

## Predicción del equilibrio líquido-vapor mediante redes neuronales: sistema PDMS + CO<sub>2</sub>

Aldana Pizzano<sup>3</sup>[0009-0007-6222-7998], Sabrina Belén Rodríguez Reartes<sup>1,3,4</sup>[0000-0002-1430-2953], Pablo Ezequiel Hegel<sup>1,3</sup>[0000-0003-0983-9497] and Nélida Beatriz Brignole<sup>2,3</sup>[0000-0002-4795-2872]

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur (UNS),  
Avda. Alem 1253, Bahía Blanca, Argentina.  
apizzano@plapiqui.edu.ar  
brodriguez@plapiqui.edu.ar  
phegel@plapiqui.edu.ar

<sup>2</sup> Laboratorio de Investigación y Desarrollo en Computación Científica (LIDecc)-  
Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación (DCIC),  
Universidad Nacional del Sur (UNS)- Bahía Blanca, Argentina.  
dybrigno@criba.edu.ar

<sup>3</sup> Planta Piloto de Ingeniería Química (PLAPIQUI), UNS-CONICET, Bahía Blanca, Argentina.

<sup>4</sup> Department of Chemical Engineering, ETSEQ, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Spain

**Resumen.** Recientemente la necesidad de contar con información experimental confiable para el diseño y la optimización de procesos industriales ha tenido una creciente demanda. En este contexto, se aplicaron redes neuronales artificiales (ANN) para la predicción de la composición en el equilibrio de fases. La red neuronal diseñada es de regresión y “feedforward”, con aprendizaje supervisado. Para el entrenamiento se emplearon datos experimentales de equilibrio de fases de polidimetilsiloxano (PM≈6000) + CO<sub>2</sub>. Las predicciones de la ANN fueron comparadas con las de la ecuación de Sánchez-Lacombe. Los valores teóricos obtenidos mediante esta última sólo consideran datos experimentales medidos en nuestro laboratorio, mientras que la ANN contempla también datos de la literatura. El diseño de una ANN con 2, 1 y 30 neuronas en sus capas de entrada, salida y oculta fue la mejor opción para predecir la composición del CO<sub>2</sub> en el equilibrio para temperaturas entre 30 y 80°C y presiones entre 3.4 a 12.9 MPa. Con el incremento del número de neuronas de la capa oculta, la predicción de la fracción másica para el CO<sub>2</sub> es cada vez menos acertada, obteniéndose comportamientos alejados de los puntos experimentales. Por lo tanto, un sobredimensionamiento impide el correcto entrenamiento de la ANN.

**Palabras clave:** Red neuronal anticipativa, Entrenamiento supervisado, Equilibrio de fases.

## 1 Introducción

En un problema de predicción de equilibrio líquido-vapor (LV) se pretende realizar una predicción numérica con base en una entrada dada. Se espera que el método cumpla con las siguientes propiedades: carencia de sesgo, consistencia y eficiencia. Las redes neuronales artificiales (ANN) tienen la propiedad de ser aproximadores universales [1]. Por este motivo siempre serán un posible modelo candidato en este tipo de problema, aun cuando su desempeño está fuertemente condicionado por los datos disponibles. El uso de ANNs es el enfoque de aprendizaje automático más extendido para modelar fenómenos complejos debido a su formulación simple, flexibilidad y robustez [2].

Se presenta aquí una aplicación de ANNs para la predicción de la composición de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) en el equilibrio LV del sistema binario conformado por polidimetilsiloxano (PDMS) +  $\text{CO}_2$ . El análisis de la predicción del equilibrio químico mediante ANN de dicha mezcla binaria resulta interesante por tratarse de un lubricante sintético en base a siliconas que sirve como modelo para entender el comportamiento tanto de los lubricantes minerales como de los bio-lubricantes.

Los aceites de silicona son polímeros bien caracterizados que exhiben propiedades únicas, y se han propuesto como modelo para estudiar distintos sistemas reportados en la literatura (principalmente polímeros + solventes) [3]. Asimismo, los aceites de siliconas se utilizan en diferentes áreas tecnológicas como, por ejemplo, la industria de procesamiento de petróleo (antiespumante), como lubricante en servicios de alta temperatura, como fluido de refrigeración térmica en transformadores y circuitos electrónicos, y como fluido orgánico en ciclos Rankine avanzados [4].

La elección de PDMS como sustancia modelo se ha realizado por su buena miscibilidad con el  $\text{CO}_2$ . Además de la determinación de solubilidades, el sistema PDMS +  $\text{CO}_2$  ha sido usado recientemente como sustancia modelo en varias investigaciones. Por ejemplo, Wang et al. predijeron el comportamiento de las películas de PDMS con otros polímeros en una atmósfera de  $\text{CO}_2$  supercrítico, y los resultados sugieren que las propiedades mecánicas de tales mezclas inmiscibles podrían mejorarse mediante el tratamiento supercrítico [5].

Actualmente, un solvente que recibe especial consideración es el  $\text{CO}_2$ , el cual es no-inflamable, no-tóxico, inocuo y relativamente barato por su gran disponibilidad. Asimismo, se plantea su captura y utilización a nivel industrial para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero [6]. Muchas razones lo hacen recomendable frente a los solventes convencionales. No es corrosivo en presencia de agua y no es inflamable. Se puede obtener a partir de recursos renovables en grandes cantidades, con alta pureza y a bajo costo. Es recuperable a bajo costo. No provoca daños a los solutos. El  $\text{CO}_2$  también se ha sugerido como disolvente para la extracción y el fraccionamiento de aceites residuales obtenidos de la destilación de petróleo bajo vacío [7], así como para el fraccionamiento de polímeros y oligómeros [8],[9]. Puede actuar como solvente a temperaturas relativamente bajas y en las condiciones adecuadas puede utilizarse para una extracción selectiva de múltiples componentes de productos naturales. El  $\text{CO}_2$  tiene una baja polaridad, lo que le permite extraer selectivamente

compuestos con estructuras químicas similares a los extraídos con solventes orgánicos convencionales, tales como el pentano o el hexano.

### 1.1 Redes neuronales artificiales

Las redes neuronales artificiales denominadas habitualmente como ANNs (Artificial Neural Networks), son una representación matemática del sistema neuronal humano. Al igual que el sistema biológico, las ANN consisten en neuronas interconectadas que son responsables del procesamiento y envío de datos [2].

Las ANNs son un conjunto de técnicas pertenecientes al campo de la inteligencia artificial que se han utilizado como poderosas herramientas computacionales para resolver problemas complejos de reconocimiento de patrones, estimación de funciones y clasificación que no son compatibles con otras herramientas analíticas debido a su flexibilidad y facilidad de uso [10]. También se han utilizado para problemas de optimización complejos con restricciones altamente no lineales y discontinuas [10]. Hay una gran cantidad de tipos de ANNs que se pueden clasificar de acuerdo a su aplicación, topología, patrón de conexión y el método de aprendizaje aplicado como se muestra en la Fig. 1 [10].

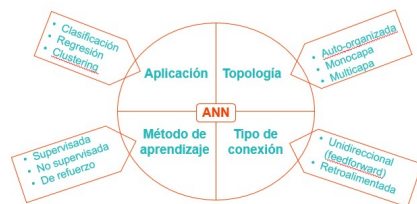


Fig. 1. Clasificación de las ANNs.

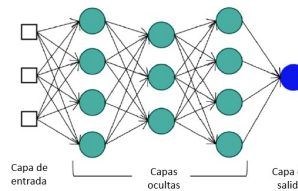


Fig. 2. Estructura de una red neuronal artificial feedforward multicapa, con una capa de entrada, una capa de salida y tres capas ocultas.

La estructura de una ANN consiste en una red formada por nodos (neuronas) y conexiones. Hay una capa de entrada que contiene las señales o variables de entrada y una capa de salida que contiene todas las señales de salida de la red, relacionadas por algún tipo de correlación o dependencia. Además, también pueden tener una o más capas ocultas ubicadas entre la entrada y la salida [2], [11]. La Fig. 2 muestra un ejemplo de red neuronal con una capa de entrada, una de salida y tres (3) capas ocultas.

El número de neuronas en las capas de entrada y salida está limitado por el escenario en cuestión, mientras que el diseñador debe determinar el número de capas ocultas y neuronas ocultas en función de prueba y error o usando reglas generales [2]. Un número creciente de capas ocultas conducirá a un número creciente de parámetros. En algunos casos, una red grande puede ser favorable para la precisión de la predicción del modelo. Sin embargo, demasiadas capas ocultas también pueden conducir a una

capacidad de procesamiento de información excesiva y, por lo tanto, a la memorización de las muestras de entrenamiento (sobreajuste). Por otro lado, un número insuficiente de parámetros puede resultar en capacidades deficientes de pronóstico de la red [2]. En particular, en este trabajo se utilizó una red neuronal de regresión, supervisada, monocapa y de tipo anticipativa (feedforward).

## 2 Metodología

Las ANNs fueron diseñadas utilizando una herramienta computacional que soluciona un problema de ajuste de datos usando una red prealimentada entrenada con Levenberg-Marquardt. Este modelo sencillo es beneficioso para el entrenamiento que se pretende llevar a cabo ya que no se cuenta con una muestra de datos muy numerosa que requiera un modelo de red más complejo. Se utilizó un CPU Intel Core i7 10700f con GD210 y 16 GB RAM, y todas las redes fueron entrenadas con un tiempo de cómputo inferior a 2 segundos.

Se diseñó una red neuronal con una (1) capa de entrada que consta de dos (2) neuronas, una (1) capa oculta, con un número de neuronas variable y una (1) capa de salida con una (1) única neurona. Se varió la cantidad de neuronas en la capa oculta y el porcentaje del total de datos utilizados para entrenar, validar y testear la red, con el fin de evaluar su efecto en el entrenamiento y el ajuste de datos. Una vez que la red se entrenó, se analizaron los siguientes indicadores: la cantidad de datos usada para cada etapa del entrenamiento, el error cuadrático medio (MSE), el cual debe ser similar en las tres etapas para alcanzar un buen entrenamiento, el histograma del error y el desempeño de la regresión.

En este trabajo se llevaron a cabo distintos tipos de entrenamiento variando la cantidad de neuronas de la capa oculta, comenzando con un número de neuronas igual a 30 que fue aumentando hasta alcanzar las 500 neuronas. El algoritmo de entrenamiento elegido fue el de “Levenberg-Marquardt”, mientras que se usó un 70% de los datos para entrenar la red, 15% para validar y 15% para testear. Para el caso de 50 neuronas en la capa oculta, se llevó a cabo también el entrenamiento de la red con 60% de datos para la etapa de entrenamiento, 20% para validar y 20% para testear.

Los datos de entrada a la red fueron presión y temperatura en el equilibrio LV del sistema binario PDMS + CO<sub>2</sub> medidos experimentalmente (no publicados), tomados en el marco de la tesis doctoral de Pizzano, A. [12], así como también un set de datos experimentales extraídos de la literatura [13]. Con el fin de aumentar el tamaño de la muestra para mejorar el funcionamiento de la red neuronal se combinan datos experimentales propios y de literatura, contabilizando un total de 62 datos experimentales de presión, temperatura y composición.

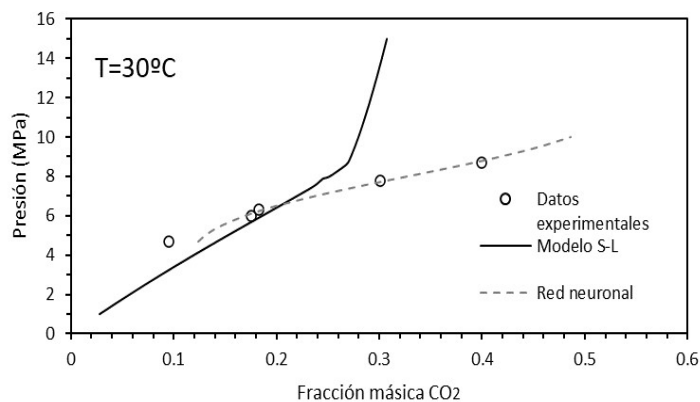
Los resultados obtenidos se han evaluado con la métrica MSE y gráficas de regresión. Aquellas redes que mostraron valores de entrenamiento satisfactorios, luego fueron utilizadas para predecir las composiciones de CO<sub>2</sub> en el equilibrio LV. Los datos utilizados para llevar a cabo esta predicción son de temperatura y presión. El rango de temperatura considerado es de 30°C-80°C mientras que el de presión abarca desde 4,7 MPa hasta 31,7 MPa.

La ecuación de estado de Sanchez-Lacombe (EdE S-L) [14],[15], requiere el cálculo previo de parámetros característicos, tal como, densidad, presión y temperatura que fueron ajustados en este trabajo para el caso de PDMS, mientras que para el CO<sub>2</sub> se tomaron de literatura [16]. Cabe mencionar que el ajuste de los parámetros de la EdE S-L se realizaron sólo considerando los datos medidos experimentalmente en el marco de la tesis doctoral desarrollada por Pizzano, A [12], mientras que la predicción que realiza la red neuronal, contempla estos mismos datos experimentales además de un set extraído de literatura [13].

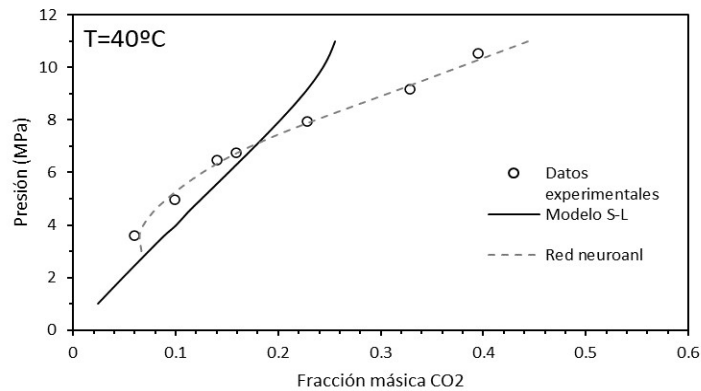
### 3 Resultados y discusión

#### Red neuronal artificial con 30 neuronas en la capa oculta

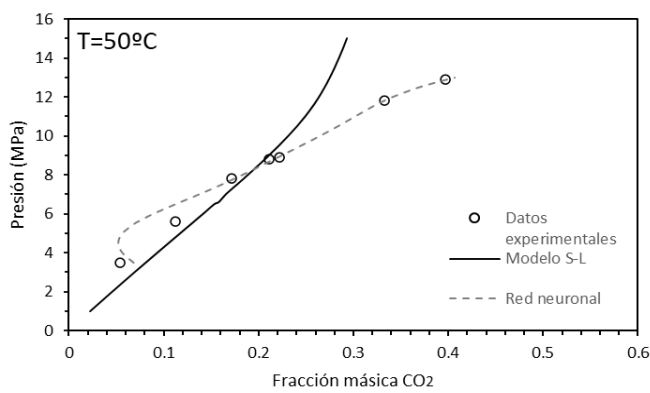
En este caso, se realizaron tres (3) corridas con el fin de mejorar la performance del entrenamiento. Luego los valores de composición predichos por la red neuronal se compararon con los datos experimentales y con el modelado termodinámico de S-L como muestran las Figs. 3-6. Se observa que la red neuronal diseñada con 30 neuronas en la capa oculta entrenada tres veces es capaz de predecir de manera bastante acertada los datos experimentales. Para todas las temperaturas se puede ver como la curva de la predicción de la EdE de S-L tiende a desviarse de los datos experimentales a partir de fracciones máscas de CO<sub>2</sub> entre 0.2 y 0.3, y muestra un pronunciada pendiente en el plano presión-composición a medida que aumenta la fracción máscica de CO<sub>2</sub>. Por su parte, las predicciones obtenidas con la red neuronal capturan más apropiadamente el comportamiento de los puntos experimentales.



**Fig. 3.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 30 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 30°C.



**Fig. 4.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 30 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 40°C.



**Fig. 5.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 30 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 50°C.

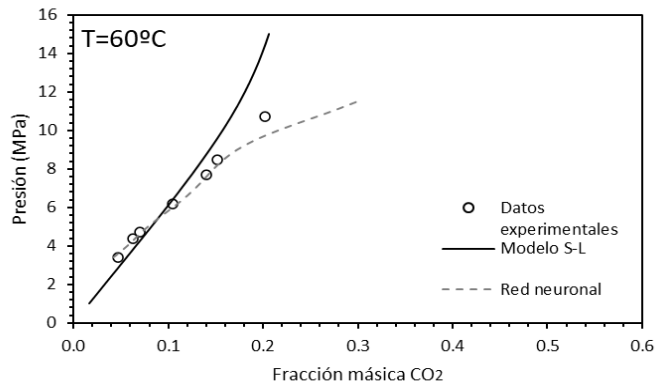


Fig. 6. Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 30 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 60°C

**Red neuronal artificial con 40 neuronas en la capa oculta**

Para este diseño se realizaron 3 entrenamientos. A continuación, se muestran los resultados obtenidos (Figs. 7 al 10) para el caso del último entrenamiento. El diseño de una red neuronal con 40 neuronas en su única capa oculta y entrenada por triplicado, muestra una buena concordancia con los datos experimentales para el caso de T=30°C, T=40°C y T=50°C, mientras que para la última temperatura evaluada (T=60°C), se nota una pequeña perturbación entre W\_CO<sub>2</sub>=0.1 y W\_CO<sub>2</sub>=0.15. Posiblemente esto se debe a un “sobreaprendizaje”, problema típico del proceso de entrenamiento, que se produce cuando la muestra de entrenamiento es pequeña.

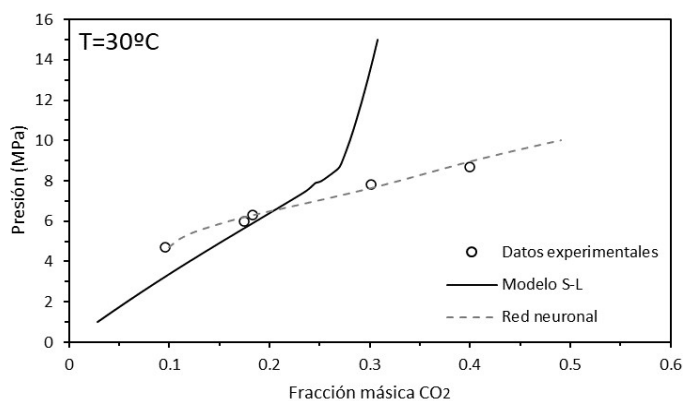
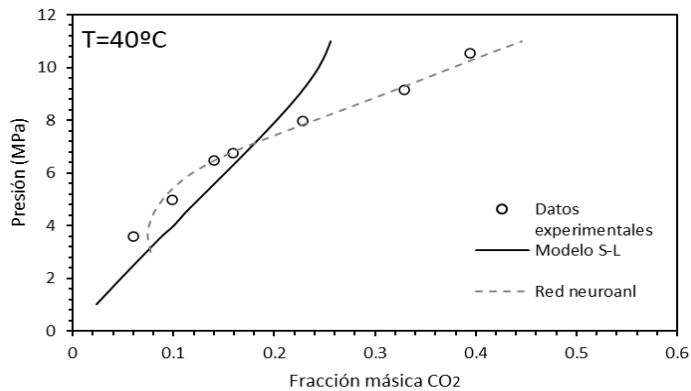
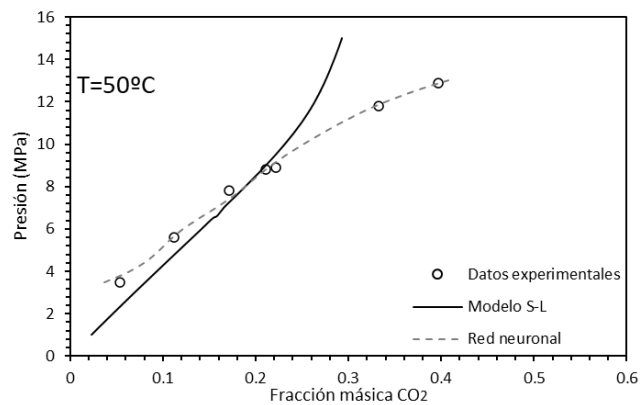


Fig. 7. Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 40 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 30°C.



**Fig. 8.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 40 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 40°C.



**Fig. 9.** Datos experimentales modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 40 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 50°C



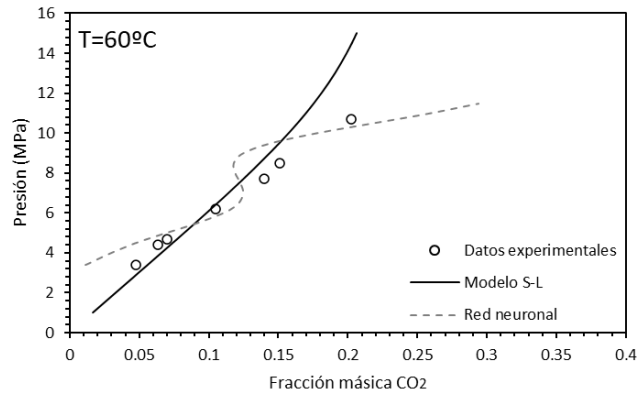


Fig. 10. Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 40 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 60°C.

**Red neuronal artificial con 50 neuronas en la capa oculta**

El diseño de esta red neuronal se realiza dividiendo los datos disponibles considerando los siguientes porcentajes para los sets de entrenamiento, validación y test:

- a) 70% Entrenamiento, 15% Validación, 15% Test.
- b) 60% Entrenamiento, 20% Validación, 20% Test.

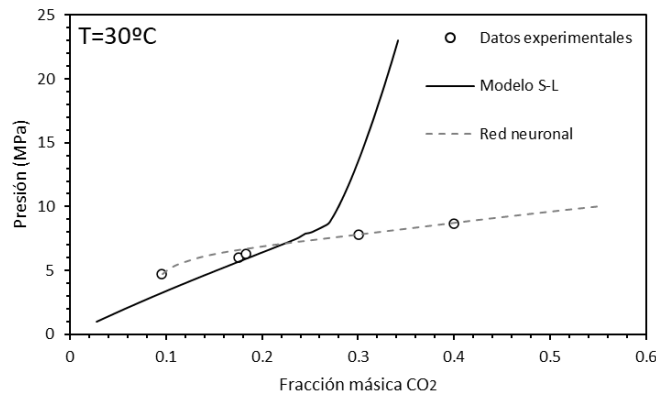
Para el inciso a) se realizaron 5 entrenamientos. Al observar los valores de R para el entrenamiento, validación y testeo se piensa que el diseño de esta red, arrojará buenas predicciones para el valor de composición de CO<sub>2</sub> en el equilibrio; sin embargo, dicha predicción para T=60°C arroja valores negativos de fracción másica de CO<sub>2</sub> para valores de presión pequeños, tal como se observa en la Tabla 1. Este resultado, da la pauta que esta red neuronal no fue entrenada de manera correcta. Por lo tanto, se entrenó nuevamente con los porcentajes de entrenamiento, validación y testeo mencionados en b).

Tabla 1. Respuesta de la red neuronal para T=60°C y P=3.4 MPa (empleando 50 neuronas en la capa oculta, y dividiendo los datos disponibles según lo explicado en a) en esta sección).

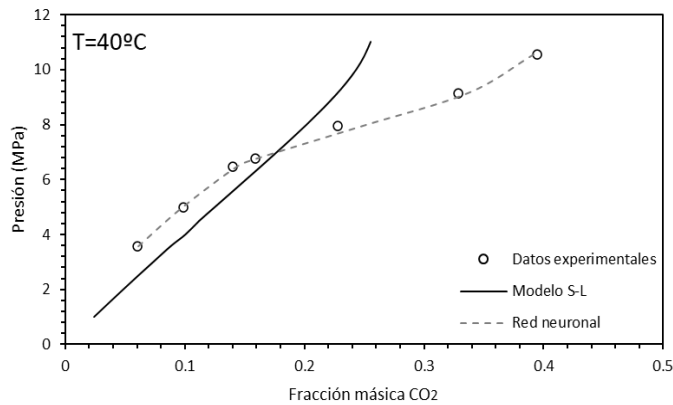
P (MPa)	W_CO <sub>2</sub>
3.4	-0.031
3.5	-0.0186

En el caso del inciso b) se ejecutan 6 entrenamientos. Se observa claramente que esta última corrida es la que da, en general, mejores valores de R, por lo tanto, se usará para predecir los valores de composición del CO<sub>2</sub> en el equilibrio. Los resultados se pueden ver en las Figs. 11 a 14. Los resultados muestran que la red neuronal predice de buena manera las composiciones del CO<sub>2</sub> en el equilibrio para T=30°C y T=40°C, mientras que para una temperatura igual a 50°C y a 60°C se observa cierta desviación respecto a los datos experimentales. Este comportamiento se puede atribuir

al tamaño de la red, al parecer 50 neuronas en la capa oculta resulta ser excesivo para el problema de regresión que intenta resolver.



**Fig. 11.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 50 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 30°C.



**Fig. 12.** Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 50 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 40°C.

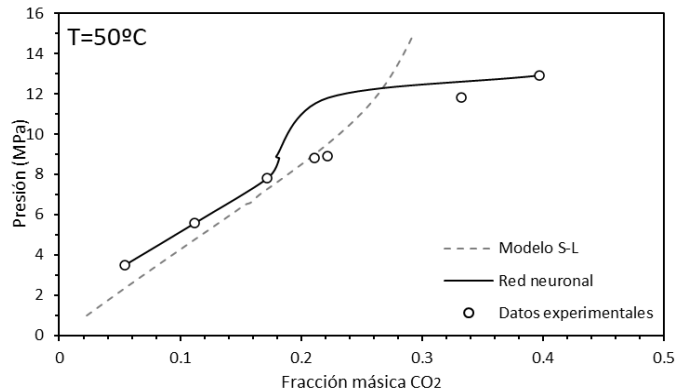


Fig. 13. Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 50 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 50°C.

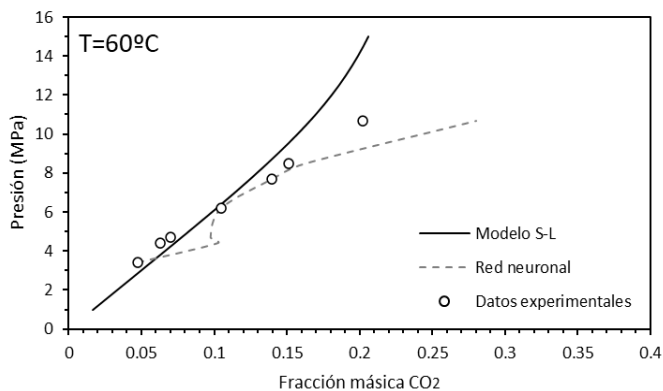


Fig. 14. Datos experimentales, modelo termodinámico con EdE S-L y predicción de la red neuronal con 50 neuronas en la capa oculta para una temperatura igual a 60°C.

### Redes neuronales artificiales con 100, 200, 300 y 500 neuronas en la capa oculta

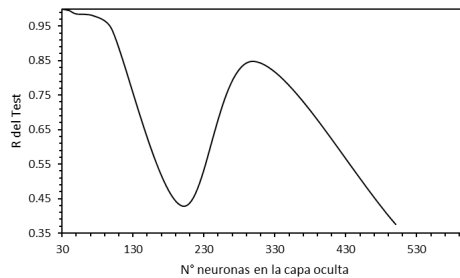
La red neuronal con 100 neuronas en su capa oculta fue entrenada 6 veces. Si bien el R correspondiente al test fue igual a 0.9414, siendo este un valor bastante bueno, cuando se realizó la simulación para obtener la composición de CO<sub>2</sub> en el equilibrio, la predicción arrojó valores de composición negativos para las temperaturas de 40°C y 60°C. Por lo tanto, se puede decir que el entrenamiento de dicha red no fue alcanzado con éxito y tal vez esto se deba al sobredimensionamiento ya que 100 neuronas podrían resultar un exceso para resolver un problema de regresión relativamente sencillo.

Asimismo, en el diseño de ANNs con más de 100 neuronas en su capa oculta, se puede observar que no se logra obtener un buen entrenamiento. Para 5 corridas en cada caso, la Tabla 2 muestra los resultados obtenidos en la etapa de entrenamiento de estas tres ANNs. Ya que los resultados no son satisfactorios, se ha decidido no avanzar con la etapa de simulación. Es claro que, para las redes reportadas en la Tabla 2, a medida que se aumenta el número de neuronas en la capa oculta el rendimiento de la red neuronal empeora.

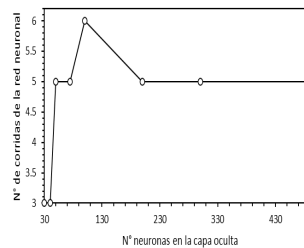
**Tabla 2.** Diseño de red neuronal con 200, 300 y 500 neuronas en su única capa oculta.

# neuronas	# corridas	R entrenamiento	R validación	R Test	R Total
200	5	0.99951	0.81752	0.428	0.836
300	5	0.99411	0.78694	0.848	0.797
500	5	0.98509	0.51088	0.376	0.596

Las Figs 15 y 16 muestran la performance del entrenamiento de la red neuronal artificial, evaluada mediante el valor que adopta R y la cantidad de entrenamientos requeridos, con respecto a la variación del número de neuronas en su capa oculta. La Fig. 15 muestra el rendimiento de la red neuronal, en función del valor de R del test a medida que aumenta el número de neuronas en su capa oculta. Se ve claramente que para un número de neuronas igual a 30 se obtiene el mejor valor para R, y desde 40 a 200 neuronas el comportamiento de R es decreciente. A partir de este último valor de neuronas el valor de R vuelve a aumentar, para alcanzar un máximo local en 300 neuronas, luego nuevamente el comportamiento es decreciente.



**Fig. 15.** Rendimiento de la red neuronal en función del valor de R del test a medida que aumenta el número de neuronas de la capa oculta.



**Fig. 16.** Número de neuronas en la capa oculta en función del número de corridas de la red neuronal

Cuando la red neuronal artificial se diseña con un número de neuronas igual a 30 en su capa oculta se obtiene el menor número de corridas (3, ver Fig. 16) necesarias para entrenarla, es decir a medida que el número de neuronas de la capa oculta au-

menta también lo hace la cantidad de entrenamientos necesarios para lograr obtener una buena performance (valor de R apropiado).

El análisis del error relativo cuadrático medio (MSE) que se muestra en la Tabla 3 también revela, en líneas generales, que la red de 30 neuronas en la capa oculta, predice de manera más certera la composición de CO<sub>2</sub> en ELV. De la Tabla 3 también se observa que el modelo de Sánchez-Lacombe arroja mayores valores de MSE respecto a las redes que tienen 30, 40 y 50 neuronas en su capa oculta, para los mismos valores de temperatura de estudio.

**Tabla 3.** Errores relativos cuadráticos medios (MSE) de redes neuronales entrenadas y modelo de S-L respecto de datos experimentales medidos en el marco de la tesis doctoral de Pizano, A. [12]

T [°C]	MSE			
	30 neuronas	40 neuronas	50 neuronas	Modelo S-L
30	0.020%	0.015%	0.051%	0.452%
40	0.010%	0.021%	0.008%	0.487%
50	0.026%	0.173%	0.211%	0.310%

#### 4 Conclusiones

El diseño de una red neuronal con 2 neuronas en su capa de entrada, 1 en su capa de salida y 30 en su capa oculta, resultó la mejor opción para predecir la composición del CO<sub>2</sub> en el equilibrio. Se consigue con tan solo 3 entrenamientos que la red neuronal prediga de manera acertada la fracción de CO<sub>2</sub> para las distintas temperaturas evaluadas. Los tiempos de ejecución que demandó esta tarea fueron inferiores a 2 segundos.

Se observó que un sobredimensionamiento de la ANN produce un entrenamiento deficiente de la red, obteniéndose valores bajos de R. Las Figs. 15 y 16 muestran que la red neuronal diseñada con 30 neuronas en su capa oculta alcanza su mejor performance en tan solo 3 entrenamientos con un valor de R para el test igual a 0.999. En el caso de la red neuronal que posee 50 neuronas en su capa oculta entrenada considerando un porcentaje de los datos disponibles de 60% para el Entrenamiento, 20% para la Validación y 20% para el Test, se observó que mejoró notablemente su performance con respecto al mismo diseño de ANN, pero conformando los sets de datos con un porcentaje igual a 70% “entrenamiento”, 15% “validación” y 15% “test”.

Es interesante resaltar que a medida que el número de neuronas de la capa oculta aumenta, la predicción es cada vez menos acertada, obteniéndose comportamientos que difieren mucho de los puntos experimentales como sucede para la capa oculta con un número de neuronas entre 100 y 500. Por lo tanto, aumentar la cantidad de capas ocultas no mejora la exactitud lograda para esta aplicación que debe ser modelada con pocas entradas. Se evidencia que cuando los datos son menos complejos, entonces funcionan mejor las ANNs con pocas capas ocultas.

Es evidente que el modelo termodinámico de S-L presenta algunas limitaciones posiblemente debido al uso de parámetros ajustables o reglas de mezclado que lo hace computacionalmente deficiente. Sin embargo, la ANN predijo de manera más certera el equilibrio termodinámico gracias a que su enfoque es un algoritmo capaz de aproximar una determinada propiedad, como la solubilidad, mediante el aprendizaje de relaciones entre datos de entrada y salida. Esto explica que la tendencia de la ANN sea más parecida a los datos experimentales de lo que es el modelo termodinámico y que se piense en su uso en trabajos futuros como una herramienta con gran potencial para resolver modelado de propiedades termodinámicas.

## Referencias

1. Hornik K, Stinchcombe M, White H (1989) Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks* 2:359–366. [https://doi.org/10.1016/0893-6080\(89\)90020-8](https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8)
2. Delgado Otalvaro N, Gül Bilir P, Herrera Delgado K, et al (2021) Modeling the Direct Synthesis of Dimethyl Ether using Artificial Neural Networks. *Chemie-Ingenieur-Technik* 93:754–761. <https://doi.org/10.1002/cite.202000226>
3. Christov M, Dohm R (2002) High-pressure fluid phase equilibria: Experimental methods and systems investigated (1994-1999)
4. Colonna P, Nannan NR, Guardone A, Lemmon EW (2006) Multiparameter equations of state for selected siloxanes. *Fluid Phase Equilib* 244:193–211. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2006.04.015>
5. Lang S, Frerich S, Pollak S (2019) Solubility of pressurised carbon dioxide in three different polydimethylsiloxanes. *Fluid Phase Equilib* 491:12–22. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.03.009>
6. Yoro KO, Daramola MO (2020) CO2 emission sources, greenhouse gases, and the global warming effect. Elsevier Inc.
7. E. B. Auerbach. (1926) (1926) Process for treating, separating and purifying oils. Berlin, Germany. 19–22
8. Mchugh MA, Krukoni VJ (1993) Supercritical fluid extraction. Principles and Practice, 2ND ed. Butterworth-Heinemann, USA
9. Zhao X, Watkins R, Barton SW (1995) Strategies for Supercritical CO2 Fractionation of Polydimethylsiloxane. *J Appl Polym Sci* 55:773–778
10. Ghosh-dastidar S, Lichtenstein AG (2009) SPIKING NEURAL NETWORKS. *Int J* 19:295–308
11. Carlo M, Soto G (2015) Aplicación de redes neuronales para la predicción de propiedades termodinámicas. 456–473
12. Pizzano A Fraccionamiento de aceites lubricantes mediante gases licuados, Universidad Nacional del Sur, 2020-presente. Tesis Doctoral
13. Franken HH, Knoetze JH, Schwarz CE (2018) High-pressure binary phase equilibria, density and dynamic viscosity of 100 & 200 cSt polydimethylsiloxane (PDMS) with supercritical CO2. *J Supercrit Fluids* 139:1–7. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2018.04.020>
14. Sanchez IC, Lacombe RH (1978) Statistical Thermodynamics of Polymer Solutions. *Macromolecules* 11:1145–1156. <https://doi.org/10.1021/ma60066a017>
15. Sanchez IC, Lacombe RH (1976) AN ELEMENTARY MOLECULAR THEORY OF CLASSICAL FLUIDS. PURE FLUIDS. *J Phys Chem* 80:
16. Pope DS, Sanchez IC, Koros WJ, Fleming GK (1991) Sorption/Dilation. 1779–1783