

**USO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA ESTIMAR EL PERFIL DE  
TEMPERATURA EN UN REACTOR DE LECHO FIJO**

**SANDRA PAOLA SANTOS RODRÍGUEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2011**

**USO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA ESTIMAR EL PERFIL DE  
TEMPERATURA EN UN REACTOR DE LECHO FIJO**

**SANDRA PAOLA SANTOS RODRÍGUEZ**

**Documento presentado como requisito para optar por el título de Ingeniera  
Química.**

**Director:**

**CRISÓSTOMO BARAJAS FERREIRA**

**Magíster en Ingeniería Química**

**Codirector:**

**IVÁN DARÍO ORDOÑEZ SEPÚLVEDA**

**Ingeniero Químico**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2011**

A Dios por darme la sabiduría necesaria para recorrer este camino.

A mis padres Zoraida y Mauricio por su esfuerzo para hacer de mi una profesional, por confiar siempre en mis habilidades y brindarme su amor incondicional.

A mis hermanas por ser mi ejemplo, mi orgullo y por acompañarme en el cumplimiento de mis sueños.

A mi novio y amigo Andres Felipe por acompañarme en esta etapa de mi vida, ser el motor para no rendirme ante los obstáculos y mi fuente de inspiración. Te amo.

A mis amigos y compañeros de carrera por los maravillosos momentos compartidos y por su valiosa amistad.

A mi familia por estar siempre en los grandes momentos de mi vida.

## **AGRADECIMIENTOS**

Expreso mis sinceros agradecimientos a

Ing Iván Darío Ordoñez Sepúlveda. Por la confianza depositada en mi, por su valioso apoyo, orientación y dedicación a este proyecto.

M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira. Por su colaboración en la revisión y aceptación de este trabajo de investigación.

## CONTENIDO

<b>1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>2. MARCO TEÓRICO</b>	<b>2</b>
2.1. REACTOR DE LECHO FIJO PARA LA OXIDACIÓN CATALÍTICA DE O-XILENO . . . . .	2
2.2. MODELO 2D SEUDO-HOMOGÉNEO . . . . .	3
2.3. PUNTO CALIENTE . . . . .	4
2.4. RED NEURONAL ARTIFICIAL . . . . .	5
2.4.1. Ventajas de las redes neuronales . . . . .	5
2.5. ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL . . . . .	6
2.6. ELEMENTOS DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL . . . . .	7
2.6.1. Función de salida o de transferencia . . . . .	7
2.6.2. Conexiones entre neuronas . . . . .	7
2.6.3. Aprendizaje . . . . .	8
2.7. TIPOS DE REDES NEURONALES . . . . .	9
2.7.1. <i>Backpropagation</i> . . . . .	9
2.8. ALGORITMO DE ENTRENAMIENTO . . . . .	10
2.8.1. Levenberg-Marquardt (trainlm) . . . . .	10
<b>3. METODOLOGÍA</b>	<b>11</b>
3.1. SIMULACIÓN EN FEMLAB . . . . .	13
3.2. ELECCIÓN DE LAS VARIABLES DE ENTRADA DE LA RED NEURONAL Y SUS RANGOS DE VARIACIÓN . . . . .	13
3.2.1. Rangos de Variación . . . . .	14
3.3. DETERMINACIÓN DE LA MATRIZ DE ENTRADA Y SALIDA DE LA RED NEURONAL . . . . .	15
3.3.1. Selección del tamaño apropiado de la matriz de salida . . . . .	16
3.4. ESPECIFICACIÓN DE LA PRESENCIA DEL PUNTO CALIENTE . . . . .	17

3.5. DETERMINACIÓN DEL TAMAÑO DEL PUNTO CALIENTE . . . . .	18
3.6. ENTRENAMIENTO DE REDES NEURONALES ESPECIALIZADAS .	19
3.7. DIMENSIONAMIENTO DE LA RED . . . . .	19
<b>4. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS</b>	<b>21</b>
4.1. ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL GENERAL . . . . .	21
4.2. RED NEURONAL PARA LA REACCIÓN SIN PUNTO CALIENTE . . .	23
4.3. RED NEURONAL PARA LA TEMPERATURA MÁXIMA DEL REACTOR	25
4.4. REDES PARA LAS COMBINACIONES DE TAMAÑO Y POSICIÓN . .	25
<b>5. CONCLUSIONES</b>	<b>28</b>
<b>6. RECOMENDACIONES</b>	<b>29</b>
<b>7. ANEXO A. MATRIZ DE ENTRADA CON LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA LAS REDES NEURONALES</b>	<b>34</b>

## LISTA DE FIGURAS

2.1. Caminos de reacción del proceso de oxidación de o-xileno. . . . .	2
2.2. Dispersión radial y axial en el reactor. . . . .	4
2.3. Estructura de la red neuronal artificial. . . . .	6
2.4. Funciones de transferencia más utilizadas. . . . .	8
3.1. Representación del reactor en un plano bidimensional, donde el eje vertical representa la altura [m] y el eje horizontal el radio [m] del mismo.	12
3.2. 3.2(a) Error porcentual absoluto promedio, 3.2(b) Error máximo de las tres grillas interpoladas. . . . .	17
3.3. Umbralización. 3.3(a) colores escala de Femlab, 3.3(b) escala de grises, 3.3(c) umbral de 0,5, 3.3(d) umbral de 0,1, 3.3(e) umbral de 0,9. .	18
3.4. División del reactor para especializar las redes neuronales. . . . .	19
4.1. Errores de entrenamiento obtenidos para la red general. . . . .	22
4.2. Comparación del perfil de temperatura 2D 4.2(a) columna 4 red neuronal y Femlab, 4.2(b) columna 115 red neuronal y Femlab. . . . .	24
4.3. Errores de entrenamiento obtenidos para la red sin punto caliente . .	24
4.4. Errores de entrenamiento obtenidos para la red de temperatura máxima	25
4.5. Errores de entrenamiento obtenidos para: 4.5(a) red para la combinación 1, 4.5(b) red para la combinación 2, 4.5(c) red para la combinación 3. . . . .	26
4.6. Comparación del perfil de temperatura 2D. (Izquierda) red neuronal, (Derecha) simulación en Femlab 4.6(a) Columna 50 - red sin punto caliente, 4.6(b) Columna 5 - red combinación 1, 4.6(c) Columna 5 - red combinación 2, 4.6(d) Columna 5 - red combinación 3. . . . .	27

## LISTA DE TABLAS

3.1. Conversión de anhídrido ftálico. . . . .	14
3.2. Conversión máxima y mínima con la variación simultánea de la temperatura inicial y la concentración total del reactor. . . . .	14
3.3. Conversión máxima y mínima con la variación simultánea de la velocidad superficial, la temperatura inicial y la concentración total del reactor. . . . .	15
3.4. Combinación de valores de radio y altura para elegir el tamaño de la grilla. . . . .	16
3.5. Combinaciones según el tamaño y la posición del punto caliente, en función de la longitud del reactor. . . . .	19
4.1. Ensayos para encontrar la mejor red basados en el menor error absoluto promedio. . . . .	22
4.2. Matriz de pesos $W$ entre la capa de entrada y la capa oculta. . . . .	23
4.3. Estructuras neuronales con el mejor entrenamiento. . . . .	27
7.1. Entrada red general y red temperatura máxima . . . . .	34
7.2. Entradas para la red sin punto caliente . . . . .	36
7.3. Entrada para la red combinación 1 . . . . .	38
7.4. Entrada para la red combinación 2 . . . . .	38
7.5. Entrada para la red combinación 3 . . . . .	39

## RESUMEN

**TÍTULO: USO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA ESTIMAR EL PERFIL DE TEMPERATURA EN UN REACTOR DE LECHO FIJO.<sup>1</sup>**

**AUTOR: SANDRA PAOLA SANTOS RODRÍGUEZ.<sup>2</sup>**

**PALABRAS CLAVES:** Red neuronal artificial, Backpropagation, Trainlm, Grilla.

### **DESCRIPCIÓN O CONTENIDO:**

Las redes neuronales artificiales son un conjunto de técnicas que permiten a las computadoras aprender y ser capaces de generalizar comportamientos a partir de información suministrada en forma de ejemplos, utilizando modelos matemáticos recreados mediante mecanismos artificiales que permiten mayor exactitud en los resultados aunque la naturaleza de los problemas sea no lineal como sucede en la oxidación de o-xileno. En este proyecto las redes neuronales artificiales se emplean para emular el perfil de temperatura de un reactor de lecho fijo para oxidación catalítica de o-xileno a diferentes condiciones de operación (temperatura inicial, velocidad superficial y concentración total del alimento) utilizando el programa Femlab para generar los datos a utilizar en el entrenamiento y la simulación de las redes.

Para esto primero se abordó el problema estableciendo las variables del proceso, los rangos de trabajo de éstas y el tamaño de las matrices de entrada y salida de las redes neuronales, luego se creó una red neuronal capaz de emular el comportamiento del perfil de temperatura del reactor. Se determinó la existencia del punto caliente que se genera en el reactor por la reacción altamente exotérmica y se crearon cinco redes neuronales: la primera para la reacción sin punto caliente, la segunda para hallar la temperatura máxima del interior del reactor y las tres restantes especializadas en la posición y el tamaño del punto caliente dentro del reactor.

Las arquitecturas elegidas para el entrenamiento de las redes neuronales permitieron lograr buenos resultados y sólo fueron necesarias pocas neuronas.

---

<sup>1</sup>Trabajo de grado

<sup>2</sup>Facultad de ingenierías físico-químicas, escuela de ingeniería química. Director: M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira. Co-director: Ing. Iván Darío Ordoñez Sepúlveda.

## ABSTRACT

**TITLE: USE OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS TO ESTIMATE THE TEMPERATURE PROFILE IN A FIXED BED REACTOR.<sup>1</sup>**

**AUTHOR: SANDRA PAOLA SANTOS RODRÍGUEZ.<sup>2</sup>**

**KEYWORDS:** Artificial neural networks, Backpropagation, Trainlm, grid.

### DESCRIPTION OR CONTENT:

Artificial neural networks are a set of techniques which allows computers to learn and be able of generalize behaviors from information provided as examples, using mathematical models created by artificial mechanisms allowing more accuracy in results although the nature of the problems is not linear as happens in the oxidation of o-xylene. In this project, artificial neural networks are used to emulate the temperature profile of a fixed bed reactor for catalytic oxidation of o-xylene to different operating conditions (initial temperature, superficial velocity and total concentration). Using the Femlab program to generate data to use in training and simulation on networks.

Firstly, the problem is addressed by establishing the process variables, the working ranges of these and the size of the input and output matrixes of neural networks. After, a neural network capable of emulating the behavior of the reactor temperature profile is created. The existence a hot spot that is generated in the reactor was determinate by the highly exothermic reaction creating five neural networks: the first for the reaction without the hot spot, the second to find the maximum temperature inside the reactor and the remaining three specializes in the position and size of the hot spot within the reactor.

The architecture chosen for the training of neural networks allowed to achieve good results and it only took a few neurons.

---

<sup>1</sup>Work Degree

<sup>2</sup>Faculty of Physico-chemical engineering, chemical engineering school. Directress: M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira. Codirectress: Ing. Iván Darío Ordoñez Sepúlveda.

## **OBJETIVOS**

### **OBJETIVO GENERAL**

Construir y usar un modelo basado en redes neuronales artificiales, para estimar el perfil bidimensional de temperatura en un reactor de lecho fijo para la oxidación catalítica del hidrocarburo o-xileno.

### **OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Realizar en Femlab la simulación de un reactor de lecho fijo para un sistema catalítico exotérmico de reacciones múltiples en diferentes condiciones de velocidad de flujo, temperatura inicial y concentración de alimento.
- Implementar una red neuronal artificial que use para su entrenamiento datos proporcionados por la simulación en el programa Femlab.
- Construir una red neuronal basada en la simulación de Femlab para determinar la ubicación y el tamaño del punto caliente, generado por la reacción exotérmica que ocurre en el reactor.
- Proponer y ejecutar sobre una red neuronal una estrategia para la predicción del perfil de temperatura, manipulando el número de puntos del perfil a simular, según las condiciones de operación del reactor.

## 1. INTRODUCCIÓN

Muchos de los problemas de la ciencia y la ingeniería se reducen a un conjunto de ecuaciones diferenciales (ED) a través de un proceso de modelado matemático. En ocasiones no es fácil obtener soluciones exactas de estas ED y por esto, muchos métodos han sido propuestos en la literatura para la solución de las mismas, entre estos Runge Kutta, Predictor-corrector, funciones de base radial, modelos basados en la programación genética y redes neuronales artificiales [1, 2].

Encontrar una red neuronal que se aproxime a la solución de un determinado conjunto de ecuaciones diferenciales tiene muchas ventajas en comparación con los tradicionales métodos numéricos, ya que no es necesario crear algoritmos ni sistemas de ecuaciones y la solución es continua durante todo el dominio de integración.

Desde principios de los años 80's se han utilizado ampliamente las redes neuronales artificiales en la industria química para diversas aplicaciones, tales como: el control adaptativo, control basados en modelos, control de procesos, detección de fallos, modelado dinámico y predicción de propiedades termodinámicas.

En este trabajo la metodología de construcción de redes neuronales se aplica en la predicción del perfil de temperatura de un reactor de lecho fijo para la oxidación de o-xileno. La simulación de este tipo de procesos se realiza con el fin de evitar que se generen condiciones fuera de control en el reactor ocasionadas por la formación de puntos calientes en su interior. Prediciendo la zona de reacción y la mayor temperatura dentro del reactor, es entonces posible diseñar y/o implementar un buen método de enfriamiento.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1. REACTOR DE LECHO FIJO PARA LA OXIDACIÓN CATALÍTICA DE O-XILENO

Un proceso de gran importancia industrial es la oxidación parcial de o-xileno a anhídrido ftálico (PA) en presencia de aire y dentro de un reactor multitubular de lecho fijo. En este proceso, la temperatura suele mantenerse entre 400-475 °C, mientras que el tiempo de residencia varía entre 0,5 y 5 segundos. El catalizador de elección es por lo general una mezcla de óxido de vanadio y sulfato de potasio en un soporte de sílice. El factor más importante a considerar para este proceso es la temperatura a lo largo del reactor, debido a que las reacciones que tienen lugar en éste son altamente exotérmicas. Con el fin de eliminar las condiciones fuera de control, el reactor debe ser enfriado controlando la distribución de la temperatura mediante un adecuado diseño del diámetro del tubo, variación del tiempo de residencia, temperatura de la pared (velocidad de enfriamiento), así como la temperatura de entrada de la alimentación. En este ejemplo se cubren algunos de estos factores mediante el uso de un modelo pseudo-homogéneo de dos dimensiones, donde se supone que el sistema tiene simetría de rotación. La cinética de la reacción se describe en el esquema de la Figura 2.1 [3, 4, 6].

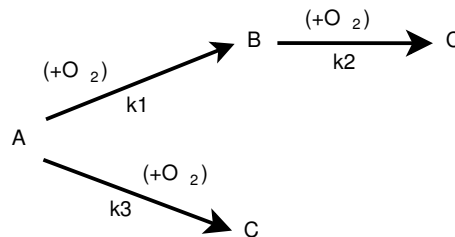


Figura 2.1: Caminos de reacción del proceso de oxidación de o-xileno.

Donde A representa o-xileno, B representa al anhídrido ftálico y C es la cantidad total de monóxido de carbono y dióxido de carbono.

Un solo tubo de gran diámetro empacado con el catalizador no se usa debido a la necesidad de eliminar o añadir calor, por esto el reactor deberá construirse con cierto número de tubos encajados en un solo cuerpo. Si el efecto calorífico es considerable, los tubos de catalizador deben ser pequeños (de hasta 1 pulgada de diámetro) para evitar temperaturas excesivas en la mezcla reaccionante. En este trabajo se simulará el comportamiento de un reactor de 3 m de altura y 0,0127 m de radio (dimensiones usadas en la industria).

Un método de enfriamiento que se puede utilizar en este reactor consta de hacer circular un fluido en el espacio que hay entre los tubos, sin embargo, una desventaja de este método es la rapidez de transferencia constante de calor al fluido a lo largo de todo el tubo y casi siempre la mayor parte de la reacción tiene lugar cerca de la entrada del mismo. Por ejemplo, en una reacción exotérmica la velocidad de reacción es relativamente grande a la entrada del reactor por las altas concentraciones de reactantes en dicha zona y un poco mayor a medida que la mezcla reaccionante se desplace a una corta distancia dentro del tubo, esto debido a que el calor liberado por la alta velocidad de reacción, es mayor al que puede ser transferido al fluido refrigerante. Siguiendo por el tubo, la velocidad disminuirá, la cantidad menor de calor obtenido puede ahora eliminarse a través de la pared, dando como resultado que la temperatura disminuya. Esta situación conduce a un máximo en la curva de temperatura en función de la longitud del reactor, este máximo puede llegar a ser muy grande comparado con las zonas frías, tanto que puede poner la operación en riesgo de seguridad [5].

## **2.2. MODELO 2D SEUDO-HOMOGÉNEO**

En el modelo pseudo-homogéneo se ignoran los gradientes intraparticulares, por lo que en todo el reactor la concentración y la temperatura tienen el mismo valor que en el fluido. El sistema que realmente consiste de dos fases, se modela como si fuera homogéneo. Los modelos 2D se prefieren utilizar para reactores no adiabáticos

con pronunciados efectos térmicos y cuando la difusión radial no se puede despreciar (Figura 2.2). Este modelo permite predecir un detallado patrón de temperatura y concentración en el reactor utilizando el concepto de transporte efectivo para formular el flujo de calor y masa en la dirección radial [6].

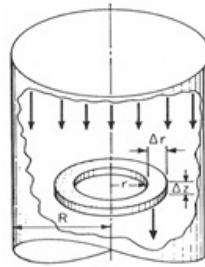


Figura 2.2: Dispersión radial y axial en el reactor.

Fuente: Diseño de reactores heterogéneos catalíticos, reactor de lecho fijo.

M.A.Romero. 2003

### 2.3. PUNTO CALIENTE

Cuando un fluido circula a través de un lecho estático de sólidos, parte de la superficie de las partículas no está en contacto directo con el fluido. Si el sólido es un catalizador, se pierde algo de su eficacia. Por otra parte, si se produce calor en un lecho estático, como consecuencia de una reacción exotérmica, pueden producirse fuertes gradientes de temperatura y con frecuencia presentarse zonas locales de temperatura muy alta. Una zona de este tipo se conoce como *punto caliente*. Puesto que la temperatura del punto caliente no debe exceder de un valor determinado por razones de seguridad y control, entonces gran parte del catalizador opera a una temperatura por debajo de la óptima [7].

Si la velocidad a la que el sistema desprende calor es superior a la velocidad con la que el propio sistema puede disiparlo, entonces la temperatura aumentará hasta un valor crítico a partir del cual el proceso será incontrolable; el peligro surge, entre cosas, cuando se genera presión a causa de la reacción y ésta no es aliviada, si el

sistema es cerrado el aumento de presión originará en el peor de los casos la explosión del reactor. Para prevenir accidentes, es recomendable la determinación del límite de temperatura por debajo del cual se pueden tener unas condiciones seguras de trabajo [8].

## **2.4. RED NEURONAL ARTIFICIAL**

“Las redes neuronales artificiales son redes interconectadas masivamente en paralelo de elementos simples y con organización jerárquica, las cuales intentan interactuar con los objetos del mundo real del mismo modo que lo hace el sistema nervioso biológico”. [9].

una red neuronal artificial esta compuesta por un conjunto de neuronas conectadas unas a otras, cada conexión que une las neuronas tiene asociado un peso que es el que hace que la red adquiera conocimiento. La entrada neta que recibe una neurona es igual a la suma del producto de cada señal individual por el peso de cada conexión, además esta entrada tiene ligada una función de transferencia que se utiliza para acotar la salida de la neurona. Al finalizar el entrenamiento de la red neuronal se realiza una comparación entre la salida de la red y la salida deseada para obtener los errores de entrenamiento (ver Figura 2.3).

### **2.4.1. Ventajas de las redes neuronales**

Debido a su constitución y a sus fundamentos, las redes neuronales artificiales presentan un gran número de características semejantes a las del cerebro. Por ejemplo, son capaces de aprender de la experiencia, de generalizar de casos anteriores a nuevos casos, de abstraer características esenciales a partir de entradas que representan información irrelevante, etc. Esto hace que ofrezcan numerosas ventajas y que este tipo de tecnología se esté aplicando en múltiples áreas. Estas ventajas incluyen: Aprendizaje adaptativo, autoorganización, tolerancia a fallos, ope-

ración en tiempo real, fácil inserción dentro de la tecnología existente y numerables aplicaciones [10–12].

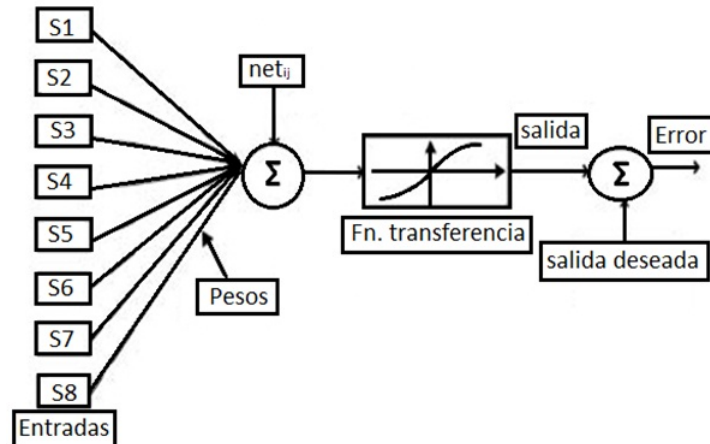


Figura 2.3: Estructura de la red neuronal artificial.

Fuente: Autor

## 2.5. ESTRUCTURA DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL

- *Número de niveles o capas.* La distribución de neuronas dentro de la red se realiza formando niveles o capas de un número determinado de neuronas cada una. A partir de su situación dentro de la red, se pueden distinguir tres tipos de capas: de entrada, ocultas y de salida.
- *Número de neuronas por nivel.*
- *Patrones de conexión.*
- *Flujo de información.*
- *Formas de conexión entre neuronas.* La conectividad entre los nodos de una red neuronal está relacionada con la forma en que las salidas de las neuronas están canalizadas para convertirse en entradas de otras neuronas. Cuando ninguna salida de las neuronas es entrada de neuronas del mismo nivel o de

niveles precedentes, la red se describe como de propagación hacia adelante. Cuando las salidas pueden ser conectadas como entradas de neuronas de niveles previos o del mismo nivel, incluyéndose ellas mismas, la red es de propagación hacia atrás.

## **2.6. ELEMENTOS DE UNA RED NEURONAL ARTIFICIAL**

### **2.6.1. Función de salida o de transferencia**

Entre las unidades o neuronas que forman una red neuronal artificial existe un conjunto de conexiones que unen unas a otras. Cada unidad transmite señales a aquellas que están conectadas con su salida. Existen cuatro funciones de transferencia típicas que determinan distintos tipos de neuronas.

- Función escalón.
- Función lineal y mixta.
- Sigmoidal.
- Función gaussiana.

La función escalón o umbral únicamente se utiliza cuando las salidas de la red son binarias (dos posibles valores). La función lineal o identidad equivale a no aplicar función de salida. Las funciones mixtas y sigmoidal son las más apropiadas cuando se quiere como salida información analógica. En general se utiliza la función identidad [10].

En la Figura 2.4 se puede observar las funciones de transferencia más utilizadas para el entrenamiento de las redes neuronales artificiales.

### **2.6.2. Conexiones entre neuronas**

Las conexiones que unen a las neuronas que forman una red neuronal artificial tienen asociado un peso, que hace que la red adquiera conocimiento. Cada conexión (sinapsis) entre la neurona  $i$  y la  $j$  está ponderada por pesos  $W_{ij}$ . Normalmente,

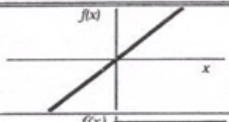
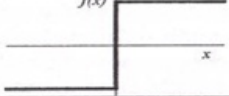
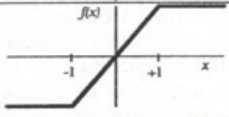
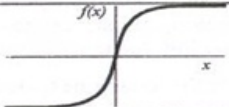
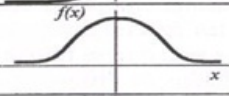
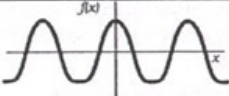
	<b>Función</b>	<b>Rango</b>	<b>Gráfica</b>
<b>Identidad</b>	$y = x$	$[-\infty, +\infty]$	
<b>Escalón</b>	$y = \text{sign}(x)$ $y = H(x)$	$\{-1, +1\}$ $\{0, +1\}$	
<b>Lineal a tramos</b>	$y = \begin{cases} -1, & \text{si } x < -l \\ x, & \text{si } -l \leq x \leq +l \\ +1, & \text{si } x > +l \end{cases}$	$[-1, +1]$	
<b>Sigmoidea</b>	$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ $y = \text{tgh}(x)$	$[0, +1]$ $[-1, +1]$	
<b>Gaussiana</b>	$y = Ae^{-Bx^2}$	$[0, +1]$	
<b>Sinusoidal</b>	$y = A \text{sen}(\omega x + \varphi)$	$[-1, +1]$	

Figura 2.4: Funciones de transferencia más utilizadas.

como simplificación se considera que el efecto de cada señal es aditivo, de tal forma que la entrada neta que recibe una neurona (potencial postsináptico)  $net_{ij}$  es la suma del producto de cada señal individual por el valor de la sinapsis que conecta ambas neuronas.

$$net_j = \sum_i^N W_{ij} \cdot y_i \quad (2.1)$$

La matriz de pesos  $W$  con todos los pesos  $W_{ij}$  refleja la influencia que sobre la neurona  $j$  tiene la neurona  $i$ .  $W$  es un conjunto de elemento positivos, negativos o nulos.

### 2.6.3. Aprendizaje

Durante la operación de una red neuronal podemos distinguir claramente dos fases o modos de operación: la fase de aprendizaje o entrenamiento, y la fase de operación o ejecución. En la primera fase, la fase de aprendizaje, la red es entre-

nada para realizar un determinado tipo de procesamiento. Una vez alcanzado un nivel de entrenamiento adecuado, se pasa a la fase de operación, donde la red es utilizada para llevar a cabo la tarea para la cual fue entrenada [10].

## **2.7. TIPOS DE REDES NEURONALES**

La clasificación de las redes neuronales se realiza de acuerdo al tipo de función de transferencia y tipo de algoritmo o regla de aprendizaje principalmente, encontrando gran número de modelos en la literatura. En este caso se usará la red *backpropagation*.

### **2.7.1. *Backpropagation***

El algoritmo *backpropagation* (propagación del error hacia atrás), es una regla de aprendizaje que se puede aplicar en modelos de redes con más de dos capas de neuronas. Una característica importante de este algoritmo es la representación interna del conocimiento que es capaz de organizar en la capa intermedia de las neuronas para conseguir cualquier correspondencia entre la entrada y la salida de la red. De forma simplificada, el funcionamiento de una red *backpropagation* consiste en un aprendizaje de un conjunto predefinido de pares de entradas-salidas dados como ejemplo, empleando un ciclo propagación- adaptación de dos fases: primero se aplica un patrón de entrada como estímulo para la primera capa de neuronas de la red, se va propagando a través de todas las capas superiores hasta generar una salida, se compara el resultado obtenido en las neuronas de salida con la salida que se desea obtener y se calcula un valor del error para cada neurona de salida. A continuación, estos errores se transmiten hacia atrás, partiendo de la capa de salida, hacia todas las neuronas de la capa intermedia que contribuyan directamente a la salida, recibiendo el porcentaje de error aproximado a la partición de la neurona intermedia en la salida original. Este proceso se repite, capa por capa, hasta que todas las neuronas de la red hayan recibido un error que describa su aportación relativa al error total. Basándose en el valor del error recibido, se reajustan los pesos

de conexión de cada neurona, de manera que en la siguiente vez que se presente el mismo patrón, la salida esté más cercana a la deseada, es decir, el error disminuya [10].

## **2.8. ALGORITMO DE ENTRENAMIENTO**

Para el entrenamiento de las diferentes redes se utilizó el algoritmo Levenberg-Marquardt, que viene por defecto incluida en el *nntool* de Matlab [13], para redes *backpropagation*.

### **2.8.1. Levenberg-Marquardt (trainlm)**

Es el nombre del algoritmo que actualiza los pesos y las ganancias de acuerdo a la optimización de Levenberg-Marquardt. Es el algoritmo más rápido para redes *backpropagation*, pero tiene la desventaja de requerir de un set de entrenamiento lo más estándar posible, pues de otra forma solo aproximará correctamente valores que se encuentren dentro de los patrones de aprendizaje. Su algoritmo de optimización es no lineal y usa el gradiente y la aproximación del hessiano mediante el método de Gauss Newton [14].

### 3. METODOLOGÍA

1) *Simulación en Femlab*: Esta simulación se realiza con el fin de obtener los datos de entrada y salida de la red neuronal ya que los datos reales de la industria no son de fácil adquisición. Este reactor ya fue simulado en Femlab por Eduardo Fontes, Johan Sundqvist, Olof Hernell, Magnus Marklund, y Shu-Ren Hysing.

2) *Elección de las variables de entrada de la red neuronal y sus rangos de variación*: Consiste en la determinación de las variables de operación del proceso que puedan afectar significativamente el perfil de temperatura del reactor y los rangos de variación de éstas, tomando en este caso como parámetro de elección, el límite máximo y mínimo de la conversión de anhídrido ftálico alcanzada en la reacción [5].

3) *Determinación de la matriz de entrada y salida de la red neuronal*: En esta etapa se eligen las variables de la matriz de entrada y salida, así como el tamaño de estas matrices para utilizarlas en el entrenamiento de la red neuronal. Para definir el tamaño de la matriz de salida se debe tener en cuenta el número de divisiones de los ejes (grilla) de la Figura 3.1 que representan discretizadamente el radio y la altura del reactor. La selección de la mejor grilla se realiza tomando tres grillas diferentes e interpolándolas bidimensionalmente a una de un tamaño superior; la que prediga el perfil de temperatura bidimensional del reactor con el menor error será la elegida.

4) *Entrenamiento de la red neuronal general*: Consiste en entrenar una red neuronal con todas las condiciones de operación a la vez y sus correspondientes perfiles de temperatura (Etapa 1).

5) *Especificación de la presencia del punto caliente*: Una vez realizado el entrenamiento de la red neuronal con todos los perfiles de temperatura, se determina el tamaño y la posición del punto caliente estableciendo primero a que deltas de tem-

peratura se presenta éste.

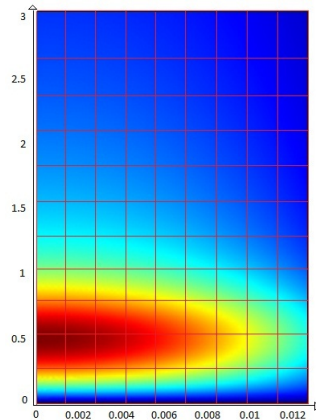


Figura 3.1: Representación del reactor en un plano bidimensional, donde el eje vertical representa la altura [m] y el eje horizontal el radio [m] del mismo.

Fuente: Autor

6) *Red neuronal para la reacción sin punto caliente*: Luego de establecer el delta de temperatura al cual se presenta el punto caliente, se entrena una red neuronal con las condiciones de operación que no generan punto caliente en la reacción y sus correspondientes perfiles de temperatura (Etapa 2).

7) *Red neuronal para la temperatura máxima del reactor*: Adicionalmente se entrena una red neuronal en donde todas las condiciones de operación del proceso corresponden a la matriz de entrada; y la matriz de salida es la temperatura máxima del interior del reactor (Etapa 3).

8) *Determinación del tamaño del punto caliente*: En esta etapa se halla el tamaño (alto y ancho) del punto caliente aplicando el concepto de tratamiento digital de imágenes. Para esto se emplea como método, la segmentación ó Umbralización, con la cual es posible extraer la zona de interés de la imagen obtenida por la simulación de Femlab.

9) *Entrenamiento de redes neuronales especializadas*: Un grupo de redes neuronales fue entrenado, donde cada una de las redes se especializa en la localización y el tamaño del punto caliente (Etapa 4).

### **3.1. SIMULACIÓN EN FEMLAB**

Para simular el proceso de oxidación catalítica de o-xileno en un reactor de lecho fijo, se utilizó el programa Femlab, versión 3.1.0.157 fabricado por Comsol AB [15], que contiene este ejemplo en los modelos de la librería, como un modelo avanzado. Los datos obtenidos en la simulación fueron usados para crear las redes neuronales artificiales en el *nntool* de Matlab R2006a [13].

### **3.2. ELECCIÓN DE LAS VARIABLES DE ENTRADA DE LA RED NEURONAL Y SUS RANGOS DE VARIACIÓN**

En este proceso, la temperatura inicial del reactor desempeña un papel muy importante en la determinación del punto caliente, pero éste no es el único parámetro influyente. Por medio de la simulación se puede observar que la disminución de la concentración total hace que disminuya la temperatura del punto caliente, igualmente se observa que el aumento de la velocidad superficial expande el punto caliente en el reactor haciendo que la zona de alta temperatura ocupe un área mayor.

Estos tres parámetros se toman para realizar un estudio del comportamiento del perfil de temperatura del reactor y del tamaño y la posición del punto caliente. En base a esto la matriz de entrada contendrá estas tres variables del proceso, y la matriz de salida será una grilla de  $n \times m$  posiciones que representa el perfil de temperatura bidimensional para cada una de estas condiciones de operación.

### 3.2.1. Rangos de Variación

Para elegir el rango de temperatura de trabajo se analizó la variación de la conversión media y se tuvo en cuenta que el cambio de temperatura no generara conversiones de anhídrido ftálico inferiores a 0,1. El valor máximo para el rango de temperatura inicial será el que produzca la mayor conversión de producto deseado. Se utilizaron como constantes del proceso:

$$\text{Velocidad superficial } (U_s) = 1,064 \text{ m/s}$$

$$\text{Concentración total } (C_{tot}) = 44,85 \text{ mol/m}^3$$

que son las condiciones ideales de producción, obteniendo los resultados de la Tabla 3.1.

Temperatura inicial [K]	573	585	597	609	621	627	630
Conversión Anh. Ftálico	0,10	0,17	0,27	0,41	0,58	0,67	0,70

Tabla 3.1: Conversión de anhídrido ftálico.

El rango de concentración de alimento a trabajar se escogió bajo el mismo criterio anterior, pero esta vez solo se mantuvo constante la velocidad superficial y se varió la temperatura inicial y la concentración total simultáneamente. Como se puede observar en la Tabla 3.2, la máxima conversión de anhídrido ftálico se alcanza cuando se trabaja con una concentración de 18 mol/m<sup>3</sup> y una temperatura inicial de 627K; y la mínima conversión a una concentración de 72 mol/m<sup>3</sup>. Debido a que a 630K no es posible trabajar con concentraciones superiores a 48 mol/m<sup>3</sup>, ya que la simulación en el programa Femlab no converge por que se sobrepasa el límite de temperatura de trabajo del reactor de 748K, se establece el intervalo de temperatura inicial de 573 – 627K y el de concentración total de 18-72 mol/m<sup>3</sup>.

La velocidad superficial se halló estableciendo el mismo criterio de la conversión del producto deseado, variando la temperatura y la concentración total. En la Tabla 3.3 se puede observar la conversión mínima y máxima que se obtiene de las diferentes combinaciones de los tres parámetros. Si se usa un valor de velocidad

Concentración Total [ $mol/m^3$ ]	Temperatura inicial [ $K$ ]	Conversión Anh. Ftálico
18	627	0,720
72	573	0,1

Tabla 3.2: Conversión máxima y mínima con la variación simultánea de la temperatura inicial y la concentración total del reactor.

superficial mayor a 2,6 m/s la conversión disminuye y si se usa un valor menor a 0,4 m/s la simulación en Femlab no converge por que se sobrepasa el límite de temperatura de trabajo del reactor, por esto el rango elegido para la velocidad superficial es de 0,4 – 2,6 m/s.

Velocidad superficial [ $m/s$ ]	Concentración total [ $mol/m^3$ ]	Temperatura inicial [ $K$ ]	Conversión Anh. Ftálico
0,4	72	626	0,711
2,6	18	573	0,1

Tabla 3.3: Conversión máxima y mínima con la variación simultánea de la velocidad superficial, la temperatura inicial y la concentración total del reactor.

### 3.3. DETERMINACIÓN DE LA MATRIZ DE ENTRADA Y SALIDA DE LA RED NEURONAL

Para crear la matriz de entrada de la red neuronal se subdividen arbitrariamente los rangos de las 3 variables del proceso en cinco valores equiespaciados de donde se obtienen 125 posibles combinaciones, generando una matriz de 3x125 datos que se puede ver en el Anexo A. En el caso de las salidas (objetivos), se tienen n posiciones tanto en el radio, como en la altura del reactor, proporcionadas por la simulación en Femlab. En este punto se debe decidir la cantidad apropiada de datos que predicen el perfil de temperatura sin exceder el límite de memoria que el sistema operativo tiene disponible para Matlab, lo cual puede generar errores al momento de entrenar la red neuronal [16]. Para esta elección se ensaya con diferentes tamaños de grillas.

### 3.3.1. Selección del tamaño apropiado de la matriz de salida

Se escogieron tres combinaciones de radio y altura para decidir el tamaño de la grilla, se interpolaron a una matriz de 50x50 y se usó el error porcentual absoluto promedio (error prom) como parámetro de elección.

$$errorprom = \frac{100}{n} * \sum_{i=1}^n \frac{|valor\ teórico - valor\ experimental|}{valor\ teórico} \quad (3.1)$$

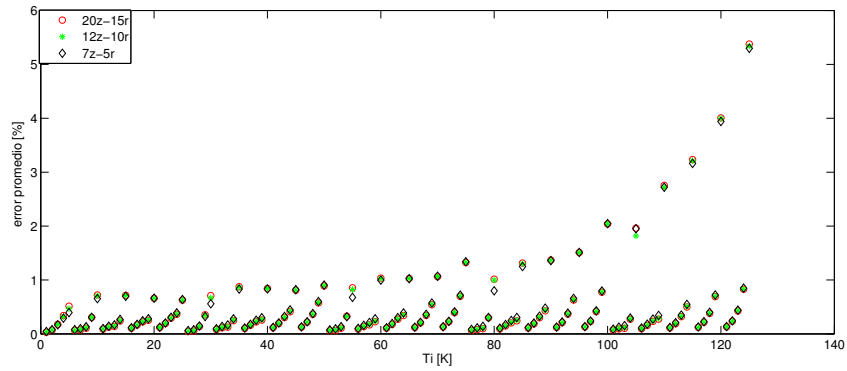
Donde  $n$  es el número de datos de entrenamiento. Las grillas seleccionadas arbitrariamente son las que se presentan en la Tabla 3.4.

	Grilla		
Altura	20	12	7
Radio	15	10	5

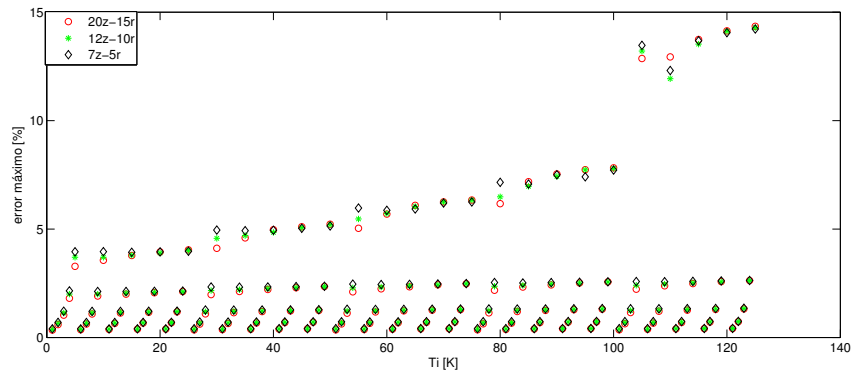
Tabla 3.4: Combinación de valores de radio y altura para elegir el tamaño de la grilla.

La Figura 3.2 representa: 3.2(a) el error porcentual absoluto promedio y 3.2(b) el error máximo entre el perfil de temperatura interpolado y el perfil de temperatura de Femlab con malla 50x50. Se puede observar que el error absoluto promedio presenta un comportamiento similar para las tres interpolaciones; sin embargo, al realizar un acercamiento, la grilla de 7 valores de altura y 5 de radio, contiene un mayor error con respecto a las demás.

Debido a que la interpolación con las grillas de 20 valores de altura - 15 de radio y 12 valores de altura - 10 de radio, tiene un error absoluto promedio aproximadamente igual en la mayoría de los puntos, se observa que es suficientemente adecuado tomar la grilla 12 valores de altura - 10 de radio para definir el tamaño de la matriz de salida.



(a)



(b)

Figura 3.2: 3.2(a) Error porcentual absoluto promedio, 3.2(b) Error máximo de las tres grillas interpoladas.

Fuente: Autor

### 3.4. ESPECIFICACIÓN DE LA PRESENCIA DEL PUNTO CALIENTE

En la literatura consultada no fue posible encontrar una definición formal ni cuantitativa que defina cuando existe un punto caliente en la reacción, así que arbitrariamente se establece, para este trabajo, que el punto caliente se presenta a deltas de temperatura al interior del reactor superiores a 10 grados centígrados. Definiendo este delta como la diferencia entre la temperatura más baja y la más alta dentro del reactor.

### 3.5. DETERMINACIÓN DEL TAMAÑO DEL PUNTO CALIENTE

La umbralización se realizó con el fin de determinar el tamaño (alto y ancho) del punto caliente en el reactor. Para esto es necesario llevar la imagen que muestra la simulación de Femlab a escala de grises y posteriormente convertirla en imagen binaria (blanco y negro) con la elección de un umbral que determina el color asignado a cada pixel, es decir, negro para los valores menores al umbral y blanco para los mayores o iguales.

Se trabajó con diferentes valores de umbrales desde 0,1 hasta 0,9 con un espaciamiento de 0,1 entre ellos, destacando los tres que se muestran en la Figura 3.3. Con un umbral de 0,5 se abarca toda la zona de alta temperatura incluida la del punto caliente; con el umbral de 0,1 se cubre toda la zona de reacción y termina en donde el reactor estabiliza su temperatura; a un umbral de 0,9 se puede observar que la zona más oscura de la imagen de colores de Femlab es rodeada; esta zona es la que representa el punto caliente en el reactor y por eso éste umbral es el elegido para definir el tamaño.

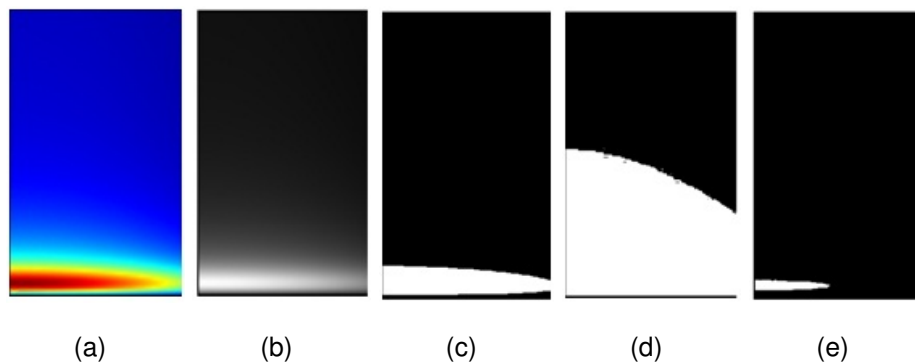


Figura 3.3: Umbralización. 3.3(a) colores escala de Femlab, 3.3(b) escala de grises, 3.3(c) umbral de 0,5, 3.3(d) umbral de 0,1, 3.3(e) umbral de 0,9.

Fuente: Autor

### 3.6. ENTRENAMIENTO DE REDES NEURONALES ESPECIALIZADAS

Observando el tamaño y la posición del punto caliente en la simulación de Femlab, se puede deducir que éste se presenta en un mismo lugar para determinadas condiciones de operación, así que se decidió especializar las redes que generan el perfil de temperatura en función de esta ubicación. Para esto se dividió el reactor en 2 partes para la posición y 3 partes para el tamaño, debido a la frecuencia de aparición del punto caliente en estas zonas (ver Figura 3.4). Se realizó la combinación de estas divisiones del reactor como se muestra en la Tabla 3.5, donde se entrenó una red neuronal para cada situación manipulando el número de puntos del perfil a simular, es decir, siete puntos de la grilla se ubicaron en la zona del punto caliente y los tres restantes en el resto del reactor.

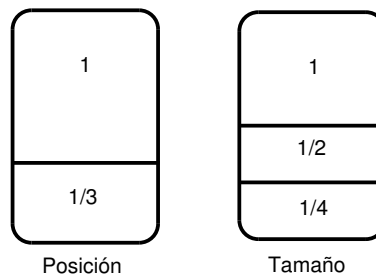


Figura 3.4: División del reactor para especializar las redes neuronales.

	Combinación 1	Combinación 2	Combinación 3
Tamaño	$\geq 0 \ \& \ < 1/4$	$\geq 0 \ \& \ < 1/2$	$\geq 1/2 \ \& \ < 1$
Posición	$\geq 0 \ \& \ < 1/3$	$\geq 0 \ \& \ < 1/3$	$\geq 1/3 \ \& \ < 1$

Tabla 3.5: Combinaciones según el tamaño y la posición del punto caliente, en función de la longitud del reactor.

### 3.7. DIMENSIONAMIENTO DE LA RED

No se pueden establecer reglas concretas para determinar el número de neuronas o el número de capas de una red para resolver un problema concreto. Lo mismo ocurre a la hora de seleccionar el conjunto de vectores de entrenamiento. En todos

estos casos, lo único que se puede proporcionar son unas cuantas ideas generales deducidas de la experiencia de numerosos autores [17].

El número de neuronas ocultas a usar no suele ser tan evidente. En cada simulación se debe ensayar con diferentes números de neuronas hasta obtener la que mejor se asemeje a los objetivos y tenga el menor error de entrenamiento. La idea más utilizada es empezar con pocas neuronas ocultas e ir aumentando o disminuyendo la cantidad según la red converja. Es necesario tener en cuenta que una gran cantidad de neuronas en las capas ocultas conllevan una mayor carga de procesamiento en el caso de una simulación por software.

Respecto a las capas de la red, en general tres capas son suficientes (entrada-oculta-salida), aunque algunas veces, si se tiene gran cantidad de datos, el problema es más fácil de resolver con más de una capa oculta.

## 4. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

### 4.1. ENTRENAMIENTO DE LA RED NEURONAL GENERAL

La red general fue realizada según lo planteado en la Etapa 1, esta red consta de una matriz de entrada de 3x125 que contiene las combinaciones de las tres variables del proceso que se pueden ver en la Tabla 7.1 del Anexo A y una matriz de salida de 120x125 (que resulta de aplicar la grilla 12 valores de altura – 10 de radio) con el perfil de temperatura de cada columna de la matriz de entrada. Antes de entrenar la red es recomendable normalizar las matrices de entrada y salida en un rango entre [-1,1], para esto se usa la función *mapminmax* de Matlab [15].

El entrenamiento se realizó con diferente número de neuronas, capas ocultas y funciones de transferencia, y se usó el menor error absoluto promedio como parámetro de elección de la mejor red. Como se observa en la Tabla 4.1, el aumento o disminución de sólo una neurona causa grandes cambios en el error absoluto promedio, por esto se debe variar el número de éstas hasta obtener el mejor entrenamiento, el método de prueba y error es de gran ayuda en este proceso.

El rendimiento de la red se puede medir en cierta medida por los errores de formación, validación y los de test de prueba, pero es útil, para examinar la respuesta de la red con más detalle, realizar un análisis de comparación entre la respuesta de la red y las salidas (objetivos) correspondientes. Si ocurriera un ajuste perfecto, la respuesta de la red sería exactamente igual a los objetivos.

En la Figura 4.1 se puede observar el error absoluto promedio que se obtiene de esta comparación, para ello se utilizaron las matrices desnormalizadas (es decir, se convirtieron a sus valores originales con la función *postmnmx*). En esta Figura las salidas de la red se presentan como círculos abiertos frente a los objetivos y la línea continua indica el ajuste perfecto. También se puede observar que a valores

Red general				
Número de capas ocultas	Número de neuronas	F. de transferencia capa oculta	F. de transferencia capa de salida	Error absoluto promedio( %)
1	5	Tansig	Purelin	0,94
1	8	Tansig	Purelin	0,136
1	10	Tansig	Purelin	0,148
1	9	Tansig	Purelin	0,253
1	15	Tansig	Purelin	0,245
1	10	Tansig	Tansig	0,966
1	12	Tansig	Tansig	0,176
1	15	Tansig	Tansig	0,633
2	8 – 4	Tansig	Purelin	0,18
2	10 – 5	Tansig	Purelin	0,195
2	20 – 10	Logsig	Purelin	0,23
2	20 – 5	Logsig	Purelin	0,146
2	18 – 5	Logsig	Purelin	1,26

Tabla 4.1: Ensayos para encontrar la mejor red basados en el menor error absoluto promedio.

de temperaturas altas no se logró un buen entrenamiento ya que se presenta una mayor dispersión de los datos y se obtiene un error de temperatura máximo de 51K, es posible que esto tenga solución aumentando el tamaño de la grilla.

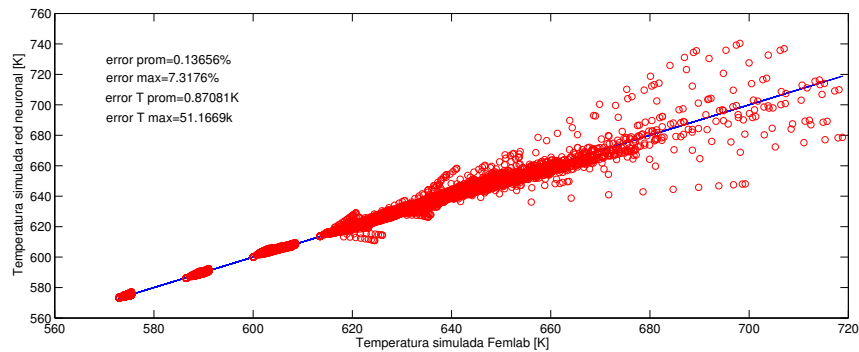


Figura 4.1: Errores de entrenamiento obtenidos para la red general.

Fuente: Autor

Los matriz de pesos  $W$  que contiene los pesos  $W_{ij}$  entre la capa de entrada y

la capa oculta, es la mostrada en la Tabla 4.2, en donde cada columna corresponde a la interacción de una variable de entrada de la red con las neuronas de la capa oculta.

Matriz de pesos entre la capa de entrada y la capa oculta de la red general		
To [K]	C_tot [mol/m <sup>3</sup> ]	U_s [m/s]
4,389	2,531	-0,949
5,017	2,462	0,171
-2,192	0,161	0,937
1,833	0,271	0,064
-2,290	0,508	1,587
-0,541	-0,059	-0,095
-0,428	0,056	0,089
-2,725	-1,849	2,049

Tabla 4.2: Matriz de pesos  $W$  entre la capa de entrada y la capa oculta.

Para ver gráficamente el entrenamiento de la red general se eligió una columna de la matriz de salida de la red neuronal, donde cada columna pertenece al perfil de temperatura del reactor a determinadas condiciones de operación (estas condiciones de operación se observan en el Anexo A). En este caso se eligieron la columna 4 y la columna 115 y se compararon con la simulación de Femlab; como se puede observar en la Figura 4.2 el entrenamiento para la columna 4 fue muy bueno, aunque no se logra predecir el perfil de temperatura correctamente debido a que la posición del punto caliente se desplaza un poco hacia arriba del reactor, debe destacarse que sin embargo las diferencias son mínimas. En la columna 115 no solo se desplaza la posición del punto caliente, además cambia su tamaño y contribuye a aumentar el error en el entrenamiento.

## 4.2. RED NEURONAL PARA LA REACCIÓN SIN PUNTO CALIENTE

Como a deltas de temperatura menores a 10 °C no existe punto caliente, se pone en marcha la etapa 2, entrenando una red neuronal que incluye estos perfiles de

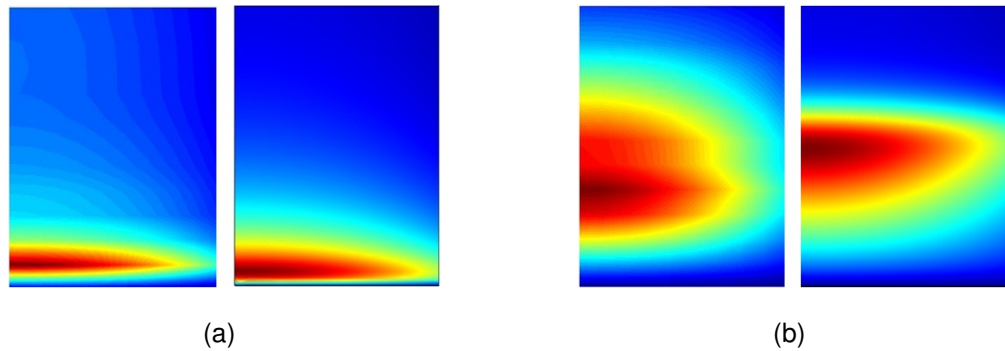


Figura 4.2: Comparación del perfil de temperatura 2D 4.2(a) columna 4 red neuronal y Femlab, 4.2(b) columna 115 red neuronal y Femlab.

Fuente: Autor

temperatura exclusivamente, y se obtienen resultados satisfactorios como se puede observar en la Figura 4.3. El error absoluto promedio obtenido es de 0,0053 % esto indica que la red tubo un adecuado entrenamiento y que al usar los pesos de las neuronas con entradas distintas a las usadas para el entrenamiento de la red también es posible lograr resultados con errores bajos.

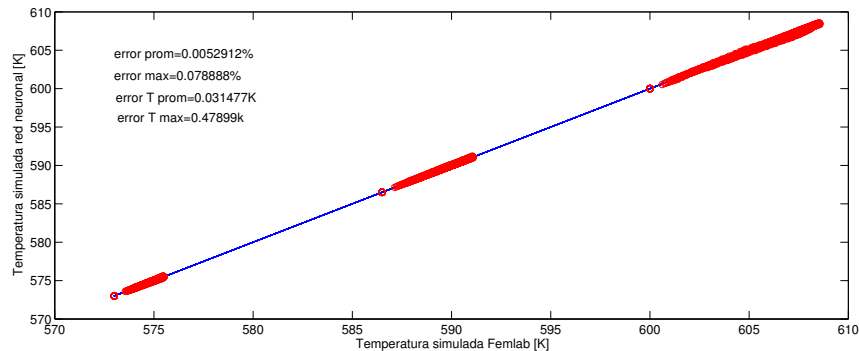


Figura 4.3: Errores de entrenamiento obtenidos para la red sin punto caliente

Fuente: Autor

Las arquitecturas elegidas para todas redes que se presentan, el error de 1184 entrenamiento y el error de simulación con entradas diferentes a las usadas 1185 en el entrenamiento se encuentran en la Tabla 4.3.

### 4.3. RED NEURONAL PARA LA TEMPERATURA MÁXIMA DEL REACTOR

Utilizando la misma matriz de entrada de la red general, se entrena una red que suministra la temperatura máxima del reactor para todas las combinaciones de las tres variables de entrada (Etapa 3), obteniendo los resultados presentados en la Figura 4.4 donde se puede observar que las salidas de la red se ajustan casi perfectamente a los objetivos y que el máximo error de temperatura es de 1,6 K.

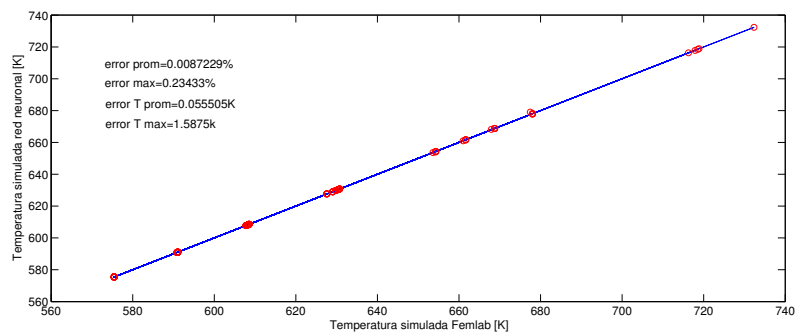


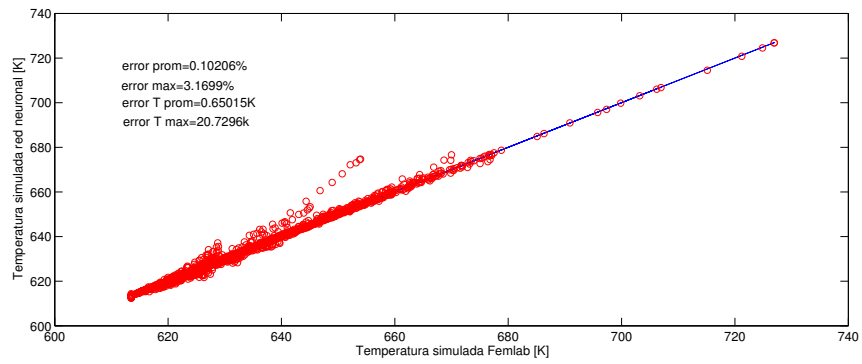
Figura 4.4: Errores de entrenamiento obtenidos para la red de temperatura máxima

Fuente: Autor

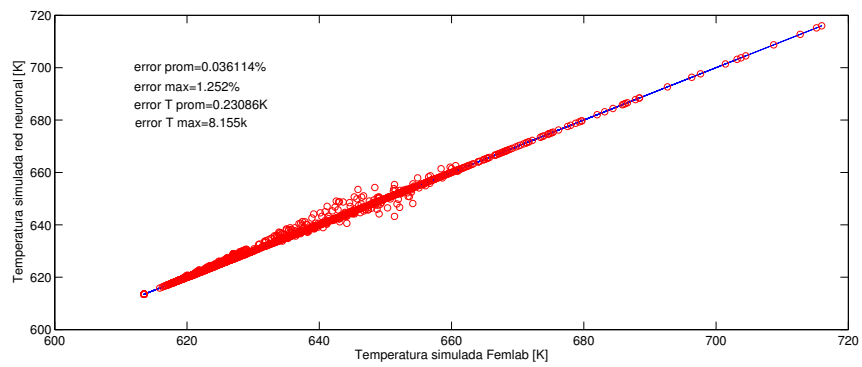
### 4.4. REDES PARA LAS COMBINACIONES DE TAMAÑO Y POSICIÓN

Al realizar la clasificación de los perfiles de temperatura según la posición y el tamaño del punto caliente (Etapa 4), se obtiene un mejor entrenamiento de las redes neuronales como se observa en la Figura 4.5, estas redes se ajustan mucho mejor a los valores de alta temperatura que se encontraban dispersos en la red general y además el tiempo y los errores de simulación disminuyen.

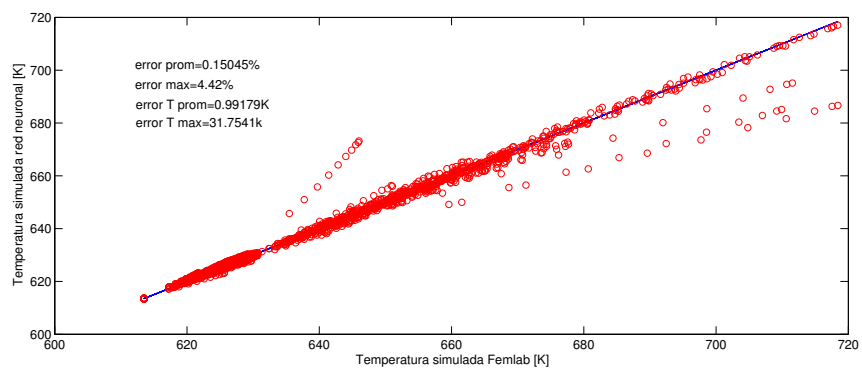
Como se puede observar en la Figura 4.6 las cuatro redes neuronales presentan entrenamientos muy buenos; el perfil de temperatura del reactor obtenido tras el entrenamiento de las redes es muy similar al de Femlab y la posición del punto caliente no presenta grandes variaciones, en cuanto al tamaño de este punto se genera un error en la red para la Combinación 2.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.5: Errores de entrenamiento obtenidos para: 4.5(a) red para la combinación 1, 4.5(b) red para la combinación 2, 4.5(c) red para la combinación 3.

Fuente: Autor

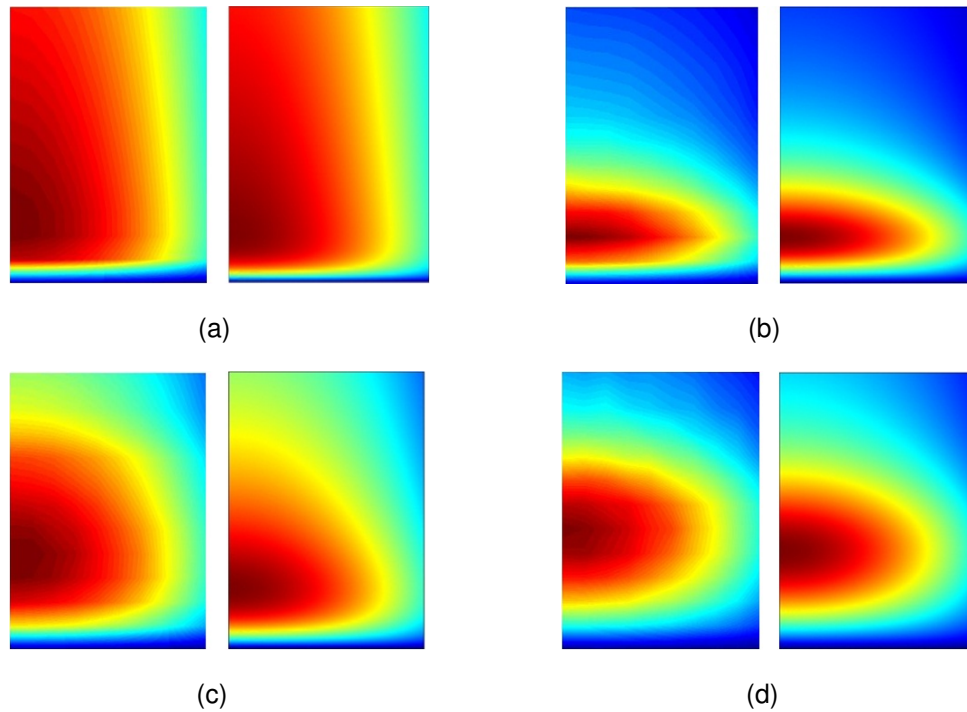


Figura 4.6: Comparación del perfil de temperatura 2D. (Izquierda) red neuronal, (Derecha) simulación en Femlab 4.6(a) Columna 50 - red sin punto caliente, 4.6(b) Columna 5 - red combinación 1, 4.6(c) Columna 5 - red combinación 2, 4.6(d) Columna 5 - red combinación 3.

Fuente: Autor

Red	General	Sin punto caliente	Temperatura máxima	Combinación 1	Combinación 2	Combinación 3
Número de Capas ocultas	1	1	1	1	1	1
Número de neuronas	8	15	15	10	14	5
Función de transferencia capa oculta	Tansig	Tansig	Tansig	Tansig	Tansig	Tansig
Función de transferencia capa de salida	Purelin	Purelin	Purelin	Purelin	Purelin	Purelin
Error promedio entrenamiento (%)	0,136	0,0053	0,0087	0,102	0,036	0,15
Error promedio fase de operación (%)	2,406	3,62	3,66	2,85	1,68	2,44

Tabla 4.3: Estructuras neuronales con el mejor entrenamiento.

## 5. CONCLUSIONES

- Los resultados indican que las redes neuronales artificiales de tipo backpropagation y con entrenamiento Levenberg-Marquardt son útiles para simular el comportamiento de un reactor de lecho fijo para la oxidación de o-xileno, porque se aproximaron mucho a los perfiles de temperatura de la simulación en Femlab.
- De un caso general, donde se simulan todos los perfiles de temperatura del reactor a diferentes condiciones de operación, se pasó a un caso particular separando las redes según posición y tamaño del punto caliente, obteniendo buenos resultados. Esta estrategia de aprendizaje ahorró tiempo de cálculo y generó errores más bajos.
- Con la metodología desarrollada en este trabajo, se logró encontrar las arquitecturas apropiadas para que las redes neuronales artificiales predijeran el perfil de temperatura del reactor en función de la temperatura inicial, la concentración total y la velocidad superficial.
- Una vez la red neuronal fue entrenada satisfactoriamente se comprobó, con entradas distintas a las usadas para el entrenamiento, la capacidad de generalización de la red, obteniendo errores menores a 4 % en todos los casos.

## 6. RECOMENDACIONES

- Trabajar con una grilla de mayor tamaño en la matriz de salida para comprobar si el error absoluto promedio disminuye y las salidas de la red se asemejan más a los objetivos; además tener en cuenta si los resultados obtenidos ameritan el aumento de esta grilla y de la memoria de simulación requerida.

## Referencias

- [1] Ioannis G.Tsoulos, DimitrisGavrilis, EuripidisGlavas. "Solving differential equations with constructed neural networks." *Elsevier*, Diciembre 18 de 2008.
- [2] Yazdan Shirvany, Mohsen Hayati, Rostam Moradian. "Multilayer perceptron neural networks with novel unsupervised training method for numerical solution of the partial differential equations." *Elsevier*, Febrero 13 de 2008.
- [3] Froment, G.F. "Fixed Bed Catalytic Reactors." *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 59, no. 2, pp. 18-27, Jan 1967.
- [4] User guide FEMLAB 3.1. Chemical Engineering Module, "Fixed Bed Catalytic Reactors for Catalytic Hydrocarbon Oxidation".
- [5] J. M. Smith, *Ingeniería de la Cinética Química*. Sexta Edición. McGraw Hill, 1991.
- [6] Froment, G.F. and Bischoff, K. B., *Chemical Reactor Analysis and Design*. Segunda Edición. Jhon Wiley & Sons. New York, 1990.
- [7] Warren L. McCabe, Julian C. Smith. *Operaciones Básicas de Ingeniería Química*. Vol 1. Reverte, 1978.
- [8] Calvet M. Silvia, *Reacciones químicas exotérmicas: factores de riesgo y prevención*. Centro Nacional de Condiciones de Trabajo. [http://www.jmcpri.net/ntps/@datos/ntp\\_527.htm](http://www.jmcpri.net/ntps/@datos/ntp_527.htm). Consultada el 01 de noviembre del 2011.
- [9] T. Kohonen. "An introduction to neural computing". *Neural Networks*, vol. 1, pp. 3-16, 1988.
- [10] José. R. Hilera, Victor J. Martinez. *Redes Neuronales Artificiales. Fundamentos, Modelos y Aplicaciones*. Alfaomega, 2000.

- [11] Maren A. J. Harston C. T. y Pap R. M. *Handbook of Neural Computing Applications*. Academic Press, 1990.
- [12] Thomas E. Quantrille, Y. A. Liu. *Artificial Intelligence in Chemical Engineering*. Academic Press, 1991.
- [13] The MathWorks, Inc. Matlab 7.2.0.232 (R2006a). Marzo 01 de 2006 .
- [14] Maria I. Acosta, Halord Salazar, Camilo Zuluaga, *Tutorial de redes neuronales*. Universidad Tecnológica de Pereira, Facultad de Ingeniería Eléctrica, 2000.
- [15] Comsol AB. Femlab 3.1.0.157, 2004.
- [16] Página de soporte de Mathworks. <http://www.mathworks.com/support/solutions/en/data/1-BBJCDC/index.html?product=NN&solution=1-BBJCDC>, consultada el 20 de noviembre del 2011.
- [17] J.A.Freeman & D.M. Skapura. *Neural Networks. Algorithms, Applications and Programming Techniques*. Addison-Wesley, 1991.

## Bibliografía

Calvet M. Silvia, *Reacciones químicas exotérmicas: factores de riesgo y prevención*. Centro Nacional de Condiciones de Trabajo. [http://www.jmcpri.net/ntps/@datos/ntp\\_527.htm](http://www.jmcpri.net/ntps/@datos/ntp_527.htm). Consultada el 01 de noviembre del 2011.

Comsol AB. Femlab 3.1.0.157, 2004.

Froment, G.F. and Bischoff, K. B., *Chemical Reactor Analysis and Design*. Segunda Edición. Jhon Wiley & Sons. New York, 1990.

Froment, G.F. "Fixed Bed Catalytic Reactors." *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 59, no. 2, pp. 18-27, Jan 1967.

Ioannis G.Tsoulos, DimitrisGavrilis, EuripidisGlavas. "Solving differential equations with constructed neural networks." *Elsevier*, Diciembre 18 de 2008.

J.A.Freeman & D.M. Skapura. *Neural Networks. Algorithms, Applications and Programming Techniques*. Addison-Wesley, 1991.

J. M. Smith, *Ingeniería de la Cinética Química*. Sexta Edición. McGraw Hill, 1991.

José. R. Hilera, Victor J. Martinez. *Redes Neuronales Artificiales. Fundamentos, Modelos y Aplicaciones*. Alfaomega, 2000.

Maren A. J. Harston C. T. y Pap R. M. *Handbook of Neural Computing Applications*. Academic Press, 1990.

Maria I. Acosta, Halord Salazar, Camilo Zuluaga, *Tutorial de redes neuronales*. Universidad Tecnológica de Pereira, Facultad de Ingeniería Eléctrica, 2000.

Página de soporte de Mathworks. <http://www.mathworks.com/support-/solutions/en/data/1-BBJCDC/index.html?product=NN&solution=1-BBJCDC>, consultada el 20 de noviembre del 2011.

The MathWorks, Inc. Matlab 7.2.0.232 (R2006a). Marzo 01 de 2006.

Thomas E. Quantrille, Y. A. Liu. *Artificial Intelligence in Chemical Engineering*. Academic Press, 1991.

T. Kohonen. "An introduction to neural computing". *Neural Networks*, vol. 1, pp. 3-16, 1988.

User guide FEMLAB 3.1. Chemical Engineering Module, "Fixed Bed Catalytic Reactors for Catalytic Hydrocarbon Oxidation".

Warren L. McCabe, Julian C. Smith. *Operaciones Básicas de Ingeniería Química*. Vol 1. Reverte, 1978.

Yazdan Shirvany, Mohsen Hayati, Rostam Moradian. "Multilayer perceptron neural networks with novel unsupervised training method for numerical solution of the partial differential equations." *Elsevier*, Febrero 13 de 2008.

## 7. ANEXO A. MATRIZ DE ENTRADA CON LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA LAS REDES NEURONALES

Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]	Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]
1	573	18	0,4	42	586,5	31,5	2,05
2	586,5	18	0,4	43	600	31,5	2,05
3	600	18	0,4	44	613,5	31,5	2,05
4	613,5	18	0,4	45	627	31,5	2,05
5	627	18	0,4	46	573	31,5	2,6
6	573	18	0,95	47	586,5	31,5	2,6
7	586,5	18	0,95	48	600	31,5	2,6
8	600	18	0,95	49	613,5	31,5	2,6
9	613,5	18	0,95	50	627	31,5	2,6
10	627	18	0,95	51	573	45	0,4
11	573	18	1,5	52	586,5	45	0,4
12	586,5	18	1,5	53	600	45	0,4
13	600	18	1,5	54	613,5	45	0,4
14	613,5	18	1,5	55	627	45	0,4
15	627	18	1,5	56	573	45	0,95
16	573	18	2,05	57	586,5	45	0,95
17	586,5	18	2,05	58	600	45	0,95
18	600	18	2,05	59	613,5	45	0,95
19	613,5	18	2,05	60	627	45	0,95
20	627	18	2,05	61	573	45	1,5
21	573	18	2,6	62	586,5	45	1,5
22	586,5	18	2,6	63	600	45	1,5
23	600	18	2,6	64	613,5	45	1,5
24	613,5	18	2,6	65	627	45	1,5
25	627	18	2,6	66	573	45	2,05
26	573	31,5	0,4	67	586,5	45	2,05
27	586,5	31,5	0,4	68	600	45	2,05
28	600	31,5	0,4	69	613,5	45	2,05
29	613,5	31,5	0,4	70	627	45	2,05
30	627	31,5	0,4	71	573	45	2,6
31	573	31,5	0,95	72	586,5	45	2,6
32	586,5	31,5	0,95	73	600	45	2,6
33	600	31,5	0,95	74	613,5	45	2,6
34	613,5	31,5	0,95	75	627	45	2,6
35	627	31,5	0,95	76	573	58,5	0,4
36	573	31,5	1,5	77	586,5	58,5	0,4
37	586,5	31,5	1,5	78	600	58,5	0,4
38	600	31,5	1,5	79	613,5	58,5	0,4
39	613,5	31,5	1,5	80	627	58,5	0,4
40	627	31,5	1,5	81	573	58,5	0,95
41	573	31,5	2,05	82	586,5	58,5	0,95

Tabla 7.1: Entrada red general y red temperatura maxima

Continuación de la Tabla 7.1

Columna	To[K]	C.tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U.s[m/s]
83	600	58,5	0,95
84	613,5	58,5	0,95
85	627	58,5	0,95
86	573	58,5	1,5
87	586,5	58,5	1,5
88	600	58,5	1,5
89	613,5	58,5	1,5
90	627	58,5	1,5
91	573	58,5	2,05
92	586,5	58,5	2,05
93	600	58,5	2,05
94	613,5	58,5	2,05
95	627	58,5	2,05
96	573	58,5	2,6
97	586,5	58,5	2,6
98	600	58,5	2,6
99	613,5	58,5	2,6
100	627	58,5	2,6
101	573	72	0,4
102	586,5	72	0,4
103	600	72	0,4
104	613,5	72	0,4
105	627	72	0,4
106	573	72	0,95
107	586,5	72	0,95
108	600	72	0,95
109	613,5	72	0,95
110	627	72	0,95
111	573	72	1,5
112	586,5	72	1,5
113	600	72	1,5
114	613,5	72	1,5
115	627	72	1,5
116	573	72	2,05
117	586,5	72	2,05
118	600	72	2,05
119	613,5	72	2,05
120	627	72	2,05
121	573	72	2,6
122	586,5	72	2,6
123	600	72	2,6
124	613,5	72	2,6
125	627	72	2,6

Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]
1	573	18	0,4
2	586,5	18	0,4
3	600	18	0,4
4	573	18	0,95
5	586,5	18	0,95
6	600	18	0,95
7	573	18	1,5
8	586,5	18	1,5
9	600	18	1,5
10	573	18	2,05
11	586,5	18	2,05
12	600	18	2,05
13	573	18	2,6
14	586,5	18	2,6
15	600	18	2,6
16	573	31,5	0,4
17	586,5	31,5	0,4
18	600	31,5	0,4
19	573	31,5	0,95
20	586,5	31,5	0,95
21	600	31,5	0,95
22	573	31,5	1,05
23	586,5	31,5	1,05
24	600	31,5	1,5
25	573	31,5	2,05
26	586,5	31,5	2,05
27	600	31,5	2,05
28	573	31,5	2,6
29	586,5	31,5	2,6
30	600	31,5	2,6
31	573	45	0,4
32	586,5	45	0,4
33	600	45	0,4
34	573	45	0,95
35	586,5	45	0,95
36	600	45	0,95
37	573	45	1,5
38	586,5	45	1,5
39	600	45	1,5
40	573	45	2,05
41	586,5	45	2,05

Tabla 7.2: Entradas para la red sin punto caliente

Continuación de la Tabla 7.2

Columna	To[K]	C.tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U.s[m/s]
42	600	45	2,05
43	573	45	2,6
44	586,5	45	2,6
45	600	45	2,6
46	573	58,5	0,4
47	586,5	58,5	0,4
48	600	58,5	0,4
49	573	58,5	0,95
50	586,5	58,5	0,95
51	600	58,5	0,95
52	573	58,5	1,5
53	586,5	58,5	1,5
54	600	58,5	1,5
55	573	58,5	2,05
56	586,5	58,5	2,05
57	600	58,5	2,05
58	573	58,5	2,6
59	586,5	58,5	2,6
60	600	58,5	2,6
61	573	72	0,4
62	586,5	72	0,4
63	600	72	0,4
64	573	72	0,95
65	586,5	72	0,95
66	600	72	0,95
67	573	72	1,5
68	586,5	72	1,5
69	600	72	1,5
70	573	72	2,05
71	586,5	72	2,05
72	600	72	2,05
73	573	72	2,6
74	586,5	72	2,6
75	600	72	2,6

Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]
1	613,5	18	0,4
2	627	18	0,4
3	613,5	18	0,95
4	627	18	0,95
5	627	18	1,5
6	613,5	31,5	0,4
7	627	31,5	0,4
8	613,5	31,5	0,95
9	627	31,5	0,95
10	613,5	45	0,4
11	627	45	0,4
12	627	45	0,95
13	613,5	58,5	0,4
14	627	58,5	0,4
15	627	58,5	0,95
16	613,5	72	0,4
17	627	72	0,4

Tabla 7.3: Entrada para la red combinación 1

Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]
1	613,5	18	1,5
2	613,5	18	2,05
3	627	18	2,05
4	627	18	2,06
5	613,5	31,5	1,5
6	627	31,5	1,5
7	613,5	31,5	2,05
8	627	31,5	2,05
9	613,5	45	0,95
10	613,5	45	1,5
11	627	45	1,5
12	613,5	58,5	0,95
13	613,5	58,5	1,5
14	627	58,5	1,5
15	613,5	72	0,95
16	627	72	0,95

Tabla 7.4: Entrada para la red combinación 2

Columna	To[K]	C_tot[mol/m <sup>3</sup> ]	U_s[m/s]
1	613,5	18	2,6
2	613,5	31,5	2,6
3	627	31,5	2,6
4	613,5	45	2,05
5	627	45	2,05
6	613,5	45	2,6
7	627	45	2,6
8	613,5	58,5	2,05
9	627	58,5	2,05
10	613,5	58,5	2,6
11	627	58,5	2,6
12	613,5	72	1,5
13	627	72	1,5
14	613,5	72	2,05
15	627	72	2,05
16	613,5	72	2,6
17	627	72	2,6

Tabla 7.5: Entrada para la red combinación 3