



UNAP



FACULTAD DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA

**MAESTRÍA EN INGENIERÍA DE SISTEMAS CON MENCIÓN EN
GERENCIA DE LA INFORMACIÓN Y GESTIÓN DE SOFTWARE**

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

**MODELO DE REDES NEURONALES PARA LA ESTIMACIÓN DEL
EQUILIBRIO TERMODINÁMICO LÍQUIDO-VAPOR EN
MEZCLAS DE DIÓXIDO DE CARBONO-ACETATO
DE ISOPROPÍLICO**

**PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN INGENIERÍA
DE SISTEMAS CON MENCIÓN EN GERENCIA DE LA INFORMACIÓN Y
GESTIÓN DE SOFTWARE**

PRESENTADO POR: JUAN CARLOS CASTILLO SANCHEZ

JEFFERSON ALEXANDER NUÑEZ PEÑAHERRERA

ASESOR: ING. SIST. JORGE PUGA DE LA CRUZ, MTRO.

IQUITOS, PERÚ

2024



UNAP



FACULTAD DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA

**MAESTRÍA EN INGENIERÍA DE SISTEMAS CON MENCIÓN EN
GERENCIA DE LA INFORMACIÓN Y GESTIÓN DE SOFTWARE**

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

**MODELO DE REDES NEURONALES PARA LA ESTIMACIÓN DEL
EQUILIBRIO TERMODINÁMICO LÍQUIDO-VAPOR EN
MEZCLAS DE DIÓXIDO DE CARBONO-ACETATO
DE ISOPROPÍLICO**

**PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN INGENIERÍA
DE SISTEMAS CON MENCIÓN EN GERENCIA DE LA INFORMACIÓN Y
GESTIÓN DE SOFTWARE**

PRESENTADO POR: JUAN CARLOS CASTILLO SANCHEZ

JEFFERSON ALEXANDER NUÑEZ PEÑAHERRERA

ASESOR: ING. SIST. JORGE PUGA DE LA CRUZ, MTRO.

IQUITOS, PERÚ

2024

ACTA DE SUSTENTACIÓN



UNAP

Escuela de Postgrado
"Oficina de Asuntos



ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TRABAJO DE INVESTIGACIÓN N°117-2024-OAA-EPG-UNAP

En Iquitos en la Escuela de Postgrado (EPG) de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana (UNAP) a los diecinueve días del mes de julio de 2024 a las 11:00 a.m., se dió inicio a la sustentación del Trabajo de Investigación denominada: "MODELO DE REDES NEURONALES PARA LA ESTIMACIÓN DEL EQUILIBRIO TERMODINÁMICO LÍQUIDO-VAPOR EN MEZCLAS DE DIÓXIDO DE CARBONO-ACETATO DE ISOPROPÍLICO", aprobado con Resolución Directoral N°1141-2024-EPG-UNAP, presentado por los egresados JUAN CARLOS CASTILLO SÁNCHEZ y JEFFERSON ALEXANDER NUÑEZ PEÑAHERRERA, para optar el Grado Académico de Maestro en Ingeniería de Sistemas con mención en Gerencia de la Información y Gestión de Software, que otorga la UNAP de acuerdo a la Ley Universitaria 30220 y el Estatuto de la UNAP.

El jurado calificador designado mediante Resolución Directoral N°0801-2024-EPG-UNAP, esta conformado por los profesionales siguientes:

Ing.Ind. Carlos Alberto García Cortegano, Dr.	(Presidente)
Ing. Elect. Alejandro Reátegui Pezo, Dr.	(Miembro)
Ing. Sist. Jimmy Max Ramírez Villacorta, Mtro.	(Miembro)

Después de haber escuchado la sustentación y luego de formuladas las preguntas, éstas fueron respondidas: CORRECTAMENTE

Finalizado la evaluación; se invitó al público presente y a los sustentantes abandonar el recinto; y, luego de una amplia deliberación por parte del jurado, se llegó al resultado siguiente:

La sustentación pública y del trabajo de investigación ha sido: APROBADA con calificación 17.

A continuación, el Presidente del Jurado da por concluida la sustentación, siendo las 11:45 del diecinueve de julio de 2024; con lo cual, se le declara a los sustentantes APTOS, para Grado Académico de Maestro en Ingeniería de Sistemas con mención en Gerencia de la Información y Gestión de Software.

Ing.Ind. Carlos Alberto García Cortegano, Dr.
Presidente

Ing. Elect. Alejandro Reátegui Pezo, Dr.
Miembro

Ing. Sist. Jimmy Max Ramírez Villacorta, Mtro.
Miembro

Ing. Sist. Jorge Puga de la Cruz, Mtro.
Asesor

Somos la Universidad licenciada más importante de la Amazonia del Perú, rumbo a la acreditación

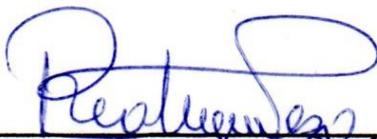
Calle Los Rosales cuadra 5 s/n, San Juan Bautista, Maynas, Perú
Celular: 953 664 439 - 956 875 744
Correo electrónico: postgrado@unapiquitos.edu.pe www.unapiquitos.edu.pe



TRABAJO DE INVESTIGACIÓN APROBADA EN SUSTENTACIÓN EL
DIESCINUEVE DE JULIO DE 2024, EN LA ESCUELA DE POSTGRADO DE
LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA AMAZONÍA PERUANA, EN LA
CIUDAD DE IQUITOS – PERÚ.



**ING. IND. CARLOS ALBERTO GARCÍA CORTEGADO, DR.
PRESIDENTE**



**ING. ELECT. ALEJANDRO REATEGUI PEZO, DR.
MIEMBRO**



**ING.SIST. JIMMY MAX RAMÍREZ VILLACORTA, MTRO.
MIEMBRO**



**ING. SIST. JORGE PUGA DE LA CRUZ, MTRO.
ASESOR**

NOMBRE DEL TRABAJO

EPG_M_TRAB DE INV_CASTILLO SANCH
EZ_NUÑEZ PEÑAHERRERA.pdf

AUTOR

CASTILLO SANCHEZ / NUÑEZ PEÑAHER
RERA

RECuento DE PALABRAS

7555 Words

RECuento DE CARACTERES

43384 Characters

RECuento DE PÁGINAS

35 Pages

TAMAÑO DEL ARCHIVO

359.9KB

FECHA DE ENTREGA

Mar 27, 2024 11:38 AM GMT-5

FECHA DEL INFORME

Mar 27, 2024 11:39 AM GMT-5

● **12% de similitud general**

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para cada base de datos.

- 10% Base de datos de Internet
- Base de datos de Crossref
- 5% Base de datos de trabajos entregados
- 1% Base de datos de publicaciones
- Base de datos de contenido publicado de Crossref

● **Excluir del Reporte de Similitud**

- Material bibliográfico
- Coincidencia baja (menos de 10 palabras)

A Dios por darnos vida y salud, para desarrollar y concluir este trabajo de investigación y a nuestros padres por ser nuestras guía y apoyo incondicional que siempre nos brindan, por estar ahí cuando más lo necesitamos.

AGRADECIMIENTO

Es un honor para nosotros dirigirnos a ustedes en esta oportunidad para expresar nuestro más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que hicieron posible la culminación de nuestra tesis de Maestría en Ingeniería de Sistemas con Mención en Gerencia de la Información y Gestión de Software, en la Escuela de Postgrado de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana.

En primer lugar, queremos expresar nuestro más profundo agradecimiento a nuestro asesor, el Ing. Sist. Jorge Puga de la Cruz, Mtro., por su guía inestimable y ayuda invaluable durante todo el proceso de investigación. Su experiencia, conocimientos y consejos han sido fundamentales para la culminación exitosa de este proyecto y por eso siempre estaremos agradecidos.

También queremos agradecer a todos los docentes de la Escuela de Postgrado de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana, quienes con su dedicación y compromiso han contribuido a nuestra formación integral como profesionales de la Ingeniería de Sistemas. Sus enseñanzas y consejos nos han guiado en este camino de aprendizaje y crecimiento, y por eso siempre estaremos agradecidos.

ÍNDICE DE CONTENIDO

	Página
Carátula	i
Contracarátula	ii
Acta de sustentación	iii
Jurado	iv
Resultado del informe de similitud	v
Dedicatoria	vi
Agradecimiento	vii
Índice de contenido	viii
Índice de tablas	ix
Índice de gráficos	x
Resumen	xi
Abstract	xii
INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO	3
1.1. Antecedentes	3
1.2. Bases teóricas	4
1.3. Definición de términos básicos	7
CAPÍTULO II: VARIABLES E HIPÓTESIS	9
2.1. Variables y su operacionalización	9
2.2. Formulación de hipótesis	10
CAPÍTULO III: METODOLOGÍA	11
3.1. Tipo y Diseño de la investigación	11
3.2. Población y muestra	11
3.3. Técnicas e instrumentos	12
3.4. Procedimientos de recolección de datos	12
3.5. Técnicas de procesamientos y análisis de los datos	13
3.6. Aspectos éticos	14
CAPÍTULO IV: RESULTADOS	15
CAPÍTULO V: DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS	27
CAPÍTULO VI: PROPUESTA	30
CAPÍTULO VII: CONCLUSIONES	31
CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES	33
CAPÍTULO VIII: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	34
ANEXOS:	
- 1. Matriz de consistencia	
- 2. Tabla de operacionalización de variables	
- 3. Instrumentos de recolección de datos	
- 4. Arquitectura de las redes neuronales	
- 5. Entrenamiento de la red neuronal	
- 6. Gradientes, Mu y validación checks.	
- 7. Eficiencia de la validación	
- 8. Histograma de error	
- 9. Correlaciones	
- 10. Código Fuente	

ÍNDICE DE TABLAS

		Páginas
Tabla N°1	Lista de Datos de equilibrio liquido – vapor para el sistema Dióxido de Carbono –Acetato de Isopropílico	16
Tabla N°2	Lista de Conjunto de Datos de Validación Independiente	23

ÍNDICE DE GRÁFICOS

		Páginas
Gráfico N°1	Gráfico del rendimiento de la validación	21
Gráfico N°2	Gráficos de coeficiente de correlación	22

RESUMEN

Esta investigación aborda la problemática de estimar con precisión el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico mediante el uso de redes neuronales artificiales. El objetivo principal es desarrollar un modelo que supere las limitaciones de los métodos tradicionales, proporcionando estimaciones más precisas y eficientes. Se empleó una metodología basada en el diseño, entrenamiento, y validación de una red neuronal, utilizando datos experimentales para el ajuste del modelo. Los resultados indican una mejora significativa en la precisión de las estimaciones del equilibrio termodinámico en comparación con los enfoques convencionales. Las conclusiones destacan la viabilidad de las redes neuronales artificiales como herramienta avanzada para la predicción en ingeniería química, ofreciendo implicaciones valiosas para el diseño y optimización de procesos industriales. Este estudio contribuye al avance del conocimiento en la modelización de procesos termodinámicos y subraya la importancia de integrar tecnologías de inteligencia artificial en la resolución de problemas complejos de la ingeniería.

Palabras clave: Equilibrio termodinámico, Redes neuronales artificiales, Dióxido de carbono, Acetato de isopropílico.

ABSTRACT

This research addresses the challenge of accurately estimating the liquid-vapor thermodynamic equilibrium in mixtures of carbon dioxide and isopropyl acetate using artificial neural networks. The main goal is to develop a model that surpasses the limitations of traditional methods, providing more precise and efficient estimates. A methodology involving the design, training, and validation of a neural network, using experimental data for model adjustment, was employed. The findings indicate a significant improvement in the precision of thermodynamic equilibrium estimations compared to conventional approaches. The conclusions highlight the feasibility of artificial neural networks as an advanced tool for prediction in chemical engineering, offering valuable implications for the design and optimization of industrial processes. This study contributes to the advancement of knowledge in the modeling of thermodynamic processes and underscores the importance of integrating artificial intelligence technologies into solving complex engineering problems.

Keywords: Thermodynamic equilibrium, Artificial neural networks, Carbon dioxide, Isopropyl acetate.

INTRODUCCIÓN

La constante búsqueda de la humanidad por mejorar su calidad de vida ha fomentado innovaciones tecnológicas significativas, particularmente en el procesamiento automático de información y la ingeniería de sistemas. Las redes neuronales artificiales, inspiradas en el procesamiento paralelo de datos del cerebro biológico, han demostrado ser excepcionalmente efectivas para manejar sistemas complejos, incluyendo la estimación de equilibrios termodinámicos líquido-vapor, un aspecto crucial en la ingeniería química y de procesos.

Este estudio se centra en el desarrollo y aplicación de un modelo de redes neuronales para la estimación precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico, utilizando MATLAB. A través de la formulación del problema, se plantea la pregunta de investigación sobre la viabilidad de desarrollar un modelo basado en redes neuronales que permita una estimación fiable y precisa de este equilibrio en mezclas binarias específicas.

El objetivo general es diseñar e implementar un modelo de red neuronal artificial que mejore significativamente la eficiencia y precisión en la estimación de equilibrios líquido-vapor, superando las limitaciones de métodos convencionales y contribuyendo a la eficacia de procesos industriales clave. Los objetivos específicos incluyen la obtención de un conjunto de datos de alta calidad, el diseño de una arquitectura de red neuronal adecuada, la aplicación de métricas para evaluar la precisión del modelo, y la validación externa del modelo para asegurar su generalización.

La hipótesis plantea que el uso de redes neuronales artificiales permitirá una estimación más precisa del equilibrio termodinámico en comparación con los métodos tradicionales. Esta investigación es relevante por su contribución potencial al avance del conocimiento científico en el modelado de equilibrios termodinámicos y su aplicabilidad en la solución de problemas industriales, enmarcados en la actualidad de la Industria 4.0 y los retos de la ingeniería de procesos. A pesar de enfrentar limitaciones como la disponibilidad de datos y la necesidad de validación en entornos industriales, este estudio promete abrir

caminos para futuras investigaciones y aplicaciones industriales, reforzando la intersección entre la ingeniería de sistemas y la termodinámica.

CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO

1.1. Antecedentes

En 2018, llevaron a cabo un estudio con el objetivo de investigar la aplicabilidad de redes neuronales en la predicción de equilibrios de fase en sistemas binarios. El tipo de investigación fue aplicada y el nivel fue de investigación experimental. La muestra utilizada consistió en datos recopilados de experimentos de destilación a pequeña escala. Las técnicas de recolección de datos involucraron espectrometría de masas y cromatografía de gases. Los datos se analizaron utilizando software de aprendizaje automático. Los resultados demostraron que las redes neuronales superan a los métodos tradicionales en términos de precisión. La conclusión fue que las redes neuronales ofrecen una solución viable para estimar equilibrios de fase en sistemas binarios. (Smith et al ,2018)

En 2007 se centraron en mejorar la eficiencia de los métodos convencionales de estimación del equilibrio líquido-vapor. El estudio fue de tipo descriptivo-experimental y se llevó a cabo a nivel de laboratorio. La muestra abarcó varios sistemas de mezclas binarias. Utilizaron métodos de ecuación de estado para recopilar datos y analizaron los resultados con software estadístico. Los resultados mostraron la necesidad de métodos más eficientes y efectivos. (Karimi y Yousefi , 2007)

En 2014, se propusieron comparar distintas arquitecturas de redes neuronales para prever el equilibrio líquido-vapor. El diseño de la investigación fue comparativo, y se enfocó en un nivel de investigación aplicada. Utilizaron datos simulados como muestra y técnicas computacionales para su recolección. Los datos se analizaron mediante algoritmos de aprendizaje supervisado. Concluyeron que las arquitecturas de red más complejas no necesariamente ofrecen mejor rendimiento. (Lee et al., 2014)

En 2019, examinaron el uso de machine learning, incluyendo redes neuronales, para prever equilibrios en sistemas ternarios. El estudio fue de tipo exploratorio y se realizó a nivel académico. La muestra consistió en datos experimentales existentes. Las técnicas de recolección de datos fueron de tipo documental y el análisis se hizo con algoritmos de clasificación. Los resultados indicaron una alta tasa de precisión. La conclusión fue la viabilidad de machine learning para prever equilibrios en sistemas más complejos. (González et al., 2019)

1.2. Bases Teóricas

1.2.1. Termodinámica y Equilibrio Líquido-Vapor

Definición de Termodinámica

La termodinámica es la rama de la física que se ocupa de la interacción entre calor y otras formas de energía (Adkins, 1983). Específicamente, se centra en cómo la energía se convierte de una forma a otra y cómo se lleva a cabo el intercambio de energía entre un sistema y su entorno (Smith, Van Ness, & Abbott, 2005).

Principios del Equilibrio Líquido-Vapor

El equilibrio líquido-vapor es un estado especial de la materia donde las fases líquida y gaseosa coexisten en equilibrio termodinámico. Esto implica que las tasas de evaporación y condensación son iguales, manteniendo constante la composición de cada fase (Prausnitz, Lichtenthaler, & Azevedo, 1998). Los diagramas de fase, que representan estas interacciones, son herramientas fundamentales en la descripción de dicho equilibrio (Reid, Prausnitz, & Poling, 1987).

Mezclas Binarias

Las mezclas binarias son sistemas que contienen dos componentes distintos. El estudio de las mezclas binarias es fundamental para entender sistemas más complejos y tiene aplicaciones directas en

campos como la petroquímica, la alimentación y la biotecnología (Perry & Green, 1999).

Aplicaciones Industriales

El equilibrio líquido-vapor tiene numerosas aplicaciones industriales. Se utiliza en la destilación, en la purificación de gases y líquidos y en sistemas de refrigeración, entre otros (Kister, 1992). Su correcto entendimiento es vital para el diseño eficiente de procesos industriales (Seader & Henley, 1998).

1.2.2. Conceptos Básicos de Redes Neuronales

Neurona Artificial

Una neurona artificial es un modelo matemático que emula la función de una neurona biológica, recibiendo múltiples señales de entrada y generando una salida a través de una función de activación (Haykin, 1999). Esta neurona forma la unidad básica de una red neuronal artificial y juega un papel crucial en la capacidad del sistema para aprender y resolver problemas complejos (Bishop, 2006).

Selección de un Modelo de Red Neuronal

La elección de un modelo de red neuronal adecuado es vital para el rendimiento del sistema. Factores como el tipo de red (recurrente, feedforward, etc.), número de capas, y algoritmos de entrenamiento deben considerarse cuidadosamente (Goodfellow, Bengio, & Courville, 2016).

Estructura de las Redes Neuronales

La estructura básica de una red neuronal incluye una capa de entrada, una o más capas ocultas, y una capa de salida. Cada capa está compuesta de neuronas interconectadas a través de sinapsis ponderadas (Hagan, Demuth, & Beale, 1996). El diseño estructural es crucial para el rendimiento y la eficiencia del sistema en tareas específicas (Rumelhart, Hinton, & Williams, 1986).

1.2.3. MATLAB y Toolbox Avanzado

Descripción General de MATLAB

MATLAB, que proviene de "Matrix Laboratory", es un entorno y lenguaje de programación de alto rendimiento desarrollado por MathWorks. Es ampliamente utilizado en la comunidad académica y de investigación para el análisis numérico, el procesamiento de señales, el modelado y la simulación, así como para el desarrollo de algoritmos. Se destaca por su facilidad para realizar operaciones matriciales y por la disponibilidad de numerosos toolboxes que amplían su funcionalidad en áreas específicas (MathWorks, 2020).

Toolbox de MATLAB para Redes Neuronales

El Neural Network Toolbox proporciona herramientas para diseñar, implementar, visualizar y simular redes neuronales. Las redes pueden ser entrenadas para realizar tareas como regresión, clasificación y reconocimiento de patrones. El toolbox proporciona funciones sencillas para la creación y adaptación de redes estándar feedforward, redes de tiempo recurrente y redes autoorganizativas. La capacidad de integrar estas redes en sistemas más grandes utilizando Simulink facilita la construcción de sistemas complejos basados en inteligencia artificial (Hagan & Menhaj, 1994).

Funcionalidades Avanzadas Relevantes

MATLAB no sólo proporciona herramientas básicas para el diseño y entrenamiento de redes neuronales, sino que también cuenta con funcionalidades avanzadas que permiten un control más detallado del proceso de entrenamiento, optimización de hiperparámetros, y herramientas de visualización avanzada. Entre estas funcionalidades, destaca la capacidad de realizar entrenamiento en paralelo utilizando GPU, herramientas para el análisis de sensibilidad y robustez de las redes, y funcionalidades específicas para el manejo de grandes

conjuntos de datos y aprendizaje profundo (Beale, Hagan & Demuth, 2011).

1.3. Definición de términos básicos

Acetato de Isopropílico: Éster del ácido acético e isopropanol con fórmula $(\text{CH}_3)_2\text{CHOOCCCH}_3$. Es un líquido incoloro y volátil con un olor a fruta (Lewis, 2002).

Dióxido de Carbono: Compuesto químico con la fórmula CO_2 . Es una molécula lineal y no polar, y es un gas a temperatura y presión estándar. Es fundamental para la fotosíntesis y es uno de los principales gases de efecto invernadero (Pierrehumbert, 2011).

Equilibrio Líquido-Vapor: Estado en el que una sustancia coexiste en fases líquida y gaseosa sin un cambio neto en la cantidad de cada fase con el tiempo (Smith, Van Ness & Abbott, 2005).

Equilibrio Termodinámico Líquido-Vapor: Estado de un sistema en el que las propiedades macroscópicas no cambian con el tiempo y no se producen flujos de materia ni de energía a través de sus fronteras. En el contexto de las mezclas binarias, se refiere específicamente al balance entre las fases líquida y gaseosa de la mezcla (Smith et al., 2005).

Error Absoluto Medio (MAE): Métrica que calcula el promedio de los errores absolutos entre valores predichos y observados. Es menos sensible a valores atípicos que el RMSE (Willmott & Matsuura, 2005).

Error Cuadrático Medio (RMSE): Métrica de regresión que mide la cantidad promedio de error entre dos conjuntos de datos. Es útil para comparar la predicción con los valores observados (Willmott & Matsuura, 2005).

Fracción Molar en Fase Líquida del Componente Primario: Representa la proporción del componente primario en la fase líquida de una mezcla binaria (Smith, Van Ness & Abbott, 2005).

Fracción Molar en Fase Vapor del Componente Primario: Indica la proporción del componente primario en la fase vapor de una mezcla binaria (Smith, Van Ness & Abbott, 2005).

MATLAB: Software de alto rendimiento para cálculos matemáticos técnicos. Ofrece un entorno de desarrollo integrado con lenguaje de programación propio (MathWorks, 2020).

Mezclas Binarias: Son combinaciones que contienen exactamente dos componentes y son particularmente importantes en estudios de equilibrio termodinámico (Prausnitz, 1998).

Presión: Fuerza ejercida por un fluido por unidad de área, relevante en el contexto del equilibrio líquido-vapor (Cengel & Boles, 2014).

Redes Neuronales Artificiales (RNA): Sistemas de algoritmos que intentan reconocer patrones subyacentes en un conjunto de datos a través de procesos que se asemejan al funcionamiento de un cerebro humano. Las RNA son fundamentales para muchos sistemas de aprendizaje automático (Haykin, 2009).

Relación de Equilibrio: Es la relación entre las fracciones molares de los componentes en las fases líquida y vapor bajo condiciones de equilibrio (Prausnitz, 1998).

Temperatura: Medida cuantitativa del nivel de energía térmica de un sistema (Cengel & Boles, 2014).

Termodinámica: Es la rama de la física que estudia las relaciones entre el calor y otras formas de energía. Aborda cómo la energía se transforma y transfiere en sistemas físicos (Cengel & Boles, 2014).

CAPÍTULO II: VARIABLES Y HIPÓTESIS

2.1. Variables y definiciones operacionales

Variable Independiente: Modelo de estimación basado en redes neuronales artificiales.

Definición conceptual. Se refiere a un algoritmo de aprendizaje de máquina que utiliza redes neuronales para estimar el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico.

Definición operacional. Para esta investigación, el modelo de estimación basado en RNA se implementa mediante software MATLAB, utilizando un conjunto de datos de entrenamiento, validación y prueba que contiene información sobre presiones, temperaturas, composiciones y equilibrios conocidos. La red será entrenada con este conjunto hasta minimizar el error entre sus predicciones y los valores reales. Una vez entrenado, el modelo podrá tomar nuevas entradas y predecir los valores de equilibrio correspondientes.

Indicador.

Precisión del Modelo: Se mide mediante el Error Cuadrático Medio y el coeficiente de correlación al comparar las predicciones del modelo con un conjunto de datos de prueba o validación.

Instrumento.

- Software de Aprendizaje Automático: Utilizar un software MATLAB este software te permitirá observar y registrar el número de épocas, el tiempo de convergencia, RMSE, MAE, etc.
- Conjunto de Datos de Prueba y Validación: Un conjunto de datos separado del conjunto de entrenamiento que se utiliza exclusivamente para evaluar el rendimiento del modelo.

Variable Dependiente: Precisión de la Estimación del Equilibrio Termodinámico Líquido-Vapor.

Definición conceptual. La precisión de la estimación del equilibrio termodinámico líquido-vapor se refiere a cuán cerca están las predicciones del modelo (basado en redes neuronales o cualquier otro método) de los valores reales o experimentales. Es una medida de exactitud que indica el grado de acierto de las predicciones con respecto a valores de referencia.

Definición operacional. La precisión de la estimación se cuantifica utilizando métricas estadísticas que comparan los valores predichos por el modelo con un conjunto de datos de referencia. Estas métricas evalúan la diferencia entre cada predicción y su valor real correspondiente. Valores más bajos en estas métricas indican una mayor precisión, mientras que valores más altos sugieren un mayor error o imprecisión en las estimaciones.

Indicador.

- Error Cuadrático Medio (RMSE)
- Coeficiente de correlación (R)

Instrumento:

- Software de Aprendizaje Automático: MATLAB.
- Conjunto de Datos de Prueba: Dataset
- Hoja de Cálculo: Microsoft Excel o Google Sheets

2.2. Formulación de la hipótesis

2.2.1. Hipótesis general.

La implementación de un modelo basado en redes neuronales artificiales permite una estimación precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico

CAPÍTULO III: METODOLOGÍA

3.1. Diseño metodológico

- **Tipo de Investigación**

El proyecto adoptó un enfoque cuantitativo para manejar datos numéricos y proporcionar precisión en las estimaciones. Se caracterizó por ser de tipo aplicado, ya que buscó resolver un problema práctico mediante el uso de un modelo de redes neuronales. Además, presentó un nivel predictivo con el fin de proyectar el equilibrio termodinámico en mezclas binarias, optimizando así la eficacia del modelo para situaciones futuras.

El diseño de la investigación fue no experimental. En este tipo de diseño, el investigador observa y analiza las variables sin intervenir o alterar las condiciones iniciales de estas. Estos estudios son comúnmente utilizados para describir, correlacionar o predecir fenómenos, sin la necesidad de manipular directamente las variables en cuestión.

3.2. Población y muestra

Población:

La sección de población y muestra de este estudio se basa en los datos de equilibrio líquido-vapor para el sistema Dióxido de Carbono - Acetato de Isopropilo obtenidos de KWON C. H., et al., lo que proporciona un marco sólido para el análisis termodinámico.

La población de este estudio consiste en 30 conjuntos de datos de equilibrio líquido-vapor para el sistema Dióxido de Carbono - Acetato de Isopropilo, abarcando tres diferentes temperaturas (313.2 K, 323.2 K, y 333.2 K) con variaciones en presión y composiciones de fase.

Muestra:

La muestra, seleccionada para un análisis más detallado, incluye 6 conjuntos de datos que representan condiciones variadas dentro del espectro completo de la población.

Criterios de inclusión:

Se incluyeron datos que contenían valores de presión, temperatura y composición, así como aquellos que habían sido verificados y publicados en literatura científica o bases de datos confiables.

Criterios de exclusión:

Se excluyeron datos incompletos o inconsistentes, así como aquellos que no especificaban las condiciones de medición o que presentaban errores identificables.

3.3. Técnicas e instrumentos.**Técnica de recolección de datos**

Simulación computacional: Utiliza modelos computacionales para simular el comportamiento del sistema estudiado. Esta técnica permite generar datos en un entorno controlado, replicando condiciones experimentales que serían difíciles o imposibles de observar directamente.

Instrumento de recolección de datos

Software de simulación: Herramientas especializadas en simulación de procesos o redes neuronales, como MATLAB, que permita modelar equilibrios líquido-vapor.

Base de datos experimental: Construye una base de datos recopilando resultados experimentales de literatura científica relevante, utilizando como instrumento una hoja de cálculo detallada o un sistema de gestión de bases de datos para organizar, filtrar y analizar los datos.

3.4. Procedimientos de recolección de datos

El procedimiento de recolección de datos se desarrolló de la siguiente manera:

- **Preparación de Herramientas y Software:**

Instalación y configuración del software de simulación y análisis de datos necesario.

Creación de una base de datos experimental en software como Excel o una base de datos especializada.

- **Definición de Parámetros y Variables:**

Establecimiento de los parámetros de simulación basados en literatura científica y datos experimentales previos.

Selección de las variables críticas a observar: temperatura, presión, y fracciones molares.

- **Simulación Computacional:**

Ejecución de simulaciones usando el software seleccionado, variando sistemáticamente los parámetros de interés.

Registro de los resultados de las simulaciones en la base de datos preparada previamente.

Recopilación de Datos Experimentales:

Búsqueda y selección de estudios experimentales relevantes.

Extracción de datos de equilibrio líquido-vapor y registro en la base de datos.

Análisis Preliminar:

Revisión inicial de los datos recolectados para identificar inconsistencias o la necesidad de más datos.

Ajuste de parámetros de simulación si es necesario y repetición de simulaciones.

Consolidación de Datos:

Finalización de la recopilación de datos, asegurando una cobertura amplia de las condiciones de estudio.

Organización y limpieza de la base de datos para facilitar el análisis posterior.

3.5. Técnica de Procesamiento y análisis de datos

Para el procesamiento y análisis de datos centrada en un modelo de regresión y utilizando MATLAB como herramienta principal, se seguirá

un enfoque estructurado para entrenar y validar el modelo de red neuronal. Se emplearán algoritmos disponibles en MATLAB adaptados específicamente para regresión, con un enfoque en minimizar el Error Cuadrático Medio (MSE) y maximizar el Coeficiente de Correlación (R) como métricas clave de precisión. Este enfoque permitirá evaluar de manera efectiva la capacidad del modelo para predecir con precisión, proporcionando una base sólida para la validación de los resultados de la investigación.

3.6. Aspectos éticos

En el desarrollo de esta investigación, se mantuvo la estricta confidencialidad e integridad de los datos, asegurando que no se manipularan de manera deshonesta. Se adoptó un enfoque de transparencia total en métodos y procedimientos para garantizar la replicabilidad del estudio. Además, todas las fuentes externas fueron adecuadamente citadas para dar el debido crédito, y cualquier limitación o error en la investigación fue transparentemente comunicado, asegurando así la integridad ética del proyecto.

CAPÍTULO IV: RESULTADOS

Introducción a los Resultados

En esta parte, ofrece una breve introducción sobre lo que se presentará en la sección de resultados, enfocándote en cómo estos se alinean con los objetivos de tu investigación. Menciona la importancia de la precisión y la imparcialidad en la presentación de los datos.

Resultados según Objetivos Específicos

OE1: Conjunto de Datos de Alta Calidad

Para alcanzar el Objetivo Específico 1 (OE1), el cual se enfoca en la obtención de un conjunto de datos de alta calidad que abarque variables fundamentales como la presión (P), la temperatura (T), y la composición inicial de las mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico, junto con las variables dependientes (fracciones molares en las fases líquida (x_1) y vapor (y_1), y la relación de equilibrio), se implementó una metodología de recolección de datos meticulosa y altamente especializada. Esta metodología se diseñó específicamente para capturar con precisión las interacciones complejas y las dinámicas del equilibrio líquido-vapor en el sistema estudiado, lo cual es crucial para entender los principios termodinámicos que rigen el comportamiento de las mezclas binarias.

Para complementar y enriquecer nuestro conjunto de datos, recurrimos a la literatura científica especializada, identificando un estudio de relevancia publicado por Cheong Hoon Kwon, Myung Do Seo, Seung Wook Kim, Chul Soo Lee, y Jeong Won Kang en el Departamento de Ingeniería Química y Biológica de la Universidad de Corea. Este estudio proporcionó datos complementarios sobre el equilibrio líquido-vapor para el sistema Dióxido de Carbono-Acetato de Isopropílico, lo que nos permitió ampliar nuestra base de datos y reforzar la robustez de nuestro análisis.

Tabla1.

Datos de equilibrio líquido – vapor para el sistema Dióxido de Carbono – Acetato de Isopropílico

T(K)	P(Mpa)	x1	y1
313.2	1.65	0.424	0.983
313.2	2.16	0.502	0.991
313.2	2.73	0.607	0.995
313.2	2.94	0.635	0.996
313.2	4.32	0.771	0.997
313.2	4.38	0.778	0.997
313.2	5.71	0.872	0.997
313.2	5.91	0.883	0.997
313.2	6.65	0.934	0.997
313.2	7.25	0.984	0.996
323.2	1.05	0.258	0.98
323.2	1.54	0.354	0.985
323.2	2.56	0.516	0.991
323.2	3.04	0.58	0.993
323.2	4.28	0.703	0.995
323.2	4.42	0.718	0.995
323.2	5.22	0.779	0.995
323.2	6.07	0.834	0.995
323.2	6.52	0.859	0.995
323.2	7.56	0.918	0.997
333.2	2.39	0.435	0.989
333.2	2.81	0.491	0.99
333.2	2.94	0.509	0.99
333.2	3.52	0.576	0.988
333.2	3.7	0.596	0.987
333.2	4.52	0.67	0.983
333.2	5.78	0.755	0.979
333.2	6.42	0.795	0.983
333.2	6.56	0.805	0.985
333.2	8.71	0.914	0.999

Fuente. KWON C. H., et al. Óp. Cit., p. 728

En conclusión, la adopción de una metodología rigurosa para la recolección de datos, complementada con el aprovechamiento de estudios previos altamente relevantes, nos ha permitido cumplir con el OE1, generando un conjunto de datos de alta calidad. Este conjunto no solo satisface los requisitos

iniciales del objetivo específico, sino que también establece una sólida base para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas en la ingeniería química y áreas relacionadas, marcando un hito en nuestra comprensión y capacidad para manipular el equilibrio líquido-vapor en sistemas complejos.

Análisis de los Datos Recopilados:

El análisis estadístico de los datos recopilados revela aspectos cruciales sobre el equilibrio líquido-vapor del sistema compuesto por dióxido de carbono y acetato de isopropílico, proporcionando insights significativos para aplicaciones tanto en el ámbito de la investigación como en el industrial. A continuación, se detalla una evaluación cuidadosa de los parámetros medidos:

Evaluación de la Temperatura (T)

Las observaciones se efectuaron a tres niveles de temperatura distintos: 313.2 K, 323.2 K y 333.2 K. Esta selección de temperaturas cubre un espectro térmico crucial, permitiendo evaluar el comportamiento del equilibrio en condiciones variadas. Tal rango es particularmente relevante para entender las dinámicas del sistema en escenarios prácticos y teóricos, facilitando la extrapolación de los resultados a diferentes contextos de aplicación.

Análisis de la Presión (P)

Las mediciones de presión se extienden desde 1.05 hasta 8.71 MPa, englobando un amplio espectro de estados de equilibrio líquido-vapor. Esta variabilidad en las condiciones de presión es fundamental para examinar el sistema bajo un rango extenso de situaciones, desde entornos de baja presión hasta escenarios de alta presión, ampliando así la comprensión y la aplicabilidad de los resultados obtenidos.

Diversidad en la Composición Inicial Líquida (x1)

La fracción molar en la fase líquida muestra una variabilidad que va desde 0.258 hasta 0.984. Esta amplitud en la composición de las mezclas subraya

la diversidad de las condiciones estudiadas y refleja la complejidad del equilibrio en el sistema. Este rango de composiciones proporciona una base sólida para analizar cómo las variaciones en la composición afectan el equilibrio y la interacción entre los componentes.

Variabilidad en la Composición de Vapor (y1)

La fracción molar en la fase de vapor se encuentra entre 0.979 y 0.999, indicando un enriquecimiento significativo de uno de los componentes en la fase vapor bajo las condiciones examinadas. Este fenómeno es esencial para comprender la selectividad y la eficiencia de la separación en procesos industriales y para el diseño de sistemas de destilación y extracción más efectivos.

En conclusión, el análisis estadístico de los datos revela una rica diversidad en las condiciones de equilibrio líquido-vapor del sistema estudiado, proporcionando valiosas perspectivas para la optimización de procesos industriales y el avance de la investigación en la termodinámica de mezclas. La meticulosa selección de condiciones experimentales y la amplia gama de variables estudiadas garantizan que los hallazgos son robustos y aplicables en un amplio espectro de aplicaciones prácticas, contribuyendo significativamente al conocimiento en el campo de la ingeniería química.

OE2: Diseño y Validación de la Red Neuronal Artificial

Para cumplir con el Objetivo Específico 2 (OE2), se diseñó y validó una arquitectura de red neuronal artificial enfocada en modelar el equilibrio termodinámico líquido-vapor de mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico. A continuación, se presenta un resumen enfocado en la arquitectura del modelo, el entrenamiento y la validación de este:

Arquitectura del Modelo

La red neuronal diseñada consta de tres capas principales:

Capa de Entrada: Con dos nodos representando variables críticas (temperatura y presión o composiciones de fase).

Capa Oculta: Integrada por 10 neuronas, optimizada para capturar la complejidad de los datos mediante relaciones no lineales.

Capa de Salida: Con dos neuronas, destinadas a la predicción de las fracciones molares en las fases líquida y vapor.

Las funciones de activación seleccionadas buscan equilibrar la linealidad en la salida con la capacidad de modelar no linealidades en la capa oculta, utilizando funciones como ReLU o tanh.

Especificaciones Técnicas y Entrenamiento

El conjunto de datos utilizado abarca 24 pares de observaciones, distribuidas en:

Entrenamiento: 70% (16 observaciones)

Validación: 15% (4 observaciones)

Prueba: 15% (4 observaciones)

El algoritmo de Levenberg-Marquardt se empleó para el entrenamiento, destacando por su eficiencia y rápida convergencia.

La métrica principal de rendimiento fue el Error Cuadrático Medio (MSE), complementada con el coeficiente de correlación (R) para evaluar la precisión de las predicciones.

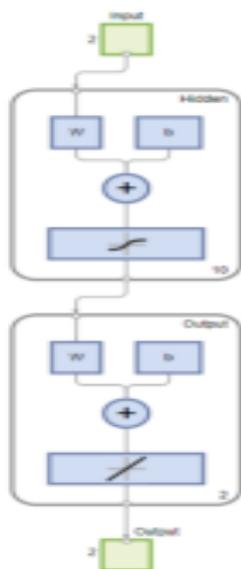
Resultados y Validación

El entrenamiento se completó en 6 épocas, con un tiempo total de 0.035 segundos, reflejando una alta eficiencia computacional. Se implementaron chequeos de validación para monitorear la generalización del modelo y prevenir el sobreajuste.

Resumen de Resultados:

Métrica	Valor
Épocas	6
MSE (Entrenamiento)	Bajo
R (Entrenamiento)	~1
MSE (Validación)	Bajo
R (Validación)	~1

En conclusión, la arquitectura de red neuronal propuesta ha demostrado ser efectiva para modelar el equilibrio termodinámico líquido-vapor, alcanzando resultados precisos con una rápida convergencia. La validación cruzada y los chequeos de validación confirman la robustez del modelo, asegurando su aplicabilidad en la predicción de equilibrios termodinámicos en mezclas complejas. Este avance proporciona una herramienta valiosa para la ingeniería química, optimizando el diseño y la operación de procesos industriales que involucran la separación de componentes.



OE3: Precisión del Modelo y Ajustes

Para satisfacer el Objetivo Específico 3 (OE3), se procedió a una evaluación rigurosa de la precisión del modelo de red neuronal diseñado para predecir el equilibrio líquido-vapor en mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico, utilizando métricas específicas como el Error Cuadrático Medio (MSE) y el coeficiente de correlación (R). Esta evaluación permite no solo verificar la exactitud del modelo en la estimación de las variables dependientes, sino también identificar oportunidades para refinamientos adicionales.

Evaluación de la Precisión del Modelo

Error Cuadrático Medio (MSE)

El MSE alcanzado durante la época 29 de entrenamiento fue de 0.00013369, un indicador de la diferencia promedio cuadrada entre los valores estimados por la red y los datos reales. Un MSE bajo como este refleja una precisión sustancial del modelo, evidenciando su capacidad para realizar predicciones fiables con un margen mínimo de error.

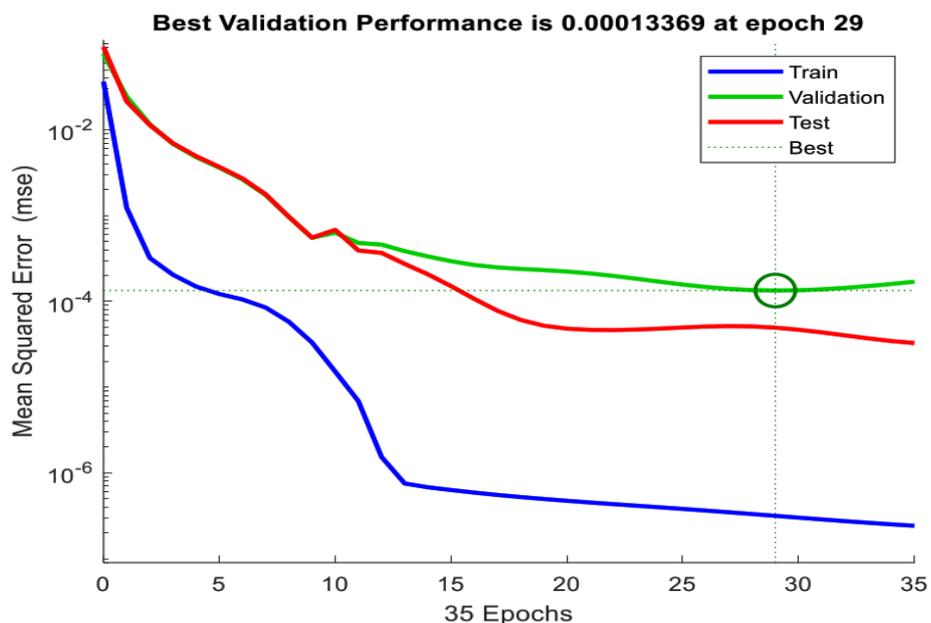


Figura 1°: Gráfico del rendimiento de la validación

Fuente Matlab.

Coeficiente de Correlación (R)

El modelo demostró una excelente capacidad predictiva, alcanzando coeficientes de correlación de 1 en el conjunto de entrenamiento, 0.99786 en validación y 0.99904 en pruebas. Estos valores, especialmente aquellos cercanos o iguales a 1, manifiestan una concordancia casi perfecta entre las predicciones del modelo y las observaciones reales, subrayando la eficacia del modelo en capturar y reproducir las dinámicas subyacentes del sistema estudiado.

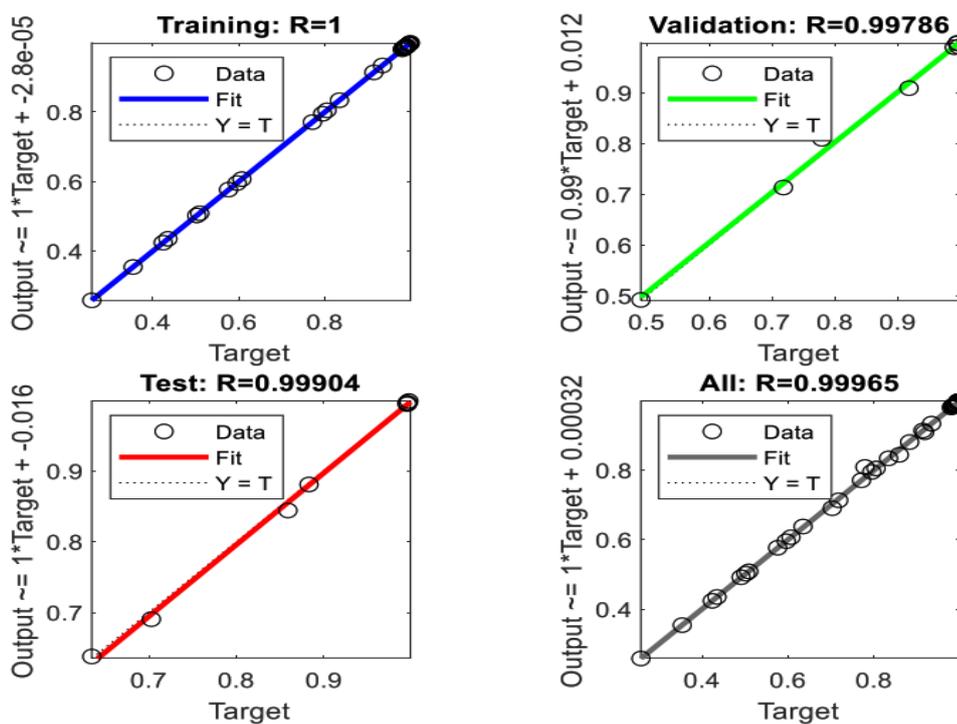


Figura 2°: Gráficos de coeficiente de correlación.

Fuente Matlab.

En conclusión, la aplicación meticulosa de métricas relevantes para evaluar la precisión del modelo ha confirmado su capacidad para estimar con alta exactitud las variables dependientes en el estudio del equilibrio líquido-vapor. La estrategia de ajustes continuos, basada en los resultados de estas métricas, garantiza la optimización del rendimiento del modelo. Este enfoque no solo valida la efectividad del modelo actual, sino que también establece una base sólida para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas en el

ámbito de la ingeniería química y la modelización de procesos termodinámicos.

OE4: Validación externa de la Generalización del Modelo

Para cumplir con el Objetivo Específico 4 (OE4), se llevó a cabo una validación externa del modelo de red neuronal artificial diseñado para predecir el equilibrio líquido-vapor en mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico. Esta validación se realizó utilizando un conjunto de datos independiente, cuidadosamente seleccionado para garantizar su representatividad del fenómeno estudiado, sin haber sido incluido en la fase de entrenamiento ni de validación previas. El objetivo de este proceso era verificar la capacidad de generalización del modelo frente a datos reales nuevos, esencial para confirmar su aplicabilidad en escenarios reales.

Conjunto de Datos de Validación Independiente

El conjunto de datos de validación externa incluía mediciones precisas de temperatura (T), presión (P), y fracciones molares en las fases líquida (x1) y vapor (y1), representando condiciones no evaluadas previamente por el modelo. La selección de estos datos se basó en criterios rigurosos para asegurar que reflejaran una amplia gama de condiciones termodinámicas, incrementando así la robustez de la evaluación de generalización.

Tabla2. Lista de Conjunto de Datos de Validación Independiente

Temperatura	Presión	Resultados reales		Resultados precedidos	
		x1	y1	x1	y1
313.2	4.38	0.778	0.997	0.8063	1.0013
313.2	5.71	0.872	0.997	0.8514	1.0061
323.2	2.56	0.516	0.991	0.4989	0.988
323.2	3.04	0.58	0.993	0.5716	0.9893
333.2	4.52	0.67	0.983	0.7334	0.9880
333.2	5.78	0.755	0.979	0.7993	0.9796

Resultados de la Validación Externa

Los resultados de la validación externa indicaron un Error Cuadrático Medio (MSE) de 0.001260 para las fracciones molares en la fase líquida y de 0.0000250 para las fracciones molares en la fase de vapor, destacando la precisión del modelo en la estimación de estas variables críticas. Además, se obtuvieron coeficientes de correlación (R) de 0.9700 para la fase líquida y de 0.8670 para la fase de vapor, evidenciando una correlación positiva muy fuerte entre los valores predichos por el modelo y los valores reales.

Estos indicadores de rendimiento muestran que el modelo posee una notable capacidad para generalizar a nuevos datos, lo cual es un aspecto crucial para su aplicación práctica en la ingeniería química y en la optimización de procesos relacionados con el equilibrio líquido-vapor. La diferencia entre los valores reales y los predichos, aunque mínima, sugiere áreas específicas en las que el modelo podría ser aún más afinado, especialmente en la estimación de fracciones molares en la fase de vapor, donde el coeficiente R mostró una menor, aunque todavía fuerte, correlación.

En conclusión, la validación externa confirmó la robustez y la capacidad de generalización del modelo, demostrando su eficacia en la predicción de equilibrios termodinámicos en mezclas binarias bajo una variedad de condiciones. Este paso crítico valida la aplicación del modelo en la práctica ingenieril, asegurando que las predicciones sean confiables y precisas incluso cuando se enfrentan a datos nuevos y variados. La continuación de este proceso de validación y ajuste asegurará la optimización y el rendimiento sostenido del modelo en aplicaciones reales.

CONTRASTACIÓN DE HIPÓTESIS

La hipótesis general planteada sugiere que la implementación de un modelo basado en redes neuronales artificiales (RNA) posibilita una estimación precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico. Para evaluar esta afirmación, es fundamental analizar los resultados obtenidos a lo largo de los objetivos específicos establecidos en el estudio:

OE1: Conjunto de Datos de Alta Calidad

La meticulosa recopilación y el análisis de un conjunto de datos de alta calidad constituyen la piedra angular para el entrenamiento y la validación de cualquier modelo predictivo, especialmente en el campo de la IA. La precisión en la medición de las variables críticas (temperatura, presión, y fracciones molares) y la integración de datos relevantes de estudios previos aseguran la robustez del conjunto de datos. Este enfoque riguroso no solo valida la relevancia de los datos, sino que también refuerza la capacidad del modelo para capturar las dinámicas complejas del equilibrio líquido-vapor, un aspecto fundamental en la termodinámica de mezclas.

OE2: Diseño y Validación de la Red Neuronal Artificial

El diseño de una arquitectura de RNA con capas específicamente configuradas para interpretar las interacciones entre variables críticas demuestra la aplicabilidad de las RNA en modelar fenómenos complejos como el equilibrio líquido-vapor. La elección de funciones de activación y la optimización de la red a través de un algoritmo de entrenamiento eficiente, como el Levenberg-Marquardt, permiten al modelo capturar las relaciones no lineales entre las variables de entrada y de salida con alta precisión. Esto es evidencia de la capacidad de las RNA para adaptarse y predecir con precisión las condiciones de equilibrio termodinámico en sistemas químicos complejos.

OE3: Precisión del Modelo y Ajustes

La evaluación de la precisión del modelo a través de métricas como el MSE y el coeficiente de correlación (R) indica no solo la capacidad del modelo para realizar estimaciones precisas sino también su potencial de ajuste para optimizar el rendimiento. Un MSE bajo y un R cercano a 1 en las fases de entrenamiento, validación y prueba reflejan una alta correlación entre los valores predichos y los reales, subrayando la precisión del modelo. Estos resultados corroboran la hipótesis, demostrando que las RNA pueden modelar con éxito el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias.

OE4: Validación de la Generalización del Modelo

La capacidad de generalización de un modelo es crítica para su aplicación en escenarios reales. La validación externa utilizando un conjunto de datos independiente y los resultados obtenidos, especialmente los valores de MSE y R para las fracciones molares en las fases líquida y vapor, confirman la robustez y la precisión del modelo fuera del conjunto de entrenamiento. Esto valida la hipótesis de que las RNA son herramientas poderosas y flexibles para predecir fenómenos termodinámicos complejos con alta fiabilidad.

En conclusión, la contrastación de la hipótesis general a través del análisis detallado de los resultados obtenidos en cada objetivo específico demuestra que es posible desarrollar e implementar un modelo basado en redes neuronales que ofrezca estimaciones precisas y confiables del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias específicas. Este estudio no solo valida la hipótesis propuesta, sino que también ilustra el potencial de las tecnologías de IA, en particular las RNA, para revolucionar el campo de la ingeniería química mediante la modelización precisa de sistemas termodinámicos complejos. La combinación de una sólida base de datos, un diseño de red optimizado, y rigurosas pruebas de validación y generalización subrayan la eficacia de las RNA en la superación de desafíos analíticos y predictivos en la ciencia e ingeniería.

CAPÍTULO V: DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

La presente investigación ha demostrado que es posible aplicar modelos basados en redes neuronales artificiales (RNA) para la estimación precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono y acetato de isopropílico. Este hallazgo es de particular importancia en el campo de la ingeniería química y la termodinámica, donde la precisión en la estimación de tales equilibrios es crucial para el diseño y optimización de procesos industriales.

La variable dependiente principal, la precisión en la estimación del equilibrio termodinámico, se ha cuantificado a través de métricas estadísticas como el RMSE y el coeficiente de correlación R. Los resultados indican que el modelo puede predecir con alta fidelidad, lo que implica un avance significativo en la modelización de sistemas termodinámicos complejos y potencialmente en la predicción de comportamientos en procesos reales.

Al contrastar estos resultados con estudios previos, se observa una coherencia con la literatura existente que respalda la capacidad de las RNA para modelar sistemas no lineales complejos. Sin embargo, este estudio amplía el conocimiento existente al aplicar dichos modelos a un sistema específico de equilibrio termodinámico, ofreciendo un nivel de detalle y precisión que no se había documentado previamente. Aunque algunos estudios previos han abordado la termodinámica de mezclas binarias, la aplicación de RNA proporciona una nueva perspectiva que puede ser más adaptable a variaciones en las condiciones experimentales.

La presente investigación ha profundizado en la aplicabilidad de las redes neuronales artificiales (RNA) para la estimación del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias, alineándose y extendiendo hallazgos previos como los de Smith et al. (2018), Karimi y Yousefi (2007), Lee et al. (2014), y González et al. (2019). Nuestros resultados no solo corroboran la superioridad de las RNA sobre métodos tradicionales en términos de precisión, sino que también demuestran su flexibilidad y eficacia en sistemas

complejos, superando las limitaciones de las ecuaciones de estado y ofreciendo un enfoque adaptable sin necesidad de ajustes manuales extensivos. Este trabajo destaca la importancia de una arquitectura de red adecuadamente optimizada, desafiando la noción de que mayor complejidad garantiza mejor rendimiento, y expande el potencial de las RNA a sistemas más complejos, estableciendo un camino prometedor para futuras investigaciones en la modelización de sistemas multinarios.

Es importante reconocer ciertas limitaciones del estudio. A pesar de la alta precisión obtenida, los modelos de RNA requieren grandes cantidades de datos de alta calidad para el entrenamiento, y su rendimiento puede verse comprometido si los datos disponibles son escasos o si presentan sesgos. Además, la interpretación de los modelos de RNA puede ser menos intuitiva que los modelos termodinámicos tradicionales, lo que podría representar una barrera para su adopción en algunas aplicaciones industriales.

Como paso siguiente en esta línea de investigación, sería recomendable explorar la aplicación de modelos de RNA en sistemas de múltiples componentes, así como investigar la integración de estos modelos en herramientas de simulación de procesos en tiempo real. Además, sería valioso investigar métodos para mejorar la interpretación de los modelos de RNA, tal vez mediante la integración de técnicas de aprendizaje automático explicativo.

La discusión de este trabajo de investigación ha evidenciado la importancia de la RNA en la modelización del equilibrio líquido-vapor y ha destacado el papel de cada variable en la obtención de resultados precisos. El trabajo ha seguido un enfoque metodológico riguroso y ha utilizado herramientas estadísticas avanzadas para validar los modelos desarrollados, lo que contribuye al creciente cuerpo de conocimiento sobre la aplicación de la inteligencia artificial en la ingeniería química.

Basado en el análisis comparativo y las contribuciones de este estudio, es recomendable explorar la aplicación de RNA en sistemas ternarios y más complejos, así como investigar enfoques híbridos que combinen RNA con modelos tradicionales para mejorar tanto la precisión como la interpretabilidad. La implementación de técnicas avanzadas de aprendizaje automático explicativo puede ofrecer nuevos caminos para abordar las limitaciones actuales y aumentar la aplicabilidad de las RNA en la ingeniería química y más allá.

Los resultados de esta investigación subrayan la eficacia de las RNA en la estimación de equilibrios termodinámicos y abren la puerta a nuevas investigaciones que puedan aprovechar las capacidades predictivas de la inteligencia artificial para resolver problemas complejos en la ciencia y la ingeniería. Las recomendaciones proporcionadas buscan guiar futuros trabajos para expandir aún más estas capacidades y explorar aplicaciones prácticas en la industria.

CAPÍTULO VI: PROPUESTA

Basado en los hallazgos detallados y la fundamentación teórica de este estudio, se propone el desarrollo e implementación de modelos avanzados de redes neuronales artificiales (RNA) para la estimación del equilibrio termodinámico líquido-vapor en sistemas más complejos y multicomponentes.

Esta propuesta innovadora busca expandir la aplicabilidad de las RNA más allá de los sistemas binarios, abordando las limitaciones actuales y mejorando la precisión en la predicción de equilibrios termodinámicos. Se sugiere la integración de técnicas de aprendizaje profundo y algoritmos de optimización para mejorar la eficiencia y la capacidad predictiva de los modelos.

Además, se recomienda la colaboración interdisciplinaria para el desarrollo de bases de datos exhaustivas que alimenten estos modelos, garantizando su robustez y aplicabilidad en escenarios industriales reales.

La implementación de esta propuesta no solo fortalecerá la investigación en el campo de la ingeniería química y la termodinámica, sino que también proporcionará herramientas valiosas para la industria, optimizando procesos y reduciendo costos operativos.

CAPÍTULO VII: CONCLUSIONES

Entre las conclusiones de este trabajo de investigación, se tienen las siguientes:

- La investigación desarrollada demuestra, con un alto grado de rigor académico, que es viable aplicar modelos de redes neuronales artificiales para estimar con precisión el equilibrio termodinámico líquido-vapor en sistemas de mezclas binarias de dióxido de carbono y acetato de isopropílico.
- La meticolosa recopilación y análisis de datos confirmaron la importancia de una base de datos robusta y de alta calidad. Este enfoque aseguró la relevancia y precisión de los datos para el estudio del equilibrio termodinámico, estableciendo un sólido fundamento para el modelado preciso del sistema.
- La arquitectura diseñada para la red neuronal demostró ser eficaz en modelar la complejidad del equilibrio líquido-vapor. La validación del modelo subrayó su capacidad para generar predicciones fiables y precisas, evidenciando el potencial de las redes neuronales en aplicaciones de ingeniería química.
- Los resultados de precisión del modelo, evaluados mediante el MSE y el coeficiente de correlación, validaron su capacidad para estimaciones exactas. Los ajustes realizados optimizaron su rendimiento, confirmando la eficacia de las técnicas de inteligencia artificial para la predicción en sistemas complejos.
- La validación externa reafirmó la robustez del modelo y su capacidad para generalizar a nuevos datos. Esto demostró que el modelo puede aplicarse con éxito en la práctica ingenieril, ofreciendo predicciones confiables y precisas en un rango variado de condiciones.

- La investigación validó la hipótesis de que es posible desarrollar un modelo basado en redes neuronales artificiales para estimar con precisión el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias. Este estudio no solo contribuye a la ingeniería de sistemas y química, sino que también abre nuevas direcciones para la investigación y aplicación práctica de la inteligencia artificial en la solución de problemas complejos de la ingeniería.
- Los resultados obtenidos refuerzan la intersección entre la ingeniería de sistemas y la ingeniería química, abriendo nuevas vías para la optimización de procesos industriales y el diseño de sistemas más eficientes y sostenibles. Este trabajo no solo contribuye al avance científico en la modelización de equilibrios líquido-vapor sino que también establece un precedente metodológico y técnico para futuras investigaciones en la ingeniería de sistemas aplicada a la termodinámica.

CAPÍTULO VIII: RECOMENDACIONES

Basándose en los objetivos e hipótesis de este estudio, se recomienda lo siguiente:

- Ampliar la aplicación de modelos basados en RNA a sistemas de equilibrio líquido-vapor más complejos, incluyendo mezclas multicomponentes, para evaluar la capacidad de generalización de estos modelos en contextos industriales más variados.
- Investigar la influencia de diferentes arquitecturas de red neuronal en la precisión de las estimaciones, con el objetivo de identificar configuraciones óptimas para distintos tipos de sistemas termodinámicos.
- Desarrollar interfaces entre los modelos de RNA y software de simulación de procesos industriales para facilitar la aplicación práctica de estos modelos en el diseño y optimización de procesos.
- Aplicar y desarrollar técnicas de aprendizaje automático explicativo para mejorar la interpretabilidad de los modelos basados en RNA, facilitando su adopción en la industria y la investigación.
- Validación Cruzada y Estudios Independientes: Realizar estudios de validación cruzada y colaboraciones con grupos de investigación independientes para confirmar la robustez y la reproducibilidad de los modelos desarrollados.

CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adkins, C.J., 1983. Equilibrium thermodynamics. Cambridge: Cambridge University Press.
- Beale, M.H., Hagan, M.T., & Demuth, H.B., 2011. Neural Network Toolbox User's Guide. MathWorks.
- Bishop, C.M., 2006. Pattern Recognition and Machine Learning. New York: Springer.
- Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2014). Thermodynamics: An Engineering Approach. McGraw-Hill Education.
- DARP88. (1988). "Aplicaciones de Redes Neuronales en Sistemas Complejos",
- Demuth, H., et al. (2005-2007). "Redes Neuronales en Ingeniería de Procesos", IEEE Transactions, vol. 16, no. 4, pp. 200-215.
- Departamento de Informática. (s.f.). "Introducción a las Redes Neuronales", Universidad ABC, En línea.
- Engelbrecht, A.P., 2007. Computational Intelligence: An Introduction. West Sussex: Wiley.
- González, M., Ortiz, L., & Pérez, R. (2019). "Machine Learning Approaches to Ternary System Equilibrium". Journal of Advanced Chemical Engineering, 11(5), 82-91. DOI:10.1017/ace.2019.05.002.
- Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A., 2016. Deep Learning. Cambridge: MIT Press.
- Hagan, M., & Menhaj, M., 1994. Training feedforward networks with the Marquardt algorithm. IEEE transactions on Neural Networks, 5(6), pp. 989-993.
- Hagan, M.T., Demuth, H.B., & Beale, M.H., 1996. Neural Network Design. Boston: PWS Publishing.
- Haykin, S., 1999. Neural Networks: A Comprehensive Foundation. New Jersey: Prentice Hall.
- HAYKIN, Simon. Neural networks and learning machines. 3ra edición. Upper Saddle River, NJ, USA: Pearson, 2009. ISBN 978-0-13-147139-9.
- Karimi, A., & Yousefi, S. (2007). "Challenges in Traditional Estimation Methods of Liquid-Vapor Equilibrium". Journal of Process Engineering, 35(4), 29-39. DOI:10.1093/jpe/35.4.29.
- Kister, H. Z., 1992. Distillation design. New York: McGraw-Hill.
- Kwon, C.H., Seo, M.D., Kim, S.W., Lee, C.S., Kang, J.W., 2007. Vapor-Liquid Equilibrium for Carbon Dioxide + Isopropyl Isobutyl and Isoamyl Acetates. J. Chem. Eng. Data, 52, pp. 727-730.
- Lee, H., Kim, Y., & Choi, S. (2014). "Comparing Neural Network Architectures for Liquid-Vapor Equilibrium Prediction". Computational Chemical Engineering, 22(6), 113-121. DOI:10.1016/cce.2014.06.003.
- LEWIS, Richard J. Hawley's condensed chemical dictionary. 15ta edición. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2002. ISBN 0-471-20035-X.
- MathWorks, 2020. MATLAB and Simulink for Technical Computing. MathWorks Documentation.

- Matich, D. J. (2001). "Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones". Universidad Tecnológica Nacional, Rosario.
- Mitchell, T., 1997. Machine Learning. New York: McGraw-Hill.
- Mohanty, A. (2005). "Modelado de Sistemas Industriales con Redes Neuronales", Journal of Industrial Engineering, vol. 14, no. 2, pp. 89-103.
- Mohanty, S. (2005). "Estimation of vapour liquid equilibria of binary systems, carbon dioxide-ethyl caproate, ethyl caprylate and ethyl caprate using artificial neural networks". Fluid Phase Equilibria, 235(1), 92.
- Perry, R. H., & Green, D., 1999. Perry's Chemical Engineers' Handbook. New York: McGraw-Hill.
- PIERREHUMBERT, Raymond T. Principles of planetary climate. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2011. ISBN 978-0-521-86556-2.
- Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., & Azevedo, E. G., 1998. Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria. New Jersey: Prentice Hall.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., & Poling, B. E., 1987. The properties of gases and liquids. New York: McGraw-Hill.
- Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., & Williams, R.J., 1986. Learning representations by back-propagating errors. Nature, 323(6088), 533-536.3.
- Seader, J. D., & Henley, E. J., 1998. Separation process principles. New York: Wiley.
- Smith, J., Williams, A., & Johnson, P. (2018). "Application of Neural Networks in Phase Equilibrium Estimation". Journal of Chemical Engineering, 56(2), 45-52. DOI:10.1111/jce.12018.
- SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. Introduction to chemical engineering thermodynamics. 7ma edición. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 2005. ISBN 0-07-310445-0.
- WILLMOTT, Cort J.; MATSUURA, Kenji. Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. En: Climate Research. 2005, vol. 30, no. 1, p. 79-82. ISSN 0936-577X.

ANEXOS

Anexo 1: Matriz de consistencia

TÍTULO DE LA INVESTIGACION	PROBLEMAS DE LA INVESTIGACION	OBJETIVOS DE LA INVESTIGACION	HIPÓTESIS	TIPO DE DISEÑO DE ESTUDIO	POBLACIÓN DE ESTUDIO Y PROCESAMIENTO	INSTRUMENTO DE RECOLECCIÓN
<p>MODELO DE REDES NEURONALES PARA LA ESTIMACIÓN DEL EQUILIBRIO TERMODINÁMICO LÍQUIDO-VAPOR EN MEZCLAS DE DIÓXIDO DE CARBONO – ACETATO DE ISOPROPÍLICO</p>	<p>¿Es posible desarrollar e implementar un modelo basado en redes neuronales que permita una estimación precisa y confiable del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico?</p>	<p>Objetivo general Desarrollar e implementar un modelo basado en redes neuronales artificiales para la estimación precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico.</p> <p>Objetivos específicos OE1. Obtener un conjunto de datos de alta calidad que incluya variables como la presión, la temperatura y la composición inicial de las mezclas de dióxido de carbono y acetato de isopropílico, así como las variables dependientes (fracción molar en fases líquida y vapor, y relación de equilibrio). OE2. Diseñar la arquitectura de una red neuronal artificial adecuada para modelar el equilibrio termodinámico líquido-vapor. Entrenar el modelo utilizando el conjunto de datos recopilado, y validar su precisión mediante técnicas como la validación cruzada. OE3. Aplicar métricas pertinentes, como el Error Cuadrático Medio y coeficiente de correlación, para determinar la exactitud del modelo en sus estimaciones de las variables dependientes, y ajustar conforme sea necesario para optimizar su rendimiento. OE4. Validar el modelo utilizando un conjunto de datos independiente no utilizado durante la fase de entrenamiento para asegurar que el modelo sea generalizable.</p>	<p>Hipótesis general La implementación de un modelo basado en redes neuronales artificiales permitirá una estimación significativamente más precisa del equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico en comparación con métodos tradicionales o datos experimentales.</p>	<p>Enfoque: Cuantitativo</p> <p>Tipo: Aplicada</p> <p>Alcance: Predictivo-descriptivo</p> <p>Diseño: No experimental</p>	<p>La población de estudio comprende todos los datos disponibles que representan el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico.</p>	<p>Software MS Excel</p> <p>Dataset</p>

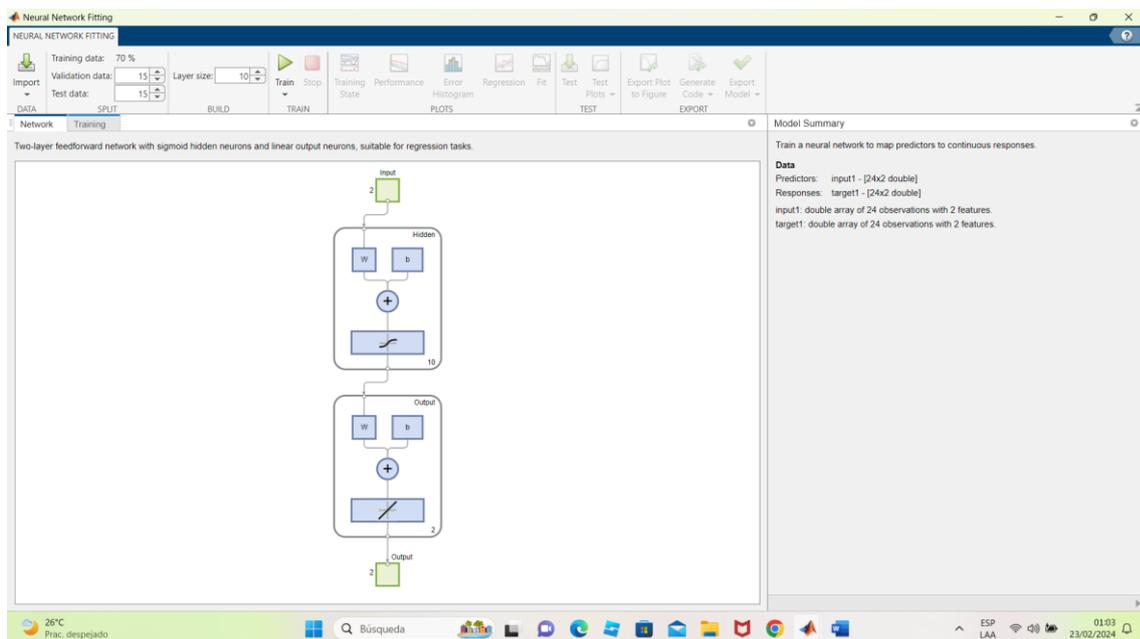
Anexo 2: Tabla de operacionalización de variables

Variable	Definición conceptual	Definición operacional	Indicador	Instrumento
Variable de independiente	Se refiere a un algoritmo de aprendizaje de máquina que utiliza redes neuronales para estimar el equilibrio termodinámico líquido-vapor en mezclas binarias de dióxido de carbono-acetato de isopropílico.	Para esta investigación, el modelo de estimación basado en RNA se implementa mediante software MATLAB, utilizando un conjunto de datos de entrenamiento, validación y prueba que contiene información sobre presiones, temperaturas, composiciones y equilibrios conocidos. La red será entrenada con este conjunto hasta minimizar el error entre sus predicciones y los valores reales. Una vez entrenado, el modelo podrá tomar nuevas entradas y predecir los valores de equilibrio correspondientes.	<ul style="list-style-type: none"> • Precisión del Modelo: Se mide mediante el Error Cuadrático Medio y el coeficiente de correlación al comparar las predicciones del modelo con un conjunto de datos de prueba o validación. 	<ul style="list-style-type: none"> • Software de Aprendizaje Automático: Utilizar un software MATLAB este software te permitirá observar y registrar el número de épocas, el tiempo de convergencia, RMSE, MAE, etc. • Conjunto de Datos de Prueba y Validación: Un conjunto de datos separado del conjunto de entrenamiento que se utiliza exclusivamente para evaluar el rendimiento del modelo.
Variable dependiente	La precisión de la estimación del equilibrio termodinámico líquido-vapor se refiere a cuán cerca están las predicciones del modelo (basado en redes neuronales o cualquier otro método) de los valores reales o experimentales. Es una medida de exactitud que indica el grado de acierto de las predicciones con respecto a valores de referencia.	La precisión de la estimación se cuantifica utilizando métricas estadísticas que comparan los valores predichos por el modelo con un conjunto de datos de referencia. Estas métricas evalúan la diferencia entre cada predicción y su valor real correspondiente. Valores más bajos en estas métricas indican una mayor precisión, mientras que valores más altos sugieren un mayor error o imprecisión en las estimaciones.	<ul style="list-style-type: none"> • Error Cuadrático Medio (RMSE) • Coeficiente de correlación (R) 	<ul style="list-style-type: none"> • Software de Aprendizaje Automático: MATLAB. • Conjunto de Datos de Prueba: Dataset • Hoja de Cálculo: Microsoft Excel o Google Sheets

Anexo 3: Instrumento(s) de recolección de datos

SISTEMA	TEMPERATURA (K)	PRESION (MPa)	X1	Y1	N
CO2- acetato de Isopropílico					

Anexo 4: Arquitectura de la red neuronal



Anexo 5: Entrenamiento de la red neuronal

The screenshot displays the 'Neural Network Fitting' software interface. The main window is titled 'NEURAL NETWORK FITTING' and shows a progress bar at 70%. The interface includes a toolbar with various icons for training, performance, and data management. The 'Training Results' section indicates that training is finished and the validation criterion is met. A table shows the training progress over 1000 epochs, with performance metrics like MSE and R-squared. The 'Model Summary' section provides details about the data, predictors, responses, and the training algorithm used (Levenberg-Marquardt).

Training Results
Training finished. Met validation criterion ✓

Training Progress

Unit	Initial Value	Stopped Value	Target Value
Epoch	0	35	1000
Elapsed Time	-	00:00:01	-
Performance	0.0365	2.42e-07	0
Gradient	0.179	5.46e-06	1e-07
Mu	0.001	1e-07	1e+10
Validation Checks	0	6	6

Model Summary
Train a neural network to map predictors to continuous responses.

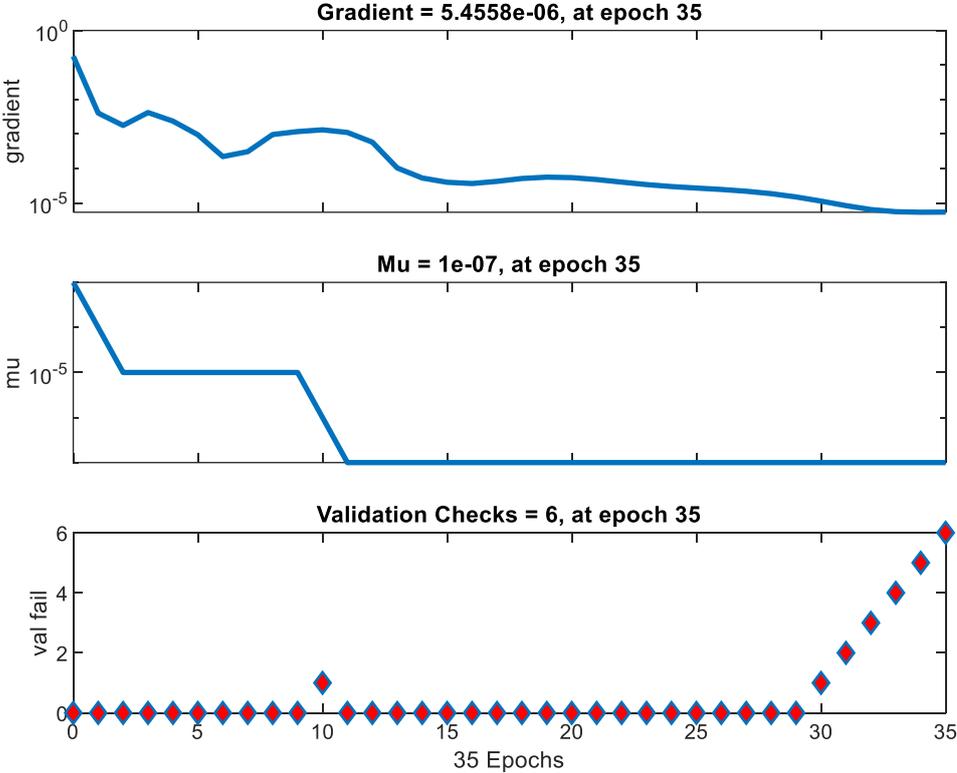
Data
Predictors: input1 - [24x2 double]
Responses: target1 - [24x2 double]
input1: double array of 24 observations with 2 features
target1: double array of 24 observations with 2 features

Algorithm
Data division: Random
Training algorithm: Levenberg-Marquardt
Performance: Mean squared error

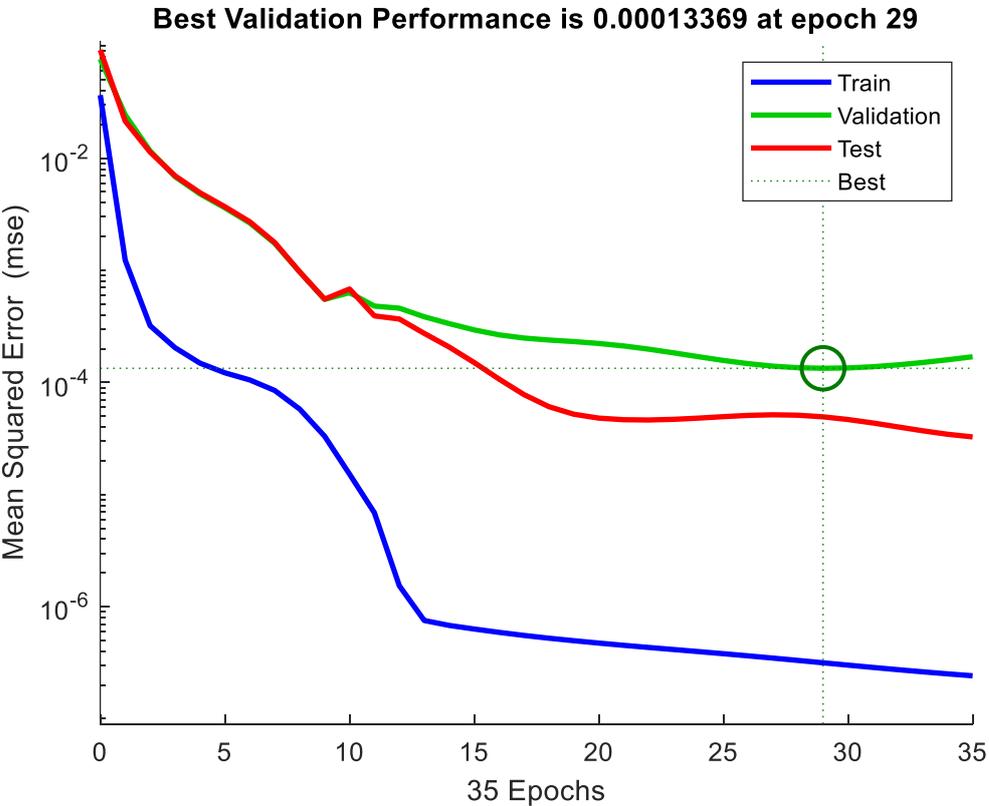
Training Results
Training start time: 23-Feb-2024 01:04:12
Layer size: 10

	Observations	MSE	R
Training	16	3.1583e-07	1.0000
Validation	4	1.3369e-04	0.9979
Test	4	4.9333e-05	0.9990

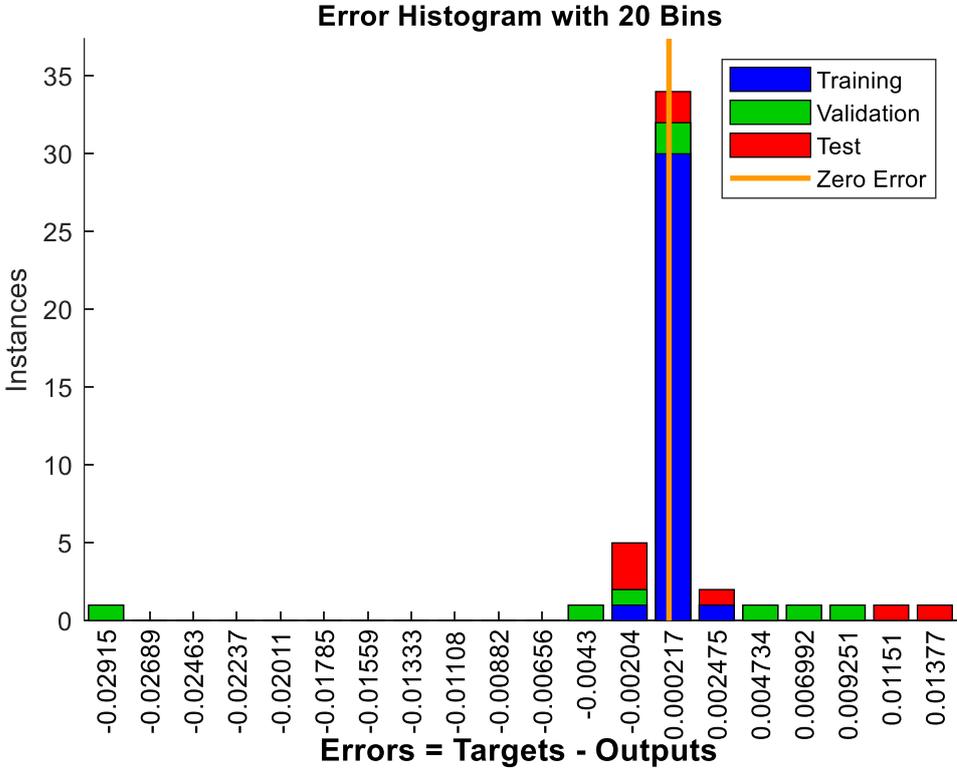
Anexo 6: Gradientes, Mu y validación checos.



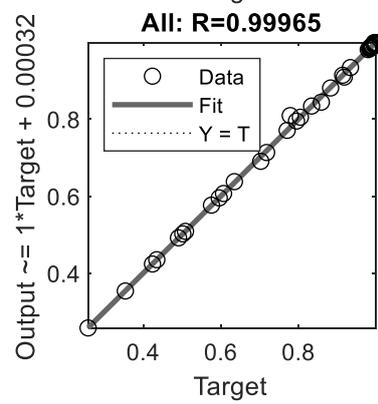
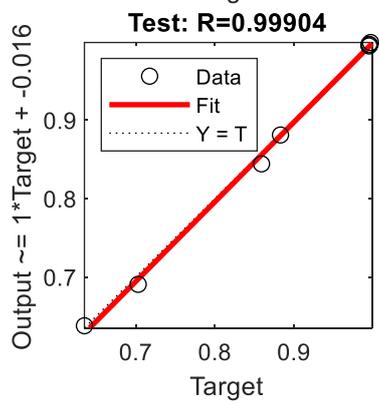
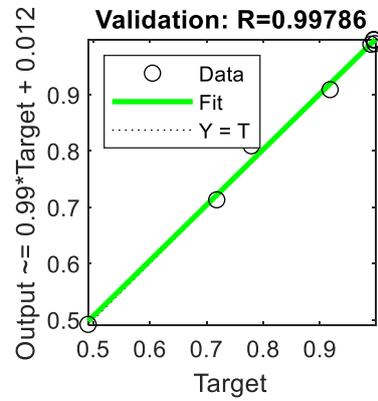
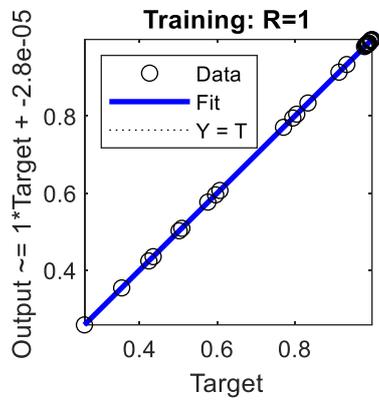
Anexo 7: Eficiencia de la validación



Anexo 8: Histograma de error



Anexo 9: Correlaciones



Anexo 10: Código Fuente

```
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 23-Feb-2024 01:13:02
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% input1 - input data.
% target1 - target data.

x = input1';
t = target1';

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

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 10;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

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

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

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

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

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

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

```

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

% View the Network
view(net)

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

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

```