



DOI: <http://dx.doi.org/10.23857/dc.v7i4>

Ciencias Químicas  
Artículo de investigación

*Predicción de la concentración de cloroformo en el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo mediante ARN*

*Prediction of chloroform concentration in the distillation process of a methanol-chloroform mixture using RNA*

*Predição da concentração de clorofórmio no processo de destilação de uma mistura de metanol e clorofórmio utilizando RNA*

Daniel Antonio Chuquín Vasco <sup>I</sup>  
[daniel.chuquin@esPOCH.edu.ec](mailto:daniel.chuquin@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0001-9637-3140>

Bryan David Rosario Rosero <sup>II</sup>  
[bryan.i10@hotmail.es](mailto:bryan.i10@hotmail.es)  
<https://orcid.org/0000-0002-1625-6401>

Nelson Santiago Chuquín Vasco <sup>III</sup>  
[nelson.chuquin@esPOCH.edu.ec](mailto:nelson.chuquin@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0001-8998-1156>

Juan Pablo Chuquín Vasco <sup>IV</sup>  
[juan.chuquin@esPOCH.edu.ec](mailto:juan.chuquin@esPOCH.edu.ec)  
<https://orcid.org/0000-0001-6680-507X>

**Correspondencia:** [daniel.chuquin@esPOCH.edu.ec](mailto:daniel.chuquin@esPOCH.edu.ec)

\***Recibido:** 25 de mayo de 2022 \***Aceptado:** 2 de junio de 2022 \* **Publicado:** 7 de julio de 2022

- I. Ingeniero Químico, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Grupo de Investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería (GISAI), Riobamba, Ecuador.
- II. Ingeniero Químico, Investigador independiente, Riobamba, Ecuador.
- III. Ingeniero Mecánico, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Grupo de Investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería (GISAI), Riobamba, Ecuador.
- IV. Ingeniero Mecánico, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), Grupo de Investigación en Seguridad, Ambiente e Ingeniería (GISAI), Riobamba, Ecuador.

## Resumen

En este trabajo se realiza la simulación mediante el software de código abierto DWSIM de un sistema de destilación por oscilación de presión de la mezcla azeotrópica metanol-cloroformo para posteriormente predecir por redes neuronales artificiales (ARN) la concentración de cloroformo. El modelo de predicción desarrollado utiliza una capa oculta con 100 neuronas. La temperatura y la fracción molar de cloroformo en la alimentación, la relación de reflujo y temperatura de reboiler en la columna de baja y alta presión se han seleccionado como variables de entrada y la fracción molar de cloroformo y velocidad de flujo en el destilado y residuo de las columnas como variables de salida. El coeficiente de correlación de Pearson de 0.999, el error cuadrático medio de  $1.52 \times 10^{-14}$  y el análisis ANOVA (P-value > 0.05) confirman que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre los datos experimentales y los valores predichos por la ARN, lo cual indica que la capacidad de predicción de la ARN es satisfactoria y que puede ser empleada para la predicción de la concentración de cloroformo en el sistema.

**Palabras clave:** ARN; DWSIM; cloroformo; destilación.

## Abstract

In this work, the simulation is carried out using the open source software DWSIM of a system for distillation by pressure oscillation of the azeotropic methanol-chloroform mixture to subsequently predict the chloroform concentration by artificial neural networks (ANN). The prediction model developed uses a hidden layer with 100 neurons. The temperature and the molar fraction of chloroform in the feed, the reflux ratio and reboiler temperature in the low and high pressure column have been selected as input variables and the molar fraction of chloroform and flow rate in the distillate and residue columns as output variables. The Pearson correlation coefficient of 0.99919 and mean square error of  $1.52 \times 10^{-14}$  and the ANOVA analysis (P-value > 0.05) confirm that there is no statistically significant difference between the experimental data and the values predicted by the RNA, which indicates that the predictability of RNA is satisfactory and that it can be used for the prediction of chloroform concentration in the system.

**Keywords:** ANN; DWSIM; chloroform; distillation.

## Resumo

Neste trabalho, a simulação de um sistema de destilação por oscilação de pressão da mistura azeotrópica de metanol e clorofórmio é realizada utilizando o software de código aberto DWSIM, a fim de prever a concentração de clorofórmio por redes neurais artificiais (ARN). O modelo de previsão desenvolvido utiliza uma camada oculta com 100 neurónios. A temperatura e a fracção molar de clorofórmio na alimentação, a razão de refluxo e a temperatura do reboque na coluna de baixa e alta pressão foram seleccionadas como variáveis de entrada e a fracção molar de clorofórmio e o caudal no destilado e resíduo das colunas como variáveis de saída. O coeficiente de correlação de Pearson de 0,999, o erro quadrático médio de  $1,52 \times 10^{-14}$  e a análise ANOVA (valor  $P > 0,05$ ) confirmam que não há diferença estatisticamente significativa entre os dados experimentais e os valores previstos pelo RNA, indicando que a capacidade de previsão do RNA é satisfatória e que pode ser utilizada para a previsão da concentração de clorofórmio no sistema.

**Palavras-chave:** RNA; DWSIM; clorofórmio; destilação.

## Introducción

En la industria de procesos químicos, la pureza deseada del producto es obtenida mediante procesos de separación, y la destilación es uno de los procesos más utilizados y consume aproximadamente el 95% de la energía total utilizada en la industria de la separación química (Mahdi, Ahmad, Nasef, & Ripin, 2015). La destilación se basa en diferencias de las composiciones entre las fases líquida y vapor. Los procesos de destilación convencionales se utilizan para mezclas ideales o con un comportamiento de equilibrio vapor-líquido casi ideal. Si la mezcla tiene un comportamiento de equilibrio vapor-líquido no ideal, puede formar un azeótropo, que es una mezcla de componentes químicos con composiciones idénticas de fases líquidas y de vapor en equilibrio (Hosgor, Kucuk, Oksal, & Kaymak, 2014). Para separar mezclas azeotrópicas, se han aplicado algunos procesos especiales de destilación, como la destilación por oscilación de presión (PSD), la destilación extractiva (DE) y la destilación azeotrópica (AD) (Yixuan Chen, Liu, & Geng, 2018).

La destilación por oscilación de presión se ha convertido en un método eficiente para separar mezclas azeotrópicas sensibles a la presión, cuya composición azeotrópica cambia claramente a medida que cambia la presión del sistema. Este método presenta ventajas al no introducir un tercer componente (agente de arrastre), proteger el medio ambiente y ahorrar energía mediante la integración del calor.

Sin embargo, los experimentos de laboratorio en destilación por oscilación de presión o destilación extractiva requieren mucho tiempo y son costosos debido a la gran cantidad de parámetros involucrados. Por lo tanto, resulta conveniente predecir los datos experimentales con la ayuda de los programas de simulación disponibles. El uso de simulaciones por computadora para el modelado y diseño de procesos ha resultado la mejor opción establecida para el rápido desarrollo y optimización de procesos en la industria química y petroquímica (Lladosa, Montón, & Burguet, 2011).

La investigación moderna sobre destilación se concentra principalmente en la separación de mezclas no ideales con enfoque en la separación azeotrópica (Widagdo & Seider, 1996). Métodos especiales de destilación, incluida la destilación azeotrópica (W. Li et al., 2015; Yu, Ye, Xu, Zhang, & Dai, 2015), destilación extractiva (An et al., 2015; Luyben, 2015; You, Rodriguez-Donis, & Gerbaud, 2015), y la destilación por oscilación de presión (PSD) (Fulgueras, Kim, & Cho, 2016; R. Li, Ye, Suo, Dai, & Yu, 2016; Luyben, 2013, 2014; Y. Wang et al., 2016; Z. Zhang, Zhang, Li, Liu, & Gao, 2016), son formas comunes de separación de azeótropos.

La destilación por oscilación de presión (PSD) se basa en el hecho de que una mezcla de componentes puede mostrar sensibilidad a la presión, lo que significa que un simple cambio de presión puede alterar la composición del azeótropo (Hosgor et al., 2014). La sensibilidad a la presión de los azeótropos se conoce desde la década de 1860 (Roscoe, 1862). Lewis en 1928, fue el primero, que propuso destilar las mezclas azeotrópicas por PSD (Liang et al., 2017). Desde entonces, el efecto de la presión sobre las mezclas azeotrópicas ha sido explorado en varios artículos de estudios teóricos y experimentales (Horsley, 1947; Knapp & Doherty, 1992; Wasylkiewicz, Kobylka, & Castillo, 2003). El diseño, modelado y optimización de los procesos de destilación por oscilación de presión ha sido analizado por varios autores (Hamad & Dunn, 2002; Kim, Jeon, & Kim, 2016; Lee, Cho, Kim, & Park, 2011; Luyben, 2012), así como también, la capacidad de control dinámico de los procesos de destilación por oscilación para diferentes mezclas azeotrópicas binarias (Yixuan Chen et al., 2018; Mulia-Soto & Flores-Tlacuahuac, 2011; Repke, Forner, & Klein, 2005).

Por otra parte, las investigaciones en redes neuronales artificiales (RNA) han demostrado que tienen potentes capacidades de clasificación, reconocimiento de patrones y predicción de cantidades. Inspirados en los sistemas biológicos, particularmente en la investigación del cerebro humano, las RNA pueden aprender de la experiencia y generalizarla. Desde hace varias décadas, las RNA se están utilizando para una amplia variedad de tareas en muchos campos diferentes de negocios, industria y

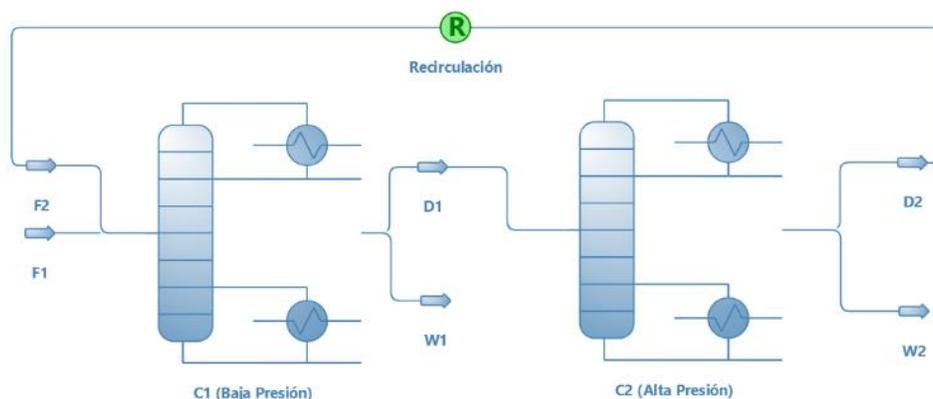
ciencia (Wei et al., 2013; G. Zhang, Eddy, & Hu, 1998). En 1957 Frank Rosenblatt comenzó el desarrollo del Perceptrón, la red neuronal más antigua; utilizada para aplicación como identificador de patrones. Posteriormente, en 1986, David Rumelhart/G. Hinton, redescubrieron el algoritmo de aprendizaje de propagación hacia atrás (backpropagation), planteando un panorama alentador con respecto a las futuras investigaciones y desarrollo de las redes neuronales (Raúl Rojas, 2013). Una de las principales áreas de aplicación de las RNA es el pronóstico (G. Zhang et al., 1998). Se han utilizado redes neuronales artificiales en combinación con visión artificial (Baiocco et al., 2020); en el control inteligente de plantas de agua residual (Yaqub, Asif, Kim, & Lee, 2020); modelos de predicción (Gupta & Nigam, 2020); detección y diagnóstico de fallas (Alblawi, 2020; Heo & Lee, 2018); optimización de procesos (Dantas, Cabral, Dantas Neto, & Moura, 2020); monitoreo en tiempo real y control automático de procesos químicos industriales (Sun, Huang, Jang, & Wong, 2016). El presente estudio, propone y diseña una RNA a partir de la multiplataforma de procesos químicos de código abierto “DWSIM” del proceso propuesto por Hosgor et al., (Hosgor et al., 2014), para predecir la fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de baja y alta presión.

## Metodología

### Descripción del Proceso

La Figura 1 ilustra el proceso de destilación por oscilación de presión para la obtención de cloroformo. En este proceso, primero se envía la corriente de alimentación (F1) que contiene una mezcla equimolar de metanol y cloroformo a una columna de destilación (C1) que tiene 24 etapas. La alimentación se envía a la etapa número 9 mientras que la corriente de alimentación reciclada (F2) se envía a la etapa número 18. La velocidad de flujo de la alimentación es de 100 kmol/ h, 300 K y la relación de reflujo de la torre de baja presión (C1) es de 0.55. Los destilados de la primera columna (D1) se envían a una segunda columna de destilación de alta presión (C2). La segunda columna de destilación tiene una relación de reflujo de 0.95 y produce destilados (D2) que se reciclan nuevamente a la primera columna de destilación. La primera columna de destilación es una columna de destilación de baja presión mantenida a una presión de 1 atm mientras que la segunda columna de destilación es una columna de destilación de alta presión mantenida a una presión de 10 atm.

**Figura 1:** Esquema de destilación por oscilación de presión para la obtención de cloroformo



Fuente: Autores,2022

### Simulación en DWSIM

DWSIM es un simulador de procesos químicos de código abierto, compatible con CAPE-OPEN para sistemas Windows, Linux y macOS. Escrito en VB.NET y C#. DWSIM presenta un conjunto integral de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas de reacción, herramientas de caracterización del petróleo y una interfaz gráfica con todas las funciones (Medeiros, 2020) .

Las torres de destilación empleadas para la simulación de la Fig.1 corresponden al modelo de “ChemSep Column” y el paquete de propiedades termodinámicas utilizado en las columnas para la simulación es el DECHEMA; por otro lado, las especificaciones generales de la columna de destilación están definidas por el modelo termodinámico NRTL. Las condiciones establecidas en la Tabla 1, corresponden a las condiciones de operación con las cuales se realizó la simulación del proceso.

**Tabla 1:** Parámetros de operación de la columna de baja y alta presión

Parámetro	Baja Presión	Alta Presión	Unidad
Presión	1	10	atm
Platos totales	24	25	-
Plato de alimentación	9	20	-
Plato de recirculación	18	-	-

Valor K	DECHEMA	DECHEMA	-
Coefficiente de actividad	NRTL	NRTL	-
Presión de vapor	Antoine	Antoine	-

Fuente: Autores, 2022

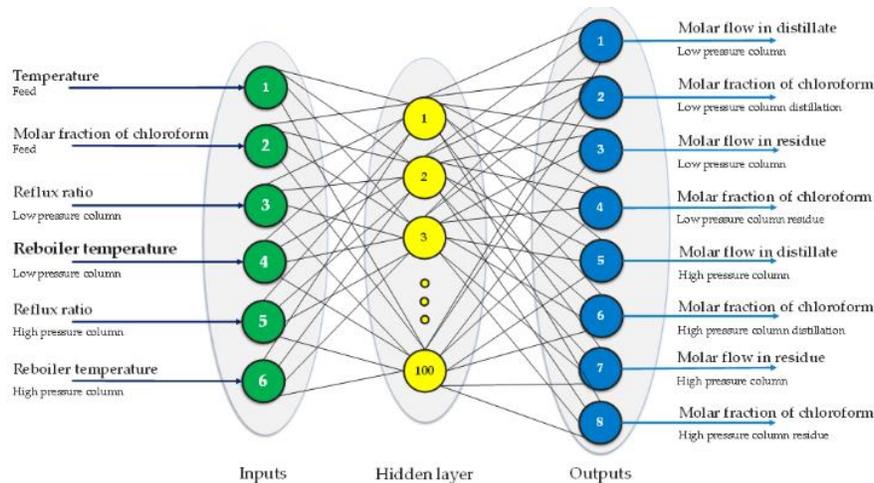
### Diseño y entrenamiento de la RNA

En la arquitectura de la red neuronal artificial se debe definir la estructura, las funciones de transferencia y el número de neuronas del modelo de predicción. Para determinar el número de capas y neuronas, algunos autores sugieren el uso de reglas heurísticas (W. Wang, Van Gelder, & Vrijling, 2005) o la aplicación de metodologías sistemáticas como poda y crecimiento (Narasimha, Delashmit, Manry, Li, & Maldonado, 2008) y enfoques basados en algoritmos genéticos (Nolfi & Parisi, 1997; Stanley & Miikkulainen, 2002). Sin embargo, por simplicidad, el número de capas y neuronas se eligió siguiendo el método de generación dinámica de la topología (Tabares, Branch, & Valencia, 2006), técnica que consiste en la búsqueda dinámica y forzada de los mejores mínimos locales, es decir si el valor está por debajo del valor esperado una nueva neurona es incorporada, pero si el error es cero o muy cercano a cero una neurona será retirada con el fin que no memorice, garantizando así un buen rendimiento en el pronóstico y minimizando el error de predicción.

El diseño de la RNA (Figura 2) se basa en seis (6) parámetros de entrada: 1) temperatura y 2) fracción molar del cloroformo en la alimentación, 3) Relación de reflujo y 4) Temperatura del reboiler en la columna de baja presión, 5) Relación de reflujo y 6) Temperatura del reboiler en la columna de alta presión mientras que los ocho (8) parámetros de salida que se han considerado corresponden a: 1) Flujo molar del destilado y 2) residuo y 3) fracción molar de cloroformo en el destilado y 4) residuo de la columna de baja presión; 5) Flujo molar del destilado y 6) residuo y 7) fracción molar de cloroformo en el destilado y 8) residuo de la columna de alta presión.

La RNA diseñada se entrena con el algoritmo de regularización Bayesiana (BR), que es una función prominente utilizada en los problemas de ajuste de curva y emplea una capa oculta con 100 neuronas activada con la función de transferencia sigmoideal tangente hiperbólica (TANSIG).

**Figura 2:** Diseño de la RNA



Fuente: Autores, 2022

Una vez validado el proceso de simulación en DWSIM, se generó una base de 100 pares de datos (con 6 entradas y 8 salidas), provenientes de la variación aleatoria de los parámetros de operación y/o funcionamientos seleccionados para el estudio. En la Tabla 2, se detalla el rango de variación de las entradas.

**Tabla 2:** Restricciones para la entrada de la RNA

Parámetro	Mínimo	Máximo	Unidad
Temperatura	290	310	K
Fracción molar de Cloroformo	0.12	0.90	-
Relación de Reflujo en columna de baja presión	0.12	0.98	-
Relación de Reflujo en columna de alta presión	0.51	1.50	-
Temperatura del calderín en columna de baja presión	329	337	K
Temperatura del calderín en columna de alta presión	415	426	K

Fuente: Autores, 2022

Para validar la red neuronal artificial y demostrar la confiabilidad del modelo para la predicción de las principales fracciones molares en el sistema alternativo se utilizaron los indicadores de desempeño: error cuadrático medio (MSE) y coeficiente de regresión (R) mediante las Ec. (1) y Ec. (2) y adicionalmente un análisis de varianza ANOVA.

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

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

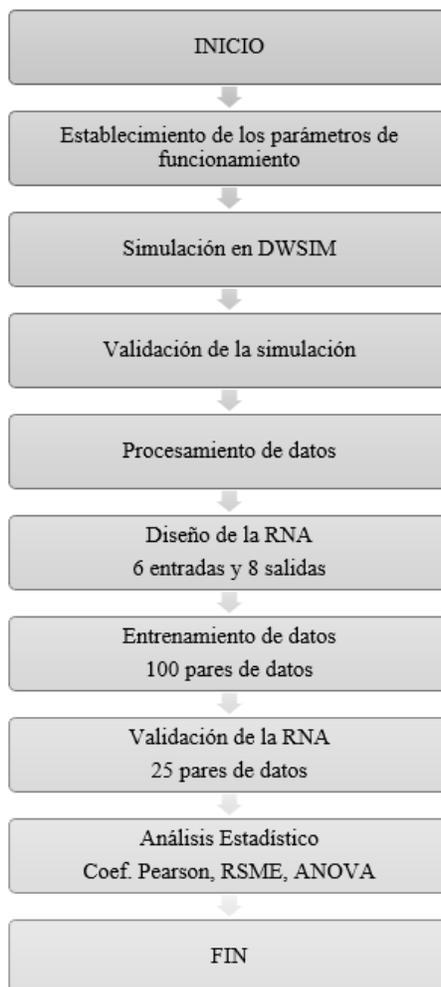
Donde n es el número de observaciones; y, son los resultados reales (salidas de la simulación en DWSIM); y' son los resultados predichos (salidas de la ARN).

Tomando en cuenta las recomendaciones establecidas por Chen et al., (Yingyi Chen, Song, Liu, Yang, & Li, 2020) del conjunto total de datos generados, el 70% de los datos son seleccionados para el diseño y entrenamiento de la RNA mediante la herramienta NNTOOL de MATLAB versión R2018a, mientras que el 30% de los datos se utilizan para realizar una validación adicional mediante el análisis estadístico correspondiente que permita corroborar el funcionamiento de la RNA y evaluar su nivel de aprendizaje.

### Descripción de la metodología

La primera parte de este estudio consiste en simular el proceso de la Fig.1, tomando en cuenta las condiciones de operación de las columnas de destilación. El siguiente paso es validar los resultados obtenidos y proceder con el diseño de la RNA considerando las entradas y salidas determinadas para la predicción del proceso y las restricciones impuestas por la simulación. Posteriormente, se realiza el entrenamiento y validación de la RNA mediante análisis gráfico y estadístico para evaluar la capacidad de predicción de la red neuronal. La Fig. 3 ilustra el diagrama de flujo de la metodología.

**Figura 3:** Metodología de la RNA diseñada



**Fuente:** Autores,2022

## Resultados

### Validación de la simulación

Previo al diseño de la RNA es indispensable realizar la comparación de la simulación desarrollada en DWSIM con resultados de la literatura. El estudio desarrollado por Hosgor et al., (Hosgor et al., 2014) fue utilizado para la validación. El proceso en DWSIM se adaptó conforme a la simulación desarrollada en ASPEN PLUS. La Tabla 3 resume la comparación de los resultados. Como se puede observar, los errores porcentuales de las fracciones molares de interés en sus respectivas columnas de destilación no excedan el 6%.

**Tabla 3:** Validación de la simulación

Corriente de flujo	Parámetro	ASPEN (Hosgor et al., 2014)	DWSIM	Error (%)
Destilado de la columna de baja presión	Temperatura	327	326.12	0.27
	Flujo molar	134.5	133.59	0.67
	Fracción molar de metanol	0.36	0.355	1.31
	Fracción molar de cloroformo	0.64	0.644	0.72
Residuo de la columna de baja presión	Temperatura	341.1	337.01	1.20
	Flujo molar	50	50.44	0.89
	Fracción molar de metanol	0.995	0.984	1.07
Destilado de la columna de alta presión	Temperatura	405.5	404.85	0.16
	Flujo molar	80.2	84.58	5.47
	Fracción molar de metanol	0.57	0.560	1.63
	Fracción molar de cloroformo	0.43	0.439	2.16
Residuo de la columna de alta presión	Temperatura	426.6	426.40	0.04
	Flujo molar	50	49.00	1.98
	Fracción molar de cloroformo	0.995	0.999	0.42

Fuente: Autores, 2022

### Selección del número de neurona en la capa oculta

Después de seguir un enfoque de prueba y error combinado el método de generación dinámica y a su vez con base en el mejor coeficiente de determinación R del entrenamiento, el modelo RNA óptimo tiene una capa oculta con 100 neuronas. La capa oculta utiliza la función de transferencia sigmoideal tangente hiperbólica (TANSIG).

En la Tabla 4, se resumen algunos de los ensayos seleccionados con los valores correspondientes de correlación lineal (R) y de error cuadrático medio (MSE) para varias topologías de red.

**Tabla 4:** Valores de R y MSE para determinar el número óptimo de neuronas en la capa oculta

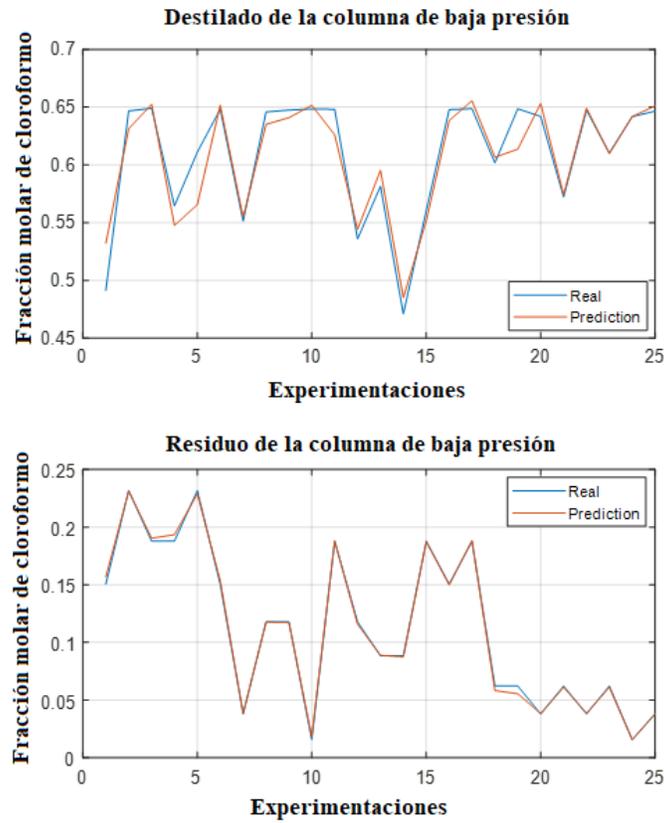
Número de neurona en la capa oculta	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization	
	R	MSE	R	MSE
10	0.993	5.56E-04	0.998	1.70E-04
20	0.996	1.78E-03	0.998	1.71E-05
40	0.983	1.12E-02	0.996	7.33E-10
50	0.962	2.65E-02	0.994	1.49E-14
75	0.897	8.13E-02	0.999	2.03E-14
80	0.894	7.40E-02	0.998	1.68E-14
95	0.839	8.57E-02	0.998	3.00E-14
100	0.812	0,156000	0.999	1.52E-14
120	0.755	2.17E-01	0.998	2.04E-14
150	0.697	3.20E-01	0.999	8.80E-15

Fuente: Autores, 2022

### Modelo de predicción de la fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de baja y alta presión

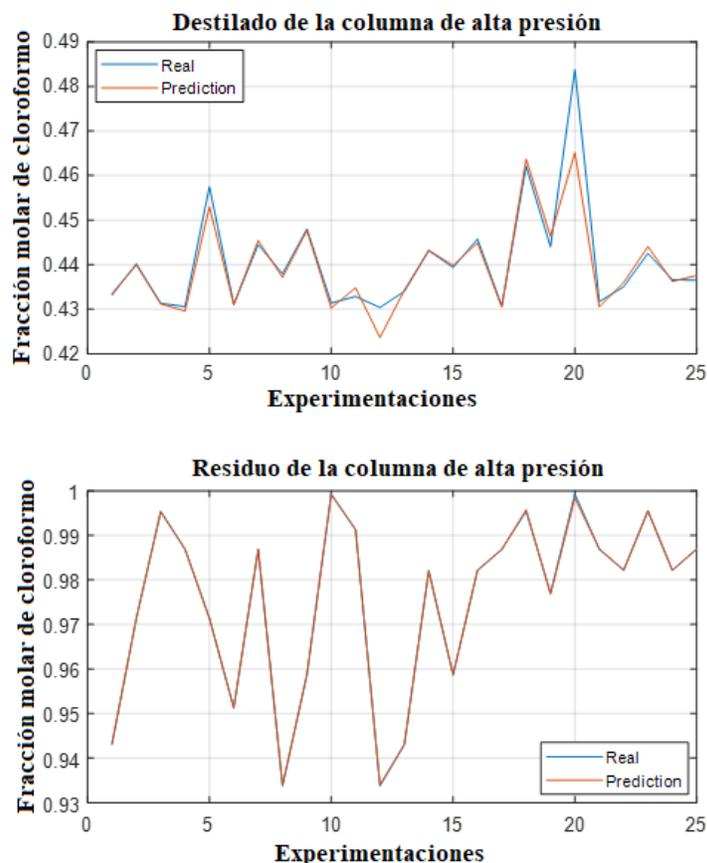
Para evaluar la capacidad de predicción de la RNA se ha generado un conjunto de 25 datos aleatorios (Condiciones de entrada a la RNA) que fueron simulados en DWSIM para determinar las nuevas observaciones (experimentaciones) en función de las nuevas condiciones de operación. Para verificar la capacidad de predicción se utilizó la RNA diseñada para predecir la concentración de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de baja y de alta presión. La comparación entre las experimentaciones y las predicciones se muestran en la Figura 4 y 5. Los resultados muestran un solapamiento entre las experimentaciones y las predicciones por lo que se puede deducir que la ARN diseñada presenta una buena capacidad y precisión de predicción de las fracciones molares de los destilados y residuos de las columnas de destilación.

**Figura 4:** Comparación entre las experimentaciones (Real) y las predicciones (Predicción) de la fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de baja presión



Fuente: Autores,2022

**Figura 5:** Comparación entre las experimentaciones (Real) y las predicciones (Predicción) de la fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de alta presión



Fuente: Autores,2022

Además, para determinar la idoneidad de la RNA se llevó a cabo un análisis estadístico utilizando las experimentaciones y predicciones para las corrientes de flujo y fracciones molares de cloroformo. El análisis estadístico en este caso comparar varias muestras usando el análisis de la varianza (ANOVA) que se utiliza para contrastar la hipótesis de igualdad de medias (hipótesis nula). El nivel de significancia tomada para esta investigación es de 0.05 (o un nivel de confianza del 95%). Como se detalla en la Tabla 5, el valor-P es mayor que 0.05 en todas las variables comparadas; se acepta la hipótesis nula, por lo que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos por la RNA con un 95% de confianza. Esta prueba revela que la RNA construida, es estadísticamente válida para la predicción de las fracciones molares de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de destilación de baja y de alta presión.

**Tabla 5:** ANOVA

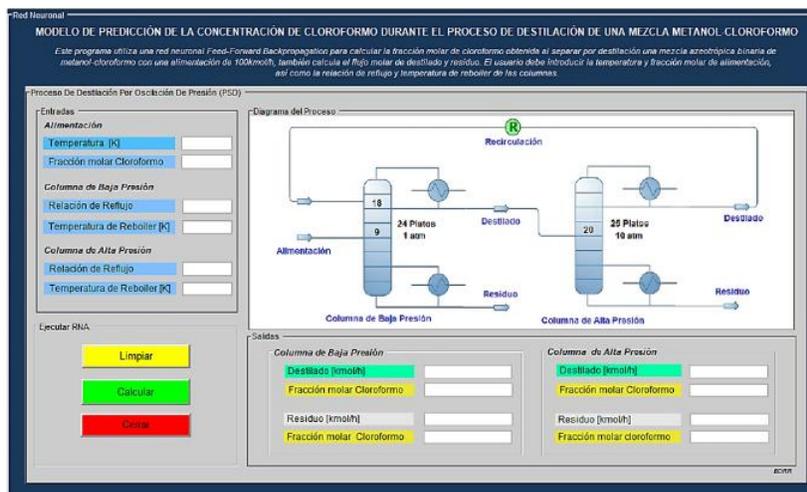
<b>Parámetro evaluado</b>	<b>Razón-F</b>	<b>Valor-P</b>
Flujo molar de destilado en la columna de baja presión	0.139	0.710
Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de baja presión	0.018	0.891
Flujo molar de residuo en la columna de baja presión	0.000	0.989
Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de baja presión	0.000	0.997
Flujo molar de destilado en la columna de alta presión	0.909	0.664
Fracción molar de cloroformo en destilado de la columna de alta presión	0.095	0.758
Flujo molar de residuo en la columna de alta presión	0.000	0.989
Fracción molar de cloroformo en residuo de la columna de alta presión	0.000	0.998

**Fuente:** Autores, 2022

### **Interfaz gráfica de usuario (GUI)**

Se desarrolló una interfaz gráfica de usuario (GUI) integrando la RNA, de modo que los usuarios puedan realizar las predicciones en una interfaz fácil de usar. Esta interfaz, permite al usuario ingresar los 6 parámetros de entrada del modelo: la temperatura y fracción molar de cloroformo en la alimentación, así como la relación de reflujo y temperatura de reboiler de las columnas; para predecir el flujo y la fracción molar de cloroformo en los destilados y residuos de las columnas. En la Figura 6 se observa la interfaz gráfica desarrollada.

**Figura 5:** GUI desarrollada para la predicción de las fracciones molares de cloroformo



Fuente: Autores,2022

## Conclusiones

En este estudio, se diseñó una red neuronal (RNA) para predecir las fracciones molares de cloroformo en un sistema de oscilación de presión de una mezcla azeotrópica metanol – cloroformo a partir del proceso de simulación en DWSIM. La RNA diseñada posee 100 neuronas ocultas y se entrenó con una base de 100 pares de datos con 6 variables de entrada: temperatura y fracción molar del cloroformo en la alimentación, relación de reflujo y temperatura del reboiler en la columna de baja presión, relación de reflujo y temperatura del reboiler en la columna de alta presión y es capaz de predecir mientras 8 variables de salida: Flujo molar del destilado y residuo en la columna de baja presión, fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de baja presión; Flujo molar del destilado y residuo de la columna de alta presión, fracción molar de cloroformo en el destilado y residuo de la columna de alta presión.

La RNA fue entrenada con el algoritmo de regularización Bayesiano, tiene un MSE de  $1.52E-14$  y un coeficiente de regresión total de 0,999. Además, la RNA se validó a través de un análisis estadístico comparativo (ANOVA) entre las observaciones (DWSIM) y los valores predichos por la RNA. Las pruebas estadísticas señalan que la red predice adecuadamente las salidas estudiadas con un nivel de significancia del 95%. Basado en los resultados, se deduce que la RNA diseñada en este estudio puede ser usada como una herramienta de predicción para la mejora continua del proceso y para estudios futuros de optimización.

## Referencias

1. Alblawi, A. (2020). Fault diagnosis of an industrial gas turbine based on the thermodynamic model coupled with a multi feedforward artificial neural networks. *Energy Reports*. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2020.04.029>
2. An, Y., Li, W., Li, Y., Huang, S., Ma, J., Shen, C., & Xu, C. (2015). Design/optimization of energy-saving extractive distillation process by combining preconcentration column and extractive distillation column. *Chemical Engineering Science*. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.05.003>
3. Baiocco, G., Almonti, D., Guarino, S., Tagliaferri, F., Tagliaferri, V., & Ucciardello, N. (2020). Image-based system and artificial neural network to automate a quality control system for cherries pitting process. In *Procedia CIRP*. <https://doi.org/10.1016/j.procir.2020.05.091>
4. Chen, Yingyi, Song, L., Liu, Y., Yang, L., & Li, D. (2020). A review of the artificial neural network models for water quality prediction. *Applied Sciences (Switzerland)*, 10(17). <https://doi.org/10.3390/app10175776>
5. Chen, Yixuan, Liu, C., & Geng, Z. (2018). Design and control of fully heat-integrated pressure swing distillation with a side withdrawal for separating the methanol/methyl acetate/acetaldehyde ternary mixture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2017.11.013>
6. Dantas, T. N. C., Cabral, T. J. O., Dantas Neto, A. A., & Moura, M. C. P. A. (2020). Enrichment of patchoulol extracted from patchouli (*Pogostemon cablin*) oil by molecular distillation using response surface and artificial neural network models. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.09.011>
7. Fulgueras, A. M., Kim, D. S., & Cho, J. (2016). Modeling and optimization study of pressure-swing distillation for the separation process of acetone-methanol mixture with vapor-liquid equilibrium analysis. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. <https://doi.org/10.1252/jcej.14we424>
8. Gupta, N., & Nigam, S. (2020). Crude Oil Price Prediction using Artificial Neural Network. In *Procedia Computer Science*. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2020.03.136>
9. Hamad, A., & Dunn, R. F. (2002). Energy optimization of pressure-swing azeotropic distillation systems. *Industrial and Engineering Chemistry Research*.

---

<https://doi.org/10.1021/ie020219h>

10. Heo, S., & Lee, J. H. (2018). Fault detection and classification using artificial neural networks. *IFAC-PapersOnLine*. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2018.09.380>
11. Horsley, L. H. (1947). Graphical method for predicting azeotropism and effect of pressure on azeotropic constants. *Industrial and Engineering Chemistry*. <https://doi.org/10.1021/ba-1952-0006.ch004>
12. Hosgor, E., Kucuk, T., Oksal, I. N., & Kaymak, D. B. (2014). Design and control of distillation processes for methanol-chloroform separation. *Computers and Chemical Engineering*, 67, 166–177. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.03.026>
13. Kim, W., Jeon, S. W., & Kim, Y. (2016). Model-based multi-objective optimal control of a VRF (variable refrigerant flow) combined system with DOAS (dedicated outdoor air system) using genetic algorithm under heating conditions. *Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.03.139>
14. Knapp, J. P., & Doherty, M. F. (1992). A New Pressure-Swing-Distillation Process for Separating Homogeneous Azeotropic Mixtures. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie00001a047>
15. Lee, J., Cho, J., Kim, D. M., & Park, S. (2011). Separation of tetrahydrofuran and water using pressure swing distillation: Modeling and optimization. *Korean Journal of Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1007/s11814-010-0467-1>
16. Li, R., Ye, Q., Suo, X., Dai, X., & Yu, H. (2016). Heat-Integrated Pressure-Swing Distillation Process for Separation of a Maximum-Boiling Azeotrope Ethylenediamine/Water. *Chemical Engineering Research and Design*. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.10.038>
17. Li, W., Zhong, L., He, Y., Meng, J., Yao, F., Guo, Y., & Xu, C. (2015). Multiple Steady-States Analysis and Unstable Operating Point Stabilization in Homogeneous Azeotropic Distillation with Intermediate Entrainer. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b00572>
18. Liang, S., Cao, Y., Liu, X., Li, X., Zhao, Y., Wang, Y., & Wang, Y. (2017). Insight into pressure-swing distillation from azeotropic phenomenon to dynamic control. *Chemical Engineering Research and Design*. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.10.040>
19. Lladosa, E., Montón, J. B., & Burguet, M. C. (2011). Separation of di-n-propyl ether and n-

- propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.07.010>
20. Luyben, W. L. (2012). Pressure-swing distillation for minimum- and maximum-boiling homogeneous azeotropes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie3002414>
21. Luyben, W. L. (2013). Comparison of extractive distillation and pressure-swing distillation for acetone/chloroform separation. *Computers and Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.10.014>
22. Luyben, W. L. (2014). Control of a heat-integrated pressure-swing distillation process for the separation of a maximum-boiling azeotrope. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie502395h>
23. Luyben, W. L. (2015). Improved design of an extractive distillation system with an intermediate-boiling solvent. *Separation and Purification Technology*. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2015.10.020>
24. Mahdi, T., Ahmad, A., Nasef, M. M., & Ripin, A. (2015). State-of-the-art technologies for separation of azeotropic mixtures. *Separation and Purification Reviews*. <https://doi.org/10.1080/15422119.2014.963607>
25. Medeiros, D. (2020). DWSIM - Open Source Process Simulator Web Site.
26. Mulia-Soto, J. F., & Flores-Tlacuahuac, A. (2011). Modeling, simulation and control of an internally heat integrated pressure-swing distillation process for bioethanol separation. *Computers and Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.03.011>
27. Narasimha, P. L., Delashmit, W. H., Manry, M. T., Li, J., & Maldonado, F. (2008). An integrated growing-pruning method for feedforward network training. *Neurocomputing*. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2007.08.026>
28. Nolfi, S., & Parisi, D. (1997). Evolution of Artificial Neural Networks. *Neural Networks*.
29. Raúl Rojas. (2013). *Neural Networks: A Systematic Introduction*. Berlin: Springer Science & Business Media. Retrieved from <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-61068-4>
30. Repke, J. U., Forner, F., & Klein, A. (2005). Separation of homogeneous azeotropic mixtures by pressure swing distillation - Analysis of the operation performance. *Chemical Engineering*

- and Technology. <https://doi.org/10.1002/ceat.200500232>
31. Roscoe, H. E. (1862). On the composition of the aqueous acids of constant boiling point. - Second communication. Journal of the Chemical Society. <https://doi.org/10.1039/JS8621500270>
  32. Stanley, K. O., & Miikkulainen, R. (2002). Evolving neural networks through augmenting topologies. *Evolutionary Computation*. <https://doi.org/10.1162/106365602320169811>
  33. Sun, K., Huang, S. hsuan, Jang, S. S., & Wong, D. S. H. (2016). Development of soft sensor with neural network and nonlinear variable selection for crude distillation unit process. In *Computer Aided Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63428-3.50061-8>
  34. Tabares, H., Branch, J., & Valencia, J. (2006). Dynamic topology generation of an artificial neural network of the multilayer perceptron type. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*.
  35. Wang, W., Van Gelder, P. H. A. J. M., & Vrijling, J. K. (2005). Some issues about the generalization of neural networks for time series prediction. In *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. [https://doi.org/10.1007/11550907\\_88](https://doi.org/10.1007/11550907_88)
  36. Wang, Y., Bu, G., Wang, Y., Zhao, T., Zhang, Z., & Zhu, Z. (2016). Application of a simulated annealing algorithm to design and optimize a pressure-swing distillation process. *Computers and Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.09.014>
  37. Wasylkiewicz, S. K., Kobyłka, L. C., & Castillo, F. J. L. (2003). Pressure sensitivity analysis of azeotropes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie020079b>
  38. Wei, H. M., Wang, F., Zhang, J. L., Liao, B., Zhao, N., Xiao, F. K., ... Sun, Y. H. (2013). Design and control of dimethyl carbonate-methanol separation via pressure-swing distillation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie3034976>
  39. Widagdo, S., & Seider, W. D. (1996). Journal review. Azeotropic distillation. *AIChE Journal*. <https://doi.org/10.1002/aic.690420110>
  40. Yaqub, M., Asif, H., Kim, S., & Lee, W. (2020). Modeling of a full-scale sewage treatment plant to predict the nutrient removal efficiency using a long short-term memory (LSTM)

---

neural network. Journal of Water Process Engineering.  
<https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101388>

41. You, X., Rodriguez-Donis, I., & Gerbaud, V. (2015). Improved design and efficiency of the extractive distillation process for acetone-methanol with water. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie503973a>
42. Yu, H., Ye, Q., Xu, H., Zhang, H., & Dai, X. (2015). Design and control of dividing-wall column for tert-butanol dehydration system via heterogeneous azeotropic distillation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/ie504325g>
43. Zhang, G., Eddy, P., & Hu, M. (1998). Forecasting with artificial neural networks: The state of the art. *International Journal of Forecasting*, 14(1), 35–62. [https://doi.org/10.1016/S0169-2070\(97\)00044-7](https://doi.org/10.1016/S0169-2070(97)00044-7)
44. Zhang, Z., Zhang, Q., Li, G., Liu, M., & Gao, J. (2016). Design and control of methyl acetate-methanol separation via heat-integrated pressure-swing distillation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2016.06.013>

©2022 por los autores. Este artículo es de acceso abierto y distribuido según los términos y condiciones de la licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional (CC BY-NC-SA 4.0) (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>).