

# 53

Fecha de presentación: septiembre, 2021

Fecha de aceptación: octubre, 2021

Fecha de publicación: noviembre, 2021

## REDES NEURONALES ARTIFICIALES

PARA ESTIMAR PROPIEDADES FÍSICAS, TERMODINÁMICAS Y DE EQUILIBRIO DE MEZCLAS ETANOL-AGUA

### ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO ESTIMATE PHYSICAL, THERMODYNAMIC AND EQUILIBRIUM PROPERTIES OF ETHANOL-WATER MIXTURES

Julio César Gutiérrez Labrador<sup>1</sup>

E-mail: [raseg880202@gmail.com](mailto:raseg880202@gmail.com)

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0551-8098>

Osney Pérez Ones<sup>1</sup>

E-mail: [osney@quimica.cujae.edu.cu](mailto:osney@quimica.cujae.edu.cu)

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0366-0317>

Lourdes Zumalacárregui de Cárdenas<sup>1</sup>

E-mail: [lourdes@quimica.cujae.edu.cu](mailto:lourdes@quimica.cujae.edu.cu)

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6921-737X>

<sup>1</sup> Universidad Tecnológica de La Habana "José Antonio Echevarría" Cuba.

#### Cita sugerida (APA, séptima edición)

Gutiérrez Labrador, J. C., Pérez Ones, O., & Zumalacárregui de Cárdenas, L. (2021). Redes neuronales artificiales para estimar propiedades físicas, termodinámicas y de equilibrio de mezclas etanol-agua. *Revista Universidad y Sociedad*, 13(6), 514-525.

#### RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar redes neuronales para la predicción de propiedades físicas, termodinámicas y de equilibrio de la mezcla etanol-agua, a partir de la recopilación de datos existentes en la literatura. Se realiza la limpieza de la base de datos y su transformación aplicando el criterio de los máximos. Se utiliza como tipo de red la perceptrón multicapas con tres capas y para el entrenamiento se usa la retroalimentación hacia atrás, con funciones de activación sigmoidea e hiperbólica. El error cuadrático medio (ECM), el coeficiente de regresión (R), así como el error relativo promedio (ERP) y la prueba de Friedman, son los criterios empleados para determinar la mejor red. La importancia relativa de las variables independientes en la predicción se determina mediante el empleo del método de los pesos. Se diseña una interfaz de usuario personalizada, que unifica las redes neuronales seleccionadas.

**Palabras clave:** Redes neuronales artificiales, propiedades físicas, propiedades termodinámicas, propiedades de equilibrio, interfaz de usuario.

#### ABSTRACT

The purpose of this work is to development neural networks for the prediction of physical, thermodynamic and equilibrium properties of the ethanol-water mixture, based on the compilation of existing data in the literature consulted. The database is cleaned and processed using the criterion of the maximum heat of each variable. The multi-layered perceptron with three layers and the backward feedback for the training are used as a network type, with functions of sigmoidal and hyperbolic activation. The mean squared error (MSE), the regression coefficient (R), the mean relative error (MRE) and the Friedman test, are the criteria used to determine the most appropriate network. The relative importance of the independent variables in the prediction is determined by the use of the weights' method. A customized user interface is designed, which unifies the selected neural networks.

**Keywords:** Artificial neural networks, physical properties, thermodynamics properties, equilibrium properties, user interface.

## INTRODUCCIÓN

En los procesos de producción de etanol se hace necesario cuantificar las cualidades del etanol producido. Este análisis demanda procedimientos de laboratorio que imponen un tiempo entre recolecta de la muestra y la obtención de los resultados. Este tiempo afecta la velocidad de reacción del sistema de control de producción y, consecuentemente, influye en la variación de la calidad del etanol (Teixeira, 2014). De aquí la necesidad de determinar las propiedades en el menor tiempo posible, hecho que ha llevado a que en la actualidad se empleen modelos de simulación para predecirlas.

Una de las razones fundamentales por la que los simuladores de procesos son exitosos, es su habilidad para modelar con precisión el comportamiento termodinámico de las mezclas de fluidos con muy poca información de entrada por parte del usuario. La mayoría de los simuladores tienen una gran base de datos de componentes y una amplia variedad de modelos termodinámicos y correlaciones estadísticas que se incluyen en el paquete de propiedades físicas disponibles (Pérez, et al., 2010a).

Dado que la información relacionada con la estimación de propiedades de mezclas etanol-agua se encuentra dispersa en la literatura, que en todos los casos no se brinda la calidad del ajuste ni el error de estimación de las propiedades calculadas (Pérez, et al., 2010b) por medio de los modelos matemáticos convencionales, y que la relación entre las propiedades físicas y termodinámicas es altamente no lineal, es que se inicia en la actualidad el empleo de las redes neuronales artificiales (RNA), pues logran ser una alternativa adecuada para modelar y desarrollar una relación no lineal entre la entrada y los parámetros de salida.

Las RNA han demostrado ser muy exitosas para proporcionar una extracción de datos de manera precisa e interesante. Se ha encontrado una amplia aplicación en el campo de la termodinámica como la estimación de la viscosidad, la densidad, presión de vapor, factor de compresibilidad y equilibrio líquido-vapor, entre otras propiedades (Karunanithi, et al., 2014).

Existen modelos basados en algunos resultados experimentales que están pensados para predecir los datos requeridos y evitar más experimentos. Estos modelos proveen una conexión entre las variables de entrada y de salida con baja complejidad dentro del sistema. La habilidad para aprender el comportamiento de los datos generados por un sistema certifica la versatilidad de las redes neuronales (Moghadassi, et al., 2009).

Las ventajas de las RNA para la estimación de propiedades termodinámicas están dadas por modelar un proceso sin requerir suposiciones acerca de la naturaleza del mecanismo fenomenológico, aprender de las relaciones lineales y no lineales entre las variables de un grupo de ejemplos y tener alta capacidad de modelar simultáneamente múltiples salidas y una aplicación razonable del modelo para un conjunto de datos escasos (Andrade, et al., 2016).

El tipo de RNA más empleado en la predicción de propiedades es el Perceptron multicapas, el método de preferencia en el entrenamiento ha sido el "back propagation" o retroalimentación hacia atrás, usando como funciones de activación las sigmoidea e hiperbólica. El programa utilizado en la mayoría de las predicciones para el diseño, validación y empleo de las RNAs ha sido el MatLab, pues consta con una amplia opción de tipos de RNAs y métodos de entrenamiento.

En el presente trabajo, se estableció como objetivo general estimar datos de propiedades físicas tales como densidad, viscosidad dinámica y cinemática, conductividad térmica, así como datos de equilibrio como presión y fracción másica del etanol en la fase vapor a partir de valores de temperatura y fracción másica del etanol en fase líquida. Las redes se diseñaron en MatLab 2017 empleando como criterios de selección el error cuadrático medio (ECM), el coeficiente de regresión (R), así como el error relativo promedio (ERP). Se determinó la influencia de las variables independientes en la predicción de las propiedades con la RNA y se diseñó una interfaz de usuario personalizada, que unifica las dos redes neuronales antes mencionadas, la cual facilita el trabajo de predicción a partir un mismo valor de temperatura y de fracción másica de etanol en la fase líquida.

## MATERIALES Y MÉTODOS

La base de datos empleada para la realización de este trabajo se obtuvo de valores reportados en la literatura (Stabnikov, 1976; Zumalacárregu, et al., 2018). Teniendo en cuenta que es una fase crítica dentro de la minería de datos, se realizó una transformación y limpieza de los datos para conformar el conjunto a utilizar para la modelación.

Se preparó la información que será procesada por la RNA y se redujo la cantidad de información redundante. Una buena selección puede mejorar la calidad del modelo obtenido, ya que se centra solamente en las características relevantes. Permite expresar el modelo resultante en función del menor número de variables posibles. Se agruparon los datos en dos libros Excel; el primero contiene los

datos de las propiedades físicas y el segundo los datos referentes al equilibrio líquido-vapor.

En el caso del Libro de Excel que contiene los datos referentes a las propiedades físicas se escogió un intervalo de temperatura que abarca valores desde 0 °C a 70 °C, mientras que para la fracción másica del etanol en la fase líquida el intervalo seleccionado abarca valores de 0 % a 100 %. En cambio, para el Libro de Excel que contiene los datos referentes al equilibrio de fases se tomó un intervalo de temperatura que abarca desde 20 °C hasta 197,40 °C y se mantuvo el mismo intervalo de valores de fracción másica del etanol en la fase líquida seleccionado para el primer libro. Esta selección responde a la recopilación de datos realizada durante el estudio de la literatura.

Para trabajar con las redes neuronales fue necesario aplicar a los datos el proceso de normalización dependiendo de la salida de los resultados que se desea obtener. Uno de los métodos más utilizados para normalizar datos es el máximo (MAX) (ecuación 1) y es el que se usó en el presente trabajo. Los datos que se quieren normalizar se encuentran dentro del vector Datos (i), con  $i = 1 \dots n$ . El procedimiento a seguir es el siguiente (Quintana, 2015):

- a) Se busca el máximo del vector
- b) Se normalizan los datos según la relación:

$$DATOS_{norm(i)} = \frac{DATOS(i)}{MAX} \quad (1)$$

Todos los valores se normalizaron a partir de determinar los máximos de cada variable y empleando la ecuación 1, se obtuvieron dos tablas cuyos valores estaban en un intervalo de 0 a 1.

### MatLab – Redes neuronales artificiales

MatLab presenta una caja de herramientas denominada “Neural Network Toolbox”, paquete que contiene una serie de funciones para crear y trabajar con redes neuronales artificiales. Así pues, proporciona las herramientas para el diseño, la puesta en práctica, la visualización, y la simulación de redes neuronales.

Se decidió desarrollar dos redes del tipo “Perceptron multicapas” constituidas por tres capas de neuronas. La primera capa está formada por dos neuronas correspondientes a las variables independientes. La segunda, constituye la capa oculta y contiene inicialmente, para ambas redes diseñadas la misma cantidad de neuronas que de variables a predecir por la red. La última capa está formada, en el caso de la red empleada en la predicción de las propiedades físicas por cuatro neuronas mientras que la

red que se diseñó para la predicción de las propiedades de equilibrio contiene dos neuronas en esta capa.

Se evaluó el comportamiento de ambas redes neuronales variando el número de neuronas de la capa oculta hasta 20. Este incremento se realizó hasta obtener parámetros que ratifiquen la calidad de predicción de la red en desarrollo. Como criterio de selección de la mejor red o topología se empleó el error cuadrático medio (ECM) y el coeficiente de correlación (R) y como criterios complementarios se empleó la prueba de Friedman, la prueba de Wilcoxon y el error relativo promedio (ERP) de estimación; se tuvo en cuenta también la información que brinda la gráfica de desempeño de entrenamiento “plotperform” de MatLab, dado que, si la curva de prueba aumenta significativamente antes del aumento de la curva de validación, es posible que haya ocurrido un sobreajuste.

Con la prueba de Friedman se comprobó si existían diferencias estadísticamente significativas entre el comportamiento (error cuadrático medio) de las topologías creadas. Si existían diferencias significativas se aplicó la prueba de Wilcoxon (López, et al., 2018), que permite la comparación entre dos topologías para determinar si existen o no diferencias significativas entre los errores cuadráticos medios.

### Contribución de las variables independientes en la predicción

En la literatura existen varios métodos que posibilitan analizar de una forma explicativa los datos internos que se generan durante el desarrollo de una red. Estos métodos posibilitan a su vez determinar la importancia que tiene o no una variable de entrada en la tarea que está realizando la red; es decir la contribución de la variable.

En el caso del presente trabajo se emplea el método de los pesos de conexión para el cálculo de la importancia relativa (IR) (Oña & Garrido, 2014).

1. Para cada neurona de una capa oculta  $h$ , según la ecuación 3 se divide el valor absoluto del peso de la conexión de la neurona de entrada - capa oculta ( $W_{ih}$ ) por el valor absoluto de la suma de los pesos de conexión de las neuronas de entrada - capa oculta.

Para  $h = 1$  a  $n_h$ ,  $i = 1$  a  $n_i$ ,

$$Q_{ih} = \frac{|W_{ih}|}{\sum_{i=1}^{n_i} |W_{ih}|} \quad (2)$$

2. Para cada neurona de la capa de entrada  $i$ , se divide la suma de las  $Q_{ih}$  para cada neurona de la capa oculta por la suma para cada neurona de la capa oculta

por la suma para cada neurona de la capa de entrada de  $Q_{in}$ , multiplicado por 100.

Para  $i = 1$  a  $n_i$

$$IR(\%)_i = \frac{\sum_{h=1}^{n_h} Q_{ih}}{\sum_{h=1}^{n_h} \sum_{i=1}^{n_i} Q_{ih}} * 100 \quad IR(\%)_i = \frac{\sum_{h=1}^{n_h} Q_{ih}}{\sum_{h=1}^{n_h} \sum_{i=1}^{n_i} Q_{ih}} * 100 \quad (3)$$

### RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se diseñaron 17 redes neuronales comenzando por cuatro neuronas en la capa oculta hasta alcanzar las 20 neuronas, manteniendo un incremento de una neurona de un diseño a otro. Teniendo en cuenta que las medias de los ECM de todas las topologías tienen el mismo orden, se aplicó la prueba de Friedman para comprobar si estos valores eran significativamente diferentes, para un 95 % de confianza, concluyéndose que no existían diferencias estadísticamente significativas en el comportamiento de las diferentes topologías de acuerdo con el criterio de ECM pues el valor-P es de  $0,8127 >$  .

Se calculó el ERP para cada topología, tomando como criterio de selección valores de ERP lo más cercano o menores que el 5 %. Se usó la ecuación 4 la cual se programó en un Libro de Excel a partir del empleo de los valores que se obtienen durante la validación de la red (Tabla 1).

$$ERP = \frac{Valoresperado - Valorcalculado}{Valoresperado} * 100$$

$$ERP = \frac{Valoresperado - Valorcalculado}{Valoresperado} * 100 \quad (4)$$

Tabla 1. Criterios de selección.

Topología	ECM	R	ERP (%)
2 - 4 - 4	$2,2703 \times 10^{-3}$	0,9880	8,95
2 - 5 - 4	$1,0908 \times 10^{-3}$	0,9956	8,45
2 - 6 - 4	$6,8966 \times 10^{-3}$	0,9604	4,73
2 - 7 - 4	$5,7748 \times 10^{-4}$	0,9975	9,42
2 - 8 - 4	$1,7969 \times 10^{-3}$	0,9927	8,69
2 - 9 - 4	$1,0607 \times 10^{-3}$	0,9950	11,10
2 - 10 - 4	$1,7662 \times 10^{-4}$	0,9992	5,20
2 - 11 - 4	$2,0927 \times 10^{-4}$	0,9991	3,61
2 - 12 - 4	$1,2080 \times 10^{-4}$	0,9991	3,67
2 - 13 - 4	$8,6810 \times 10^{-5}$	0,9996	2,40
2 - 14 - 4	$1,0773 \times 10^{-3}$	0,9937	5,01
2 - 15 - 4	$1,8308 \times 10^{-3}$	0,9921	12,98
2 - 16 - 4	$4,3233 \times 10^{-4}$	0,9977	3,95
2 - 17 - 4	$1,6915 \times 10^{-3}$	0,9910	5,76
2 - 18 - 4	$3,1555 \times 10^{-3}$	0,9845	8,50
2 - 19 - 4	$4,5550 \times 10^{-3}$	0,9772	13,04
2 - 20 - 4	$3,2849 \times 10^{-3}$	0,9845	11,27

Se seleccionó como mejor red la que presenta una topología 2 - 13 - 4, ya que muestra el menor valor del ECM y de ERP, así como el mayor valor de R con respecto a las otras redes desarrolladas. Además, su gráfico de desempeño, la Figura 1, muestra que la curva de desempeño de la prueba (roja) se mantiene por debajo de la curva de desempeño de la validación (verde), lo que significa que no ha existido posiblemente un sobre entrenamiento de la red.

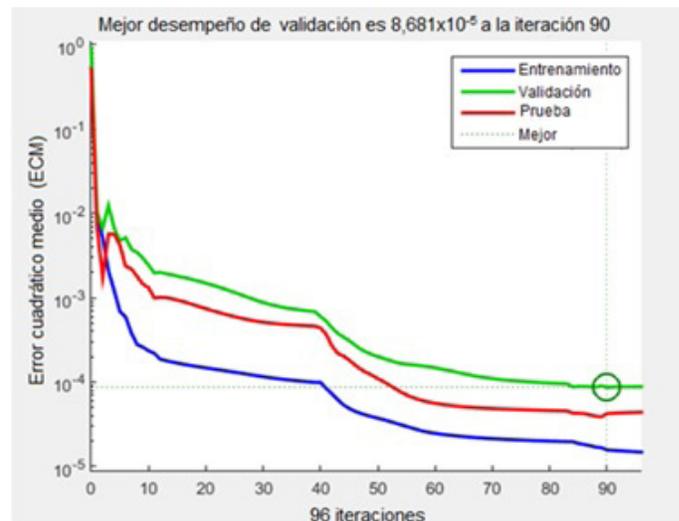


Figura 1. Desempeño de la validación

Se desarrollaron 19 redes neuronales comenzando por dos neuronas en la capa oculta hasta alcanzar las 20 neuronas, manteniendo un incremento de una neurona de un diseño a otro. Después de aplicar la prueba de Friedman se concluyó que no existían diferencias estadísticamente significativas en el comportamiento de las diferentes topologías de acuerdo con el criterio de ECM, pues el valor-P es de  $0,5248 <$  y por tanto se acepta la hipótesis nula.

Se calculó el ERP para cada topología, los resultados obtenidos son los que se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Criterios de selección.

Topología	ECM	R	ERP (%)
2 - 2 - 2	$7,1881 \times 10^{-3}$	0,9617	16,76
2 - 3 - 2	$5,9244 \times 10^{-4}$	0,9975	19,58
2 - 4 - 2	$3,9467 \times 10^{-4}$	0,9981	14,09
2 - 5 - 2	$3,6855 \times 10^{-4}$	0,9983	10,62
2 - 6 - 2	$1,4036 \times 10^{-4}$	0,9992	11,73
2 - 7 - 2	$7,9563 \times 10^{-4}$	0,9963	11,78
2 - 8 - 2	$4,4680 \times 10^{-4}$	0,9978	9,07

2 – 9 – 2	$3,5963 \times 10^{-4}$	0,9980	14,32
2 – 10 – 2	$5,1805 \times 10^{-4}$	0,9980	12,78
2 – 11 – 2	$1,4902 \times 10^{-4}$	0,9993	4,04
2 – 12 – 2	$7,0909 \times 10^{-3}$	0,9686	8,33
2 – 13 – 2	$4,5294 \times 10^{-4}$	0,9978	12,76
2 – 14 – 2	$4,3211 \times 10^{-3}$	0,9807	6,77
2 – 15 – 2	$3,9442 \times 10^{-4}$	0,9980	8,58
2 – 16 – 2	$5,5137 \times 10^{-4}$	0,9971	10,56
2 – 17 – 2	$1,1907 \times 10^{-3}$	0,9947	14,80
2 – 18 – 2	$3,1870 \times 10^{-4}$	0,9986	8,73
2 – 19 – 2	$6,9198 \times 10^{-4}$	0,9677	5,13
2 – 20 – 2	$6,7558 \times 10^{-4}$	0,9966	13,93

Si se realizara un ordenamiento lógico de las redes para cada uno de los parámetros de acuerdo al criterio de selección se podría decir que la red cuya topología es 2 – 11 – 2 es la de mejor trío de valores; ECM es el segundo mejor valor del grupo de redes, R el mayor valor y ERP el menor valor reportado. Pero si se observa la Figura 2 se puede apreciar que posiblemente esta red sufrió un sobre entrenamiento, dado que la curva de desempeño de prueba supera a la curva de desempeño de la validación, por tal motivo se descarta la selección de esta red.

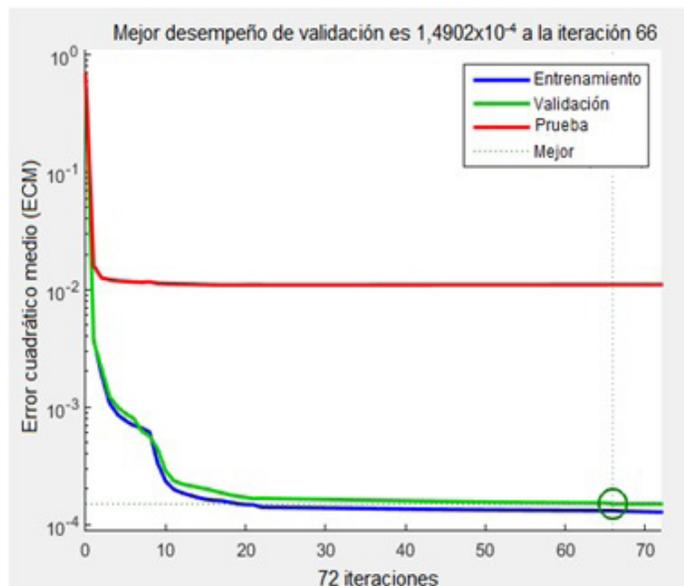


Figura 2. Desempeño de la validación.

FSiguendo el mismo razonamiento se descartan las redes cuyas curvas de desempeño mantienen un comportamiento similar a la anterior. Luego de depurar el grupo de redes desarrollada a partir del criterio anterior se obtiene la Tabla 3.

Tabla 3. Redes que no mostraron un posible sobre entrenamiento

Topología	ECM	R	ERP (%)
2 – 2 – 2	$7,1881 \times 10^{-3}$	0,9617	16,76
2 – 3 – 2	$5,9244 \times 10^{-4}$	0,9975	19,58
2 – 7 – 2	$7,9563 \times 10^{-4}$	0,9963	11,78
2 – 12 – 2	$7,0909 \times 10^{-3}$	0,9686	8,33
2 – 14 – 2	$4,3211 \times 10^{-3}$	0,9807	6,77
2 – 19 – 2	$6,9198 \times 10^{-4}$	0,9677	5,13

En tal sentido se seleccionó la red cuya topología corresponde a 2 – 14 – 2; presenta el cuarto menor valor de ECM, el tercer mayor valor de R, el segundo menor valor de ERP y contiene cinco neuronas menos que la red de mejor valor de ERP, hecho que asegura que no haya ocurrido el sobre entrenamiento de la red, dado que entre más neuronas tenga la capa oculta las probabilidades de sobre entrenarse son mayores; y en la Figura 3 se observa que esta red no sufrió un sobre entrenamiento, dado que la curva de desempeño de prueba no supera a la curva de desempeño de la validación.

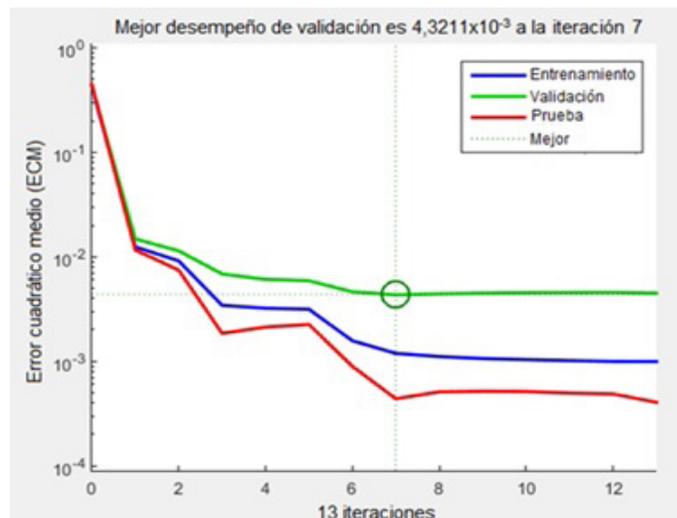


Figura 3. Desempeño de la validación.

En la literatura (Pérez, et al., 2010a; Sánchez, 2011; Acosta, et al., 2016; Lauzurique, et al., 2016; Hernández, 2017) se encontraron modelos estadísticos de estimación de propiedades de la mezcla binaria etanol-agua. El uso de los modelos obtenidos está limitado al intervalo de temperatura y presión para el que se desarrolló cada uno.

En comparación con los 240 modelos mostrados en la Tabla 4 se puede apreciar que el modelo propuesto en

este trabajo presenta una mejor capacidad de generalización, se logra eliminar las limitaciones de los intervalos de presiones y la diversidad de modelos estadísticos a emplear.

Tabla 4. Comparación de los modelos obtenidos con los existentes en la literatura.

Propiedades	Modelo	Cantidad	ERP (%)	R	ECM	Fuente
Físicas	$\rho = f(T;x_1)$	3	0,18	0,9998	-	(Pérez, et al., 2010a)
	$\mu d = f(T;x_1)$	4	3,57	0,9897	-	
	$k = f(T;x_1)$	4	5,70	0,9950	-	
De equilibrio (6,7 a 98,7 kPa)	$y_1 = f(x_1)$	50	0,32	-	-	(Acosta, et al., 2016)
	$y_1 = f(T)$	25	0,98	0,9902	-	
De equilibrio (101,3 kPa)	$y_1 = f(T)$	2	-	-	-	
De equilibrio (203 a 811 kPa)	$y_1 = f(x_1)$	47	0,01	-	-	(Lauzurique, et al., 2016)
	$y_1 = f(T)$	25	0,55	0,9938	-	
De equilibrio (912 a 1520 kPa)	$y_1 = f(x_1)$	57	0,00	-	-	(Sánchez, 2011)
	$y_1 = f(T)$	22	0,80	0,9792	-	
De equilibrio (6,67 a 1519,88 kPa)	$(y_1;x_1) = f(T;P)$	1	-	0,9729	$5,40 \times 10^{-3}$	(Hernández, 2017)
Físicas	$(\rho, \mu d, \mu c, k) = f(T;x_1)$	1	2,40	0,9996	$1,49 \times 10^{-4}$	Este trabajo
De equilibrio (6,67 a 1519,88 kPa)	$(P;y_1) = f(T;x_1)$	1	6,77	0,9807	$4,32 \times 10^{-3}$	

La Tabla 5 muestra los pesos de la conexión ( $W_{ih}$ ) entre las neuronas de la capa de entrada (i) y las neuronas en la capa oculta (h); se obtuvieron ejecutando el comando *net.IW* en el espacio de trabajo de MatLab para cada red seleccionada; el término net hace referencia al nombre de la red.

Tabla 5. Valores de  $W_{ih}$ , (a) RNA 2 – 13 – 4, (b) RNA 2 – 14 – 2

a)		Neuronas en la entrada		b)		Neuronas en la entrada	
		1	2			1	2
Neuronas ocultas	1	-3,5176	5,0402	Neuronas ocultas	1	-3,4179	5,3632
	2	-5,1540	-0,4740		2	4,6128	3,0732
	3	-1,1487	-1,6946		3	-0,4353	-1,9710
	4	5,5243	0,7125		4	5,0219	1,1767
	5	1,7805	0,3740		5	3,5205	-3,8213
	6	3,2625	2,3101		6	2,6892	-4,1435
	7	-0,8228	0,1067		7	-2,9706	1,2089
	8	1,1212	-0,1905		8	-3,6126	-1,1275
	9	1,6955	1,9979		9	-3,7618	1,4404
	10	2,9037	2,2979		10	-0,0408	4,4257
	11	-2,7162	-2,1382		11	-1,7079	-4,1303
	12	-1,6110	-3,0846		12	-4,0752	0,0664
	13	4,4774	1,6311		13	-5,1189	-0,5321
			14		1,1382	-2,5371	

Para ambas redes la columna 1 corresponde a la variable fracción másica del etanol en la fase líquida y la columna 2 a la temperatura.

Empleando las ecuaciones 2 y 3 se obtienen los valores de la importancia relativa de las neuronas de entrada de cada red, las cuales corresponden a las variables independientes. Los valores obtenidos son los que se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Valores de IR (%).

RNA	Neuronas a la entrada	
	1	2
2 – 13 – 4	64,78	35,22
2 – 14 – 2	53,93	46,07

Como se puede apreciar para ambas redes la fracción másica del etanol en la fase líquida (columna 1) tiene mayor importancia que la temperatura (columna 2). Esto demuestra que  $x_1$  hace una mayor contribución a la predicción de las propiedades que la temperatura.

Otra de las bondades de MatLab es su paquete para el diseño, programación y empleo de la interfaz de usuario (Barragán, 2014). Tecleando en el espacio de trabajo de MatLab el comando “*guide*” se logra acceder a esta ventana (Figura 4a), la cual permite crear la interfaz de usuario. Seleccionado la primera opción, se accede a otra ventana que permite diseñar el espacio de la interfaz.

Empleando la paleta de opciones que se presenta en el lado izquierdo (Figura 4b), se puede introducir en el espacio de trabajo botones de comando (“*pushbotton*”), cuadro de texto (“*text*”) para la creación de las etiquetas, cuadros de edición (“*edit*”) con los que se introducen los valores y por los que se visualiza el resultado, y un fondo de interfaz (“*background*”). Teniendo en cuenta las variables independientes y las predichas seleccionadas se diseñó la interfaz.

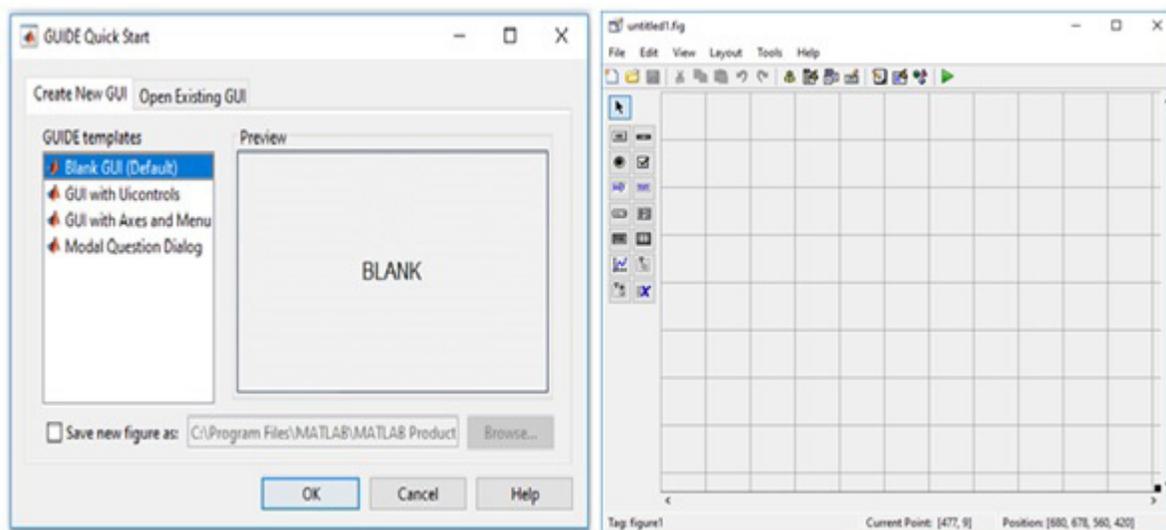


Figura 4. a) Interfaz GUIDE, b) Área de trabajo para el diseño de la interfaz.

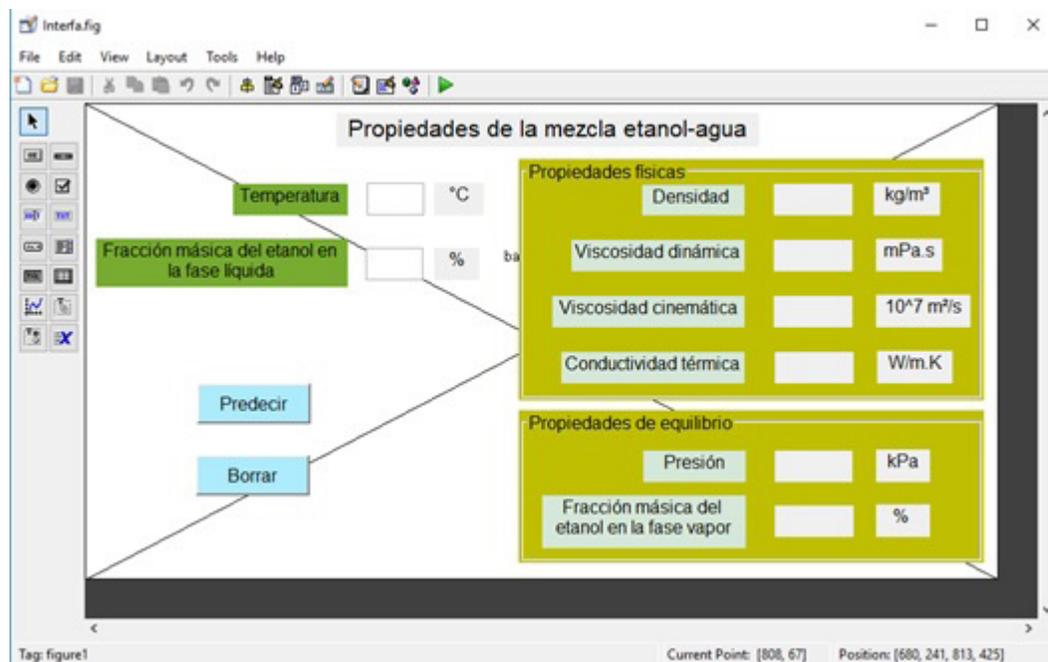


Figura 5. Imagen preliminar de la interfaz personalizada.

Automáticamente al crear la interfaz MatLab realiza una salva identificando dos archivos: “*interfa.fig*” y el otro es “*interfa.m*”, de acuerdo a los nombres asignados por el usuario y los almacena en la dirección señalada por este. La diferencia entre estos archivos está dada por la extensión que le asigna el programa.

La extensión **.m** corresponde a un archivo de tipo función, característica de MatLab. Este archivo se construye automáticamente por MatLab y las líneas de código son las que crean la interfaz que aparece en el archivo *interfa.fig*. El archivo de inicialización define los parámetros básicos de la interfaz y crea un conjunto de “*handles*” para cada uno de los objetos que vayan apareciendo sobre la interfaz.

Accionando sobre cualquier objeto dentro del espacio de trabajo de la interfaz, Figura 5, y seleccionando la opción “*View Callbacks*” y posteriormente “*Callbacks*” se accede al espacio de trabajo de MatLab que posibilita la programación de cada uno de los objetos introducidos en el diseño gráfico de la interfaz.

» Comando “Predecir”

Como bien indica el nombre del botón, su objetivo es predecir las propiedades de la mezcla etanol-agua mediante el empleo de las dos redes seleccionadas.

El primer paso es la creación de las variables independientes, Figura 6. El término **get** se emplea para captar el texto que se escribe en los cuadros de edición, texto que se define por el uso de la palabra **string**; debido a que el programa no puede realizar operaciones aritméticas con texto se convierte la información en números dobles mediante la orden **str2double**.

```
% --- Executes on button press in pushbutton1.
function pushbutton1_Callback(hObject, eventdata, handles)
    liquido = str2double(get(handles.edit3,'String'));
    temperatura = str2double(get(handles.edit1,'String'));
    %[f,p] = uigetfile({'*.m;*.mat'},'Escoger archivo');
    load 'RNA13.mat'
    load 'RNA14.mat'
```

### Figura 6. Creación de las variables independientes.

Seguidamente se programa la orden para que la interfaz cargue las redes seleccionadas, las cuales deben estar ubicadas dentro de la misma carpeta de la interfaz. La orden de cargar de las redes se realiza mediante el empleo del comando *load*.

La programación para predecir las propiedades físicas, Figura 7, se inicia con una condición empleando el comando "if"; se establecieron los límites para los cuales esta condición es efectiva. En este caso corresponden a los valores máximo y mínimos de la temperatura del sistema. Se declara la conformación de una matriz con el comando  $A = \text{sim}$ , el cual además establece la acción de llamar a la red que se especifica. Debido a que la red trabaja con datos normalizados entre valores de 0 y 1 se programa dentro de este comando la transformación de los datos que se introducen en los cuadros de edición de cada variable independiente hacia valores normalizados, *liquido/100* y *temperatura/70*.

El resultado obtenido es una matriz de una fila y cuatro columnas. A continuación, se declaran las variables predichas y las posiciones que tendrán cada una dentro de la matriz, así como la transformación de los valores obtenidos normalizados hacia valores no normalizados:  $\text{densidad} = A(1) * 100$ ,  $\text{viscosidadDin} = A(2) * 7,15$ , respectivamente. Los resultados se muestran en los respectivos cuadros de texto mediante el empleo del comando *set* y especificando la ubicación de cada uno: *set(handles.text20, 'String', densidad)*.

```
if (70 >= temperatura) && (temperatura >= 0)
    A = sim (RNA13, [liquido/100;temperatura/70]);
    densidad = A(1)*1000;
    viscosidadDin = A(2)*7.15;
    viscosidadCin = A(3)*75.3;
    conductividadTer = A(4)*0.66;
    set(handles.text20, 'String', densidad);
    set(handles.text21, 'String', viscosidadDin);
    set(handles.text23, 'String', viscosidadCin);
    set(handles.text22, 'String', conductividadTer);
else errordlg('Error, temperatura fuera del intervalo requerido para la prediccion de los datos fisicos');
end
```

Figura 7. Codificación de la predicción de las propiedades físicas.

Se programó la acción a seguir por la interfaz en el caso que no se cumpla la condición establecida. Por ejemplo, en el caso que la temperatura no se encuentre entre el intervalo señalado, tanto para las propiedades físicas como para las propiedades de equilibrio, la interfaz muestra un cuadro de error con un aviso; esto se logra mediante el empleo del comando: *errordlg*. Al no existir otra limitación se cierra la condición mediante el comando *end*.

Para predecir propiedades de equilibrio, se realizó la misma operación explicada para la predicción de propiedades físicas. Se emplearon los mismos comandos descritos anteriormente, se especificaron los límites de la temperatura para esta red y se especificaron las variables predichas, Figura 8.

```
if (197.40 >= temperatura) && (temperatura >= 21.55)
    B = sim (RNA14, [liquido/100;temperatura/197.40]);
    presion = B(1)*1519.88;
    vapor = B(2)*100;
    set(handles.text24, 'String', presion);
    set(handles.text25, 'String', vapor);
else errordlg('Error, temperatura fuera del intervalo requerido para la prediccion de los datos de equilibrio');
end
```

Figura 8. Codificación de las propiedades de equilibrio.

#### » Comando "Borrar"

El objetivo de este comando es el de borrar los textos que se introducen en los cuadros de edición y en los cuadros de texto. Esta operación se logra primeramente declarando la acción de limpieza mediante la variable *ini* y el comando *char* ( ` ` ), seguidamente se especifican los objetos dentro de la interfaz que serán modificados con este comando (Figura 9).

```

% --- Executes on button press in pushbutton2.
function pushbutton2_Callback(hObject, eventdata, handles)
ini = char(' ');
set(handles.text20, 'String', ini);
    set(handles.text21, 'String', ini);
    set(handles.text23, 'String', ini);
    set(handles.text22, 'String', ini);
    set(handles.text24, 'String', ini);
    set(handles.text25, 'String', ini);
    set(handles.edit1, 'String', ini);
    set(handles.edit3, 'String', ini);
% hObject    handle to pushbutton2 (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)

```

Figura 9. Codificación del comando “Borrar”.

» Tapiz de la interfaz

Con vista a personalizar la interfaz se programó un comando que facilita cargar y mostrar una imagen de fondo, un tapiz, en la interfaz. Esto se logra primeramente nombrando el fondo y programando la acción de cargar el fondo que se quiere mostrar. Para esto se ubicó en la carpeta del programa la imagen a mostrar y posteriormente en el archivo tipo **.m** en la sección correspondiente al fondo de la interfaz se declaró el fondo como **background** y se estableció mediante el comando **imread** la orden de cargar la imagen especificando el nombre de la misma.

Para mostrar dicho fondo se introdujo en la interfaz un objeto gráfico; mediante el comando **axes** se estableció que el fondo se mostrara en este objeto. Con el comando **imagesc** fue posible el cambio de escala y hacer visible la imagen. Con el empleo de la orden **axes** se logró que la imagen seleccionada se muestre a todo lo largo y ancho de la interfaz (Figura 10).

```

% --- Executes just before Interfa is made visible.
function Interfa_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)

background = imread('Destileria.jpg');
axes(handles.background);

imagesc(background)
%colormap(map)
axis off
%hold on
%imshow(background);
% This function has no output args, see OutputFcn.
% hObject    handle to figure
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
% varargin   command line arguments to Interfa (see VARARGIN)
% Choose default command line output for Interfa
handles.output = hObject;
% Update handles structure
guidata(hObject, handles);

```

Figura 10. Programación del fondo de la interfaz.

En la Figura 11 se puede observar cómo quedó diseñada la interfaz, la cual se encuentra lista para su empleo.

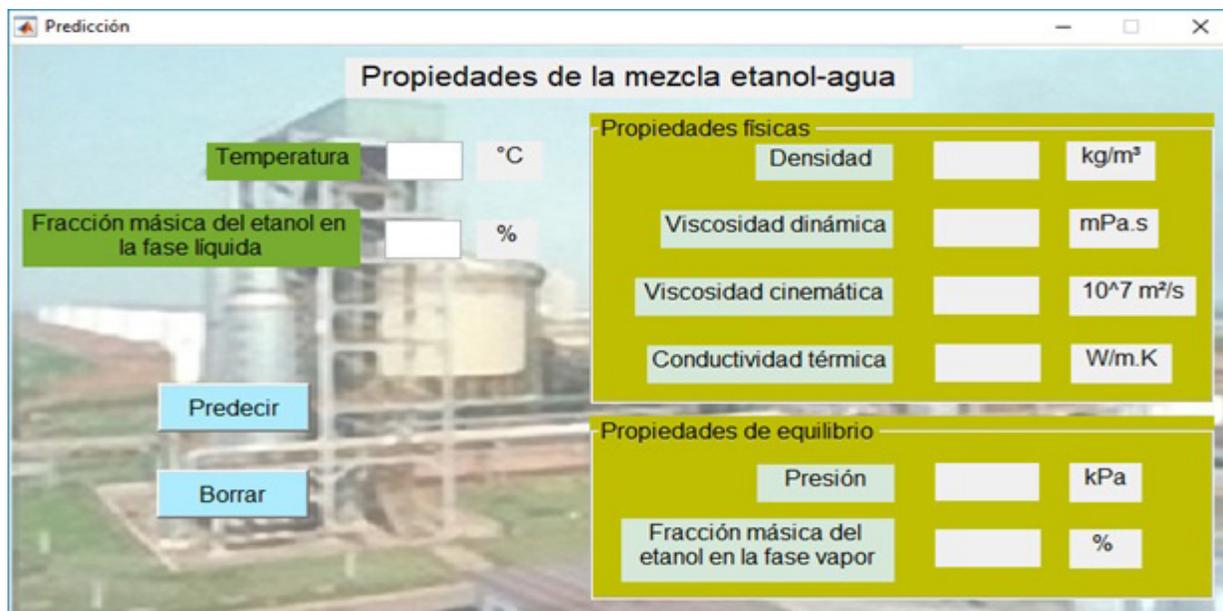


Figura 11. Imagen de la interfaz finalizada.

## CONCLUSIONES

Se desarrollaron 36 redes neuronales; divididas en dos grupos, 17 destinadas a la predicción de las propiedades físicas y 19 a las de equilibrio.

Se seleccionaron las dos mejores redes neuronales para cada caso. La red neuronal para la predicción de las propiedades físicas fue la de topología 2-13-4 con ECM, R y ERP ( $8,6810 \times 10^{-5}$ ; 0,9996 y 2,40 % respectivamente). Para el caso de la red que predice las propiedades de equilibrio se seleccionó la de topología 2-14-2 con ECM, R y ERP ( $4,3211 \times 10^{-3}$ ; 0,9807 y 6,77 % respectivamente).

La fracción másica de etanol en la fase líquida tiene una mayor contribución a la predicción de las propiedades que la temperatura.

Se diseñó una interfaz de usuario personalizada, que unifica las dos redes neuronales antes mencionadas, que facilita el trabajo de predicción para un mismo valor de temperatura y de fracción másica de etanol en la fase líquida.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Acosta, L., Pérez, O., & Zumalacárregui, L. (2016). Modelos de propiedades de equilibrio del sistema etanol-agua. Parte 2. Presiones subatmosféricas. *Ambiens Techné et Scientia México*, 4(1), 24-37.
- Andrade, R. S, Magalhaes, R., & Iglesias, M. (2016). Artificial neural network model to predict thermodynamic properties of low molar mass protic ionic liquid. *World Wide Journal of Multidisciplinary Research and Development*, 2(2), 1-6.
- Barragán, D. O. (2014). *Manual de interfaz gráfica de usuario de Matlab*. <https://anyflip.com/ijnf/ffdr/basic/51-71>
- Hernández, F. A. (2017). *Estimación de datos del equilibrio líquido-vapor utilizando redes neuronales artificiales para la mezcla binaria etanol-agua*. (Trabajo de diploma). Universidad Tecnológica de La Habana "José Antonio Echeverría".
- Karunanithi, B., Shrinivasan, S., & Bogeshwaran, K. (2014). Modelling of Vapour Liquid Equilibrium by Artificial Neural Networks. *International Journal of Computational Engineering Research*, 4(6), 2250-3005.
- Lauzurique, Y., Pérez, O., & Zumalacárregui, L. (2016). Modelos de propiedades de equilibrio del sistema etanol-agua. Parte 1. Presiones moderadas. *Ambiens Techné et Scientia México*, 4(1), 7-23.

- López, L. E., Zumalacárregui, L., Pérez, O., & Llanes, O. (2018). Obtención de un modelo neuronal para la predicción de la concentración de etanol en la destilería Héctor Molina. *Tecnología Química*, *38*(2), 315-325.
- Oña, R., & Garrido, V. (2014). Extracting the contribution of independent variables in neural network models: a new approach to handle instability. *Neural Computing & Applications*, *259*(3-40), 859-869.
- Pérez, O., Díaz, J., Zumalacárregui, L., & Gozá, O. (2010a). Evaluación de propiedades físicas de mezclas etanol-agua (II). *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, *52*, 62-74.
- Pérez, O., Díaz, J., Zumalacárregui, L., & Gozá, O. (2010b). Evaluación de propiedades termodinámicas de mezclas etanol-agua (I). *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, *52*, 47-61.
- Quintana, A. (2015). *Implementación de un sistema de redes neuronales en Matlab para la predicción del equilibrio líquido-vapor de mezclas binarias selectas*. (Tesis de grado). Universidad de San Buenaventura.
- Sánchez, G. (2011). *Modelos para el cálculo de propiedades de equilibrio del sistema etanol-agua a altas presiones*. (Trabajo de diploma). Universidad Tecnológica de La Habana "José Antonio Echeverría".
- Stabnikov, B. N. (1976). Alcohol etílico. Manual. Editorial Industria Alimentaria.
- Teixeira, C. L. (2014). *Uma aplicação de redes neurais na instrumentação virtual do grau alcoólico no processo industrial de produção do etanol*. (Tesis de maestría). USP, São Carlos.