidad de catalizador, los productos tienen que ser separados más rápidamente para evitar cambios en la concentración (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998).



$$\frac{\partial [\text{Ester}]}{\partial t} = k^+ [\text{Alcohol}][\text{Acido}] - k^- [\text{Ester}][\text{Agua}]$$

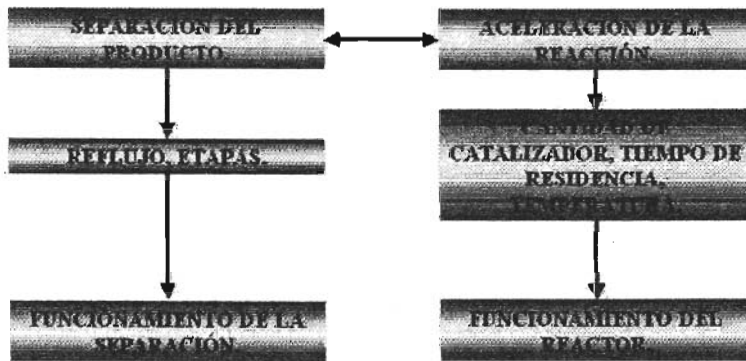


Figura 26. Interacción de una reacción y separación.

Sería bueno referir a “la intensidad de remoción de producto” en una columna reactiva usando el termino de funcionamiento de separación y “lo adecuado de convertir los materiales iniciales” usando el termino de funcionamiento del reactor.

Si un ingeniero de desarrollo tiene que diseñar una columna industrial puramente con base en experimentos pilotos; él tiene que considerar, no solo el funcionamiento de separación sino que también tiene que tomar en cuenta el intervalo de funcionamiento de separación / funcionamiento del reactor así que la reacción principal y las reacciones secundarias avanzan a una extensión comparable en el escalamiento industrial de la columna reactiva. Una forma en la cual esto puede conseguir consiste en construir un sistema de reacción – separación y un sistema de separación del producto en otro, ambos en pruebas piloto o a un nivel de escala industrial. Esto es posible por ejemplo cuando la reacción química es llevada a cabo en presencia de un catalizador heterogéneo en la corriente descendente o con reactores laterales en la columna. Una alternativa es utilizar empaque estructurado con trayectorias bien definidas para el flujo del líquido. Este problema no ha sido bien resuelto, la razón principal es la falta de columnas de referencia

a un nivel de escala industrial. Por ello como podemos observar el camino a emprender es uno u otro de los siguientes:

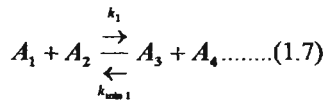
- Desarrollar métodos de escalamiento o,
- Llevar a cabo experimentos a un nivel de escala industrial.

La ultima posibilidad, representa para los ingenieros de procesos un paso hacia atrás al diseño de columnas en la edad de piedra, y esto en muchos casos significaría implementar en las líneas de procesos químicos a la destilación reactiva, aunque una compañía raramente estará preparada; por razones de tiempo y de costos, para construir e integrar plantas experimentales en una escala industrial o semi – industrial. Así el desarrollar un procedimiento adecuado para el escalamiento de los partes internas de las columnas reactivas es un punto clave.

#### **1.5.7.6 ELECCIÓN DEL EQUIPO.**

Como hemos mencionado antes una reacción química y la operación de destilación pueden combinarse favorablemente en una sola unidad; en una columna de destilación simple, en el caso de catalizadores homogéneos y en una columna con internos especiales o un volumen adicional exterior en el caso de catalizadores heterogéneos. Sin embargo las columnas solo son apropiadas para reacciones que son tan rápidas como para conseguir conversiones considerables en el intervalo de tiempo de residencia de tales columnas. Por ello la pregunta es si se puede obtener el potencial total al combinar la reacción y la destilación y si lo es será posible implementarlo industrialmente usando columnas reactivas solamente en lugar de secuencias completas de separación.

En reacciones de equilibrio simple, la ecuación de la reacción puede ser descrita como sigue:



Las constantes de equilibrio para la reacción hacia delante y para la reacción reversible quizás sean diferentes. El estado de equilibrio (cuando la velocidad de reacción tiende a cero) es descrita por la ley de acción de masas:

$$\frac{c_3^* c_4^*}{c_1^* c_2^*} = \frac{k_1}{k_{\text{min } 1}} = K_c \dots \dots (1.8)$$

La conversión del reactivo limitante estequiometricamente, por ejemplo el componente, 1 en la ecuación de estado es:

$$U_1^* = 1 - \frac{\dot{V} c_3^* c_4^*}{\dot{V}_0 c_1^* c_2^* K_c} \dots \dots (1.9)$$

El índice 0 indica el estado inicial, el índice \* indica el estado final (por ejemplo, el estado de equilibrio).

La ecuación muestra que, la manera mas indicada para incrementar la conversión es reducir la concentración de uno de los productos de la reacción. Que es el principio al imponer una destilación en una reacción: el tema de este trabajo. En la ecuación el efecto de volumen de una destilación impuesta ha sido tomada en cuenta.

La figura 27 (líneas de equilibrio) es una representación grafica de la ecuación anteriormente citada que muestra mas claramente las posibilidades de tales combinaciones: la conversión fraccional del componente 1 se aproxima a 1 solamente si la concentración de uno de los productos es significativamente reducida. Esto es cierto aun con constantes de equilibrio extremadamente desfavorables. Si por ejemplo, la constante de equilibrio es 0.01, en el estado de equilibrio solamente un 1 % del componente 1 se ha convertido. Sin embargo si el componente 3 es removido hasta  $x = 0.001 \text{ mol / mol}$ , conversiones de mas del 90 % son posibles para el componente 1.

La conversión real quizás sea definida en analogía a una conversión en el equilibrio pero sin los valores del equilibrio:

$$U_1 = \frac{n_1^0 - n_1}{n_1^0} \dots\dots(1.10)$$

La velocidad de reacción del reactivo 1 puede; en muchos casos, ser descrita por una ecuación simple:

$$\tau = k_1 c_1 c_2 - k_{\text{min}1} c_3 c_4 \dots\dots(1.11)$$

Y asumiendo entradas estequiométricas, con el termino de corrección de volumen tomando en cuenta la destilación y con algunas simples ecuaciones de balance, la ecuación superior puede ser rearmada en la siguiente forma:

$$U_1 = \tau \frac{k_1 c_1 c_2 - k_{\text{min}1} c_3 c_4}{c_1^0} \dots\dots(1.12)$$

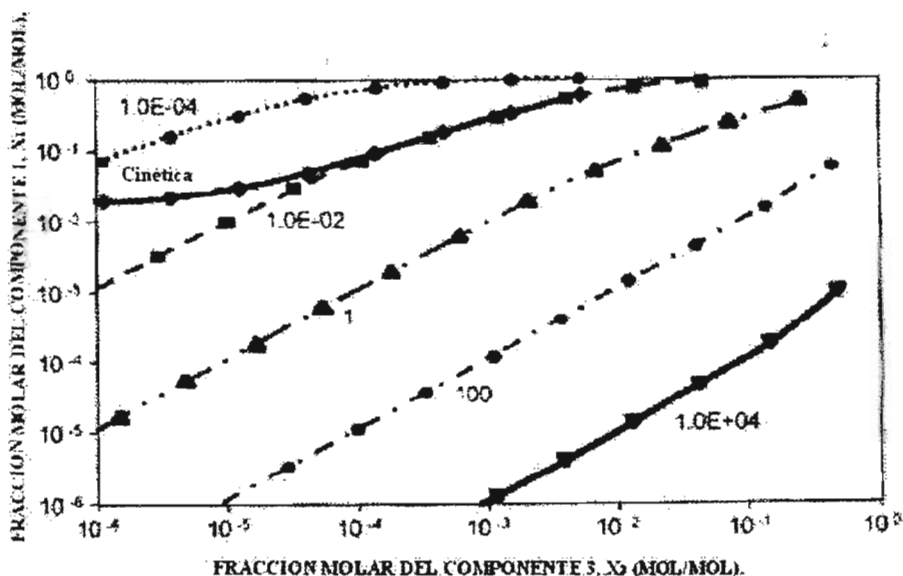


Figura 27. Líneas de equilibrio y línea de cinética.

Por tanto, la conversión real es incrementada si la reacción reversible es suprimida por remoción de uno de los productos reactivos, por ejemplo disminuyendo la concentración del componente 3. La conversión real también está influenciada por el tiempo de residencia  $\tau$  o por el producto  $\tau k$ . Esto puede ser observado en la figura 28, la línea cinética. Es claro que la supresión de la reacción reversible influye en la conversión

hasta cierto límite. Una caída más lejana en la concentración del producto en la reacción no incrementa la conversión. La contribución de la reacción reversible se ha vuelto tan baja que la conversión solo depende del rango de la reacción hacia adelante, lo cual es una función del tiempo de residencia  $\tau$  y de la constante de reacción  $k$  (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998).

Así dos condiciones de operación pueden ser distinguidas:

- El intervalo en el cual la conversión es influenciada principalmente por la concentración del componente a ser separado; este intervalo es llamado “controlado por la destilación”.
- El intervalo en el cual la conversión es influenciada principalmente por el tiempo de residencia y la constante de reacción; este intervalo es llamado “controlado por la cinética”.

Así el diseño de procesos industriales deberá dirigirse a las condiciones de operación dentro de estos rangos: *solo el tiempo de residencia y solamente la salida necesaria para la destilación* (Sundmacher y col., 2003).

Así nosotros tenemos un segundo problema de escalamiento: ¿Cuál es el equipo adecuado para cumplir con estas demandas?; esto significa más precisamente, ¿Cómo puede la operación del reactor ser alcanzado sobre un amplio rango de velocidades de reacción? Un ejemplo de este tipo de problemas puede ser observado en una configuración alternativa mostrada en la figura 28: Una reacción puede ser corrida dentro de una columna; que normalmente es entendida como una destilación reactiva, pero también puede ser desarrollada en un reactor exterior con una bomba de reciclaje. Tal arreglo secuencial exhibe la misma conversión como la simultaneidad de reacción y separación como puede ser visto en la figura 39, donde un reactor con un sistema de bomba de reciclaje y una configuración de destilación reactiva son comparadas.



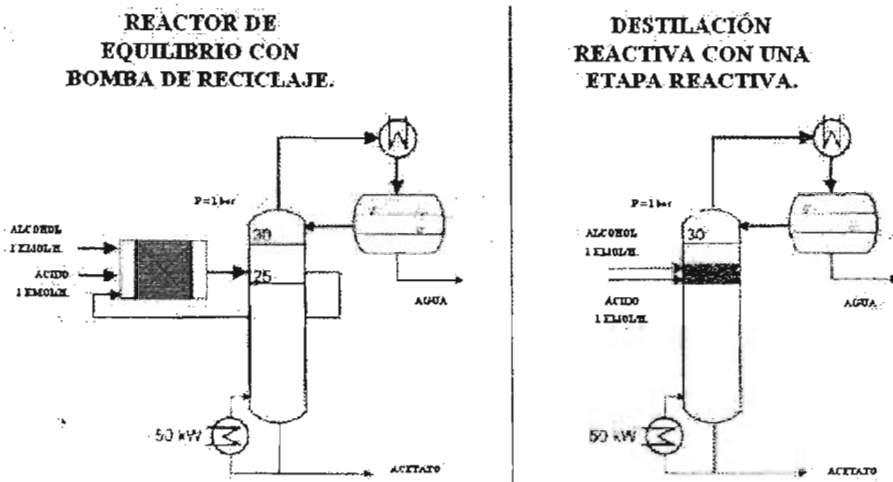


Figura 28. Configuraciones alternativas.

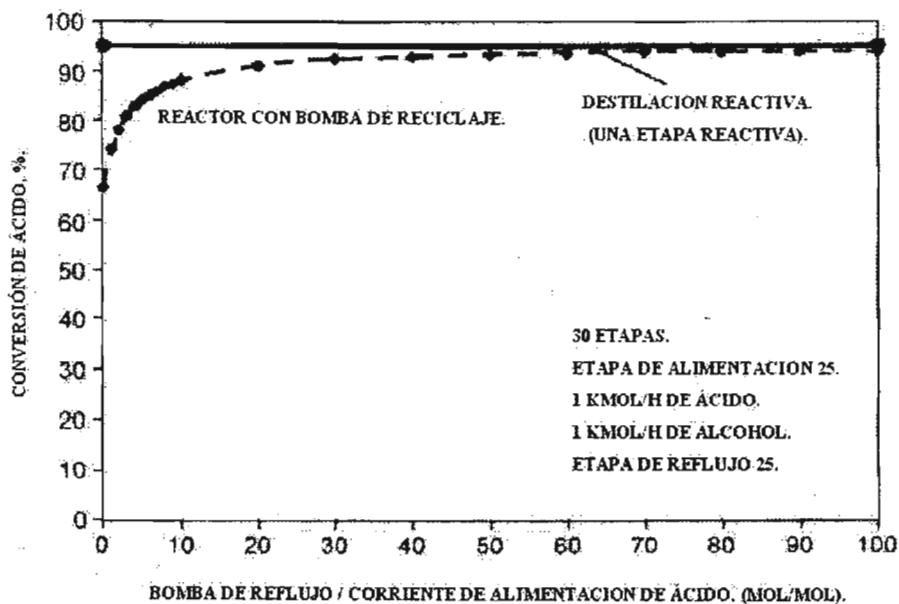


Figura 29. Comparación del reactor con bomba de reciclaje con la destilación reactiva.

Así los diferentes equipos quizás sean elegidos para combinar la reacción con la destilación dentro de las condiciones limitantes de la velocidad relativa, la volatilidad relativa y el mecanismo catalítico como esta indicado en la figura 30.

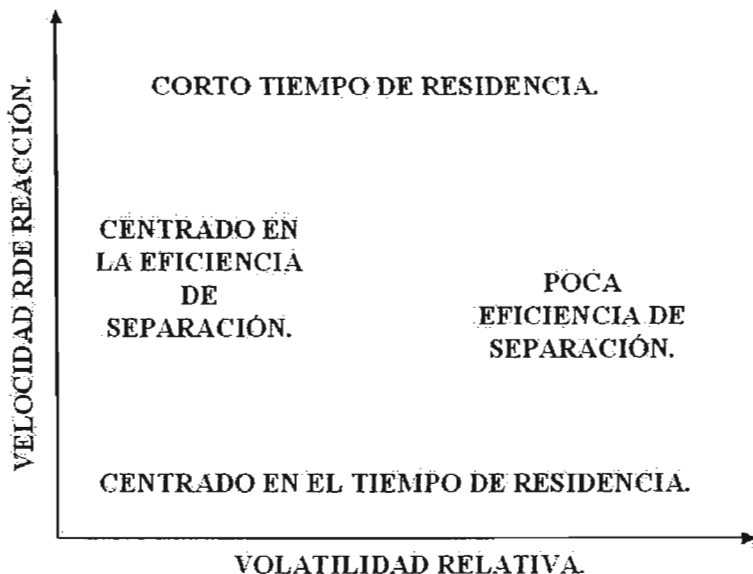


Figura 30. Diseño con respecto al tiempo de residencia y volatilidad relativa.

El equipo en cuestión incluye:

- Tanques con agitación,
- Cascadas de tanques con agitación, ambos con o sin columnas, y
- Columnas reactivas.

Volúmenes adicionales pueden ser proveídos para todos estos casos, los ejemplos están enlistados en la figura 31.

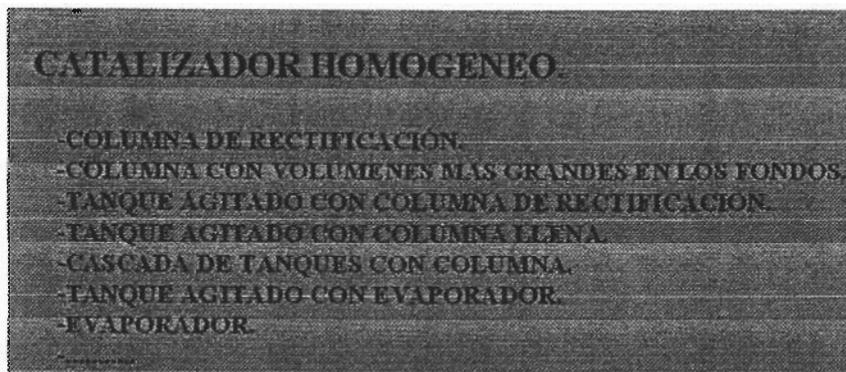


Figura 31. Equipo adecuado para combinar la reacción y la destilación (catalizador homogéneo).

Las siguientes consideraciones se concentran en catalizadores homogéneos. Consideraciones similares aplican para los catalizadores heterogéneos y estas serán comentadas posteriormente.

Primero una *reacción lenta* es considerada. “Lenta” significa, que el tiempo de reacción es bajo, comparado con los tiempos de residencia típicos para los equipos de separación tales como etapas de destilación. Por razones de tiempos de residencia un tanque con agitación o, mejor, una cascada de tanques con agitación es necesaria. Cada tanque es suministrado con energía para evaporar el componente a ser separado. Si la volatilidad relativa de este componente es muy alta, una etapa de evaporación es suficiente. A bajas volatilidades relativas la separación requiere mas etapas, así una columna tiene que ser colocada en el tanque. Si la separación es aun mas difícil, una sección de agotamiento es necesaria. En el caso limitante de una muy baja volatilidad relativa, cada etapa de la cascada puede ser operada como una etapa a contracorriente. La primer etapa es adicionalmente proveída con una columna de fraccionamiento para enriquecer el componente a ser separado. Como en un inicio es equivalente a una columna de reacción con un gran rechazo en cada etapa de reacción (Sundmacher y col., 2003; Stein y col., 2000; Baur, 2000; Serafimov y col., 1999; Fair, 1998; Güttinger, 1998).

Las *reacciones rápidas* no demandan grandes tiempos de residencia, “*rápido*” significa que la reacción alcanza el equilibrio en el rango de tiempo de residencia que es típico para los internos de la columna. El equipo por eso quizás sea seleccionado bajo los aspectos de eficiencia de separación. Si la volatilidad relativa del componente a ser removida es baja, un número considerable de etapas es necesario. El único equipo apropiado es una columna. Dependiendo del tiempo de residencia requerido esta puede ser una columna empacada o una columna de etapas. Una volatilidad relativa en un intervalo promedio permite que el número de etapas sea reducido, aunque el rechazo total tiene que mantenerse constante. Una columna de etapas, quizás con etapas especiales de borboteo será una buena opción. A bajas volatilidades relativas el número de etapas necesario para influenciar la reacción en un camino deseado volviéndolo tan pequeño y consecuentemente el volumen por etapa se vuelve tan grande que un reactor pequeño con una columna en la parte superior o un reactor con un evaporador puede ser usado.

En el intervalo de *velocidades de reacción media*, las construcciones mezcladas son la solución ideal, por ejemplo columnas de etapas especiales con grandes rechazos o reactores en cascada con solo una columna en la primer etapa.

Los principios resultantes para la elección del equipo para catalizadores homogéneos son presentados en la figura 32.

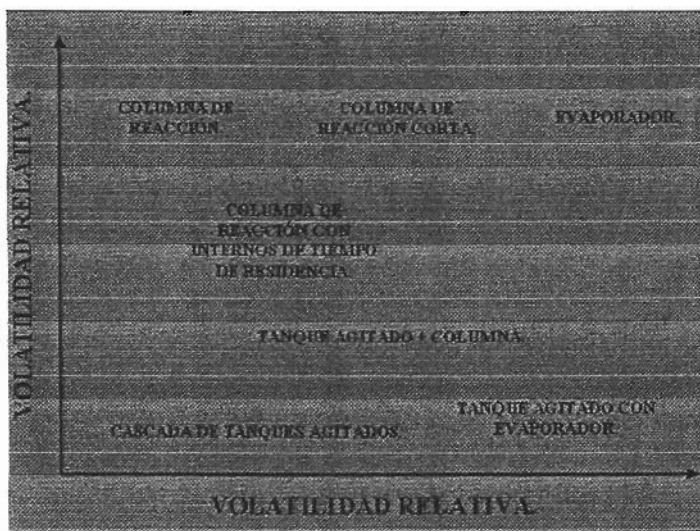


Figura 32. Principios de la elección del equipo (catalizadores homogéneos.)

Como mencionamos antes, los catalizadores heterogéneos pueden ser tratados en una forma similar adicional, los volúmenes de reacción separados son necesarios para retener el catalizador. Estos volúmenes puede ser arreglado uno con el equipo o en una posición lateral, o acoplada por los sistemas de reciclaje. La figura 33 enlista las alternativas de equipos para catalizadores heterogéneos. Como en el caso de los catalizadores homogéneos, los principios para la elección del equipo quizás sea formulada. Algunas no todas las posibilidades son mostradas en la figura 34.



Figura 33. Equipo adecuado para combinar la reacción y la destilación (catalizadores heterogéneos).

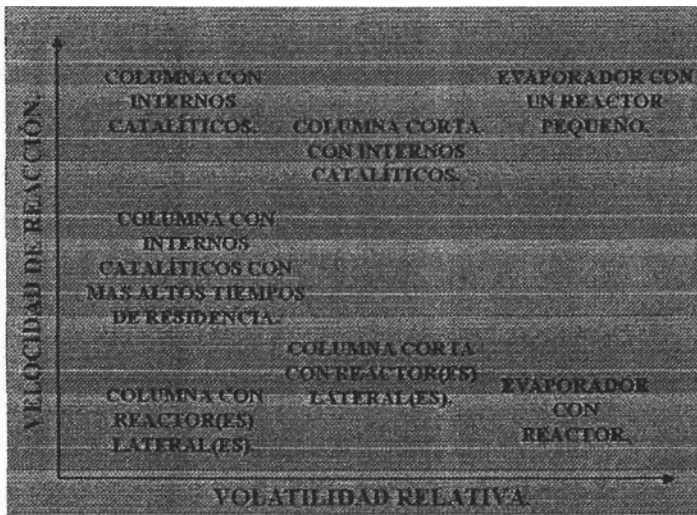


Figura 34. Principios de la elección del equipo (catalizadores heterogéneos).

Después de la elección del equipo, lo cual es en principio determinado por la velocidad de reacción y la volatilidad relativa el siguiente paso que sigue: es el diseño propio del equipo elegido bajo las condiciones especiales del proceso. Solamente si este paso es hecho con sumo cuidado se tomara ventaja de la elección adecuada del equipo y así se obtendrá el óptimo en consumo de energía.

#### 1.5.7.7 ALGUNAS OBSERVACIONES SOBRE EL DESEMPEÑO DEL CATALIZADOR.

El catalizador puede ser auto catalítico, homogéneo o heterogéneo. Esto también aplica para la destilación reactiva.

En el caso de reacciones auto catalíticas la velocidad de reacción puede solamente ser influenciada por la temperatura de reacción y en el caso de la destilación reactiva por la presión del equipo.

Los catalizadores homogéneos permiten a la velocidad de reacción ser influenciada por el cambio de la concentración del catalizador. Así la velocidad de reacción puede ser adaptada sobre un amplio intervalo a las necesidades del equipo de destilación (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

El catalizador heterogéneo requiere una estructura para fijar las partículas catalíticas en la zona de reacción. Esto quizás cause problemas de construcción y de operación y es también un factor que limita la concentración del catalizador que se puede conseguir. La velocidad de reacción puede ser mejorada solamente al límite dispuesto por el intervalo de concentración alcanzada. Además, la posibilidad de mejorar la velocidad de reacción al aumentar la presión y la temperatura esta limitada, porque en general el catalizador consiste de partículas de intercambio iónico, debido a que el intervalo de temperatura es limitado (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998)..

Así, el catalizador homogéneo es mucho mas flexible pero tiene su precio en un paso adicional de separación necesario para reciclar el catalizador y por demandas de materiales caros en el caso de ácidos minerales. El catalizador heterogéneo es mas simple en principio, pero algunos problemas técnicos tienen que ser resueltos con el tiempo. En general el equipo necesitará más volumen; por ejemplo, las columnas deben tener un diámetro mas alto.

### 1.5.8 NOTACIÓN.

- $A_i$       Componente  $i$ .
- $c_i$       Concentración del componente,  $\text{Kmol}/\text{m}^3$ .
- $k_f$       Constante de rango para la ecuación hacia delante,  $\text{m}^3/\text{Kmol h}$ .
- $k_{minl}$     Constante de rango para la ecuación reversible,  $\text{m}^3/\text{Kmol h}$ .
- $K_c$       Constante de equilibrio.
- $U_i$       Conversión fraccional para el componente  $i$ .
- $V$       Volumen,  $\text{m}^3$ .

- $\dot{V}$  Rango de flujo volumétrico, m<sup>3</sup>/h.
- $\tau$  Tiempo de residencia, h.



## **CAPITULO II. REDES NEURONALES.**

### **2. DESARROLLO HISTÓRICO.**

El desarrollo histórico de las redes neuronales, parte de las investigaciones psicológicas hechas a la actividad del cerebro humano en 1940, ya que en 1949 el Hebb introdujo la regla de aprendizaje de redes neuronales. Sin embargo, no fue hasta la introducción del modelo Perceptron y más tarde por el trabajo de Rosenblactt en 1962 que el concepto de neurona artificial se hizo popular (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995; Werbos, 1994; Bhagat, 1990).

Esta popularidad llego a interrumpirse de forma inesperada en 1969 cuando Minsky y Report hicieron observaciones relevantes al modelo Perceptron. Ellos mostraron que el modelo de Perceptron fue capaz de responder a la pre – linealidad; pero más tarde, con investigaciones en esta área, nuevamente las redes neuronales empezaron a ser una promesa en 1982 con la publicación de Hopfield al introducir el concepto de no – linealidad y la fuerza colectiva de los elementos computacionales.

La fase desarrollada después de 1982, tomó una delantera pletórica de paradigmas y algoritmos de aprendizaje. Como ejemplos de mas popularidad podemos mencionar los siguientes tipos de redes: de Hopfield (1982), mapa – autoorganizado (Kohonen, 1984), propagación hacia delante (Hech – Nielsen, 1987), el clasificador de Carpenter / Grosserg (1986), y el Neocognitron (Fukushima et, al., 1983). Sin embargo, el trabajo mas popular fue “el algoritmo de aprendizaje del error de propagación hacia atrás” (Back – Propagation training algorithm) de Rumelhart, 1986, que es el que tiene actualmente un 95 % de aplicación (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

#### **2.1 REDES NEURONALES ARTIFICIALES.**

El cerebro humano constituye una computadora muy notable, capaz de interpretar información no bien definida suministrada por los sentidos a un ritmo increíblemente

rápido. Mucho se ignora todavía sobre la forma en que el cerebro humano aprende por si mismo a procesar información, por lo que las teorías abundan. Para contrarrestar dichas hipótesis, se han tratado de mimetizar los procesos cerebrales de aprendizaje creando redes de neuronas artificiales.

Una neurona típica del cerebro humano recoge señales procedentes de otras a través de una pléyade de delicadas estructuras llamadas dendritas (figura 1). La neurona emite impulsos de actividad eléctrica a lo largo de una fibra delgada y larga denominada axón, que se escinde en millares de ramificaciones. En la extremidad de cada rama, una estructura llamada sinapsis convierte la actividad procedente del axón en efectos eléctricos que inhiben o provocan actividad en las neuronas a las que está conectado. Cuando las señales excitadoras que una neurona recibe alcanzan suficiente intensidad frente a las señales inhibitoras, la neurona envía a lo largo de su axón un breve impulso de actividad eléctrica. El aprendizaje se produce por variación de las sinapsis, de suerte que la influencia de una hormona sobre otra cambia.

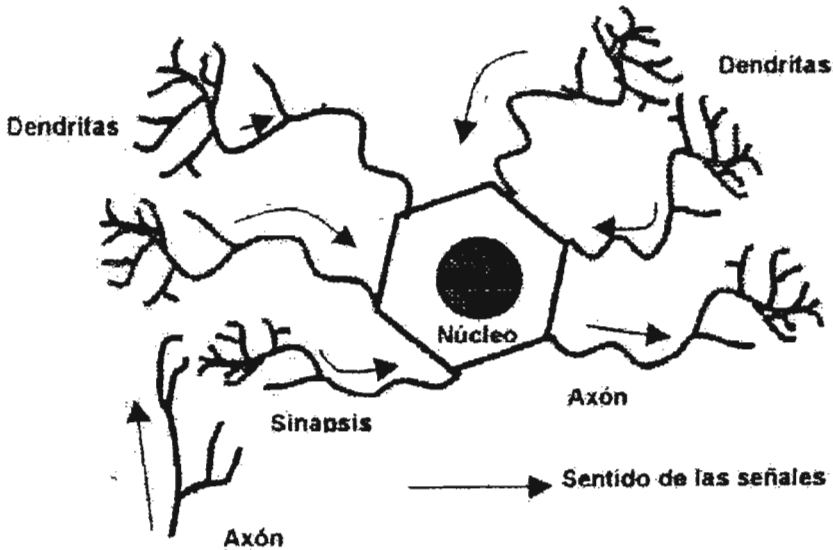


Figura 1. Representación de una neurona biológica.

Las redes neuronales artificiales se componen típicamente de “unidades” interconectadas que cumplen el rol de un modelo de neurona. La función de la sinapsis es modelada atribuyendo a cada conexión un peso modificable. Ninguna red artificial trata de reflejar, en todo su por menor, la geometría de axones y dendritas; la señal eléctrica de salida de una neurona queda expresada por un solo número que representa la frecuencia de disparo de la neurona; es conveniente decir, su actividad (figura 2).

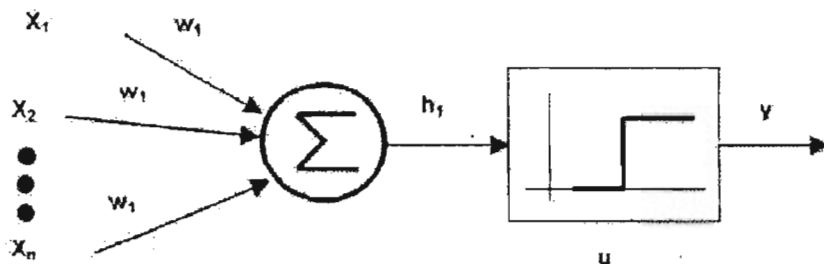


Figura 2. Esquema típico de una red neuronal artificial.

Cada unidad convierte la pauta de actividades que en ella ingresan en una única actividad de egreso, que es difundida a otras unidades. Tal conversión se efectúa en 2 etapas. Primero cada actividad aferente es multiplicada por un coeficiente de ponderación (peso), atribuido a la conexión; todos los productos ingresados se suman para obtener una cantidad denominada “entrada total”. En una segunda fase, la unidad utiliza una función de transferencia entrada – salida, que transforma el ingreso total en actividad de regreso o “salida”.

El comportamiento de una red neuronal artificial depende; a la vez, de los coeficientes de ponderación y de la función de transferencia que sea especificada para las unidades. Tal función se encuadra en una de tres categorías; de umbral, lineal, o sigmoide (figura 3).

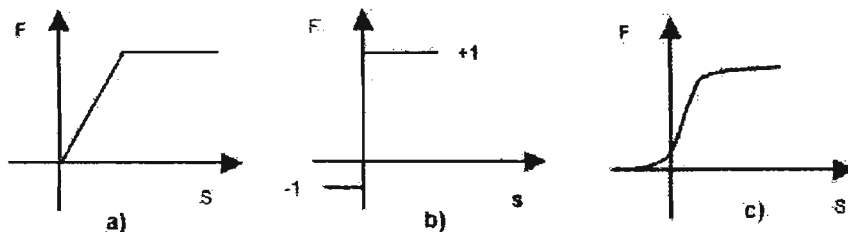


Figura 3. Tipos de funciones de transferencia, a) función de transferencia de umbral, b) función de transferencia lineal y c) función de transferencia sigmoide.

## 2.2 ¿QUÉ ES UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL?

Una excelente definición de lo que es una red neuronal artificial es proporcionada por Robert Hecht – Nielsen: una red neuronal artificial es un sistema computacional constituido por un número, altamente interconectado de elementos y el cual procesa información por medio de su estado de respuesta dinámico a sus entradas externas (Del Río y col., 2001).

## 2.3 ESTRUCTURA DE UN SISTEMA NEURONAL ARTIFICIAL.

Los elementos básicos de un sistema neuronal biológico son las neuronas, que se agrupan en conjuntos compuestos por millones de ellas organizadas en capas, constituyendo un sistema con funcionalidad propia. Un conjunto de estos subsistemas da lugar a un sistema global (el sistema nervioso, en el caso biológico). En la realización de un sistema neuronal artificial puede establecerse una estructura jerárquica similar. El elemento esencial de partida será la neurona artificial, que se organizará en capas, varias capas constituirán una red neuronal; y, por último una red neuronal (o un conjunto de ellas), junto con las interfaces de entrada y salida, más los módulos convencionales adicionales necesarios, constituirán el sistema global de proceso (Figura 4).

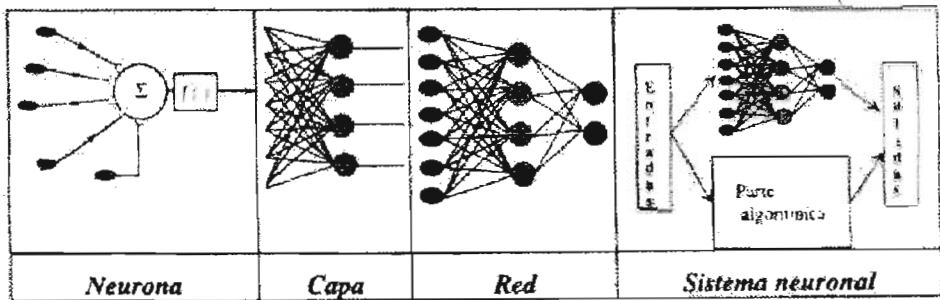


Figura 4. Estructura jerárquica de un sistema basado en redes neuronales artificiales.

Finalmente, y desde el punto de vista del grupo PDP (*Parallel Distributed Processing Research Group*, de la Universidad de California en San Diego), de D. E. Rumelhart y J.L. McClelland, un sistema neuronal o conexista, está compuesto por los siguientes elementos (Del Río y col., 2001).

- Un conjunto de procesadores elementales o neuronas artificiales.
- Un patrón de conectividad o arquitectura.
- Una dinámica de activaciones.
- Una regla o dinámica de aprendizaje.
- El entorno donde opera.

#### 2.4 MODELO GENERAL DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL.

En este punto describiremos la estructura genérica de una neurona artificial en el marco establecido por el grupo PDP.

Se denomina **procesador elemental** o **neurona** a un dispositivo simple de cálculo que, a partir de un vector de entrada procedente del exterior o de otras neuronas, proporciona una única respuesta o salida. Los elementos que constituyen la neurona de etiqueta  $i$  son los siguientes (ver figura 5):

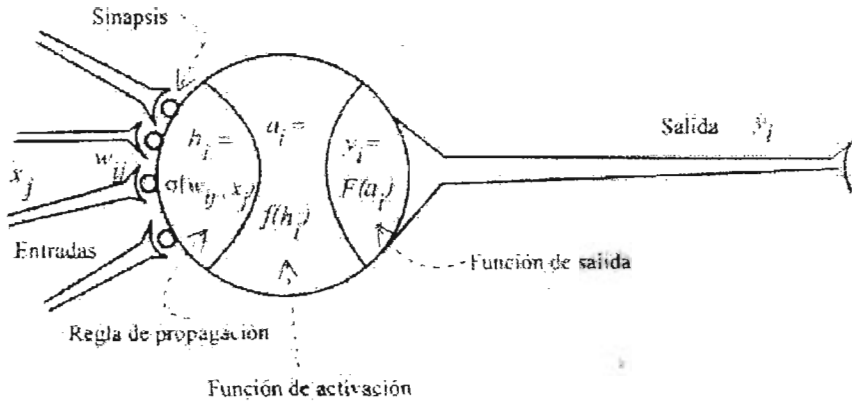


Figura 5. Modelo genérico de una neurona artificial.

- Conjunto de **entradas**,  $x_j(t)$ .
- **Pesos sinápticos** de la neurona  $i$ ,  $w_{ij}$  que representa la intensidad de interacción entre cada neurona presináptica  $j$  y la neurona postsináptica  $i$ .
- **Regla de propagación**  $\sigma(w_{ij}, x_j(t))$  que proporciona el valor del potencial postsináptico  $h_i(t) = \sigma(w_{ij}, x_j(t))$  de la neurona  $i$  en función de sus pesos y entradas.
- **Función de activación**  $f_i(a_i(t-1), h_i(t))$ , que proporciona el estado de activación actual  $a_i(t) = f_i(a_i(t-1), h_i(t))$  de la neurona  $i$ , en función de su estado anterior  $a_i(t-1)$ , y de su potencial postsináptico actual.
- **Función de salida**  $F_i(a_i(t))$ , que proporciona la salida actual  $y_i(t) = F_i(a_i(t))$  de la neurona  $i$  en función de su estado de activación.

### 2.4.1 ENTRADAS Y SALIDAS.

Las entradas al nodo  $j^{\text{th}}$  están representados como un vector de entrada;  $\mathbf{x}$ , con los componentes  $x_i$  ( $i = 1$  a  $n$ .) El nodo manipula estas entradas, o actividades, para dar la salida;  $y_j$ , la cual luego puede formar una parte de la entrada a otros nodos (Baughman y col., 1995).

### 2.4.2 FACTORES DE PESO.

¿Qué determina la salida de un nodo? Ciertamente, los valores de los componentes del vector  $x$  tienen un efecto. Sin embargo, algunos factores adicionales afectan la salida  $y_j$ . Uno es el *factor de peso*,  $w_{ij}$ , para la  $i^{\text{th}}$  entrada,  $x_i$ , correspondiente al nodo  $j^{\text{th}}$ . Cada entrada es multiplicada por su correspondiente factor de peso, y el nodo usa una entrada pesada para mejorar cálculos posteriores. Por ejemplo, consideremos una red con 6 nodos. La primer entrada dentro del nodo es  $x_1$ . Multiplicando esta entrada por el correspondiente factor de peso da  $w_{1j}x_1$  (Baughman y col., 1995).

Los factores de peso pueden tener uno u otro efectos: inhibitorio o uno excitatorio. Si se ajusta  $w_{ij}$  tal que  $w_{ij}x_i$  es positivo (y preferiblemente grande), se tiende a excitar el nodo. Si  $w_{ij}x_i$  es negativo esto, inhibe el nodo. Finalmente si  $w_{ij}x_i$  es muy pequeña en magnitud relativa a otras señales, la señal de entrada  $x_i$  tendrá muy poco o ningún efecto (Baughman y col., 1995).

### 2.4.3 UMBRALES INTERNOS.

El siguiente factor importante que gobierna la salida de un nodo es el umbral interno. El umbral interno para el nodo  $j^{\text{th}}$ , denotado como  $T_j$ , controla la activación de ese nodo. El nodo calcula todos sus  $w_{ij}x_i$ 's, suma los términos juntos y luego calcula la activación total  $a_j$ , por substracción el valor del umbral interno será:

$$\text{Activación Total} = a_j = \sum_{i=1}^n (w_{ij} x_i) - T_j \dots\dots(2.1)$$

Si  $T_i$  es grande y positiva, el nodo tiene un alto umbral interno, lo cual inhibe el encendido del nodo. Opuestamente si  $T_i$  es cero (o negativo, en algunos casos), el nodo tiene un bajo umbral interno, lo cual también excita el encendido del nodo. Algunos, pero no necesariamente todos los nodos tienen un umbral interno. Si no es especificado algún umbral interno, se asume que el valor para ese umbral;  $T_i$ , es cero (Baughman y col., 1995; Bhagat, 1990).

#### 2.4.4 FUNCIÓN DE TRANSFERENCIA.

El factor final que gobierna a la salida de un nodo es la función de transferencia. una vez que el nodo calcula el producto punto del vector  $w_j = [w_{1j}, w_{2j}, \dots, w_{nj}]T$  con el vector  $x$ , y subtrae el umbral  $T_j$  (como se describió arriba), este pasa el resultado a una función de transferencia,  $f()$ . Así, el calculo completo del nodo es:

$$f(w_j \cdot x - T_j) = f\left(\sum_{i=1}^n (w_{ij} a_i) - T_j\right) \dots\dots\dots(2.2)$$

Este calculo, luego, es una función de la diferencia entre la entrada total pesada y el umbral interno.

Ahora bien se puede la función de transferencia que se desee, raíz cuadrada, logarítmica, exponencial y demás. Científicos matemáticos y de la computación; sin embargo, han encontrado una función sigmoide (forma de S (S - shaped)) particularmente útil. Una función sigmoide típica, se muestra en la figura 6 y es:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \dots\dots\dots(2.3)$$

Esta función incrementa monótonamente, con los valores limites de 0 (a  $x = -\infty$ ) y 1 (a  $x = +\infty$ ). Todas las funciones sigmoides tienen limites superiores e inferiores. Por el hecho de poseer estos valores limite, las funciones sigmoide son llamadas también *funciones de umbral*. A muy bajos valores de entrada, la salida de la función de umbral es cero. A muy altos valores de entrada, el valor de salida es uno.



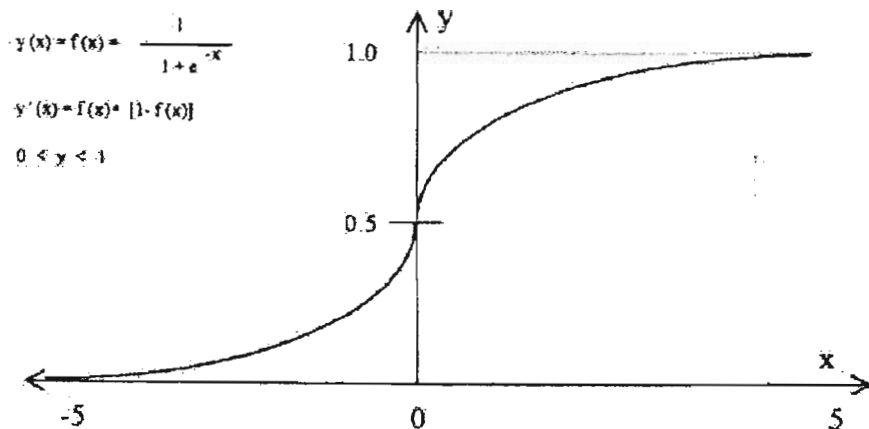


Figura 6. Función sigmoide.

Otra función de transferencia útil es la tangente hiperbólica, con valores límite de  $-1$  a  $+1$  (figura 7):

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \dots (2.4)$$

La función de transferencia de tangente hiperbólica también produce típicamente redes de buena conducta.

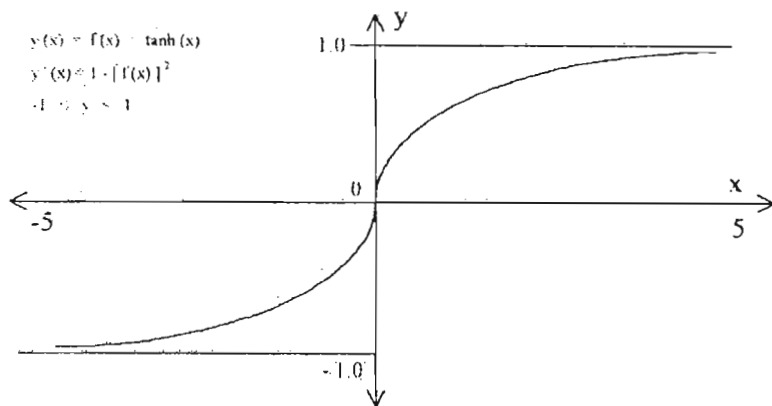


Figura 7. Función de transferencia de tangente hiperbólica.

Otra función de transferencia útil es la función de base radial. La función de transferencia Gaussiana y mas usada comúnmente es la función “radial simétrica” y su ecuación es:

$$f(x) = \exp\left[\frac{-x^2}{2}\right] \dots\dots(2.5)$$

La figura 8 muestra una representación grafica de una función de transferencia gaussiana. La función tiene una máxima respuesta,  $f(x) = 1$ , cuando la entrada es  $x = 0$ , y la respuesta disminuye a  $f(x) = 0$ , cuando la entrada es  $x = \pm \infty$ . Este tipo de elementos de respuesta hacen a la función de base radial muy ventajosa para ciertos tipos de redes (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

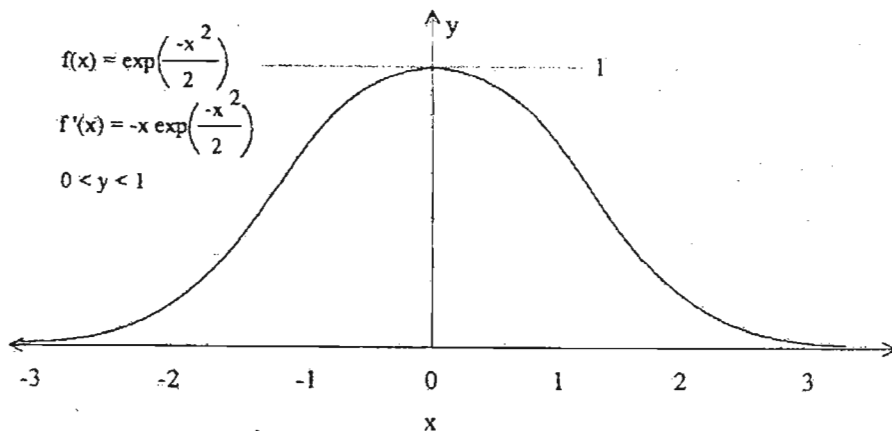


Figura 8. Función de transferencia Gaussiana.

## 2.5 TOPOLOGÍA DE UNA RED NEURONAL.

La topología de una red neuronal se refiere a como sus nodos están interconectados. La figura 9 muestra una topología muy común. Se tienen diferentes topologías, o arquitecturas para organizar los nodos en capas; conectándolos y pesando las interconexiones. La red tiene tres capas; de las cuales una esta oculta, y cada salida de

este nodo se alimenta dentro de todos los nodos en la capa subsiguiente (Baughman y col., 1995).

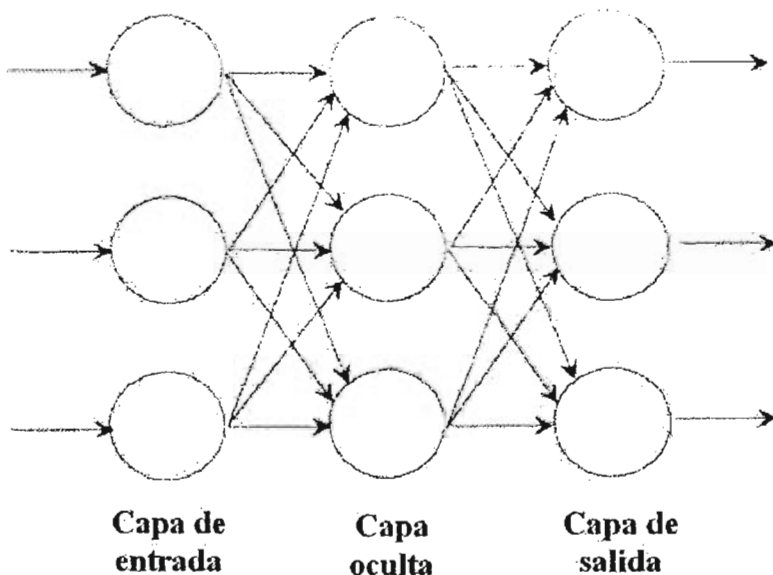


Figura 9. Una red neuronal con una capa oculta.

## 2.6 OPCIONES DE CONEXIÓN.

Existen tres opciones para conectar los nodos unos a otros, como se ve en la figura 10 en las conexiones *intra capa*, las salidas de un nodo son alimentadas a otros nodos en la misma capa. En las conexiones *intercapa*, las salidas de un nodo en una capa son alimentadas dentro de los nodos en otra capa. Finalmente; en las conexiones *recurrentes*, las salidas de un nodo se alimentan a él mismo.

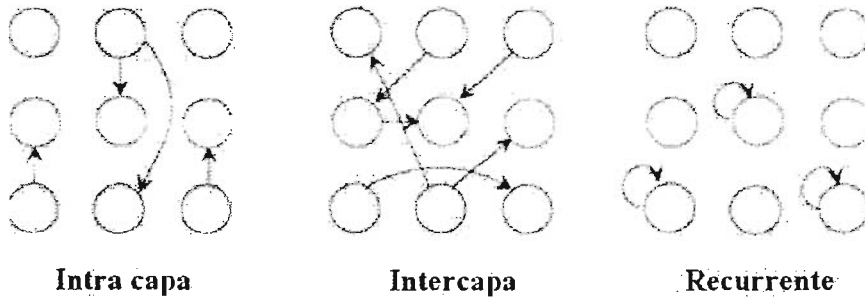


Figura 10. Opciones de conexión en una red neuronal.

Generalmente, cuando se construye por primera vez una red neuronal, se *pre – especifica la topología*. Es decir, se especifican las interconexiones, pero estos salen fuera de los valores numéricos de los pesos en la primera fase de entrenamiento. En aplicaciones de ingeniería, la mas importante y por consiguiente la mas frecuente topología especificada, es la de las conexiones intercapa.

Dentro de la topología de intercapa, se tienen dos opciones: 1) las conexiones de alimentación hacia atrás, y 2) las conexiones de alimentación hacia delante, mostradas en la figura 11.

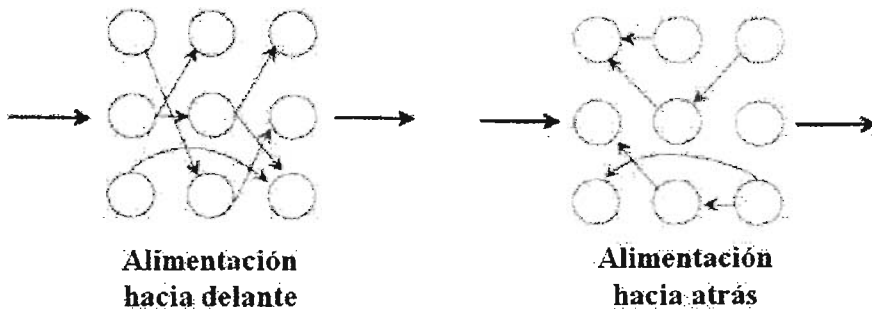


Figura 11. Las conexiones de alimentación hacia delante y hacia atrás.

El tipo de problema que se intente resolver determina cual topología favorece. Por ejemplo, si se desea desarrollar una red neuronal que se entrene sola, probablemente la

opción mas adecuada será la de conexiones de alimentación hacia atrás. En contraste, en el modelado dinámico de un reactor químico, donde se intenta proyectar una respuesta de salida basada en una señal de entrada, favorece el usar una conexión de alimentación hacia delante (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994; Bhagat, 1990).

## 2.7 MÚLTIPLES CAPAS OCULTAS.

Muchas redes neuronales contienen de una a tres capas ocultas. Las conexiones son similares a las descritas en la sección previa (usando solamente una capa oculta), excepto que solo se inserta una o dos capas ocultas adicionales entre la capa de entrada y la capa de salida. La figura 12 muestra una red típica de alimentación hacia delante con tres capas ocultas con conexiones solo entre las capas adyacentes. Muchas redes usadas en ingeniería de bioprocesos e ingeniería química siguen esta arquitectura básica.

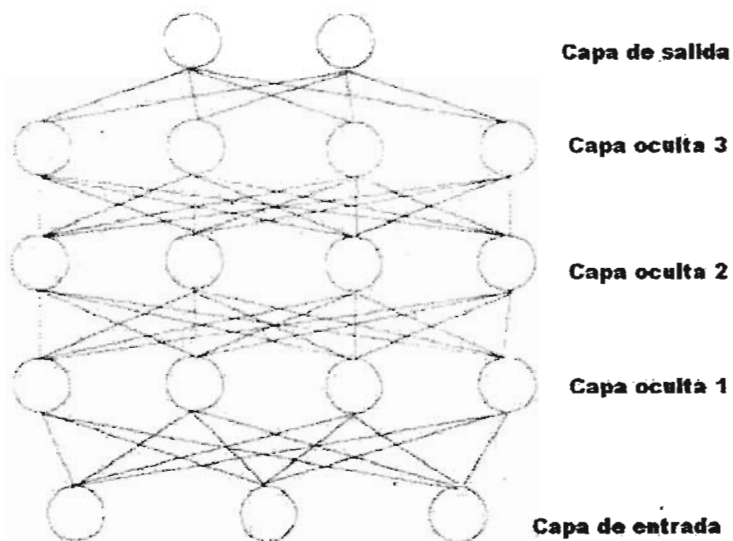


Figura 12. Una red típica de alimentación hacia delante de tres capas ocultas.

En el presente trabajo la configuración de capas ocultas se referirá al numero de nodos en cada capa oculta. Por ejemplo, una configuración de 30:20:10 capas ocultas indicará que hay 30 nodos en la capa oculta 1, 20 nodos en la capa oculta 2 y 10 nodos en

la capa oculta 3. si hay solamente dos capas ocultas, el tercer termino es eliminado (ejemplo, 30:20) (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

## **2.8 EL PROCESO DE APRENDIZAJE.**

La estructura de las redes neuronales forma la base para el almacenamiento de la información y gobierna el proceso de aprendizaje de la red. Las redes neuronales (ver figura 13) abarcan simulaciones de neuronas interconectadas. Como se mencionó antes una neurona es una entidad capaz de recibir y enviar señales, y esto es simulado por la adición de algún software de algoritmos en una computadora. Cada neurona simulada:

- 1) Recibe señales de otras neuronas.
- 2) Suma estas señales.
- 3) Transforma esta suma, usualmente por la representación de una función sigmoideal.
- 4) Envía los resultados a otras neuronas.

De las muchas posibles configuraciones de redes neuronales, un tipo simple “la red de propagación hacia atrás” es particularmente relevante a ingeniería química. La red de propagación hacia atrás tiene un flujo de información hacia delante en el modo de predicción y una corrección de errores de propagación hacia atrás en el modo de aprendizaje. Tales redes están usualmente organizadas en capas de neuronas. Las conexiones están hechas entre las neuronas o capas adyacentes: una neurona esta conectada a esta que recibe señales desde cada neurona en la capa precedida inmediatamente y transmite señales a cada neurona en la capa subsiguiente inmediata. Un mínimo de 3 capas es requerido; una capa de entrada; como su nombre lo dice, recibe entradas. Una o mas capas intermedias (también llamadas capas ocultas porque ellas están ocultas de la exposición exterior) están ubicadas entre la capa de entrada y la capa de salida, la cual comunica los resultados externamente.

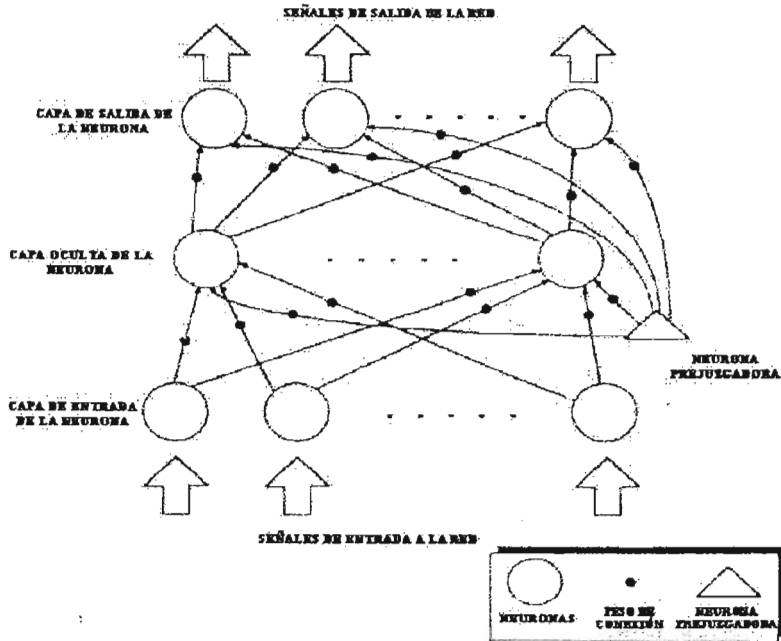


Figura 13. Esquema típico de una red, mostrando el proceso de aprendizaje.

Adicionalmente, una neurona “prejuzadora” que suministra una salida invariante está conectada a cada neurona en las capas oculta y de salida. El número de neuronas en la capa oculta es del mismo orden como el número en las capas de entrada y salida. Pocas neuronas ocultas impiden el proceso de aprendizaje y demasiadas ocasionalmente degradan la capacidad de desarrollo de la red. En el modo de aprendizaje (o entrenamiento) a la red se le suministra una serie de datos compuestos de valores de entrada con sus correspondientes valores de salida deseados para el desarrollo de esta fase de entrenamiento (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995; Werbos, 1994; Bhagat, 1990).

### **2.8.1 ESTABILIDAD Y CONVERGENCIA.**

La fase de entrenamiento necesita producir una red neuronal que presente ambas características; es decir, que sea *estable* y *convergente*. La estabilidad garantiza un resultado, pero este no necesariamente garantiza un resultado exacto.

Una red neuronal convergente por otro lado, produce relaciones de entrada – salida exactas. La convergencia; entonces, está relacionada con la exactitud de la red. La magnitud del error entre los resultados deseados con las predicciones de las redes es una medición directa de la convergencia de la red neuronal (Baughman y col., 1995).

### **2.9 ALCANCES Y LIMITACIONES DE LAS REDES NEURONALES.**

Las grandes ventajas de las redes neuronales es que pueden manipular problemas que involucran datos imprecisos o “alterados”, así como también aquellos que son altamente no lineales o complejos. Se adaptan eficientemente al renacimiento fundamental del proceso o fenómeno que será modelado.

Además del alcance de las computadoras seriales en sus formas mas básicas con un único procesador central se puede direccionar un arreglo de localización de memoria. Los datos y las instrucciones son almacenados ahí mismo. El procesador direcciona una instrucción y cualquier dato requerido por esa instrucción, ejecuta la instrucción y almacena los resultados (si hay alguno) regresa a la celda de memoria especificada. Un sistema serial (y aun un sistema en paralelo estándar) es un sistema secuencial; esto es, todo sucede en una determinada secuencia de operaciones.

Una red neuronal; en contraste, no es secuencial y no necesariamente determinística, no cuenta con un arreglo separado de memoria para el almacenamiento de datos. Los procesos que constituyen una red neuronal, no son unidades de proceso central altamente complejos. Por el contrario; una red neuronal, esta constituida por varios



procesos simples que típicamente pueden hacer un poco mas que solo hacer una suma de los pesos de todos los elementos de las entradas.

La red neuronal no ejecuta una serie de instrucciones; pero sin embargo, responde en paralelo a las entradas presentadas. El resultado no es almacenado en una localidad de memoria específica, pero forma parte del estado total de la red después de que ha alcanzado una condición de equilibrio.

El conocimiento en una red neuronal no es almacenado en una localidad en particular. No podemos direccionar a memoria en la dirección 1354 para recuperar el valor de la variable  $x$ . En lugar de eso, el conocimiento es almacenado en forma tal que se procesen los elementos que están conectados (la forma en que la señal de los elementos de salida de un proceso está conectado a la señal de otros elementos de entrada de proceso), y de importancia (o valor de peso) a cada entrada de los elementos. El conocimiento es entonces una función mas de la arquitectura o estructura de la red que el contenido de una localidad particular en la red (Baughman y col., 1995).

## **2.10 ALGORITMOS PARA EL DESARROLLO DE REDES NEURONALES.**

### **2.10.1 LA RED HOPFIELD.**

La red Hopfield y otras dos redes neuronales son normalmente usadas con entradas binarias. Estas redes son mas apropiadas cuando son posibles representaciones exactas binarias con imágenes en blanco y negro donde los elementos de entrada son valores de pixeles, o con texto ASCII donde los valores de entrada podrían representar bits en la representación ASCII de 8 bits de cada carácter. Estas redes son menos apropiadas cuando los valores de entrada son continuos, por que una representación fundamental del problema debe ser direccionada para convertir las cantidades análogas a valores binarios.

Este tipo de red puede ser utilizada como una memoria asociativa o para resolver problemas de optimización. Esta red como se muestra en la figura 14 tiene  $N$  nodos contiene una difícil y limitada no linealidad y sus entradas y salidas binarias toman valores de +1 y -1.

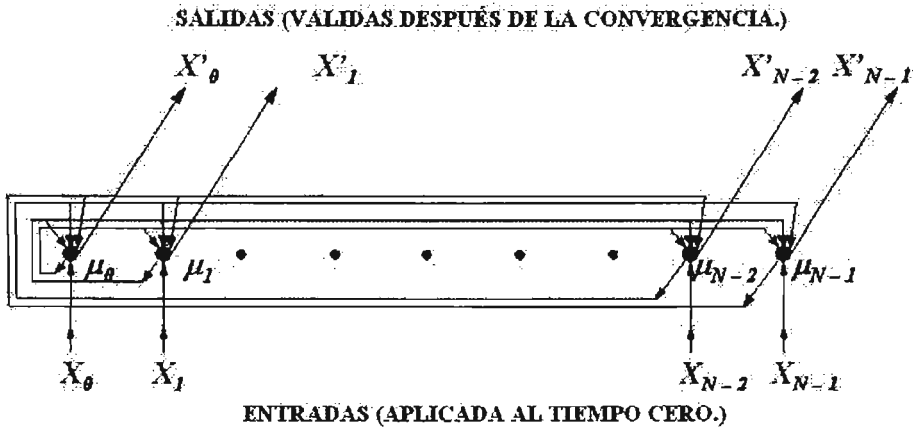


Figura 14. Una red de Hopfield que puede ser usada como una memoria de contenido – direccionable. Un elemento de entrada binario desconocido es aplicado al tiempo cero y la red luego encuentra una solución hasta la convergencia cuando los nodos de salida permanecen sin cambio alguno. La salida son los elementos producidos por los nodos de salida después de la convergencia.

La red de Hopfield tiene dos mayores limitaciones cuando es usada como una memoria de contenido – direccionable. Primero el numero de elementos que pueden ser almacenados y exactamente reconocidos es severamente limitado. Si muchos elementos son almacenados, la red quizás converja a un valor diferente de los alimentados a la red. Segundo, la red de Hopfield será inestable si alguno de los elementos de ejemplo comparte muchos bits en común con otro elemento de ejemplo (Del Río y col., 2001).

### 2.10.2 LA RED HAMMING.

La red Hopfield es a menudo usada en problemas donde las entradas son generadas por selección de un ejemplo e invirtiendo los valores de los bits aleatoriamente e independientemente con una probabilidad dada. Esto es un problema clásico en la teoría de la comunicación que ocurre cuando las señales de longitud binaria fija son enviadas a través de un canal de menos memoria simétrico binario. El clasificador de error mínimo optimo en este caso calcula la distancia Hamming al ejemplo para cada clase y selecciona que clase con la distancia mínima de Hamming. La distancia Hamming es el numero de bits en la entrada en la cual no encuentra los bits del correspondiente ejemplo. Una red, la cual será llamada red Hamming implementa este algoritmo usando los componentes de las redes neuronales y es mostrada en la figura 15.

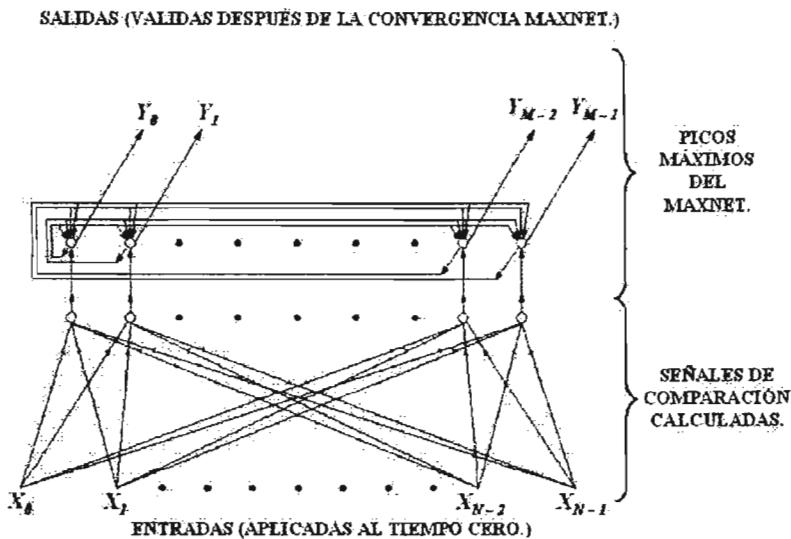


Figura 15. Una red de Hamming de alimentación hacia delante de clasificación máxima de probabilidad para entradas binarias degenerada por el ruido.

La red Hamming tiene un numero de ventajas obvias sobre la red Hopfield. Esta implementa el clasificador de mínimo error optimo cuando los errores de los bits son aleatorios e independientes, y así el desempeño de la red Hopfield es mas incorrecto que;

o equivalente, al desempeño de la red Hamming en tales situaciones. La red Hamming también requiere menos conexiones que la red Hopfield. Además, la diferencia en el número de conexiones requeridas incrementa cuando el número de entradas también incrementa, ya que el número de conexiones en la red de Hopfield crece al cuadrado del número de entradas mientras que el número de conexiones en la red de Hamming crece linealmente. La red de Hamming puede también ser modificada para ser un clasificador de error mínimo cuando los errores son generados por invertir los elementos de entrada desde +1 a -1 y desde -1 a +1 asimétricamente con diferentes probabilidades y cuando los valores de elementos específicos de entrada son desconocidos. Finalmente la red de Hamming no sufre de la falsedad de los elementos de salida lo cual puede producir un resultado “no localizado” (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

### **2.10.3 EL CLASIFICADOR CARPENTER / GROSSBERG.**

Carpenter y Grossberg, en el desarrollo de su teoría adaptable de la resonancia han diseñado una red la cual forma grupos y es entrenada sin supervisión. Esta red implementa un algoritmo de agrupación que es muy similar al algoritmo líder de agrupación simple secuencial. El algoritmo líder selecciona la primera entrada como el ejemplo para la primera agrupación. La siguiente entrada es comparada con la primera agrupación de ejemplo. Este “sigue al líder” y es agrupada con el primero si la distancia al primero es menor que un umbral. De otra manera este es el ejemplo para un nuevo agrupamiento. Este proceso es repetido para las siguientes entradas. El número de agrupaciones así crece con el tiempo y depende de ambos los umbrales y la distancia métrica usada para comparar las entradas con las agrupaciones de ejemplo.

Una representación esquemática de una red de Carpenter / Grossberg puede ser observada en la figura 16. La estructura de esta red es similar a la que tiene la red de Hamming. Los valores buscados son calculados usando conexiones de alimentación hacia delante y el valor máximo es mejorado usando una inhibición lateral en medio de los nodos de salida.

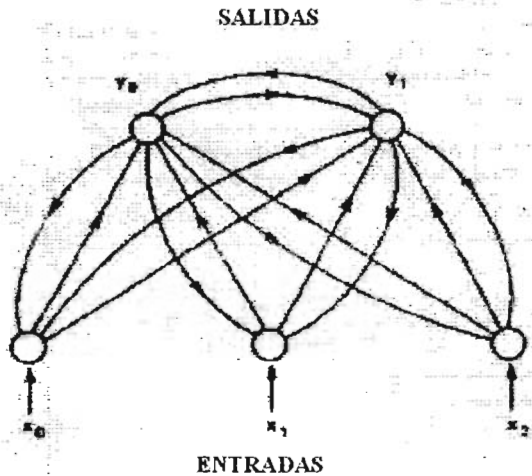


Figura 16. Componentes característicos de una red de clasificación de Carpenter / Grossberg.

La red de Carpenter / Grossberg puede ejecutarse bien con elementos de entrada perfectos pero con la mas mínima cantidad de ruido puede causar problemas. Sin ruido, el umbral de vigilancia puede ser alimentado tal que los dos elementos los cuales son muy similares son considerados diferentes. Con ruido; sin embargo, este nivel quizás sea muy alto y el número de ejemplos almacenados puede rápidamente crecer hasta que todos los nodos disponibles están llenos o agotados (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

#### 2.10.4 PERCEPTRON DE CAPA SIMPLE.

El Perceptron de capa simple es una de las primeras redes que puede ser usada con valores continuos y entradas binarias. Esta red simple genero mucho interés cuando se empezó su desarrollo, por su habilidad para aprender a reconocer elementos simples. Un Perceptron que decide si una entrada pertenece a una o dos clases es mostrada en la figura 17. El nodo simple calcula una suma de pesos de los elementos de entrada, resta un umbral ( $\theta$ ) y pasa el resultado a través de un limite no lineal pesado tal que la salida y la suma de los elementos de entrada estén entre +1 o -1. La regla de decisión consiste en

responder a la clase A cuando la salida es +1 y la clase B si la salida es -1. La ecuación de la línea terminal depende de los pesos de conexión y los umbrales.

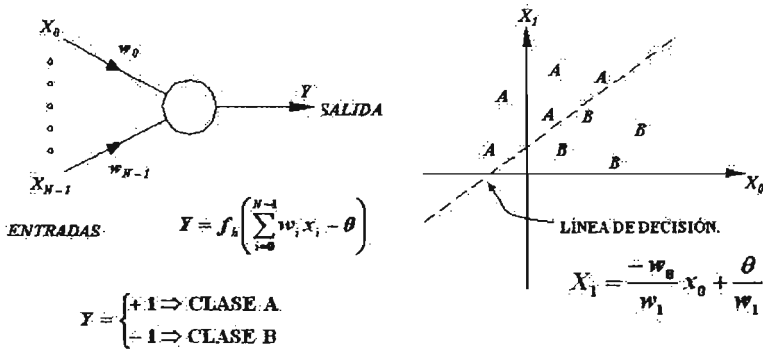


Figura 17. Perceptron de capa simple que clasifica un vector de entrada análoga en 2 clases denotadas como A y B.

Los pesos de conexión y los umbrales en un Perceptron pueden ser fijados o adaptados usando un numero diferente de algoritmos. El procedimiento de convergencia original del Perceptron para ajuste de pesos fue diseñado por Rosenblatt. Primero los pesos de conexión y los valores de los umbrales son iniciados a valores aleatorios cercanos al cero. Luego una nueva entrada con  $N$  elementos de valores continuos es aplicado a la entrada y la salida es calculada como en la figura 17. Los pesos de conexión son ajustados solo cuando ocurre un error mediante la formula:

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \eta [d(t) - y(t)] x_i(t), \quad 0 \leq i \leq N-1 \quad \dots\dots\dots(2.6)$$

$$d(t) = \begin{cases} +1 \text{ si la entrada es de la clase A.} \\ -1 \text{ si la entrada es de la clase B.} \end{cases}$$

Esta formula incluye un termino de ganancia ( $\eta$ ) que está en el rango de 0.0 a 1.0 y controla el rango de adaptación. Este termino debe ser ajustado para satisfacer los requerimientos conflictivos de una adaptación rápida para cambios reales en las distribuciones de las entradas y promediando las entradas pasadas para proveer un estimado de pesos estables (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

### 2.10.5 MAPAS DE RASGOS SIMILARES AUTOORGANIZADOS DE KOHONEN.

Un principio importante de organización del camino de los sentidos en el cerebro es que la colocación de neuronas es ordenada y a menudo refleja algunas características físicas de un estímulo externo que está siendo experimentado. El algoritmo de Kohonen crea un vector contador por ajuste de los pesos desde nodos de entradas comunes a  $M$  nodos de salida ordenados en una rejilla de dos dimensiones como se muestran en la figura 18.

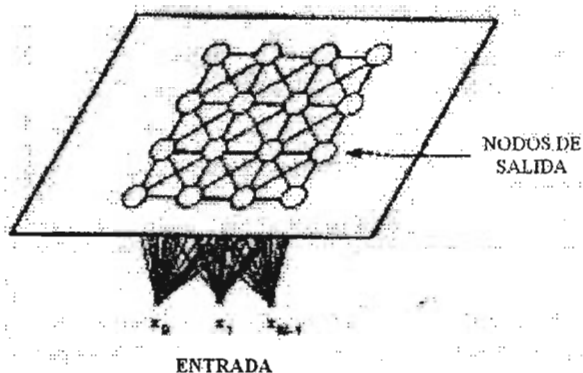


Figura 18. Orden de dos dimensiones de los nodos de salida usados para formar un mapa organizado. Cada entrada está conectada a cada nodo de salida vía un peso de conexión variable.

Los nodos de salida están extensivamente interconectados con muchas conexiones locales. Los vectores de entrada con valores continuos son presentados secuencialmente en tiempo sin especificar la salida deseada. Los pesos son organizados tal que topológicamente los nodos cercanos sean sensitivos a las entradas que sean físicamente similares. Los nodos de salida así serán ordenados de una forma natural. Esto quizás sea importante en sistemas complejos con muchas capas de procesamiento porque esto puede reducir las longitudes de las conexiones entre – capa.

Kohonen ha presentado muchos otros ejemplos y pruebas relacionados con su algoritmo. El también ha demostrado como su algoritmo puede ser usado en un reconocedor de voz como un vector contador. Diferente al clasificador de Carpenter / Grossberg, este algoritmo puede trabajar relativamente bien en presencia de ruido, por que el numero de clases es fijo, los pesos se adaptan lentamente y la adaptación se detiene después del entrenamiento. Este algoritmo es así un viable vector contador secuencial cuando el numero de agrupaciones deseada puede ser especificada antes de usarlo y la cantidad de datos en entrenamiento es relativamente grande al numero de agrupaciones deseadas (Del Río y col., 2001).

## **2.10.6 FUNDAMENTOS DEL APRENDIZAJE DE PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS.**

La forma mas común de aprendizaje utilizado en redes neuronales hoy es el aprendizaje de corrección de error. Previamente, los matemáticos y científicos en computación miraron hacia el aprendizaje de corrección de error, primeramente por que la técnica no trabaja con redes neuronales con capas ocultas. Este solo aplica a redes neuronales de dos capas porque se puede definir que tanto error llega desde los nodos ocultos, y por lo tanto no se pueden determinar los factores de peso para estos nodos. Por medio de una técnica conocida como la propagación hacia atrás (Backpropagation); sin embargo, se puede aplicar el aprendizaje de la corrección de error para redes neuronales con capas ocultas (Baughman y col., 1995).

### **2.10.6.1 ALGORITMO DE LA PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS (BACKPROPAGATION).**

Este algoritmo usa una técnica de búsqueda de un gradiente para minimizar una función objetivo a la diferencia media cuadrada entre las salidas de la red deseadas y las salidas actuales. La salida deseada de todos los nodos es típicamente “baja” ( $0 < 0.1$ ) a menos que el nodo correspondiente a la clase de la entrada presente sea “alta” ( $1.0 > 0.9$ ). La red es entrenada primeramente asignando valores pequeños y aleatorios a los



pesos y a los umbrales internos, y luego presentando todos los datos entrenados repetidamente. Los pesos son ajustados después de cada prueba usando información lateral, especificando la clase correcta hasta que los pesos converjan y la función objetivo es reducida a un valor aceptable (Baughman y col., 1995).

### 2.10.7 REQUERIMIENTOS PARA EL APRENDIZAJE DE PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS.

La propagación hacia atrás requiere una red neuronal del tipo Perceptron, definida como una red con conexiones entre – capa y alimentación hacia delante (no conexiones intra – capa o conexiones recurrentes). Cada capa se debe alimentar secuencialmente dentro de la siguiente capa. Por simplicidad se considerara una red Perceptron de tres capas como se muestra en la figura 19.

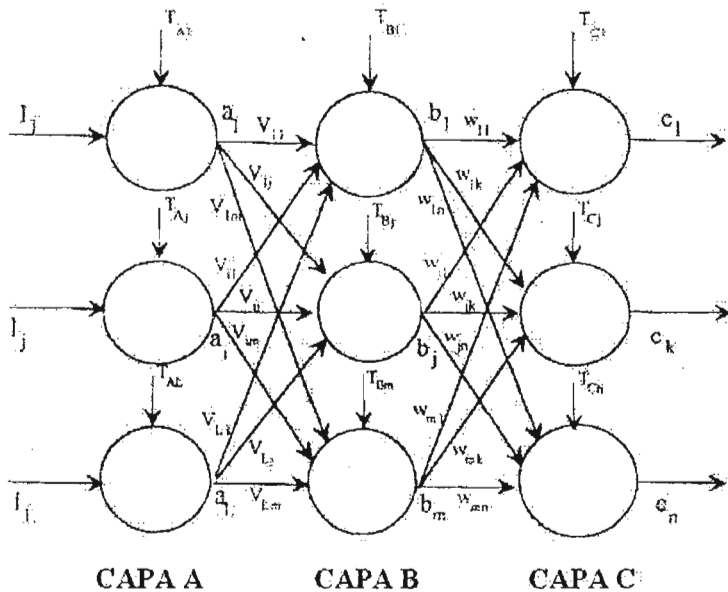


Figura 19. Una red neuronal Perceptron de tres capas.

Esta red tiene tres capas, A, B y C. La alimentación dentro de la capa A es el vector de entrada I. Así la capa tiene L nodos,  $a_i$  ( $i = 1$  a L), un nodo para cada parámetro

de entrada. La capa B, la capa oculta, tiene  $m$  nodos,  $b_j$  ( $j = 1$  a  $m$ ). En la figura  $L = m = 3$ ; para fines prácticos, aunque  $L$  y  $m$  la mayoría de las veces necesitan no ser iguales. Cada capa quizás tenga un número diferente de nodos. La capa C, la capa de salida, tiene  $n$  nodos,  $c_k$  ( $k = 1$  a  $n$ ), de nuevo con un nodo para cada parámetro de salida. Los pesos de interconexión entre el nodo  $i^{th}$  de la capa A y el nodo  $j^{th}$  de la capa B están denotados como  $v_{ij}$ , y los pesos de interconexión entre el nodo  $j^{th}$  de la capa B y el nodo  $k^{th}$  de la capa C están denotados como  $w_{jk}$ . Finalmente cada nodo tiene un valor de umbral interno. Para la capa A, el umbral es  $T_{A_i}$ , Para la capa B,  $T_{B_j}$ , y para la capa C,  $T_{C_k}$  (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

Para ilustrar los conceptos básicos del aprendizaje de la propagación hacia atrás, usemos la red neuronal Perceptron de tres capas mostrada en la figura 19 para la falla de diagnósticos en el procesado de datos de un reactor químico. La tabla I muestra los vectores de entrada y de salida para la red.

La salida deseada,  $d_k$ , de la red es booleana: 0 indica que no existe ninguna falla operacional, y 1 indica que una falla existe. La salida actual desde la red neuronal es un valor numérico entre 0 y 1, y puede ser visto casi como la “probabilidad” de que una entrada dada produzca la falla operacional (0 = la falla definitivamente no ocurrirá; 1 = la falla definitivamente ocurrirá).

Tabla I.2. Entradas y salidas para la red neuronal de falla en el diagnóstico.

Vectores de entrada.	Vectores de salida.
$I_1$ : temperatura de entrada al reactor, ° F.	$c_1$ : baja conversión.
$I_2$ : presión de entrada al reactor, psia.	$c_2$ : baja selectividad del catalizador.
$I_3$ : flujo de alimentación, lb/min.	$c_3$ : aglomeración del catalizador.

Dando las entradas y salidas superiores, ahora ilustraremos como usar el algoritmo de propagación hacia atrás para entrenar a la red a reconocer las siguientes condiciones específicas:

Tabla II.2. Entradas y salidas para la red neuronal de falla en el diagnóstico.

Entradas:	Salida deseada:
$I_1 = 300/1000 \text{ } ^\circ\text{F} = 0.3$	$D_1 = 1$ (baja conversión)
$I_2 = 100/1000 \text{ psia} = 0.1$	$D_2 = 0$ (sin problema)
$I_3 = 200/1000 \text{ lb/min} = 0.2$	$D_3 = 0$ (sin problema)

Todos los valores de entrada se han dividido por 1000. En el entrenamiento de redes neuronales, se recomienda “normalizar” las entradas y las salidas a un rango finito, tal como [0,1] o [-1,1]. En este problema se dividen los valores de entrada por sus correspondientes valores máximos para lograr esto. Mas adelante la necesidad de normalizar los datos se volverá mas clara.

### 2.10.8 ALGORITMO DE PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS VANILLA.

La propagación hacia atrás; como se notó, es una forma del aprendizaje de corrección de errores, y por lo tanto intenta dar propiamente un mapa de las entradas dadas con las salidas deseadas para minimizar una función error. Típicamente, se usa la suma del error al cuadrado. El componente del vector error desde el nodo  $k^{th}$  en la capa de salida,  $\epsilon_k$ , es definido como  $\epsilon_k = d_k - c_k$ , donde  $d_k$  es el valor de la salida deseada y  $c_k$  es el valor calculado. La función de error total de mínimos cuadrados,  $E$ , es:

$$E = \sum_k \epsilon_k^2 = \sum_k (d_k - c_k)^2 \dots\dots(2.7)$$

ahora se ajustan ambas alimentaciones de factores de peso,  $v_{ij}$  y  $w_{jk}$  (ver figura 19), junto con los umbrales internos para minimizar  $E$ . Mas adelante se puede observar este procedimiento de ajuste paso a paso conocido como el *algoritmo de propagación hacia atrás vanilla*. Este algoritmo requiere que se suministre el vector de entrada  $I$  para las salidas  $c_k$  (Del Río y col., 2001; Baughman y col., 1995).

*Paso 1.* Aleatoriamente se especifican los valores para todos los factores de peso ( $v_{ij}$ 's y  $w_{jk}$ 's) dentro del intervalo [-1, +1]. Lo mismo sucede para los umbrales internos

$(T_{Ai}, T_{Bj}$  y  $T_{Ck})$  se les asignan valores para cada nodo, también deben estar entre  $-1$  y  $+1$ .

Se debe notar que en este punto, solo se esta considerando como el algoritmo opera, por lo tanto simplemente se asignan valores iniciales a los factores de pesos y a los umbrales internos. Mas adelante se explicara como seleccionar estos valores. Se debe recordar que  $i = 1, 2, \dots, L$ , donde  $L$  es el numero de nodos en la capa A;  $j = 1, 2, \dots, m$ , donde  $m$  es el numero de nodos en la capa B y  $k = 1, 2, \dots, n$ , donde  $n$  es el numero de nodos en la capa C.

Los valores para los pesos son:

$$[v_{ij}] = \begin{bmatrix} -1.0 & -0.5 & 0.5 \\ 1.0 & 0.0 & -0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad w_{jk} = \begin{bmatrix} -1.0 & -0.5 & 0.5 \\ 1.0 & 0.0 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$$

Para los valores de los umbrales internos ( $T_{1i}$ ,  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$ ) todos los umbrales internos son representados por la matriz como:

$$[T_{ij}] = \begin{bmatrix} 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.5 & 0.0 & -0.5 \\ 0.0 & 0.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$

**Paso 2.** Introducir el vector de entrada **I** dentro de la red neuronal de la figura 19. Se calculan todas las salidas de la primer capa, usando la función sigmoideal introducida previamente:

$$x_i = I_i - T_{Ai} \dots\dots(2.8)$$

$$f(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-x_i}} = a_i \dots\dots(2.9)$$

Aquí,  $I_i$  es la entrada normalizada dentro del nodo  $i^{th}$  en la capa de entrada,  $T_{Ai}$  es el umbral interno para el nodo,  $x_i$  es la activación total del nodo  $i^{th}$ , y  $a_i$  es la salida del nodo.

Se introduce el vector de entrada dentro de la red neuronal y calculamos las salidas desde la capa 1:

$$x_1 = I_1 - T_{11} = 0.3 - 0 = 0.3$$

$$x_2 = I_2 - T_{12} = 0.1 - 0 = 0.1$$

$$x_3 = I_3 - T_{13} = 0.2 - 0 = 0.2$$

Al sustituir estos valores dentro de la función sigmoïdal, nosotros conseguimos:

$$a_1 = f(x_1) = \frac{1}{1 + e^{-x_1}} = 0.57444$$

$$a_2 = f(x_2) = \frac{1}{1 + e^{-x_2}} = 0.52498$$

$$a_3 = f(x_3) = \frac{1}{1 + e^{-x_3}} = 0.54983$$

se debe apreciar que si no se normalizan los valores de entrada en el rango de  $[0, 1]$ , se tendrían los siguientes resultados:

$$x_1 = I_1 - T_{11} = 300 - 0 = 300$$

$$x_2 = I_2 - T_{12} = 100 - 0 = 100$$

$$x_3 = I_3 - T_{13} = 200 - 0 = 200$$

Y:

$$a_1 = f(x_1) = \frac{1}{1 + e^{-x_1}} = 1.0$$

$$a_2 = f(x_2) = \frac{1}{1 + e^{-x_2}} = 1.0$$

$$a_3 = f(x_3) = \frac{1}{1 + e^{-x_3}} = 1.0$$

Así si no se normalizan los valores de entrada,  $I_1$  a  $I_3$ , se tienen problemas potenciales. Si  $I_1 = 300$  ° F entonces  $a_1 = 1$ . Si  $I_1 = 150$  ° F, entonces  $a_1 = 1$  de nuevo. Esto es, que la función de transferencia sigmoïdal es *insensitiva* a los cambios en la entrada cuando  $I_1 > 2$ . Este ejemplo claramente porque es recomendable normalizar los valores de entrada en un rango finito,  $[0, 1]$  o  $[-1, +1]$ ; dentro de estos rangos, la función de transferencia varía apreciablemente con los cambios en la entrada y provee una respuesta mucho más *sensitiva*. Note que lo mismo sucede para las funciones de transferencia de tangente hiperbólica y la función de transferencia gaussiana.

*Paso 3.* Dando las salidas de la capa A, se calcula la salida de la capa B, usando la ecuación:

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i) - T_{Bj}\right) \dots\dots (2.10)$$

Donde  $f()$  es la misma función sigmoideal.

Así se calcula la salida de cada nodo en la capa 2:

$$b_1 = f(v_{11}a_1 + v_{21}a_2 + v_{31}a_3 - T_{21})$$

$$b_1 = f[(-1.0)(0.57444) + (1.0)(0.57444) + (0.5)(0.54983) - 0.5]$$

$$b_1 = f(-0.27455)$$

$$b_1 = 0.43179$$

Y sucesivamente para los demás nodos de salida.

*Paso 4.* Obteniendo las salidas de la capa B, se calcula la salida de la capa C, usando la ecuación:

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j) - T_{Ck}\right) \dots\dots (2.11)$$

Donde  $f()$  es la misma función sigmoideal.

Los pasos 1 al 4 representan *la activación de flujo hacia delante*, que es los valores de entrada dados;  $I_1$  a  $I_3$ , que se mueven hacia delante en la red, activan los nodos y producen los valores de salida actuales  $c_1$  a  $c_3$  basados en los valores iniciales asumidos de los pesos de interconexión,  $v_{ij}$  y  $w_{ik}$ , y los umbrales internos,  $T_{ij}$ . Obviamente los valores de salida actuales ( $c_1 = 0.56862$ ,  $c_2 = 0.25715$  y  $c_3 = 0.77598$ ) se desvían de los valores deseados de salida ( $d_1 = 1.0$ ,  $d_2 = 0.0$  y  $d_3 = 0.0$ ).

Los siguientes pasos del algoritmo de propagación hacia atrás representan *el flujo de error hacia atrás* en el cual se *propagan* los errores entre la salida deseada  $d_k$  ( $k = 1$  a  $3$ ) y la salida actual  $c_k$  *hacia atrás* a través de la red, y se intenta encontrar la mejor agrupación de parámetros para la red ( $v_{ij}$  y  $w_{ik}$ , y  $T_{ij}$ ). Los métodos tradicionales de entrenamiento permiten encontrar estos parámetros de la red minimizando la suma del error al cuadrado:

$$E = \sum_k \epsilon_k^2 = \sum_k (d_k - c_k)^2 \dots\dots\dots(2.12)$$

Sin embargo, métodos de entrenamiento mas eficientes, tales como el algoritmo de la propagación hacia atrás vanilla pequeñamente modifican la ecuación del error de salida,  $\epsilon_k = d_k - c_k$ , por introducción de la ecuación de mínimos cuadrados para el error de salida (LMS<sup>1</sup>) como se describe en el paso siguiente.

*Paso 5.* Ahora se propaga el error hacia atrás a través de la red, iniciando en la salida y moviéndose hacia atrás hacia la entrada. Se calcula el componente  $k^{th}$  del error de salida,  $\epsilon_k$  para cada nodo en la capa C, de acuerdo a la ecuación:

$$\epsilon_k = c_k (1 - c_k) (d_k - c_k) \dots\dots\dots(2.13)$$

Donde  $d_k$  es la salida deseada y  $c_k$  es la salida actual. Se llama a la ecuación  $\epsilon_k$  *la ecuación de mínimos cuadrados para el error de salida*. Esencialmente el producto  $c_k(1 - c_k)$  es un termino característico de la técnica llamada *técnica del aprendizaje del gradiente descendiente*<sup>2</sup> envolviendo la función de transferencia sigmoideal. Se recomienda utilizar el método de Newton (bajando en una pendiente sobre una superficie) para minimizar el error LMS. La ventaja de este método es que los cambios de los pesos son estimados sistemáticamente mejor que arbitrariamente, basados en las derivadas parciales de la función de transferencia. La función sigmoide de la salida es:

$$f(x_k) = \frac{1}{1 + e^{-x_k}} = c_k \dots\dots\dots(2.14)$$

Y su derivada parcial es:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{e^{-x_k}}{(1 + e^{-x_k})^2} \dots\dots\dots(2.15)$$

Nosotros podemos describir la ecuación como:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{1}{(1 + e^{-x_k})} \left( 1 - \frac{1}{1 + e^{-x_k}} \right) \dots\dots\dots(2.16)$$

Y así tenemos:

---

<sup>1</sup> Least – mean – square.

<sup>2</sup> Gradient –descent learning technique.

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = c_k(1 - c_k) \dots \dots \dots (2.17)$$

Así, se puede observar que el termino  $c_k(1 - c_k)$  en el paso 5 del algoritmo es actualmente el gradiente para el método de Newton (ejemplo, la derivada parcial con respecto a  $x_k$ ).

Así se calcula el error para cada nodo en la capa 3:

$$\epsilon_1 = c_1(1 - c_1)(d_1 - c_1) = 0.10581$$

$$\epsilon_2 = c_2(1 - c_2)(d_2 - c_2) = -0.04912$$

$$\epsilon_3 = c_3(1 - c_3)(d_3 - c_3) = -0.13489$$

*Paso 6.* Se continua la propagación hacia atrás, moviéndonos a la capa B. Se calcula el componente  $f^{th}$  del vector error,  $e_j$ , de la capa B relativo a cada  $\epsilon_k$ , usando la ecuación:

$$e_j = b_j(1 - b_j) \left( \sum_{k=1}^n (w_{jk} \epsilon_k) \right) \dots \dots \dots (2.18)$$

Es importante notar que la ecuación de nuevo aplica el termino gradiente,  $b_j(1 - b_j)$ , para calcular el error relativo.

Así los errores son:

$$e_1 = b_1(1 - b_1)(w_{11}\epsilon_1 + w_{12}\epsilon_2 + w_{13}\epsilon_3) = -0.03648$$

$$e_2 = b_2(1 - b_2)(w_{21}\epsilon_1 + w_{22}\epsilon_2 + w_{23}\epsilon_3) = 0.00887$$

$$e_3 = b_3(1 - b_3)(w_{31}\epsilon_1 + w_{32}\epsilon_2 + w_{33}\epsilon_3) = 0.00214$$

*Paso 7.* Ajustamos los factores de peso, calculando los nuevos  $w_{jk}$ , o  $w_{jk, nuevos}$  como:

$$w_{jk, nuevos} = w_{jk} + \eta_c b_j \epsilon_k \dots \dots \dots (2.19)$$

Para  $j = 1$  a  $m$  y  $k = 1$  a  $n$ . El termino  $\eta_c$  es una constante positiva que controla el rango de aprendizaje en la capa C. Así, los nuevos factores de peso son calculados desde los viejos factores a partir de los cálculos previos de entrenamiento por la expresión general siguiente:

$$\begin{bmatrix} \text{Nuevo Factor} \\ \text{de peso} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Viejo Factor} \\ \text{de Peso} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Rango de} \\ \text{Entrenamiento} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{Termino de} \\ \text{Entrada} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{Termino de Coreccion} \\ \text{del Gradiente Descendiente} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (2.20)$$



Usualmente a este esquema se le llama la regla de mínimos cuadrados.

Ahora se asigna  $\eta = 0.7$  para todos los valores de  $\eta$  y los nuevos valores de los factores de peso serán:

$$w_{11, \text{nuevo}} = w_{11} + \eta b_1 \epsilon_1 = -0.9680$$

$$w_{12, \text{nuevo}} = w_{12} + \eta b_1 \epsilon_2 = -0.5149$$

$$w_{13, \text{nuevo}} = w_{13} + \eta b_1 \epsilon_3 = 0.4593$$

*Paso 8.* Se ajustan los umbrales  $T_{Ck}$  ( $k = 1$  a  $n$ ) en la capa C, de acuerdo a la ecuación:

$$T_{Ck, \text{nuevo}} = T_{Ck} + \eta_C \epsilon_k \dots\dots(2.21)$$

Los umbrales para la capa 3 serán:

$$T_{31, \text{nuevo}} = T_{31} + \eta \epsilon_1 = 0.0741$$

$$T_{32, \text{nuevo}} = T_{32} + \eta \epsilon_2 = 0.4656$$

$$T_{33, \text{nuevo}} = T_{33} + \eta \epsilon_3 = -0.5944$$

$$T_{33, \text{nuevo}} = T_{33} + \eta \epsilon_3 = -0.5944$$

Así, los valores de los umbrales nuevos y viejos son:

$$\text{Viejos: } T_{31} = 0.0 \quad T_{32} = 0.5 \quad T_{33} = -0.5$$

$$\text{Nuevos: } T_{31} = 0.0741 \quad T_{32} = 0.4656 \quad T_{33} = -0.5944$$

*Paso 9.* Se ajustan los factores de peso,  $v_{ij}$ , para las conexiones entre las capas 1 y 2 de acuerdo a la ecuación:

$$v_{ij, \text{nuevos}} = v_{ij} + \eta_B \epsilon_{ij} \dots\dots(2.22)$$

Para  $i = 1$  a  $L$  y  $j = 1$  a  $m$ . El término  $\eta_B$  es una constante positiva que controla el rango de aprendizaje en la capa B. Note que esta ecuación tiene la misma forma que la ecuación (2.19) para calcular los factores de peso para la capa C.

De nuevo se asume que  $\eta = 0.7$  y los nuevos valores de los factores de peso serán:

$$v_{11, \text{nuevo}} = v_{11} + \eta a_1 \epsilon_1 = -1.0147$$

$$v_{12, \text{nuevo}} = v_{12} + \eta a_1 \epsilon_2 = -0.4964$$

$$v_{13, \text{nuevo}} = v_{13} + \eta a_1 \epsilon_3 = 0.5009$$

Y así sucesivamente para todos los factores de peso.

$$[v_{ij}] = \begin{bmatrix} -1.0 & -0.5 & 0.5 \\ 1.0 & 0.0 & -0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad [v_{ij, \text{nuevos}}] = \begin{bmatrix} -1.0147 & -0.4964 & 0.5009 \\ 0.9866 & 0.0033 & -0.4992 \\ 0.4860 & -0.4966 & 0.5008 \end{bmatrix}$$

*Paso 10.* Ajustamos los umbrales  $T_{Bk}$  ( $k = 1$  a  $n$ ) en la capa C, de acuerdo a la ecuación:

$$T_{Bj, \text{nuevo}} = T_{Bj} + \eta_B \in_i \dots \dots (2.23)$$

Los umbrales para la capa 2 serán:

$$T_{21, \text{nuevo}} = T_{21} + \eta \in_1 = 0.4745$$

$$T_{22, \text{nuevo}} = T_{22} + \eta \in_2 = 0.0062$$

$$T_{23, \text{nuevo}} = T_{23} + \eta \in_3 = -0.4985$$

Así, los valores de los umbrales nuevos y viejos son:

$$\text{Viejos: } T_{21} = 0.5 \quad T_{22} = 0.0 \quad T_{23} = -0.5$$

$$\text{Nuevos: } T_{21} = 0.4745 \quad T_{22} = 0.0062 \quad T_{23} = -0.4985$$

*Paso 11.* Repetir los pasos desde el 1 al 10 hasta que el error cuadrado;  $E$ , o el vector del error de salida;  $\in$ , sea cero o suficientemente pequeño.

**Numero de veces desarrollado:** 3860

$$\text{Valores deseados: } d_1 = 1 \quad d_2 = 0 \quad d_3 = 0$$

$$\text{Valores actuales: } d_1 = 0.9900 \quad d_2 = 0.0156 \quad d_3 = 0.0098$$

$$\text{Porcentaje de error: } e_1 = 1.00 \% \quad e_2 = 1.56 \% \quad e_3 = 0.98 \%$$

### 2.10.9 LIMITACIONES DEL ALGORITMO DE PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS VANILLA.

Este algoritmo requiere algunos comentarios:

- *Primero*, no se puede ajustar el umbral interno para la capa A,  $T_{Ai}$ 's. Sin embargo, dependiendo del problema que esta siendo resuelto, quizás se desee iniciar con todos los  $T_{Ai}$ 's iguales a cero.

- *Segundo*, usando una función sigmoide se restringen los valores de salida a valores entre 0 y 1, lo cual puede causar algunos problemas cuando se use la red neuronal para modelado empírico. Si se desea usar valores fuera del intervalo [0, 1], se necesita algún tipo de valor de salida “normalizada” para usarlo con el algoritmo de propagación hacia atrás.
- *Tercero*, un problema potencial al utilizar una red con las características de la figura 12 es la presencia de los valores de los umbrales internos,  $T_{Ai}$ ,  $T_{Bj}$  y  $T_{Ck}$ . Como estos valores de umbrales son ajustados durante el entrenamiento de la propagación hacia atrás, los niveles de activación de los nodos (como se determinan por los factores de peso de un cálculo previo de entrenamiento) pueden súbitamente volverse excesivamente bajos o altos, dependiendo de los nuevos valores de los umbrales. Estos cambios repentinos en la activación de un nodo inducen algunas consecuencias indeseables; específicamente, discontinuidad en la red, lo cual quizás en el momento guiaran a una estabilidad pobre en la red. Como resultado, el entrenamiento de la red quizás se postre a generar oscilaciones.

Por causa de estas dificultades muchas redes neuronales no usan valores de umbrales internos ( $T_{Ai}$ 's,  $T_{Bj}$ 's y  $T_{Ck}$ 's son todos fijados a cero). Aunque, la función sigmoideal actúa como un “umbral gradual,” con una curva en forma de S que elimina las discontinuidades causadas por los umbrales normales internos. La función sigmoide tiene un valor límite de cero a baja activación y un valor de uno a alta activación, permitiendo que ésta active o desactive el nodo. Cuando las funciones sigmoideas son usadas de esta forma, ellas son llamadas, *funciones umbrales sigmoideas* (Baughman y col., 1995).

No obstante estas modificaciones, se considera que uno de los retos mas grandes en el desarrollo de redes neuronales es el entrenamiento: este es a menudo largo y tedioso (> 50,000 iteraciones). A continuación se explica una técnica de entrenamiento

mucho mas eficiente llamada el algoritmo generalizado de la regla delta<sup>3</sup>, y se presentara este algoritmo para el entrenamiento de redes con múltiples puntos de datos. Mas adelante; también, se abordaran muchos aspectos prácticos en el desarrollo de redes neuronales para facilitar el entrenamiento de redes, haciendo énfasis en como seleccionar los parámetros de la red, tales como los factores de peso, funciones de transferencia, rangos de aprendizaje y más.

#### 2.10.10 ALGORITMO DE LA REGLA DELTA GENERALIZADO.

Muchos de los crecientes y numerosos o sofisticados algoritmos de entrenamiento de redes usan ambos parámetros como son los umbrales internos y las funciones de umbrales sigmoideas. Un ejemplo particular útil es el algoritmo de la regla delta. Este algoritmo es mas eficiente que el algoritmo de propagación hacia atrás vanilla, requiriendo una fracción de las iteraciones de entrenamiento, y además también incorpora ambos tipos de valores para los umbrales.

Como se ha visto, una dificultad con los algoritmos de la propagación hacia atrás es el tiempo excesivo requerido para entrenar la red. Dependiendo del tamaño de la red neuronal, el entrenamiento puede tomar horas o quizás días dependiendo en la rapidez y la capacidad de la computadora usada. Los investigadores han realizado muchos procedimientos de entrenamiento diferentes para aumentar la rapidez en los procesos de aprendizaje. Uno de tales procedimientos que ha sido frecuentemente aplicado, y usado en el algoritmo de propagación hacia atrás, es el *aprendizaje de gradiente de descenso*. (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

Otro método de entrenamiento que usa el aprendizaje del gradiente de descenso es la regla delta generalizada (regla delta), un método iterativo que minimiza el *error cuadrado medio*. Este esta relacionado con el algoritmo de propagación hacia atrás vanilla, pero tiene diferencias clave.

---

<sup>3</sup> O simplemente el algoritmo de la regla delta.

Primero, la regla delta usa una técnica conocida como *momentum* para agilizar el entrenamiento. El momentum es un peso extra adherido dentro de los factores de peso cuando ellos son ajustados. Al acelerar el cambio en los factores de peso, se mejora el rango de entrenamiento.

Para entender el significado físico del término "*momentum*", sigamos la ilustración dada por Caudill (1990). Supongamos que nosotros estamos viajando en una colina, como se ve en la figura 20a.

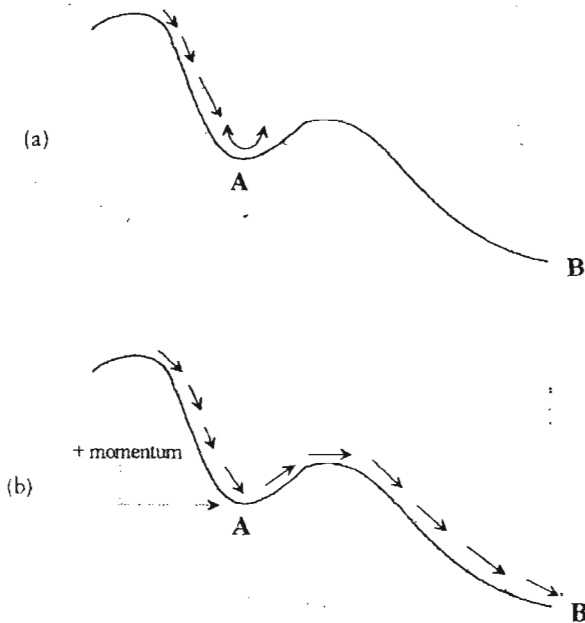


Figura 20. Una ilustración del método gradiente descendente (descenso de una colina) al momento de encontrar un mínimo (o obstáculo): (a) un esquema puro del gradiente descendente puede solamente llegar a la subida (punto mínimo local A); adheriendo momentum para ir sobre la colina y continuar moviéndonos para llegar al fondo de la colina (punto mínimo global B).

Para llegar al fondo de la colina, se toma siempre el camino mas empinado para descender desde la posición actual. Aunque ocasionalmente se encuentra una pequeña

subida en la senda de descenso, frecuentemente se es capaz de ir sobre esta y continuar la pendiente. Porque se ha estado llevando el trineo por un gran tiempo y bastante lejos, se ha ganado algo de momentum, entonces se tiende a pasar el obstáculo o la colina a menos que una barrera grande nos detenga. Si tenemos una barrera con esas características en la senda de descenso, una forma para dominar esto es introducir momentum externo para ayudar a mover el trineo sobre la colina y eventualmente llegar al fondo de esta, como se ve en la figura 20b (Baughman y col., 1995).

Este ejemplo es idéntico al método del gradiente de descenso para encontrar los parámetros de la red neuronal, tal como los factores de peso y los umbrales internos, basados en minimizar el error total de salida mínimo al cuadrado. En ciertas situaciones, la regla de mínimos cuadrados (LMS) para corrección de los factores de peso usada en el algoritmo de propagación hacia atrás vanilla, ecuación (2.20) guía a un mínimo local (similar a la pequeña subida en la figura 20a) del error total mínimo al cuadrado. La regla LMS es:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Nuevo Factor} \\ \text{de peso} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Viejo Factor} \\ \text{de Peso} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Rango de} \\ \text{Entrenamiento} \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \text{Termino de} \\ \text{Entrada} \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \text{Termino de Correccion} \\ \text{del Gradiente Descendiente} \end{array} \right] \dots\dots(2.24)$$

Para llegar al mínimo global (o el fondo de la colina) del error total mínimo al cuadrado, es necesario modificar la regla LMS por adición del termino de momentum para acelerar el entrenamiento de la red. Este proceso es el llamado *regla delta generalizada* (o regla delta) para la corrección de los factores de peso:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Nuevo Factor} \\ \text{de peso} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Viejo Factor} \\ \text{de Peso} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Rango de} \\ \text{Entrenamiento} \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \text{Termino de} \\ \text{Entrada} \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \text{Termino de Correccion} \\ \text{del Gradiente Descendiente} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Coeficient } \alpha \\ \text{de Momentum} \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \text{Cambio Previo} \\ \text{del Peso} \end{array} \right] \dots\dots(2.25)$$

Aquí el coeficiente de momentum;  $\alpha$ , es restringido tal que  $0 < \alpha < 1$ . el termino de momentum así representa un valor fraccional del cambio del peso desde las iteraciones previas.

Otra diferencia entre la regla delta y el algoritmo de propagación hacia atrás es la presencia de una *función prejujgadora* en lugar de los valores internos de los umbrales. Los umbrales internos ( $T_{1i}$ ,  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$ ) se convierten en una función prejujgadora cuando nosotros adherimos (preferible a restar como en el algoritmo de la propagación hacia

atrás) un número fijo a la sumatoria nodal. En adición, cuando sirven como funciones prejuizgadoras, los valores de  $T_{1i}$ ,  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$  se vuelven constantes a través del proceso de entrenamiento. En la regla delta, se inicia  $T_{1i} = 0$ ,  $T_{2j} = T_{3k} = 1$  para el entrenamiento entero de la red neuronal (Baughman y col., 1995).

Al usar el momentum aclopado con una función de prejuizgue, el algoritmo de la regla delta es mas eficiente que el algoritmo de la propagación hacia atrás vanilla. Para ilustrar la comparación, se aplicara la regla delta para el Perceptron de 3 capas de alimentación hacia delante mostrado en la figura 19 al mismo problema de falla en el diagnostico.

*Paso 1.* Aleatoriamente se asignan valores entre 0 y 1 a los pesos  $v_{ij}$  y  $w_{ik}$ . Para la regla delta, los valores de los umbrales internos *deben* ser asignados como sigue: todos los umbrales de la capa de entrada deben ser iguales a cero, ejemplo,  $T_{1i} = 0$ ; todos los umbrales de la capa oculta y los de la capa de salida deben ser iguales a 1, ejemplo.  $T_{2j} = T_{3k} = 1$ .

$$[T_{ij}] = \begin{bmatrix} 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

*Paso 2.* Introducir la entrada  $I_i$  dentro de la red neuronal y calcular todas las salidas desde la primer capa de acuerdo a las ecuaciones:

$$x_i = I_i - T_{1i} = I_i + 0 = I_i \dots\dots(2.26)$$

$$f(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-x_i}} = a_i \dots\dots(2.27)$$

Notar que aquí se adhiere  $T_{1i}$  al valor de entrada. Una vez de nuevo,  $f()$  es la función sigmoide.

$$x_1 = I_1 - T_{11} = 0.3 - 0 = 0.3$$

$$x_2 = I_2 - T_{12} = 0.1 - 0 = 0.1$$

$$x_3 = I_3 - T_{13} = 0.2 - 0 = 0.2$$

$$a_1 = f(x_1) = \frac{1}{1 + e^{-x_1}} = 0.57444$$

$$a_2 = f(x_2) = \frac{1}{1 + e^{-x_2}} = 0.52498$$

$$a_3 = f(x_3) = \frac{1}{1 + e^{-x_3}} = 0.54983$$

*Paso 3.* Dando las salidas de la capa A, se calcula la salida de la capa B, usando la ecuación:

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i) + T_{2j}\right) \dots\dots\dots (2.28)$$

Donde  $f()$  es la misma función sigmoideal. Note que  $T_{2j} = 1$  en este algoritmo, y se esta de nuevo adhiriendo este a las entradas pesadas. Cuando lo usamos de este modo,  $T_{2j}$  actúa como una función prejujadora mejor que como un umbral interno.

$$b_1 = f(v_{11}a_1 + v_{21}a_2 + v_{31}a_3 + T_{21}) = f(1.22546) = 0.77302$$

$$b_2 = f(v_{12}a_1 + v_{22}a_2 + v_{32}a_3 + T_{22}) = f(0.43786) = 0.60775$$

$$b_3 = f(v_{13}a_1 + v_{23}a_2 + v_{33}a_3 + T_{23}) = f(1.29965) = 0.78578$$

*Paso 4.* Conociendo las salidas de la segunda capa, se calcula el resultado de la capa de salida, de acuerdo a la ecuación:

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j) + T_{3k}\right) \dots\dots\dots (2.29)$$

Donde  $f()$  es la misma función sigmoideal. Notar de nuevo, que  $T_{3k} = 1$  en este algoritmo, actúa como una función prejujadora adherida a la entrada pesada.

$$c_1 = f(w_{11}b_1 + w_{21}b_2 + w_{31}b_3 + T_{31}) = f(1.22762) = 0.77340$$

$$c_2 = f(w_{12}b_1 + w_{22}b_2 + w_{32}b_3 + T_{32}) = f(0.22060) = 0.55493$$

$$c_3 = f(w_{13}b_1 + w_{23}b_2 + w_{33}b_3 + T_{33}) = f(2.08327) = 0.88927$$

*Paso 5.* Se continúan los pasos del 1 al 4 para P numero de elementos entrenados presentados en la capa de entrada. Calcular el error mínimo cuadrado, E, de acuerdo a la siguiente ecuación:



$$E = \sum_{p=1}^P \sum_{k=1}^n (d_k^p - c_k^p)^2 \dots\dots\dots(2.30)$$

Donde P es el numero de elementos entrenados presentados en la capa de entrada, n es el numero de nodos en la capa de salida  $d_k^p$  es el valor deseado de salida desde el nodo  $k^{\text{th}}$  en el elemento de entrenamiento  $p^{\text{th}}$ , y  $c_k^p$  es el valor de la salida actual desde el nodo  $k^{\text{th}}$  en el elemento de entrenamiento  $p^{\text{th}}$ .

$$E = \sum_{k=1}^3 (d_k - c_k)^2 = (d_1 - c_1)^2 + (d_2 - c_2)^2 + (d_3 - c_3)^2 = 1.1501$$

*Paso 6.* Conociendo el elemento  $p^{\text{th}}$ , calcule;  $\delta_{3k}^p$ , el termino gradiente de descenso para el nodo  $k^{\text{th}}$  en la capa de salida (capa 3) para el elemento de entrenamiento. Usar la siguiente ecuación:

$$\delta_{3k}^p = (d_k^p - c_k^p) \frac{\partial f}{\partial x_k} \dots\dots\dots(2.31)$$

Donde  $f()$  es la función sigmoide:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \dots\dots\dots(2.32)$$

Y su derivada parcial es:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{e^{-x_k}}{(1 + e^{-x_k})^2} \dots\dots\dots(2.33)$$

En este punto, la regla delta es cercanamente paralela al algoritmo de propagación hacia atrás vanilla (ecuaciones (2.13) a la (2.17)). Sin embargo, hay que notar que  $x_k$  aquí es la suma de las entradas pesadas en el nodo  $k^{\text{th}}$  en la capa de salida *más* la función prejujuadora (ejemplo, para la sesión de entrenamiento):

$$x_k^p = \sum_j w_{jk}^p b_j^p + T_{jk}^p \dots\dots\dots(2.34)$$

Donde para el elemento de entrenamiento p,  $b_j^p$  es el valor de salida del nodo  $j^{\text{th}}$  en la capa oculta y  $T_{jk}^p$  es el valor del umbral en la capa de salida.

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{e^{-x_1}}{(1+e^{-x_1})^2} = \frac{e^{-0.77340}}{(1+e^{-0.77340})^2} = 0.27193$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{e^{-x_2}}{(1+e^{-x_2})^2} = \frac{e^{-0.55493}}{(1+e^{-0.55493})^2} = 0.23170$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_3} = \frac{e^{-x_3}}{(1+e^{-x_3})^2} = \frac{e^{-0.88927}}{(1+e^{-0.88927})^2} = 0.20643$$

$$\delta_{31} = (d_1 - c_1) \frac{\partial f}{\partial x_1} = 0.06162$$

$$\delta_{32} = (d_2 - c_2) \frac{\partial f}{\partial x_2} = -0.12858$$

$$\delta_{33} = (d_3 - c_3) \frac{\partial f}{\partial x_3} = -0.18357$$

*Paso 7.* De nuevo, conociendo el elemento  $p^{\text{th}}$ , calculamos  $\delta_{2j}^p$ , el termino del gradiente de descenso para el nodo  $j^{\text{th}}$  en la capa oculta (capa 2). Usando la ecuación:

$$\delta_{2j}^p = \left( \sum_k \delta_{3k}^p w_{jk}^p \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \dots\dots\dots(2.35)$$

Donde la  $k$  subscripta denota un nodo en la capa de salida. Renombrando a esta  $x_j$  esta definida por:

$$x_j^p = \sum_i v_{ij}^p a_i^p + T_{2j}^p \dots\dots\dots(2.36)$$

Y la derivada parcial de la función sigmoide, de nuevo, es:

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{e^{-x_j}}{(1+e^{-x_j})^2} \dots\dots\dots(2.37)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{e^{-x_1}}{(1+e^{-x_1})^2} = \frac{e^{-0.77302}}{(1+e^{-0.77302})^2} = 0.21608$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{e^{-x_2}}{(1+e^{-x_2})^2} = \frac{e^{-0.60775}}{(1+e^{-0.60775})^2} = 0.23512$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_3} = \frac{e^{-x_3}}{(1+e^{-x_3})^2} = \frac{e^{-0.78578}}{(1+e^{-0.78578})^2} = 0.21506$$

$$\delta_{21} = (\delta_{31}w_{11} + \delta_{32}w_{12} + \delta_{33}w_{13}) \frac{\partial f}{\partial x_1} = -0.019257$$

$$\delta_{22} = (\delta_{31}w_{21} + \delta_{32}w_{22} + \delta_{33}w_{23}) \frac{\partial f}{\partial x_2} = -0.070936$$

$$\delta_{23} = (\delta_{31}w_{31} + \delta_{32}w_{32} + \delta_{33}w_{33}) \frac{\partial f}{\partial x_3} = -0.026941$$

*Paso 8.* Conociendo  $\delta_{2j}^p$  para la capa oculta y  $\delta_{3k}^p$  para la capa de salida, calcular el cambio de los pesos usando las ecuaciones:

$$\Delta v_{ij, nuevo}^p = \eta \delta_{2j}^p a_i^p + \alpha \Delta v_{ij}^{p-1} \dots\dots\dots(2.38)$$

$$\Delta w_{jk, nuevo}^p = \eta \delta_{3k}^p b_j^p + \alpha \Delta w_{jk}^{p-1} \dots\dots\dots(2.39)$$

Donde  $\eta$  es el *rango de aprendizaje*, y  $\alpha$  es el *coeficiente de momentum*. Como se mencionó, el momentum es simplemente un peso adherido para acelerar el rango de entrenamiento. El coeficiente de momentum,  $\alpha$ , esta usualmente restringido al intervalo  $0 < \alpha < 1$ . así el termino de momentum,  $\alpha \Delta w_{jk}^{p-1}$  y  $\alpha \Delta v_{ij}^{p-1}$ , son valores fraccionales de los cambios de los pesos de las iteraciones previas de entrenamiento.

$$\begin{bmatrix} \Delta v_{ij, nuevo} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -9.96 * 10^{-3} & -3.67 * 10^{-2} & -1.39 * 10^{-2} \\ -9.10 * 10^{-3} & -3.35 * 10^{-2} & -1.73 * 10^{-2} \\ -9.53 * 10^{-4} & -3.51 * 10^{-2} & -1.33 * 10^{-2} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \Delta w_{jk, nuevo} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.19 * 10^{-2} & -8.95 * 10^{-2} & -1.28 * 10^{-2} \\ 3.31 * 10^{-2} & -7.03 * 10^{-2} & -1.00 * 10^{-2} \\ 3.92 * 10^{-2} & -9.09 * 10^{-2} & -1.30 * 10^{-1} \end{bmatrix}$$

*Paso 9.* Conociendo los cambios de los pesos, actualizar los mismos de acuerdo a las ecuaciones:

$$w_{jk, nuevo}^p = w_{jk}^{p-1} + \Delta w_{jk, nuevo}^p \dots\dots\dots(2.40)$$

$$v_{ij, nuevo}^p = v_{ij}^{p-1} + \Delta v_{ij, nuevo}^p \dots\dots\dots(2.41)$$

$$[v_{ij}] = \begin{bmatrix} -1.0 & -0.5 & 0.5 \\ 1.0 & 0.0 & -0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad [v_{ij, \text{nuevos}}] = \begin{bmatrix} -1.0009 & -0.5367 & 0.4867 \\ 0.9909 & -0.0335 & -0.5173 \\ 0.4990 & -0.5351 & 0.4867 \end{bmatrix}$$

$$[w_{jk}] = \begin{bmatrix} -1.0 & -0.5 & 0.5 \\ 1.0 & 0.0 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad [w_{jk, \text{nuevos}}] = \begin{bmatrix} -0.9581 & -0.5895 & 0.4872 \\ 1.0331 & -0.0703 & -0.4900 \\ 0.5392 & -0.4091 & 0.4870 \end{bmatrix}$$

Repetir los pasos 2 al 9 para todos los elementos entrenados hasta que el error mínimo es cero o suficientemente bajo.

**Numero de veces desarrollado:** 784

<b>Valores deseados:</b>	$d_1 = 1$	$d_2 = 0$	$d_3 = 0$
<b>Valores actuales:</b>	$d_1 = 0.9900$	$d_2 = 0.0099$	$d_3 = 0.0099$
<b>Porcentaje de error:</b>	$e_1 = 1.00 \%$	$e_2 = 0.99 \%$	$e_3 = 0.99 \%$

La superioridad del algoritmo de la regla delta sobre el algoritmo de la propagación hacia atrás vanilla es evidente: el algoritmo de propagación hacia atrás vanilla requirió de 3860 iteraciones para conseguir un error del 1 % para  $d_1$ , mientras que el algoritmo de la regla delta solo requirió 784. esto es casi un 80 % de disminución en el numero de iteraciones. En adición, el algoritmo de la regla delta produjo bajos errores para ambos  $d_2$  y  $d_3$ .

Es importante notar que en el ejemplo anterior, solo se usó solo un punto de datos (elementos de entrada). Sin embargo, el algoritmo de la regla delta puede acomodarse a múltiples elementos de entrada, y el procedimiento esbozado aquí quizás sea aplicado a una red neuronal con P numero de elementos de entrada.

## 2.11 FORMULACIÓN ALTERNATIVA DEL ALGORITMO DE LA PROPAGACIÓN HACIA ATRÁS.

Antes de que se regrese a algunos de los aspectos prácticos del calculo de redes neuronales, incluyendo mas detalles en el aprendizaje de la propagación hacia atrás, primero se debe proveer un eficiente algoritmo de entrenamiento.

Aquí se puede observar una formulación alternativa de la red Perceptron de alimentación hacia delante de tres capas y el algoritmo de la regla delta que los hacen mas fáciles de implementar en el software comercial y común sobre redes neuronales. La figura 21 muestra una red neuronal simplificada con las funciones prejuzadoras  $T_{ij}$  ( $i = 1$  a  $3, j = 1$  a  $3$ ) y las funciones de los umbrales sigmoides usadas en la discusión sobre el algoritmo de la regla delta (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

Se puede entender que desde los pasos 3 y 4 del algoritmo de la regla delta que:

- Las salidas de la capa oculta:

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i) + T_{2j}\right) \dots\dots\dots (2.42)$$

- Las salidas de la capa de salida:

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j) + T_{3k}\right) \dots\dots\dots (2.43)$$

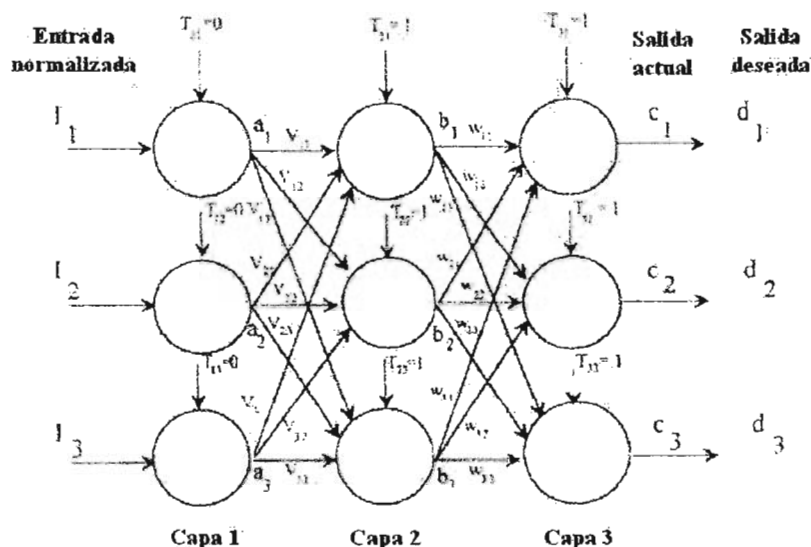


Figura 21. Una red simplificada Perceptron de tres capas con alimentación hacia adelante para el problema de falla en el diagnóstico con las funciones prejujadoras  $T_{ij}$  ( $i = 1$  a  $3, j = 1$  a  $3$ ) y las funciones de los umbrales sigmoide.

Para la figura 21, se tiene que  $i = 1$  a  $3$  ( $= L$ ),  $j = 1$  a  $3$  ( $= m$ ), y  $k = 1$  a  $3$  ( $= n$ ).

La figura 22 muestra un método para incorporar y ajustar las funciones prejujadoras  $T_{ij}$  ( $i = 1$  a  $3, j = 1$  a  $3$ ) durante el entrenamiento de la red, que es popular en el software de redes neuronales comercial. Este método introduce aun nodo llamado nodo de *prejujgue* con una entrada constante  $a_0$  igual a 1. esta entrada de prejujgue;  $a_0$ , es alimentada a todos los nodos en la capa oculta y la capa de salida con los factores de peso  $v_{0j}$  y  $w_{0k}$  ( $j = 1$  a  $3; k = 1$  a  $3$ ), y los pesos prejujgados resultantes reemplazan a los umbrales internos  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$  ( $j = 1$  a  $3; k = 1$  a  $3$ ).

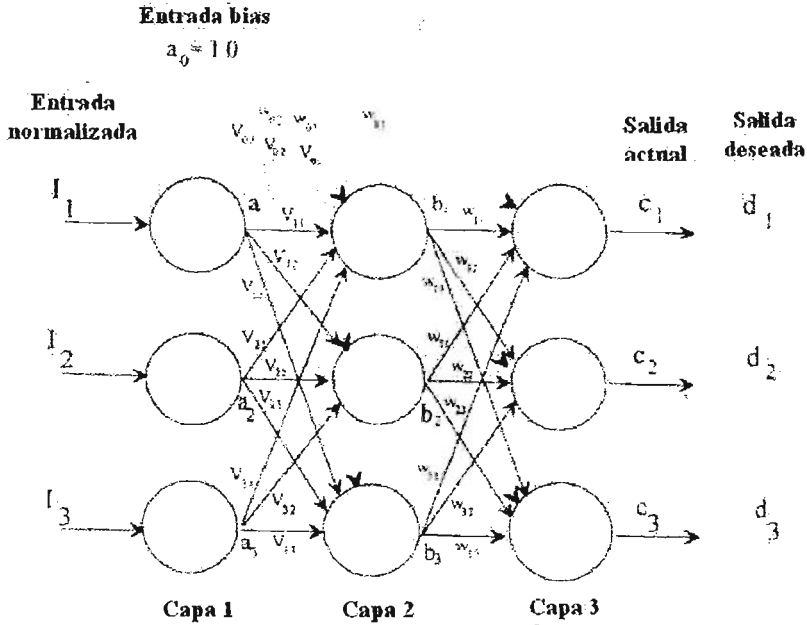


Figura 22. Una arquitectura alternativa para una red simplificada Perceptron de tres capas con alimentación hacia adelante para el problema de falla en el diagnostico con una entrada de prejujuce y los factores de peso  $v_{0j}$  y  $w_{0k}$  ( $j = 1$  a  $3$ ;  $k = 1$  a  $3$ ) reemplazando los umbrales internos  $T_{ij}$  ( $i = 1$  a  $3$ ;  $j = 1$  a  $3$ ).

En otras palabras quizás sea necesario escribir:

- Las salidas de la capa oculta:

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i) + T_{2j}\right) \dots\dots\dots(2.44)$$

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i) + v_{0j} * a_0\right) \dots\dots\dots(2.45)$$

$$b_j = f\left(\sum_{i=1}^L (v_{ij} a_i)\right) (a_0 = 1) \dots\dots\dots(2.46)$$

- Las salidas de la capa de salida:

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j) + T_{3k}\right) \dots\dots(2.47)$$

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j) + w_{0k} * b_0\right) \dots\dots(2.48)$$

$$c_k = f\left(\sum_{j=1}^m (w_{jk} b_j)\right) \quad (\alpha_0 = b_0 = 1) \dots\dots(2.49)$$

Debido a que se alimenta el elemento de prejujuque  $a_0 = 1.0$  también se requerirá que  $a_0 = b_0$ , así:

$$T_{2j} = v_{0j} \quad (j = 1 \text{ a } 3) \dots\dots(2.50)$$

$$T_{3k} = w_{0k} \quad (k = 1 \text{ a } 3) \dots\dots(2.51)$$

Estos resultados indican que las funciones de prejujuque  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$  ( $j = 1$  a  $3$ ,  $k = 1$  a  $3$ ) en la red neuronal de la figura 21 se convierten en los factores de peso entre los nodos de prejujuque y los nodos de las capas oculta y de salida. Con esta formula, se puede usar el algoritmo de la regla delta para modificar iterativamente los valores de los umbrales internos  $T_{2j}$  y  $T_{3k}$  ( $j = 1$  a  $3$ ,  $k = 1$  a  $3$ ) durante el proceso de corrección de factores de peso en el sentido de que se modifiquen los otros factores de peso (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

La formulación alternativa mostrada en la figura 22, incorporando un nodo de prejujuque y los factores de peso es básico para implementar el algoritmo de la regla delta con el software comercial disponible.

## 2.12 ASPECTOS PRÁCTICOS DEL CALCULO DE REDES NEURONALES.

Hay muchos parámetros en redes neuronales que controlan el comportamiento de las redes y su capacidad de predicción. Para desarrollar un modelo de red neuronal efectivo, se deben controlar esos parámetros cuidadosamente. Así los siguientes apartados proporcionaran información detallada sobre:



1. Selección del número de capas ocultas.
2. Normalización del set de datos de entrada y salida.
3. Inicialización de la distribución de los factores de peso.
4. Alimentación del rango de aprendizaje y el coeficiente de momentum.
5. Selección de la función de transferencia adecuada.
6. Generación de una curva de aprendizaje de red.

## 2.13 SELECCIÓN DEL NUMERO DE CAPAS OCULTAS.

Aunque el problema de falla en el diagnóstico abarcado en la sección anterior usa una red con solo una capa oculta, las redes neuronales no están ciertamente restringidas a esa estructura. Ellas quizás; por supuesto, tienen múltiples capas ocultas, y determinar el número de capas ocultas es una parte crítica del diseño de una red. Para determinar el número óptimo de capas ocultas, y el número óptimo de nodos en cada capa, se entrena a la red usando varias configuraciones, luego se selecciona la configuración con el número mínimo de capas y nodos que produzca rápida y eficientemente el mínimo error raíz promedio al cuadrado.

Para problemas de clasificación, se recomienda usar una red de base de función radial<sup>4</sup>. Muchas predicciones de redes neuronales han sido limitadas a redes de simple capa. Sin embargo también se puede encontrar en la literatura que si se considera una segunda capa oculta esta mejora significativamente la capacidad de predicción de la red *sin tener algún efecto nocivo en la generalización del set de datos probados*. Así pues se ha demostrado que incluir una segunda capa oculta, efectivamente mejora la capacidad de predicción de las redes neuronales. Adhiriendo una tercera capa oculta; sin embargo, produce capacidades de predicción similares a las redes de 2 capas ocultas, pero requiere largos tiempos de entrenamiento debido a las estructuras más complejas. Así pues se recomienda usar una *configuración de 30:15 capas ocultas como la arquitectura inicial*

---

<sup>4</sup> Si se desea profundizar en este tema se puede revisar, Baughman D. R., Liu Y. A., "Neural Networks in Bioprocessing and Chemical Engineering", Capítulo 3.

*para muchas redes neuronales.* La configuración de 30:15 capas ocultas ejecuta efectivamente la mayoría de las redes neuronales pero, esta quizás no siempre sea la mejor configuración (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

## 2.14 NORMALIZACIÓN DEL SET DE DATOS DE ENTRADA Y DE SALIDA.

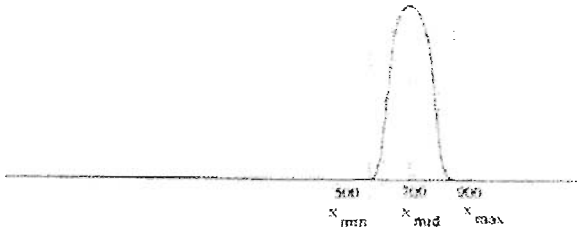
Muchos paquetes de software para redes neuronales tales como el NeuralWare's, NeuralWorks Explorer y el Profesional II/Plus, normalizan el set de datos de entrada y de salida por el usuario. Esta normalización es muy critica, si las variables de entrada y de salida no son del mismo orden de magnitud, algunas variables quizás tendrán mas significado de lo que ellas actualmente hacen. El algoritmo de entrenamiento tiene que compensar para diferencias de orden de magnitud ajustando los pesos de la red, lo cual no es muy efectivo en muchos algoritmos de entrenamiento (por ejemplo, el algoritmo de la propagación hacia atrás). Por ejemplo, si la variable de entrada 1 tiene un valor de 10000 y la variable de entrada 2 tiene un valor de 10, el peso asignado para la segunda variable que entra a un nodo de la capa oculta 1 debe ser mucho mas grande que para el primero en orden para la variable 2 para tener algún significado. En adición las funciones de transferencia, tales como la función sigmoide o la función de tangente hiperbólica no puede distinguir entre 2 valores diferentes de  $x_i$  cuando ambos son muy grandes porque producen valores idénticos en las salidas de los umbrales de 1.0. Por ejemplo, usando la función sigmoide ecuación (2.3), cuando  $x_i = 5$ ,  $f(x_i) = 0.993$ ; cuando  $x_i = 50$ ,  $f(x_i) = 1.00$ ; y cuando  $x_i = 500$ ,  $f(x_i) = 1.00$ . Para evitar tales problemas, la literatura recomienda normalizar todas las variables de entrada y de salida. Aquí se pueden observar 3 procedimientos de normalización típicos (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

1. *Normalización de cada variable*;  $x_i$ , en el set de datos entre los valores de 0 a 1 dividiendo su valor por el limite máximo de esa variable,  $x_{i, \max}$ , para dar una variable normalizada ; y cuando  $x_{i, \text{norm}}$ :

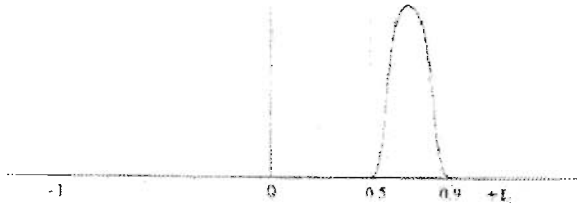
$$x_{i, \text{norm}} = \frac{x_i}{x_{i, \max}} \dots\dots(2.52)$$

Por ejemplo, se da una variable  $x_i$  con una distribución normal entre 500 y 900 y se asigna un factor de normalización  $x_{i, \max} = 1000$ . Usando la ecuación (2.56) se transforma la variable,  $x_i$ , en una distribución entre 0.5 y 0.9. una limitación de este método es que este no utiliza el rango entero de la función de transferencia. La figura 23 ilustra que solo una parte de la función de transferencia corresponde a  $x_i$  desde los valores de 0.5 a 0.9 y de  $-0.5$  a  $-0.9$  (se debe notar que también se incluye el intervalo negativo aun cuando este no esta representado en la figura 24, por que los factores de peso también tienen valores negativos). Los factores de peso abren y trasladan este intervalo a uno que incluya una región mas grande de la función de transferencia. Sin embargo como el numero de variables y factores de peso incrementa, estos ajustes se vuelven mas dificiles para los algoritmos de entrenamiento. Como resultado de esto, este algoritmo es adecuado para muchas redes simples, pero los problemas pueden elevarse cuando la arquitectura de la red se vuelve mas compleja.

### Distribución de las variables



### Distribución de las variables normalizadas



### Función de transferencia sigmoide

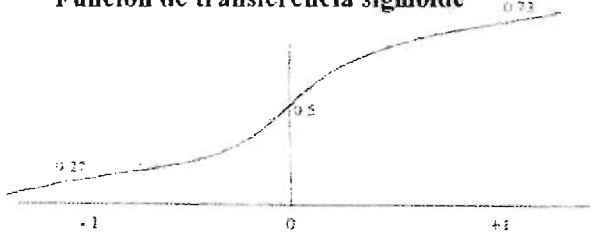


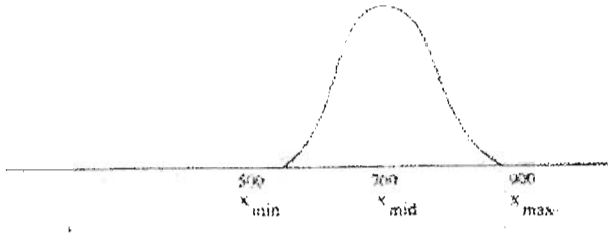
Figura 23. Ilustración de la normalización de un set de datos que va desde el rango de 500 a 900 y su representación en una función sigmoide usando los tres métodos de normalización.

2. Expandir el rango de normalización hasta que el valor mínimo de la variable normalizada,  $x_{i, norm}$  es colocado a 0 y el máximo valor  $x_{i, norm}$  es colocado en 1. Se define la variable normalizada  $x_{i, norm}$  al usar los valores máximo y mínimo de la variable original,  $x_{i, min}$  y  $x_{i, max}$ , respectivamente.

$$x_{i, norm} = \frac{x_i - x_{i, min}}{x_{i, max} - x_{i, min}} \dots\dots\dots (2.53)$$

Este método es mejor significativamente con respecto al primero porque usa el intervalo completo de la función de transferencia, como se ilustra en la figura 24 (de nuevo hay que notar que se incluye la región negativa de la función de transferencia). Además, con este método, cada variable de entrada en el set de datos tiene un intervalo de distribución similar, lo cual mejora la eficiencia de entrenamiento.

### Distribución de las variables



### Distribución de las variables normalizadas



### Función de transferencia sigmoide

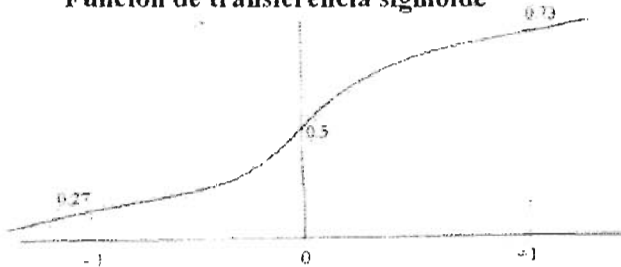


Figura 24. Ilustración de la normalización de un set de datos que va desde el rango de 500 a 900 y su representación en una función sigmoide usando los tres métodos de normalización: método 2.

3. *Normalice el set de datos entre los límites de -1 y +1, teniendo los valores promedio colocados en 0.* Se llama a esta técnica el método de normalización del cero promedio y representa a la variable normalizada,  $x_{i, norm}$ , por:

$$x_{i, norm} = \frac{x_i - x_{i, promedio}}{R_{i, max}} \dots\dots\dots(2.54)$$

Y

$$R_{i, max} = \maximo [x_{i, max} - x_{i, promedio}, x_{i, min} - x_{i, promedio}] \dots\dots\dots(2.55)$$

Donde  $x_i$ , es una variable de entrada o salida,  $x_{i, promedio}$ , es el valor promedio de las variables sobre el set de datos,  $x_{i, min}$ , es el valor mínimo de las variables,  $x_{i, max}$ , es el valor máximo de las variables, y  $R_{i, max}$ , es el intervalo máximo entre el valor promedio y entre el valor mínimo o máximo.

Como en el segundo método, este utiliza todo el rango de la función de transferencia y cada variable de entrada en el set de datos tiene un rango de distribución similar (figura 25).

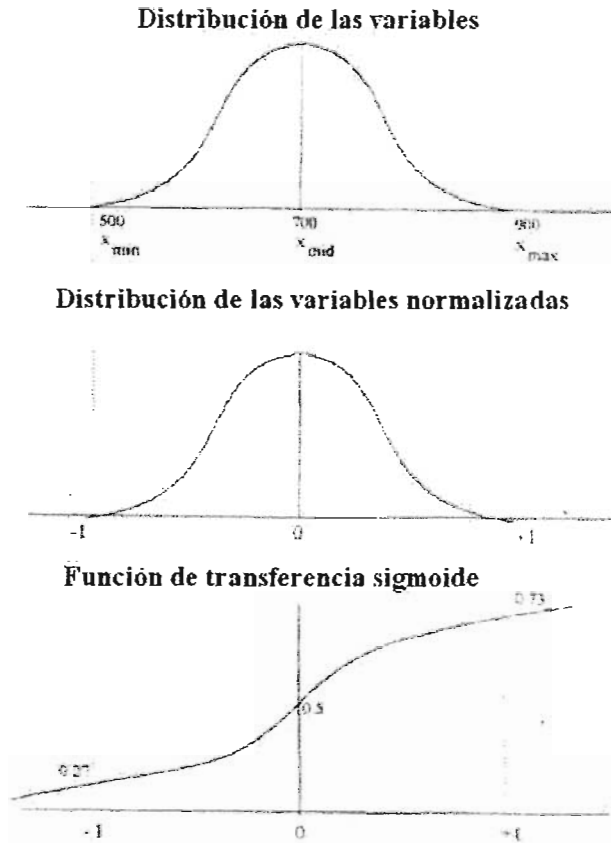


Figura 25. Ilustración de la normalización de un set de datos que va desde el rango de 500 a 900 y su representación en una función sigmoide usando los tres métodos de normalización: método de normalización del cero promedio.

## 2.15 INICIALIZANDO LA DISTRIBUCIÓN DE LOS FACTORES DE PESO.

Antes de entrenar una red neuronal, primero se deben colocar valores iniciales para los factores de peso,  $w_{ij}$ , entre los nodos de las capas ocultas. Típicamente los factores de peso son colocados en una forma aleatoria utilizando una distribución gaussiana uniforme. Diferentes investigaciones han permitido encontrar la distribución gaussiana mas adecuada y efectiva.

La tabla III.2 muestra las recomendaciones para distribuciones efectivas iniciales de factores de peso usadas en entrenamiento de redes de propagación hacia atrás basadas en un número de variables de entrada y un número total de nodos en las capas ocultas. La distribución recomendada inicial para los factores de peso varía solamente poco entre redes con 1 o 3 capas ocultas, dado que el número total de nodos es el mismo. Por eso, la tabla III.2 solo enlista las distribuciones basadas solamente en el número total de nodos en las capas ocultas. La mayoría de las ocasiones estas distribuciones son consistentes en el entrenamiento de redes neuronales (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

Tabla III.2. Un set estándar de distribuciones de factores de peso los cuales identifican las mejores distribuciones Gaussianas para un número total diferente de nodos en las capas ocultas para redes neuronales con 1 a 3 capas ocultas.

Numero de variables de entrada (nodos).	Numero total de nodos en las capas ocultas.		
	30	45	100
5	-0.7 a 0.7	-0.5 a 0.5	-0.35 a 0.35
10	-0.5 a 0.5	-0.40 a 0.40	-0.30 a 0.30
20	-0.45 a 0.45	-0.35 a 0.35	-0.30 a 0.30
30	-0.40 a 0.40	-0.30 a 0.30	-0.25 a 0.25
50	-0.30 a 0.30	-0.20 a 0.20	-0.20 a 0.20
100	-0.25 a 0.25	-0.20 a 0.20	-0.20 a 0.20

## 2.16 COLOCANDO EL INTERVALO DE APRENDIZAJE Y EL COEFICIENTE DE MOMENTUM.

El rango de aprendizaje y el coeficiente de momentum son dos parámetros muy importantes para definir que tan efectivamente el algoritmo de propagación hacia atrás entrena la red neuronal. El intervalo de aprendizaje es una constante positiva que controla el intervalo en el cual los nuevos factores de peso son ajustados basados en el término de corrección del gradiente de descenso. El coeficiente de momentum es un peso extra



adherido dentro de los factores de peso que acelera el intervalo en el cual los factores de peso son ajustados.

Se debe notar que aumentar el coeficiente de momentum disminuye el tiempo de entrenamiento. Eventualmente, aunque, el coeficiente de momentum y el rango de aprendizaje alcanzan un umbral en el cual el algoritmo de entrenamiento comienza a oscilar. La literatura menciona que los valores iniciales efectivos para el rango de entrenamiento y el coeficiente de momentum son 0.3 a 0.7, y 0.4 respectivamente (Baughman y col., 1995; Werbos, 1994).

Importantemente, aunque el set de valores iniciales para el rango de aprendizaje y el coeficiente de momentum no son óptimos para todas las etapas del proceso de aprendizaje. Diversos autores ha desarrollado *una lista de aprendizaje* que entrenara la red a los valores iniciales para un determinado numero de repeticiones, luego gradualmente reducirá estos valores hasta cero en un numero especifico de repeticiones. La tabla IV.2 muestra la típica lista de aprendizaje para una red propagación hacia atrás de 3 capas ocultas.

Tabla IV.2. Una lista típica de aprendizaje para una red de propagación hacia atrás para 3 capas ocultas.

		<u>Capa oculta 1</u>			
Repeticiones de entrenamiento.	de	0 – 10,000	10,001 – 30,000	30,001 – 70,000	70,001 – 150,000
Rango de aprendizaje.	de	0.3	0.15	0.0375	0.0234
Coefficiente de momentum.	de	0.4	0.2	0.05	0.00312
		<u>Capa oculta 2</u>			
Repeticiones de entrenamiento.	de	0 – 10,000	10,001 – 30,000	30,001 – 70,000	70,001 – 150,000
Rango de aprendizaje.	de	0.25	0.125	0.03125	0.0195
Coefficiente de momentum.	de	0.4	0.2	0.05	0.00312
		<u>Capa oculta 3</u>			
Repeticiones de entrenamiento.	de	0 – 10,000	10,001 – 30,000	30,001 – 70,000	70,001 – 150,000
Rango de aprendizaje.	de	0.2	0.1	0.025	0.00156
Coefficiente de momentum.	de	0.4	0.2	0.05	0.00312

## 2.17 IMPORTANCIA DE LA CINÉTICA DE LA REACCIÓN PARA LOS PROCESOS DE DESTILACIÓN REACTIVA.

Los procesos de destilación reactiva a menudo son diseñados bajo consideraciones de equilibrio para las reacciones químicas y para los fenómenos interfase. El diseño basado en el equilibrio nos guía a importantes implicaciones para la posibilidad de implementar la RD. Pero; sin embargo, muchas reacciones químicas llevadas a cabo en columnas RD son cinéticamente controladas y ellas pueden ser

fuertemente afectadas por las limitaciones de la inter - o intra fase másica y las resistencias de las energías de transporte (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Higler y col., 1999; Güttinger, 1998; Shah y col., 1994).

### 2.17.1 MEZCLAS REACTIVAS BINARIAS IDEALES.

Primero el papel de la cinética de la reacción es analizado considerando los procesos RD para una reacción reversible simple  $A_1 \rightleftharpoons A_2$  en una mezcla binaria ideal. El componente  $A_1$  es considerado como el componente reactivo con el punto de ebullición mas alto, así el producto  $A_2$  es obtenido en el destilado. La reacción puede ser llevada a cabo en una secuencia de columna RD con un loop externo de reciclaje (figura 26), en una columna no RD sobre la parte alta de un reboiler reactivo (figura 27), o en una columna RD completa (figura 28).

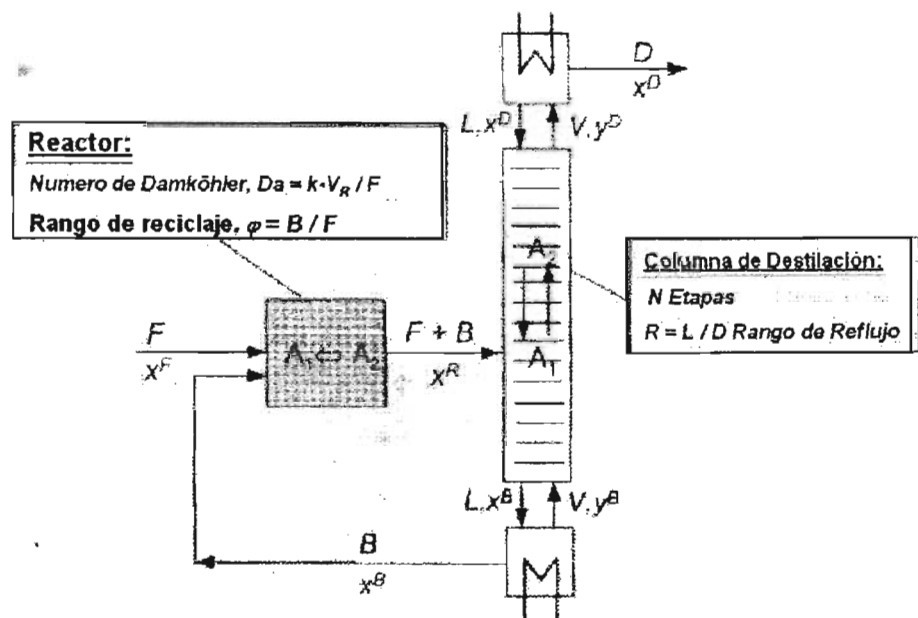


Figura 26. Sistema de columna de destilación con reactor y reciclaje.

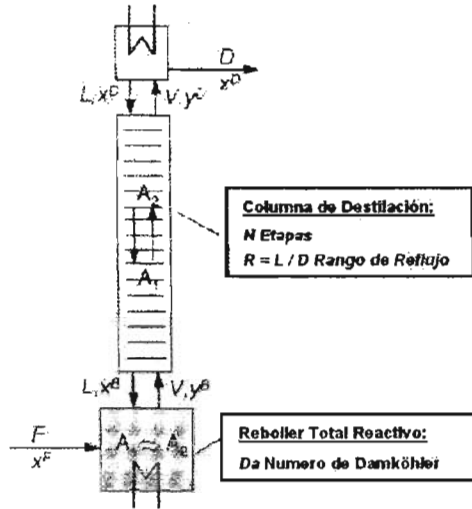


Figura 27. Columna de destilación con reboiler total reactivo.

En la etapa inicial del diseño conceptual de los procesos, muy poco se sabe acerca de la cinética de la reacción, así que una ley de expresión potencial macro cinética en términos de los moles de la fase líquida se debe usar:

$$r = kx_1^n \left( 1 - \frac{1}{K} \frac{x_2}{x_1} \right) \dots \dots (2.56)$$

Con  $n$  como el orden aparente de la reacción con respecto a  $A_1$ ,  $K$  como la constante de equilibrio, y  $k$  como la constante de intervalo efectivo de la reacción hacia delante (en este caso para la formación de  $A_2$ ).  $K$  y  $k$  son dependientes de la temperatura  $T$ , pero en un principio, estas pueden ser tomadas como parámetros constantes,  $K$  puede ser estimada de relaciones termodinámicas a una temperatura típica de ebullición de la mezcla reactiva (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

Para simplificar la nomenclatura, los índices de los componentes son eliminados y cambiados por  $x_2 = x$  y  $x_1 = 1 - x$ . En adición, un intervalo de reacción;  $r^*$ , adimensional es introducido:

$$r^* = \frac{r}{k} = (1-x)^n \left( 1 - \frac{1}{K} \frac{x}{1-x} \right) \dots\dots(2.57)$$

Como un caso especial de (2.61), el intervalo de reacción de primer orden ( $n = 1$ ) es dado por:

$$r^* = 1 - \frac{x}{x_{ce}} \quad \text{con } x_{ce} = \frac{K}{K+1} \dots\dots(2.58)$$

Donde  $x_{ce}$  es la fracción molar de  $A_2$  en el equilibrio químico. El equilibrio líquido – vapor es descrito asumiendo una volatilidad relativa constante  $\alpha = p_2^s / p_1^s > 1$ . Entonces, la fracción molar del equilibrio del componente  $A_2$ , en la fase vapor,  $y^e$ , es dada por:

$$y^e = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \dots\dots(2.59)$$

### 2.17.2 COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA COMPLETA.

En la figura 28, una columna RD completa es representada, en la cual una reacción química del tipo  $A_1 \rightleftharpoons A_2$  toma lugar. El reactivo (o educto)  $A_1$  es alimentado en el punto más alto de concentración dentro de la columna, que es el reboiler. En general, los números de Damköhler del reboiler,  $Da_{reb}$ , del condensador,  $Da_{cond}$ , y de las etapas reactivas,  $Da_s$ , pueden ser seleccionados independientemente. Los balances de masa correspondientes son dados como:

$$\text{Condensador total } (i = 1) 0 = (R + 1)(y^D - x^D) + Da_{cond} r^*(x^D) \dots\dots(2.60)$$

$$\text{Etapas } (i = 2, \dots, NC) 0 = R(x^{i-1} - x^i) + (R + 1)(y^e(x^i) - y^e(x^{i+1})) + Da_s r^*(x^i) \dots\dots(2.61)$$

$$\text{Reboiler total } (i = N) 0 = Rx^B - (R + 1)y^B + Da_{reb} r^*(y^B) \dots\dots(2.62)$$

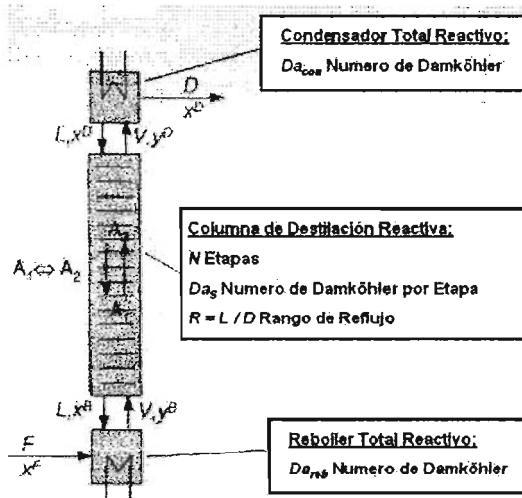


Figura 28. Columna RD con condensador total reactivo y con reboiler total reactivo.

La figura 29 muestra la representación geométrica de estos balances en el diagrama McCabe – Thiele. La composición del destilado  $x^D$  está localizada en la intersección de la línea de operación del condensador y la línea de operación de la sección de destilación reactiva. Al especificar  $x^D$ , el numero de etapas reactivas puede ser estimado con la construcción de escalera clásica. Con la intersección de la línea de operación de la sección de la columna con la línea del reboiler, la composición de los fondos es determinada.

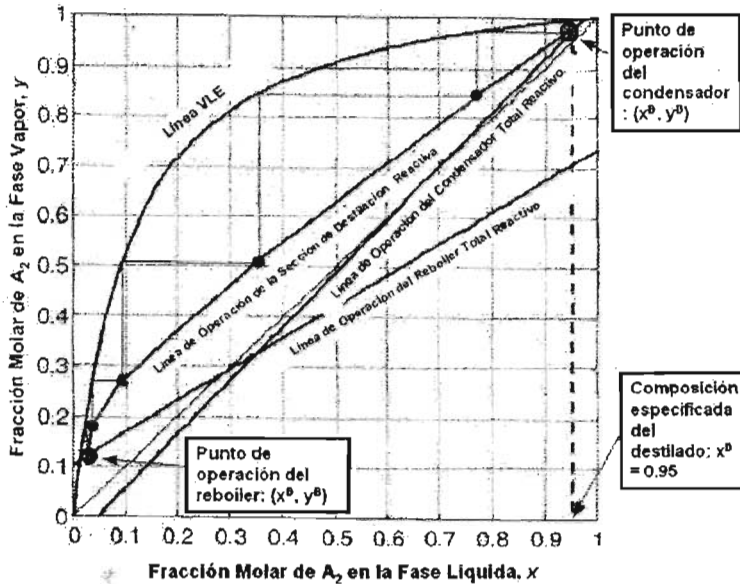


Figura 29. Diagrama de McCabe – Thiele para la configuración en la figura 28 ( $R = 1$ ,  $Da_{reb} = 0.5$ ,  $Da_s = 0.2$ ,  $Da_{cond} = 0.2$ ,  $\alpha = 10$ ,  $K = 2$ ,  $n = 1$ ).

Por propósitos de diseño, es deseable conocer la máxima concentración disponible de destilado del producto de la reacción  $A_2$ . Esta composición puede ser encontrada desde la intersección de la línea de operación reactiva del condensador con la línea de VLE. En el punto de intersección, la siguiente ecuación es válida:

$$0 = (R + 1)(y^*(x_{max}^D) - x_{max}^D) + Da_{cond} r^*(x_{max}^D) \dots (2.63)$$

De una manera similar, la concentración mínima posible en los fondos es determinada por:

$$0 = R x^*(x_{min}^B) - (R + 1)x_{min}^B + Da_{reb} r^*(x_{min}^B) \dots (2.64)$$

En la figura 30, uno puede ver que la concentración alcanzada en los domos de la columna para  $n = 1$  está continuamente disminuyendo cuando se aumenta el número de Damköhler,  $Da_{cond}$ , debido a la reacción reversible en la sección superior de la columna. Para  $Da_{cond} = \infty$ ,  $x^D$  se aproxima a la composición del equilibrio químico  $x_{ce}$ . Tendencias similares se obtienen con otros órdenes de reacción. A  $n = 3$  múltiples composiciones son posibles (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

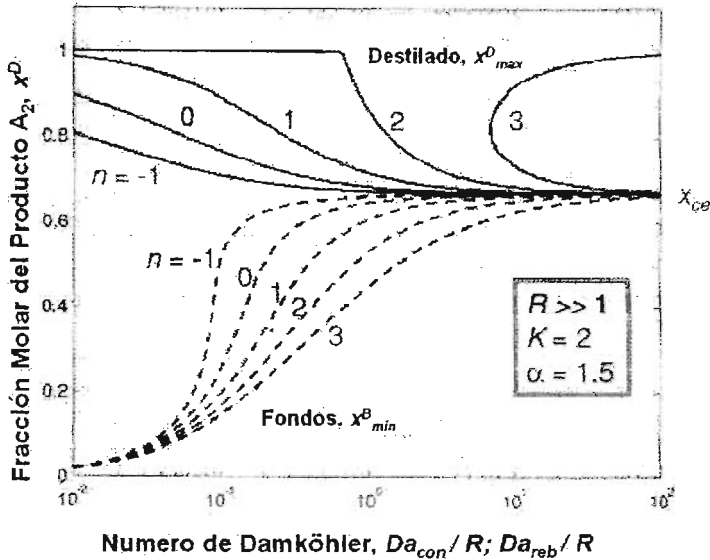


Figura 30. Composición del producto disponible (líneas sólidas = destilado, líneas punteadas = producto de los fondos) para la configuración en la figura 28.

La figura 31 muestra como la composición del destilado disponible  $x^D_{max}$ , precedida por la ecuación (2.63), se compara con la concentración del destilado  $x^D$  obtenida desde las simulaciones de la columna. A un número finito de etapas  $N$ , sobre un cierto intervalo de  $Da_c/R$  el equilibrio químico;  $x_{ce}$ , esta dominando y una fracción molar máxima en el destilado es obtenida. Cualquier cambio posterior en el número de Damköhler provoca un decrecimiento continuo en la concentración del destilado bajando el nivel del equilibrio químico. Dependiendo del número de etapas en la columna  $N$ , el valor máximo simulado de  $x^D$  puede ser significativamente más bajo que la composición máxima disponible  $x^D_{max}$ . Como un ejemplo; para una columna de 20 etapas con un rango de  $Da_{cond}/R = 0.1$ , las composiciones para la simulación son  $x^D = 0.82$  y  $x^D_{max} = 0.89$  con la ecuación (2.63).



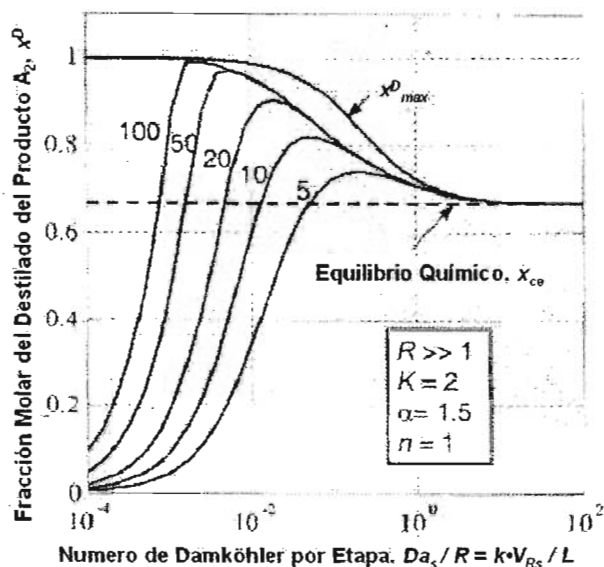


Figura 31. Fracción molar del producto  $A_2$ , en el destilado contra el número de Damköhler de las etapas a diferentes números de etapas,  $N$ , para la configuración del proceso en la figura 28.

El diagrama McCabe Thiele en la figura 32 revela que la línea correspondiente a la sección RD y la línea de VLE están en un punto tangencial de pinch a los parámetros dados (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Higler y col., 1999; Güttinger, 1998; Shah y col., 1994).

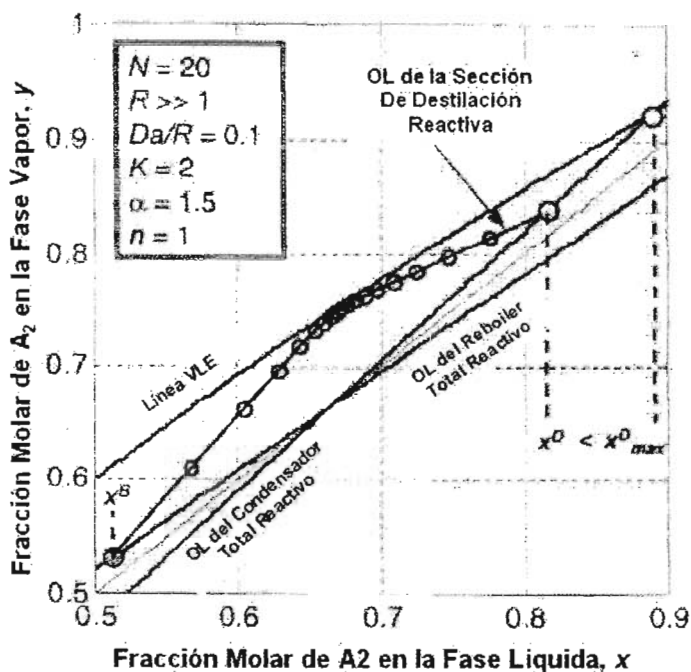


Figura 32. Composición del producto destilado real y disponible ilustrado en el diagrama de McCabe – Thiele para la configuración en la figura 28 (OL = línea de operación).

### 2.17.3 EFECTO DE LA CINÉTICA EN EL PRODUCTO DISPONIBLE.

Como se noto, la cinética tiene una influencia significativa en el comportamiento de los procesos RD en mezclas binarias y lo mismo ocurre para mezclas multicomponentes. En los siguientes apartados se hará un análisis de los procesos RD cinéticamente controlados, primero para mezclas ideales ternarias y posteriormente para mezclas ternarias no ideales. En todos los casos, las reacciones reversibles del tipo  $A + B \rightleftharpoons C$  son considerados (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000).

## 2.17.4 ANÁLISIS DE PUNTO SINGULAR.

Para columnas RD a contracorriente con una reacción química simple tomando lugar, la composición alcanzable en los fondos  $x^B$  puede ser interpretada como un punto singular de los balances de masa de los rehervidores reactivos representados en la figura 33a:

$$\frac{dx_i^B}{d\tau} = -(y_i^e(x^B) - x_i^B) + (v_i - x_i^B v_i) \cdot Da \cdot r^*(x^B), \quad i = 1, \dots, NC - 1 \quad (2.65)$$

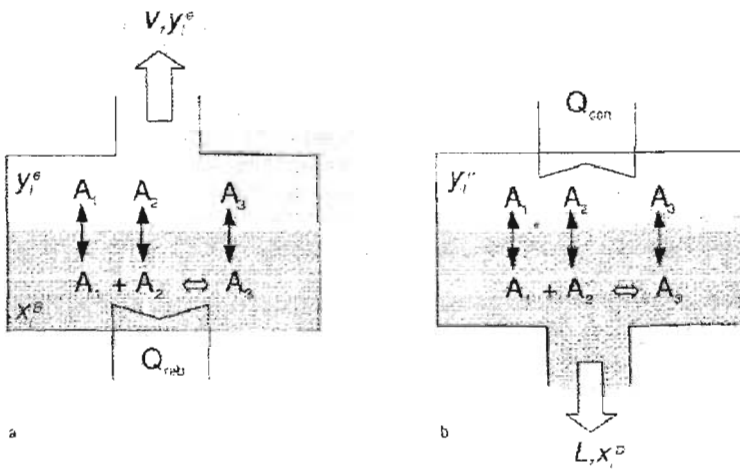


Figura 33. a) Rehervidor reactivo, b) Condensador reactivo.

Donde el número de Damköhler está definido como  $Da = kV_{cat} / V$  con  $V$  como el rango de flujo de vapor en los fondos de la columna. La correspondiente composición del destilado alcanzable  $x^D$  puede ser interpretado también como un punto de análisis de los balances de masa desarrollados para el condensador en la figura 33b:

$$\frac{dy_i^e}{d\tau} = -(y_i^e - x_i^D(y_i^e)) + (v_i - y_i^e v_i) \cdot Da \cdot r^*(x^D), \quad i = 1, \dots, NC - 1 \quad (2.66)$$

Con el número de Damköhler como  $Da = kV_{cat} / V$  donde  $V$  permanece como el intervalo de vapor en el domo de la columna. Las ecuaciones (2.65) y (2.66) son válidas para una columna infinitamente extendida y operada a un intervalo de reflujo infinito. Esto

corresponde a la ecuación (2.64) la cual fue derivada para el caso binario. Para  $Da = 0$ , los puntos singulares no reactivos (componentes puros y azeótropos no reactivos) serán recuperados. Para  $Da = \infty$ , los puntos singulares de análisis alcanzan las condiciones de equilibrio químico. Entonces se tienen las relaciones:

$$0 = (v_i - x_i^B v_r) \cdot r^*(x^B), \quad i = 1, \dots, NC - 1 \quad (2.67a)$$

$$0 = (v_i - y_i^C v_r) \cdot r^*(x^D), \quad i = 1, \dots, NC - 1 \quad (2.67b)$$

Hay tres posibles tipos de puntos singulares para las ecuaciones (2.67a) y (2.67b):

- Azeótropos reactivos.
- Componentes puros, ambos en el caso de  $r^* = 0$ , y
- El polo  $\pi$  de las líneas estequiométricas, determinadas de  $(v_i - x_i v_r) = 0$ .

Para una reacción simple dada, el polo  $\pi$  es simple y está siempre fuera del espacio de la composición válida debido a que habrá al menos un  $v_i$  con un signo opuesto a  $v_r$ . Para el caso especial con  $v_r = 0$ , la línea estequiométrica se vuelve paralela y el polo  $\pi$  se aproxima al infinito (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

De (2.65) y (2.66), las localizaciones de los puntos singulares en el espacio de la composición pueden ser determinados como sigue. En los fondos, las condiciones para el punto singular para un componente  $i$  de la ecuación (2.65) es:

$$0 = -(y_i^C(x^B) - x_i^B) + (v_i - x_i^B v_r) \cdot Da \cdot r^*(x^B) \quad (2.68)$$

para un componente de referencia arbitrario  $k$ , la condición para los puntos singulares es dada por:

$$0 = -(y_k^C(x^B) - x_k^B) + (v_k - x_k^B v_r) \cdot Da \cdot r^*(x^B) \quad (2.69)$$

usando la ecuación (2.69) para sustituir el término  $Da \cdot r^*$  en la ecuación (2.68) nos da:

$$x_i^B - y_i^C = (v_i - v_r x_i^B) \frac{x_k^B - y_k^C}{v_k - v_r x_k^B} \quad (2.70)$$

la ecuación (2.70) puede ser rearmada para obtener finalmente:

$$X_i^B - Y_i^B = 0 \quad (i = 1, \dots, NC - 2) \quad (2.71)$$

donde  $X_i^B$  y  $Y_i^B$  son las fracciones molares transformadas de la fase líquida y vapor:

$$X_i^B = \frac{v_k x_i^B - v_i x_k^B}{v_k - v_i} \text{ y } Y_i^B = \frac{v_k y_i^e - v_i y_k^e}{v_k - v_i} \quad (i = 1, \dots, NC - 1) \dots \dots (2.72)$$

Para todos los puntos singulares con y sin reacción química, la ecuación (2.71) da las condiciones necesarias. Ellas solamente dependen del equilibrio líquido – vapor y la estequiometría de la reacción, y son completadas por la ecuación (2.69), la cual refleja la influencia de la cinética de la reacción química. Para la composición del destilado, uno termina con su correspondiente condición de punto singular:

$$X_i^D - Y_i^D = 0 \quad (i = 1, \dots, NC - 1) \dots \dots (2.73)$$

la relación cinética completa para el componente de referencia  $k$  es dada por:

$$0 = -(y_k^e(x^D) - x_k^D) + (v_k - y_k^e v_i) \cdot Da \cdot r^*(x^D) \dots \dots (2.74)$$

### 2.17.5 DETERMINACIÓN Y ANÁLISIS DE LA CINÉTICA DE LA REACCIÓN.

Se ha visto y mostrado que la cinética de la reacción química juega un papel importante en el desempeño de los procesos RD. Sin embargo, para un diseño y una operación confiable de columnas a contracorriente, es importante determinar y analizar los intervalos de reacción a detalle. A continuación observaremos algunas líneas útiles para formular las expresiones de intervalos de reacción y cuales son las resistencias de transporte que tienen que ser consideradas cuando se están describiendo las cinéticas de la reacción cuando se esta a las condiciones de operación de las columnas RD (Sundmacher y col., 2003).

### 2.17.6 FENÓMENOS DE TRANSPORTE FISICOQUÍMICOS.

Es preferible que la reacción en columnas RD sean catalizadas con catalizadores heterogéneos porque estos son fácilmente sostenidos en la columna y ellos permiten la combinación de sistemas híbridos RD permitiendo la combinación de secciones no reactivas con secciones reactivas. La figura 34 ilustra una columna empacada aleatoriamente con resinas de intercambio iónico soportadas en anillos. Tal tipo de

configuración fue utilizada para la síntesis del éter combustible MTBE, el éter combustible TAME y el ester acetato de metilo.

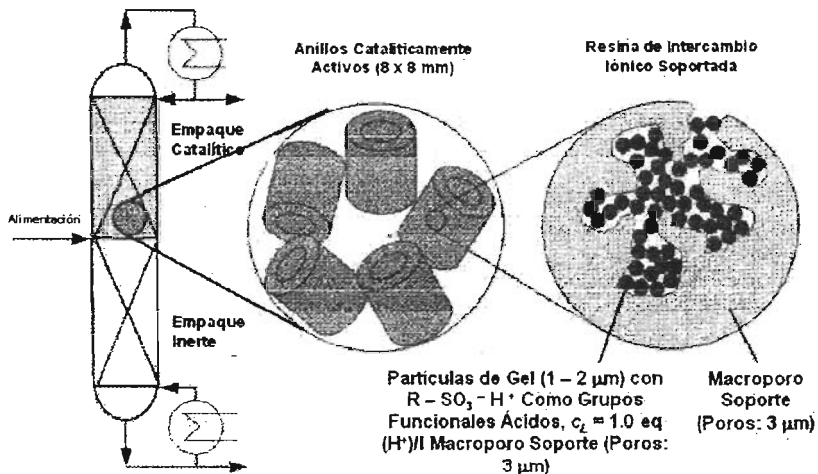


Figura 34. Instalación de catalizador de intercambio iónico dentro de anillos en una columna de destilación.

La figura 35 da una representación esquemática de los fenómenos de transporte de masa y energía que ocurren en los procesos de destilación reactiva con un catalizador heterogéneo. En este proceso, la reacción química toma lugar en la fase sólida del catalizador. A lo largo de la superficie del catalizador externa, la fase líquida gotea hacia abajo de la columna. El diagrama en la figura 35 asume que el catalizador está totalmente húmedo en su superficie externa. Internamente el cuerpo poroso del catalizador muy a menudo está completamente húmedo debido a las fuerzas capilares pero en algunos casos esta situación puede ser cambiada por procesos de ebullición interna.

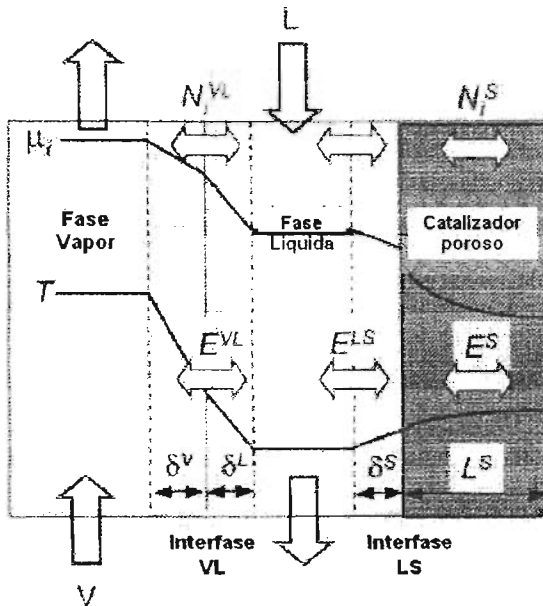


Figura 35. Esquema de los fenómenos de transporte en la sección de una columna empacada con catalizador heterogéneo.

Las direcciones de los flujos de masa y energía entre las fases no pueden ser predecidas por la influencia de la convección en la dirección axial de la columna, y debido al hecho de que los fenómenos de transporte multicomponente quizás resulten en un transporte hacia arriba. Hay tres tipos de resistencia al transporte presentes en el proceso considerado de tres fases (vapor / líquido / sólido):

- Transporte entre la fase vapor y la fase líquida,
- Transporte entre la fase líquida y la fase sólida,
- Transporte intra partículas dentro de la fase sólida.

Si son usadas como catalizador resinas de intercambio iónico macro reticulares soportadas, los procesos de transporte intra partículas pueden ser descompuestos en difusión en la fase gel y difusión en el macroporo (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000).

## 2.17.7 MODELADO DE LOS PROCESOS DE DESTILACIÓN REACTIVA HOMOGENÉOS Y HETEROGÉNEOS.

### 2.17.7.1 MODELO DE ETAPAS EN EQUILIBRIO.

Un diagrama esquemático de una etapa en equilibrio es mostrada en la figura 36a. El vapor de la etapa inferior y el líquido de la etapa superior es puesto en contacto con una etapa junto con una alimentación fresca o una corriente de reciclaje. Las corrientes de vapor y de líquido que salen de las etapas son asumidas como corrientes en equilibrio una con otra. Un proceso de separación completa es modelado con una secuencia de S numero de etapas en equilibrio (figura 36b).

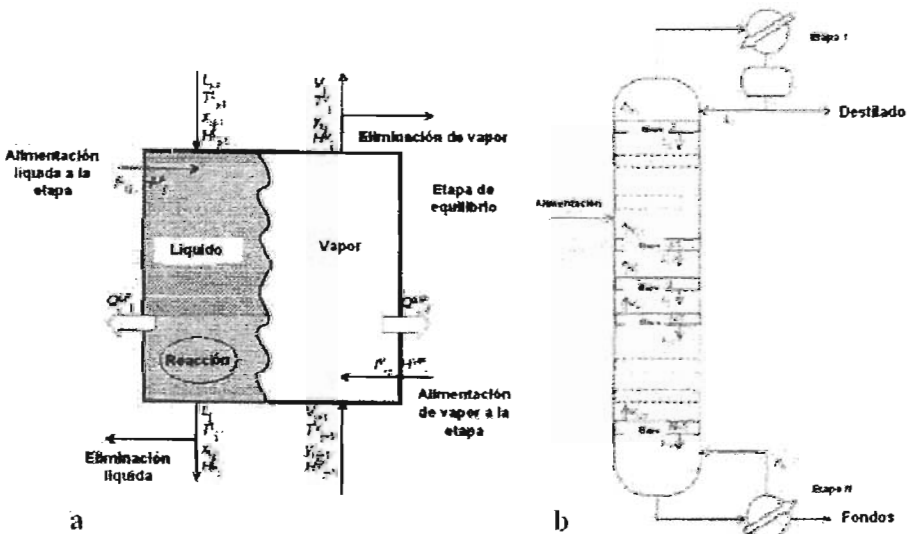


Figura 36. a) etapa de equilibrio; b) columna de destilación multietapas.

Las ecuaciones que modelan las etapas en equilibrio son conocidas como las ecuaciones MESH, MESH siendo un acrónimo referido a los diferentes tipos de ecuaciones. Las **M** ecuaciones son las ecuaciones de balances de masa; el balance de masa total toma la forma:



$$\frac{dU_j}{dt} = V_{j+1} + L_{j-1} + F_j - (1 + r_j^v) V_j - (1 + r_j^L) L_j + \sum_{m=1}^r \sum_{i=1}^c v_{i,m} R_{m,j} \varepsilon_j \dots\dots(2.75)$$

$U_j$  es la retención en la etapa  $j$ . Con muy pocas excepciones  $U_j$  es considerado a ser la retención solamente de la fase líquida. Esto es; sin embargo, importante también incluir la retención de la fase vapor a altas presiones. El balance de masa por componente (despreciando la retención del vapor) es:

$$\frac{dU_j x_{i,j}}{dt} = V_{j+1} y_{i,j+1} + L_{j-1} x_{i,j-1} + F_j z_{i,j} - (1 + r_j^v) V_j y_{i,j} - (1 + r_j^L) L_j x_{i,j} + \sum_{m=1}^r \sum_{i=1}^c v_{i,m} R_{m,j} \varepsilon_j \dots\dots(2.76)$$

En la ecuación de balance de masa dada arriba,  $r_j$  es el intervalo de flujo de corriente lateral con respecto al flujo inter – etapa:

$$r_j^v = S_j^v / V_j; \quad r_j^L = S_j^L / L_j \dots\dots(2.77)$$

$v_{i,m}$  representa el coeficiente estequiométrico del componente  $i$  en la reacción  $m$  y  $\varepsilon_j$  representa el volumen de reacción.

Las **E** ecuaciones son las relaciones de fase:

$$y_{i,j} = K_{i,j} x_{i,j} \dots\dots(2.78)$$

Las reacciones de equilibrio químico no son consideradas en muchos de los artículos de hoy en día ya que es muy difícil de modelar. Aunque hay algunas excepciones a esta situación.

Las **S** ecuaciones son las sumatorias de las ecuaciones:

$$\sum_{i=1}^c x_{i,j} = 1; \quad \sum_{i=1}^c y_{i,j} = 1 \dots\dots(2.79)$$

El balance de entalpía es dado por la ecuación:

$$\frac{dU_j H_j}{dt} = V_{j+1} H^v_{j+1} + L_{j-1} H^L_{j-1} + F_j H^F_j - (1 + r_j^v) V_j H^v_j - (1 + r_j^L) L_j H^L_j - Q_j \dots\dots(2.80)$$

Las  $H$  indicadas en la ecuación son las entalpías de las fases apropiadas. La entalpía derivada con respecto del tiempo en el lado izquierdo representa la entalpía total de las etapas pero, por las razones dadas anteriormente esta será normalmente para la fase líquida. Algunos autores incluyen un término adicional al balance de energía para el calor de reacción. Si embargo, si las entalpías son referidas a sus estados elementales, el calor de reacción es obtenido automáticamente y no hay necesidad de separarlo de la ecuación. Bajo condiciones de estado estático todas las derivadas de tiempo en las ecuaciones anteriores son iguales a cero.

Es bien sabido que los procesos de destilación reales no operan a las condiciones de equilibrio. Los caminos convencionales para salir de este tipo de problemas consisten en introducir un eficiente factor en las ecuaciones para modelar. Hay muchas definiciones diferentes para las eficiencias de las etapas, en la cual la mayoría de las veces la eficiencia Murphree es muy a menudo usada en las ecuaciones de etapas en equilibrio:

$$E_j^{MV} = \frac{\overline{\gamma_{iL}} - \gamma_{iE}}{\gamma_i - \gamma_{iE}}; \quad i = 1, 2, \dots, n \dots \dots (2.81)$$

Donde  $\overline{\gamma_{iL}}$  es la composición promedio del vapor saliente de la etapa,  $\gamma_{iE}$  es la composición del vapor que entra a la etapa, y  $\gamma_i$  es la composición del vapor en equilibrio con el líquido saliente de la etapa. Desde las fracciones molares adheridas a la unidad, solamente  $(n - 1)$  de las eficiencias Murphree de los componentes son independientes. Para la destilación de sistemas con tres o mas especies, las eficiencias de los componentes son casi siempre desiguales unas de otras y estas pueden rutinariamente asumir valores mas grandes que la unidad o menores que cero.

Para columnas empacadas es común utilizar el HETP (altura equivalente a un plato teórico). El comportamiento de los HETP's en mezclas multicomponentes está cercanamente relacionado a los comportamientos de las eficiencias de las etapas (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

**2.17.7.2 MODELO DE ETAPAS EN NO – EQUILIBRIO.**

En años recientes la evidencia ha estado demostrando que las operaciones de destilación (y relacionados) son mejor simulados con modelos en no – equilibrio (o sin equilibrio); NEQ, ya que toman en cuenta la transferencia de masa (y energía, y algunas veces el comportamiento del fluido) en una forma mas rigurosa que en la que es posible con los modelos de etapas en equilibrio (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000).

**2.17.7.2.1 EL MODELO CONVENCIONAL NEQ.**

Es útil primero iniciar con una breve revisión de los modelos de no – equilibrio de Krishnamurthy y Taylor para operaciones convencionales de destilación y adsorción. Una representación esquemática del modelo NEQ es representada en la figura 37. Esta etapa NEQ quizás represente a una etapa o a una sección transversal de una columna empacada. Los balances por componente de las fases vapor y la fase líquida son:

$$V_j y_{i,j} - V_{j+1} y_{i,j+1} - f_{j,j}^v + N_{i,j}^v \dots\dots\dots(2.82)$$

$$L_j x_{i,j} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{j,j}^L + N_{i,j}^L \dots\dots\dots(2.83)$$

$N_{i,j}$  son los intervalos de transferencia de masa interfaciales: el producto de los fluxes molares y el área interfacial neta. Los balances molares globales son obtenidos al sumar las ecuaciones (2.82) y (2.83) sobre el numero total (c) de componentes en la mezcla. En la interfase líquido – vapor se tiene la ecuación de continuidad:

$$N_i^v \Big|_1 = N_i^L \Big|_1 = 0 \dots\dots\dots(2.84)$$

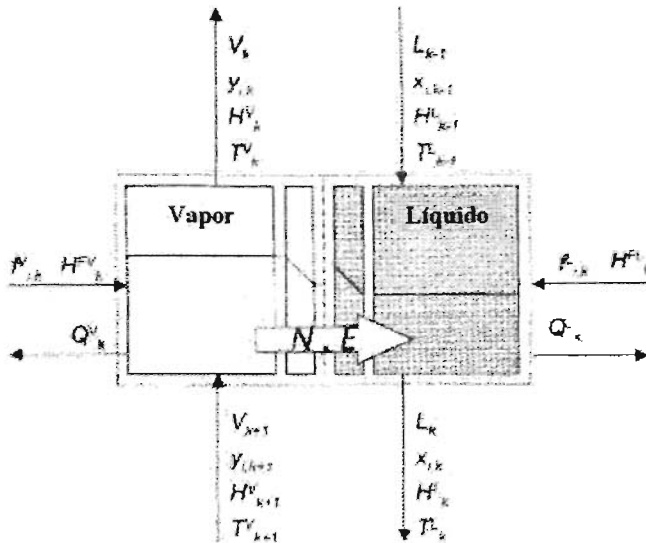


Figura 37. Etapa sin equilibrio para reacciones homogéneas en fase líquida.

Los balances de entalpía para las fases vapor y líquido serán:

$$V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - F_j^V H_j^{VF} + E_j^V + Q_j^V = 0 \dots\dots (2.85)$$

$$L_j H_j^L - L_{j-1} H_{j-1}^L - F_j^L H_j^{LF} + E_j^L + Q_j^L = 0 \dots\dots (2.86)$$

$E_j$  son las rangos de transferencia de energía en la interfase, el producto de los fluxes de energía y el área neta interfacial. También se tiene continuidad en los intervalos de transferencia de energía en la interfase, por ello:

$$E_j^V \Big|_1 = E_j^L \Big|_1 \dots\dots (2.87)$$

El camino fundamental para modelar la transferencia de masa en sistemas multicomponentes es usar la teoría de Maxwell – Stefan. Las ecuaciones de Maxwell – Stefan para transferencia de masa en las fases vapor y líquida respectivamente son dadas por:

$$\frac{y_i}{RT^V} \frac{\partial \mu_i^V}{\partial z} = \sum_{k=1}^c \frac{y_i N_k^V - y_k N_i^V}{c_i^V D_{i,k}^V} \dots\dots (2.88)$$

y

$$\frac{x_i}{RT^L} \frac{\partial \mu_i^L}{\partial z} = \sum_{k=1}^c \frac{x_i N_k^L - x_k N_i^L}{c_i^L D_{i,k}^L} \dots\dots\dots(2.89)$$

Donde  $x_i$  y  $y_i$  son las fracciones molares de las especies  $i$  en las fases líquida y vapor respectivamente. El término  $N_i$  representa los fluxes molares de las especies  $i$ ,  $D_{i,k}$  representa la difusión correspondiente Maxwell – Stefan del par  $i - k$  en la fase apropiada. Solamente  $c - 1$  de las ecuaciones (2.88) y (2.89) son independientes; la fracción molar del último componente es obtenida por la suma de las ecuaciones para ambas fases (Baur, 2000; Güttinger, 1998).

El flux de energía está relacionado a las contribuciones convectivas y conductivas como sigue:

$$E_j^L = -\lambda_j^L \frac{\partial T^L}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^c N_{i,j}^L H_{i,j}^L \dots\dots\dots(2.90)$$

Las ecuaciones (2.90) a la (2.92) forman un sistema no – lineal, acoplado con ecuaciones diferenciales que debe ser resuelto numéricamente en muchos casos. En la práctica, al menos para las separaciones no – reactivas,  $N_{i,j}$  es obtenido de las ecuaciones de Maxwell – Stefan (2.98) modificadas como sigue:

$$\frac{x_{i,j}}{RT_j} \frac{\partial \mu_{i,j}^L}{\partial \eta} = \sum_{k=1}^c \frac{x_{i,j} N_{k,j}^L - x_{k,j} N_{i,j}^L}{c_{i,j}^L (k_{i,k}^L a)_j} \dots\dots\dots(2.91)$$

Con una relación similar para la fase vapor. El elemento  $k_{i,k}^L$  representa el coeficiente de transferencia de masa del par  $i - k$  en la fase líquida; este coeficiente es estimado de la información de la correspondiente difusividad de Maxwell – Stefan  $D_{i,k}^L$  usando los procedimientos estándar,  $a$  es el área interfacial.

La ecuación (2.91) está basada en un modelo de capa de transporte de interfase. Para este modelo las ecuaciones (2.88) y (2.89) quizás sean resueltas analíticamente, sujetas a las mismas consideraciones de simplificación.

El intervalo de transferencia de energía es dado por:

$$E_j^L = -h_j^L a \frac{\partial T^L}{\partial \eta} + \sum_{i=1}^c N_{i,j}^L H_{i,j}^L \dots\dots(2.92)$$

Con una relación similar para la fase vapor,  $h_j^L$  es el coeficiente de transferencia de calor en la fase líquida.

En la interfase líquido – vapor se asume equilibrio de fases:

$$y_{i,j}|_I = K_{i,j} x_{i,j}|_I \dots\dots(2.93)$$

Donde la subscrita  $I$  denota la composición del equilibrio y  $K_{i,j}$  es el rango de equilibrio líquido – vapor para el componente  $i$  en la etapa  $j$ . Los valores de las  $K$  son evaluados a la temperatura, presión, y composición de la interface a partir de los modelos termodinámicos apropiados (los mismos modelos usados en los modelos de etapas en equilibrio convencionales) (Sundmacher y col., 2003).

Además, en el modelo NEQ nosotros tomamos en cuenta el servicio de presión que cruza en la etapa:

$$p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0 \dots\dots(2.94)$$

Donde  $p_j$  y  $p_{j-1}$  son las presiones de las etapas y  $\Delta p_{j-1}$  es la presión de servicio por etapa desde la etapa  $(j - 1)$  a la etapa  $j$ . La presión de servicio sobre la etapa es considerada como función de los flujos por etapa, las propiedades físicas, y el diseño del equipo. En el modelo NEQ, la información para el diseño del equipo debe ser especificada para que los coeficientes de transferencia de masa, las áreas interfaciales, los soportes de líquidos y demás puedan ser calculados.

El modelo NEQ requiere las propiedades termodinámicas, no solamente para calcular los equilibrios de fase sino también para calcular las fuerzas de interacción en la transferencia de masa. En adición, son necesarias las propiedades físicas como la tensión superficial, los coeficientes de difusión y las viscosidades para calcular los coeficientes de transferencia de masa (y calor) y el área interfacial (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

### **2.17.7.2.2 MODELADO NEQ DE LA DESTILACIÓN REACTIVA.**

Construir un modelo NEQ para los procesos de separación reactivos no es tan sencillo como lo es para los modelos de etapas en equilibrio, en los cuales simplemente (o no tan simplemente) se adhiere un término para estimar la reacción en los balances de masa para la fase líquida. Se debe saber que un simple modelo no satisface todos los tipos de separaciones; son necesarios modelos independientes dependiendo del camino en el cual la reacción es colocada dentro del proceso.

Se pueden identificar 2 tipos muy diferentes de procesos de separación reactiva: un sistema homogéneo en el cual la reacción (con catalizador o no) toma lugar solamente en la fase líquida, o un sistema heterogéneo en el cual una fase sólida está presente para catalizar la reacción (Sundmacher y col., 2003; Baur, 2000; Güttinger, 1998).

#### **2.17.7.2.2.1 SISTEMAS HOMOGÉNEOS.**

Si la reacción ocurre en la fase líquida (sin cualquier catalizador sólido presente), como en el caso de algunas separaciones reactivas, entonces nosotros debemos considerar los siguientes pasos en los procesos de transporte como se muestra en la figura 38:

- Transferencia de masa a través de la capa vapor,
- Transferencia de masa con reacción en la capa líquida y
- Reacción en el volumen líquido.

Hay 2 casos limitantes de importancia práctica:

- Reacción de fase líquida homogénea baja y
- Reacción de fase líquida homogénea rápida.

Si el rango de reacción es muy bajo entonces la reacción toma lugar esencialmente solo en el volumen líquido y el modelo de no – equilibrio de Krishnamurthy y Taylor será

suficiente con la modificación del volumen de fase en el balance de masa para estimar las reacciones químicas.

$$L_j x_{i,j} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{i,j}^L - N_{i,j}^L - \sum_{m=1}^r v_{i,m} R_{m,j} \varepsilon_j = 0 \dots\dots (2.95)$$

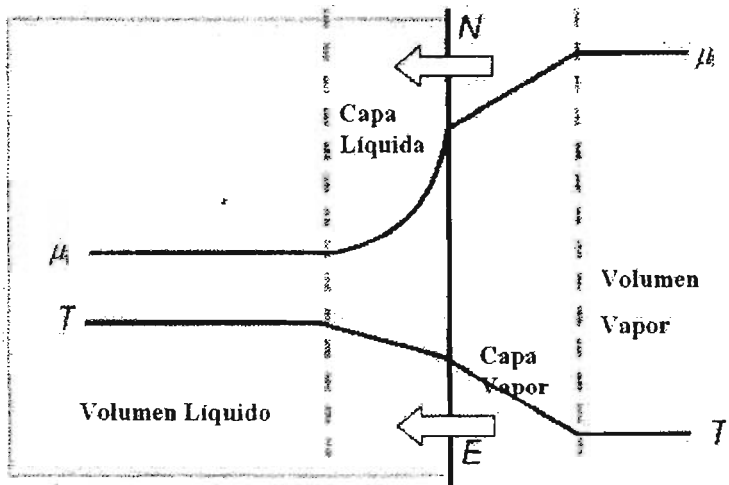


Figura 38. Procesos de transporte en destilación reactiva en fase líquida homogénea.

Pero si es lo suficientemente rápida, la reacción tomara lugar en la capa adyacente a la interfase de la fase, y reacciones muy rápidas quizás ocurrirán solo en la capa. En cualquier caso las ecuaciones de continuidad para la capa son requeridas para tomar en cuenta el efecto de la reacción en los intervalos de transferencia de masa en la interfase:

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} = \sum_{m=1}^r v_{i,m} R_m \dots\dots (2.96)$$

**2.17.7.2.2 SISTEMAS HETEROGÉNEOS.**

Si un catalizador sólido influye en la reacción entonces se debe considerar la naturaleza del catalizador también. Dos tipos de catalizadores sólidos necesitan ser considerados:



- No porosos o
- Porosos.

En algunos procesos el catalizador esta presente como una capa o revestimiento en una forma empaque estructurado mas o menos estándar. En este caso nosotros debemos considerar los siguientes pasos en los procesos de transporte mostrados en la figura 39:

- Transporte de los reactivos desde el volumen del vapor al volumen del líquido,
- Transporte de los reactivos desde el volumen líquido hasta la superficie del catalizador,
- Reacción en la superficie,
- Transporte de los productos de la reacción desde la superficie del catalizador hasta el volumen líquido, y
- Transporte de los productos de la reacción desde el volumen líquido hasta el volumen de vapor.

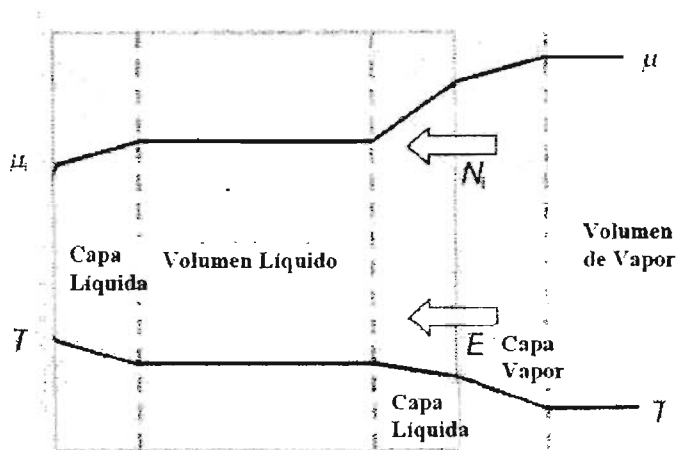


Figura 39. Procesos de transporte en destilación reactiva con un catalizador empacado sólido no poroso.

Los primeros dos y los dos últimos de estos pasos deben ser modelados usando las ecuaciones de Maxwell – Stefan como se mencionó anteriormente. Las reacciones de superficie proveen la condición de comportamiento de superficie sobre los procesos de transferencia de masa sólido – líquido (Baur, 2000; Güttinger, 1998).

Pero en muchos otros casos, se tiene un catalizador poroso que es soportado en alguna estructura dentro de los muros de una columna. En estos procesos la lista de procesos de transporte y los procesos de reacción se vuelven mas grandes que los anteriores. Como se muestra en la figura 40, se debe considerar:

- Transporte de los reactivos desde el volumen del vapor al volumen del líquido,
- Transporte de los reactivos desde el volumen líquido hasta la superficie del catalizador,
- Difusión con reacción simultanea dentro del catalizador poroso,
- Transporte de los productos de la reacción desde la superficie del catalizador hasta el volumen líquido, y
- Transporte de los productos de la reacción desde el volumen líquido hasta el volumen de vapor.

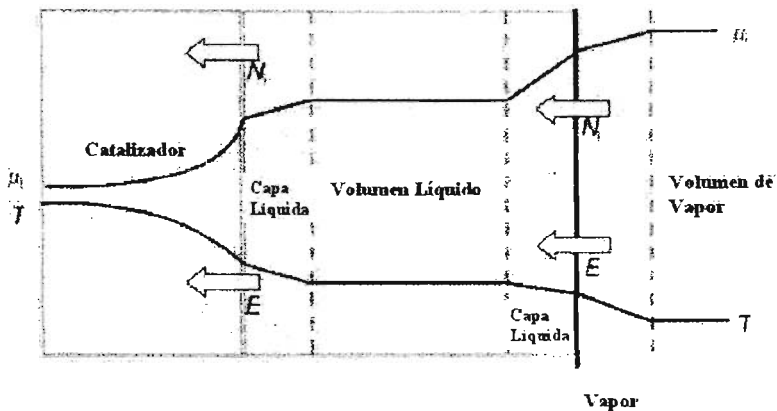


Figura 40. Procesos de transporte en destilación reactiva con un catalizador sólido poroso empacado.

## 2.17.8 NOTACIÓN.

- $a$	Área interfacial, $m^2$ .
- $A_1, A_2$	Educto, producto.
- $B$	Flujo de fondos, mol/seg.
- $B_0$	Permeabilidad, $m^2$ .
- $c$	Numero de componentes.
- $c_t$	Concentración total, $mol/m^3$ .
- $D$	Flujo de destilado, mol/seg.
- $Da$	Numero de Damköhler, adimensional.
- $D_{i,eff}$	Difusividad efectiva de Fick, $m^2/seg$ .
- $D_i^e$	Difusividad efectiva de Knudsen en catalizador poroso, $m^2/seg$ .
- $D_{i,k}$	Difusividad de Maxwell – Stefan,
- $E$	Flux de energía, $W/m^2$ .
- $E$	Rango de transferencia de energía, $J/seg$ .
- $E_i^{MV}$	Eficiencia por etapa global de Murphree, adimensional.
- $F$	Rango de alimentación, mol/seg.
- $F^V$	Alimentación de vapor, mol/seg.
- $F^L$	Alimentación de liquido, mol/seg.
- $f$	Alimentación del componente, mol/seg.
- $H$	Entalpía molar, $J/mol$ .
- $h$	Coefficiente de transferencia de calor, $W/m^2 K$ .
- $K$	Constante de equilibrio liquido – vapor, adimensional.
- $k$	Constante de rango de reacción, $mol/m^3 seg$ .
- $L$	Rango de flujo liquido, mol/seg.
- $N$	Numero total de etapas.
- $N_i$	Flux molar de las especies $i$ , $mol/m^2 seg$ .
- $N_{min}$	Numero mínimo de etapas.
- $N$	Rango de transferencia de masa, mol/seg.
- $n$	Orden de reacción.
- $p_j$	Presión por etapa, Pa.

- $p_i^S$	Presión de vapor del componente $i$ , Pa.
- $Q$	Servicio de calor, J/seg.
- $R$	Rango de reflujo.
- $R_{min}$	Reflujo mínimo.
- $R_{mj}$	Rango de reacción, mol/m <sup>3</sup> seg.
- $R$	Constante de gas, J/mol K.
- $r$	Numero de reacciones, adimensional.
- $r_j$	Rango de flujo lateral con respecto al flujo inter – etapa sobre la etapa $j$ , adimensional.
- $r_j^*$	Rango de reflujo transformado, adimensional.
- $s_j^*$	Rango de agotamiento transformado, adimensional.
- $S$	Toma lateral, mol/seg.
- $t$	Tiempo, seg.
- $T$	Temperatura, K.
- $U$	Soporte molar, mol.
- $V$	Flujo de vapor, mol/seg.
- $x$	Fracción molar en la fase líquida, adimensional.
- $y$	Fracción molar en la fase vapor, adimensional.
- $z$	Fracción molar en cualquiera de las fases vapor o líquido, adimensional.

### ***Griegas.***

- $\alpha$	Volatilidad relativa.
- $\varepsilon$	Volumen de reacción, m <sup>3</sup> .
- $\gamma_i$	Coefficiente de actividad de la especie $i$ , adimensional.
- $k$	Coefficiente de transferencia de masa, masa/seg.
- $\mu$	Potencial químico, J/mol.
- $\nu$	Coefficiente estequiométrico, adimensional.
- $\eta$	Viscosidad de la mezcla fluida, Pa · seg.
- $\eta$	Distancia a lo largo de la cama de difusión, adimensional.
- $\varphi$	Rango de reciclaje.

***Subscritas.***

- cl      Líquido claro.
- crit      Crítica.
- eff      Efectivo.
- *i*      Componente índice.
- I      Referido a la interfase.
- *j*      Etapa índice.
- k      Componente índice alternativo.
- m      Índice de reacción.
- t      Total.

***Súper escritas.***

- F      Refiriéndose a la corriente de alimentación.
- L      Refiriéndose a la fase líquida.
- V      Refiriéndose a la fase vapor.

## CAPITULO III. SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS.

### 3. INTRODUCCIÓN.

La simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma “rápida” un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de estos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso antes de su construcción. La simulación de procesos no es un tema nuevo en la Ingeniería Química, sino que cuenta con al menos dos décadas de antigüedad. Estos hicieron su aparición en el año de 1981 cuando los software de simulación de procesos químicos son desarrollados para usarse en las computadoras personales. Rápidamente aparecen programas como DESIGN II, ASPEN, SIMSCI, HYSIM y CHEMCAD.

La variedad de aplicaciones de los simuladores de procesos es muy grande, anteriormente solo los usaban los ingenieros que diseñaban procesos, ahora los simuladores son manejados por ingenieros ambientales e ingenieros de procesos (Hypotech, 2002; Aspentech, 2001; Umez, E. E. 2001; Seider y col., 1999).

Los simuladores dinámicos y a estado estable han llegado a ser una herramienta de apoyo para el diseño de procesos químicos, esta herramienta es adecuada para el diseño, caracterización, optimización y monitoreo del funcionamiento de procesos industriales.

Aun cuando en sus inicios la simulación de procesos estuvo enfocada principalmente a la industria petroquímica y de refinación del petróleo, su aplicación se ha ido extendiendo a otras industrias tales como la de combustibles sintéticos, pulpa y papel, cemento, metales, minerales, alimentos, etc., en donde se involucra la fase sólida.

Para llevar a cabo una simulación es necesario tener una plena comprensión del problema, identificando el o los objetivos: entradas, salidas, datos, restricciones, criterios,

etc. Hay que jerarquizarse las cuestiones a investigar y, si el problema va a ser resuelto en equipo, se deberán generar discusiones y el equipo deberá organizarse para llevar a cabo el trabajo de investigación acerca de lo que se desconoce y sea necesario para la solución del problema o para reunir información faltante (Hypotrech, 2002; Aspentech, 2001; Umez, E. E. 2001; Seider y col., 1999).

La simulación de procesos químicos es una herramienta moderna que se ha hecho indispensable para la solución adecuada de los problemas de proceso. Permite efectuar el análisis de plantas químicas en operación y llevar a cabo las siguientes tareas, las cuales son comunes en las diversas ramas de la industria química.

- Detección de cuellos de botella en la producción.
- Predicción de los efectos de cambios en las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- Optimización de las variables de operación.
- Optimización del proceso cuando cambian las características de los insumos y / o las condiciones económicas del mercado.
- Análisis de nuevos procesos para nuevos productos.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de condiciones críticas de operación.
- Transformación de un proceso para nuevos productos.
- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Optimización del proceso para minimizar la producción de desechos y contaminantes.
- Entrenamiento de operadores e ingenieros de procesos.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso.

A continuación hablaremos un poco de los simuladores existentes en el mercado para la simulación de procesos químicos así como de su similitud entre ellos y su posible uso en la simulación de columnas de destilación reactiva.

### 3.1 SIMULADORES DE PROCESOS COMERCIALES.

Existe gran variedad de simuladores comerciales, algunos de las cuales son poderosas herramientas de cálculo en procesos industriales, con enormes bases de datos y un fuerte respaldo de bibliotecas para cálculos de equipos y bibliotecas de modelos para cálculos termodinámicos, que le dan al simulador la ventaja de una gran versatilidad. Algunos de estos simuladores de procesos de propósitos generales son: Aspen Plus y Speedup (de Aspen Technology, USA), Pro II (de Simulations Sciences, USA), Hysys (de Hydrotech, Canada), Chemcad (de Chemstations, USA), etc. Aspen Plus, Pro II y Chemcad son simuladores de procesos en estado estable, Speedup es un simulador de procesos dinámicos y Hysys es útil para los dos tipos de simulación (Hypotech, 2002; AspenTech, 2001; Umez, E. E. 2001; Seider y col., 1999).

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos, es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes del proceso, estas propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al grado de que si tenemos buenos datos o buenas correlaciones para las propiedades, entonces los resultados de la simulación serán altamente confiables (Seider y col., 1999).

Los simuladores modernos deben de permitir la selección de los modelos de propiedades termodinámicas adecuados para la naturaleza de los componentes químicos, estado de agregación y condiciones de operación. Las corrientes del proceso pueden ser:

- Gases a baja y alta presión.
- Soluciones líquidas con componentes no polares, polares y electrolitos a baja y alta presión.
- Sólidos en suspensión o finamente divididos.

Estas características son las que permiten que un simulador de procesos pueda representar una gran variedad de procesos industriales.



### 3.2 INTRODUCCIÓN DE LA INFORMACIÓN DEL PROBLEMA PARA PROCEDER A SU EJECUCIÓN.

Para introducir la información del diagrama de flujo del proceso a un simulador, usualmente se siguen los pasos básicos que a continuación se enlistan, el orden de los pasos y la manera en que esos pasos son cubiertos puede variar según el simulador que se está utilizando (Hypotrech, 2002; Aspentech, 2001; Umez, E. E. 2001).

- a) Establecer el sistema de unidades en que se desea trabajar.
- b) Definir los equipos y las corrientes del proceso. Esto puede hacerse de diversas formas de acuerdo al simulador, pero en cualquier caso se puede esperar un procedimiento sencillo.
- c) Especificar la totalidad de los compuestos que van a intervenir en el proceso. Lo normal será que el usuario simplemente especifique el compuesto con su nombre o su fórmula, o lo seleccione de un menú; en ocasiones el usuario tendrá que definirlo, cuando el compuesto no forme parte del banco de datos del simulador.
- d) Seleccionar modelos termodinámicos apropiados al problema a resolver para el cálculo de las propiedades.
- e) Especificar un régimen. Como se sabe, es necesario fijar en cada corriente los flujos (flujo de cada componente o flujo total y composición de todos los componentes menos uno) y dos propiedades de la corriente que frecuentemente son presión ó temperatura.
- f) Especificar las condiciones de operación de los equipos en el diagrama de flujo. Este paso también varía significativamente entre un simulador y otro de acuerdo a la estructura operacional del mismo, pero el usuario contará con ayudas en el mismo software y en los manuales del simulador. Como es lógico pensar, el trabajo se facilitará considerablemente sobre operaciones unitarias y reactores en ingeniería química.

### **3.3 ALGORITMOS DE SOLUCIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS.**

Los modelos de un proceso químico son todas las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, las leyes de la termodinámica y las restricciones de control y de diseño. Estos modelos matemáticos constituyen para cada equipo en el proceso, un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales que describe ese equipo.

Los modelos matemáticos de los equipos de un proceso, en conjunto dan forma al modelo matemático del proceso completo. Este debe ser resuelto por medio de algún algoritmo de solución para producir los resultados.

En el caso de simulación de procesos en estado estacionario, el modelo matemático del proceso está constituido, en general, por un enorme sistema de ecuaciones algebraicas no lineales para cuya solución existen tres algoritmos: el método modular secuencial, el método orientado a ecuaciones y el método modular simultáneo.

#### **3.3.1 MÉTODO MODULAR SECUENCIAL.**

La estructura modular secuencial implica la interpretación del diagrama de flujo del proceso como un grupo de unidades de proceso (equipos), para cada una de las cuales existen subrutinas de cálculo o módulos. Dentro de este concepto, en un simulador se cuenta con una biblioteca de módulos que puede ser usada para simular una gran diversidad de diagramas de flujo de proceso en una estructura flexible.

En este método, un módulo o subrutina de cálculo para una unidad de proceso dada, calcula las variables de las corrientes de salida de esa unidad de proceso con base en el modelo matemático correspondiente a ese equipo, conocidas las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de equipo de esa unidad de proceso.

Las corrientes de reciclado en un diagrama de flujo son resueltas, en este método, mediante un procedimiento iterativo. Se suponen valores iniciales de las variables de una o varias corrientes involucradas en el reciclado y se busca la convergencia de los valores de esas variables en el proceso iterativo.

### **3.3.2 MÉTODO ORIENTADO A ECUACIONES.**

Consiste básicamente en la solución simultánea de las ecuaciones que describen el diagrama de flujo, es decir, resolver el enorme sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que constituye el modelo matemático del proceso completo, por algún procedimiento de soluciones de sistemas de ecuaciones.

### **3.3.3 MÉTODO MODULAR SIMULTÁNEO.**

Este método intenta aprovechar algunas ventajas de los dos métodos descritos anteriormente. Se usa la estructura modular tradicional, pero a su vez se resuelve un sistema de ecuaciones simultáneas incluyendo a todas las variables de las corrientes. Este sistema simplificado está formado por modelos ingenieriles aproximados o representaciones lineales de los modelos rigurosos (ecuaciones no lineales).

### **3.3.4 COMPARACIÓN DE LOS SIMULADORES DE PROCESO QUÍMICO.**

A continuación se muestra una tabla comparativa donde podemos observar algunas de las ventajas y desventajas de los simuladores de proceso químico disponibles hoy en día.

Si se observan los componentes generales se puede notar que los 3 componentes principales, la mayoría de los simuladores de proceso químico los contemplan además estos nos permiten establecer los parámetros principales al momento de llevar a cabo una simulación. Ahora bien se tratara de identificar si alguno o algunos de ellos pueden llevar a cabo simulaciones de columnas de destilación reactiva mas adelante.

Tabla I.3. Comparación de los simuladores de proceso.

Categoría.		DESIGN II.	Hysys.	Pro II.	ProSim.	Aspen Plus.	Chemcad.
Precios de lista estimado.	Arrendamiento.	\$ 4,000 / año.	\$ 12,000 / año.	\$ 12,000 / año.	\$ 12,000 / año.	\$ 18,000 / año.	\$ 12,000 / año.
	Término de Arrendamiento (típico).	3 años.	5 años.	1 año.	1 año.	5 años.	5 años.
General.	Envío de datos a un archivo Excel.	✓	N / A	N / A	N / A	N / A	N / A
	Librería de componentes.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Opciones termodinámicas.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Convergencia de corrientes de reciclado.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Procesado de gases.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Simulación Batch.		+	+		+	+
	Simulación dinámica.		+	+		+	+
	Manejo de sólidos.			✓		✓	✓
	Electrolitos fuertes.		+	✓		+	✓
Redes de tuberías.		+	+		+	+	
Mezclas de aminas.	✓		+	✓	+	+	
Unidad de módulos.	Columnas rigurosas.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Tuberías.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Intercambiadores de calor.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Flash.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Reactores.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Bombas y compresores.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Tanques de almacenamiento.			+		+	+
Destilación Reactiva.		✓	✓	✓	✓	✓	
Interface.	Entorno basado en Windows.	✓	✓	✓		✓	✓
	Otro.				✓		
Entrenamiento.	En el lugar.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Fuera del lugar.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Conferencia basada en la WEB.	✓	✓			✓	
	Seminario.	✓	✓		✓	✓	✓
Soporte y actualizaciones.	Soporte de usuario.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Soporte de proceso experto.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Soporte por teléfono.	✓	✓	✓	✓	✓	✓
	Soporte por e - mail.	✓	✓	✓	✓	✓	✓

**LEYENDA.**

✓ Elemento estándar.

+ Elemento disponible por una licencia adicional y / o pago por derecho al uso.

Nota. El costo del simulador es en USD.

### 3.4 ASPEN PLUS.

El simulador conocido como Aspen Plus suministrado por Aspen Tech (USA) presenta una amplia gama de soluciones para un sinnúmero de operaciones unitarias. Este cuenta con un apartado única y exclusivamente para el modelado de columnas de destilación, extracción, lavado, absorción, desorción y etc. En este apartado se encuentra el modelo RadFrac.

RadFrac puede manejar reacciones químicas dentro de columnas de destilación. Estas reacciones pueden ocurrir en la fase líquida, y / o en la fase vapor. Los detalles acerca de las reacciones se insertan en una forma genérica de la reacción fuera de RadFrac. RadFrac permite usar dos modelos diferentes de reacciones: REAC – DIST o USER. RadFrac puede modelar los siguientes tipos de reacciones:

- Equilibrio controlado.
- Intervalo controlado.
- Conversión.
- Electrolítica.

RadFrac puede también modelar precipitación de sales, especialmente en el caso de sistemas electrolíticos. Se pueden solicitar cálculos de reacción para la columna entera o se pueden restringir las reacciones a ciertos segmentos de la misma (por ejemplo, para modelar la presencia de un catalizador). Para cálculos de tres fases, se pueden restringir las reacciones a una de las 2 fases líquidas, o usar las cinéticas de las reacciones por separado para las 2 fases líquidas.

Para incluir una reacción química en RadFrac se debe alimentar la siguiente información en la hoja de especificaciones de las reacciones:

- Tipo de reacción e ID de la química de la reacción.
- Sección de la columna en la cual la reacción ocurre.

Dependiendo del tipo de reacción, se puede alimentar la constante de equilibrio, la cinética, o los parámetros de conversión en la forma genérica de reacciones fuera de RadFrac. Para reacciones electrolíticas, se pueden también alimentar los datos de la reacción en la forma de química de las reacciones fuera de RadFrac. Para considerar precipitación de sales, se alimentan los parámetros de precipitación de sales en la hoja de reacción de sales o en la forma de química de las reacciones fuera de RadFrac. Para asociar reacciones y precipitación de sales con un segmento de la columna, se alimentan las correspondientes ID de las reacciones (o ID química) en la hoja de especificaciones de reacción.

Para reacciones de intervalo controlado, se deben alimentar los datos de retraso o el tiempo de residencia en la fase donde las reacciones ocurren. Se puede usar la hoja de retraso de reacciones o la hoja de tiempo de residencia. Para reacciones de conversión se usa la hoja de reacciones de conversión para invalidar los parámetros especificados en la forma de reacciones de conversión (Aspentech, 2001).

### **3.5 CHEMCAD.**

Chemcad es un simulador proveído por Chemstations, Inc., (USA) el cual es un paquete de simulación de procesos a estado estático y es un programa completo con una interface grafica que crea un modelo matemático del proceso como es construido en el diagrama de flujo.

Chemcad puede simular un sin fin de columnas; como son, columnas a estado estático, columnas dinámicas, columnas de destilación batch, columnas de equilibrio vapor – liquido, columnas de transferencia de masa y destilación azeotrópica.

Algunos de los componentes que presenta este simulador; para columnas en general, son:

#### Columna SCDS.

- Cálculos rigurosos de equilibrio vapor – líquido.
- Puede ser usada para estado estático o para modelos dinámicos.
- **Permite la destilación reactiva.**
- Bien acoplado con modelos VLE de coeficientes de actividad.

#### Columna TOWR.

- Cálculos rigurosos de equilibrio vapor – líquido.
- Usa algoritmos de entrada – salida.
- Puede ser usada para estado estático o para modelos dinámicos.
- Bien acoplado con modelos VLE con ecuaciones de estado.

#### Columna TPLS.

- Cálculos rigurosos de equilibrio vapor – líquido.
- Permite la especificación de bombas de retorno, deslingoteras laterales e intercambiadores de calor laterales.
- Útil para el modelado de columnas de fraccionamiento.
- Usa el algoritmo TOWR como base del modelo.

#### Columna corte – bajo (SHOR).

- Métodos de Fenske – Underwood – Gilliland para la simulación de columnas de destilación simple con una entrada y 2 salidas.

#### Opciones de columna dinámica.

- Permite usar cualquiera de las columnas rigurosas (SCDS, TOWR, TPLS) para el modelado básico.
- Permite calcular o especificar el retraso en las etapas y los efectos de presión.
- Permite iniciar la operación de la columna desde un reflujo seco a un reflujo total.
- Permite integrar un reactor batch, controles PID, y otras operaciones unitarias para un diagrama de flujo dinámico.

Opciones de columna de transferencia de masa.

- Permite calcular el efecto de la resistencia a la transferencia de masa en las separaciones.
- Permite especificar el empaque de la columna o la geometría de la etapa.
- Puede ser usado con columnas dinámicas.

La destilación reactiva puede ser simulada; como se puede observar, usando el componente SCDS como una plataforma o plantilla para la adición de las especificaciones de la reacción química. Las reacciones quizás sean definidas como cinéticas y / o de equilibrio y quizás se lleven a cabo en la fase vapor y o líquido, simultáneamente. Las expresiones para el equilibrio y los rangos de reacción son los mismos como los que se describen en este simulador para los reactores de equilibrio y los reactores cinéticos.

### **3.6 DESIGN II, WINSIM.**

Este programa fue desarrollado por WinSim Inc. (Houston, Texas, USA). Este es un programa muy fácil de utilizar, solamente con un clic y uno se convencerá de que DESIGN II para windows es el mejor camino para hacer una simulación. Este programa cuenta con una interface grafica, lo cual significa que no hay comandos especiales o funciones clave para recordar al momento de realizar una simulación. Solo se dibuja el diagrama de flujo localizando un punto y dando clic simplemente. Dando doble clic en los equipos del diagrama de flujo y las corrientes para especificar los cuadros de dialogo que aparecen.

Una vez que el diagrama de flujo esta listo, DESIGN II para windows validara las entradas antes del proceso de simulación de los resultados. Finalmente enviara los resultados de las corrientes y de los equipos a un archivo de Microsoft Excel, o mostrará



los resultados completos en un archivo de texto. La simulación es rápida, fácil y libre de errores.

Algunas de las aplicaciones de este simulador de proceso son:

- Estimado de propiedades físicas.
- Modelado de tuberías a 2 fases.
- Unidades de glicol.
- Unidades de aminas (simples y mezclas).
- Plantas de aceite de reposo.
- Reunión y transmisión.
- Columnas rigorosas de refinería.
- Plantas petroquímicas de: hidrocarburos, refrigeración, químicas, amoniaco, metanol e hidrógeno.
- Dimensionamiento y clasificación de intercambiadores de calor.
- Dimensionamiento y clasificación de separadores.
- Regresión de datos para VLE / LLE.
- Sistemas de celdas combustibles.

A pesar de la simplicidad de este simulador, la revisión realizada mostró que no se cuenta con la opción para poder desarrollar la simulación de la destilación reactiva. Por lo tanto este simulador se descarta como una opción para el desarrollo de este tipo de operaciones.

### **3.7 PRO II.**

Este programa fue desarrollado por Simulation Sciences Inc. (USA). El programa de simulación ejecuta rigurosos balances de masa y energía para un amplio intervalo de procesos químicos. Desde separaciones gas / aceite hasta la destilación reactiva Pro / II ofrece la solución de simulación disponible mas comprensible y fácil de usar.

Desde la ventana principal de columnas se debe seleccionar el botón de convergencia. En la ventana de convergencia se selecciona el botón de destilación reactiva. Cuando reacciones de equilibrio o reacciones cinéticas están presentes, algunos productos de la reacción quizás no estén inicialmente presentes en las corrientes de alimentación o la cantidad de estos componentes quizás incremente significativamente como la reacción progresa. El generador inicial estimado olvida la contribución de los productos de la reacción cuando se estima la fase del estado inicial. El algoritmo de destilación reactiva contiene lógica para introducir los productos de la reacción gradualmente, para asegurar una convergencia uniforme.

### **3.8 SYNTHESISER, DESIGNER y PREDICTOR.**

El diseño de las columnas de destilación reactiva es comúnmente basado en secuencias de laboratorio y experimentos de plantas tipo piloto que son muy caros y consumen mucho tiempo, desde que no hay comercialmente disponible un software que adecuadamente describa todos los rasgos relevantes de las reacciones (catálisis, cinética, soportes) y la destilación (VLE, termodinámica, comportamiento de platos y empaque) y su combinación en la destilación reactiva. Hay también una necesidad de mejorar el catalizador y los internos de la columna para aplicaciones de destilación reactiva.

Bajo la iniciativa de SUSTECH, el consorcio de las compañías BP Chemicals (Gran Bretaña), Hoechst (Alemania), BASF (Alemania), Snamprogetti (Italia), Neste Oy (Finlandia), y las universidades de Clausthal (Alemania), Dortmund (Alemania), Aston (Gran Bretaña), Bath (Gran Bretaña) y la universidad tecnológica de Helsinki (Finlandia) tomaron el reto de modelar los procesos de destilación reactiva o catalítica (Kemig, 1999).

Los objetivos principales de este proyecto fueron:

- Proveer una herramienta predictiva (llamada SYNTHESISER) para la evaluación de la destilación reactiva. Este programa de computadora permite una rápida evaluación de las posibilidades de utilizar la destilación reactiva para un sistema químico y para proveer un diseño básico para futuros desarrollos del proceso.

- Proveer un simulador de proceso (llamado DESIGNER) para modelar, diseñar, dimensionar y entender el complejo comportamiento dentro de la columna de destilación reactiva para integrarlo dentro de un diseño de proceso industrial.
- Identificar y demostrar un número de aplicaciones industriales n escala piloto para verificar el desarrollo del software en el proyecto.
- Y unir el SYNTHESISER y el DESIGNER dentro de una herramienta integrada, PREDICTOR para la síntesis y diseño de procesos de destilación reactiva usando un interface de usuario común desarrollada especialmente.

### 3.8.1 SYNTHESISER.

A pesar de los beneficios de los procesos de destilación reactiva, su aplicabilidad depende dramáticamente de las propiedades del sistema químico particular con el cual esta distribuido. Este fue el punto de inicio para el desarrollo de SYNTHESISER. Esta herramienta esta diseñada para soportar las decisiones de proceso si la destilación reactiva es benéfica o no para un sistema de reacción química dado comparándolo con las secuencias de reacción convencionales y los procesos de destilación. SYNTHESISER da una primer aproximación acerca de la separación alcanzada y el diseño de la columna. La herramienta es capaz de manejar sistemas multi – reacción. SYNTHESISER está basado en el conocimiento obtenido de los proyectos de otros compañeros y de la literatura abierta (Kenig, 1999).

El diagrama de flujo del SYNTHESISER es dado en la figura 1. Como SYNTHESISER esta diseñado para ser usado en una primera fase de evaluación para el desarrollo del proceso, solamente es necesaria información limitada acerca del sistema de reacción que se está usando: la estequiometría de cada reacción, el tipo de reacciones, algo de información cuantitativa acerca de las reacciones y datos VLE.

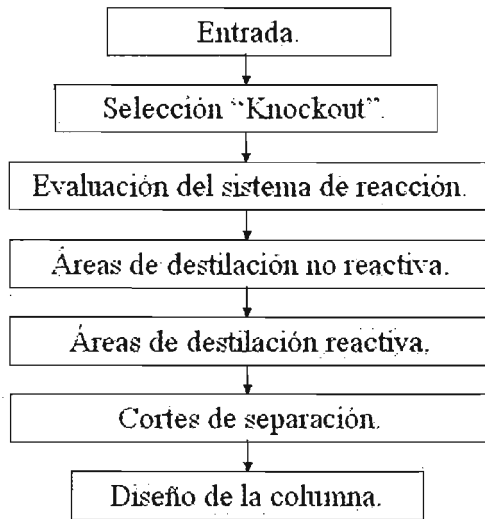


Figura 1. Diagrama de flujo de SYNTHESISER.

Primero este programa trata de encontrar un “criterio de knockout”, considerando solamente el sistema de reacción sin una consideración exacta de la termodinámica. Este sistema busca razones por las cuales se debe excluir el uso de la destilación reactiva, antes de considerar el problema exacto de destilación. Esta búsqueda está basada en reglas como:

La destilación reactiva es excluida si:

- El sistema de reacción no tiene reacciones laterales.
- Solamente un producto está presente, y
- El último paso del sistema de reacción es irreversible.

Porque la destilación reactiva no tiene ninguna ventaja comparada con un recipiente simple. El siguiente paso consiste en evaluar el sistema de reacción sin tomar en cuenta su comportamiento termodinámico exacto. Esta evaluación orienta a una primera impresión de la conveniencia de la destilación reactiva. La evaluación está basada en el

tipo, el intervalo de reacción, y la entalpía de reacción de la reacción principal, también como en el tipo de reacciones laterales y la separación de los inertes.

En el siguiente paso el programa busca azeótropos binarios y terciarios y estima las áreas de destilación basados en un análisis topológico de los puntos de ebullición de los componentes puros y de los azeótropos (Kenig, 1999).

Luego de esto, los algoritmos del programa tratan a las áreas no reactivas como un sistema de destilación simple usando una variable de transformación propuesta por Ung y Doherty, esta transformación necesita valores para las constantes de equilibrio químico las cuales pueden ser severamente estimadas basadas en la información previamente obtenida. Asimismo los azeótropos reactivos y las áreas de destilación reactiva pueden ser estimados a las áreas de destilación no reactiva. Así aplicando algoritmos como el de Bessling se pueden combinar las líneas de destilación reactiva con las líneas de destilación no reactiva para determinar las zonas de reacción en la columna.

Basado en esto el programa genera un número de cortes de separación los cuales son reducidos por una selección de la mínima concentración del producto en la corriente de producto. Los siguientes diseños para una columna de destilación reactiva pueden ser propuestos:

- Columna con alimentación y una zona de reacción a través de ella.
- Columna con alimentación y una zona de destilación arriba o debajo de la zona de reacción.
- Columna con 2 alimentaciones y una zona de reacción a través de la ella.
- Columna con 2 alimentaciones y una zona de destilación arriba o abajo la corriente de alimentación superior o inferior.

En la etapa final SYNTHESISER evalúa los cortes de separación. Este compara la destilación reactiva con un proceso convencional considerando el grado de conversión de las reacciones principales, la pureza del producto y una simplificación del problema

subsiguiente de destilación. Además este evalúa el comportamiento de las reacciones laterales.

Después de esta evaluación final el programa propone un diseño de columna. El número de alimentaciones el número de reacciones y zonas de destilación son fijados por el corte de separación. Adicionalmente, la herramienta propone el número de etapas ideales y el rango de reflujo (Kenig, 1999).

### **3.8.2 DESIGNER.**

En DESIGNER se toma en cuenta la difusión, la cinética de la reacción, el calor de transporte y los efectos de la interacción multi – componente. Los aspectos de mayor interés en DESIGNER son el modelo de transferencia de masa incluyendo la reacción en la región de la película, y una determinación de la eficiencia del catalizador basado en la transferencia de masa en el interior del catalizador y los modelos hidrodinámicos para las etapas reactivas (Kenig, 1999).

### **3.8.3 PREDICTOR.**

El blanco final de proyecto es una herramienta integrada para la síntesis y el diseño de la destilación reactiva, PREDICTOR. Así SYNTHESISER y DESIGNER han sido acoplados juntos bajo una interface común. La interface modifica el resultado obtenido desde SYNTHESISER dentro de la entrada necesaria para DESIGNER, y una simulación del diseño propuesto puede ser hecho (Sundmacher y col., 2003; Kenig, 1999).

## CAPITULO IV. DESARROLLO DEL MODELO DE RED NEURONAL PARA LA SIMULACIÓN DE LA DESTILACIÓN REACTIVA MEDIANTE EL USO DEL PROGRAMA NEUROHELL 2.

### 4. INTRODUCCIÓN.

Como se mencionó antes la destilación reactiva es una combinación de la separación y la reacción dentro de una unidad simple. El concepto de combinar estas dos funciones importantes para el enriquecimiento del comportamiento global del proceso no es nuevo para la industria de procesos químicos. La recuperación de amoníaco en el proceso clásico Solvay por sosa calcinada del año de 1860 quizás sea considerado como la primera aplicación comercial para los procesos de destilación reactiva. La producción de etileno, dicloro etileno, metóxido de sodio, y varios esteres de ácidos carboxílicos son algunos ejemplos de procesos en los cuales la destilación reactiva ha encontrado un lugar de una forma u otra, sin atraer la atención como una clase diferente de operación. No fue hasta el año de 1980, gracias a la enorme demanda de MTBE (Metil ter – butil éter), que el proceso ganó una posición distinta como un prometedor separador – reactor multifuncional (Sundmacher y col., 2003).

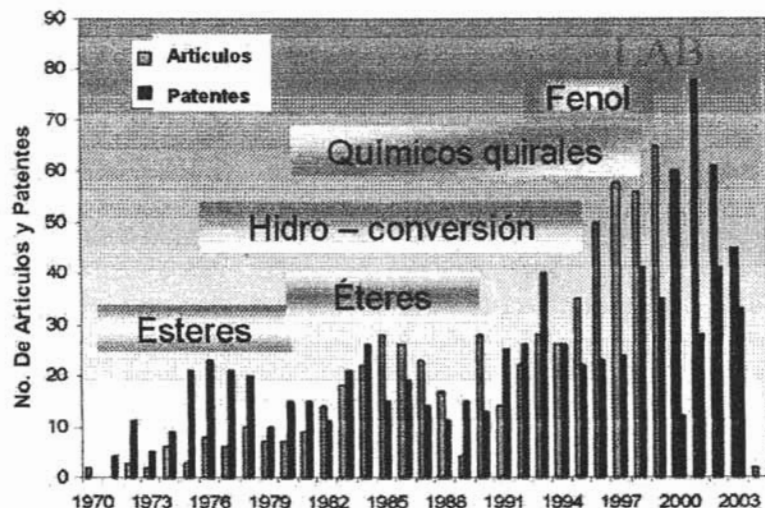


Figura 1. Investigaciones desarrolladas para los procesos de destilación reactiva.

La gran aparición comercial de la destilación reactiva aplicada a la producción de MTBE fue inmediatamente seguida por otro logro remarcable con su uso en el proceso de Eastman Kodak, donde se logro condensar una planta química completa para la producción de acetato de metilo en una unidad simple de destilación reactiva, la cual usaba los mismos reactivos y entregaba productos puros. Con esta demostración de su habilidad para conseguir costos bajos y su pequeño tamaño en una planta química, la destilación reactiva ha sido investigada como un proceso importante y potencial para muchos otros procesos químicos y muchas otras reacciones. Junto con la esterificación y la eterificación, otras reacciones como la producción de aldehídos (acetalización), hidrogenación, alquilación, e hidratación han sido investigadas (Sundmacher y col., 2003).

#### **4.1 APLICACIONES INDUSTRIALES DE LA DESTILACIÓN REACTIVA.**

##### **4.1.1 REACCIONES DE ETERIFICACIÓN.**

Las reformulaciones de la gasolina usando éteres tales como Metil ter – butil éter MTBE, Etil ter – butil éter (ETBE), y Ter – amil metil éter (TAME) como elevadores de octanos y oxigenados han sido considerados por el decreto de aire limpio en USA en los pasados 70's, lo cual elevó la producción del MTBE a un nuevo nivel en los tempranos 80's; TAME y ETBE también emergieron como prometedores aditivos combustibles. Además de sus propiedades antidetonantes, mejorando el octanaje del combustible, el MTBE mejora la tolerancia limite del agua en el combustible y tiene un valor calorífico mas alto que otros aditivos como el metanol. Los procesos de destilación reactiva pueden superar las limitaciones de equilibrio y pueden ofrecer conversiones por arriba del 99 %. Este proceso es mostrado en la figura 3. Otro aspecto importante para llevar a cabo la destilación reactiva a una conversión casi completa, es su eficiente uso en la separación de iso – olefinas desde las corrientes de las refinerías conteniendo ambos tipos de butenos, normales y secundarios (C<sub>4</sub> o C<sub>5</sub>), los cuales por otros caminos son muy difíciles de separar. Una columna de destilación reactiva puede manejar las olefinas mezcladas completa y efectivamente y explotar la presencia de butenos inertes para mejorar su propio desempeño. Esta separación es necesaria ya que los n – butenos son requeridos en su forma pura para la producción de 1 – buteno, como comonomeros para la polimerización de etileno, para la alimentación para la



producción de acrilatos y para la producción mediante oxidación de butadieno (Sundmacher y col., 2003; Higler y col., 1999; Sundmacher y col., 1999; González y col., 1997; Hauan y col., 1995; Shah y col., 1994; Jacobs y col. 1993; Nijhuis y col., 1993).

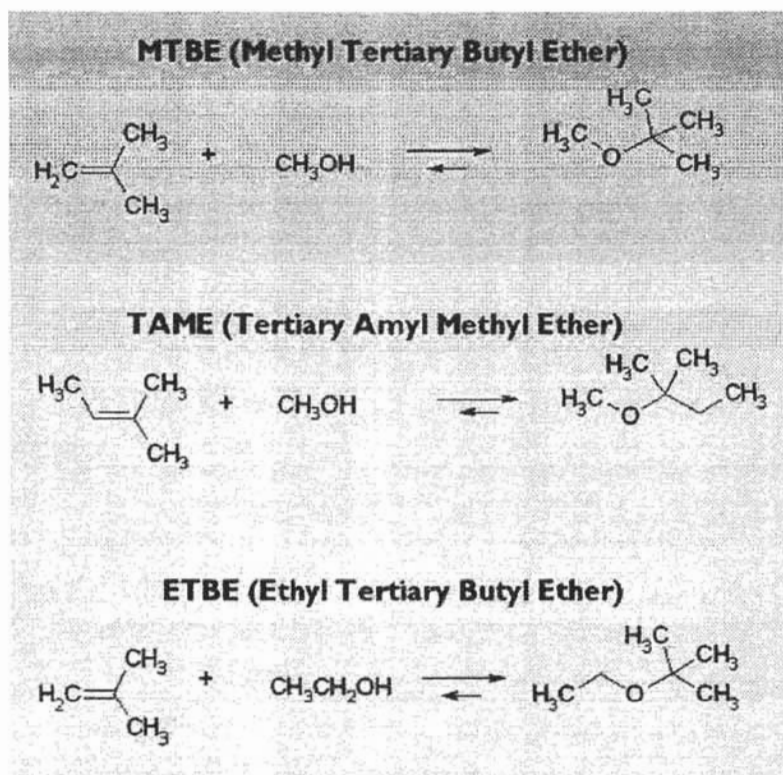


Figura 2. Reacciones implicadas en la eterificación.

La decisión de prohibir el uso de MTBE en California en el año 2003 forzó a las refinerías a buscar un nuevo aditivo combustible y probablemente tendrá adversas implicaciones para las unidades existentes y para las propuestas para la producción del MTBE y otros éteres. No obstante, el MTBE ha sido responsable de la búsqueda, por el inicio de la investigación y desarrollo en la destilación reactiva y esto tiene una muy alta posición hoy en día. En las últimas 2 décadas, especialmente en los 80's, las patentes y la literatura publicada sobre la destilación reactiva ha sido principalmente centrada en su aplicación para el MTBE y otros éteres.

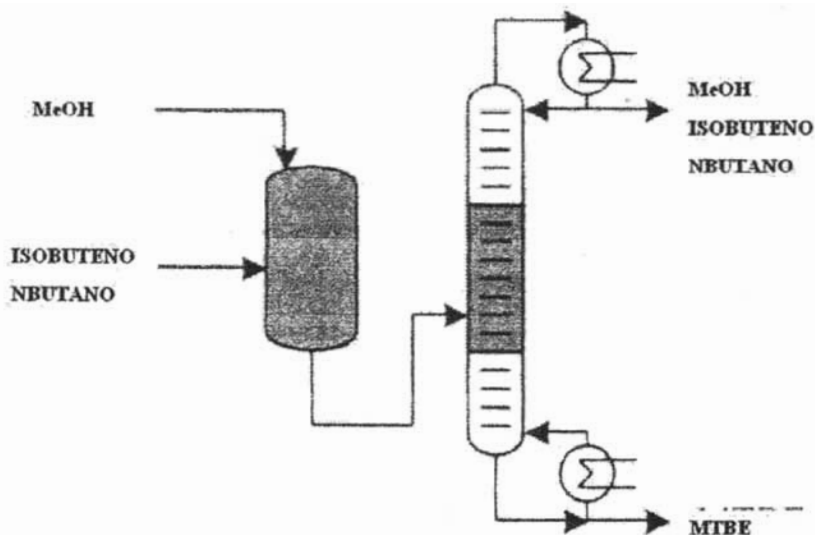


Figura 3. Proceso para la producción de MTBE: un reactor adiabático y una columna de destilación reactiva.

Los procesos convencionales para la producción del MTBE usan un reactor catalítico con un ligero exceso de metanol (metanol / isobuteno = 1.05 a 2). Los productos alcanzan una conversión cercana al equilibrio de 90 a 95 %. La mezcla reaccionante es separada por destilación, pero esto es complicado por la formación de azeótropos binarios como son metanol – MTBE e isobuteno – metanol. El isobuteno sin reaccionar es difícil de separar de otros productos C<sub>4</sub> volátiles. En los procesos de destilación reactiva; por otro lado, una conversión casi completa del isobuteno es casi alcanzada, de este modo se eliminan los problemas de separación y de recirculación. La columna de destilación reactiva está separada por tres secciones, de las cuales la sección media es la zona de reacción empacada con catalizador sólido. El domo rectificador no reactivo es la zona donde se lleva a cabo la separación de los gases inertes y el metanol de exceso, y la sección del fondo separa el MTBE en una forma casi pura. Aunque el punto de ebullición para el MTBE es 328 K (54.85 ° C) y el del metanol es 337.5 K (64.35 ° C) sorpresivamente, el MTBE es el producto de los fondos mientras que el metanol que no ha reaccionado es recolectado en el destilado. Este comportamiento se debe a la formación del azeótropo de bajo punto de ebullición entre el

isobuteno y el metanol, lo cual eleva al metanol desde la sección de agotamiento de la columna.

El trabajo pionero para comercializar esta tecnología fue desarrollado por Smith de “La Compañía De Licencia E Investigación Química (CR&L<sup>1</sup>)” quien ha sido premiado con muchas patentes para diferentes estructuras catalíticas, diseño interno de columnas, y esquemas de flujo. Algunas patentes ha sido asignadas a los investigadores de Elf quien describe esto alternando zonas catalíticas y zonas no catalíticas para llevar a cabo la eterificación. Los esfuerzos en estos estudios fueron dirigidos a través de minimizar la caída de presión en el lecho de catalizador y proveyendo tiempos de residencia máximos para el líquido en la zona catalítica. Esto fue conseguido al proveer pasajes de separación libre a las corrientes de vapor que fluyen hacia arriba uno a otro por empacar el catalizador en la corriente inferior o por proveer un espacio anular en la cama del catalizador, de este modo aislando así la zona de reacción y la de destilación en una simple columna. UOP, Koch Engineering y Hügs AG han conjuntamente desarrollado el proceso Ethermax para la producción de éteres por destilación reactiva. El proceso usa el empaque Katamax<sup>2</sup> de Koch Engineering donde un catalizador sólido ácido es confinado en las cubiertas de la tela metálica (Sundmacher y col., 2003; Shah y col., 1994; Jacobs y col. 1993; Nijhuis y col., 1993).

---

<sup>1</sup> Chemical Research and Licensing Company.

<sup>2</sup> Actualmente el empaque Katamax de Koch Engineering es conocido como empaque Fleximax.

#### 4.1.1.1 CASO I. PRODUCCIÓN DE MTBE.

Los datos que serán suministrados a la red son mostrados en la tabla I.4, estos datos muestran las variables que resultan importantes para la simulación de una columna de destilación reactiva para la producción de MTBE. Como se puede notar en la tabla I.4 los casos 10, 11, 13, 14, y 15 están resaltados con color amarillo ya que serán eliminados del set de datos, tanto de entrada como de salida ya que son datos que salen fuera del intervalo que se presenta para este caso (Higler y col., 1999; Sundmacher y col., 1999; González y col., 1997; Hauan y col., 1995; Rehfinger y col., 1990).

Tabla I.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de MTBE.

CASO	TEMP. CORRIENTE 3. (°K.)	TEMP. CORRIENTE 6. (°K.)	PRESIÓN 3. (ATM.)	PRESIÓN 6. (ATM.)	FLUJO 3. (GMOL/SEG.)	FLUJO 6. (GMOL/SEG.)	X3, MEOH.	X16, IBUTENE.	X26, NBUTANE.
1	320.000	354.530	11.000	11.000	195.000	594.000	1.000	0.3283	0.6717
2	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
3	350.000	298.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
4	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
5	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
6	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
7	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
8	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
9	350.000	310.000	11.000	11.000	215.500	594.000	1.000	0.3283	0.6717
10	350.000	310.000	11.000	5.000	215.500	604.000	1.000	0.3394	0.6606
11	350.000	310.000	1.000	5.000	300.500	604.000	1.000	0.3394	0.6606
12	350.000	310.000	11.000	11.000	300.500	604.000	1.000	0.3394	0.6606
13	350.000	355.245	11.000	11.000	300.500	795.000	1.000	0.2453	0.7547
14	350.000	354.519	11.000	11.000	300.500	595.000	1.000	0.3277	0.6723
15	350.000	353.953	11.000	11.000	300.500	495.000	1.000	0.3939	0.6061

Tabla I.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de MTBE (Continuación).

CASO	ETAPA ALIMEN. CORRIENTE 3	ETAPA ALIMEN. CORRIENTE 6	REFLUJO L / F.	TEMP. 4. (° K.)	TEMP. 5. (° K.)	PRESIÓN 4. (ATM.)	PRESIÓN 5. (ATM.)	FLUJO 4. (GMOL/SEG.)	FLUJO 5. (GMOL/SEG.)
1	5.0000	4.0000	2.0000	377.212	272.405	4.000	1.000	275.008	311.177
2	5.0000	4.0000	2.0000	378.912	272.417	4.000	1.000	156.011	476.105
3	5.0000	4.0000	2.0000	378.912	272.417	4.000	1.000	156.011	476.105
4	4.0000	10.0000	2.0000	357.815	272.923	2.400	1.000	98.714	633.816
5	4.0000	10.0000	3.0000	377.957	289.822	4.000	1.000	61.909	809.075
6	4.0000	10.0000	3.0000	378.059	276.988	4.000	1.000	101.154	685.227
7	6.0000	10.0000	3.0000	357.460	272.640	2.400	1.000	178.824	435.010
8	6.0000	4.0000	5.0000	357.794	272.932	2.400	1.000	124.797	588.102
9	4.0000	8.0000	5.0000	334.434	273.066	1.700	1.000	0.001	739.189
10	8.0000	11.0000	5.0000	357.633	271.785	2.400	1.000	126.596	604.993
11	8.0000	11.0000	10.0000	360.020	278.809	2.500	1.000	30.146	764.438
12	4.0000	11.0000	4.0000	402.268	272.247	7.000	1.000	98.748	758.013
13	4.0000	11.0000	4.0000	460.221	272.844	19.738	1.000	147.706	840.669
14	11.0000	8.0000	4.0000	426.063	272.639	10.369	1.000	57.669	671.176
15	11.0000	8.0000	4.0000	426.063	272.639	10.369	1.000	50.020	582.148

Tabla I.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de MTBE (Continuación).

CASO	XMTBE4	XMEOH4	IBUT4	XBUT4	XMTBE5	XMEOH5	IBUT5	XBUT5	CONVER SION
1	0.9934	9.8187E-10	0.0065516	1.0000E-30	2.2814E-06	0.1502	0.022059	0.8277	0.9556
2	0.9576	0.0393	0.0000035	3.0947E-03	3.0104E-05	0.0000118	0.030593	0.9694	0.9253
3	0.9576	0.0393	0.0000035	3.0947E-03	3.0104E-05	0.0000118	0.030593	0.9694	0.9253
4	0.9980	0.0020	0.0000000	9.9657E-31	1.1576E-05	0.2718	0.000000	0.7282	1.0000
5	0.9998	0.0000	0.0000963	9.2438E-05	1.3516E-02	0.5381	0.256925	0.1915	0.9340
6	0.9964	0.0033	0.0001850	1.1817E-04	1.0560E-02	0.4314	0.141129	0.4169	0.5040
7	0.9981	0.0000	0.0000184	1.8468E-03	3.2984E-05	0.0000	0.000000	0.9999	0.9999
8	0.9985	0.0014	0.0000003	1.3868E-05	4.7929E-06	0.2696	0.000000	0.7304	1.0000
9	0.9212	0.0000	0.0000000	7.8847E-02	1.7791E-06	0.1000	0.000000	0.9000	1.0000
10	0.9992	0.0000	0.0003509	4.8627E-04	4.0389E-06	0.2985	0.010160	0.6914	0.9698
11	0.9751	0.0244	0.0001388	3.2276E-04	1.7624E-01	0.3395	0.001638	0.4827	0.9939
12	0.9925	0.0000	0.0003759	7.0847E-03	2.0297E-06	0.4258	0.000000	0.5742	0.9989
13	0.9930	0.0000	0.0004434	6.5582E-03	3.8156E-06	0.2923	0.000000	0.7077	0.9982
14	0.9184	0.0767	0.0015028	3.3792E-03	1.9133E-05	0.0011	0.000000	0.9989	0.9954
15	0.9184	0.0767	0.0015028	3.3792E-03	1.9133E-05	0.0011	0.000000	0.9989	0.9962

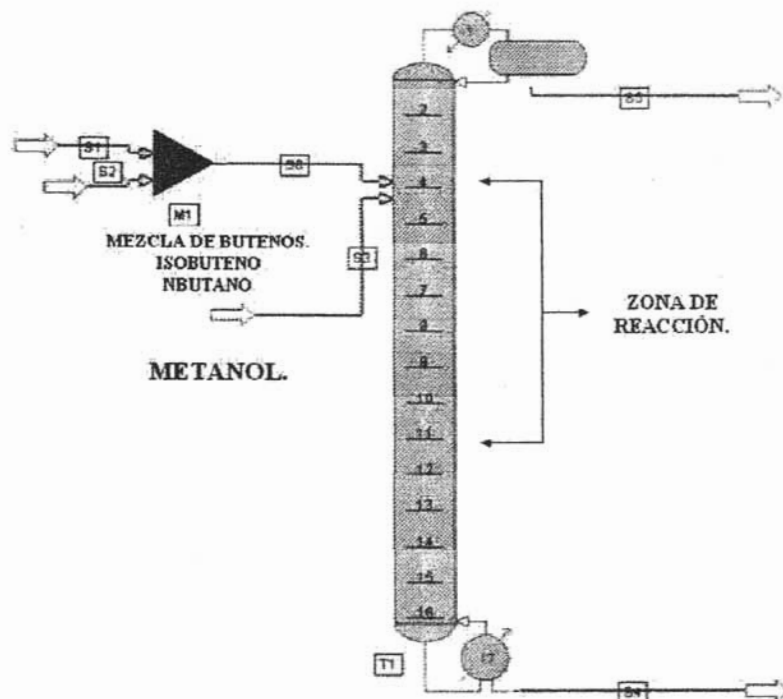


Figura 4. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de MTBE.

Las características de la columna son las siguientes:

- Columna de destilación reactiva.
- Numero total de Etapas: 17, incluyendo condensador y un reboiler.
- Condensador: total.
- Reboiler: parcial.
- Presión de la columna: 11 atm.
- Etapas reactivas: localizadas en la parte media de la columna desde la 4 hasta la 11.
- La columna tiene 2 corrientes de alimentación: una corriente de alimentación de metanol(corriente 3), y una corriente de alimentación de la mezcla de butenos (corriente 6).

- El catalizador utilizado para la zona reactiva es amberlita 15 húmeda<sup>3</sup>.
- La reacción química se lleva a cabo en la fase líquida.

Para suministrar los datos a la red se siguen los siguientes pasos:

1. Abrir el programa Neuroshell 2.
2. Seleccionar nuevo problema, New Problem.
3. Dar un nombre al problema y guardarlo, en este caso el problema se llamara **REDMTBE**.
4. En Problem Description se puede dar una breve descripción de lo que desarrollara la red.
5. Seleccionar el tipo de red a utilizar, una red para principiantes (Beginner's Neuronal Networks), o una red avanzada (Advanced Neuronal Networks). Se selecciona la red avanzada.
6. Dar clic en el icono de Entry Data para alimentar los datos mostrados en la tabla I.4. Aquí aparece una tabla tipo excel, alimentar los datos recordando que en la primera fila se debe colocar el nombre de cada columna. Dar clic en guardar datos (Save File), y dar clic en salir, Exit.
7. Ahora ir al icono de Construir Red Neuronal (Build Neuronal Network), para definir las entradas y salidas de nuestra red; Define Inputs / Outputs. Como se notara aquí aparece una tabla con 4 filas y 28 columnas donde salen identificados todos los datos que se suministraron. En la primera fila se define si se trata de una entrada (Input, I) o de una salida (Actual Output, A), en la segunda fila se define el valor mínimo de nuestros datos suministrados y en la cuarta fila se indica el valor mínimo de nuestros datos suministrados. Al finalizar dar clic en salir (Exit Define Inputs). La tabla II muestra como se definirán las entradas y salidas de los datos suministrados en la tabla I. Es preciso notar que la mayoría de las ocasiones se asignaran como datos de entrada a aquellas variables que se puedan manipular dentro del proceso por ello las variables: Temp. Corriente 3, Temp. Corriente 6, presión 3, presión 6, flujo 3, flujo 6, X3

---

<sup>3</sup> Amberlyst 15 wet, ROHM AND HAAS.

MEOH, X16 ibutene, X26 nbutane, etapa alimentación, corriente 3, etapa alimentación corriente 6 y reflujo son las variables de entrada.

Tabla II.4. Definición de doce entradas y quince salidas de la red neuronal para el caso de MTBE.

NOMBRE DE VARIABLE	TEMP. CORRIENTE 3. (° K.)	TEMP. CORRIENTE 6. (° K.)	PRESIÓN 3. (ATM.)	PRESIÓN 6. (ATM.)	FLUJO 3. (GMOL/SEG.)	FLUJO 6. (GMOL/SEG.)	X3, MEOH.	X16, IBUTENE.	X26, NBTANE.
TIPO DE VARIABLE.	I	I	I	I	I	I	I	I	I
MÍNIMO.	320	298	10.9	10.9	195	495	0.99999	0.245	0.606
MÁXIMO.	350	355.245	11.0	11.0	300.5	795	1	0.394	0.755

Tabla II.4. Definición de doce entradas y quince salidas de la red neuronal para el caso de MTBE. (continuación).

NOMBRE DE VARIABLE	ETAPA ALIMEN. CORRIENTE 3.	ETAPA ALIMEN. CORRIENTE 6	REFLUJO L / F.	TEMP. 4. (° K.)	TEMP. 5. (° K.)	PRESIÓN 4. (ATM.)	PRESIÓN 6. (ATM.)	FLUJO 4. (GMOL/SEG.)	FLUJO 5. (GMOL/SEG.)
TIPO DE VARIABLE.	I	I	I	A	A	A	A	A	A
MÍNIMO.	4	4	2	334.434	271.785	1.7	0.99999	0.001	311.177
MÁXIMO.	11	11	10	460.221	289.822	19.738	1	275.008	840.669

Tabla II.4. Definición de doce entradas y quince salidas de la red neuronal para el caso de MTBE. (continuación).

NOMBRE DE VARIABLE	XMTBE4	XMEOH4	IBUT4	XBUT4	XMTBE5	XMEOH5	IBUT5	XBUT5	CONVER SION
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A	A	A
MÍNIMO.	0.918	0	0	0	0	0	0	0.191	0.504
MÁXIMO.	1	0.077	0.007	0.079	0.176	0.538	0.257	1	1

- Ahora se debe ir al icono de diseño para seleccionar el tipo de red que se desarrollara (Design), aquí se elige arquitectura (Architecture and Parameters), y se elige el tipo de red. Elegir una red tipo cada capa conectada a la otra y además se alimenta el rango de aprendizaje, el coeficiente de momentum y el valor para los factores de peso iniciales.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.0375.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.05.

Initial weights (pesos iniciales): 0.5.



Configuración para cada capa:

Slab 1: 12, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 15, salidas.

9. Entrar al comando de entrenamiento y criterios de entrenamiento (Training and Stop Training Criteria), aquí se asigna un valor de error de  $1E - 4$ , y se elige el tipo Vanilla para la actualización de los pesos (Weights updates).
10. Ir a aprendizaje (Learning), y proceder al entrenamiento de la red con la selección de inicio de entrenamiento (Start Learning), en el comando correr (run).
11. Cuando el programa encuentre una solución, este se detendrá automáticamente. Salir del comando e ir al comando aplicar red (Apply to file), aquí se va al comando correr (Run), e iniciar con el proceso (Start processing), automáticamente la red nos dará los resultados y se obtendrá la red del sistema.
12. Salir del comando e ir a salidas del problema (Problem Outputs), aquí se verán los valores deseados y los valores obtenidos por nuestra red.

#### 4.1.2 REACCIONES DE ESTERIFICACIÓN CON ALCOHOLES / OLEFINAS.

El acetato de metilo es otra mercancía química de alto volumen que es manufacturado comercialmente usando la destilación reactiva. Este es usado como un intermediario en la manufactura de una gran variedad de poliésteres tales como base para capas de película, acetato de celulosa y acetato Estron. Los procesos convencionales usaban múltiples reactores con una gran cantidad de exceso de uno de los reactivos para conseguir altas conversiones del otro. El producto era difícil de separar por la formación de los azeótropos de acetato de metilo – metanol y acetato de metilo – agua. Diferentes métodos de disociación del azeótropo de acetato de metilo – metanol fueron empleados, como el uso de varias columnas de destilación atmosféricas y de vacío o columnas de destilación extractiva. Un proceso típico contenía 2 reactores y ocho columnas de destilación, haciéndolo complejo y capitalmente intensivo.

Eastman Kodak desarrolló un proceso de destilación reactiva para la manufactura de acetato de etilo de alta pureza y acetato de etilo de ultra alta pureza. El proceso tradicional y el proceso de destilación reactiva son mostrados en la figura 5. El hecho notable es que, a pesar de que la reacción tiene un equilibrio limitante desfavorable, un producto de alta pureza es obtenido usando un rango casi estequiometrico de metanol y ácido acético en la columna de destilación reactiva. El proceso completo esta integrado en una simple columna eliminando la necesidad de un sistema de columnas de destilación complejas y el reciclaje del azeótropo de metanol – acetato de metilo. Una simple columna de destilación reactiva de la planta en Tennessee de Eastman Kodak produce 180,000 toneladas / año de acetato de metilo de alta pureza (Sundmacher y col., 2003; Agreda y col., 1990; Venkataraman y col., 1990).

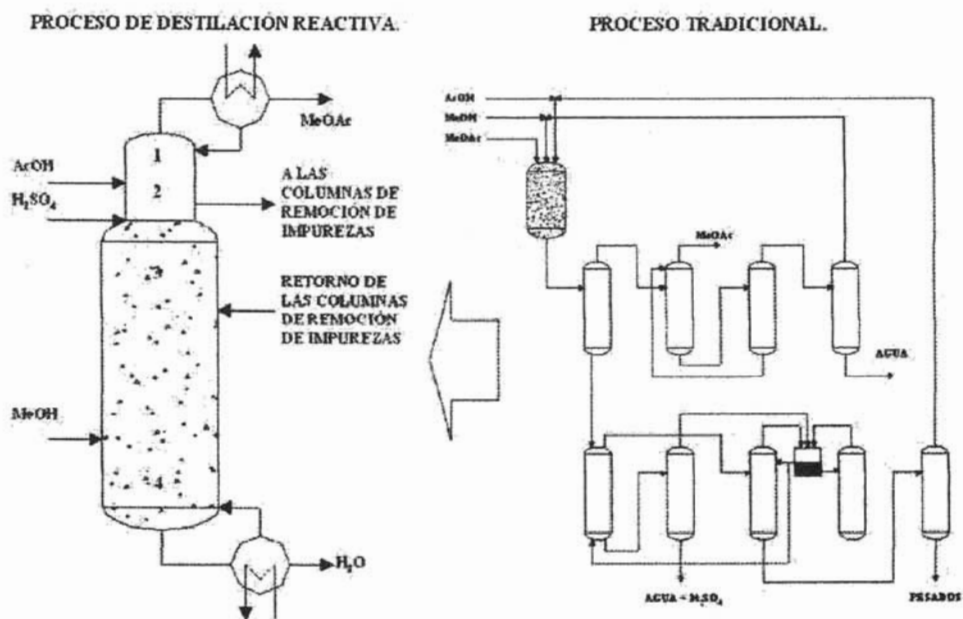


Figura 5. Destilación reactiva y proceso tradicional para la producción de acetato de metilo.

Aparte del acetato de metilo, la destilación reactiva quizás sea utilizada en la producción de otros ésteres tales como acetato de etilo, acetato de isopropilo y acetato de butilo. La reacción quizás sea utilizada también como una herramienta para la recuperación de ácido acético y otros ácidos carboxílicos a partir de soluciones acuosas.

#### 4.1.2.1 CASO II. PRODUCCIÓN DE ACETATO DE ETILO.

Los datos que serán suministrados a la red son mostrados en la tabla III.4, estos datos muestran las variables que resultan importantes para la simulación de una columna de destilación reactiva para la producción de acetato de etilo. Estos datos son de un experimento a nivel laboratorio por ello es que los flujos son tan pequeños. Aquí se eliminarán los casos 1, 11 y 13 ya que salen fuera del intervalo propuesto (Agreda y col., 1990; Venkataraman y col., 1990).

Tabla III.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de acetato de etilo.

CASO	TEMPERATUR A1, (° C)	PRESIÓN I (ATM)	FLUJO TOTAL (KMOL/HR)	X ETANOL	X ACETIC	X AGUA	PESO MOLECULAR
1	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673
2	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3670
3	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673
4	90.150	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.5000	0.0200	52.5004
5	90.150	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.5000	0.0200	52.5000
6	90.150	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.5000	0.0200	52.3673
7	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673
8	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673
9	91.000	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3670
10	91.000	1.000	6.4680E-03	0.4908	0.4863	0.0229	52.2275
11	91.000	1.000	6.4680E-03	0.4908	0.4863	0.0229	52.2270
12	91.000	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673
13	90.150	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.5000	0.0200	52.5004
14	90.150	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.5000	0.0200	52.5004
15	90.750	1.000	6.4680E-03	0.4808	0.4963	0.0229	52.3673

Tabla III.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de acetato de etilo.  
(continuación).

CASO	ETAPA ALIMENTACO N	REFLUJO L/F	TEMPERATUR A.2 (°C)	TEMPERATUR A.3 (°C)	PRESIÓN 2 (ATM)	PRESIÓN 3 (ATM)	FLUJO 2 (KMOL/HR)
1	6	10.0000	55.000	84.972	1.000	1.000	1.40E-06
2	8	10.0000	69.027	95.995	1.000	1.000	0.004
3	8	10.0000	68.946	82.396	1.000	1.000	0.005
4	6	6.0000	55.000	121.374	1.000	1.000	0.004
5	6	9.0000	55.000	74.952	1.000	1.000	0.000
6	6	10.0000	55.000	78.411	1.000	1.000	0.000
7	6	10.0000	55.000	84.972	1.000	1.000	0.000
8	6	10.0000	55.000	101.101	1.000	1.000	0.002
9	6	10.0000	55.000	101.101	1.000	1.000	0.002
10	11	6.0000	55.000	73.740	1.000	1.000	0.000
11	11	6.0000	0.782	89.573	1.000	1.000	0.000
12	7	6.0000	72.254	37.099	1.000	1.000	0.000
13	10	3.0000	50.000	111.962	1.000	1.000	0.005
14	11	9.0000	50.000	113.724	1.000	1.000	0.006
15	6	10.0000	59.687	73.685	1.000	1.000	9.40E-05

Tabla III.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de acetato de etilo.  
(continuación).

CASO	FLUJO 3 (KMOL/HR)	XACETIC2	XETANOL2	XAGUA2	XREACTAT2	XACETIC3	XETANOL3	XAGUA3	XREACTAT3	CONVERSI ON.
1	6.369E-03	0.0002	0.0000	0.0000	0.9998	0.5050	0.4942	0.00002	0.0008	0.0020
2	2.604E-03	0.0004	0.3521	0.3042	0.3433	0.6436	0.3092	0.00000	0.0471	0.4775
3	7.555E-04	0.0000	0.3253	0.3112	0.3634	0.2498	0.0652	0.00003	0.6850	0.9412
4	2.126E-03	0.0001	0.1582	0.3866	0.4551	0.9992	0.0008	0.00000	0.0000	0.3431
5	4.906E-03	0.0076	0.0000	0.9920	0.0004	0.2693	0.3132	0.0002	0.4173	0.5903
6	4.963E-03	0.0092	0.0000	0.9908	0.0000	0.3825	0.2449	0.0001	0.3724	0.4120
7	6.369E-03	0.0002	0.0000	0.0000	0.9998	0.5050	0.4942	0.0000	0.0008	0.9830
8	1.088E-02	0.0104	0.2467	0.2578	0.4852	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.9922
9	1.090E-02	0.0103	0.2446	0.2561	0.4890	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.9923
10	6.790E-03	0.0796	0.1797	0.2460	0.4946	0.0419	0.8853	0.0000	0.0728	0.9094
11	5.243E-03	0.0096	0.0343	0.2644	0.6917	0.6538	0.1267	0.0000	0.2194	0.0898
12	6.928E-03	0.1628	0.5415	0.0008	0.2949	0.4108	0.3584	0.2068	0.0239	0.1025
13	1.225E-03	0.4101	0.5624	0.0116	0.0159	0.9532	0.0282	0.0000	0.0185	0.0076
14	1.605E-04	0.3723	0.6218	0.0025	0.0033	0.9736	0.0253	0.0000	0.0011	0.2118
15	1.352E-02	0.0066	0.0000	0.2644	0.7290	0.0498	0.1592	0.7909	0.0001	0.7901

Las características de la columna son las siguientes:

- Columna de destilación reactiva.

- Numero total de Etapas: 13, incluyendo condensador y un reboiler.
- Condensador: total.
- Reboiler: parcial.
- Presión de la columna: 1 atm.
- Etapas reactivas: localizadas a lo largo de la columna.
- La columna tiene 1 corriente de alimentación(corriente 1): esta incluye a los 2 reactivos (etanol (ETOH) y ácido acético(ETAC)) y al componente inerte (agua (H<sub>2</sub>O)).
- La reacción química se lleva a cabo en la fase liquida.
- Nota: este ejemplo pertenece a un caso desarrollado en el laboratorio.

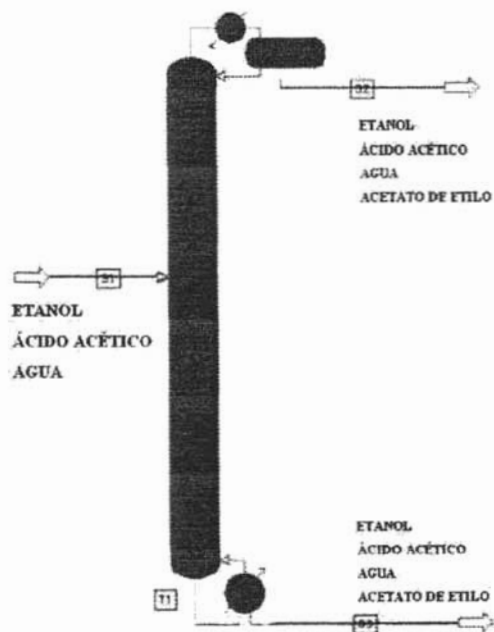


Figura 6. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de Acetato de etilo.

Para suministrar los datos a la red seguiremos los pasos considerados en el Caso I, producción de MTBE. El nombre del archivo será **REDETAC**, El paso 7 y el paso 8 variarán de la siguiente forma:

7.

Se definen a las variables Temp. Corriente 1, presión 1, flujo total, x etanol, x acetic, c agua, etapa alimentación, reflujo, temperatura 2 y temperatura 3 como las variables de entrada ya que si nosotros pretendemos realizar una operación de este tipo estas variables son las que se pueden manipular para obtener la conversión o composición del acetato de etilo deseada. La presión 2 y la presión 3 son desechadas debido a que su valor no afecta el sistema, ya que se encuentra a una presión constante.

Tabla IV.4. Definición de once entradas y once salidas de la red neuronal para el caso de Acetato de etilo.

NOMBRE DE VARIABLE.	TEMP. CORRIENTE 1, (°C.)	PRESIÓN 1. (ATM.)	FLUJO TOTAL, (KMOL/HR.)	X ETANOL	X ACETIC	X AGUA	ETAPA ALIMENTACIÓN.	REFLUJO L / F.
TIPO DE VARIABLE.	I	I	I	I	I	I	I	I
MÍNIMO.	90.14999	0.9999	0.006467	0.48	0.4863	0.02	6	3
MÁXIMO.	91	1	0.006468	0.4908	0.5	0.0229	11	10

Tabla IV.4. Definición de once entradas y once salidas de la red neuronal para el caso de Acetato de etilo. (Continuación).

NOMBRE DE VARIABLE.	TEMPERATUR A 2, (°C)	TEMPERATUR A 3, (°C)	PRESIÓN 2. (ATM)	PRESIÓN 3. (ATM)	FLUJO 2. (KMOL/HR)	FLUJO 3 (KMOL/HR)	XACETIC2
TIPO DE VARIABLE	I	I			A	A	A
MÍNIMO.	0.782	37.099			0	1.61E-04	0
MÁXIMO.	72.254	121.374			0.006	0.013515	0.4101

Tabla IV.4. Definición de once entradas y once salidas de la red neuronal para el caso de Acetato de etilo. (Continuación).

NOMBRE DE VARIABLE.	XETANOL2	XAGUA2	XEACTAT2	XACETIC3	XETANOL3	XAGUA3	XEACTAT3	CONVERSI ON.
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A	A
MÍNIMO.	0	0.3042	0	0	0	0.00000	0	0.002
MÁXIMO.	0.6218	0.3112	0.9998	0.9992	0.8853	0.00003	0.685	0.9923

8.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.5.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 11, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 11, salidas.

#### 4.1.3 CONDENSACIÓN ALDÓLICA SEGUIDA POR UNA DESHIDRATACIÓN.

La reacción considerada para este caso es la condensación aldólica de acetona para producir 4 – metil – 4 – hidroxil – 2 – pentanona o alcohol de diacetona (DAA). DAA es un químico útil intermediario y un solvente amigable y limpio para el ambiente, el cual está siendo comercializado como una alternativa para la acetona. La formación de DAA está fuertemente limitada por su equilibrio, como lo demuestran los datos de la tabla V. El orden de formación de DAA es de segundo orden con respecto a la acetona, y el orden con que el DAA se revierte a acetona es de primer orden con respecto al DAA.

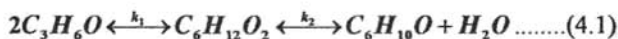
Tabla V.4. Conversión en el equilibrio de acetona a DAA a varias temperaturas.

Temperatura (° C).	0	10	20	30	45	54
Conversión (% peso).	23.1	16.9	12.1	9.1	5.6	4.3

Para producir DAA en cantidades razonables en un reactor de lecho fluidizado, se necesita enfriar la acetona alimentada de 5 a 20 ° C. A esta temperatura la máxima conversión posible de acetona es de 20 % al llegar a 5 ° C. Así los procesos convencionales para la producción de este solvente requieren de grandes cantidades de acetona. Los procesos de destilación reactiva eliminan la necesidad del enfriamiento de la acetona alimentada,

incrementan la conversión global de la acetona y reducen la cantidad de acetona reciclada (Sundmacher y col., 2003; Podrebarac y col., 1997).

DAA desafortunadamente genera una reacción de deshidratación para formar 4 – metil – 3 – penten – 2 ona, la cual es comúnmente llamada oxido mesitilico<sup>4</sup> (MO). La reacción general que muestra la conversión de acetona a DAA y MO es mostrada en la ecuación (4.1), el comportamiento de la formación de MO es completamente único. Aunque la formación de MO a partir de DAA es reversible, se pueden encontrar pequeñas cantidades de este componente en las secuencias realizadas para la formación de DAA, y esta reacción se comporta como si no fuese reversible. Debido a las influencias combinadas de la difusión porosa y el rápido equilibrio de acetona – DAA, la producción de MO puede ser tratada como una reacción de orden pseudo – cero.



La formación de MO se vuelve significativa con catalizadores de resina de intercambio aniónico a temperaturas superiores a 30 ° C. El MO quizás continúe reaccionando con acetona para producir foreno e isoforeno (IP) y estos reaccionan entre si para producir subproductos mas pesados. Aunque a las temperaturas bajas que comúnmente se encuentran los reactores de lecho fijo, estas reacciones consecutivas son despreciables. Pero la columna debe operar cercana al punto de ebullición de la acetona (cerca de 56 ° C) lo cual significa que posiblemente estas reacciones aparecen implicadas.

---

<sup>4</sup> Mesityl Oxide.



#### 4.1.3.1 CASO III. PRODUCCIÓN DE DAA.

Los datos que serán suministrados a la red son mostrados en la tabla VI.4. Aquí podemos notar que el conjunto de datos es congruente por lo cual no hay necesidad de eliminar alguno de los mismos (Podrebarac y col., 1997).

Tabla VI.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de DAA.

CASO	CALENTAMIENTO (V)	REFLUJO (G/MIN)	CANTIDAD CATALIZADOR (ml)	ACTIVIDAD DAA	ACTIVIDAD MO.	SELECTIVIDAD	% PESO DAA	% PESO MO.	% PESO AGUA
1	65	8.76	22.50	1.206	0.139	7.213	5.15	0.590	1.030
2	66	9.08	22.45	1.254	0.140	7.525	5.16	0.572	1.027
3	67	9.42	22.41	1.302	0.140	7.837	5.16	0.555	1.023
4	68	9.75	22.38	1.350	0.141	8.150	5.16	0.538	1.020
5	69	10.09	22.35	1.398	0.141	8.462	5.17	0.521	1.017
6	70	10.44	22.33	1.446	0.142	8.774	5.17	0.505	1.014
7	71	10.80	22.31	1.495	0.142	9.086	5.17	0.489	1.011
8	72	11.16	22.30	1.543	0.142	9.398	5.16	0.474	1.008
9	73	11.52	22.29	1.591	0.142	9.711	5.16	0.459	1.005
10	74	11.89	22.29	1.639	0.142	10.023	5.16	0.444	1.003
11	75	12.27	22.30	1.687	0.142	10.335	5.15	0.430	1.000
12	76	12.65	22.31	1.735	0.142	10.647	5.14	0.416	0.998
13	77	13.04	22.33	1.783	0.141	10.959	5.13	0.403	0.995
14	78	13.44	22.36	1.831	0.141	11.272	5.12	0.390	0.993
15	79	13.84	22.39	1.879	0.140	11.584	5.11	0.377	0.991
16	80	14.24	22.43	1.927	0.140	11.896	5.10	0.365	0.989
17	81	14.65	22.47	1.976	0.139	12.208	5.08	0.353	0.987
18	82	15.07	22.52	2.024	0.138	12.520	5.07	0.342	0.985
19	83	15.50	22.57	2.072	0.137	12.833	5.05	0.331	0.983
20	84	15.92	22.63	2.120	0.136	13.145	5.03	0.320	0.982
21	85	16.36	22.70	2.168	0.135	13.457	5.01	0.310	0.980

Las características de la columna son las siguientes:

- Columna de destilación reactiva o destilación catalítica.
- Catalizador utilizado: resina de intercambio aniónico Amberlita IRA – 900<sup>5</sup>.
- Material de la columna: acero inoxidable 316.
- Diámetro de la columna 2.54 cm y altura total 4.9 m.
- Zona de catalizador: 1.2 m.

<sup>5</sup> Amberlite IRA – 900 anion exchange resin, Aldrich, Milwaukee, USA.

- Las zonas sobre y bajo de la zona del catalizador están rellenas con empaque tipo sillas de montar de  $\frac{1}{4}$  de pulgada, 0.9 m sobre la zona y 2.7 bajo la zona.
- Condensador: total.
- Reboiler: parcial.
- Cantidad alimentada: 450 ml de acetona, posteriormente se utilizó una mini bomba Milton Roy LCD para proveer un flujo continuo de 152 ml/hr., cuando la columna estuvo trabajando a reflujo total.
- No existe producción de domo.
- Cada experimento duró 45 h.
- La reacción química se lleva a cabo en la fase líquida.
- El orden de la reacción es:
  - Para la producción de DAA: 2.
  - Para la reacción reversible de acetona: 1.
  - Para la producción de MO: 0.

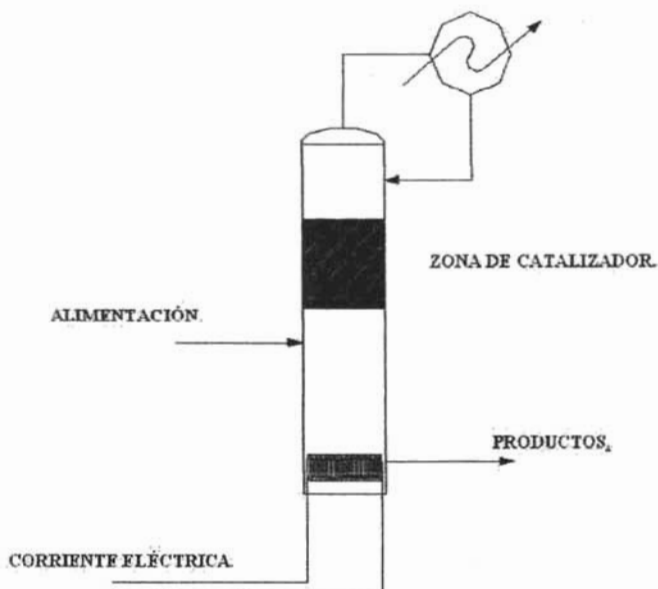


Figura 7. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de DAA.

Para suministrar los datos a la red se siguen los pasos considerados en el Caso I, producción de MTBE. El nombre de la red será DAA. El paso 7 y el paso 8 variarán de la siguiente forma:

7.

Las variables definidas como entradas son aquellas que nos permiten manipular la columna de destilación reactiva para obtener las concentraciones deseadas.

Tabla VII.4. Definición de cinco entradas y cuatro salidas de la red neuronal para el caso de producción de DAA.

NOMBRE DE VARIABLE	CALENTAMIENTO (V).	REFLUJO (G/MIN).	CANTIDAD CATALIZADOR (ml).	ACTIVIDAD DAA	ACTIVIDAD MO.	SELECTIVIDAD.	% PESO DAA.	% PESO MO.	% PESO AGUA.
TIPO DE VARIABLE.	I	I	I	I	I	A	A	A	A
MÍNIMO.	65	8.76	22.29	1.21	0.1351	7.21	5.01	0.31	0.98
MÁXIMO.	85	16.36	22.7	2.17	0.1423	13.46	5.17	0.59	1.03

8.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.7.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 5, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 4, salidas.

#### 4.1.4 NEUTRALIZACIÓN (PROTONACIÓN DE BASES ORGÁNICAS).

Las mezclas de componentes de puntos de ebullición cercanos no pueden ser económicamente separadas por destilación ordinaria. Sin embargo tales separaciones pueden ser conseguidas utilizando la destilación reactiva: la selectividad es realizada por emplear una reacción química reversible la cual afecta al equilibrio líquido – vapor de una manera favorable.

Como un ejemplo, en las mezclas de punto de ebullición cercano tales como 3 – / 4 – picolina, la adición de ácido trifluoroacético, en la deficiencia estequiometrica, resulta en la obtención enriquecida de la mas básica 4 – picolina, con una selectividad de alrededor de 2 en formamida como solvente. Y como las sales de piridina no son volátiles, la fase vapor es enriquecida con respecto a la 3 – picolina. Una separación casi completa puede ser esperada por repetición de este enriquecimiento en una etapa a contracorriente. La 3 – picolina saldrá de la columna con el destilado y la 4 – picolina, saldrá con la fase liquida en los fondos de la columna. La 4 – picolina es regenerada por adición de un tercer agente de desplazamiento (una tercer amina) para revertir el equilibrio ácido – base; entonces, el agente de desplazamiento enriquecido con el ácido es de nuevo reciclado al domo de la columna. Así cada picolina es recuperada y separada del agente de desplazamiento y del solvente si es necesario en una serie de pasos de destilación (Sundmacher y col., 2003; Duprat y col., 1991).

#### 4.1.4.1 CASO IV. SEPARACIÓN DE PIRIDINAS.

Los datos suministrados que serán suministrados a la red son mostrados en la tabla VIII.4, aquí de igual forma que en el caso III no hay necesidad de eliminar alguno de ellos ya que todos son congruentes (Duprat y col., 1991).

Tabla VIII.4. Datos suministrados para la red neuronal para el caso de separación de piridinas.

CASO	PUREZA	K21	X1F	ZA	N1	V/F1	Y3B1	L/F	N2	V/F2	Y3B2	N3	N4	N5	N6	a13	K13
1	97	2	0.5	0.2	143	5.8	0.19	5.7	14	5.5	0.95	6	14	47	35	1.83	1.32
2	98.5	2	0.5	0.2	173	5.6	0.19	5.5	9	6.1	0.94	6	15	59	47	1.74	1.25
3	97	1.8	0.5	0.2	288	6.4	0.24	5.9	9	6.4	0.8	8	26	44	36	1.82	1.31
4	97	2.4	0.5	0.2	84	5.3	0.19	5.2	11	6	0.9	6	15	47	39	1.76	1.25
5	97	2	0.25	0.2	118	7	0.15	7.1	13	8.8	0.78	7	13	62	41	1.72	1.3
6	97	2	0.75	0.2	136	4.1	0.27	4.8	9	8.6	0.52	9	14	35	44	1.86	1.36
7	97	2	0.5	0.175	161	5.8	0.2	6.8	14	6.3	0.91	7	16	52	40	1.75	1.25
8	97	2	0.5	0.25	116	5.8	0.19	4.6	14	5.1	0.95	9	15	48	38	1.74	1.27
9	98.5	2	0.5	0.2	71	11.4	0.2	9.5	22	9.2	0.64	11	11	23	23	0.55	0.4
10	97	2	0.5	0.2	82	11	0.2	9.7	10	11.5	0.88	9	11	49	49	0.68	0.57
11	97	1.8	0.5	0.2	112	12.6	0.17	9.6	16	8.8	0.9	9	11	47	48	0.7	0.57
12	97	2.4	0.5	0.2	32	10	0.22	9.1	21	9.1	0.7	10	11	26	26	0.57	0.38
13	97	2	0.25	0.2	112	8.2	0.21	9.7	13	12	0.85	6	11	43	45	0.67	0.59
14	97	2	0.75	0.2	46	11.2	0.22	9.7	8	9	0.7	12	10	22	20	0.5	0.37
15	97	2	0.5	0.175	87	10.6	0.18	9.6	64	8.8	0.92	8	11	44	45	0.68	0.58
16	97	2	0.5	0.25	113	6.18	0.47	9.4	33	9.2	0.63	7	10	31	31	0.61	0.44

Las características de la columna son las siguientes:

- 1 columna de destilación reactiva.
- 2 columna de regeneración y 4 columnas de destilación normal.
- La columna 1 y la columna 2 contienen ácido en la fase líquida.
- La separación de los isómeros es conseguida en la columna 1 mientras el isómero más reactivo es regenerado en la columna 2.
- La columna 1 cuenta de: 70 a 150 platos.
- La columna de regeneración (columna 2) de: 10 a 20 platos.
- Agente de desplazamiento: ácido trifluoroacético.
- Disolvente: formamida.

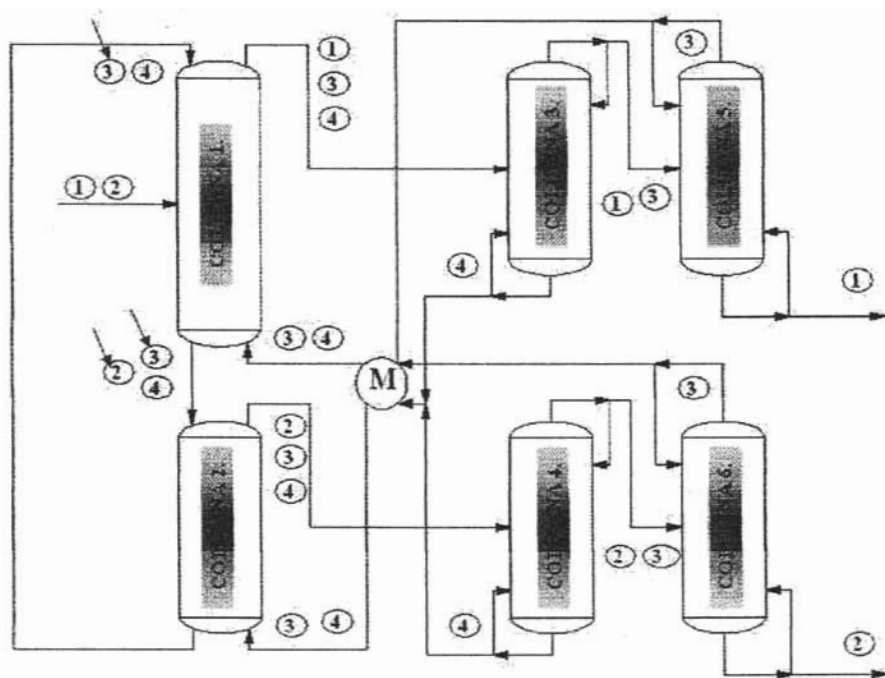


Figura 8. Proceso de destilación reactiva para la separación de isómeros. El componente 1 es el isómero menor (3 - picolina), 2 es el más reactivo (4 - picolina), 3 es el agente de desplazamiento y 4 el solvente. Las componentes resaltados con la flecha son los componentes enriquecidos (sales de piridina). La columna 1 es la columna de destilación reactiva, la columna 2 es la columna de regeneración y las columnas 3 a 6 columnas de destilación normales.

Para suministrar los datos a la red se siguen los pasos considerados en el Caso I, producción de MTBE. El paso 7 y el paso 8 variaran de la siguiente forma:

7.

Se definen catorce entradas ya que estos parámetros son los que nos permiten alcanzar la separación de las piridinas. Las variables que nos permiten alcanzar la separación son por lo tanto la pureza, y las composiciones en cada una de las columnas estos parámetros son los que se definen como salidas de nuestro sistema.

Tabla IX.4. Definición de catorce entradas y tres salidas de la red neuronal para el caso de Acetato de etilo.

NOMBRE DE LA VARIABLE.	PUREZA	K21	X1F	ZA	N1	V/F1	Y3B1	L/F	N2	V/F2	Y3B2	N3	N4	N5	N6	a13	K13
TIPO DE VARIABLE.	A	I	I	I	I	I	A	I	I	I	A	I	I	I	I	I	I
MÍNIMO.	97	1.8	0.25	0.17	32	4.1	0.15	4.6	8	5.1	0.52	6	10	22	20	0.5	0.37
MÁXIMO.	98.5	2.4	0.75	0.25	288	12.6	0.47	9.7	64	12	0.95	12	26	62	49	1.86	1.36

8.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.5.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 14, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 3, salidas.

A continuación se presentan algunos otros casos donde se ha encontrado una aplicación prometedora para la destilación reactiva aunque en el presente trabajo no se incluyen.

#### 4.1.5 HIDRÓLISIS DE ESTERES.

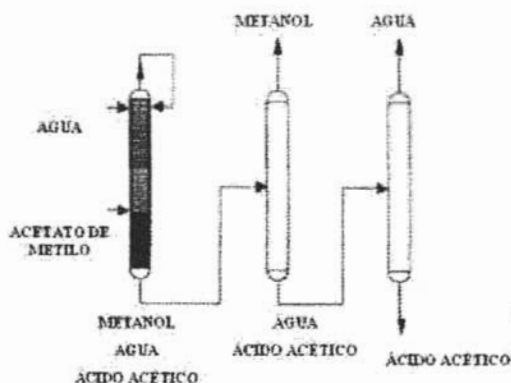
Una mezcla de agua – acetato de metilo es producida en grandes cantidades por la purificación de ácido teraftálico (PTA). La producción de alcohol polivinílico (PVA) también produce grandes cantidades de acetato de metilo (1.68 kg / kg PVA). El acetato de metilo es un disolvente comparativamente de bajo valor, fuera de aquí este tiene que ser vendido a un precio muy bajo. Alternativamente, este puede ser hidrolizado eficientemente para recuperar el metanol y el ácido acético para rehusarlo en el proceso.

El proceso convencional para la hidrólisis del acetato de metilo usa un reactor de lecho fijo seguido por un complejo arreglo de diferentes columnas de destilación / extracción. Por el infavorable equilibrio (constante de equilibrio de 0.14 – 0.2) y las grandes cantidades de acetato de metilo que no se convierte necesita ser separado y reciclado. La reacción es llevada a cabo en un reactor de lecho fijo y las corrientes de producto contienen a los 4 productos. Esto necesita cuatro columnas adicionales para separar las corrientes del metanol y del ácido acético y reciclar el acetato de metilo no convertido a lo largo con el metanol al reactor.

Fuchigami desarrolló un proceso de destilación reactiva a nivel laboratorio para la hidrólisis de acetato de metilo usando una resina catalizadora de intercambio iónico en una forma especial (figura 9). Cambiando el proceso convencional a un proceso de destilación reactiva puede eliminar muchos pasos complicados. El uso de un catalizador sólido y ácido obvia la necesidad para pasar la recuperación del ácido y los materiales para una construcción exótica. La resina fue moldeada en pellets de 7 mm X 7 mm utilizando polvo de polietileno. La columna de destilación fue directamente empacada con estos pellets, los cuales jugaron un punto clave entre ambos, el catalizador y el empaque.



## PROCESO DE DESTILACIÓN REACTIVA.



## PROCESO TRADICIONAL.

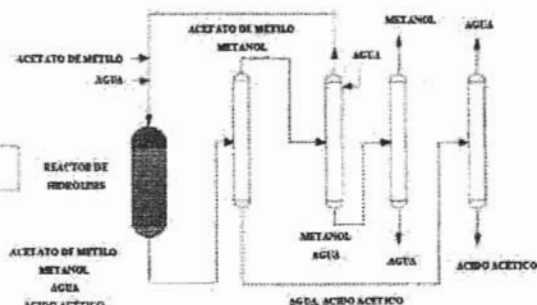


Figura 9. Destilación reactiva y proceso tradicional para la hidrólisis del acetato de etilo.

El agua es alimentada en la parte alta de la sección reactiva y el acetato de metilo es introducido en el fondo de la sección reactiva. La columna es operada bajo reflujo total del azeótropo de acetato de metilo – metanol. La sección de agotamiento agota todo el acetato de metilo y el producto de los fondos está esencialmente libre de acetato de metilo. El producto de fondos, el cual contiene ahora solamente metanol, agua y ácido acético puede ser fácilmente separado usando dos columnas en serie dando metanol y ácido acético como productos. Así, este proceso elimina dos piezas clave del equipo del proceso convencional: primero la columna de lavado de agua para la separación del metanol del acetato de metilo y segundo la columna de enriquecimiento de metanol del metanol diluido en el agua. Conversiones de alrededor del 99 % son conseguidas en este proceso. Los consumos energéticos ahorrados por este proceso son alrededor del 50 % de los que son utilizados por los procesos convencionales. La reacción también ha sido investigada usando una columna de destilación reactiva de lecho fluidizado en la cual las partículas del catalizador son mantenidas en suspensión sobre una etapa de destilación (Sundmacher y col., 2003).

#### **4.1.6 HIDRATACIÓN / DESHIDRATACIÓN.**

La hidratación del óxido de etileno a etilenglicol ha recibido también considerable atención por los beneficios potenciales que la destilación reactiva puede ofrecer para esta reacción. La reacción es exotérmica y el calor puede ser utilizado efectivamente en la destilación reactiva; además, el control sobre la temperatura que es deseable para evitar la formación de dietilenglicol, puede ser fácilmente conseguido en la destilación reactiva. Esta es una operación de múltiples alimentaciones en la cual el óxido de etileno es alimentado en el fondo de la columna y la alimentación del agua puede ser introducido a diferentes localizaciones en la sección superior. La columna es operada bajo reflujo total (Sundmacher y col., 2003; Monroy y col., 1999; Broekhuis y col., 1994).

La posibilidad de hidratación de varias olefinas tales como el isobutileno, propileno, isoamileno y ciclohexeno, ha sido también suficientemente explorado en estudios separados. En muchos casos, el alcohol, siendo un componente de alto punto de ebullición, es recolectado en el fondo de la columna operada bajo reflujo total. La hidratación de ciclohexeno representa un ejemplo peculiar del equilibrio vapor – líquido – líquido en una columna de destilación reactiva: un tema que no ha sido estudiado a profundidad.

#### **4.1.7 HIDROGENACIÓN / HIDRODESULFURACIÓN / DESHIDROGENACIÓN.**

La hidrogenación en la destilación reactiva es una clase típica de sistemas de reacción en la cual uno de los componentes no es condensable bajo las condiciones de operación. La destilación hidrogenativa para la conversión de isoforeno a trimetil, ciclohexanona ha sido practicada desde los 60's. Recientemente muchas reacciones de hidrogenación o hidrosulfuración han sido investigadas y comercializadas suficientemente usando la destilación reactiva. Los siguientes son algunos ejemplos importantes.

##### **4.1.7.1 BENCENO A CICLOHEXANO.**

El benceno es una impureza indeseable en la gasolina. Los procesos de destilación reactiva desarrollada por CR&L, mostrado en la figura 9, usa un catalizador soportado en

níquel a altas temperaturas (260 – 280 ° C) y a altas presiones (6 atm) y ofrece altas ventajas aparte de la alta selectividad de separación. La destilación reactiva facilita un eficiente contacto entre el hidrógeno y el benceno, substancialmente la remoción del calor de reacción, un buen control de temperatura y el lavado del catalizador en el mismo equipo incrementa su operabilidad (Sundmacher y col., 2003).

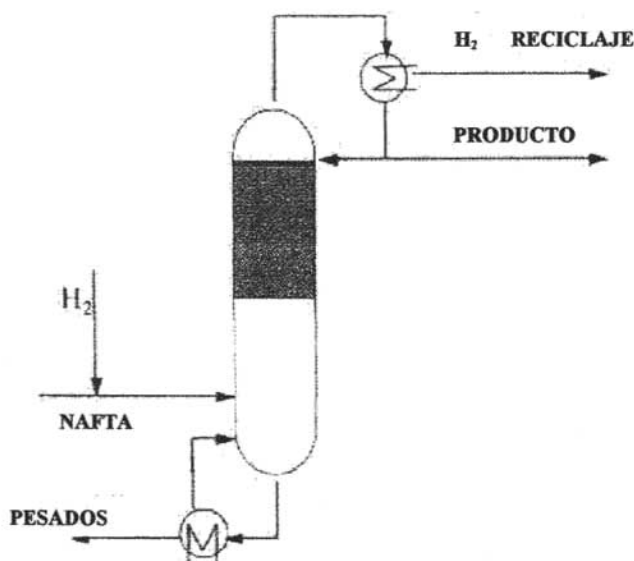


Figura 10. Proceso de destilación reactiva para la hidrogenación de aromáticos (remoción de benceno de los ligeros reformados).

#### 4.1.7.2 HIDROGENACIÓN SELECTIVA DE CORRIENTES DE C<sub>4</sub>.

La hidrogenación selectiva de butadieno de corrientes con C<sub>4</sub> es esencial para su conversión a butenos normales para evitar el alto consumo y los altos costos de regeneración de los ácidos en las unidades de alquilación. La tecnología de destilación reactiva ofrecida por CR&L para las corrientes de C<sub>4</sub> hidrogena selectivamente el butadieno en las mismas columnas que fueron usadas para la producción de MTBE. Las columnas de MTBE existentes pueden ser convenientemente modificadas para lograr este propósito. El contenido de butadieno puede ser reducido a menos de 100 ppm (Sundmacher y col., 2003).

#### 4.1.7.3 HIDROGENACIÓN DE PENTADIENO.

Para alquilación de  $C_5$ , o para producción de TAME, la remoción de pentadieno es requerida pues este incrementa el consumo de ácidos en alquilación y ensucia la unidad para producción de TAME. El catalizador de hidrogenación simple es completamente sensible a la presencia de mercaptanos presentes en esta corriente desde los cat crackers y los cokers, y la remoción mercaptana también se vuelve necesaria para una hidrogenación efectiva. Sin embargo la tecnología de CR&L para la remoción de pentadienos consigue ambos objetivos: la hidrogenación del pentadieno y la remoción de mercaptanos en la misma unidad. Los mercaptanos reaccionan con las olefinas en la presencia del catalizador para formar sulfuros olefinicos y, siendo componentes de alto punto de ebullición, pueden ser fácilmente fraccionados<sup>6</sup> como productos en los fondos. En este punto la destilación reactiva elimina el paso de la remoción de los mercaptanos efectivamente. El producto de la unidad de destilación reactiva es una alimentación ideal para la unidad de TAME o la unidad de alquilación (Sundmacher y col., 2003).

#### 4.1.7.4 HIDRODESULFURACIÓN, HIDRODENTROGENACIÓN E HIDROCRaqueo.

Como la hidrogenación, la hidrodésulfuración (HDS) de varias fracciones de destilados del aceite crudo, gas de aceite al vacío, y quizás los efluentes de una unidad FCC (Fluid Catalytic Cracker) puede ser desarrollado efectivamente en una columna de destilación reactiva. Los mercaptanos y los tiofenos pueden ser convertidos a compuestos no azufrosos y el  $H_2S$  en la presencia de un catalizador para hidrogenación sobre un soporte ácido que facilita el hidrocraqueo. HDS en destilación reactiva requiere relativamente condiciones ligeras tales como bajas presiones parciales del hidrógeno. Junto con HDS, la hidrodeshidrogenación (HDN) también toma lugar en esta unidad. Los gases ascendentes quizás sean reciclados a una unidad de destilación de crudo para facilitar un eficiente agotamiento. La destilación reactiva ha sido útil en el hidrocraqueo de elementos de corrientes de petróleo pesados a componentes mas ligeros y la subsecuente hidrogenación de

---

<sup>6</sup> Destilados.

los productos ligeros insaturados, los productos tienen puntos de ebullición bajos y son fácilmente separados fuera de la columna de destilación (Sundmacher y col., 2003).

#### **4.1.8 CLORACIÓN.**

Muchos hidrocarburos clorados que siguen un mecanismo de radicales libres están asociados con los problemas de una pobre selectividad hacia los productos intermedios. Desde que muchas veces allí tiene que suceder una diferencia distinta entre las volatilidades de los varios productos clorados, la destilación reactiva puede ser una apropiada elección de un reactor para obtener mejores selectividades hacia el producto clorado particular. El ejemplo importante de relevancia comercial es la fotocloración de aromáticos tales como benceno o tolueno. Como la hidrogenación, este proceso está también asociado con el uso de un gas que no se condensa (cloro) y así su perfil de flujo haría un impacto significativo en las consideraciones de diseño (Sundmacher y col., 2003).

#### **4.1.9 ACETALIZACIÓN Y KETALIZACIÓN.**

Acetalización y Ketalización, como la esterificación son también importantes reacciones candidatas para la destilación reactiva. Esta es una reacción reversible entre aldehídos / cetonas y alcoholes que genera una molécula de agua con una molécula de acetal / cetal. Varios acetales, tales como metilal y dioxalano, son solventes útiles en la industria química. Cola y otros estudiaron esta reacción en una columna de destilación reactiva batch y continua; como se muestra en la figura 11, con un análisis teórico de múltiples reacciones en la columna de destilación reactiva. A lo largo con el acetal, la formación de dímeros y hemicetales también toma lugar con conversiones substanciales. Esto fue encontrado que en sistemas cerrados, la conversión es 85 % con rango molar de 6:1 de metanol por formaldehído; mientras que, la conversión en una columna de destilación reactiva es cercana al 99 % con un rango molar de 3:1 (Sundmacher y col., 2003).

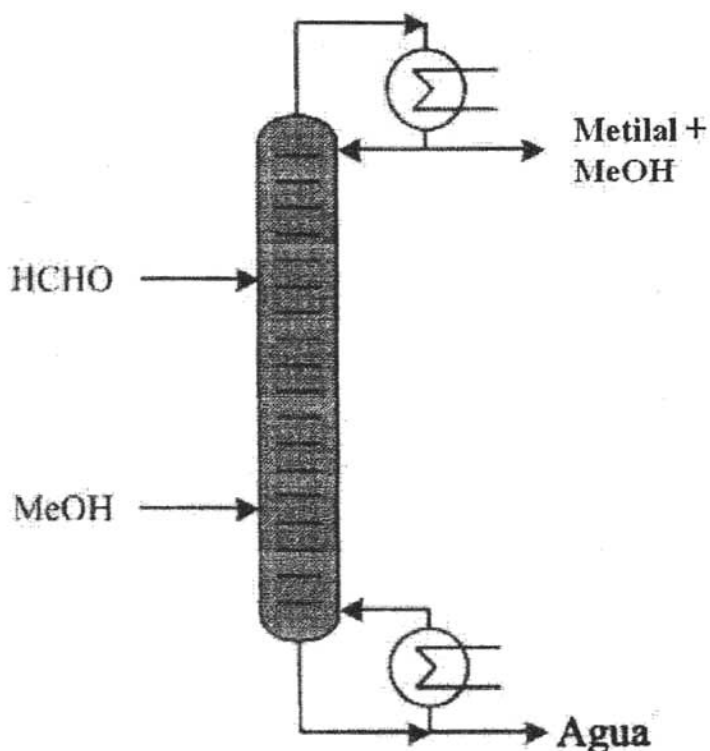


Figura 11. Proceso de destilación reactiva para la producción de metilal a partir de metanol y formaldehído.

#### 4.1.10 NITRACIÓN.

El uso de solo ácido nítrico para las reacciones de nitración es económicamente atractivo, no solo por la eliminación del ácido sulfúrico sino también por el problema de la disposición del ácido gastado. Algunas aplicaciones reportadas van desde usar el ácido nítrico como un agente nitrante y en trabajos más recientes en una aplicación azeotrópica o como un agente nitrante también ha sido utilizado, con las sustancias aromáticas en exceso. El agua formada por nitración fue removida, junto con el exceso de compuestos aromáticos, por destilación azeotrópica.

Los límites de los productos nitro fueron no mayores que el 35 % teórico, basados en los aromáticos; o 60 %, basados en el ácido nítrico ( $\text{HNO}_3$ ), a menudo un poco lejos.

Ha sido establecido que los intervalos de reacciones de nitración de aromáticos en ácido nítrico acuoso con concentraciones entre 24 y 41 % en mol (52 – 71 % peso / peso) son comparables a las obtenidas en mezclas de ácidos y el mecanismo de reacción es similar en los dos medios. El problema de usar ácido nítrico acuoso para la separación de compuestos con cadenas nitro es que el agua formada de la reacción,



rápidamente reduce la acidez así que los rangos de reacción se vuelven susceptiblemente bajos y los productos son pobres. Sin embargo el ácido nítrico y el agua forman una mezcla azeotrópica de composición igual a 38 % mol (68 % peso / peso). Así el agua excedente es removida, tan rápido como esta se forma en la ecuación (5.2), por destilación fraccionada desde una mezcla reactiva de un aromático adherido al azeótropo, manteniendo así la concentración de  $\text{HNO}_3$  al nivel azeotrópico (Sundmacher y col., 2003; Belson, 1990).

## CAPITULO V. RESULTADOS OBTENIDOS.

### 5.1 REACCIONES DE ETERIFICACIÓN.

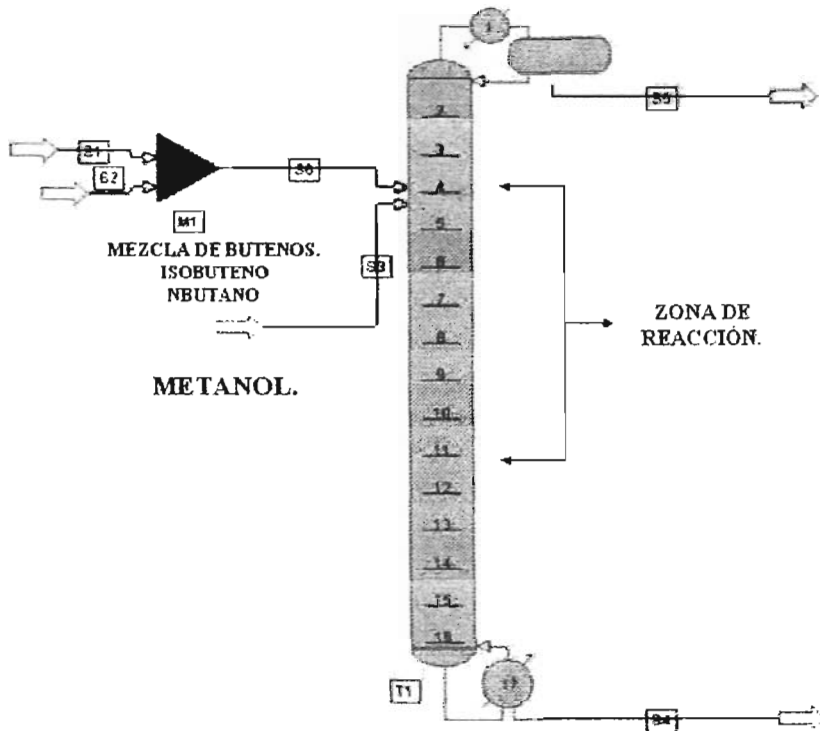


Figura 1. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de MTBE.

Learning rate(rango de aprendizaje): 0.0375.

Momentum coefficient(coeficiente de momentum): 0.05.

Initial weights(pesos iniciales): 0.5.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 12, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 15, salidas.

Tiempo de entrenamiento alcanzado: **7 minutos 34 segundos.**



Iteraciones desarrolladas: **100,809**.

Como se puede observar con los datos suministrados en las tablas I.4 y II.4 del capítulo IV se alcanzó una convergencia en 7 minutos con 45 segundos, con un número de iteraciones de 100,809. Esto demuestra como el uso de redes neuronales hace que sea posible obtener resultados en un tiempo muy corto, lo cual no sucedería con un simulador de procesos químicos. En las tablas siguientes observaremos los resultados generados por la red implementada.

La tabla I.5 muestran las variables que fueron consideradas como salidas para esta red. La tabla II.5 muestra los resultados obtenidos al implementar la red neuronal **REDMTBE**. Si se comparan ambas tablas se puede observar que la diferencia en los resultados es mínima ya que como comentamos en el capítulo II la red ajusta los factores de peso y la función umbral (bias) para encontrar, aquellos factores de peso y aquella función umbral que permitan hacer la corrida mas precisa y exacta al comparar el error global.

Las tablas III.5, IV.5 y V.5 muestran los pesos y la función umbral para cada una de las conexiones entre las capas de entrada, las capas ocultas y las capas de salida. Se puede notar que en las conexiones entre la capa de entrada y la primera capa oculta (tabla III.5) la mayoría de los valores de entrada son una parte importante en la red ya que estos valores generan efectos de excitación, lo cual nos da a entender que si no se hubiesen considerado quizás la red no hubiese convergido. Por otro lado las tablas IV.5 y V.5 muestran que las conexiones entre la capa oculta 1 y la capa oculta 2, y las conexiones entre la capa oculta 2 y la capa de salida presentan preferentemente efectos inhibitorios por lo cual no son muy importantes para la convergencia de nuestra red y quizás se podría omitir el uso de una segunda capa oculta.

Tabla I.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de producción de MTBE.

CASO.	TEMP. 4. (° K.)	TEMP. 5. (° K.)	PRESIÓN 4. (ATM.)	PRESIÓN 5. (ATM.)	FLUJO 4. (GMOL/S EG.)	FLUJO 5. (GMOL/S EG.)	XMTBE4	XMEOH4	IBUT4	XBUT4	XMTBE5	XMEOH5	IBUT5	XBUT5	CONVERS ION
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A
1	377.212	272.405	4.000	1.000	275.008	311.177	0.993	0.000	0.007	0.000	0.000	0.150	0.022	0.828	0.956
2	378.912	272.417	4.000	1.000	156.011	476.105	0.958	0.039	0.000	0.003	0.000	0.000	0.031	0.969	0.925
3	378.912	272.417	4.000	1.000	156.011	476.105	0.958	0.039	0.000	0.003	0.000	0.000	0.031	0.969	0.925
4	357.815	272.923	2.400	1.000	98.714	633.816	0.998	0.002	0.000	0.000	0.000	0.272	0.000	0.728	1.000
5	377.957	289.822	4.000	1.000	61.909	809.075	1.000	0.000	0.000	0.000	0.014	0.538	0.257	0.191	0.934
6	378.059	276.988	4.000	1.000	101.154	685.227	0.996	0.003	0.000	0.000	0.011	0.431	0.141	0.417	0.504
7	357.460	272.640	2.400	1.000	178.824	435.010	0.998	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000
8	357.794	272.932	2.400	1.000	124.797	588.102	0.998	0.001	0.000	0.000	0.000	0.270	0.000	0.730	1.000
9	334.434	273.066	1.700	1.000	0.001	739.189	0.921	0.000	0.000	0.079	0.000	0.100	0.000	0.900	1.000
12	402.268	272.247	7.000	1.000	98.748	758.013	0.993	0.000	0.000	0.007	0.000	0.426	0.000	0.574	0.999

Tabla II.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de producción de MTBE.

CASO.	TEMP. 4. (° K.)	TEMP. 5. (° K.)	PRESIÓN 4. (ATM.)	PRESIÓN 5. (ATM.)	FLUJO 4. (GMOL/S EG.)	FLUJO 5. (GMOL/S EG.)	XMTBE4	XMEOH4	IBUT4	XBUT4	XMTBE5	XMEOH5	IBUT5	XBUT5	CONVERSIÓN
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A	A
1	369.026	272.418	3.395	1.000	262.789	311.177	0.992	0.004	0.005	0.005	0.000	0.090	0.037	0.901	0.932
2	382.432	272.758	4.573	1.000	140.512	518.075	0.965	0.029	0.001	0.003	0.000	0.083	0.017	0.906	0.975
3	380.763	272.882	4.402	1.000	133.466	534.747	0.966	0.026	0.001	0.003	0.000	0.091	0.018	0.897	0.977
4	360.398	275.674	2.612	1.000	107.240	640.071	0.989	0.000	0.000	0.014	0.002	0.273	0.049	0.670	0.975
5	356.854	276.348	2.361	1.000	93.817	671.445	0.991	0.000	0.000	0.017	0.008	0.307	0.055	0.616	0.978
6	356.854	276.348	2.361	1.000	93.817	671.445	0.991	0.000	0.000	0.017	0.008	0.307	0.055	0.616	0.978
7	365.166	274.743	3.016	1.000	119.507	603.906	0.984	0.004	0.000	0.010	0.000	0.215	0.040	0.749	0.974
8	373.900	273.470	3.821	1.000	118.453	576.018	0.970	0.018	0.000	0.006	0.000	0.131	0.025	0.850	0.978
9	354.527	276.706	2.213	1.000	80.652	696.782	0.991	0.000	0.000	0.018	0.016	0.324	0.056	0.589	0.981
12	372.334	276.316	3.650	1.000	49.247	740.378	0.981	0.009	0.000	0.012	0.039	0.318	0.031	0.619	0.990

Pesos generados por capa:

Tabla III.5. Capa 1 (Entrada) – Capa 2 (Capa oculta).

Bias.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
-0.34	-0.37	-0.05	0.26	0.57	-0.41	-0.14	-0.15	-0.28	-0.27	-0.45	0.76	0.16
0.04	1.10	-0.97	0.38	-0.01	0.72	-0.35	-0.19	0.20	0.38	0.27	0.23	0.33
-0.29	0.17	0.29	0.10	-0.25	0.57	-0.56	-0.31	0.11	0.31	-0.17	-0.48	0.02
0.45	-0.80	-0.59	0.21	-0.12	-0.91	-0.22	0.63	0.37	0.42	0.05	0.38	0.02
0.10	-0.46	-0.18	0.31	0.65	0.23	0.22	-0.03	-0.14	-0.46	0.48	0.07	-0.61
-0.11	0.03	0.44	0.61	0.42	0.40	0.33	0.41	-0.34	-0.23	-0.13	-0.29	-0.31
-0.05	0.45	-0.54	-0.83	0.21	-0.34	-0.04	-0.30	-0.07	-0.14	-2.35	1.16	2.19
0.23	1.19	-0.49	-0.64	0.36	1.32	-0.52	-0.04	0.13	-0.52	-0.18	-0.17	0.36
0.65	-0.47	0.25	-0.01	-0.56	-0.15	0.35	-0.08	0.14	0.41	-1.13	0.59	1.18
0.65	-0.74	0.03	0.84	-0.20	-1.42	-0.13	0.34	-0.03	0.61	-0.68	0.51	0.45
-0.13	0.72	0.32	-0.51	0.14	-0.13	-0.43	0.63	0.16	0.08	1.40	-1.19	0.16
0.41	0.55	-0.02	0.62	-0.33	-0.10	0.02	-0.40	-0.42	-0.01	-0.07	0.46	0.26
-0.16	0.74	-0.11	-1.01	0.05	1.08	0.09	0.02	0.03	-0.25	-0.35	0.64	-0.26
0.06	0.16	-0.70	0.33	0.04	-0.57	0.47	-0.17	-0.12	0.07	-1.68	0.41	1.64
-0.38	0.67	0.28	-0.90	-0.53	1.29	-0.16	-0.46	0.13	-0.23	0.64	-0.59	0.01
-0.28	-0.60	0.40	0.50	-0.32	-0.22	-0.39	0.47	0.42	-0.02	0.61	-0.22	-0.68
-0.29	-0.44	0.49	0.45	0.41	0.31	-0.15	0.02	0.53	-0.46	1.40	-0.75	-1.66
0.05	-0.45	0.53	-0.20	0.62	-0.88	-0.17	-0.11	-0.33	-0.01	-0.08	0.16	0.82
-0.15	0.14	0.27	1.40	0.35	-0.92	0.28	0.33	0.22	0.30	0.09	-0.08	-1.00
-0.17	-0.67	-0.36	0.46	-0.12	-0.58	-0.11	0.27	0.39	-0.04	-0.21	0.20	0.03
0.32	1.23	-0.35	-0.70	0.19	0.10	-0.21	-0.22	0.31	0.27	0.12	0.04	0.34
-0.02	0.00	-0.02	0.28	-0.44	0.44	-0.21	0.00	0.14	0.47	0.16	0.17	-0.40
-0.74	1.09	-0.03	-0.14	0.25	0.17	-0.21	-0.26	0.11	0.13	0.67	-0.61	-0.34
-0.26	0.08	0.04	0.29	-0.35	-0.81	0.30	0.37	-0.47	0.47	-0.70	0.71	0.58
-0.46	-1.22	0.88	-0.15	-0.22	-0.81	0.18	0.39	0.20	-0.19	-0.38	-0.54	-0.52
-0.31	0.11	0.31	-0.71	-0.33	1.41	-0.60	0.14	0.59	0.14	1.06	-0.39	-1.12
-0.06	0.52	-0.58	-0.01	0.66	0.92	-0.11	0.03	-0.20	-0.45	-0.43	-0.02	0.46
0.26	-0.68	-0.42	0.72	-0.18	-0.68	0.62	0.41	0.14	-0.32	0.06	0.20	-0.62
0.14	-0.02	0.10	0.43	0.33	-0.48	0.15	0.11	-0.10	0.23	1.17	-0.74	-1.19
0.08	-0.08	0.38	0.52	0.59	0.38	0.27	-0.15	-0.23	-0.09	0.51	-0.80	-0.38

Tabla IV.5. Capa 2 (Capa oculta) – Capa 3 (Capa oculta).

Bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
0.46	0.06	0.41	0.49	0.39	0.26	0.21	0.11	0.05	0.08	0.00	0.25	0.14	0.02	0.14	0.26	0.21	0.26	0.31	0.27	0.16	0.03	0.08	0.13	0.34	0.52	0.27	0.14	0.18	0.14	0.21
0.23	0.40	0.40	0.00	0.62	0.33	0.11	0.62	0.28	0.35	0.10	0.56	0.18	0.36	0.54	0.03	0.23	0.12	0.24	0.24	0.37	0.05	0.41	0.03	0.14	0.27	0.51	0.23	0.42	0.06	0.47
0.15	0.15	0.03	0.35	0.36	0.12	0.43	0.36	0.16	0.63	0.06	0.37	0.17	0.32	0.24	0.40	0.06	0.32	0.02	0.55	0.16	0.09	0.30	0.06	0.41	0.08	0.60	0.23	0.62	0.40	0.12
0.16	0.50	0.42	0.52	0.31	0.46	0.35	0.06	0.08	0.42	0.56	0.48	0.35	0.15	0.53	0.72	0.20	0.67	0.09	0.59	0.11	0.30	0.19	0.41	0.31	0.07	0.70	0.39	0.38	0.30	0.33
0.14	0.45	0.58	0.48	0.00	0.61	0.38	1.04	1.01	0.22	0.23	0.00	0.35	0.08	0.53	0.51	0.00	0.48	0.05	0.73	0.39	0.57	0.25	0.18	0.28	0.78	0.48	0.62	0.65	0.20	0.11
0.37	0.44	0.04	0.10	0.30	0.18	0.03	0.94	0.12	0.67	0.28	0.82	0.40	0.62	0.20	0.26	0.54	0.71	0.35	0.30	0.16	0.51	0.31	0.42	0.12	0.11	0.04	0.43	0.03	0.38	0.19
0.28	0.35	0.65	0.20	0.31	0.28	0.56	0.91	1.06	0.12	0.85	0.26	0.39	0.96	0.75	0.61	0.52	0.76	0.28	0.74	0.45	0.86	0.37	0.33	0.29	0.79	0.47	0.34	0.55	0.72	0.01
0.35	0.34	0.42	0.10	0.13	0.49	0.31	0.60	0.19	0.04	0.25	0.39	0.25	0.48	0.11	0.09	0.51	0.07	0.24	0.34	0.37	0.15	0.17	0.26	0.22	0.13	0.61	0.02	0.49	0.29	0.48
0.38	0.66	0.39	0.35	0.62	0.08	0.40	0.79	0.52	0.91	0.73	0.90	0.05	0.19	0.93	0.72	0.62	0.56	0.79	0.29	0.07	0.44	0.39	0.70	0.57	0.73	0.67	0.52	0.07	0.52	0.48
0.24	0.41	0.46	0.32	0.36	0.12	0.46	0.73	0.32	0.38	0.72	0.16	0.45	0.41	0.49	0.49	0.21	0.28	0.33	0.10	0.09	0.42	0.31	0.08	0.43	0.40	0.56	0.18	0.40	0.38	0.28
0.04	0.44	0.14	0.03	0.06	0.57	0.44	0.37	0.44	0.55	0.54	0.06	0.18	0.28	0.47	0.03	0.47	0.73	0.26	0.50	0.45	0.53	0.21	0.13	0.09	0.14	0.72	0.29	0.14	0.07	0.01
0.60	0.06	0.50	0.57	0.65	0.14	0.27	1.08	0.29	0.68	1.02	0.10	0.20	0.56	1.06	0.44	0.02	0.18	0.03	0.29	0.61	0.32	0.55	0.80	0.72	0.58	0.37	0.25	0.68	0.03	0.53
0.58	0.56	0.05	0.17	0.44	0.15	0.26	0.70	0.16	0.01	0.40	0.51	0.38	0.43	0.57	0.97	0.28	0.13	0.39	0.77	0.43	0.01	0.63	0.13	0.51	0.41	0.66	0.29	0.21	0.19	0.17
0.30	0.08	0.36	0.41	0.56	0.08	0.09	0.55	0.24	0.10	0.26	0.17	0.45	0.59	0.04	0.23	0.03	0.38	0.02	0.77	0.23	0.23	0.09	0.23	0.34	0.18	0.52	0.22	0.05	0.74	0.60
0.01	0.10	0.23	0.08	0.19	0.61	0.70	1.44	0.02	0.62	0.17	0.23	0.16	0.37	0.86	0.09	0.78	1.34	0.49	0.25	0.17	0.27	0.02	0.27	0.73	0.25	0.63	0.15	0.16	0.89	0.30

Tabla V.5. Capa 3 (Capa oculta) – Capa 4 (Salidas).

Bias.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
-0.41	0.16	0.66	0.33	-0.04	-0.17	-0.34	-0.27	0.20	0.45	-0.63	0.80	-0.61	-0.36	0.01	-0.59
-0.11	-0.27	-0.04	0.08	0.23	-0.14	-0.36	-0.70	-0.82	-0.67	-0.36	-0.27	0.26	-0.17	0.26	0.90
-0.34	0.01	0.37	-0.29	-0.28	-0.35	-0.37	-0.12	0.43	0.66	-0.30	0.30	-0.73	-0.23	-0.18	-0.45
0.38	-0.01	0.36	0.09	0.36	0.02	0.55	0.21	0.50	-0.12	-0.22	0.60	0.18	-0.05	0.02	0.64
-0.17	-0.03	-0.09	0.23	0.05	-1.30	0.42	1.23	-0.38	-0.76	0.32	0.00	0.82	-0.58	0.58	-0.92
0.10	-0.20	0.46	-0.43	0.22	1.41	-0.15	-1.93	-0.45	0.00	0.06	0.19	-0.64	0.44	-0.12	1.14
-0.48	-0.02	-0.08	-0.36	0.97	-0.02	-0.71	0.85	-0.53	-1.38	0.67	0.23	1.30	0.18	0.24	0.61
0.43	-0.04	0.89	-0.48	-1.19	0.22	0.42	-0.31	0.15	1.84	-0.07	0.94	-1.54	-1.01	-0.48	-0.97
-0.39	0.30	0.05	-0.65	-0.64	-1.74	0.38	1.95	-0.40	-0.47	-0.25	0.60	0.25	-0.15	0.50	-0.95
-0.35	-0.47	-0.61	0.08	0.01	0.12	-0.10	-0.10	-0.47	-0.81	-0.37	-0.24	-0.06	0.94	-0.02	0.50
0.01	0.00	-0.32	-0.81	-0.47	1.27	-0.38	-0.61	-0.08	0.39	-1.14	-0.67	-0.07	-0.84	-1.02	1.64
-0.30	-0.10	0.21	0.15	0.48	0.56	-0.90	-0.30	0.13	-1.42	-0.30	-0.38	0.78	-0.21	-0.67	0.83
-0.40	-0.62	-0.27	-0.05	-0.06	-0.40	-0.04	-0.20	-0.47	-0.62	0.02	-0.71	0.62	0.77	0.19	0.06
-0.03	-0.31	0.28	0.35	0.21	-0.21	0.99	0.21	0.83	0.68	0.09	0.05	-0.68	-0.43	0.17	-1.19
0.12	0.58	-0.23	0.42	-0.22	0.37	-0.13	-0.30	0.40	0.52	-0.23	0.66	0.38	0.15	-0.30	0.47

Tabla VI.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de producción de MTBE.

	TEMP. 3.	TEMP. 6.	PRES. 3.	PRES. 6.	FLUJO 3.	FLUJO 6.	X3	X16	X26	ETAPA 3	ETAPA 6	REFLUJO L/D
<b>EJEMPLO</b>	355.000	310.000	10.000	11.000	200.000	594.000	1.000	0.328	0.672	4.000	10.000	3.000
<b>REDEJEM1</b>	355.000	310.000	10.000	11.000	200.000	594.000	1.000	0.328	0.672	4.000	10.000	3.000
<b>ERROR</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>EJEMPLO</b>	340.000	354.519	9.000	11.000	290.000	595.000	1.000	0.328	0.672	11.000	8.000	4.000
<b>REDEJEM2</b>	340.000	354.519	9.000	11.000	290.000	595.000	1.000	0.328	0.672	11.000	8.000	4.000
<b>ERROR</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>EJEMPLO</b>	330.000	310.000	2.000	5.000	295.000	604.000	1.000	0.339	0.661	9.000	10.000	10.000
<b>REDEJEM3</b>	330.000	310.000	2.000	5.000	295.000	604.000	1.000	0.339	0.661	9.000	10.000	10.000
<b>ERROR</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Tabla VI.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de producción de MTBE (Continuación).

	TEMP. 4.	TEMP. 5.	PRES. 4.	PRES. 5.	FLUJO 4.	FLUJO 5.	XMTBE 4	XMEOH4	IBUT4	XBUT4	XMTBE5	XMEOH 5	IBUT5	XBUT5	CONVERSION
<b>EJEMPLO</b>	358.5020	273.1225	2.4000	1.0000	91.8885	616.2875	0.9739	0.0256	0.0000	0.0006	0.0000	0.2020	0.0000	0.7980	1.0000
<b>REDEJEM1</b>	357.6296	277.6550	2.5962	1.0000	51.2253	744.9851	0.9876	0.0000	0.0000	0.0191	0.0524	0.3616	0.0486	0.5213	0.9898
<b>ERROR</b>	0.0024	0.0163	0.0756	0.0000	0.4425	0.1728	0.0139	1.0000	1.0000	0.9695	1.0000	0.4414	1.0000	0.3468	0.0102
<b>EJEMPLO</b>	426.0630	272.6388	10.3692	1.0000	57.2267	666.0232	0.9184	0.0767	0.0015	0.0034	0.0000	0.0011	0.0000	0.9989	0.9996
<b>REDEJEM2</b>	424.6810	271.8688	10.5494	1.0000	55.4491	630.5563	0.9230	0.0770	0.0010	0.0000	0.0225	0.0091	0.0000	0.9831	0.9872
<b>ERROR</b>	0.0032	0.0028	0.0171	0.0000	0.0311	0.0533	0.0050	0.0038	0.3512	1.0000	0.9991	0.8787	1.0000	0.0158	0.0123
<b>EJEMPLO</b>	358.2063	272.8678	2.5000	1.0000	242.9099	449.9914	0.9921	0.0000	0.0041	0.0038	0.0000	0.2864	0.0000	0.7136	0.9951
<b>REDEJEM3</b>	376.5542	276.4437	4.5522	1.0000	45.1432	736.4692	0.9743	0.0208	0.0000	0.0089	0.0811	0.3266	0.0195	0.5970	0.9905
<b>ERROR</b>	0.0487	0.0129	0.4508	0.0000	0.8142	0.3890	0.0179	1.0000	1.0000	0.5760	1.0000	0.1230	1.0000	0.1633	0.0046

La tabla VI.5 presenta 3 ejemplos que fueron separados de los valores originales (Tabla I.4) lo que se hizo fue comparar la aplicabilidad de la red neuronal con los resultados obtenidos experimentalmente, como se puede observar las variaciones entre los resultados obtenidos por la red y los resultados con los ejemplos muestran ciertas variaciones que pueden considerarse razonables al momento de compararlas y determinar el error con la formula:

$$Error = \frac{\text{Valor Mayor} - \text{Valor Menor}}{\text{Valor Mayor}} * 100 \dots\dots(5.1)$$

Y al calcular el error promedio para cada uno de los casos se tiene lo siguiente:

Tabla VII.5. Errores generados por cada uno de los ejemplos.

<b>EJEMPLO 1.</b>	
Error.	5.808%
<b>EJEMPLO 2.</b>	
Error.	1.919%
<b>EJEMPLO 3.</b>	
Error.	3.155%

Como se puede ver en la tabla VII.5 los errores obtenidos al comparar el ejemplo desarrollado y el desempeño de la red muestran que la diferencia entre hacer la corrida de manera experimental y hacer la corrida usando esta red será mínima.



## 5.2 REACCIONES DE ESTERIFICACIÓN CON ALCOHOLES / OLEFINAS.

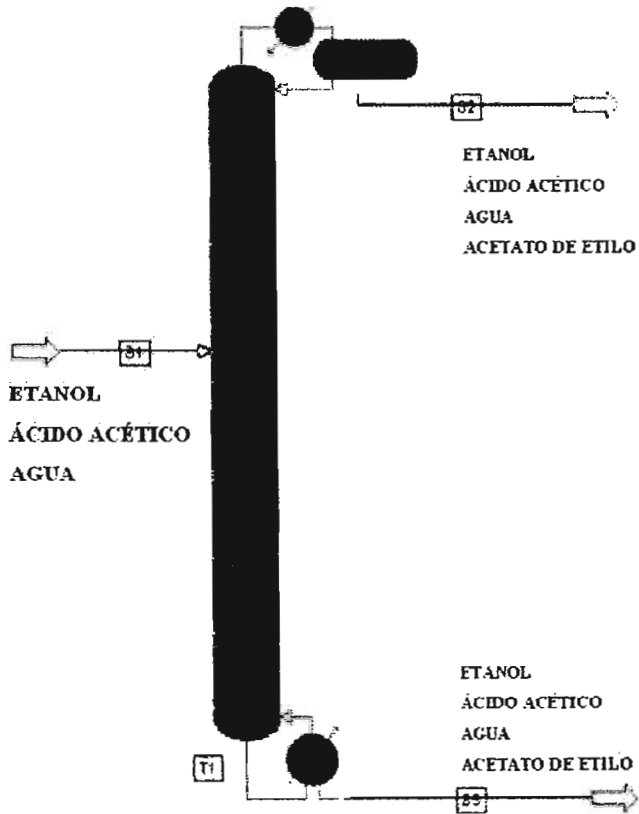


Figura 2. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de Acetato de Etilo.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.5.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 11, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 11, salidas.

Tiempo de entrenamiento alcanzado: **0 minutos 34 segundos**.

Iteraciones desarrolladas: **7,814**.

Aquí se nota que con los datos suministrados en las tablas III.4 y IV.4 del capítulo IV se alcanza la convergencia de la red en 34 segundos, con un número de iteraciones de 7,814. Nuevamente se puede ver como los resultados son alcanzados en un lapso de tiempo muy corto; lo cual nuevamente, no sucedería con un simulador de procesos químicos. En las tablas siguientes observaremos los resultados generados por la red implementada.

La tabla VIII.5 muestra las variables que fueron consideradas como salidas para esta red. La tabla IX.5 muestra los resultados obtenidos al implementar la red neuronal **REDETAC**. Si se comparan ambas tablas se puede observar que la diferencia en los resultados es casi nula de no ser por algunas de las variables.

Las tablas X.5, XI.5 y XII.5 muestran los pesos y la función umbral para cada una de las conexiones entre las capas de entrada, las capas ocultas y las capas de salida. La mayoría de estos factores de peso y la función umbral presentan preferentemente efectos inhibitorios por lo cual quizás sea solo necesario asignar una capa oculta para este caso.

Tabla VIII.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de Acetato de Etilo.

NOMBRE DE VARIABLE.	FLUJO 2. (KMOL/HR)	FLUJO 3 (KMOL/HR)	XACETIC2	XETANOL2	XAGUA2	XEACTAT2	XACETIC3
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A
2	0.004	2.6035E-03	0.0004	0.3521	0.3042	0.3433	0.6436
3	0.005	7.5548E-04	0.0000	0.3253	0.3112	0.3634	0.2498
4	0.004	2.1257E-03	0.0001	0.1582	0.3866	0.4551	0.9992
5	0.000	4.9056E-03	0.0076	0.0000	0.9920	0.0004	0.2693
6	0.000	4.9625E-03	0.0092	0.0000	0.9908	0.0000	0.3825
7	0.000	6.3688E-03	0.0002	0.0000	0.0000	0.9998	0.5050
8	0.002	1.0876E-02	0.0104	0.2467	0.2578	0.4852	0.0000
9	0.002	1.0905E-02	0.0103	0.2446	0.2561	0.4890	0.0000
10	0.000	6.7950E-03	0.0796	0.1797	0.2460	0.4946	0.0419
12	0.000	6.9278E-03	0.1628	0.5415	0.0008	0.2949	0.4108
14	0.006	1.6049E-04	0.3723	0.6218	0.0025	0.0033	0.9736
15	9.40E-05	1.3515E-02	0.0066	0.0000	0.2644	0.7290	0.0498

Tabla VIII.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de Acetato de Etilo (Continuación).

<b>NOMBRE DE VARIABLE.</b>	<b>XETANOL3</b>	<b>XAGUA3</b>	<b>XEACTAT3</b>	<b>CONVERSION.</b>
<b>TIPO DE VARIABLE.</b>	A	A	A	A
2	0.3092	0.00000	0.0471	0.4775
3	0.0652	0.00003	0.6850	0.9412
4	0.0008	0.00000	0.0000	0.3431
5	0.3132	0.0002	0.4173	0.5903
6	0.2449	0.0001	0.3724	0.4120
7	0.4942	0.0000	0.0008	0.9830
8	0.0000	1.0000	0.0000	0.9922
9	0.0000	1.0000	0.0000	0.9923
10	0.8853	0.0000	0.0728	0.9094
12	0.3584	0.2068	0.0239	0.1025
14	0.0253	0.0000	0.0011	0.2118
15	0.1592	0.7909	0.0001	0.7901

Tabla IX.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de Acetato de Etilo.

NOMBRE DE VARIABLE.	FLUJO 2. (KMOL/HR)	FLUJO 3 (KMOL/HR)	XACETIC2	XETANOL2	XAGUA2	XEACTAT2	XACETIC3
TIPO DE VARIABLE.	A	A	A	A	A	A	A
2	0.004	0.003	0.003	0.352	0.304	0.344	0.644
3	0.005	0.001	0.000	0.327	0.312	0.363	0.250
4	0.004	0.002	0.000	0.161	0.388	0.453	0.999
5	0.000	0.005	0.011	0.000	0.992	0.000	0.267
6	0.000	0.005	0.006	0.007	0.989	0.002	0.385
7	0.000	0.006	0.000	0.000	0.000	1.000	0.505
8	0.002	0.011	0.010	0.245	0.257	0.487	0.000
9	0.002	0.011	0.010	0.245	0.257	0.488	0.000
10	0.000	0.007	0.079	0.181	0.246	0.494	0.042
12	0.000	0.007	0.163	0.540	0.001	0.294	0.410
14	0.006	0.000	0.372	0.622	0.003	0.004	0.974
15	0.000	0.013	0.009	0.010	0.266	0.727	0.053

Tabla IX.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de Acetato de Etilo (Continuación).

<b>NOMBRE DE VARIABLE.</b>	<b>XETANOL3</b>	<b>XAGUA3</b>	<b>XEACTAT3</b>	<b>CONVERSION.</b>
<b>TIPO DE VARIABLE.</b>	<b>A</b>	<b>A</b>	<b>A</b>	<b>A</b>
2	0.309	0.002	0.051	0.476
3	0.066	0.000	0.684	0.942
4	0.001	0.000	0.000	0.343
5	0.311	0.000	0.419	0.585
6	0.247	0.005	0.372	0.417
7	0.494	0.000	0.003	0.982
8	0.000	0.999	0.000	0.992
9	0.000	0.999	0.000	0.992
10	0.885	0.000	0.072	0.911
12	0.358	0.206	0.023	0.102
14	0.025	0.000	0.001	0.212
15	0.160	0.793	0.000	0.789

Pesos generados por capa:

Tabla X.5. Capa 1 (Entrada) – Capa 2 (Capa oculta).

bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
-0.149	-0.610	0.075	0.160	-0.077	0.021	-0.303	-0.107	-0.178	0.105	-0.520	0.835
0.176	1.018	-0.106	0.432	-0.992	0.933	-0.399	0.092	1.577	-0.203	2.027	0.795
0.012	-0.789	0.302	0.347	0.886	-0.714	0.241	-0.741	-0.701	1.126	-0.793	-0.834
0.409	-0.922	-0.043	0.131	-0.475	0.660	-1.750	0.180	1.228	0.678	1.217	0.499
0.150	-1.653	-0.195	-0.099	0.055	-0.009	0.428	-0.147	-0.472	0.089	-1.036	0.501
-0.137	-0.161	0.126	-0.031	0.289	-0.016	0.887	0.387	-1.356	-0.190	0.016	-0.108
-0.028	0.858	-0.073	0.057	0.331	-0.530	0.254	-0.410	0.695	-0.447	-0.041	-0.091
0.760	2.497	0.386	0.261	-1.232	1.593	-1.820	0.690	0.997	-0.539	3.322	0.306
0.294	-1.684	0.153	0.220	0.767	-0.696	-0.173	-1.116	-0.398	1.109	-1.507	-1.971
0.297	-1.305	0.264	0.152	-0.457	0.321	-1.672	0.022	0.903	0.566	0.161	0.604
-0.168	1.454	0.230	-0.184	0.716	-0.592	0.735	0.122	-0.456	-0.396	1.197	-1.603
0.207	0.682	0.127	0.261	0.271	-0.585	-0.182	-0.210	-2.153	-0.247	-1.029	-0.166
0.088	1.066	-0.047	-0.253	-0.004	-0.001	1.183	0.692	0.021	-0.991	-0.153	1.151
0.011	1.262	-0.174	0.246	-0.085	0.468	-1.056	0.330	-1.061	-0.606	0.813	-0.559
0.276	0.352	0.540	0.509	-0.226	0.478	-1.109	-0.253	1.360	0.191	0.868	-1.383
-0.052	-1.390	0.220	0.121	-0.675	0.376	-1.258	0.095	0.949	0.690	0.126	0.572
0.155	1.197	0.375	0.356	-0.107	0.779	-1.343	0.206	1.271	-0.088	0.413	-1.193
-0.113	-0.113	0.238	-0.289	-0.262	0.093	0.230	-0.004	0.052	-0.645	0.830	0.735
-0.245	0.440	0.113	0.247	0.281	-0.767	1.699	0.046	-0.380	0.043	-0.094	-0.336
-0.245	-1.116	-0.280	0.065	-0.308	0.096	0.916	-0.309	0.971	0.453	-0.357	1.544
0.322	0.342	0.089	-0.179	0.403	-0.760	1.460	-0.311	-0.023	0.310	-0.061	0.258
-0.002	-0.596	-0.038	0.257	-0.187	0.381	-0.293	0.123	0.159	1.069	-0.382	1.086
-0.324	-0.597	0.046	0.098	0.832	-0.911	1.418	-0.373	-0.137	0.647	-0.955	0.983
-0.443	0.117	-0.080	-0.096	0.258	-0.400	0.075	0.356	-2.359	0.336	-1.236	0.242
-0.090	0.705	0.248	0.019	-0.234	0.003	-0.186	0.621	0.433	-0.270	-0.745	-0.206
-0.015	-0.305	-0.025	-0.135	-0.128	-0.058	0.700	-0.047	0.563	0.415	0.539	-0.398
0.109	0.490	-0.119	0.280	-0.193	0.565	0.078	0.321	0.989	-0.975	0.092	0.758
0.208	1.851	0.001	0.151	-0.762	0.613	0.357	0.487	2.126	-1.263	0.821	1.175
0.013	-0.156	-0.093	-0.254	0.645	-0.157	-0.727	0.045	-1.353	0.771	-0.684	-0.923
-0.011	-1.047	0.106	-0.073	0.805	-0.605	0.967	-0.402	-0.776	0.619	-0.592	-0.256

Tabla XI.5. Capa 2 (Capa oculta) – Capa 3 (Capa oculta).

Bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
-0.11	0.07	0.28	0.16	0.76	0.65	-0.19	0.28	-1.33	1.12	0.71	-0.68	-0.70	-0.18	-0.87	0.58	0.88	0.40	0.06	0.03	0.98	-0.11	0.16	0.39	-0.83	-0.08	0.64	0.43	0.32	-0.35	0.17
-0.12	-0.12	1.30	-1.80	0.73	-0.24	-0.51	-0.45	1.48	-1.52	0.37	-0.39	-0.45	-0.06	0.44	0.30	0.13	0.49	0.71	-0.78	0.07	-0.61	-0.64	-1.25	-0.51	-0.05	-0.31	1.05	1.55	-0.66	-1.40
-0.01	0.78	0.93	-0.27	1.66	0.47	-0.34	-0.21	0.88	-0.54	1.77	-1.66	-0.88	-0.46	-0.41	-0.07	1.53	-0.20	0.33	-1.22	1.22	-0.32	0.93	0.15	-0.98	-0.22	-0.09	0.38	0.34	-0.34	0.07
0.40	-0.22	-0.43	1.08	-0.13	-0.08	1.03	0.43	-0.69	0.44	-0.15	0.80	1.50	0.24	0.73	-0.02	-0.18	-0.63	0.06	0.53	-0.34	0.89	0.07	0.48	1.18	-0.29	0.10	-0.40	-0.94	0.50	1.10
-0.32	0.35	-1.72	0.42	0.03	0.86	0.50	-0.63	-0.89	1.54	0.89	-0.89	1.28	-0.95	0.50	-0.81	0.46	-0.16	-0.15	-0.73	-0.67	-1.05	0.00	-0.25	1.03	-0.07	-0.58	-0.72	-2.32	1.50	0.27
0.06	0.47	-0.01	-0.79	-0.33	0.85	0.42	-0.79	-1.52	-1.26	-0.10	-1.56	-0.40	1.30	-0.78	-1.73	0.14	-1.62	0.58	0.35	1.44	0.30	1.04	1.21	0.13	-0.17	0.03	0.17	0.32	-0.99	0.09
0.15	-0.03	-1.10	0.06	-1.26	0.71	0.83	-0.59	-1.30	-0.29	-0.91	0.14	0.99	0.59	0.00	-1.52	-0.90	-1.50	0.15	0.94	0.04	0.57	0.63	0.42	1.56	-0.23	0.06	-0.03	-1.42	0.33	0.86
0.30	-0.22	0.05	-0.32	-1.73	-0.19	0.70	0.73	0.43	-1.19	-1.46	1.11	1.03	1.78	0.60	-0.78	-1.27	-0.05	0.48	0.94	-0.39	0.74	-0.56	0.28	0.73	0.56	0.05	0.55	1.22	-0.25	0.02
0.17	0.13	-0.11	-0.50	0.17	-0.59	-0.44	0.53	1.06	-0.83	0.09	-0.23	0.37	0.61	0.85	0.12	-0.33	1.14	-0.41	-0.41	-0.59	-0.33	0.30	-0.42	0.17	1.06	-0.72	0.46	0.84	0.58	-0.55
0.30	-0.22	0.93	-0.37	1.33	-0.54	0.41	-0.61	2.49	-0.71	0.64	0.13	0.00	-0.50	0.97	0.30	0.89	0.05	0.29	-0.39	-0.32	-0.61	0.45	-1.04	0.07	-0.32	0.47	-0.46	-0.29	0.06	-0.01
-0.08	-0.70	0.83	-0.89	-0.10	-0.75	-0.52	0.50	1.02	-0.07	-0.02	0.17	-1.07	-0.37	-0.23	1.13	-0.25	1.03	0.03	-0.01	-0.40	-0.05	-1.24	-1.22	-1.46	0.33	0.32	0.24	1.22	-0.66	-0.82
0.47	0.31	0.46	-0.10	-0.07	-0.13	0.30	-0.07	0.29	0.26	0.06	0.08	0.29	0.49	0.08	-0.17	0.40	0.05	0.05	0.36	0.07	0.31	0.35	0.00	-0.20	-0.18	0.26	0.32	0.38	-0.16	0.37
-0.39	-0.14	-1.16	0.87	-0.25	0.43	-0.55	0.27	-2.47	1.09	0.14	-0.68	-0.06	-0.40	-1.25	-0.49	0.15	-1.12	-0.24	0.28	0.59	0.72	0.11	1.16	-0.56	-0.24	0.24	-0.56	-0.88	0.12	0.74
0.48	-0.18	-0.60	0.56	-0.47	-0.12	0.94	0.04	-0.42	0.29	-0.28	0.70	0.81	0.22	0.60	-0.19	-0.28	-0.18	-0.03	0.85	-0.37	0.87	-0.28	0.71	0.52	-0.19	0.37	-0.61	-0.62	0.43	0.67
-0.40	0.31	-1.52	0.48	-0.73	0.66	0.02	-0.15	-2.65	1.51	-0.28	-0.43	0.50	-0.54	-0.69	-0.36	-0.08	-0.43	-0.79	-0.23	0.04	0.12	-0.40	0.45	0.52	0.07	-0.09	-0.46	-1.57	0.64	0.49



Tabla XII.5. Capa 3 (Capa oculta) – Capa 4 (Salidas).

Bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
-0.35	0.87	0.38	0.95	-1.26	-1.72	2.26	0.08	0.09	-0.70	0.89	-0.66	0.29	-0.12	-1.23	-1.31
0.13	-0.25	-0.15	-1.32	0.18	-0.28	-2.37	1.73	0.66	-0.12	1.01	-1.77	0.26	-1.05	-0.16	-0.64
0.78	0.50	-0.09	-1.24	-1.76	-0.48	-0.23	0.93	-1.43	0.75	0.21	2.20	0.37	0.19	-1.30	0.16
0.20	-0.15	0.13	-0.85	-0.85	-1.79	2.06	-0.46	-1.07	0.08	0.78	1.93	0.49	-0.42	-0.13	-0.64
-0.33	-0.61	-2.06	1.72	1.12	0.68	-1.36	-0.89	-0.15	1.30	-0.51	-1.26	-0.68	-1.34	0.29	-1.18
-0.60	0.53	1.81	-0.90	0.15	0.48	0.41	0.27	1.72	-1.81	-0.26	-1.25	-0.43	1.38	-0.07	0.79
-0.40	0.46	2.44	0.67	-1.43	1.85	1.31	-1.07	1.25	-0.87	-0.39	0.29	-0.32	0.54	-0.93	0.79
-0.52	0.91	-0.67	0.57	0.33	0.38	-1.58	-1.67	1.20	0.30	-2.53	1.20	-0.62	0.63	0.84	2.00
0.48	-1.33	-1.09	-1.73	-0.43	-1.73	-0.13	2.72	-0.61	0.52	2.20	-1.76	0.14	-2.50	-0.32	-2.11
-0.20	-0.92	-1.37	0.54	1.70	-0.65	0.03	-1.69	-2.36	-1.01	0.37	0.16	-0.02	1.65	1.07	-0.73
0.11	0.26	-1.85	0.66	0.39	-1.11	1.37	0.81	-0.51	0.72	-1.23	-0.68	-0.04	0.60	0.60	0.27

Tabla XIII.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de Acetato de Etilo.

	TEMP. 1	PRESIÓN 1	FLUJO TOTAL	X ETANOL	X ACETIC	X AGUA	PESO MOLECUL. AR.	ETAPA ALIMENTA CON	REFLUJO L/F	TEMP. 2	TEMP. 3	PRES. 2
<del>EJEMPLO 1</del>	90.800	1.000	6.4680E-03	0.4900	0.4871	0.0229	52.2387	6	9.0000	55.000	84.858	1.000
REDEJEM 1	90.800	1.000	6.4680E-03	0.4900	0.4871	0.0229	52.2387	6.0000	9.0000	55.0000	84.8582	1.000
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%
<del>EJEMPLO 2</del>	90.500	1.000	6.4680E-03	0.4900	0.4900	0.0200	52.361	6	10.0000	55.000	101.101	1.000
REDEJEM 2	90.500	1.000	6.4680E-03	0.4900	0.4900	0.0200	52.361	6.0000	10.0000	55.0000	101.1010	1.000
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%
<del>EJEMPLO 3</del>	90.700	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.4971	0.0229	52.3785	6	7.0000	61.197	117.859	1.000
REDEJEM 3	90.700	1.000	6.4680E-03	0.4800	0.4971	0.0229	52.3785	6.0000	7.0000	61.1966	117.8587	1.000
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%

Tabla XIII.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de Acetato de Etilo(Continuación).

	PRESIÓN 3	FLUJO 2	FLUJO 3	XACETIC2	XETANOL2	XAGUA2	XEACTAT2	XACETIC3	XETANOL3	XAGUA3	XEACTAT3	CONVERSION.
<del>EJEMPLO 1</del>	1.000	1.996E-07	0.006	0.0005	0.0000	0.0000	0.9995	0.4969	0.5022	0.0000	0.0008	0.0045
REDEJEM1	1.000	0.000	0.006	0.001	0.000	0.000	1.000	0.687	0.885	0.000	0.026	0.968
ERROR	0.000%	100.000%	2.357%	17.268%	100.000%	100.000%	0.032%	27.700%	43.271%	100.000%	96.860%	99.539%
<del>EJEMPLO 2</del>	1.000	0.002	0.011	0.0125	0.3141	0.1683	0.5052	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.9910
REDEJEM2	1.000	0.000	0.004	0.027	0.000	0.234	0.700	0.415	0.646	0.000	0.364	0.948
ERROR	0.000%	100.000%	65.389%	53.800%	100.000%	28.240%	27.796%	100.000%	100.000%	100.000%	100.000%	4.326%
<del>EJEMPLO 3</del>	1.000	0.005	0.001	0.0008	0.2095	0.3670	0.4227	0.9852	0.0018	0.0010	0.0120	0.5998
REDEJEM3	1.000	0.005	0.007	0.000	0.379	0.138	0.537	0.348	0.000	0.880	0.000	0.907
ERROR	0.000%	1.878%	80.028%	100.000%	44.739%	62.295%	21.274%	64.684%	100.000%	99.882%	100.000%	33.894%

La tabla XIII.5 presenta; al igual que en el caso I, 3 ejemplos que fueron separados de los valores originales (Tabla III.4) y de igual forma se comparo la aplicabilidad de la red neuronal con los resultados obtenidos experimentalmente. En este caso al aplicar la ecuación (5.1) el error promedio para cada uno de los casos se tiene lo siguiente:

Tabla XIV.5. Errores generados para cada uno de los ejemplos.

<b>EJEMPLO 1.</b>	
Error.	23.961%
<b>EJEMPLO 2.</b>	
Error.	60.844%
<b>EJEMPLO 3.</b>	
Error.	48.028%

Como se puede ver en la tabla XIV.5 los errores obtenidos al comparar el ejemplo desarrollado y el desempeño de la red muestran que la diferencia entre hacer la corrida de manera experimental y hacer la corrida usando esta red es muy grande. Por ello para este caso particular no resultara adecuado aplicar esta red para realizar una simulación.

### 5.3 CONDENSACIÓN ALDÓLICA SEGUIDA POR UNA DESHIDRATACIÓN.

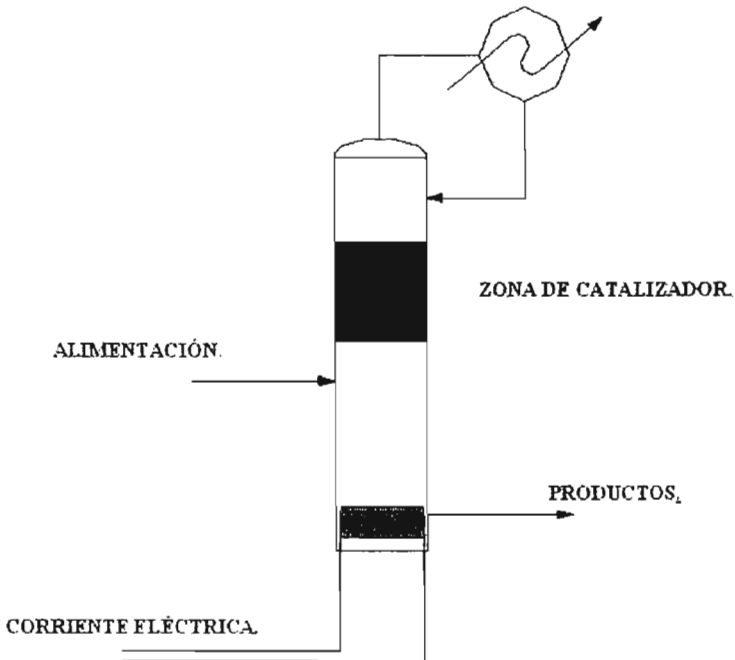


Figura 3. Configuración de la columna de destilación reactiva para el caso de producción de DAA.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.7.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 5, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 4, salidas.

Tiempo de entrenamiento alcanzado: **4 minutos 15 segundos.**

Iteraciones desarrolladas: **10,496.**

Nuevamente con los datos suministrados en las tablas VI.4 y VII.4 del capítulo IV se alcanza la convergencia de la red en 4 minutos 15 segundos, con un número de iteraciones igual a 10,496. Nuevamente se puede ver como los resultados son alcanzados en un lapso de tiempo muy corto; lo cual nuevamente, no sucedería con un simulador de procesos químicos. En las tablas siguientes observaremos los resultados generados por la red implementada.

La tabla XV.5 muestra las variables que fueron consideradas como salidas para esta red. La tabla XVI.5 muestra los resultados obtenidos al implementar la red neuronal **REDDAA**. Si se comparan ambas tablas se puede observar que la diferencia en los resultados es casi nula de no ser por algunas de las variables.

Las tablas XVII.5, XVIII.5 y XIX.5 muestran los pesos y la función umbral para cada una de las conexiones entre las capas de entrada, las capas ocultas y las capas de salida. La mayoría de estos factores de peso y la función umbral presentan preferentemente efectos de excitación por lo cual la configuración es la adecuada.

Tabla XV.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de DAA.

<b>CASO</b>	<b>SELECTIVIDAD.</b>	<b>% PESO DAA.</b>	<b>% PESO MO.</b>	<b>% PESO AGUA.</b>
1	0.760	0.69	0.762	1.091
2	0.752	0.69	0.751	1.091
3	0.758	0.70	0.740	1.090
4	0.777	0.71	0.729	1.089
5	0.809	0.73	0.718	1.087
6	0.854	0.76	0.707	1.084
7	0.912	0.79	0.696	1.081
8	0.984	0.83	0.685	1.078
9	1.069	0.88	0.675	1.074
10	1.167	0.93	0.664	1.069
11	1.278	0.98	0.654	1.065
12	1.402	1.05	0.644	1.060
13	1.540	1.12	0.634	1.055
14	1.691	1.19	0.624	1.049
15	1.855	1.27	0.614	1.044
16	2.032	1.36	0.604	1.038
17	2.222	1.45	0.594	1.032
18	2.426	1.55	0.584	1.027
19	2.643	1.65	0.575	1.021
20	2.873	1.76	0.565	1.016
21	3.116	1.88	0.556	1.011
22	3.372	2.00	0.547	1.006
23	3.642	2.13	0.538	1.001
24	3.925	2.27	0.529	0.996
25	4.221	2.41	0.520	0.992

Tabla XV.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de DAA (Continuación).

<b>CASO</b>	<b>SELECTIVIDAD.</b>	<b>% PESO DAA.</b>	<b>% PESO MO.</b>	<b>% PESO AGUA.</b>
26	4.530	2.55	0.511	0.988
27	4.852	2.71	0.502	0.985
28	5.188	2.86	0.493	0.982
29	5.537	3.03	0.485	0.979
30	5.899	3.20	0.476	0.978
31	6.274	3.38	0.468	0.977

Tabla XVI.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de DAA.

<b>CASO</b>	<b>SELECTIVIDAD.</b>	<b>% PESO DAA.</b>	<b>% PESO MO.</b>	<b>% PESO AGUA.</b>
1	0.752	0.688	0.755	1.091
2	0.752	0.688	0.748	1.091
3	0.752	0.695	0.739	1.090
4	0.786	0.718	0.730	1.088
5	0.833	0.745	0.720	1.086
6	0.886	0.774	0.710	1.083
7	0.948	0.808	0.699	1.080
8	1.018	0.846	0.688	1.077
9	1.094	0.886	0.677	1.073
10	1.187	0.934	0.665	1.069
11	1.287	0.986	0.654	1.065
12	1.405	1.047	0.643	1.060
13	1.532	1.111	0.633	1.055
14	1.682	1.185	0.622	1.050
15	1.839	1.263	0.612	1.044
16	2.017	1.350	0.603	1.039

Tabla XVI.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de DAA (Continuación).

17	2.209	1.444	0.593	1.033
18	2.420	1.546	0.584	1.027
19	2.642	1.653	0.574	1.021
20	2.873	1.764	0.565	1.016
21	3.120	1.882	0.556	1.010
22	3.381	2.007	0.547	1.005
23	3.638	2.129	0.539	1.000
24	3.922	2.264	0.530	0.996
25	4.206	2.399	0.521	0.992
26	4.524	2.550	0.512	0.989
27	4.858	2.708	0.503	0.986
28	5.224	2.881	0.493	0.983
29	5.581	3.050	0.484	0.980
30	5.911	3.206	0.475	0.978
31	6.187	3.337	0.468	0.977



Pesos generados por capa:

Tabla XVII.5. Capa 1 (Entrada) – Capa 2 (Capa oculta).

<b>bias</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
-0.237	-0.613	-0.326	-0.144	0.136	-0.708
-0.208	0.514	-0.304	0.906	0.020	0.831
-0.336	0.209	0.510	0.577	-0.139	0.724
0.787	-0.371	-0.791	-0.400	-0.107	-0.513
1.439	-0.867	-0.952	-0.768	-0.100	-0.588
-0.407	0.417	0.833	0.420	0.488	0.896
-0.533	0.883	0.171	0.470	0.784	-0.086
1.147	0.063	-0.710	-1.079	-0.608	0.063
0.092	0.511	0.582	0.682	-0.211	0.682
1.797	-0.388	0.083	-0.350	-0.784	-1.168
-0.813	1.279	1.159	0.040	0.774	0.968
1.278	0.124	0.033	0.134	-1.448	-0.843
0.372	1.080	0.364	-0.249	0.084	1.017
0.353	0.130	-0.921	-0.041	-0.521	-0.345
-0.991	0.507	0.766	0.634	0.168	0.874
0.490	-0.849	-0.339	-0.447	-0.539	-0.988
-1.929	0.033	0.102	0.233	1.215	0.976
0.587	-0.598	0.356	-0.979	0.065	-0.883
-1.626	0.762	0.623	0.995	0.493	0.050
0.389	-0.498	-0.707	-0.061	-0.759	0.176
1.207	0.277	-0.054	-0.861	-0.679	-0.614
-0.551	1.012	0.328	0.920	0.073	1.233

Tabla XVII.5. Capa 1 (Entrada) – Capa 2 (Capa oculta), (Continuación).

-1.486	0.789	0.447	0.627	0.743	0.078
-0.068	0.490	-0.095	-0.221	-0.718	-0.612
0.187	0.160	0.061	-0.575	-0.351	-0.692
0.819	-0.249	-0.322	-0.649	-0.615	-0.040
-0.569	-0.229	-0.352	0.666	1.020	0.668
2.171	-0.288	-0.533	-0.518	-1.245	-0.258
-0.276	0.973	0.383	-0.014	0.770	0.604
0.339	-1.032	0.030	-0.457	-0.463	-0.020

Tabla XVIII.5. Capa 2 (Capa oculta) – Capa 3 (Capa oculta).

bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
-0.260	-0.076	-0.465	-0.087	-0.026	0.334	-0.600	-0.146	0.066	-0.375	0.326	-0.501	-0.199	-0.456	0.198	-0.395	0.542	-0.001	0.375	-0.126	-0.093	0.138	-0.368	-0.330	-0.020	0.249	0.005	-0.172	0.231	-0.166	0.054
-0.310	0.243	-0.496	-0.405	0.472	0.630	-0.337	-0.462	0.386	-0.410	0.344	-0.908	0.131	-0.622	0.149	-0.796	0.670	-0.469	0.006	-0.695	0.189	-0.180	-0.573	-0.569	0.159	-0.048	0.379	-0.186	0.065	-0.494	0.204
-0.180	-0.289	0.025	0.008	-0.057	-0.356	0.482	0.022	-0.242	0.411	-0.212	0.370	-0.090	0.444	0.201	0.130	-0.144	0.488	0.084	0.250	0.206	-0.023	0.573	-0.049	-0.075	-0.213	0.089	0.138	0.032	0.156	-0.022
-0.263	0.223	0.174	-0.022	0.389	0.271	-0.046	0.057	0.310	-0.103	0.372	-0.437	-0.047	-0.361	0.052	0.032	0.391	-0.516	0.209	0.052	-0.133	-0.066	-0.235	-0.055	0.242	-0.031	0.283	-0.014	0.261	-0.403	-0.067
0.224	-0.175	0.076	0.145	-0.239	0.059	-0.044	-0.026	0.046	0.014	-0.098	0.378	-0.098	0.035	-0.039	0.005	0.005	0.455	0.065	-0.067	0.172	0.284	0.406	0.032	0.047	-0.121	0.047	-0.123	-0.046	0.299	0.209
0.300	0.149	0.116	-0.187	0.152	0.759	-0.434	0.002	0.169	-0.018	0.322	-0.231	0.290	-0.068	0.266	-0.579	0.325	-0.323	0.403	-0.567	0.226	-0.090	-0.234	-0.712	-0.072	0.455	0.114	-0.473	0.450	-0.426	0.410
-0.114	-0.117	-0.248	-0.018	0.147	0.197	-0.284	0.249	-0.146	0.023	0.385	-0.003	0.245	-0.101	-0.130	-0.280	-0.055	0.106	0.077	-0.293	-0.178	-0.091	-0.241	-0.146	0.310	0.184	-0.085	-0.275	-0.118	-0.282	0.123
-0.356	-0.156	0.194	0.150	-0.175	-0.283	-0.032	0.302	-0.204	0.158	-0.308	0.407	0.012	0.099	0.174	0.521	-0.633	0.333	-0.124	0.565	-0.048	-0.336	0.338	0.351	0.115	-0.083	-0.417	-0.160	-0.333	0.025	0.196
0.091	-0.105	0.018	0.295	-0.211	-0.707	0.470	0.469	-0.425	0.172	-0.503	0.743	-0.129	0.015	-0.229	0.189	-0.313	0.180	-0.386	0.555	-0.432	-0.277	0.435	0.219	-0.154	0.080	-0.172	0.198	-0.598	0.498	-0.403
0.097	0.332	0.019	0.243	0.306	0.631	0.148	-0.028	0.200	-0.172	0.461	-0.372	0.423	-0.001	0.006	-0.358	0.628	-0.401	0.433	-0.306	0.576	0.134	-0.080	-0.391	0.488	0.230	0.609	-0.136	0.838	-0.125	0.258
-0.242	-0.297	0.357	0.278	-0.130	0.087	0.178	0.332	0.174	0.210	-0.417	-0.060	0.104	-0.157	0.033	-0.097	-0.213	0.138	0.030	0.437	0.074	0.019	0.428	-0.011	-0.237	-0.167	-0.204	0.233	-0.207	0.000	0.196
0.607	0.483	-0.359	-0.012	0.633	1.092	-0.295	-0.388	0.994	-0.130	1.418	-0.238	1.199	0.314	0.722	-0.520	0.620	-1.166	0.836	-0.846	0.917	1.107	-0.149	-0.715	0.752	0.911	0.939	-0.587	1.700	-0.121	0.469
0.190	0.260	0.293	0.176	0.118	-0.021	0.022	-0.203	0.083	0.136	0.224	0.157	-0.212	-0.173	-0.257	0.337	0.006	0.031	-0.305	0.203	-0.201	0.272	0.130	0.058	0.042	-0.137	-0.268	-0.010	0.094	-0.228	-0.115
0.145	0.063	-0.021	0.128	-0.032	-0.286	0.044	0.263	-0.297	0.299	-0.086	-0.001	0.031	-0.053	-0.216	0.107	-0.257	-0.036	0.159	0.039	-0.105	-0.216	0.172	0.288	-0.057	-0.145	0.135	-0.119	-0.142	0.079	-0.135
0.058	0.321	-0.189	-0.107	0.121	-0.160	-0.054	0.048	-0.008	-0.037	-0.235	-0.285	-0.031	0.124	0.031	-0.060	0.178	0.087	0.148	-0.191	-0.292	0.195	-0.211	0.128	0.095	0.085	-0.167	0.111	0.128	-0.009	-0.272

Tabla XIX.5. Capa 3 (Capa oculta) – Capa 4 (Salidas).

bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0.554	0.030	0.144	0.467	-0.136	0.440	-0.919	-0.104	0.686	1.085	-1.058	0.649	-2.392	0.064	0.443	0.257
0.371	0.134	-0.170	0.541	-0.130	0.359	-0.836	0.142	0.889	0.942	-1.087	0.509	-2.339	0.377	0.461	0.148
-0.467	1.132	1.825	-1.159	0.560	-0.456	0.097	0.241	-1.082	0.214	1.044	-0.787	1.223	-0.199	-0.349	0.300
-0.356	0.482	1.264	-0.388	0.637	-0.342	1.024	0.470	-0.992	-0.955	1.369	-0.339	0.340	-0.318	-0.223	-0.126

Tabla XX.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de DAA.

CASO	CALENTAMIENTO (V).	REFLUJO (G/MIN).	CANTIDAD CATALIZADOR (ml).	ACTIVIDAD DAA.	ACTIVIDAD MO.	SELECTIVIDAD.	% PESO DAA.	% PESO MO.	% PESO AGUA.
EJEMPLO1	55.000	6.000	21.000	0.108	0.120	0.760	0.688	0.762	1.091
REDEJEM1	55.000	6.000	21.000	0.108	0.120	0.752	0.688	0.748	1.091
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	1.053%	0.015%	1.851%	0.037%
EJEMPLO2	74.000	12.500	22.000	0.625	0.210	2.873	1.763	0.565	1.016
REDEJEM2	74.000	12.500	22.000	0.625	0.210	2.973	1.813	0.562	1.013
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	-3.492%	-2.807%	0.652%	0.259%
EJEMPLO3	85.000	17.000	23.500	1.518	0.267	6.274	3.376	0.468	0.977
REDEJEM3	85.000	17.000	23.500	1.518	0.267	6.187	3.337	0.468	0.977
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	1.379%	1.144%	0.011%	-0.041%

La tabla XX.5 presenta; al igual que en los casos anteriores, 3 ejemplos que fueron separados de los valores originales (Tabla VI.4) y de igual forma se comparo la aplicabilidad de la red neuronal con los resultados obtenidos experimentalmente. En este caso al aplicar la ecuación (5.1) el error promedio para cada uno de los casos es:

Tabla XXI.5. Errores generados para cada uno de los ejemplos.

<b>EJEMPLO 1.</b>	
Error.	0.180%
<b>EJEMPLO 2.</b>	
Error.	1.134%
<b>EJEMPLO 3.</b>	
Error.	0.162%

Como se puede ver en la tabla XXI.5 los errores obtenidos al comparar el ejemplo desarrollado y el desempeño de la red, muestran que la diferencia entre hacer la corrida de manera experimental y hacer la corrida usando esta red es minima. Así pues esta red puede ser aplicada para la simulación de este proceso.

## 5.4 NEUTRALIZACIÓN (PROTONACIÓN DE BASES ORGÁNICAS).

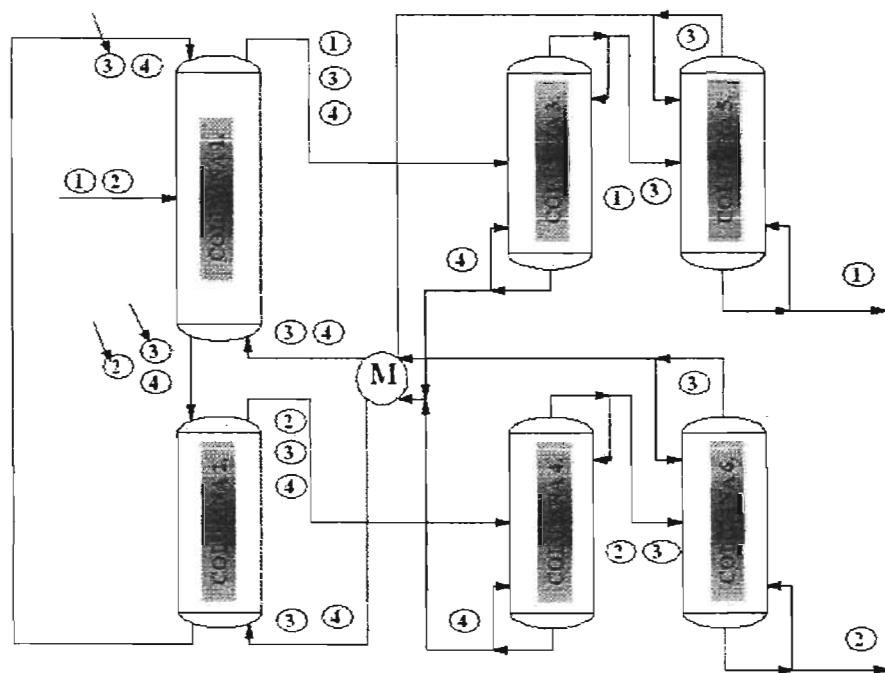


Figura 4. Proceso de destilación reactiva para la separación de isómeros. El componente 1 es el isómero menor (3 - picolina), 2 es el más reactivo (4 - picolina), 3 es el agente de desplazamiento y 4 el solvente. Los componentes resaltados con la flecha son los componentes enriquecidos (sales de piridina). La columna 1 es la columna de destilación reactiva, la columna 2 es la columna de regeneración y las columnas 3 a 6 columnas de destilación normales.

Learning rate (rango de aprendizaje): 0.3.

Momentum coefficient (coeficiente de momentum): 0.4.

Initial weights (pesos iniciales): 0.5.

Configuración para cada capa:

Slab 1: 14, entradas.

Slab 2: 30, capa oculta.

Slab 3: 15, capa oculta.

Slab 4: 3, salidas.

Tiempo de entrenamiento alcanzado: **2 minutos 15 segundos**.

Iteraciones desarrolladas: **4,657**.

Finalmente con los datos suministrados en las tablas VIII.4 y IX.4 del capítulo IV se alcanza la convergencia de la red en 2 minutos 15 segundos, con un número de iteraciones igual a 4,657. Nuevamente se puede ver como los resultados son alcanzados en un lapso de tiempo muy corto; lo cual nuevamente, no sucedería con un simulador de procesos químicos. En las tablas siguientes observaremos los resultados generados por la red implementada.

La tabla XXII.5 muestra las variables que fueron consideradas como salidas para esta red. La tabla XXIII.5 muestra los resultados obtenidos al implementar la red neuronal **REDPIRIDINAS**. Si se comparan ambas tablas se puede observar que la diferencia en los resultados es casi nula de no ser por algunas de las variables.

Las tablas XXIV.5, XXV.5 y XXVI.5 muestran los pesos y la función umbral para cada una de las conexiones entre las capas de entrada, las capas ocultas y las capas de salida. La mayoría de estos factores de peso y la función umbral presentan preferentemente efectos de excitación por lo cual la configuración es la adecuada.

Tabla XXII.5. Salidas deseadas para la red neuronal para el caso de Separación de Piridinas.

<b>CASO</b>	<b>PUREZA</b>	<b>Y3B1</b>	<b>Y3B2</b>
<b>TIPO DE VARIABLE.</b>	<b>A</b>	<b>A</b>	<b>A</b>
1	97	0.19	0.95
2	98.5	0.19	0.94
3	97	0.24	0.8
4	97	0.19	0.9
5	97	0.15	0.78
6	97	0.27	0.52
7	97	0.2	0.91
8	97	0.19	0.95
9	98.5	0.2	0.64
10	97	0.2	0.88
11	97	0.17	0.9
12	97	0.22	0.7
13	97	0.21	0.85
14	97	0.22	0.7
15	97	0.18	0.92
16	97	0.47	0.63

Tabla XXIII.5. Salidas desarrolladas por la red neuronal para el caso de separación de Piridinas.

<b>CASO</b>	<b>PUREZA</b>	<b>Y3B1</b>	<b>Y3B2</b>
<b>TIPO DE VARIABLE.</b>	<b>A</b>	<b>A</b>	<b>A</b>
1	97.041	0.196	0.925
2	98.479	0.188	0.950
3	97.000	0.241	0.802
4	97.000	0.193	0.913
5	97.000	0.155	0.788
6	97.000	0.272	0.524
7	97.000	0.186	0.904
8	97.019	0.194	0.931
9	98.492	0.200	0.637
10	97.000	0.183	0.873
11	97.017	0.174	0.912
12	97.003	0.215	0.700
13	97.009	0.213	0.848
14	97.008	0.225	0.703
15	97.005	0.187	0.915
16	97.000	0.468	0.631



Pesos generados por capa:

Tabla XXIV.5. Capa 1 (Entrada) – Capa 2 (Capa oculta).

bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
-1.427	-0.469	0.671	0.157	0.983	-1.461	-2.494	-0.957	-3.275	-2.786	-0.083	2.407	2.549	-0.741	-0.979
0.264	0.262	-0.507	-0.875	-0.889	1.908	-0.359	-0.755	-0.118	0.930	0.106	0.912	0.683	0.190	0.502
0.072	-0.237	-0.895	0.128	0.076	0.483	-1.354	0.144	0.650	0.728	-0.667	-0.463	-0.063	1.008	0.717
0.706	-0.584	-1.375	-1.412	-0.188	1.622	-0.550	0.191	0.063	0.712	0.318	1.412	0.570	0.375	0.826
0.900	-0.624	-0.738	0.326	1.357	-0.381	0.504	0.804	0.251	-0.489	0.591	-0.154	0.361	-0.100	0.039
-0.458	0.498	1.393	0.275	0.086	-0.546	0.498	0.019	0.043	-0.533	0.151	0.064	0.650	0.601	0.237
-0.091	1.442	-2.672	-0.238	-0.264	0.941	-0.257	-0.084	-2.472	-2.734	0.130	4.406	2.187	-0.022	0.327
0.415	0.452	-0.770	-1.083	-0.813	1.592	-0.794	-0.247	0.356	0.236	-0.609	0.345	0.481	0.370	-0.345
0.289	-1.560	-3.045	0.723	0.666	0.247	0.279	1.790	1.081	0.762	-0.184	-2.681	-1.935	-0.754	-0.754
0.371	0.564	2.101	-0.828	-0.762	-0.324	-0.680	-1.389	-0.524	0.177	-0.297	1.430	1.593	0.408	1.352
0.102	0.175	-0.335	-0.839	0.049	1.165	-0.893	0.488	-0.404	0.680	0.065	-0.093	0.271	0.497	0.418
0.409	0.526	1.650	0.106	-1.396	0.655	-0.064	-1.026	-2.744	-0.308	-0.247	1.123	0.184	-0.418	-0.933
0.293	0.506	0.770	-0.114	-0.244	0.555	0.272	0.119	-1.061	-0.306	0.184	0.799	-0.526	-0.847	-0.241
0.094	0.429	-0.062	0.476	0.362	-0.057	0.316	-0.121	0.157	-0.179	-0.230	-0.031	0.109	-0.488	-0.359
-0.835	0.570	1.243	0.658	0.741	-2.487	0.303	0.279	1.239	-0.519	1.030	-2.230	-1.507	0.549	0.447
-0.674	-0.023	0.194	-0.325	-0.681	-0.618	-0.421	0.026	0.819	0.154	-0.049	-0.149	-0.179	0.442	1.039
-0.260	-0.221	-0.931	-0.282	0.579	0.656	-0.374	0.198	0.783	0.088	-0.089	-0.602	-0.338	-0.010	0.287
-0.365	-0.266	0.251	-0.774	0.720	-0.984	-0.403	-0.415	0.657	-0.105	0.429	-0.059	0.588	-0.019	0.532
-0.671	0.360	0.401	0.951	0.928	-2.125	0.286	0.788	0.733	-0.232	0.751	-1.373	-1.091	0.919	-0.187
-0.160	0.458	0.895	-0.053	-0.722	0.551	-0.036	-0.795	-0.515	-0.677	-0.057	1.936	0.909	-0.067	0.862
0.596	0.176	-0.314	-1.216	-0.463	0.728	-0.726	-0.527	0.002	0.792	-0.215	0.837	0.190	0.020	0.549
0.560	0.090	-0.681	0.230	0.213	1.026	-1.757	0.373	-1.728	0.061	-0.328	0.524	-0.068	-0.428	0.113
-1.365	0.976	-0.711	-0.116	-0.234	-1.162	-0.331	0.005	1.343	0.551	0.165	-0.444	-0.892	1.175	0.830
-0.037	1.019	1.978	0.681	-0.219	-0.442	0.718	0.125	-1.613	-0.459	0.259	1.074	0.223	-0.895	-0.705
-0.561	1.460	1.834	0.722	0.246	-2.660	0.227	0.517	0.726	-0.270	0.215	-1.881	-1.578	0.506	0.405
0.560	-0.432	-0.692	-0.228	-0.152	1.038	1.610	1.007	3.180	2.243	0.248	-1.637	-1.700	0.338	0.666
0.736	-0.838	0.362	1.112	1.718	0.110	0.489	0.907	-0.548	-0.695	0.125	0.086	1.009	-0.691	-1.175
0.049	-0.684	-1.128	-0.336	-0.447	0.938	0.205	0.605	-0.263	-0.095	-0.168	-0.205	-0.724	0.251	-0.187
0.028	0.381	0.019	-0.468	-0.076	0.219	0.660	-0.143	0.735	0.811	0.350	-0.393	-0.189	0.276	0.071
0.074	-1.099	-0.436	-0.199	0.200	0.343	0.048	-0.034	0.595	0.941	-0.239	-1.271	-0.203	0.524	0.671

Tabla XXV.5. Capa 2 (Capa oculta) – Capa 3 (Capa oculta).

bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
0.290	0.651	0.387	0.447	0.855	0.123	-0.241	0.234	0.467	0.175	0.036	0.451	0.304	0.263	0.150	-1.077	-0.019	0.156	-0.160	-0.899	0.442	0.620	0.835	-0.396	0.005	-0.967	-0.436	-0.135	0.468	-0.004	0.312
-0.451	-0.867	0.374	0.172	0.257	-0.591	-0.240	-0.972	0.588	0.016	0.024	0.117	-0.161	-0.384	-0.348	0.154	0.167	0.088	0.177	-0.304	-0.029	0.688	0.132	0.528	-1.004	-0.042	0.635	-0.913	-0.039	0.365	0.177
0.178	0.437	0.622	0.191	0.632	-0.496	-0.196	-0.457	0.590	0.159	0.160	0.174	-0.063	-0.379	-0.111	-0.081	0.303	0.183	0.019	-0.394	-0.218	0.374	-0.079	0.352	-0.015	-0.127	-0.284	-0.714	-0.008	0.095	-0.360
0.019	-0.138	-0.600	-0.471	-0.427	0.196	0.341	-0.007	-0.170	-0.010	-0.017	-0.545	-0.242	-0.366	0.200	0.582	-0.249	-0.304	0.073	0.136	0.025	-0.282	-0.686	-0.215	0.209	0.176	0.377	0.179	-0.350	0.074	-0.150
-0.113	-1.330	0.369	0.464	0.148	-0.560	-0.213	0.032	0.268	-0.613	0.273	0.256	0.300	-0.049	-0.106	-0.149	-0.201	0.082	-0.611	-0.143	0.047	-0.122	-0.112	0.335	-0.424	0.113	0.432	-0.570	0.228	-0.021	0.349
0.115	0.354	0.352	-0.837	0.128	-0.732	0.006	2.205	-0.082	-1.500	0.955	-0.249	1.779	0.778	0.199	-0.541	-0.111	-0.294	-0.377	-0.602	0.816	0.109	0.087	-0.637	0.961	-0.404	-0.892	-0.100	-0.406	-0.084	-0.870
0.022	-1.737	-0.593	-0.332	-0.837	-0.238	0.629	0.885	-0.654	-1.112	0.369	-0.439	0.028	0.183	0.152	1.199	0.270	-0.445	0.267	0.706	0.421	0.015	-0.852	0.484	0.270	1.212	1.119	-0.448	-0.272	0.374	-0.087
0.071	0.617	-0.019	-0.598	-0.005	0.299	0.311	0.948	-0.379	-0.475	-0.110	-0.293	0.770	0.256	0.078	-0.121	-0.624	-0.143	-0.342	-0.083	0.297	-0.320	0.425	-0.479	0.927	-0.118	-0.307	0.888	0.016	0.028	-0.349
-0.237	-0.938	-0.217	-0.234	-0.111	-0.303	-0.045	0.785	0.075	-0.479	-0.083	0.153	-0.086	0.287	-0.187	0.405	-0.060	0.044	-0.627	0.274	-0.039	-0.219	0.125	0.335	0.260	0.327	0.742	-0.255	0.344	-0.010	-0.072
0.049	-0.677	0.252	-0.427	-0.227	-0.386	0.403	0.771	0.135	-0.628	0.596	-0.271	0.380	0.166	-0.084	-0.025	-0.111	-0.430	-0.020	0.071	0.423	-0.338	-0.374	-0.002	0.347	0.256	-0.142	-0.028	-0.122	-0.142	-0.064
0.336	2.717	0.166	-0.103	0.656	0.297	-0.197	-0.944	0.099	1.353	-0.866	-0.138	0.178	0.324	0.098	-0.491	-0.373	-0.101	0.236	-0.327	-0.180	0.043	0.380	-0.583	0.225	-0.789	-1.623	0.485	-0.237	-0.360	-0.452
0.008	-0.098	0.518	-0.097	0.009	-0.463	0.377	1.698	0.075	-1.348	1.145	-0.017	0.912	0.413	-0.296	-0.030	0.169	-0.634	-0.313	-0.732	0.662	0.350	0.034	-0.298	0.828	0.063	-0.666	-0.520	-0.416	0.070	-0.371
-0.405	-0.304	-0.786	0.046	-0.632	-0.101	0.192	-0.725	-0.736	-0.007	-0.036	-0.620	-0.694	-0.318	0.125	1.119	0.395	0.043	-0.052	0.754	-0.066	-0.659	-0.825	0.502	-0.054	0.970	0.556	-0.021	-0.467	0.288	-0.043
0.103	-1.052	-0.120	-0.329	-0.245	-0.138	-0.062	-0.063	0.217	-0.638	0.201	-0.122	-0.290	-0.057	-0.103	0.453	-0.239	0.203	-0.153	0.017	0.206	-0.229	-0.641	0.092	-0.375	0.484	0.831	-0.402	-0.281	0.099	0.140
0.260	-0.175	0.013	0.346	0.151	0.098	0.161	0.078	0.151	0.165	0.306	0.213	-0.207	-0.165	0.246	0.244	0.045	0.085	0.229	-0.141	0.406	0.252	-0.032	0.166	-0.022	-0.237	0.150	-0.241	0.282	-0.099	0.194

Tabla XXVI.5. Capa 3 (Capa oculta) – Capa 4 (Salidas).

Bias	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1.891	2.163	0.217	1.442	-0.247	-1.094	-2.652	-2.830	0.020	-1.256	-0.701	4.334	-1.819	0.020	-1.032	0.638
0.227	-1.388	-0.847	-0.896	1.271	-1.004	-0.354	1.020	0.595	-0.121	0.284	0.541	-0.689	1.501	0.531	-0.209
-0.281	1.409	-2.146	-1.054	-0.180	-0.865	1.309	-0.294	1.688	0.006	-0.012	0.560	0.342	-1.619	-1.013	-0.629

Tabla XXVII.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de Separación de Piridinas.

CASO	PUREZA	K21	X1F	ZA	N1	V/F1	Y3B1	L/F	N2	V/F2	Y3B2
EjemPLO1	97.000	2.000	0.400	0.190	150.000	5.000	0.190	5.000	20.000	6.000	0.950
REDEJEM1	97.295	2.000	0.400	0.190	150.000	5.000	0.168	5.000	20.000	6.000	0.901
ERROR	-0.304%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	11.368%	0.000%	0.000%	0.000%	5.151%
EjemPLO2	98.500	2.000	0.500	0.250	75.000	12.000	0.200	9.700	30.000	9.500	0.640
REDEJEM2	98.500	2.000	0.500	0.250	75.000	12.000	0.270	9.700	30.000	9.500	0.665
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	25.917%	0.000%	0.000%	0.000%	3.748%
EjemPLO3	97.000	2.000	0.500	0.200	120.000	6.500	0.470	9.500	34.000	9.500	0.630
REDEJEM3	97.410	2.000	0.500	0.200	120.000	6.500	0.429	9.500	34.000	9.500	0.573
ERROR	-0.423%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	8.648%	0.000%	0.000%	0.000%	8.991%

Tabla XXVII.5. Ejemplos alimentados a la red y comparación para el caso de Separación de Piridinas(Continuación).

CASO	N3	N4	N5	N6	a13	K13
EjemPLO1	7.000	13.000	50.000	40.000	1.830	1.320
REDEJEM1	7.000	13.000	50.000	40.000	1.830	1.320
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%
EjemPLO2	12.000	12.000	24.000	24.000	0.550	0.400
REDEJEM2	12.000	12.000	24.000	24.000	0.550	0.400
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%
EjemPLO3	8.000	11.000	23.000	32.000	0.610	0.440
REDEJEM3	8.000	11.000	23.000	32.000	0.610	0.440
ERROR	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%	0.000%

La tabla XXVII.5 presenta; al igual que en los casos anteriores, 3 ejemplos que fueron separados de los valores originales (Tabla VII.4) y de igual forma se comparó la aplicabilidad de la red neuronal con los resultados obtenidos experimentalmente. En este caso al aplicar la ecuación (5.1) el error promedio para cada uno de los casos es:

Tabla XXVIII.5. Errores generados para cada uno de los ejemplos.

<b>EJEMPLO 1.</b>	
Error.	2.612%
<b>EJEMPLO 2.</b>	
Error.	9.855%
<b>EJEMPLO 3.</b>	
Error.	3.204%

Como se puede ver en la tabla XXVIII.5 los errores obtenidos al comparar el ejemplo desarrollado y el desempeño de la red, muestran que la diferencia entre hacer la corrida de manera experimental y hacer la corrida usando esta red es mínima. Así pues esta red también puede ser aplicada para la simulación de este proceso.

Es importante comentar que en cada caso el rango de aprendizaje, el coeficiente de momentum, y los factores de peso son diferentes entre si. Para el caso rango de aprendizaje y el coeficiente de momentum se siguió la recomendación de la tabla IV.2 del capítulo II del presente trabajo y estos parámetros están en función del numero de capas ocultas y el numero de iteraciones de entrenamiento. La literatura recomienda establecer los factores de peso en función del numero de nodos en la capa oculta con respecto al numero de nodos de entrada así para cada caso se siguió la recomendación de la tabla III.2 del capítulo II.

## CONCLUSIONES.

En el caso de las redes neuronales se puede observar que la mejor estrategia para los problemas de Ingeniería Química es sin duda el algoritmo de propagación hacia atrás pues usa una técnica de búsqueda de gradiente para minimizar el error generado en la función y así hace las correcciones necesarias para obtener buenos resultados ó en este caso buenos valores de salida.

Cabe hacer notar que las redes neuronales permiten de una forma mucho mas simple simular el comportamiento de un proceso químico debido a que no requieren parámetros para ser definidos. Como se puede ver a pesar de lo que mucha literatura dice *las redes neuronales no aprenden por si solas* ya que es necesario que se definan los nodos de entrada y los nodos de salida, en base a una experiencia profesional que muchas veces no se tiene para que así la red pueda encontrar un resultado, o una serie de resultados con una alta precisión y exactitud.

Por otro lado cuando se quiere hacer una simulación con algún programa o paquete de simulación son necesarias grandes cantidades de información a ser alimentadas al sistema, luego es necesario definir cuál es la importancia de esta información de manera dependiente; una de la otra, y de forma independiente. Cuando una de las simulaciones o una de las etapas de solución no converge o no encuentra dicha solución, es necesario revisar todos los datos suministrados para eliminar aquellos que no son adecuados para el caso particular, lo cual demanda grandes cantidades de tiempo que muchas veces no se puede desperdiciar. Las redes neuronales; por otro lado, *trabajan con una serie de datos que han sido ya generados o realizados en repetidas ocasiones y de los cuales tenemos un amplio conocimiento de su influencia en nuestro proceso*, para lo cual se ha conseguido definir un intervalo de operación, de esté solo se definen los nodos de entrada y de salida, se eligen los valores para los factores de peso, el coeficiente de momentum y el rango de aprendizaje para así entrenar a la red, finalmente; cuando la red se ha entrenado satisfactoriamente, se establece el caso particular y se piden los resultados, lo cual es muy rápido y sencillo.

Se puede notar que las redes generadas para los casos de:

- Reacciones de eterificación,
- Reacciones de esterificación con alcoholes / olefinas,
- Condensación aldólica seguida por una deshidratación y
- Neutralización (protonación de bases orgánicas).

Son una excelente forma de aplicación de las redes neuronales en el sentido de su rápida convergencia y los errores obtenidos fueron relativamente pequeños aunque en el caso de las reacciones de esterificación con alcoholes / olefinas fue alto. En este sentido es importante mencionar que las posibles causas de estos errores tan altos se deban quizás al poco impacto que cada nodo tiene con la red neuronal. También es importante apreciar que las redes con un número de casos mayor a 13 presentan una mayor estabilidad en cuanto a su aprendizaje, también es claro que cuando el número de nodos de entrada es mayor al número de nodos de salida la red converge más rápidamente.

Por ello *para garantizar un aprendizaje preciso y exacto es necesario que el número de casos de aprendizaje sea mayor a 13 y además el número de nodos de entrada debe ser mayor al número de nodos de salida*, ya que esto permite a nuestra red ajustar los valores de una manera más rápida y desprecia rápidamente los casos donde encontramos múltiples soluciones.

Neuroshell 2 es una herramienta muy útil para el desarrollo de redes neuronales y aunque existen muchos otros paquetes comerciales para el desarrollo de redes, estos no presentan muchas diferencias con respecto a este. Las únicas diferencias que se pueden encontrar es la forma en que se asignan los factores de peso, el coeficiente de momentum y el rango de aprendizaje ya que en Neuroshell 2 solo es necesario asignar un valor para los factores de peso y este automáticamente lo ajusta como un factor de peso independiente para cada una de las conexiones entre los nodos de entrada, nodos ocultos y nodos de

salida. En otros paquetes es posible asignar a cada una de las conexiones su propio factor de peso, lo cual permite un aprendizaje mucho mas rápido, preciso y exacto.

Como se pudo observar ***una red neuronal requiere entre 4,000 y 100,000 eventos para encontrar el error minino***, si al entrenar una red se sale fuera de este intervalo la red quizás tendrá múltiples soluciones por ello es necesario cambiar los factores de peso, el coeficiente de momentum o el rango de aprendizaje o en el peor de los casos el modelo de entrenamiento.

## BIBLIOGRAFÍA.

1. Sundmacher, K. y Kienle, A. (2003), *Reactive Distillation Status and Future Directions*; Wiley – VCH, Magdeburg, Alemania.
2. Hypotrech, Aspen Technology Inc. (2002), *Get Started, Hysys 3.1*, Ed. 3.1, Cambridge, MA, USA.
3. Geankoplis, C. J. (2002), *Procesos De Transporte Y Operaciones Unitarias*, 3ª ed.; Compañía Editorial Continental, S.A. De C.V., México D. F.
4. Aspentech, Aspen Technology Inc. (2001), *Aspen Plus 11.1 User Guide*, Ed. 11.1, Cambridge, MA, USA.
5. Del Río, M. B. y Sanz, A. M. (2001), *Redes Neuronales Y Sistemas Borrosos*, 2ª ed.; Ra – Ma, Madrid, España.
6. Umez, E. E. (2001), *Dinámica de Sistemas y Control*; Thomson, Learning, México, D. F.
7. Welty, J. R., Wicks, C. E. y Wilson, R. E. (2001), *Fundamentos De Transferencia De Momento Calor Y Masa*, 2ª ed.; Limusa Wiley, México D. F.
8. Stein, E., Kienle, A. y Sundmacher, K. (2000), *Chem. Eng.*, Diciembre, 68 – 72.
9. Baur, R. (2000), *Modeling Reactive Distillation Dynamics*, Tesis de Doctorado, Ingeniería Química, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Clarkson, N. Y., USA.
10. Higler, A. P., Taylor, R. y Krishna, R. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54. 1389 – 1395.
11. Chin, K. (1999), *Chem. Eng.*, Abril, 163 – 168.
12. Ellenberger, J. y Krishna, R. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1339 – 1345.
13. Kenig, E., Jakobsson, K., Banik, P., Aittamaa, J., Gorka, A., Koskinen, M., Wettmann, P. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54. 1347 – 1352.
14. Monroy, R. L, Álvarez, J. R. (1999), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 38, 451 – 455.
15. Moritz, P. y Hasse, H. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1367 – 1374.
16. Seider, W. D., Seader, J. D. y Lewin, D. R. (1999), *Process Design Principles, Synthesis, Analysis and Evaluation*; John Wiley & Sons, Inc., New York, USA.
17. Serafimov, L. A., Pisarenko, Y. A. y Kulov, N. N. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1383 – 1388.



18. Sundmacher, K., Uhde, G. y Hoffmann, U. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 2839 – 2847.
19. Von Scala, C., Wehrli, M. y Gaiser, G. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1375 – 1381.
20. Van Hasselt, B. W., Calis, H. P. A., Sie, S. T. y Van den Bleck, C. M. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1405 – 1411.
21. Zhen, X. y Milorad, P. D. (1999), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, 1397 – 1403.
22. Güttinger, T. E. (1998), *Multiple Steady States in Azeotropic and Reactive Distillation*, Tesis de Doctorado, Ingeniería Química, Instituto Federal de Tecnología Suiza(Federal Institute Technology Zürich, ETH), Baden, Suiza.
23. Foust, A. S., Wenzel, L. A., Clump, C. W., Maus, L. y Andersen, L. B. (1998), *Principios De Operaciones Unitarias*, 2ª ed.; Compañía Editorial Continental, S.A. De C.V., México D. F.
24. Fair, J. R. (1998), *Chem. Eng.*, Octubre, 158 – 162.
25. Podrebarac, G. G., Ng, F. T. T. y Rempel, G. L. (1998), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 53, No. 5, 1067 – 1075.
26. Podrebarac, G. G., Ng, F. T. T. y Rempel, G. L. (1998), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 53, No. 5, 1077 – 1088.
27. Subawalla, H., González, J. C., Seibert, A. F. y Fair J. R. (1997), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 36, No. 9, 3821 – 3832.
28. Baughman, D. R. y Liu, Y. A. (1995), *Neural Networks In Bioprocessing And Chemical Engineering*, Academic Press, California, USA.
29. Hauan, S., Hertzberg, T. y Lien, K. M. (1995), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 34, No. 3, 987 – 991.
30. Ramasamy, S., Deshpande, P. B., Hajare, R. P. y Pastón G. E. (1995), *Hydrocarbon Processing*, Junio, 59 – 62.
31. Broekhuis, R. R., Lynn, S. y King, C. J. (1994), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 33, 3230 – 3237.
32. Werbos, P. J. (1994), *The Roots Of Backpropagation, From Ordered Derivatives To Neurona Networks And Political Forecasting*, John Wiley & Sons, Inc., New York, USA.

33. Shah, V. B., Bluck, D., Kovach III, J. W., Parikh, R. y Yu, R. (1994), *The Sensivity of the Design and Operability of the MTBE Proceses with Respect to changes in Reaction Parameters and Process Configurations*, Un articulo presentado en "Refining LNG and Petrochemasia 94", Diciembre 7 – 8, 1 – 14.
34. Nijhuis, S. A., Kerhof, F. P. J. M. y Mak, A. N. S. (1993), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 32, No. 11, 2767 – 2774.
35. Jacobs, R. y Krishna, R. (1993), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 32, No. 8, 1706 – 1709.
36. Degarmo, J. L., Parulekar, V. N. y Pinjala, V. (1992), *Chem. Eng. Prog.*, Marzo, 43 – 50.
37. Ulrich, G. D. (1992), *Diseño Y Economía De Los Procesos De Ingeniería Química*, McGraw – Hill, México D. F.
38. Hinton, G. E. (1992), *Investigación y Ciencia*, Noviembre, 105 – 111.
39. Humphrey, J. L. y Seibert, A. F. (1992), *Chem. Eng.*, Diciembre, 37 – 45.
40. Duprat, F. y Gau, G. (1991), *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 69, Diciembre, 1320 – 1326.
41. Duprat, F. y Gau, G. (1991), *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 69, Diciembre, 1327 – 1335.
42. Rehfinger, A. y Hoffmann, U. (1990), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 45, No. 6, 1605 – 1617.
43. Rehfinger, A. y Hoffmann, U. (1990), *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 45, No. 6, 1619 – 1626.
44. Chementator. (1990), *Chem. Eng.*, Agosto, 37 – 45.
45. Belson, D. J. (1990), *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 29, No. 7, 1562 – 1565.
46. Samdani, G. (1990), *Chem. Eng.*, Agosto, 37 – 45.
47. Bhagat, P. (1990), *Chem. Eng. Prog.*, Agosto, 55 – 60.
48. Venkataraman, S., Chan, W. K. y Boston, J. F. (1990), *Chem. Eng. Prog.*, Agosto, 45 – 54.
49. Agreda, V. H., Partin, L. R. y Heise, W. H. (1990), *Chem. Eng. Prog.*, Febrero, 40 – 46.
50. Watanabe, K., Matsuura, I., Kabota, M. y Himmelblau, D. M. (1989), *Aiche Journal*, Vol. 35, No. 11, 1803 – 1812.

## GLOSARIO.

***Solución ideal.*** Una solución ideal se define como aquella que obedece la ley de Raoult en todo el intervalo de concentraciones.

***Reflujo.*** El reflujo se define como aquella porción líquida, sólida o gaseosa que se regresa a un sistema.

***Volatilidad relativa.*** Es un índice de la facilidad o dificultad de separación de dos componentes por medio de la destilación.

***Reflujo mínimo.*** También conocido como *relación de flujo mínima* se define como la cantidad mínima necesaria que se debe retornar a una columna para que se verifique la separación.

***Reflujo máximo.*** También conocido como *relación de flujo máxima* se define como la cantidad máxima necesaria que se debe retornar a una columna para que se verifique la separación.

***Reflujo óptimo.*** También conocido como *relación de flujo óptima* se define como la cantidad necesaria que se debe retornar a una columna para obtener la separación adecuada.

***Azeótropo homogéneo.*** Un azeótropo homogéneo es aquel que a pesar de que se cambie la temperatura o presión del sistema permanece como una solución miscible o homogénea.

***Azeótropo heterogéneo.*** Un azeótropo heterogéneo es aquel que cuando se cambia la temperatura o presión del sistema se lleva a cabo una separación de fases.

**Entrainer.** Es un disolvente que se agrega a una mezcla con el fin de romper un azeótropo, que de otra manera se formaría en una alimentación dentro de un sistema (de destilación, de absorción, de extracción, etc.).

**Deshidratación.** El proceso de deshidratación consiste en eliminar o separa el agua de una mezcla de disolventes con un alto contenido de ella.

**Destilación catalítica.** Sinónimo de destilación reactiva.

**Regla de Aprendizaje.** Es una regla para actualizar los factores de peso en una red neuronal durante su entrenamiento.

**Línealidad.** Este termino se refiere a cuando una los coeficientes de una ecuación no son funciones de las variables dependientes de dicha ecuación.

**Modelo Determinístico(a).** Un modelo determinístico es aquel que puede representar un modelo matemático de un proceso por medio de ecuaciones algebraicas o sistemas de ecuaciones.

**Interfase másica.** Esta se refiere a cuando en un sistema reaccionante con catalizador existe una delgada capa entre el reactivo y el catalizador esta delgada capa es la que se conoce como interfase másica.

**Intrafase másica.** La intrafase masica corresponde a cuando en un sistema reaccionante con catalizador existe la reacción se lleva a cabo en la parte interna del catalizador.

**Número de Damköhler.** Es la relación que existe entre el tiempo de residencia característico dividido entre el tiempo de reacción característico de un sistema reaccionante.

**Flux(es).** Se refiere a una propiedad que es medida con respecto del tiempo y con respecto al área.

**Ingeniero de Diseño de Procesos.** Es una persona que se encarga del diseño de un proceso de un sector industrial específico (tratamiento de aguas, alimentario, petrolero, químico, etc.).

**Ingeniero de Procesos.** Es la persona encargada en la creación, invención o desarrollo de alternativas de procesamiento empleando como herramientas las operaciones unitarias, las cuales se mejoran y analizan por medio de los fenómenos de transporte, termodinámica y cinética química para obtener diagramas de flujo de proceso haciendo la selección de las condiciones de operación adecuadas para obtener los productos deseados con un alto grado de selectividad, mínimas recirculaciones y bajos costos de servicios.

**Industria Petroquímica.** La industria petroquímica se encarga del uso y aprovechamiento de cada uno de los componentes del petróleo así como también de sus posibles combinaciones para obtener productos para el uso de la sociedad.

**Refinación del Petróleo.** La refinación del petróleo consiste en la separación de cada uno de los componentes presentes dentro del petróleo.

**Reactor de Lecho Fluidizado.** Un reactor de lecho fluidizado es aquel en el que los reactivos, los productos y (de existir) el catalizador se mantienen suspendidos dentro de un reactor, la mayoría de las veces por aire o algún compuesto inerte a la reacción.