



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**SIMULACIÓN DEL PROCESO DE SEPARACIÓN DE LA  
MEZCLA ACETONITRILO - AGUA MEDIANTE DESTILACIÓN  
EXTRACTIVA EN DWSIM Y PREDICCIÓN DE LA  
CONCENTRACIÓN ACETONITRILO POR RNA**

**Trabajo de Integración Curricular**

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

**INGENIERO QUÍMICO**

**AUTOR:** EDWIN PAÚL MEDINA GUAMAN

**DIRECTOR:** Ing. NELSON SANTIAGO CHUQUIN VASCO Msc.

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, **Edwin Paúl Medina Guaman**

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Edwin Paúl Medina Guaman, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 28 de febrero de 2021

**Edwin Paul Medina Guaman**

**CI: 110570372-0**

**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El Trabajo de Titulación; Tipo Propuesta Tecnológica, **SIMULACIÓN DEL PROCESO DE SEPARACIÓN DE LA MEZCLA ACETONITRILO - AGUA MEDIANTE DESTILACIÓN EXTRACTIVA EN DWSIM Y PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN ACETONITRILO POR RNA**, realizado por el señor: **EDWIN PAUL MEDINA GUAMAN**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal autoriza su presentación.

**FIRMA**

**FECHA**

**CESAR  
ARTURO  
PUENTE  
GUIJARRO**

Firmado digitalmente por CESAR  
ARTURO PUENTE GUIJARRO  
DN: cn=CESAR ARTURO  
PUENTE GUIJARRO o=SEC  
o=SECURITY DATA S.A. I  
ou=ENTIDAD DE  
CERTIFICACION DE  
INFORMACION  
Motivo: Soy el autor de este  
documento  
Ubicación:  
Fecha: 2021-11-17 21:08:05:00

Ing. César Arturo Puente Msc.

2021-09-15

**PRESIDENTE DEL TRIBUNAL**



Carrera  
Mecánica  
Ing. Nelson  
Chuquin  
0987133285  
2021.11.22  
08:49:03-05'00'

Ing. Nelson Santiago Chuquin Vasco Msc.

2021-09-15

**DIRECTOR DE TRABAJO DE  
TITULACIÓN**



Firmado electrónicamente por:  
**DANIEL ANTONIO  
CHUQUIN VASCO**

Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco Msc.

2021-09-15

**MIEMBRO DEL TRIBUNAL**

## **DEDICATORIA**

Con gran satisfacción, dicha y honra, dedico este logro a mi madre Rosa, por haberme apoyado en todo el transcurso y recorrido de mis estudios. Además, por haberme educado con responsabilidad y disciplina, ya que los valores que me inculcó fueron importantes en mi camino estudiantil.

Edwin.

## **AGRADECIMIENTO**

En primer lugar, quiero agradecer a mi colaborador Ing. Daniel Chuquin, quien con mucha generosidad, sabiduría y entrega supo orientarme de una manera correcta en todo el trayecto de la investigación.

A mi madre por ser una mujer de sabiduría que se ha esforzado por ayudarme a llegar hasta el punto en el que me encuentro. Me ha brindado toda su entrega, confianza y soporte económico, me supo impartir conocimientos y valores, los mismos que me sirvieron y servirán para toda mi vida.

A mi familia que siempre me apoyo en todas las decisiones que he tomado a lo largo de la vida, siempre me brindaron un apoyo incondicional en los momentos difíciles de todo mi trayecto como estudiante.

Expresar también una gratitud al Instituto de Fomento al Talento Humano por la ayuda brindada en el transcurso de mis estudios.

Finalmente, expresar un agradecimiento ferviente a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo y en especial a la facultad de Ciencias por darme la oportunidad de formar parte de la carrera de Ingeniería Química, la misma que me formó profesionalmente en grandes conocimientos, los cuales me servirán para mi vida profesional y dentro de la sociedad. Gracias a todos los docentes por su entrega incondicional y por impartir conocimientos que son y serán de gran utilidad en un futuro cercano.

Edwin.

## TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
RESUMEN.....	xiv
ABSTRACT.....	xv

### CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Antecedentes.....	1
1.2. Planteamiento del problema.....	1
1.3. Justificación del proyecto.....	2
1.4. Objetivos.....	3
1.4.1. <i>Objetivo General</i> .....	3
1.4.2. <i>Objetivos Específicos</i> .....	3
1.5. Alcance.....	3

### CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	4
2.1. Estado del Arte.....	4
2.1.1. <i>Simulación de procesos</i> .....	4
2.1.2. <i>Redes Neuronales Artificiales.</i> .....	5
2.2. Bases teóricas.....	7
2.2.1. <i>Azeótropos</i> .....	7
2.2.2. <i>Destilación Extractiva</i> .....	8

### CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA.....	10
3.1. Etapas de la metodología.....	10
3.2. Establecimiento de parámetros de funcionamiento.....	11
3.2.1. <i>Generalidades del proceso</i> .....	11
3.2.2. <i>Secuencia directa convencional</i> .....	12

3.2.2.1.	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna de preconcentración.</i>	15
3.2.2.2.	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna de extracción.</i>	15
3.2.2.3.	<i>Parámetros de funcionamiento de la columna de recuperación.</i>	16
3.3.	<b>Simulación en DWSIM.</b>	16
3.3.1.	<i>Especificación de la columna 1</i>	21
3.3.2.	<i>Especificaciones de la columna 2</i>	23
3.3.3.	<i>Especificaciones de la columna 3</i>	25
3.3.4.	<i>Especificaciones de los flujos</i>	27
3.4.	<b>Validación de resultados de la simulación.</b>	28
3.5.	<b>Análisis de sensibilidad</b>	30
3.6.	<b>Procesamiento de datos</b>	31
3.7.	<b>Diseño de la red neuronal artificial</b>	36
3.8.	<b>Entrenamiento de datos</b>	36
3.9.	<b>Validación de resultados de la red neuronal artificial.</b>	40
3.10.	<b>Análisis Estadístico</b>	44

## CAPÍTULO IV

4.	<b>GESTIÓN DEL PROYECTO</b>	45
4.1.	<b>Presupuesto</b>	45
4.2.	<b>Recursos y Materiales</b>	45
4.3.	<b>Cronograma</b>	46
4.4.	<b>Discusión y análisis de resultados</b>	47
4.4.1.	<i>Informe de resultados de la simulación en DWSIM</i>	47
4.5.	<b>Validación de los resultados obtenidos en DWSIM</b>	49
4.6.	<b>Balance de masa del sistema</b>	50
4.6.1.	<i>Balance de masa general para la columna de preconcentración</i>	50
4.6.2.	<i>Balance de masa general para la columna de extracción (C2)</i>	52
4.6.3.	<i>Balance de masa general para la columna de recuperación del solvente (C3)</i>	54
4.7.	<b>Reporte de resultados de la red neuronal artificial (RNA)</b>	55
4.7.1.	<i>Error cuadrático medio (MSE)</i>	56
4.7.2.	<i>Gráficos sobre el comportamiento de la RNA</i>	56
4.7.3.	<i>Gráficas de comparación entre las salidas predichas y las deseadas</i>	58
4.7.3.1.	<i>Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA.</i>	59

<b>4.7.3.2.</b>	<i>Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la red neuronal artificial</i> .....	64
<b>4.8.</b>	<b>Resultados del análisis estadístico en SPSS</b> .....	68
	<b>CONCLUSIONES</b> .....	73
	<b>RECOMENDACIONES</b> .....	74
	<b>GLOSARIO</b>	
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	
	<b>ANEXOS</b>	

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-3.</b>	Condiciones operativas iniciales para el sistema de estudio. ....	11
<b>Tabla 2-3.</b>	Condiciones operativas de la columna de preconcentración. ....	15
<b>Tabla 3-3.</b>	Condiciones operativas de la columna extractiva.....	15
<b>Tabla 4-3.</b>	Condiciones operativas de la columna de recuperación. ....	16
<b>Tabla 5-3.</b>	Parámetros operativos utilizados durante la simulación en DWSIM. ....	17
<b>Tabla 6-3.</b>	Análisis de sensibilidad. ....	30
<b>Tabla 7-3.</b>	Parámetros de entrada a la RNA.....	31
<b>Tabla 8-3.</b>	Parámetros de salida de la RNA. ....	31
<b>Tabla 9-3.</b>	Restricciones para las entradas de la RNA. ....	32
<b>Tabla 10-3.</b>	Bases de datos generados para la RNA. ....	32
<b>Tabla 11-3.</b>	Validación de la RNA. ....	41
<b>Tabla 1-4.</b>	Presupuesto del proyecto de titulación. ....	45
<b>Tabla 2-4.</b>	Cronograma del proyecto de titulación. ....	46
<b>Tabla 3-4.</b>	Resultados de la columna de preconcentración (C1).....	48
<b>Tabla 4-4.</b>	Resultados de la columna de destilación extractiva (C2). ....	48
<b>Tabla 5-4.</b>	Resultados de la columna de recuperación (C3). ....	49
<b>Tabla 6-4.</b>	Comparación de las fracciones molares obtenidas en DWSIM.....	49
<b>Tabla 7-4.</b>	Comparación de las temperaturas de DWSIM. ....	50
<b>Tabla 8-4.</b>	Error cuadrático medio del diseño de la RNA.....	56
<b>Tabla 9-4.</b>	Valores reales vs predichos en la columna de recuperación (C3). ....	59
<b>Tabla 10-4.</b>	Valores reales vs predichos en la columna de extracción (C2) para validación de la RNA.....	64
<b>Tabla 11-4.</b>	Valores reales vs predichos en la columna de recuperación (C3) para la validación de la RNA.....	65
<b>Tabla 12-4.</b>	ANOVA.....	68
<b>Tabla 13-4.</b>	Medias con intervalos de confianza del 95% ....	69
<b>Tabla 14-4.</b>	Prueba de Kruskal-Wallis.....	70

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2.</b>	Diagramas de equilibrio del punto de ebullición.....	8
<b>Figura 2-2.</b>	Planta de destilación extractiva. ....	9
<b>Figura 1-3.</b>	Esquema de la secuencia de destilación extractiva de acetonitrilo-agua.....	12
<b>Figura 2-3.</b>	Separación de acetonitrilo-agua en destilación extractiva usando etilenglicol como solvente.....	14
<b>Figura 3-3.</b>	Flowsheet de la simulación en DWSIM.....	17
<b>Figura 4-3.</b>	Ventana principal del simulador DWSIM. ....	18
<b>Figura 5-3.</b>	Ventana de introducción a la simulación.....	19
<b>Figura 6-3.</b>	Panel de selección de componentes en DWSIM. ....	19
<b>Figura 7-3.</b>	Panel de selección del modelo termodinámico en DWSIM. ....	20
<b>Figura 8-3.</b>	Panel de selección de unidades en DWSIM. ....	20
<b>Figura 9-3.</b>	Especificaciones de la configuración de la columna 1. ....	21
<b>Figura 10-3.</b>	Panel de selección del modelo termodinámico de la columna 1. ....	21
<b>Figura 11-3.</b>	Panel de especificación de la presión de la columna 1.....	22
<b>Figura 12-3.</b>	Especificaciones del producto de la columna 1.....	22
<b>Figura 13-3.</b>	Especificaciones de operación de la columna 2. ....	23
<b>Figura 14-3.</b>	Especificaciones del modelo termodinámico de la columna 2.....	23
<b>Figura 15-3.</b>	Especificaciones de la presión de la columna 2. ....	24
<b>Figura 16-3.</b>	Especificaciones del producto de la columna 2.....	24
<b>Figura 17-3.</b>	Especificaciones de operación de la columna 3. ....	25
<b>Figura 18-3.</b>	Especificaciones de los modelos termodinámicos de la columna 3. ....	25
<b>Figura 19-3.</b>	Especificaciones de las presiones de la columna 3.....	26
<b>Figura 20-3.</b>	Especificaciones del producto de la columna 3.....	26
<b>Figura 21-3.</b>	Especificaciones del flujo de alimentación al proceso. ....	27
<b>Figura 22-3.</b>	Especificaciones del flujo de alimentación del etilenglicol.....	27
<b>Figura 23-3.</b>	Opciones numéricas de solución. ....	28
<b>Figura 24-3.</b>	Panel de configuración de la tabla de resultados en DWSIM. ....	29
<b>Figura 25-3.</b>	Interfaz de la simulación en DWSIM con sus resultados. ....	29
<b>Figura 26-3.</b>	Disposición de los datos en la matriz de Excel. ....	36
<b>Figura 27-3.</b>	Selección de las variables de entrada y salida a la RNA. ....	37
<b>Figura 28-3.</b>	Selección del porcentaje de datos para entrenamiento, validación y testeo. ....	37
<b>Figura 29-3.</b>	Selección del algoritmo de entrenamiento para la RNA. ....	38
<b>Figura 30-3.</b>	Entrenamiento de la RNA. ....	39
<b>Figura 31-3.</b>	Panel de evaluación de la RNA. ....	40

<b>Figura 1-4.</b>	Simulación completa del sistema de separación de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva en DWSIM. ....	47
<b>Figura 2-4.</b>	Resultados en DWSIM. ....	48
<b>Figura 3-4.</b>	Balance de masa general de la columna de preconcentración C1. ....	50
<b>Figura 4-4.</b>	Balance de masa general de la columna de extracción C2. ....	52
<b>Figura 5-4.</b>	Balance de masa general en la columna de recuperación del solvente.....	54
<b>Figura 6-4.</b>	Esquema de la red neuronal artificial diseñada en MATLAB.....	56

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-3.</b>	Metodología del trabajo de titulación. ....	10
<b>Gráfico 1-4.</b>	Regresión del entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial.....	57
<b>Gráfico 2-4.</b>	Rendimiento del entrenamiento de la RNA. ....	58
<b>Gráfico 3-4.</b>	Fracción molar de Acetonitrilo real vs el predicho en la columna de extracción (C2).....	62
<b>Gráfico 4-4.</b>	Fracción molar de Etilenglicol real vs predicho en la columna de recuperación (C3).....	63
<b>Gráfico 5-4.</b>	Fracción molar de agua real vs el predicho en la columna de recuperación (C3). .....	63
<b>Gráfico 6-4.</b>	Fracción molar de acetonitrilo de la columna de extracción en la validación. .	65
<b>Gráfico 7-4.</b>	Fracción molar de etilenglicol de la columna de recuperación en la validación. .....	67
<b>Gráfico 8-4.</b>	Fracción molar de agua de la columna de recuperación (C3) en la validación.	67
<b>Gráfico 9-4.</b>	Caja y bigotes para la fracción del acetonitrilo C2 .....	71
<b>Gráfico 10-4.</b>	Caja y bigotes para la fracción de etilenglicol C3 .....	71
<b>Gráfico 11-4.</b>	Caja y bigotes de la fracción de agua C3.....	72

## **ÍNDICE DE ANEXOS**

- ANEXO A.** NOMBRES DE LAS VARIABLES USADAS PARA EL DISEÑO DE LA RNA
- ANEXO B.** NOMBRES DE LAS VARIABLES USADAS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA
- ANEXO C.** SCRIPT PARA DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA
- ANEXO D.** SCRIPT PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA
- ANEXO E.** VALORES REALES VS PREDICHOS EN LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN (C2)

## RESUMEN

La finalidad de la presente investigación fue simular y validar un proceso de separación de la mezcla acetonitrilo - agua mediante destilación extractiva en DWSIM, que sirve como base para realizar el diseño de la Red Neuronal Artificial (RNA) capaz de predecir las fracciones molares de acetonitrilo, etilenglicol y agua. Para la elaboración de la RNA se generó una base de datos a partir de la simulación realizada en DWSIM, la base de datos estaba conformada de 100 pares, con cuatro entradas; temperatura del flujo de alimentación, fracción molar de acetonitrilo a la alimentación, presión de la columna de preconcentración (C1) y fracción molar de etilenglicol. La RNA se diseñó en el software MATLAB empleando nueve neuronas ocultas y un algoritmo Bayesian Regularization para el entrenamiento, con un valor de Error Cuadrático Medio (MSE) de  $3,0723e-05$  y un coeficiente de regresión total de 0,99996. La red se validó mediante un análisis estadístico comparativo obteniéndose un 95% de confiabilidad. La simulación permitió obtener 0,9830 de acetonitrilo en el destilado de la columna dos (columna de extracción), en la columna tres (recuperación) se obtiene en el destilado 0,9016 de agua y 0,9737 de etilenglicol en el fondo. Además, se debe mencionar que no se realizó la recirculación de los productos del fondo de la columna tres hacia la columna dos, esta propuesta permitió obtener resultados cercanos a la investigación de referencia. Se debe mencionar que los errores porcentuales son inferiores al 10%, dando resultados eficientes en la investigación. Se recomienda normalizar los valores de entrada a la RNA que son superiores a uno.

**Palabras clave:** <DESTILACIÓN EXTRACTIVA>, <AZEÓTROPO>, <DWSIM>, <ACETONITRILLO>, <ETILENGLICOL>, <MATLAB>, <RED NEURONAL ARTIFICIA (RNA)>.



Carrera  
Mecánica  
Ing. Nelson  
Chuquin  
0987133285  
2021.11.22  
08:49:03-05'00'



1574-DBRA-UTP-2021

## ABSTRACT

This research purpose dealt with simulating and validating a separation process of the acetonitrilewater mixture by extractive distillation in DWSIM, which serves as the basis for carrying out the design of the Artificial Neural Network (ANN) capable of predicting acetonitrile, ethylene glycol and water molar fractions. For the elaboration of the ANN, a database was generated from the simulation carried out in DWSIM; the database consisted of 100 pairs, with four entrances; feeding flow temperature, acetonitrile mole fraction at feeding, pressure of the preconcentration column (C1) and mole fraction of ethylene glycol. The ANN was designed in MATLAB software using nine hidden neurons and an algorithm Bayesian Regularization for testing, with a value of  $3.0723 \times 10^{-5}$  Mean Square Error (MSE) and 0.99996 total regression coefficient. The network was validated through a statistical comparative analysis obtaining a 95% reliability. The simulation allowed to obtain 0.9830 acetonitrile in the distillate of the column two (extraction column), and in the distillate of column three (recovery) 0.9016 of water and 0.9737 of ethylene glycol are obtained at the bottom. Moreover, it should be mentioned that the recirculation of the products from the bottom of the column three towards column two was not performed; this proposal allowed to obtain results close to the reference research. It should be mentioned that the percentage errors are less than 10%, giving efficient results in the research. It is recommended to normalize the input values to ANN that are greater than one.

**Keywords:** <EXTRACTIVE DISTILLATION>, <AZEOTROPE>, <DWSIM>, <ACETONITRILE>, <ETHYLENE GLYCOL>, <MATLAB>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK (ANN)>.

# CAPÍTULO I

## 1. INTRODUCCIÓN

### 1.1. Antecedentes

En la simulación de procesos industriales como es la destilación, es necesario disponer de datos puntuales del sistema de estudio, entre ellos; temperatura, presión, flujos y composiciones de flujos como datos a la entrada del proceso. Si se analiza el proceso de la destilación se requiere para su cálculo datos de equilibrio de mezclas binarias, ternarias o múltiples.

Los compuestos azeotrópicos han constituido una problemática para las industrias químicas con el fin de lograr esta separación, ya que son mezclas con temperaturas de ebullición a la que las composiciones del líquido y vapor son iguales bajo una presión fija (Gerbaud et al., 2019, p.55). La mezcla de acetonitrilo-agua, se puede encontrar en algunas industrias químicas. Por ejemplo, Mallinckrodt Chemicals; como corriente residual general dicha mezcla de azeótropos. Esta compañía purifica setenta fármacos peptídicos con acetonitrilo (Kim et al., 2004, p.1608).

Sin embargo, con los avances tecnológicos se ha podido realizar varios estudios para lograr su separación, algunos necesitan la adición de un tercer componente conocido como solvente, este cambia las temperaturas de ebullición de un componente y con la destilación extractiva se logra la descomposición del azeótropo (Gerbaud et al., 2019, p.58).

Por otro lado, la destilación extractiva es un nuevo método de separación de estos componentes (azeótropos) que consta de tres columnas de destilación. La primera columna es de preconcentración (destilación simple) donde se separan los componentes más ligeros, la segunda columna se conoce como extractiva donde se alimenta un tercer componente (solvente) y la tercera columna conocida como recuperación donde se recupera el tercer componente agregado (Klein, 2008, p.224).

### 1.2. Planteamiento del problema

Como resultado de las buenas capacidades de modelado, las redes neuronales se han utilizado ampliamente para una serie de aplicaciones de ingeniería química, como el análisis de datos de sensores, la detección de fallas y la identificación de procesos no lineales. Sin embargo, son muy pocos los trabajos reportados en los que se evalúa la capacidad de las redes neuronales artificiales (ANN) para modelar procesos que incluyan la destilación extractiva (DE) (Wasewar et al., 2009, p.60). La separación de azeótropos es un problema importante y desafiante en la industria de procesos químicos. Se pueden utilizar varios métodos para este propósito, incluida la destilación por oscilación de presión (PSD), la destilación azeotrópica heterogénea (HAD) y la destilación

extractiva (ED) (Luyben y Chien, 2011, p.32). La destilación extractiva utiliza un agente de arrastre o disolvente (disolvente ligero, intermedio o pesado) para interactuar con los componentes azeotrópicos, aumentando así la volatilidad relativa entre los componentes clave ligeros y pesados (Gerbaud, 2019, p.11).

El acetonitrilo es un solvente industrial común en las industrias químicas y farmacéuticas especializadas. Por ejemplo, Mallinckrodt Chemicals; una destacada compañía química global que ofrece productos de alta pureza para los mercados de laboratorio, biofarmacéutico, microelectrónico e industrial, son fabricantes de productos químicos con centros de distribución en todo el mundo. Esta empresa consume una gran cantidad de acetonitrilo para purificar 70 fármacos peptídicos en sus columnas de cromatografía líquida; sin embargo, como corriente residual se genera una mezcla de acetonitrilo y agua, que forma un azeótropo. Debido a las dificultades para separar la mezcla azeotrópica, el disolvente residual se elimina fuera de la planta. El costo de eliminación de este solvente residual y el costo de compra de acetonitrilo fresco se incrementa a medida que se expande la capacidad del proceso. Sin embargo, los experimentos de laboratorio en destilación extractiva demanda tiempo y son costosos debido a la gran cantidad de parámetros involucrados. Por lo tanto, resulta conveniente predecir datos experimentales con la ayuda de programas de simulación disponibles (Lladosa et al., 2011, p.1266).

En este trabajo se desarrollará un modelo de red neuronal artificial que permita predecir la composición de acetonitrilo recuperado de una mezcla azeotrópica acetonitrilo – agua por destilación extractiva utilizando etilenglicol como agente de arrastre. Para ello se establecerá una base de datos de entrenamiento para la red neuronal obtenida por simulaciones del proceso en DWSIM.

### **1.3. Justificación del proyecto**

En la actualidad, el uso de simuladores para el modelado y diseño de procesos se ha convertido en una herramienta eficaz para el desarrollo y optimización de procesos en la industria química y petroquímica, contribuyendo en la innovación, el desarrollo y la investigación en diferentes plantas de producción. El Ingeniero Químico está capacitado para utilizar diferentes softwares de simulación que permitan el modelado y diseño de procesos, determinando las variables que intervienen en el proceso, y, por lo tanto, efectuando una mejora en operación y rentabilidad, sin la necesidad de interactuar con el proceso real.

Desarrollar una red neuronal que permita estimar los datos y cálculos que conlleva la destilación extractiva de la mezcla acetonitrilo-agua contribuye al avance tecnológico en la industrial, educación e investigación, puesto que el software DWSIM utilizado para la elaboración del modelado es de código abierto, por lo cual se pretende que la información sea de acceso para todas las personas que deseen utilizar el trabajo como guía para el desarrollo de futuros proyectos

en el campo de la simulación y predicción de procesos que involucren la separación de mezclas azeotrópicas y demás operaciones químicas.

## **1.4. Objetivos**

### **1.4.1. *Objetivo General***

Realizar la simulación del proceso de separación de la mezcla acetonitrilo - agua mediante destilación extractiva en DWSIM y predicción de la concentración de acetonitrilo por RNA.

### **1.4.2. *Objetivos Específicos***

- Validar la simulación de la separación extractiva de acetonitrilo-agua con resultados reportados por referentes bibliográficos.
- Realizar un análisis de sensibilidad del proceso para determinar las entradas y salidas a la RNA.
- Crear una red neuronal para la predicción de la composición de acetonitrilo recuperado.
- Evaluar la capacidad de predicción de la red neuronal mediante un análisis estadístico.

## **1.5. Alcance**

En el presente trabajo se simula y valida un proceso de separación de acetonitrilo-agua, a través de una destilación extractiva a baja temperatura en tres columnas de destilación, con el uso de etilenglicol como solvente para la separación del presente azeótropo (acetonitriloagua) este dicho solvente se recupera en la tercera columna, aunque en el presente caso no se ve reflejado la recirculación de esta.

La simulación se desarrolla empleando la multiplataforma para procesos químicos DWSIM. Posteriormente, partiendo de la validación de la simulación se genera una base de datos para el diseño de una red neuronal artificial (RNA) en MATLAB que permite predecir las fracciones molares de los principales componentes que salen del proceso, ingresando y variando los valores de presión, temperatura y fracciones molares de alimentación sin necesidad de simular nuevamente.

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1. Estado del Arte

##### 2.1.1. *Simulación de procesos*

El desarrollo de modelos predictivos en las propiedades de mezclas azeotrópicas sitúa como trabajo referente al siguiente tema investigativo tecnológico “Predicción de propiedades termodinámicas de las mezclas azeotrópicas ternarias”. En este estudio los coeficientes de actividad y volatilidad relativa fueron utilizados para determinar las propiedades azeotrópicas proponiendo dos enfoques de modelado diferentes como son la predicción de variables azeotrópica y la correlación de datos experimentales, en el primer modelado calcula la posición azeotrópica en mezclas ternarias utilizando métodos numéricos haciendo uso de variables experimentales como son la volatilidad relativa y coeficiente de actividad, conociendo los parámetros de NRTL y Wilson en cada rango de temperatura, la composición azeotrópica de las mezclas ternarias y sus sistemas binarios se puede evaluar resolviendo las ecuaciones no lineales con el método de Newton. Si una raíz está entre 0 y 1, esto indicará la existencia del azeótropo en la mezcla, de lo contrario la mezcla es azeotrópica. En lo que sus autores concluyen fundamentados en el trabajo realizado por (Zhao et al., 2016, p.77) que la capacidad de observar que cada mezcla ternaria contiene dos sistemas binarios azeotrópicos hace que también la mezcla ternaria sea un azeótropo.

Mientras que el segundo consiste en aplicar el modelo termodinámico obtenido por la combinación de la ecuación de estado cúbica (la ecuación de estado de Peng-Robinson asociada a la función alfa de Mathias-Copeman) con el modelo de energía libre en exceso (el modelo NRTL), utilizando la regla de mezcla propuesta por Wong-Sandler trayendo como resultados que el comportamiento de fase de las mezclas estudiadas está bien correlacionado utilizando nuestro modelo termodinámico basado en la ecuación de estado Peng -Robinson, combinada con la función alfa Mathias Copeman. Los métodos propuestos en este estudio se pueden aplicar a otras mezclas de refrigerantes (Maalem et al., 2020, p.2).

Otro estudio de gran interés para el desarrollo del trabajo de integración celular se titula como “Un nuevo modelo para la predicción de mezcla binaria de líquidos iónicos más densidad del agua utilizando redes neuronales artificiales” la parte más importante de este estudio es la aplicación de redes neuronales artificiales cuyo propósito fundamental es la predicción de valores de densidad en una mezcla binaria de agua y líquidos iónicos a diferentes temperaturas para diferentes líquidos iónicos basados en imidazolio. Se desarrollaron dos modelos inteligentes

denominados modelo de perceptrón multicapa y modelo de función de base radial (Najafi-Marghmaleki et al., 2016, p.233).

En este estudio, se recopiló una gran cantidad de datos de densidad de 453 para diferentes líquidos iónicos basados en diversos trabajos publicados en la literatura. Cada conjunto de puntos de datos incluye valores experimentales de temperatura, proporción de agua, peso molecular, temperatura de ebullición, temperatura y presión críticas del líquido iónico y densidad del líquido iónico (Najafi-Marghmaleki et al., 2016, p.2).

Se examinó la precisión de dos modelos mediante diferentes métodos gráficos y estadísticos. Los parámetros de entrada fueron temperatura, relación agua / líquido iónico, peso molecular, temperatura crítica, presión crítica y temperatura del punto de ebullición de los líquidos iónicos y la salida del modelo fue la densidad. Se utilizaron el peso molecular, la temperatura crítica, la presión crítica y la temperatura del punto de ebullición para discriminar entre diferentes líquidos iónicos (Dixit et al., 2020). Los resultados mostraron que ambos modelos son precisos y efectivos en la predicción de la densidad de la mezcla de líquido iónico más agua. El rango de temperatura experimental fue de 278.15 K a 348.15 K, pesos moleculares de 224,18 g / mol a 288,29 g / mol, relaciones de agua de 0 a 1 y datos de densidad de 0,9748 g / cm<sup>3</sup> hasta 1.4005 g / cm<sup>3</sup> (Zhao et al., 2016, p.75).

### **2.1.2. Redes Neuronales Artificiales**

Las técnicas de las redes neuronales están adquiriendo mayor relevancia por el desempeño eficiente y la diversidad de sus aplicaciones en los sectores de las industrias químicas, empleando varios métodos de resolución de esta (Sánchez et al., 2003, p.186).

Las redes neuronales artificiales imitan al cerebro humano en el procesamiento de señales de entrada y las transforman en señales de salida. Proporciona un potente algoritmo de modelado que permite la no linealidad entre las variables de características y las señales de salida. RNA es un tipo de técnica de modelado no paramétrico, que es adecuada para fenómenos complejos cuyas funciones subyacentes los investigadores no conocen. En otras palabras, RNA puede aprender de los datos sin suposiciones de funciones específicas (Zhang, 2016, p.719).

Las redes neuronales artificiales pueden tener una o varias capas y consta de unidades de procesamiento (nodos o neuronas) que están interconectadas por un conjunto de pesos ajustables que permite que las señales viajen a través de la red consecutivamente. Generalmente, la RNA se puede dividir en tres capas de neuronas: entrada (recibe información), oculta (responsable de extraer patrones, realiza la mayor parte del procesamiento interno) y salida (produce y presenta salidas de red finales). Las funciones de transferencia, el algoritmo de aprendizaje y la arquitectura determinan el comportamiento general de la red neuronal artificial (Agatonovic-Kustrin y Beresford, 2000, p.258). Las redes neuronales artificiales están formadas por capas altamente

interconectadas de nodos simples. Las neuronas actúan como elementos de procesamiento no lineales dentro de la red neuronal (Willis et al., 1991, p.234).

En la construcción de la red neuronal se definen como datos de entrada la temperatura, relación de agua, peso molecular temperatura de ebullición, temperatura y presión críticas del líquido iónico, mientras que el parámetro de salida fue la densidad del líquido iónico. En este estudio, se utilizaron dos modelos de ANN inteligentes de uso común, a saber, el perceptrón multicapa ANN (MLP-ANN) y la función de base radial ANN (RBF-ANN) para predecir los datos de densidad experimental basados en parámetros de entrada. Para determinar el rendimiento óptimo de los modelos ANN, los puntos de datos se dividieron en tres subconjuntos, a saber, puntos de datos de entrenamiento, validación y prueba. El conjunto de trenes que incluye el 70% de los puntos de datos se utilizó para entrenar y construir los modelos. Los datos de validación (15% de todos los datos) se utilizaron para comprobar la capacidad de globalización y generalización de los modelos ANN durante la fase de entrenamiento. Los datos de prueba (15% de todos los datos) se utilizaron para determinar la calidad de los modelos ANN para predecir el patrón de datos invisibles (Najafi-Marghmaleki et al., 2016, p.359).

La eficacia y precisión de los modelos desarrollados depende en gran medida de la estructura de los modelos. Además, la evaluación de la estructura óptima para ambos modelos, que podría reproducir el conjunto completo de puntos de datos reales, es una tarea muy difícil. Sabiendo el hecho de que la relación entre los parámetros de entrada y salida es muy compleja, se utilizó una intrincada red de propagación de retroalimentación de múltiples capas. Estas redes exhiben grandes flexibilidades para mostrar mapeo no lineal entre los parámetros de entrada y salida. El error cuadrático medio y el coeficiente de correlación entre los valores reales y las predicciones del modelo se utilizaron para determinar la mejor estructura para los modelos ANN (You et al., 2018, p.234).

Los autores concluyen que la mejor estructura de red se obtuvo monitoreando el desempeño de la red. Como lo muestran los métodos estadísticos y gráficos, ambos modelos propuestos son precisos en la predicción de datos de densidad experimental, sin embargo, el modelo MLPANN mostró un mejor rendimiento en comparación con el modelo RBF-ANN debido a un coeficiente de correlación más alto ( $R^2$  MLP-ANN = 0,9992,  $R^2$  RBF-ANN = 0,9671) y valores inferiores de % AARD y valores RMSE (Najafi, Khosravi y Barati 2016, p.2).

La separación de mezclas de acetonitrilo-agua es un desafío y significa una tarea importante debido a la presencia de azeótropo, para lo cual se proponen tres alternativas de separación, incluida una energía eficiente estrategia de destilación extractiva (ED), una estrategia de destilación por cambio de presión (PSD) y una nueva estrategia de destilación azeotrópica (EAD). El diseño conceptual basado en diagramas de fase ternarios de varios solventes demuestra que el benceno es un solvente adecuado para el esquema EAD recientemente propuesto. La secuencia de separación y los parámetros operativos se optimizan mediante el uso de diferentes

procedimientos iterativos secuenciales actuales basados en el costo anual total mínimo (TAC). Bajo la guía del diagrama de temperatura-entalpía (TH), la integración de calor aplicada a estas tres secuencias significativas. Se completa poco a poco, lo que reduce el TAC en un 27,45%, 30,42% y 46,67%, respectivamente. La evaluación integral de las tres alternativas de separación desde las perspectivas económica y ambiental indica que el esquema EAD integrado en calor es más atractivo, ya que su TAC disminuye en un 52.03% y 55.30%, respectivamente, y compañía 2 las emisiones disminuyen en un 56,63% y un 61,63% en comparación con los esquemas ED y PSD. Vale la pena señalar que el diseño conceptual del esquema EAD también proporciona una energía eficiente alternativa para otros sistemas que forman azeótropos con agua (Qi et al. 2020, p.3371).

En la revisión de todos y cada uno de los artículos de investigación de alto impacto se puede identificar la falta de desarrollo en temas de simulación y predicción por redes neuronales en mezclas azeotrópicas en este caso acetonitrilo -agua.

## **2.2. Bases teóricas**

### **2.2.1. Azeótropos**

Los azeótropos son estados de equilibrio vapor-líquido (VLE) donde las composiciones son las mismas entre las dos fases coexistentes: es decir,

$$x_i = y_i \quad (\text{Ec 1-2})$$

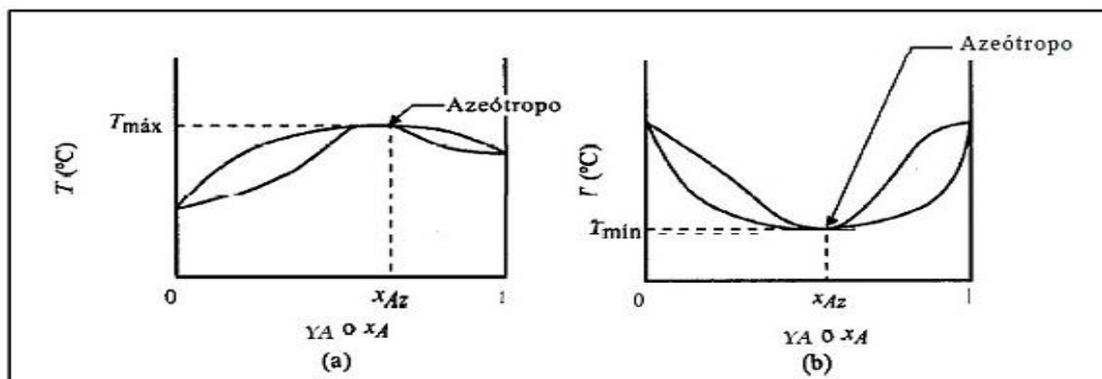
donde  $x_i$  y  $y_i$  son respectivamente las fracciones molares en fase líquida y en fase de vapor del componente  $i$ . Los azeótropos son causados por una fuerte desviación del comportamiento de mezcla ideal (descrito por la ley de Raoult) y plantea grandes desafíos para los procesos de separación. Las mezclas ideales o casi ideales se pueden diferenciar claramente de acuerdo con su volatilidad en función de la cual la separación se puede lograr de manera eficiente en los estados VLE (Vapor – Líquido en Equilibrio) mediante destilación simple. Sin embargo, esto ya no se aplica a los azeótropos donde las volatilidades de los componentes son las mismas. El diseño de un proceso de separación para azeótropos siempre comienza con datos VLE y un diagrama de fase, que se puede obtener mediante la experimentación, modelos termodinámicos y ecuaciones de estado. Los experimentos se vuelven difíciles en muchas circunstancias, como cuando están implicados productos químicos tóxicos o altas presiones, y suelen ser costosos y llevar mucho tiempo. Los modelos existentes se construyen típicamente mediante enfoques empíricos o semiempíricos y se aplican solo a grupos específicos de compuestos que comparten estructuras químicas similares. La falta de generalidad de esos modelos refleja nuestra comprensión limitada del origen molecular del fenómeno azeotrópico. Más allá de la predicción, la identificación de las interacciones moleculares responsables de la generación de los azeótropos también puede ayudar

a diseñar mejor sus procesos de separación, por ejemplo, a través de una selección más guiada de los agentes de entrenamiento utilizados en la destilación de azeótropos. En una mezcla estrictamente ideal, las interacciones intermoleculares entre moléculas diferentes son iguales a las interacciones entre moléculas de la misma especie y la presión de vapor de equilibrio sigue la ley de Raoult, así:

$$P = x_1P_{1sat}(T) + x_2P_{2sat}(T) \quad (\text{Ec 2-2})$$

Donde  $P_{isat}$  es la presión de vapor de la especie pura  $i$ . Un azeótropo ocurre cuando una fuerte desviación de la ley de Raoult da como resultado un mínimo o máximo local en la curva de presión de vapor versus fracción molar a temperatura constante. Una presión de vapor mínima se denomina azeótropo de ebullición máxima o negativa, que resulta de una mayor afinidad termodinámica entre las diferentes especies de la mezcla, lo que hace que la mezcla líquida sea más estable que la especie pura. Así mismo, un azeótropo de ebullición mínimo o positivo indica interacciones menos favorables y una mezcla líquida menos estable. Los azeótropos de mezclas binarias se han estudiado extensamente durante décadas con conjuntos de datos experimentales bien establecidos y modelos termodinámicos en la literatura (como Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC) (Li et al., 2020, p.235).

Si la mezcla tiene un comportamiento de equilibrio vapor-líquido no ideal puede formar un azeótropo, que es una mezcla de componentes químicos con composiciones idénticas de fases líquidas y de vapor en equilibrio (Hosgor et al., 2014, p.166). Para superar esta dificultad, se han aplicado algunos procesos especiales de destilación, como la destilación por oscilación de presión (PSD), la destilación extractiva (DE) y la destilación azeotrópica (AD) (Chen et al., 2018, p.57).



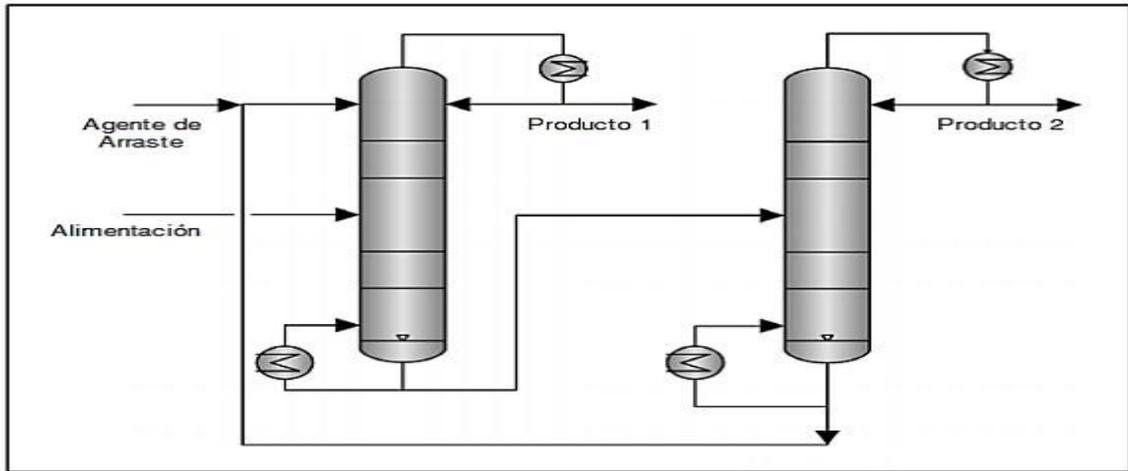
**Figura 1-2.** Diagramas de equilibrio del punto de ebullición. (a) azeótropo de ebullición máxima. (b) azeótropo de ebullición mínima.

Fuente: (Geankoplis, 1982, p.137).

### 2.2.2. Destilación Extractiva

Para la separación de mezclas homogéneas de ebullición cercana o azeotrópicas, podría usarse la destilación extractiva. Se añade un líquido de baja volatilidad a la mezcla como agente de arrastre

para aumentar la volatilidad en toda la región de concentración al disminuir la presión parcial o la volatilidad de un componente. El agente de arrastre tiene que cumplir muchas propiedades diferentes. El punto de ebullición del entrenador debe ser mucho más alto que los puntos de ebullición de los otros componentes, debe ser termoestable, barato y no tóxico, por mencionar solo las características principales (Klein, 2008, p.30).



**Figura 2-2.** Planta de destilación extractiva.

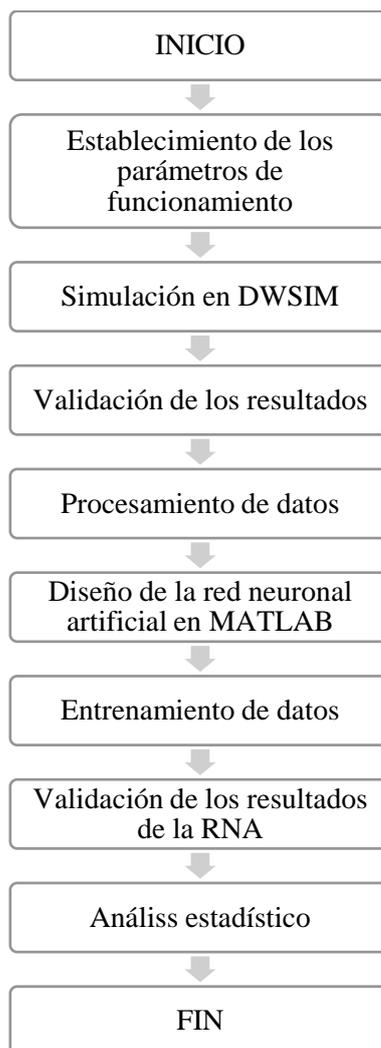
Fuente: (Klein, 2008, p.30).

## CAPÍTULO III

### 3. METODOLOGÍA

#### 3.1. Etapas de la metodología

Partiendo de la revisión bibliográfica realizada en el capítulo II, la metodología para la realización de la simulación será la siguiente:



**Gráfico 1-3.** Metodología del trabajo de titulación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

El presente trabajo de titulación presentada como propuesta tecnológica, incluye la simulación de un proceso de separación de una mezcla de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva y posteriormente, el modelado de una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir las composiciones a las salidas de las columnas de destilación utilizadas en la simulación, por lo tanto, la investigación presenta un enfoque cuantitativo ya que emplea como punto de partida una

base de datos numéricos provenientes de la simulación en DWSIM, de manera que se pueda alimentar a la red para su entrenamiento y aprendizaje.

También se lleva a cabo el análisis estadístico correspondiente para los resultados obtenidos como una técnica de interpretación y validación, proporcionando una comparación entre los valores obtenidos en la simulación de DWSIM y los valores predichos por la red neuronal artificial (RNA), obteniendo su grado de error y confiabilidad. Además, se realiza un análisis de sensibilidad para la obtención de pares de datos usados en el entrenamiento de la RNA.

Toda información recopilada para la literatura y desarrollo del presente trabajo proviene de:

Fuente primaria:

Conocimientos y valores experimentales obtenidos de la simulación en DWSIM y procesamiento de datos usando EXCEL y MATLAB.

Fuente secundaria:

- Artículos científicos de alto impacto Q1 y Q2 publicadas en revistas indexadas.
- Libros digitales afines al tema.
- Sitios web oficiales de los softwares utilizados en la investigación.

### 3.2. Establecimiento de parámetros de funcionamiento

La base de la información para llevar a cabo la simulación en DWSIM proviene del artículo científico titulado como: *Rigorous design and simultaneous optimization of extractive distillation systems considering the effect of column pressure*, mismo que fue propuesto por Chengtian Cui, Jinsheng Sun (2019) de la Escuela de Ingeniería y Tecnología Química, Universidad de Tianjin, China.

#### 3.2.1. Generalidades del proceso

Una alimentación de azeótropo (acetonitrilo-agua) ingresa a la columna de destilación, para su separación. El producto obtenido es recuperación del solvente etilenglicol y la separación del acetonitrilo-agua (Cui y Sun, 2019).

Para la simulación se usa tres columnas de destilación, para lo cual se tiene:

**Tabla 1-3.** Condiciones operativas iniciales para el sistema de estudio.

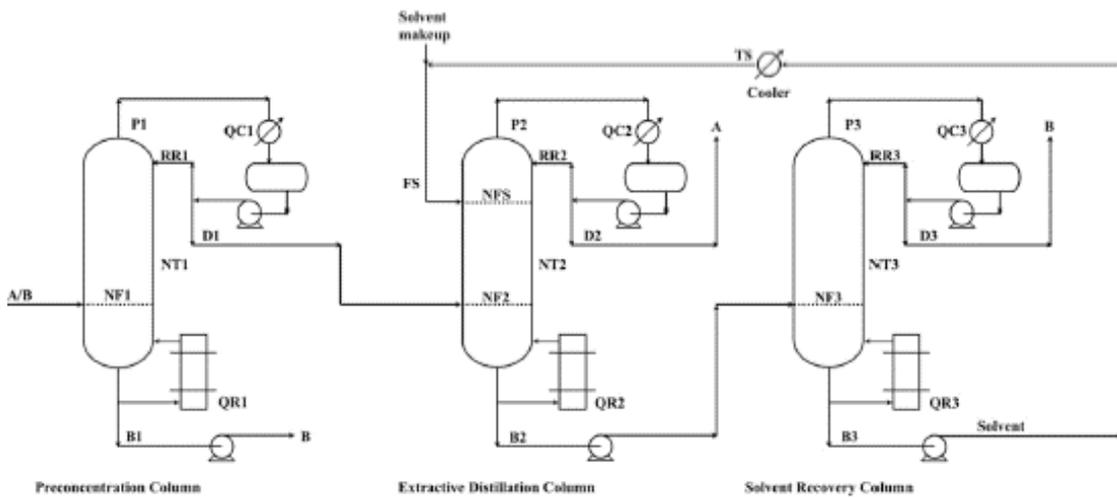
PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Presión columna 1	0,837488	Atm
Presión columna 2	0,384311	Atm
Presión columna 3	0,102004	Atm

Caudal del destilado C1	152,9765	Kmol/h
Número de platos totales C1	16	-
Número de plato de alimentación C1	11	-
Número total de platos C2	42	-
Número de plato de alimentación C2	31	-
Número de plato de alimentación del solvente C2	9	-
Número de platos totales C3	12	-
Número de plato de alimentación C3	6	-
Caudal del solvente de recirculación	116,7155	Kmol/h
Temperatura de alimentación del solvente	63,58749	C

Fuente: (Cui y Sun, 2019)

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Las purzas deseadas del producto son 99,99 % en moles de acetonitrilo y 99,99% en moles de agua en las columnas de extracción y recuperación, respectivamente.



**Figura 1-3.** Esquema de la secuencia de destilación extractiva de acetonitrilo-agua.

Fuente: (Cui y Sun, 2019, p.74).

### 3.2.2. Secuencia directa convencional

En la Figura 2-3. se muestra una secuencia directa de columnas de destilación extractiva utilizada para separar acetonitrilo- agua.

Parte del agua de la mezcla sale por el fondo de la columna de preconcentración, haciendo que en la segunda columna se alimente etilenglicol como solvente para la destilación extractiva. Obteniendo así el acetonitrilo como destilado en la segunda columna con una pureza del 99,99%

en moles y en el dónde agua, etilenglicol y trazas del acetonitrilo. La mezcla del fondo de la columna de destilación extractiva (C2) separa el agua en el destilado con una concentración en moles de 99,99% y en el fondo se recupera el etilenglicol, solvente alimentado a la columna 2.

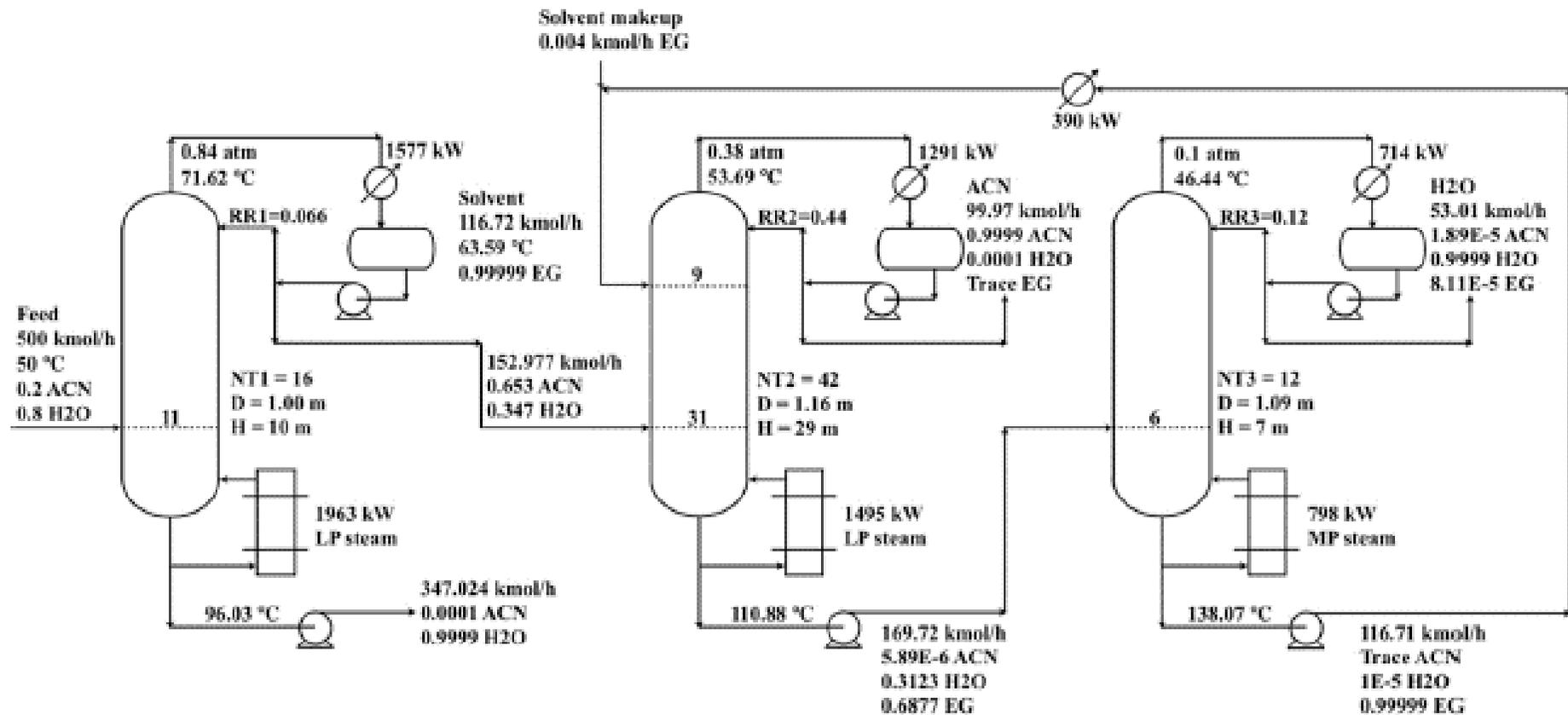


Figura 2-3. Separación de acetonitrilo-agua en destilación extractiva usando etilenglicol como solvente.

Fuente: (Cui y Sun, 2019, p.75) .

### 3.2.2.1. Parámetros de funcionamiento de la columna de preconcentración

**Tabla 2-3.** Condiciones operativas de la columna de preconcentración.

PARÁMETROS	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	0,837488	Atm
Número de platos totales de la columna	16	-
Número de plato de entrada de alimentación	11	-
Producción de acetonitrilo (destilado)	65,3	%
Producción de agua (destilado)	34,7	%
Flujo molar del destilado	152,977	Kmol/h
Flujo molar del fondo	347,024	Kmol/h
Carga térmica en el condensador	1577	kW
Carga térmica en el reboiler	1963	kW

Fuente: (Cui y Sun, 2019, p.75)

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

La alimentación a la columna de preconcentración tiene un porcentaje en moles de 20% de acetonitrilo y 80% de agua. Se alimenta 500 Kmol/h de la mezcla azeotrópica a 50 C.

### 3.2.2.2. Parámetros de funcionamiento de la columna de extracción

**Tabla 3-3.** Condiciones operativas de la columna extractiva.

PARÁMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
Presión	0,384311	Atm
Número de platos de la columna	42	-
Número de plato de alimentación	31	-
Número de plato de entrada de solvente.	9	-
Flujo de solvente	116,72	Kmol/h
Producción de Acetonitrilo (destilado)	99,99	%
Producción de agua (destilado)	0,01	%
Producción de etilenglicol (destilado)	Trazas	%
Flujo molar del destilado	99,97	Kmol/h
Flujo molar de fondo	169,72	Kmol/h
Carga térmica en el condensador	1291	kW
Carga térmica en el reboiler	1495	kW

Fuente: (Cui y Sun, 2019, p.75).

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la presente columna de extracción, se alimenta la mezcla de azeótropos obtenidas de la destilación de la primera columna. Además, se alimenta etilenglicol como solvente para la separación de la mezcla.

También se debe mencionar que se obtiene la separación del acetonitrilo con una pureza del 99,99% en el destilado y en los fondos aún existe trazas de este.

### 3.2.2.3. *Parámetros de funcionamiento de la columna de recuperación*

**Tabla 4-3.** Condiciones operativas de la columna de recuperación.

<b>PARÁMETRO</b>	<b>CANTIDAD</b>	<b>UNIDAD</b>
<b>Presión</b>	0,102004	atm
<b>Número de platos de la columna</b>	12	-
<b>Número de plato de alimentación</b>	6	-
<b>Producción de agua (destilado)</b>	99,99	%
<b>Producción de etilenglicol (fondo)</b>	99,99	%
<b>Flujo molar del destilado</b>	53,01	Kmol/h
<b>Flujo molar del fondo</b>	116,71	Kmol/h
<b>Carga térmica en el condensador</b>	714	kW
<b>Carga térmica en el rebolier</b>	798	kW

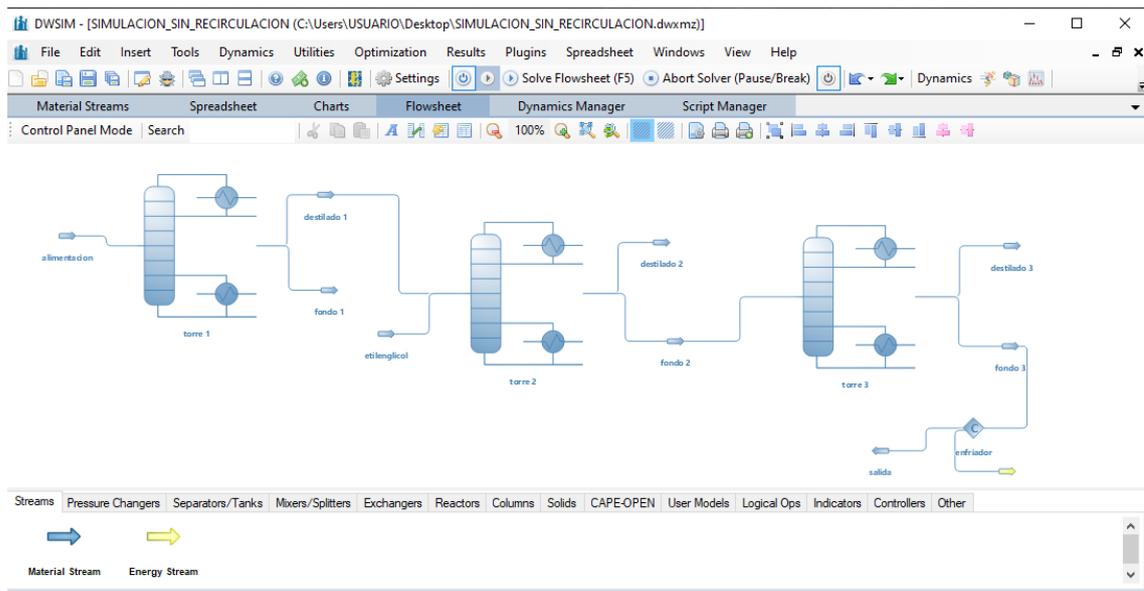
Fuente: (Cui y Sun, 2019, p.75).

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Esta columna se encarga de la separación del agua y el solvente, teniendo como productos de destilado el agua y de fondo el solvente. El solvente se lo hace recircular a la columna de extracción, para no tener pérdidas. Además, en el producto de fondo se obtiene porcentajes de la mezcla azeotrópica.

### 3.3. Simulación en DWSIM

En esta parte se emplean las condiciones de funcionamiento especificadas y que están presentes en las Tablas 2-3, 3-3 y 4-3 como base para la simulación de la separación del acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva en el software libre DWSIM.



**Figura 3-3.** Flowsheet de la simulación en DWSIM

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Las columnas empleadas en el presente proceso corresponden al modelo de “ChemSep Column”. A su vez se ha empleado el modelo termodinámico NRTL durante la ejecución de la simulación de la investigación.

Todas las líneas de flujo y torres de destilación operan con el modelo termodinámico mencionado con anterioridad, debido que al combinar modelos termodinámicos no se obtuvo buenos resultados en la ejecución de la simulación.

**Tabla 5-3.** Parámetros operativos utilizados durante la simulación en DWSIM.

PARÁMETROS	ENTRADA	COLUMNA 1	COLUMNA 2	COLUMNA 3
<b>Presión (atm)</b>	1	0,84	0,38	0,1
<b>Temperatura (C)</b>	50	-	-	-
<b># de platos</b>	-	16	42	12
<b># plato de alimentación</b>	-	11	31	6
<b>% acetonitrilo</b>	20	-	-	-
<b>% agua</b>	80	-	-	-
<b>Flujo molar de la corriente (Kmol/h)</b>	500	-	-	-

<b>Flujo molar del destilado (Kmol/h)</b>	-	152,977	99,97	53,01
<b>Flujo molar del fondo (Kmol/h)</b>	-	347,024	169,88	116,71

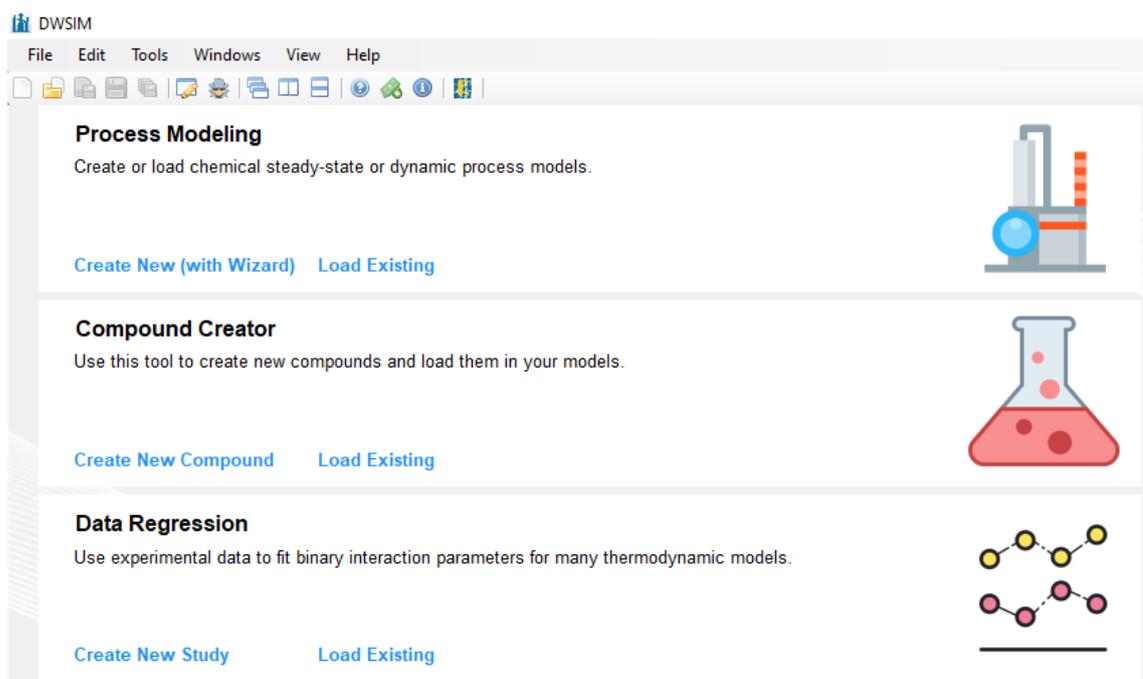
**Nota:** Los espacios que se encuentra con el signo (-) corresponden a parámetros calculados por el simulador o no aplican en la sección.

**Fuente:** (Cui y Sun, 2019, .p.75)

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

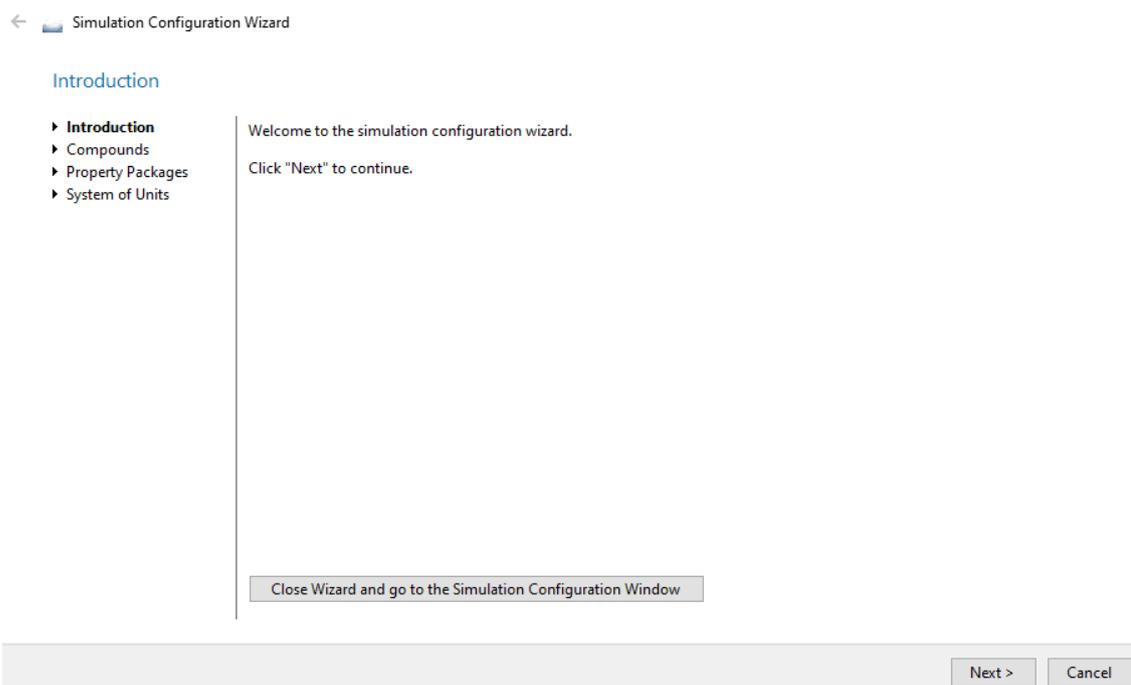
Las condiciones señaladas en la Tabla 5-3 corresponde a los valores ingresados en el simulador DWSIM para realizar el proceso. Se debe mencionar que las columnas de ChempSep requieren la especificación solo de dos parámetros de funcionamiento adicional al valor de presión.

En la presente investigación el autor del proyecto prueba y determina las condiciones que son óptimas para el funcionamiento de la simulación.



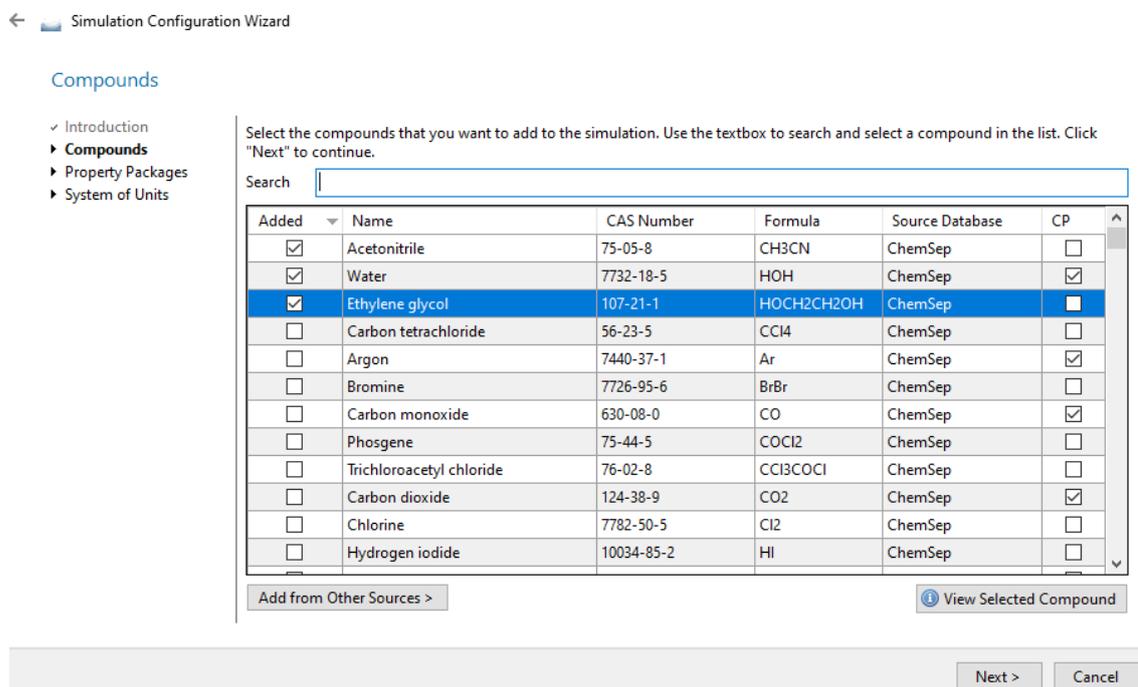
**Figura 4-3.** Ventana principal del simulador DWSIM.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.



**Figura 5-3.** Ventana de introducción a la simulación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 6-3.** Panel de selección de componentes en DWSIM.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

## Property Packages

- ✓ Introduction
- ✓ Compounds
- ▶ **Property Packages**
- ▶ System of Units

Select and Add the Property Packages that you want to use in your simulation. The first on the list will be used by default by all flowsheet objects. Click "Next" to continue.

Available Property Packages		Added Property Packages	
Black Oil		Name	Type
CAPE-OPEN		NRTL (1)	NRTL
Chao-Seader			
CoolProp			
CoolProp (Incompressible Fluids)			
CoolProp (Incompressible Mixtures)			
Electrolyte NRTL (Aqueous Electrolytes)			
Extended UNIQUAC (Aqueous Electrolytes)			
Grayson-Streed			
IAPWS-08 Seawater			
Lee-Kesler-Plöcker			
Modified UNIFAC (Dortmund)			
Modified UNIFAC (NIST)			
<b>NRTL</b>			
Peng-Robinson (PR)			
Peng-Robinson / Lee-Kesler (PR/LK)			
Peng-Robinson-Stryjek-Vera 2 (PRSV2-M)			
Add			

[Click here to get help on selecting the best Thermodynamic Model/Property Package for your system.](#)

[Click here to learn which methods and correlations are being used by the packages to calculate fluid properties.](#)

Next > Cancel

**Figura 7-3.** Panel de selección del modelo termodinámico en DWSIM.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

## System of Units

- ✓ Introduction
- ✓ Compounds
- ✓ Property Packages
- ▶ **System of Units**

Select the desired System of Units for your simulation. You can change individual units by selecting a custom system (other than SI, CGS or ENG).

Click "Finish" to exit the wizard and start designing the simulation model.

System of Units: UNID\_9909 Clone Create

Property	Unit	Property	Unit
Temperature	C	Pressure	bar
Mass Flow Rate	kg/h	Molar Flow Rate	kmol/h
Volumetric flow rate	m <sup>3</sup> /h	Specific Enthalpy	kJ/kg
Specific Entropy	kJ/[kg.K]	Molecular Weight	kg/kmol
Density	kg/m <sup>3</sup>	Surface Tension	N/m
Heat Capacity	kJ/[kg.K]	Thermal Conductivity	W/[m.K]
Kinematic Viscosity	cSt	Dynamic Viscosity	cP
Delta-T	C.	Delta-P	kgf/cm <sup>2</sup>
Length/Head	m	Energy Flow	kW
Time	h	Volume	m <sup>3</sup>
Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	Area	m <sup>2</sup>
Diameter/Thickness	mm	Force	N

Finish Cancel

**Figura 8-3.** Panel de selección de unidades en DWSIM.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.3.1. Especificación de la columna 1

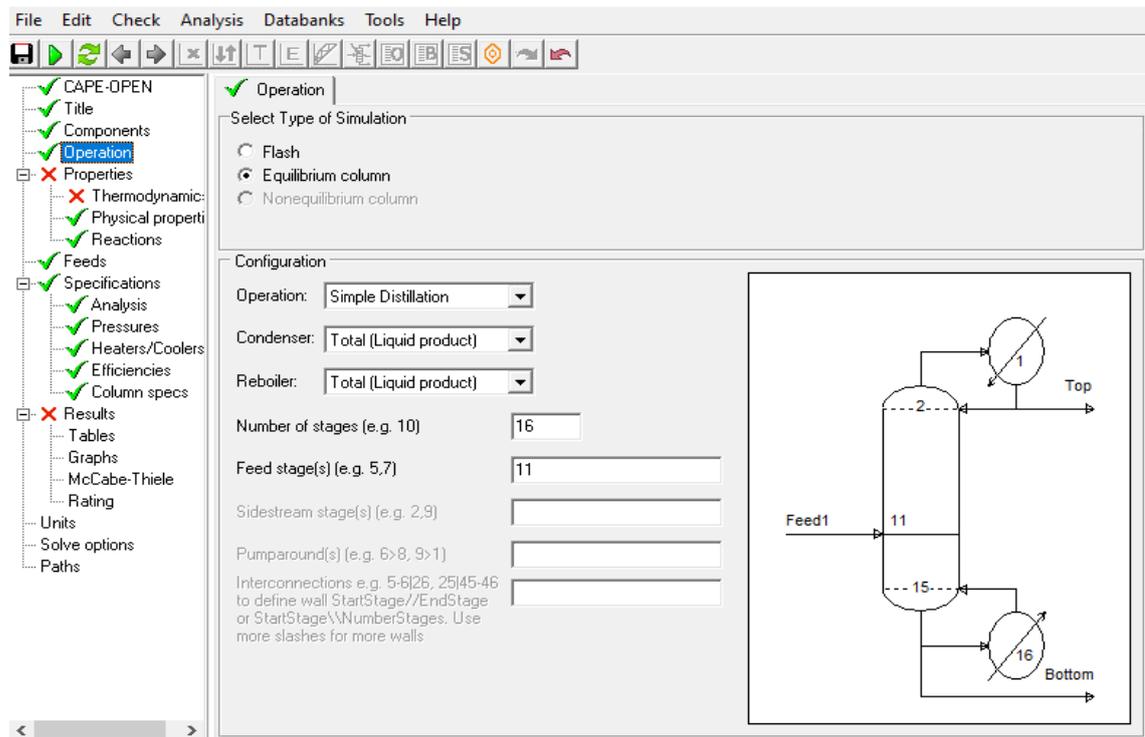


Figura 9-3. Especificaciones de la configuración de la columna 1.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

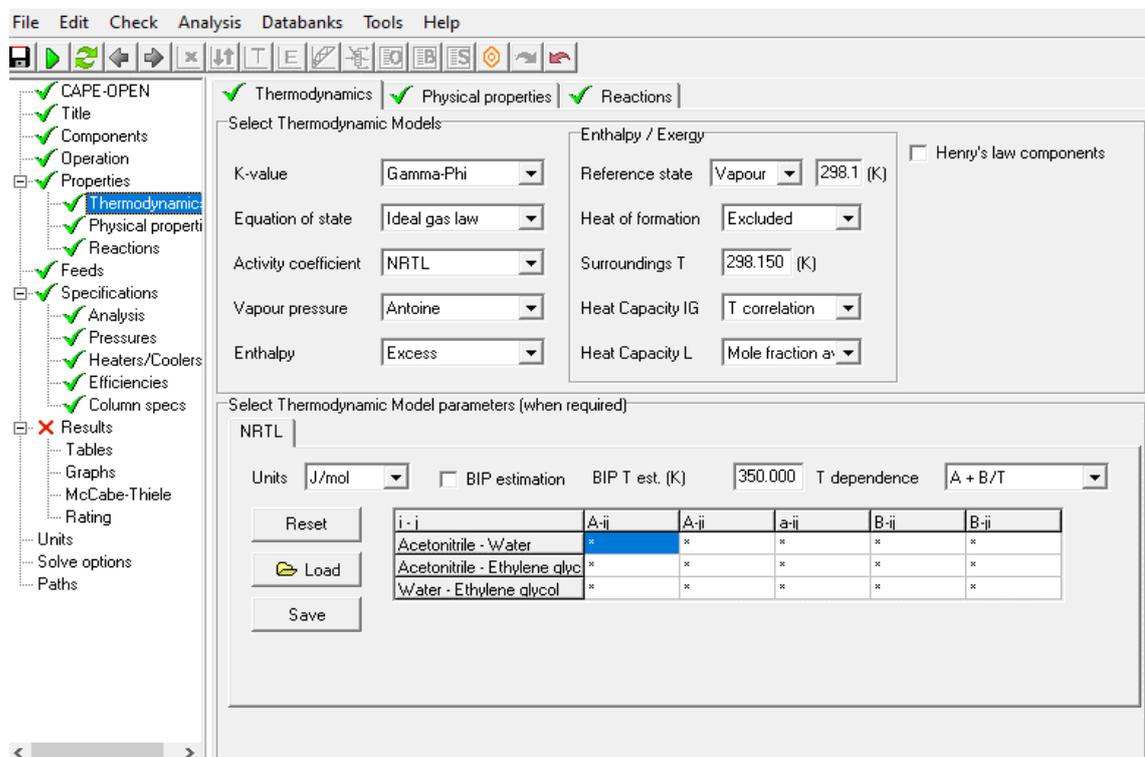
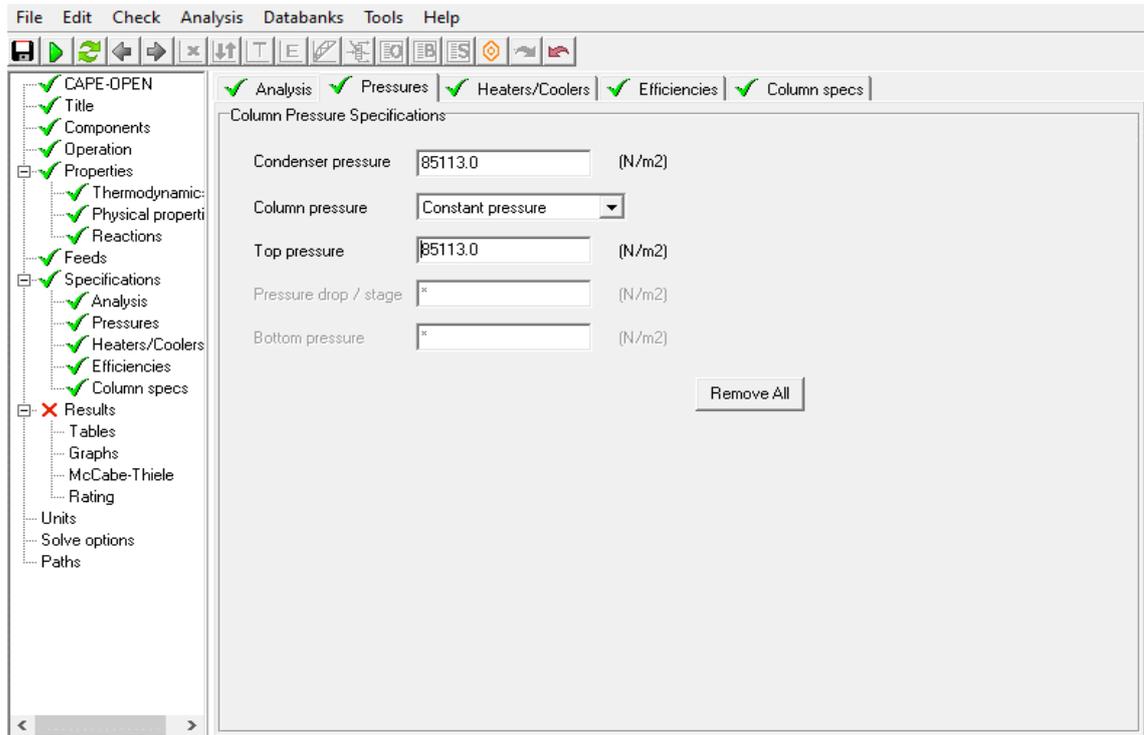


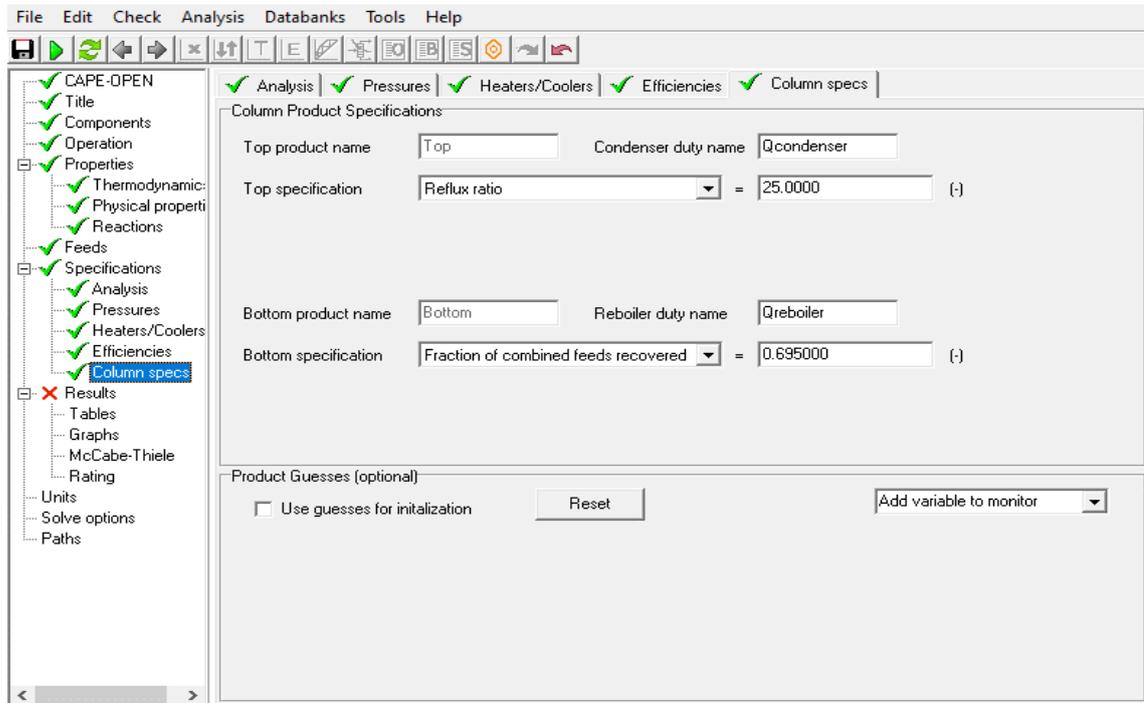
Figura 10-3. Panel de selección del modelo termodinámico de la columna 1.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 11-3.** Panel de especificación de la presión de la columna 1.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 12-3.** Especificaciones del producto de la columna 1.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.3.2. Especificaciones de la columna 2

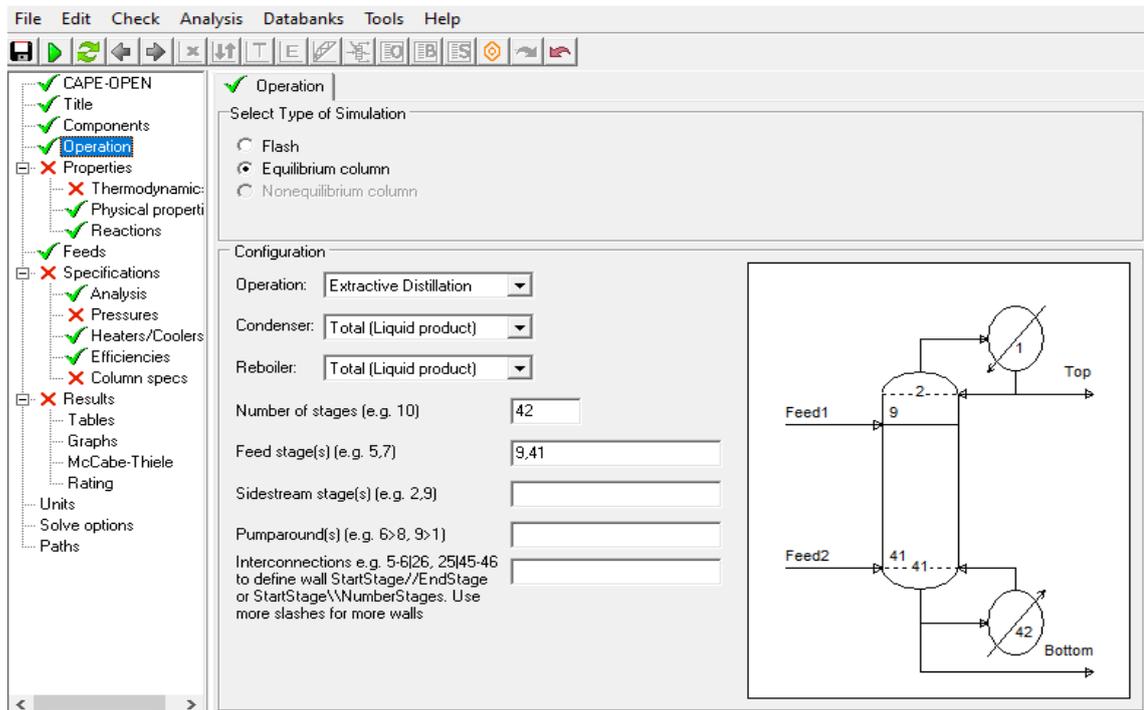


Figura 13-3. Especificaciones de operación de la columna 2.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

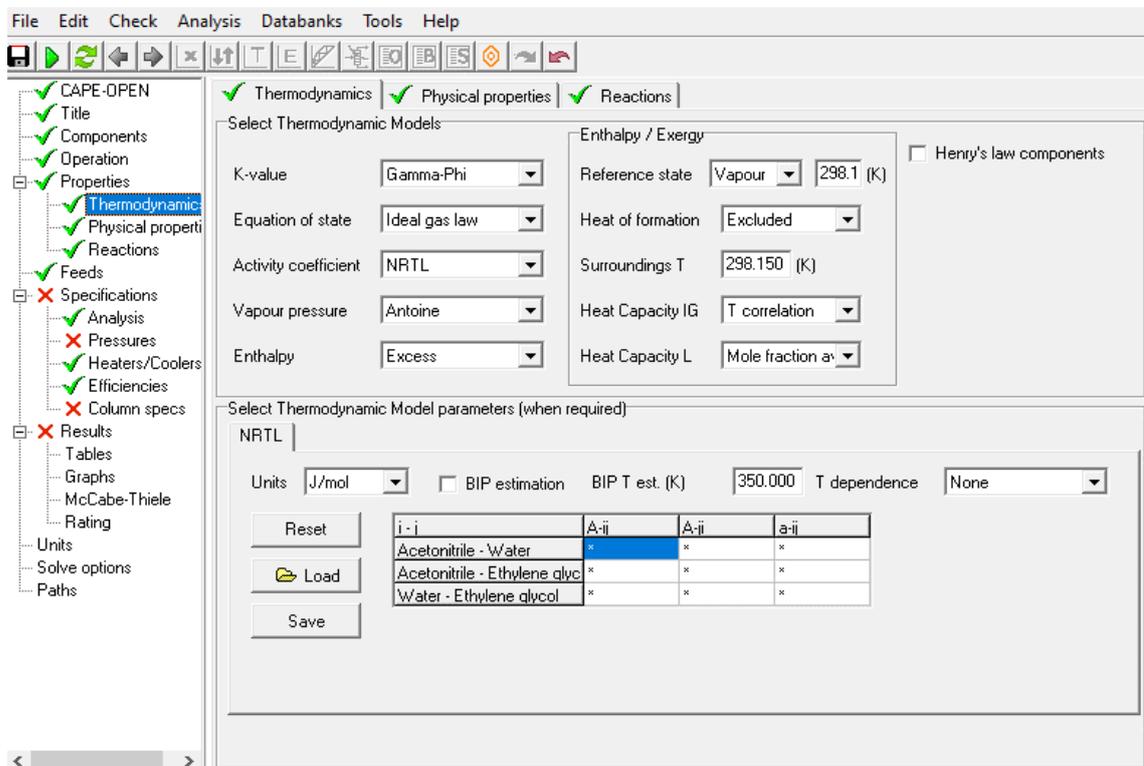
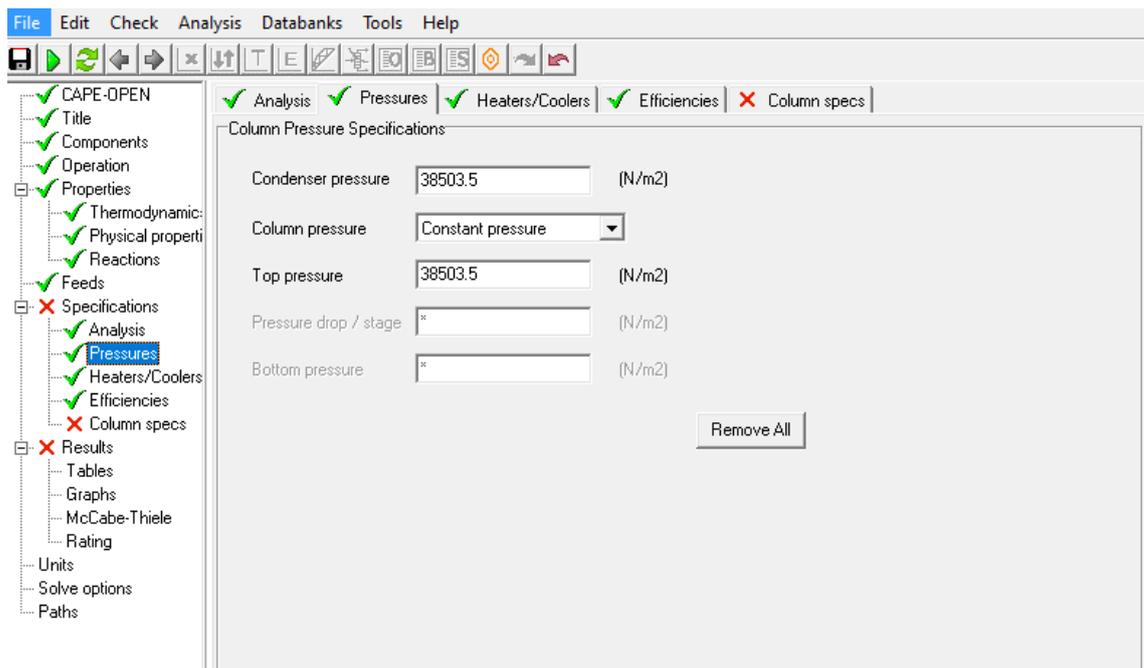


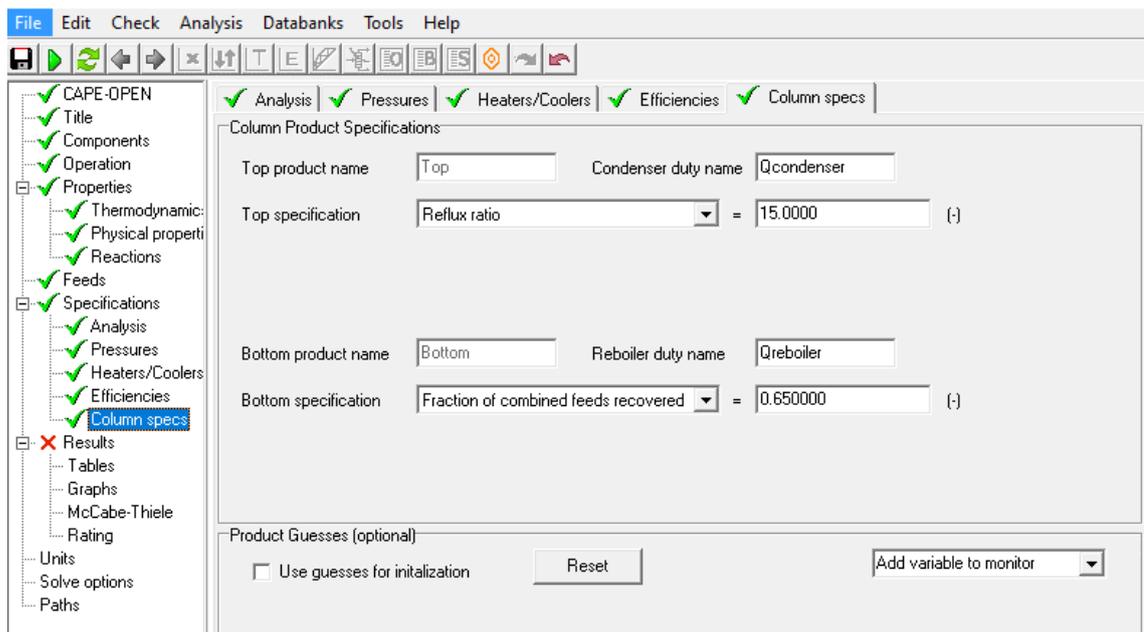
Figura 14-3. Especificaciones del modelo termodinámico de la columna 2.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 15-3.** Especificaciones de la presión de la columna 2.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 16-3.** Especificaciones del producto de la columna 2.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.3.3. Especificaciones de la columna 3

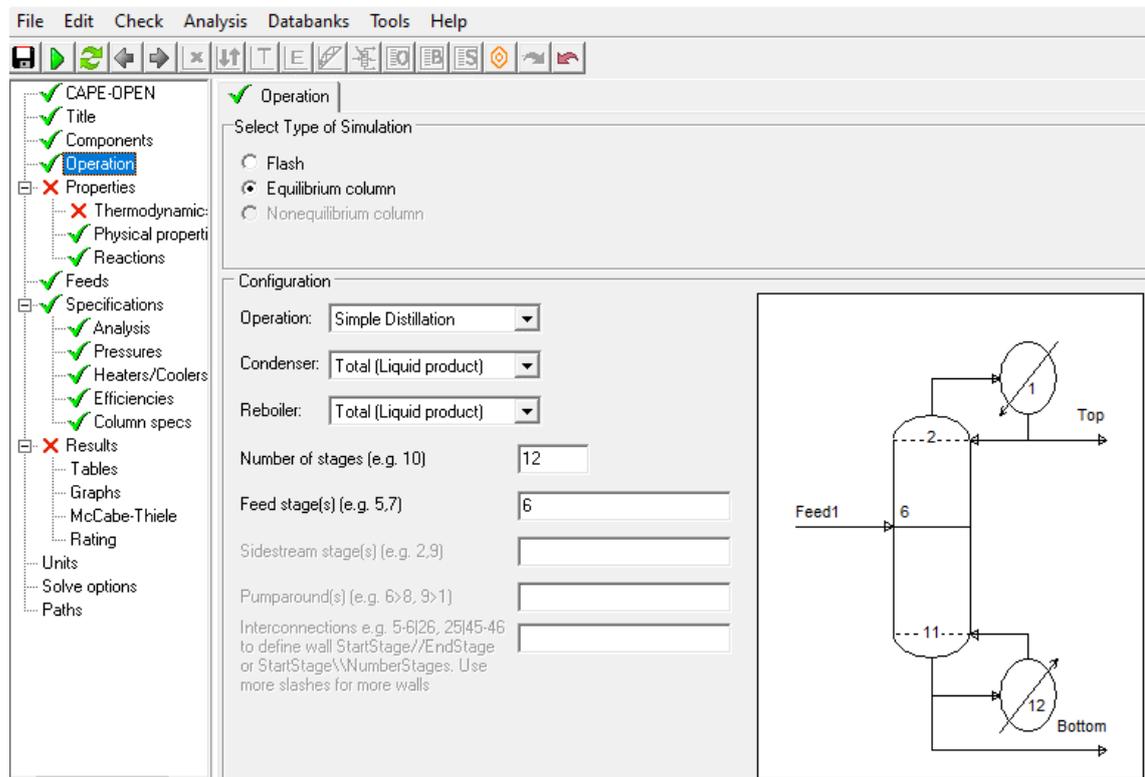


Figura 17-3. Especificaciones de operación de la columna 3.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

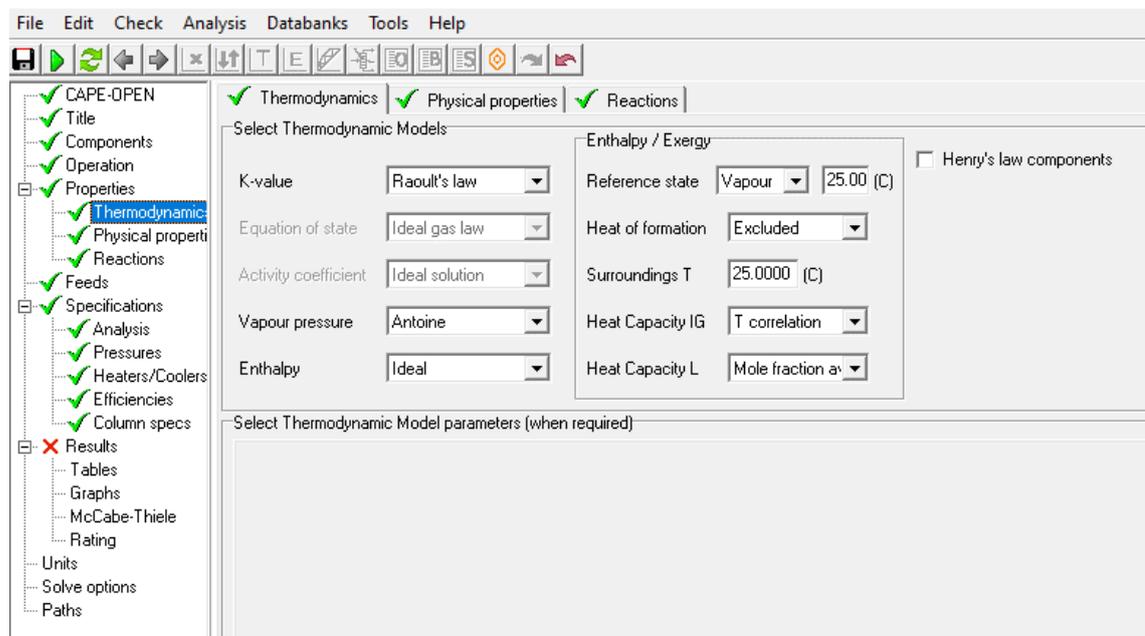
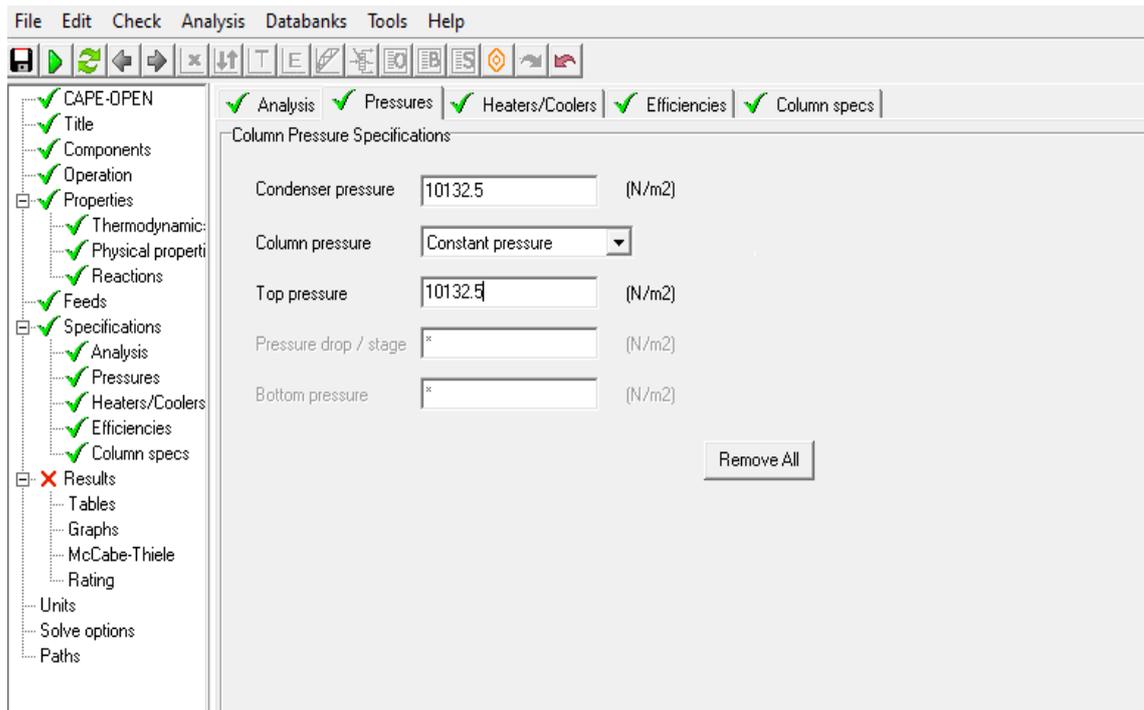


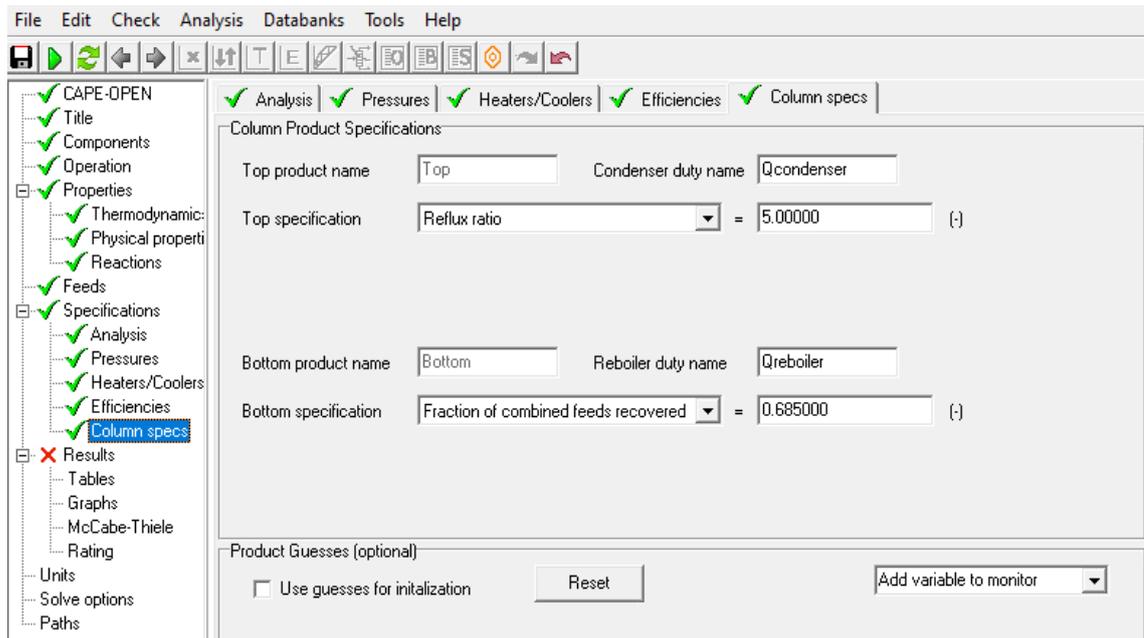
Figura 18-3. Especificaciones de los modelos termodinámicos de la columna 3.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 19-3.** Especificaciones de las presiones de la columna 3.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 20-3.** Especificaciones del producto de la columna 3.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.3.4. Especificaciones de los flujos

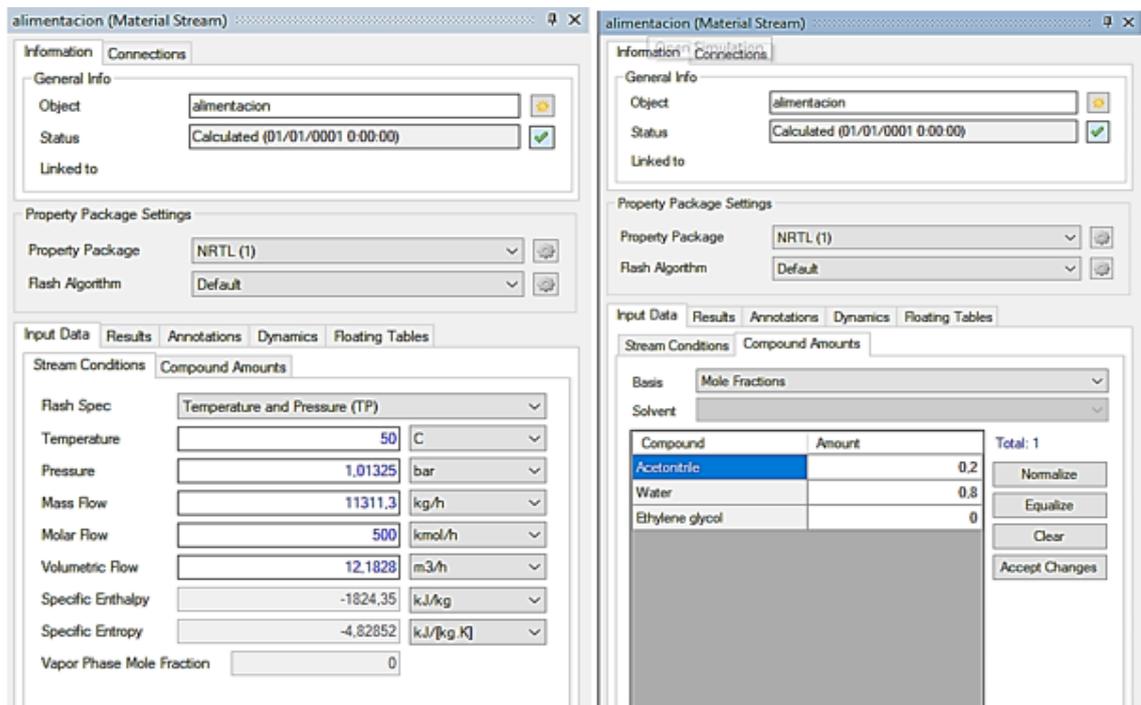


Figura 21-3. Especificaciones del flujo de alimentación al proceso.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

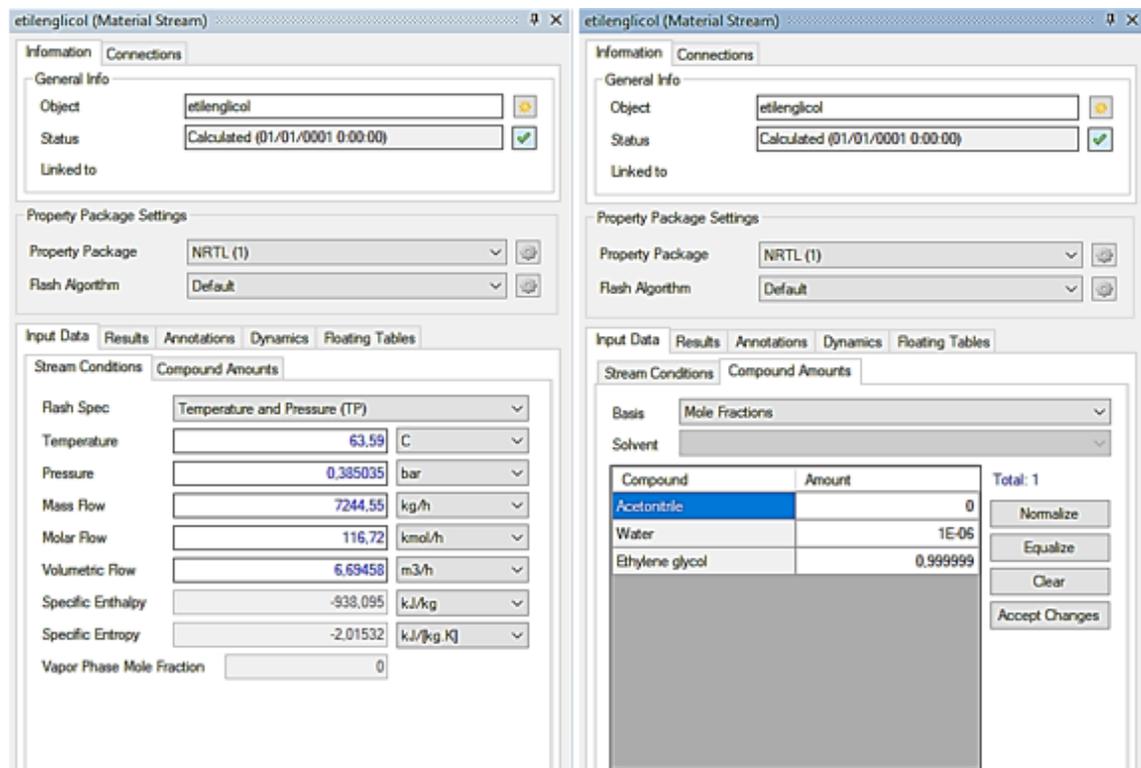
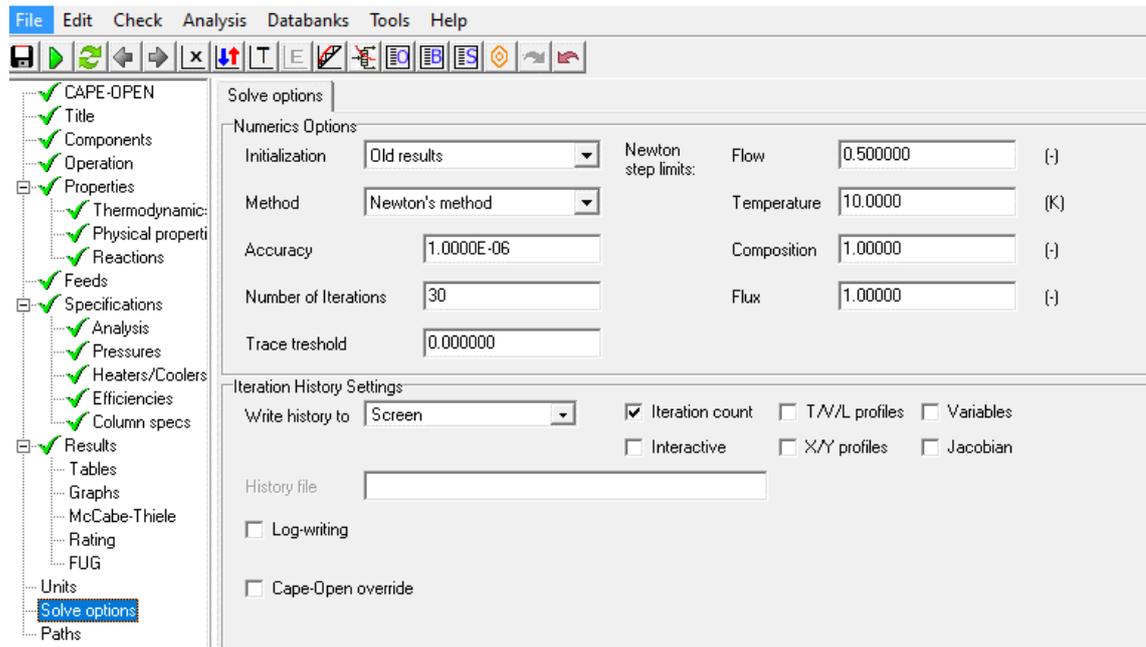


Figura 22-3. Especificaciones del flujo de alimentación del etilenglicol.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 23-3.** Opciones numéricas de solución.

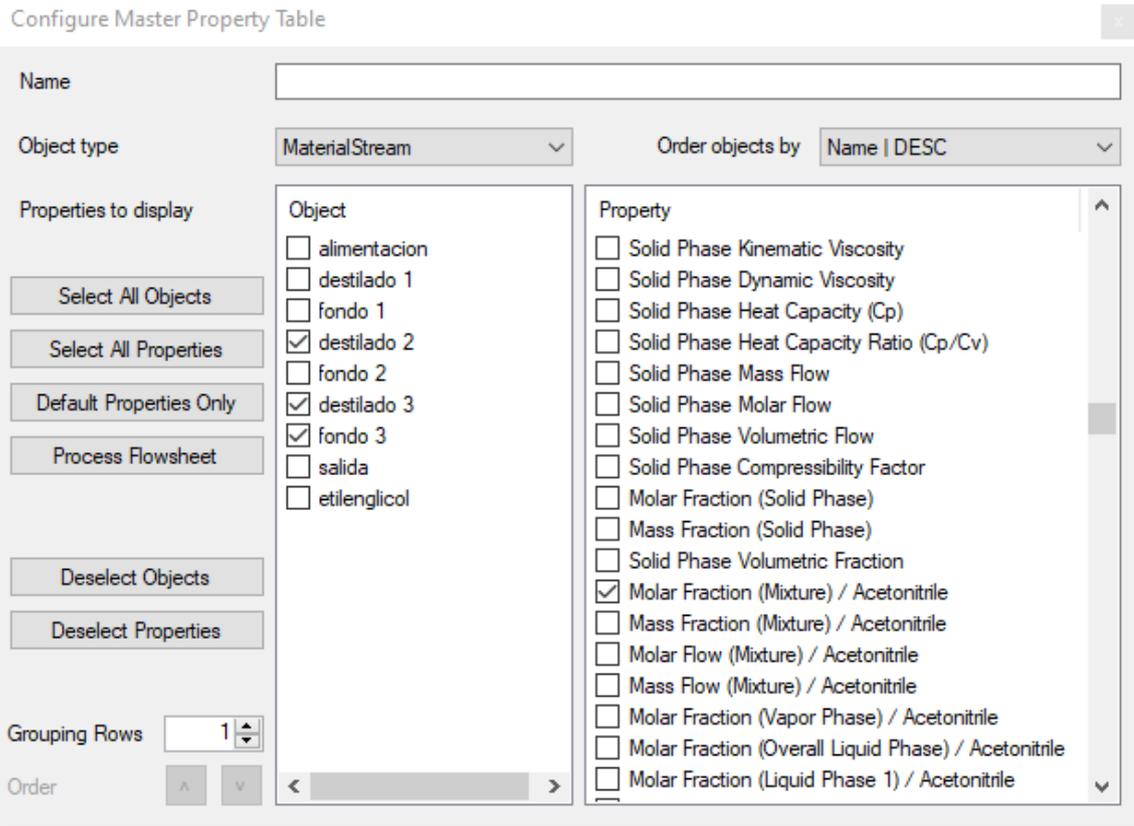
**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

Como se puede observar en la Figura 23-3, el método matemático empleado por el simulador en el presente proceso es “Newton’s method” y el número de iteraciones por defecto del simulador se estableció 30.

También se debe mencionar que en la presente simulación no se consideró la recirculación, debido que no se pudo establecer una combinación óptima de modelos termodinámicos y con el modelo utilizado (NRTL) la ejecución de la simulación alteraba los resultados óptimos obtenidos en el artículo basado, por esta razón se realizó sin recirculación para que los resultados sean validados.

### 3.4. Validación de resultados de la simulación

Los resultados obtenidos en la simulación en DWSIM como; fracciones molares de los componentes (acetonitrilo, agua y etilenglicol) se comparan con los valores definidos en bibliografía, a fin de validar los resultados obtenidos en la presente investigación. Se tomó solo las fracciones molares debido que se tiene como finalidad obtener las mismas composiciones de este (Véase en la Tabla 6-4 y 7-4 en la sección de resultados)

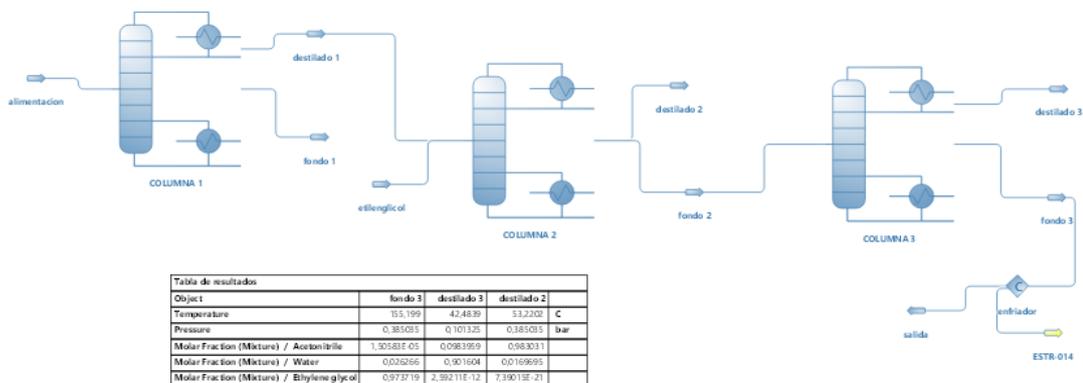


**Figura 24-3.** Panel de configuración de la tabla de resultados en DWSIM.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

Como se puede observar en la Figura 24-3, DWSIM permite ingresar que corrientes se muestre en la tabla y con diferentes propiedades que nos interese, estas pueden ser ingresadas o calculadas por el simulador. Obteniendo así una tabla con todos los resultados que se desee observar.

Como se muestra en la Figura 25-3, la simulación realizada y la tabla de resultados obtenido con las especificaciones que deseamos.



**Figura 25-3.** Interfaz de la simulación en DWSIM con sus resultados.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

### 3.5. Análisis de sensibilidad

En la Tabla 6-3, se mostrarán varias variables con sus respectivos valores obtenidos de la simulación, esto servirá para la selección de las variables de entrada a la red neuronal. Las variables que se tomaran en cuenta son; temperatura de alimentación, fracción molar del acetonitrilo, fracción molar del etilenglicol, presión de la columna 1, fracción del agua y temperatura del etilenglicol.

**Tabla 6-3.** Análisis de sensibilidad.

Entradas		Salidas		
Variable	Rango	Fracción del Acetonitrilo	Fracción del Agua	Fracción del Etilenglicol
Temperatura de alimentación (°C)	40-60	0,983043-0,983018	0,901602-0,901606	0,973719-0,973718
Fracción del Agua (Alimentación)	0,7-0,9	1-0,902538	0,754301-0,911440	0,986079-0,963424
Fracción del Acetonitrilo (Alimentación)	0,1-0,3	0,57281-1	0,947599-0,631066	0,921754-0,994762
Presión de la columna 1 (atm)	0,1-1	0,998885-0,978195	0,895595-0,903170	0,973716-0,972718
Temperatura del etilenglicol (°C)	50-80	0,983280-0,982713	0,902030-0,901062	0,973719-0,973719
Fracción del Etilenglicol	0,7-0,99	0,999980-0,983030	0,715818-0,901604	0,748254-0,973719

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

- Se optó trabajar con una pureza del etilenglicol, debido que no se considera la recirculación al final del proceso.
- En el presente análisis de sensibilidad no se aprecia variación en los resultados, por tal motivo se optimo por la combinación de tres variables.

Nota: El presente análisis de sensibilidad sirvió para comprender que variables son las consideradas las importantes en la presente investigación.

### 3.6. Procesamiento de datos

Finalizado y validado la simulación en DWSIM, la generación de datos para el diseño de la red neuronal se lleva a cabo realizando una variación de datos en el proceso, eso puede ser las veces que sean necesarios. Además, estos valores serán las entradas para la red neuronal.

**Tabla 7-3.** Parámetros de entrada a la RNA.

<b>ENTRADAS</b>				
<b>PARÁMETRO</b>	Temperatura	Fracción del acetoniitrilo	Fracción del etilenglicol	Presión
<b>DETALLES</b>	°C (Columna 1)	Adimensional (Columna 2)	Adimensional (Columna 3)	Atm (columna 1)
<b>IDENTIFICACIÓN</b>	T	$X_{ACN}$ (E)	$X_{EG}$ (E)	P

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

**Tabla 8-3.** Parámetros de salida de la RNA.

<b>SALIDA</b>			
<b>UBICACIÓN</b>	<b>COLUMNA 2</b>	<b>COLUMNA 3</b>	
	Destilado	Destilado	Fondo
<b>FRACCIONES MOLARES</b>	Acetonitrilo	Agua	Etilenglicol
<b>IDENTIFICACIÓN</b>	$X_{ACN}$ (S)	$X_{H2O}$ (S)	$X_{EG}$ (S)

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la presente sección se analiza y genera un conjunto de datos aleatorios, obtenidos mediante el software Excel. Se obtuvo una combinación de datos aleatorios de 100 pares distintos, mismos que serán usados para el entrenamiento y aprendizaje de la RNA.

**Tabla 9-3.** Restricciones para las entradas de la RNA.

<b>RESTRICCIONES</b>				
<b>PARÁMETRO</b>	Temperatura	Fracción del acetoniitrilo	Fracción del etilenglicol	Presión
<b>DETALLES</b>	°C (Columna 1)	Adimensional (Columna 2)	Adimensional (Columna 3)	Atm (columna 1)
<b>RANGO</b>	40-60	0,1-0,3	0,7-0,99	0,1-1

**Nota:** Los rangos establecidos se debe respetar, ya que al combinar y simular el programa de DWSIM no ejecuta.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

**Tabla 10-3.** Bases de datos generados para la RNA.

<b>T (°C)</b>	<b>X<sub>ACN</sub>(E)</b>	<b>X<sub>EG</sub>(E)</b>	<b>P (atm)</b>	<b>X<sub>ACN</sub>(S)</b>	<b>X<sub>EG</sub>(S)</b>	<b>X<sub>H2O</sub>(S)</b>
56	0,27	0,82	39550,8	0,99998	0,79845	0,28260
57	0,30	0,92	65728,4	0,99999	0,89582	0,05077
57	0,24	0,84	42618,9	0,99998	0,81792	0,55156
53	0,24	0,75	32770,5	0,99997	0,73029	0,54681
50	0,30	0,81	65716,3	0,99998	0,78871	0,05367
45	0,18	0,72	75822,0	0,87190	0,70108	0,87954
59	0,21	0,91	59299,8	0,99999	0,88609	0,82788
41	0,23	0,86	23389,4	0,99998	0,83740	0,63166
52	0,10	0,79	64213,8	0,49310	0,76924	0,94617
58	0,10	0,93	24221,5	0,50117	0,90556	0,95264
46	0,20	0,70	66234,2	0,96352	0,68160	0,85841
40	0,26	0,72	30585,5	1,00000	0,70108	0,36716
57	0,20	0,72	47941,6	0,96856	0,70108	0,85826
46	0,29	0,90	35295,0	0,99999	0,87635	0,10144
41	0,12	0,92	92257,6	0,59154	0,89582	0,94318
59	0,20	0,78	63608,0	0,97035	0,75950	0,86864
48	0,21	0,82	14923,3	0,99998	0,79845	0,80885
44	0,10	0,90	42582,0	0,49883	0,87635	0,95172
54	0,18	0,73	74058,5	0,87096	0,71082	0,88168
50	0,11	0,79	67599,1	0,54122	0,76924	0,93972
57	0,19	0,70	76929,9	0,91486	0,68160	0,86947
57	0,27	0,87	58219,7	0,99999	0,84714	0,29620
43	0,10	0,83	92617,2	0,49125	0,80819	0,94935
49	0,19	0,90	76731,6	0,92970	0,87635	0,89441

50	0,15	0,73	79141,0	0,72858	0,71082	0,90691
40	0,15	0,90	101320,0	0,73368	0,87635	0,92417
42	0,27	0,98	54678,9	1,00000	0,95425	0,29211
51	0,12	0,70	59400,6	0,58683	0,68160	0,92628
53	0,17	0,90	88577,0	0,83190	0,87635	0,90004
50	0,23	0,72	11297,4	0,99997	0,70108	0,62751
42	0,17	0,95	98863,4	0,83280	0,92593	0,91637
40	0,17	0,77	75181,3	0,82632	0,75976	0,89462
58	0,28	0,90	44207,1	0,99999	0,87635	0,19652
41	0,13	0,70	94214,8	0,62978	0,68160	0,92075
58	0,23	0,78	77567,4	0,99998	0,75950	0,66242
56	0,11	0,91	95705,5	0,54212	0,88609	0,94836
48	0,13	0,90	30258,8	0,64732	0,87635	0,93271
54	0,10	0,86	92818,5	0,49222	0,83740	0,95105
55	0,13	0,71	18670,4	0,63918	0,69134	0,91657
55	0,18	0,81	81663,1	0,87480	0,78871	0,89170
48	0,10	0,84	80907,5	0,49298	0,81792	0,94956
43	0,28	0,72	62766,6	0,99997	0,70108	0,21554
43	0,12	0,91	41804,2	0,59762	0,88609	0,94041
48	0,18	0,85	73323,7	0,87937	0,82766	0,89553
55	0,26	0,77	46902,1	0,99997	0,74976	0,37680
42	0,12	0,83	33595,7	0,59492	0,80819	0,93409
60	0,17	0,74	23785,2	0,83238	0,72055	0,88657
48	0,13	0,79	35353,0	0,64158	0,76924	0,92414
53	0,24	0,93	24552,8	0,99999	0,90556	0,54185
49	0,14	0,99	98749,6	0,69083	0,96398	0,93807
60	0,15	0,70	55442,3	0,73043	0,68160	0,90194
47	0,20	0,94	72726,8	0,98128	0,91530	0,89179
54	0,14	0,77	88337,3	0,68154	0,74976	0,91856
42	0,22	0,87	40360,0	0,99999	0,84714	0,72912
42	0,25	0,80	82813,3	0,99998	0,77898	0,49183
57	0,23	0,93	22248,7	0,99999	0,90556	0,63089
40	0,26	0,96	81072,5	1,00000	0,93477	0,40256
57	0,23	0,96	78992,4	1,00000	0,93477	0,66277
57	0,13	0,94	10928,7	0,65101	0,91530	0,93512

48	0,17	0,76	27742,7	0,83308	0,74003	0,88889
53	0,11	0,86	96139,7	0,54017	0,83740	0,94518
59	0,28	0,76	27852,7	0,99997	0,74003	0,18701
47	0,17	0,77	99211,4	0,82123	0,74976	0,89697
42	0,14	0,79	62280,7	0,68645	0,76924	0,91826
42	0,27	0,88	51303,9	0,99999	0,85687	0,29047
53	0,13	0,90	93726,5	0,63887	0,87635	0,93596
49	0,11	0,80	47996,6	0,54367	0,77898	0,93953
58	0,19	0,98	77761,4	0,93563	0,95425	0,90500
54	0,17	0,84	41553,7	0,83630	0,81792	0,89870
50	0,28	0,93	48679,2	0,99999	0,90556	0,19975
56	0,12	0,85	84290,4	0,58975	0,82766	0,93783
53	0,14	0,98	46250,0	0,69863	0,95425	0,93428
50	0,16	0,75	92332,9	0,77455	0,73029	0,90216
44	0,20	0,83	82622,0	0,96717	0,80819	0,87895
51	0,20	0,74	20328,5	0,97513	0,72055	0,85861
53	0,13	0,93	40887,4	0,64768	0,90556	0,93576
60	0,17	0,97	48720,5	0,84408	0,94451	0,91437
54	0,17	0,98	51790,3	0,84430	0,95425	0,91585
52	0,16	0,70	48277,8	0,77886	0,68160	0,89275
60	0,24	0,84	38906,6	0,99998	0,81792	0,54952
53	0,15	0,85	84945,9	0,73407	0,82766	0,91834
51	0,18	0,87	72267,3	0,88099	0,84714	0,89780
46	0,21	0,92	74547,6	0,99999	0,89582	0,83627
47	0,18	0,86	80600,8	0,87850	0,83740	0,89745
49	0,15	0,73	53018,2	0,73425	0,71082	0,90453
47	0,10	0,73	35145,6	0,49357	0,71082	0,94153
50	0,19	0,86	31111,3	0,93529	0,83740	0,88426
46	0,25	0,98	53695,4	1,00000	0,95425	0,46848
55	0,19	0,89	47903,4	0,93475	0,86661	0,88979
43	0,24	0,72	27928,6	0,99997	0,70108	0,54461
48	0,29	0,73	80305,4	0,99997	0,71082	0,15199
52	0,14	0,96	99164,4	0,68919	0,93477	0,93545
51	0,28	0,95	66517,0	0,99999	0,92503	0,21603
49	0,23	0,87	28320,3	0,99999	0,84714	0,63379

52	0,24	0,97	99582,5	1,00000	0,94451	0,59184
57	0,26	0,85	96392,1	0,99998	0,82766	0,41842
51	0,18	0,82	22745,9	0,88586	0,79845	0,88727
50	0,27	0,73	58468,5	0,99997	0,71082	0,29802
51	0,26	0,87	81244,2	0,99999	0,84714	0,40346
44	0,24	0,80	36129,5	0,99998	0,77898	0,54824
56	0,19	0,84	96139,7	0,88040	0,86936	0,90167
57	0,27	0,72	27852,7	0,99997	0,70108	0,27649
57	0,1	0,91	99211,4	0,49309	0,88609	0,95408
53	0,19	0,85	62280,7	0,91956	0,82766	0,88797
50	0,15	0,77	51303,9	0,73487	0,74976	0,90812
45	0,15	0,83	93726,5	0,73135	0,80819	0,91716
59	0,27	0,74	47996,6	0,99997	0,72055	0,28963
41	0,12	0,79	77761,4	0,58819	0,76924	0,93335
52	0,17	0,93	41553,7	0,84240	0,90556	0,90903
58	0,23	0,99	48679,2	1,00000	0,96398	0,64360
46	0,17	0,7	84290,4	0,74048	0,77751	0,91077
40	0,17	0,94	46250,0	0,84238	0,91530	0,91060
57	0,28	0,77	92332,9	0,99997	0,74974	0,24761
46	0,13	0,87	82622,0	0,63921	0,84714	0,93294
41	0,23	0,8	20328,5	0,99998	0,77898	0,63064
59	0,11	0,93	40887,4	0,54937	0,90556	0,94774
48	0,13	0,96	48720,5	0,64822	0,93477	0,93861
44	0,1	0,96	51790,3	0,50014	0,93477	0,95564
54	0,13	0,94	48277,8	0,64730	0,91530	0,93694
50	0,18	0,76	38906,6	0,87882	0,74003	0,88067

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

De la presente tabla de datos, los 100 primeros datos son seleccionados para el entrenamiento y aprendizaje de la red neuronal en MATLAB, mientras que los 20 últimos datos que se encuentran seleccionados no se incluirán en el diseño de la red, sino que se usará para la validación externa que permita verificar el funcionamiento de la red neuronal.

### 3.7. Diseño de la red neuronal artificial

El diseño de la red neuronal se basa en cuatro parámetros de entrada; Temperatura del flujo de alimentación, fracción molar del acetonitrilo, presión de la columna 1 y fracción molar del solvente (etilenglicol), mientras que los parámetros de salida corresponden a las fracciones de acetonitrilo, etilenglicol y agua.

Para tener un mejor procesamiento de datos, es factible normalizar los valores de entrada y salida. Misma que se puede realizar en la herramienta de MATLAB o comandos en Excel, usando la Ec 1-3:

$$x' = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (\text{Ec 1-3})$$

Donde:

$x'$  = Valor normalizado.

$X$  = Valor que se desea normalizar.

$X_{\max}$  = Valor máximo.

$X_{\min}$  = Valor mínimo.

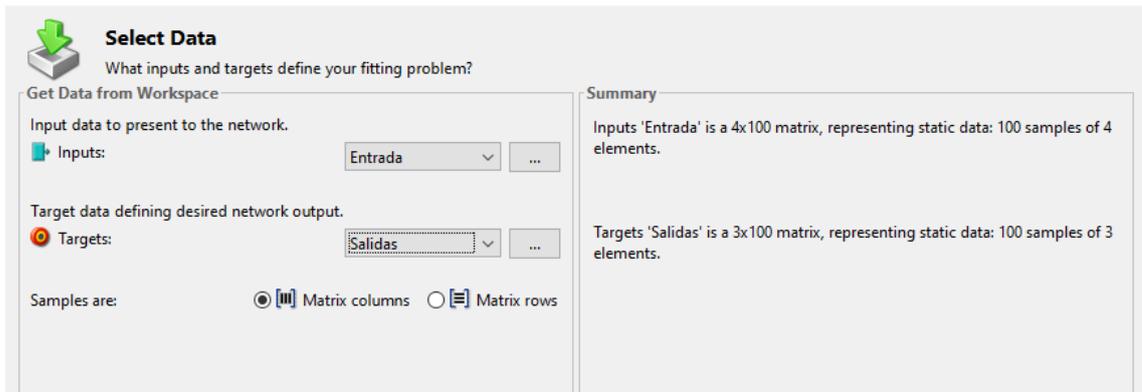
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	
1	valores normalizados																
2	0,8	0,85	0,85	0,65	0,5	0,25	0,95	0,05	0,6	0,9	0,3	0	0,85	0,3	0,05	0,95	0
3	0,85	1,00	0,70	0,70	1,00	0,40	0,55	0,65	0,00	0,00	0,50	0,80	0,50	0,95	0,10	0,50	0
4	0,413793103	0,758620690	0,482758621	0,172413793	0,379310345	0,068965517	0,724137931	0,551724138	0,310344828	0,793103448	0,000000000	0,068965517	0,068965517	0,689655172	0,758620690	0,275862069	0,413793103
5	0,31664608	0,6062494	0,35058849	0,24163656	0,60611532	0,71791509	0,53512986	0,13785271	0,58949326	0,14705835	0,61184474	0,21746367	0,4094739	0,26956479	0,89974182	0,58279185	0,041379310
6	0,99996493	0,99998701	0,9999694	0,99994919	0,99996271	0,748207	0,99998483	0,99997382	0,00363543	0,01950529	0,92829173	0,99999811	0,93819924	0,99998262	0,19713977	0,94173355	0,99996493
7	0,41379309	0,75862069	0,48275862	0,17241378	0,37931033	0,06896549	0,72413793	0,55172415	0,3103448	0,79310345	0	0,06896549	0,06896549	0,68965516	0,75862069	0,27586207	0,41379309
8	0,25705749	0	0,55527744	0,5500139	0,00321495	0,91894365	0,86165623	0,64409306	0,99282486	1	0,89551003	0,35081118	0,895349	0,05618934	0,98950161	0,90685368	0,840
9																	
10																	
11																	
12																	
13																	
14																	
15																	
16																	
17																	
18																	
19																	
20																	
21																	
22																	
23																	

Figura 26-3. Disposición de los datos en la matriz de Excel.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.8. Entrenamiento de datos

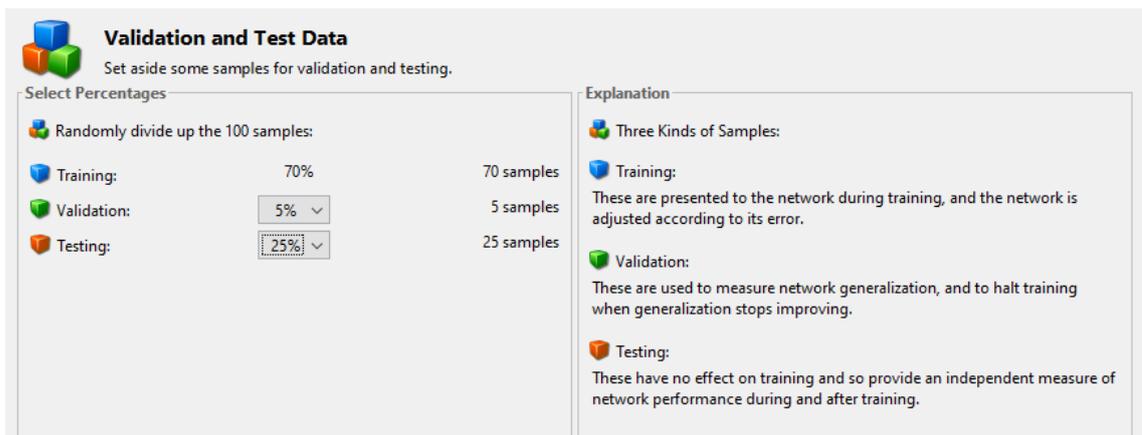
La herramienta MATLAB proporciona tres algoritmos para el entrenamiento de la red neuronal; Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient. La presente red neuronal diseñada con 9 neuronas ocultas y se entrena con el algoritmo de Levenberg-Marquardt.



**Figura 27-3.** Selección de las variables de entrada y salida a la RNA.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

Se elige las variables de entrada y salida, en el presente caso se nombró con “Entrada” a los pares de datos que se muestran en la Tabla 10-3, y “Salidas” a las variables resultantes de la red neuronal.



**Figura 28-3.** Selección del porcentaje de datos para entrenamiento, validación y testeo.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

Se dividió los datos de entrada; 70% para el entrenamiento de la red neuronal, 5% para la validación y 25% para el testeo, debido que el método de Bayesian Regularization no realiza la validación.

**Train Network**  
Train the network to fit the inputs and targets.

Train Network

Choose a training algorithm:

Bayesian Regularization

This algorithm typically requires more time, but can result in good generalization for difficult, small or noisy datasets. Training stops according to adaptive weight minimization (regularization).

Train using Bayesian Regularization. (trainbr)

Retrain

Results

	Samples	MSE	R
Training:	70	8.24488e-6	9.99962e-1
Validation:	5	0.00000e-0	0.00000e-0
Testing:	25	5.38667e-6	9.99977e-1

Plot Fit Plot Error Histogram Plot Regression

Notes

- Training multiple times will generate different results due to different initial conditions and sampling.
- Mean Squared Error is the average squared difference between outputs and targets. Lower values are better. Zero means no error.
- Regression R Values measure the correlation between outputs and targets. An R value of 1 means a close relationship, 0 a random relationship.

**Figura 29-3.** Selección del algoritmo de entrenamiento para la RNA.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

Las redes Bayesian tienen la propiedad de poder obtener representaciones de grandes cantidades de datos. Además, tiene una facilidad de interpretación y diversidad de métodos de inferencia y aprendizaje.

El algoritmo de entrenamiento de Bayesian Regularization, tiene mayor desempeño que el algoritmo Levenberg-Marquardt en la capacidad predictiva. En la presente investigación se comprobó que el tiempo de ejecución del entrenamiento de la red es mayor en comparación con los dos algoritmos (Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient), mientras mayor número de neuronas ocultas, mayor tiempo de entrenamiento.

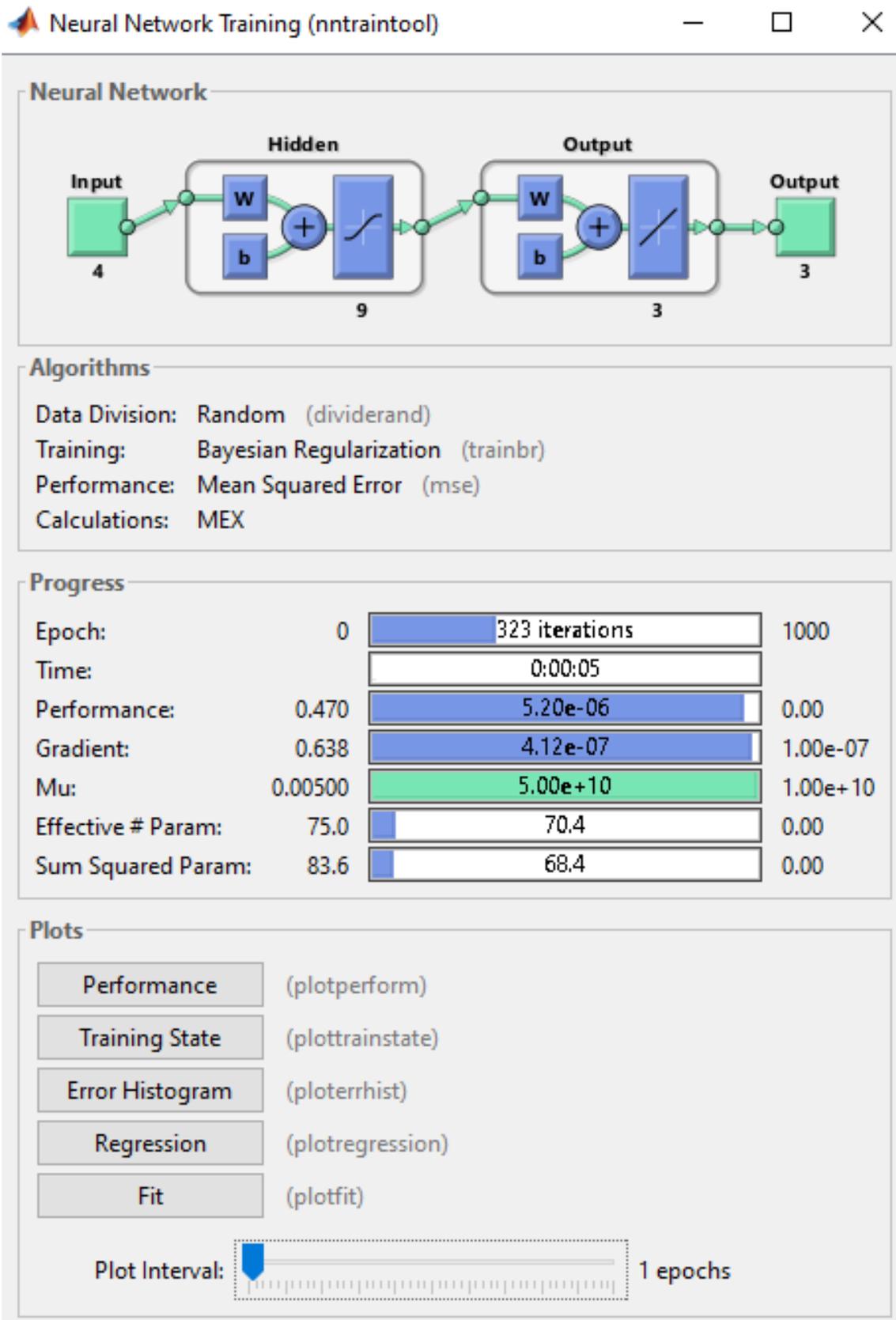
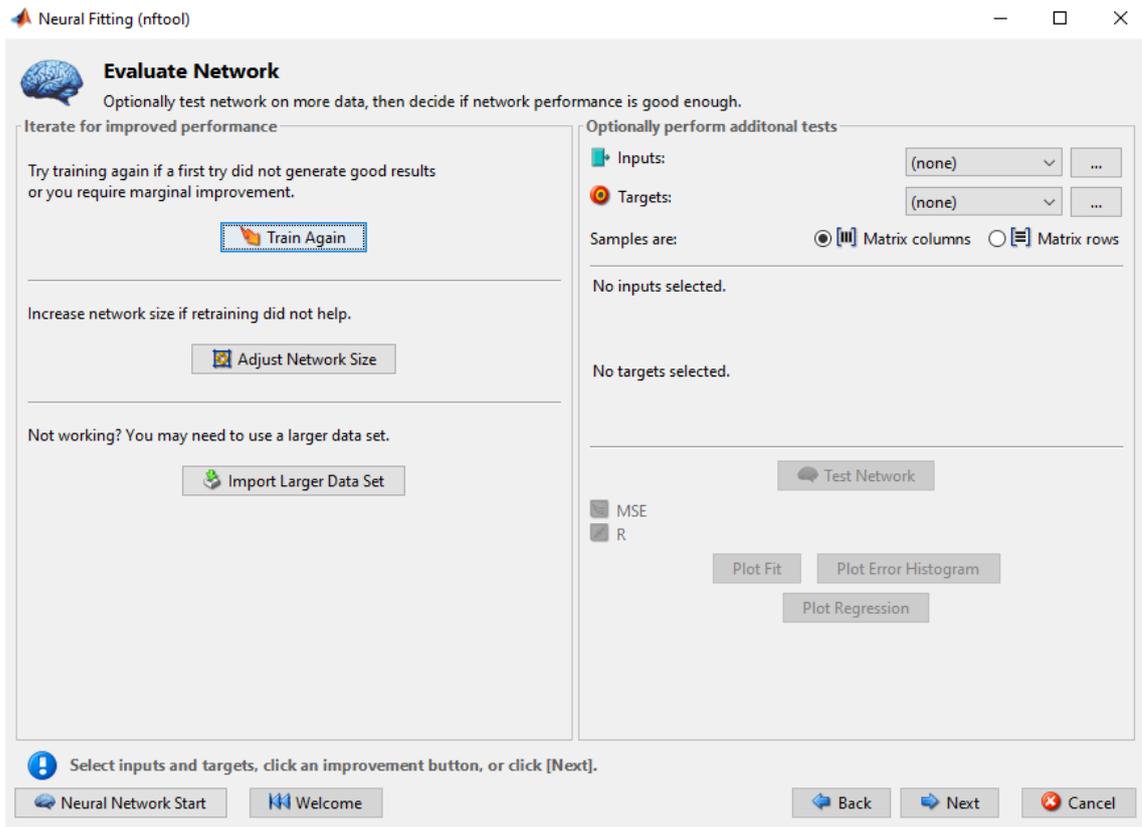


Figura 30-3. Entrenamiento de la RNA.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Figura 31-3.** Panel de evaluación de la RNA.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

### 3.9. Validación de resultados de la red neuronal artificial

La validación de la RNA en la predicción de las fracciones molares de la separación de acetonitrilo-agua en destilación extractiva usando etilenglicol como solvente, se utilizará al principio los indicadores generados en MATLAB: Erros cuadrático medio (MSE) y regresión (R). Además, se profundizará y aplicará Excel y el programa SPSS.

En la Tabla 11-3, se puede observar que el número de neuronas que produce un menor error es con 9 neuronas ocultas, con el modelo de Bayesian Regularization.

**Tabla 11-3.** Validación de la RNA.

Valores de validación de la red neuronal artificial								
			Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
NÚMERO DE NEURONAS		SAMPL ES	MSE	R	MSE	R	MSE	R
5	Training	70	2,69908 e-5	9,99881 e-1	9,71921 e-6	9,99958 e-1	3,3839e -3	9,85654e -1
	Validati on	5	5,03964 e-5	9,99854 e-1	0,000e- 0	0,0000e -0	1,90949 e-3	9,91737e -1
	Testing	25	4,47384 e-5	9,99786 e-1	7,75024 e-6	9,99966 e-1	3,47258 e-3	9,84137e -1
6	Training	70	2,06322 e-5	9,99907 e-1	3,8844e -6	9,99982 e-1	6,39334 e-4	9,97135e -1
	Validati on	5	2,98854 e-5	9,99875 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	8,02905 e-4	9,96797e -1
	Testing	25	1,58381 e-5	9,9993e -1	2,47884 e-5	9,99889 e-1	1,04112 e-3	9,95357e -1
7	Training	70	1,22934 e-4	9,99435 e-1	8,24488 e-6	9,99962 e-1	3,6156e -4	9,98288e -1
	Validati on	5	1,46734 e-4	9,99482 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	2,21197 e-4	9,99255e -1
	Testing	25	4,97392 e-4	9,98436 e-1	5,38667 e-6	9,99977 e-1	5,27801 e-4	9,97821e -1
8	Training	70	1,36437 e-4	9,994e- 1	6,95483 e-6	9,99968 e-1	3,64919 e-4	9,98409e -1
	Validati on	5	2,78319 e-4	9,98829 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	4,49084 e-4	9,9791e- 1
	Testing	25	3,48853 e-4	9,9838e -1	9,33418 e-6	9,99963 e-1	4,64164 e-4	9,98043e -1
9	Training	70	4,81503 e-5	9,99849 e-1	6,91815 e-6	9,99969 e-1	1,77475 e-3	9,92178e -1
	Validati on	5	5,27026 e-5	9,99796 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	2,86445 e-3	9,8552e- 1

	<b>Testing</b>	25	1,61163 e-4	9,99305 e-1	6,28846 e-6	9,99972 e-1	2,16281 e-3	9,90259e -1
<b>10</b>	<b>Training</b>	70	3,40962 e-5	9,99845 e-1	7,67392 e-7	9,99996 e-1	5,98388 e-3	9,74712e -1
	<b>Validati on</b>	5	2,88244 e-5	9,99904 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	5,58022 e-3	9,78518e -1
	<b>Testing</b>	25	7,67849 e-5	9,99693 e-1	2,15746 e-5	9,9991e -1	8,02808 e-3	9,64423e -1
<b>15</b>	<b>Training</b>	70	2,02133 e-4	9,99274 e-1	1,97137 e-6	9,99991 e-1	2,87706 e-3	9,86127e -1
	<b>Validati on</b>	5	1,405e- 3	9,92831 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	3,34785 e-3	9,90146e -1
	<b>Testing</b>	25	6,02405 e-4	9,97096 e-1	3,22731 e-5	9,99863 e-1	8,06182 e-3	9,70184e -1
<b>20</b>	<b>Training</b>	70	1,22452 e-4	9,99475 e-1	6,00004 e-7	9,9997e -1	1,09208 e-2	9,50528e -1
	<b>Validati on</b>	5	5,33096 e-4	9,94918 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	8,49812 e-3	9,68785e -1
	<b>Testing</b>	25	1,32791 e-3	9,95182 e-1	1,19453 e-4	9,99453 e-1	1,88648 e-2	9,19812e -1
<b>25</b>	<b>Training</b>	70	1,82823 e-6	9,9991e -1	1,44528 e-7	9,9999e -1	7,11643 e-2	7,55209e -1
	<b>Validati on</b>	5	6,59056 e-4	9,97405 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	5,56567 e-2	7,99294e -1
	<b>Testing</b>	25	1,07401 e-3	9,95498 e-1	1,59059 e-4	9,99374 e-1	1,01924 e-1	6,7911e- 1
<b>30</b>	<b>Training</b>	70	4,71553 e-4	9,98221 e-1	4,66579 e-9	9,999e- 1	5,98114 e-3	9,72733e -1
	<b>Validati on</b>	5	2,97144 e-3	9,8746e -1	0,000e- 0	0,000e- 0	5,22073 e-3	9,82944e -1
	<b>Testing</b>	25	3,31312 e-3	9,79499 e-1	1,80866 e-4	9,99268 e-1	2,01749 e-3	9,17999e -1
<b>40</b>	<b>Training</b>	70	1,49647 e-5	9,99938 e-1	8,5475e -13	9,9999e -1	6,91881 e-4	9,96772e -1
	<b>Validati on</b>	5	2,08567 e-3	9,84026 e-1	0,000e- 0	0,000e- 0	7,78474 e-3	9,7790e- 1

	<b>Testing</b>	25	5,74977 e-3	9,74382 e-1	1,1234e -4	9,9955e -1	1,71977 e-2	9,35939e -1
<b>50</b>	<b>Training</b>	70	2,12404 e-3	9,9038e -1	4,24439 e-10	9,9999e -1	3,55923 e-3	9,8363e- 1
	<b>Validati on</b>	5	1,41545 e-2	9,2666e -1	0,000e- 0	0,000e- 0	3,28978 e-2	8,81983e -1
	<b>Testing</b>	25	1,21815 e-2	9,5901e -1	2,59259 e-4	9,9882e -1	4,60118 e-2	8,3965e- 1
<b>60</b>	<b>Training</b>	70	2,8699e -4	9,9884e -1	3,62663 e-10	9,9999e -1	1,05318 e-2	9,55014e -1
	<b>Validati on</b>	5	2,6066e -2	8,7256e -1	0,000e- 0	0,000e- 0	3,96486 e-2	9,25745e -1
	<b>Testing</b>	25	2,4005e -2	8,8596e -1	7,22942 e-5	9,99668 e-1	5,16099 e-2	7,87868e -1
<b>70</b>	<b>Training</b>	70	3,68494 e-5	9,99835 e-1	1,30202 e-13	9,99999 e-1	5,79600 e-2	7,96018e -1
	<b>Validati on</b>	5	2,68014 e-2	9,21155 e-1	0,00000 e-0	0,00000 e-0	1,70327 e-1	5,17454e -1
	<b>Testing</b>	25	2,97481 e-2	8,92832 e-1	2,03906 e-1	9,99175 e-1	2,53642 e-1	4,03158e -1
<b>80</b>	<b>Training</b>	70	1,32906 e-4	9,99469 e-1	1,83032 e-12	9,99999 e-1	9,15068 e-4	9,96011e -1
	<b>Validati on</b>	5	5,26664 e-2	8,55046 e-1	0,00000 e-0	0,00000 e-0	9,55085 e-2	8,20022e -1
	<b>Testing</b>	25	6,45580 e-2	7,69517 e-1	3,77808 e-4	9,98505 e-1	1,00005 e-1	7,26129e -1
<b>90</b>	<b>Training</b>	70	1,08791 e-5	9,99956 e-1	4,72981 e-13	4,72981 e-13	6,75951 e-4	9,97038e -1
	<b>Validati on</b>	5	5,05121 e-2	8,89120 e-1	0,00000 e-0	0,00000 e-0	8,23593 e-2	8,85214e -1
	<b>Testing</b>	25	8,66621 e-2	7,80572 e-1	8,03990 e-5	9,99664 e-1	1,37392 e-1	6,39578e -1
<b>100</b>	<b>Training</b>	70	5,32052 e-4	9,97649 e-1	2,28533 e-12	9,99999 e-1	1,90658 e-2	9,244618 e-1
	<b>Validati on</b>	5	5,47437 e-2	8,07675 e-1	0,00000 e-0	0,00000 e-0	1,46342 e-1	8,13541e -1

	<b>Testing</b>	25	1,81527 e-1	6,68653 e-1	8,41452 e-4	9,97229 e-1	1,63537 e-1	6,14126e -1
--	----------------	----	----------------	----------------	----------------	----------------	----------------	----------------

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

### 3.10. Análisis Estadístico

El análisis estadístico verificará la confiabilidad del algoritmo de la red neuronal predichos en MATLAB, que presenta dos parámetros estadísticos.

- El error cuadrático medio (MSE), para tener los mejores errores deben ser cercanos al valor de cero.
- La regresión (R), el valor de 1 es una relación cercana midiendo la correlación entre producto y objetivo.

En la presente investigación se utilizará programas estadísticos para realizar las pruebas con el análisis ANOVA, la cual contiene P-valores que se pueden usar en la significación estadística.

## CAPÍTULO IV

### 4. GESTIÓN DEL PROYECTO

#### 4.1. Presupuesto

**Tabla 1-4.** Presupuesto del proyecto de titulación.

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO (\$)	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Impresión del documento final	\$20	X	
Copias e impresiones	\$10	X	
Empastados	\$30	X	
TOTAL		\$60	

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### 4.2. Recursos y Materiales

El proyecto tecnológico de titulación se desarrolla con el uso de los siguientes softwares:

- *Software libre DWSIM*: simulación del proceso de separación de la mezcla de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva.
- *Software ChemSep*: complemento de librería de DWSIM.
- *MATLAB*: diseño de la red neuronal artificial (RNA) del proceso.
- *SPSS*: análisis estadístico de los resultados obtenidos en DWSIM y MATLAB.

Los procesos mencionados se realizaron en un ordenador con procesador AMD A9-9420 RADEON R5, 5 COMPUTE CORE 2C+3G 3.00 GHz, con 8 GB de memoria RAM. Además, un sistema operativo de 64 bits, procesador x64 y Windows 10 Home.

### 4.3. Cronograma

**Tabla 2-4.** Cronograma del proyecto de titulación.

ACTIVIDAD	MESES															
	NOVIEMBRE				DICIEMBRE				ENERO				FEBRERO			
	SEMANAS															
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
Elaboración del anteproyecto		x	x	x	x											
Determinación de variables óptimas de operación para la simulación				x	x											
Simulación del proceso y obtención de la base de datos				x	x	x	x	x								
Determinación de entradas y salidas para la RNA					x	x	x	x								
Diseño de la red neuronal en Matlab						x	x	x								
Validación de la RNA mediante análisis estadístico en SPSS								x	x	x						
Redacción del trabajo final			x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		
Revisión del documento final					x	x	x	x	x	x	x	x				
Defensa de los resultados																x

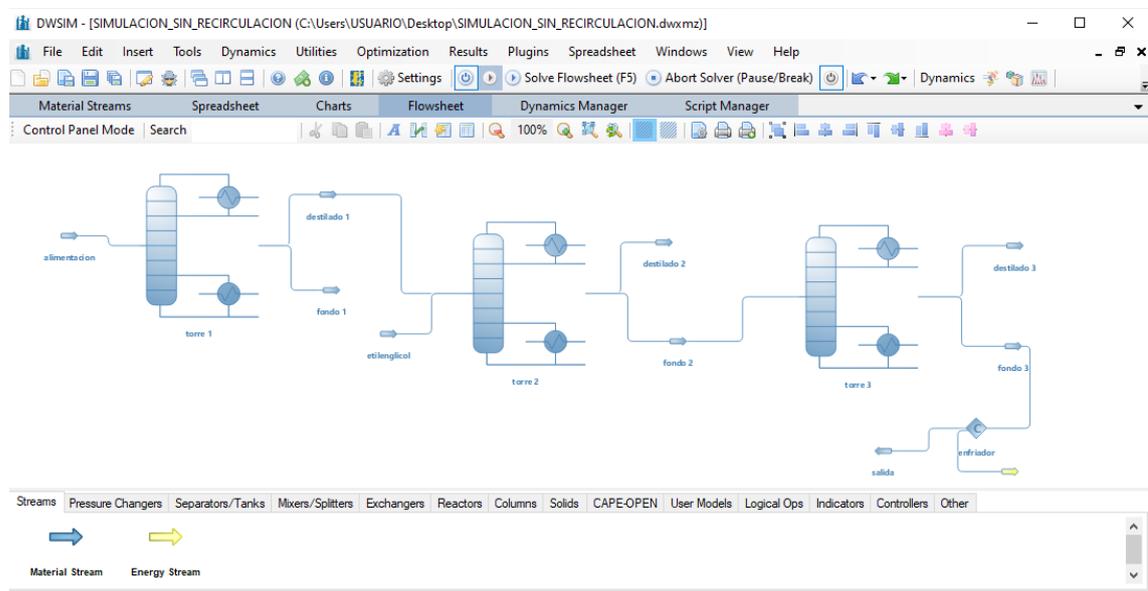
Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

## 4.4. Discusión y análisis de resultados

### 4.4.1. Informe de resultados de la simulación en DWSIM

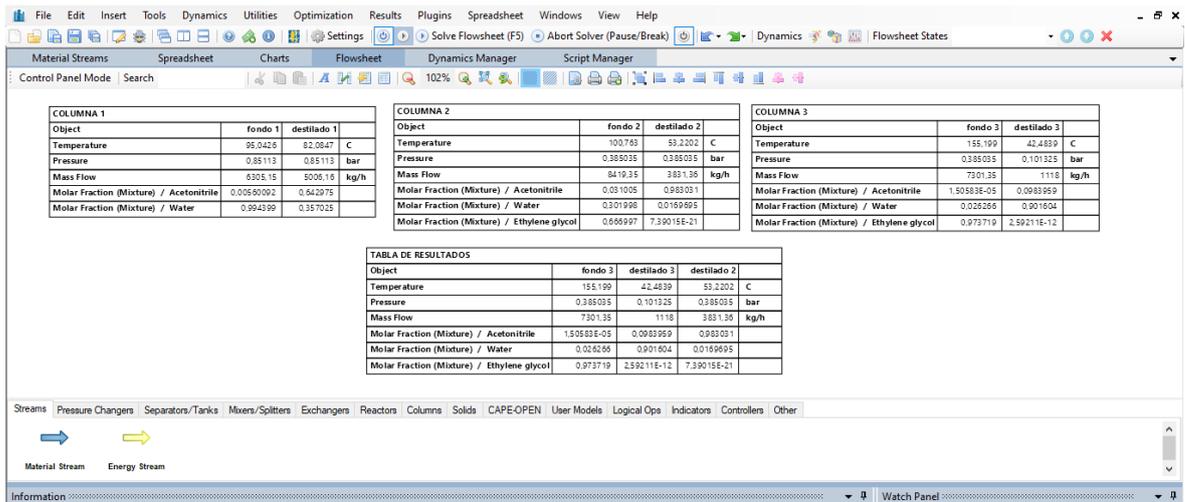
En la Figura 1-4, se esquematiza la simulación de la separación de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva en DWSIM.

Se puede observar algunas modificaciones del modelo de referencia, como la eliminación de la recirculación a la columna 2, esto se debe que al usar dicha recirculación los valores del producto cambian automáticamente y superaban los valores de error permitidos. Dicho motivo hizo que no se considere la recirculación para obtener resultados óptimos.



**Figura 1-4.** Simulación completa del sistema de separación de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva en DWSIM.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.



**Figura 2-4.** Resultados en DWSIM.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Los resultados obtenidos en el simulador DWSIM para la separación del acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva, utilizando etilenglicol como solvente. Se presenta a continuación los resultados de cada columna:

**Tabla 3-4.** Resultados de la columna de preconcentración (C1).

COLUMNA 1			
Object	Fondo C1	Destilado C1	Unidades
Temperature	95,0426	82,0847	C
Pressure	0,85113	0,85113	Bar
Mass Flow	6305,15	5006,16	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Acetonitrile	0,00560092	0,642975	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,994399	0,357025	

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

**Tabla 4-4.** Resultados de la columna de destilación extractiva (C2).

COLUMNA 2			
Object	Fondo C2	Destilado C2	Unidades
Temperature	100,763	53,2202	C
Pressure	0,385035	0,385035	Bar
Mass Flow	8419,35	3831,36	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Acetonitrile	0,031005	0,983031	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,301998	0,0169695	
Molar Fraction (Mixture) / Ethylene glycol	0,666997	7,39E-21	

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

**Tabla 5-4.** Resultados de la columna de recuperación (C3).

<b>COLUMNA 3</b>			
<b>Object</b>	<b>Fondo C3</b>	<b>Destilado C3</b>	<b>Unidades</b>
<b>Temperature</b>	155,199	42,4839	C
<b>Pressure</b>	0,385035	0,101325	Bar
<b>Mass Flow</b>	7301,35	1118	kg/h
<b>Molar Fraction (Mixture) / Acetonitrile</b>	1,51E-05	0,0983959	
<b>Molar Fraction (Mixture) / Water</b>	0,026266	0,901604	
<b>Molar Fraction (Mixture) / Ethylene glycol</b>	0,973719	2,59E-12	

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### 4.5. Validación de los resultados obtenidos en DWSIM

Los resultados obtenidos en el simulador DWSIM, se debe validar comparando con los resultados obtenidos en el artículo de referencia. En el presente caso se comparó las fracciones obtenidas ya que mediante un análisis se evidenció que dichos valores son el objetivo de estudio.

Para el cálculo del error porcentual se emplea la fórmula:

$$E(\%) = \frac{V_{\text{Deseado}} - V_{\text{Experimental}}}{V_{\text{Deseado}}} \quad (\text{Ec 1-4})$$

**Tabla 6-4.** Comparación de las fracciones molares obtenidas en DWSIM.

<b>UNIDAD</b>	<b>PARÁMETRO</b>	<b>ARTÍCULO</b>	<b>DWSIM</b>	<b>ERROR (%)</b>
<b>DESTILADOR 1</b>	X <sub>H2O</sub> -fondo	0,9999	0,9943	0.5601%
	X <sub>ACN</sub> - destilado	0,6530	0,6427	1.5773%
<b>DESTILADOR 2</b>	X <sub>ACN</sub> - destilado	0,9999	0,9830	1.6902%
	X <sub>EG</sub> -fondo	0,6877	0,6669	3.0246%
<b>DESTILADOR 3</b>	X <sub>H2O</sub> -destilado	0,9999	0,9016	9.8310%
	X <sub>EG</sub> -fondo	0,9999	0,9737	2.6203%

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Como se puede evidenciar en la Tabla 6-4. Los errores porcentuales de la presente investigación no exceden el 10% de error dando como favorable la simulación realizada en DWSIM. Además, se comparó todas las fracciones molares de la investigación y como productos de interés se tomó las fracciones molares del acetonitrilo (destilado de la columna 2), agua (destilado de la columna 3) y etilenglicol (fondo de la columna 3).

**Tabla 7-4.** Comparación de las temperaturas de DWSIM.

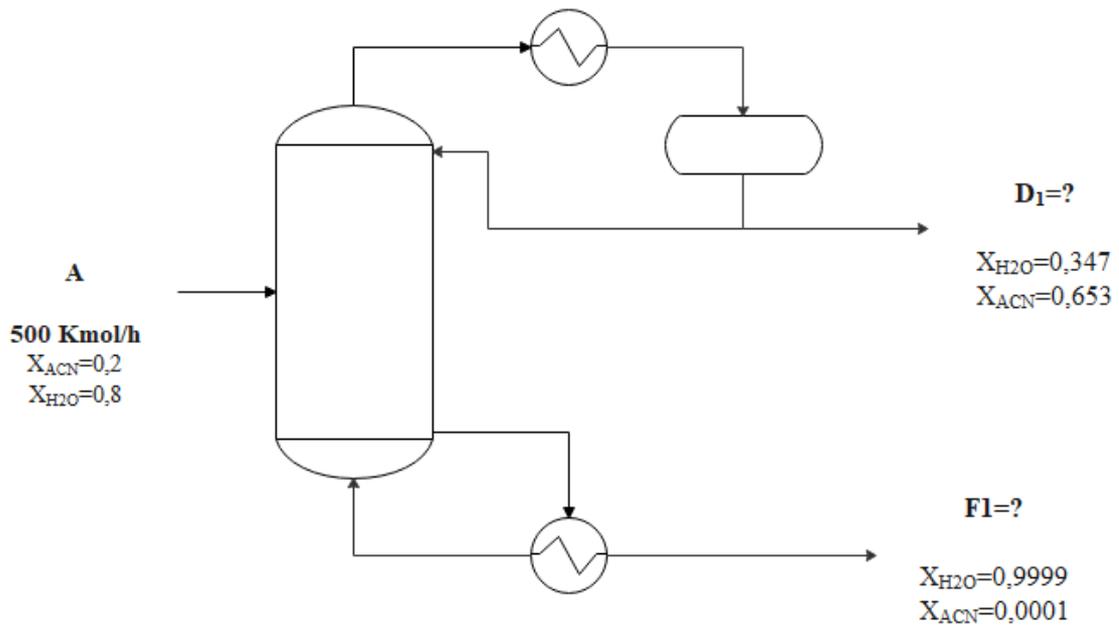
RESULTADOS	Columna 1		Columna 2		Columna 3	
	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
Temperatura °C DWSIM	82,09	95,042	53,22	100,76	42,49	155,19
Temperatura °C (Referencia)	96,03	96,03	53,69	110,88	53,01	138,07

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

De la misma manera se comparó las temperaturas de la simulación con el trabajo de referencia. En la Tabla 7-4. Se evidencia que la variación no es significativa, esto no afectara a la simulación ya que los paquetes termodinámicos son los encargados de proporcionarnos los resultados obtenidos, en el presente caso nuestro interés era obtener un error menor al 10% en las fracciones molares de los compuestos.

#### 4.6. Balance de masa del sistema

##### 4.6.1. Balance de masa general para la columna de preconcentración



**Figura 3-4.** Balance de masa general de la columna de preconcentración C1.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### Balance general de masa:

$$A = D_1 + F_1 \quad (\text{Ec 2-4})$$

Donde:

A= Flujo molar de mezcla acetonitrilo-agua (alimentación)

D<sub>1</sub>= Flujo molar del destilado de la columna 1 (C1)

F<sub>1</sub>= Flujo molar del fondo de la columna 1 (C1)

*Flujo de entrada:*

$$A = 500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} A &= D_1 + F_1 \\ 500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} &= D_1 + F_1 \\ 500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_1 &= F_1 \end{aligned} \quad (\text{Ec 3-4})$$

*Balance de masa por componente (Agua):*

$$A * X_{\text{H}_2\text{O.Ali}} = D_1 * X_{\text{H}_2\text{O.Des}} + F_1 * X_{\text{H}_2\text{O.Fon}} \quad (\text{Ec 4-4})$$

Donde:

X<sub>H<sub>2</sub>O.Ali</sub>= Fracción molar del agua en la alimentación.

X<sub>H<sub>2</sub>O.Des</sub>= Fracción molar del agua en el destilado 1.

X<sub>H<sub>2</sub>O.Fon</sub>= Fracción molar del agua en el fondo 1.

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{A * X_{\text{H}_2\text{O.Ali}} - D_1 * X_{\text{H}_2\text{O.Des}}}{X_{\text{H}_2\text{O.Fon}}} \\ F_1 &= \frac{500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} * 0,8 - D_1 * 0,347}{0,9999} \end{aligned} \quad (\text{Ec 5-4})$$

Entonces igualando la Ec 3-4 con la Ec 5-4,

$$\begin{aligned} 500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_1 &= \frac{500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} * 0,8 - D_1 * 0,347}{0,9999} \\ (500 - D_1) * 0,9999 &= 500 * 0,8 - D_1 * 0,347 \\ 500 * 0,9999 - D_1 * 0,9999 &= 500 * 0,8 - D_1 * 0,347 \\ 499,95 - 0,9999D_1 &= 400 - 0,347D_1 \\ 499,95 - 400 &= 0,9999D_1 - 0,347D_1 \\ 99,95 &= 0,6529D_1 \\ D_1 &= \frac{99,95}{0,6529} \end{aligned}$$

$$D_1 = 153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

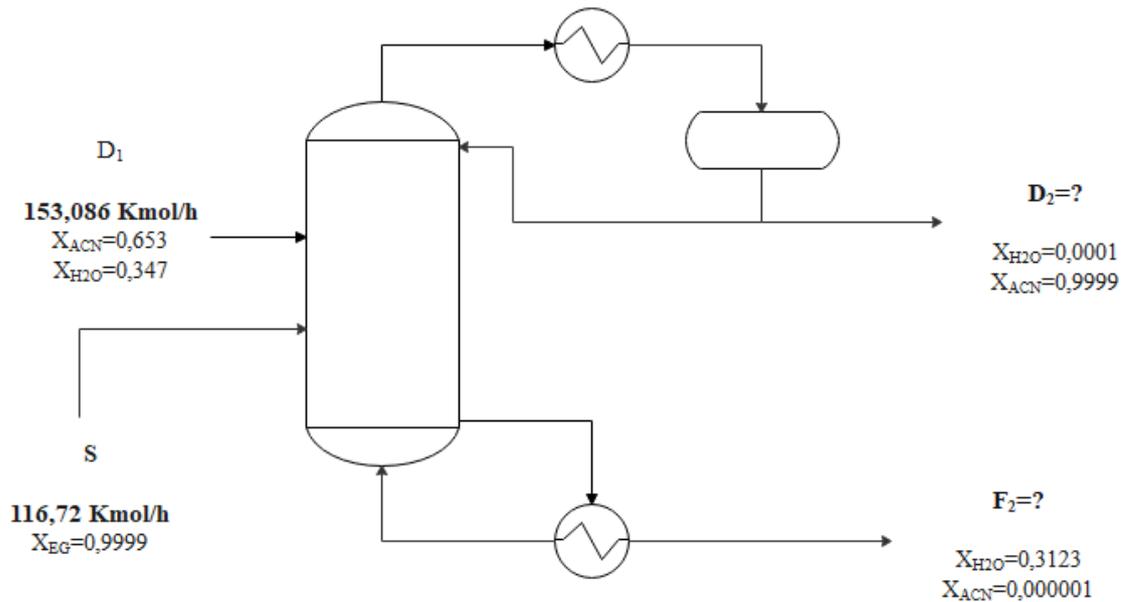
Finalmente, se reemplaza en la Ec 3-4

$$500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_1 = F_1$$

$$500 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - 153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} = F_1$$

$$F_1 = 346,914 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

#### 4.6.2. Balance de masa general para la columna de extracción (C2)



**Figura 4-4.** Balance de masa general de la columna de extracción C2.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### Balance general de masa:

$$D_1 + S = D_2 + F_2 \quad (\text{Ec 6-4})$$

Donde:

$S$ = Flujo molar del solvente (etilenglicol)

$D_1$ = Flujo molar del destilado de la columna 1 (C1)

$F_2$ = Flujo molar del fondo de la columna 2 (C2)

$D_2$ = Flujo molar del destilado de la columna 2 (C2)

Flujo de entrada:

$$D_1 = 153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

$$S = 116,72 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

Por tanto,

$$D_1 + S = D_2 + F_2$$

$$153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} + 116,72 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} = D_2 + F_2$$

$$269,806 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_2 = F_2 \quad (\text{Ec 7-4})$$

Balace de masa por componente (Agua):

$$D_1 * X_{\text{H}_2\text{O.Des}} + S * X_{\text{H}_2\text{O.Sol}} = D_2 * X_{\text{H}_2\text{O.Des2}} + F_2 * X_{\text{H}_2\text{O.Fon2}} \quad (\text{Ec 8-4})$$

Donde:

$X_{\text{H}_2\text{O.Des}}$  = Fracción molar del agua en el destilado 1.

$X_{\text{H}_2\text{O.Sol}}$  = Fracción molar del agua en el solvente.

$X_{\text{H}_2\text{O.Des2}}$  = Fracción molar del agua en el destilado 2.

$X_{\text{H}_2\text{O.Fon2}}$  = Fracción molar del agua en el fondo 2.

$$X_{\text{H}_2\text{O.Sol}} = 0$$

$$F_2 = \frac{D_2 * X_{\text{H}_2\text{O.Des}} - D_2 * X_{\text{H}_2\text{O.Des2}}}{X_{\text{H}_2\text{O.Fon2}}}$$

$$F_2 = \frac{153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} * 0,347 - D_2 * 0,0001}{0,3123} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Entonces igualando la Ec 7-4 con la Ec 9-4,

$$269,806 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_2 = \frac{153,086 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} * 0,347 - D_2 * 0,0001}{0,3123}$$

$$(269,806 - D_2) * 0,3123 = 153,086 * 0,347 - D_2 * 0,0001$$

$$269,806 * 0,3123 - D_2 * 0,3123 = 153,086 * 0,347 - D_2 * 0,0001$$

$$84,2604 - 0,3123D_2 = 53,1208 - 0,0001D_2$$

$$84,2604 - 53,1208 = 0,3123D_2 - 0,0001D_2$$

$$31,1396 = 0,3122D_2$$

$$D_2 = \frac{31,1396}{0,3122}$$

$$D_2 = 99,74 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

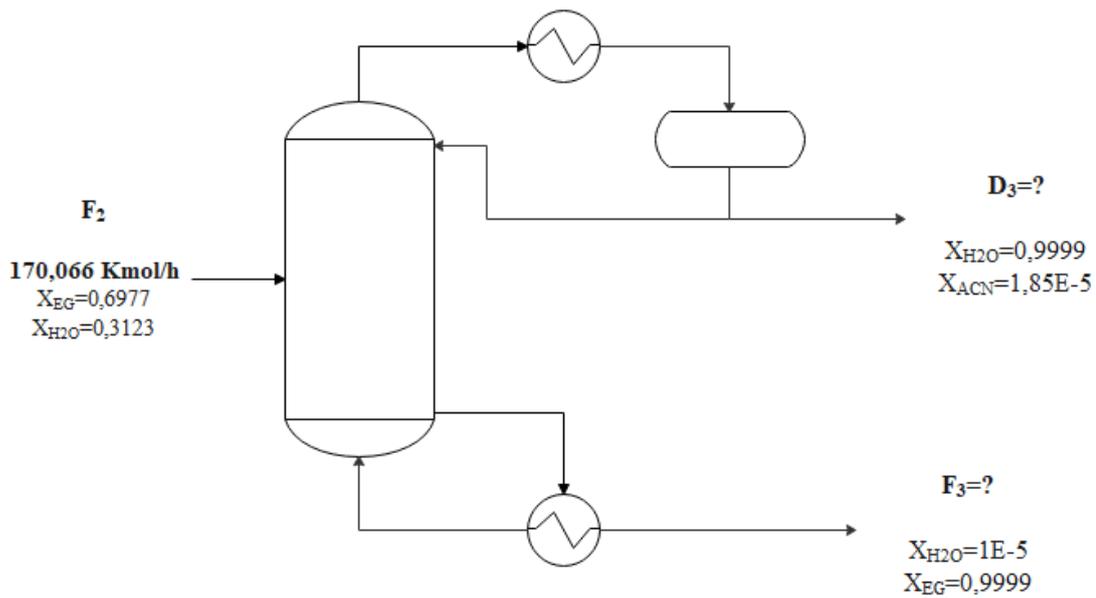
Finalmente, se reemplaza en la Ec 7-4

$$269,806 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_2 = F_2$$

$$269,806 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - 99,74 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} = F_2$$

$$F_2 = 170,066 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

#### 4.6.3. Balance de masa general para la columna de recuperación del solvente (C3)



**Figura 5-4.** Balance de masa general en la columna de recuperación del solvente.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### Balance general de masa:

$$F_2 = D_3 + F_3 \quad (\text{Ec 10-4})$$

Donde:

$F_2$  = Flujo molar del fondo de la columna 2 (C2)

$F_3$  = Flujo molar del fondo de la columna 3 (C3)

$D_3$  = Flujo molar del destilado de la columna 3 (C3)

Flujo de entrada:

$$F_2 = 170,66 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}$$

Por tanto,

$$F_2 = D_3 + F_3$$

$$170,066 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} = D_3 + F_3$$

$$170,066 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}} - D_3 = F_3 \quad (\text{Ec 11-4})$$

Balance de masa por componente (Agua):

$$F_2 * X_{H_2O.Fon2} = D_3 * X_{H_2O.Des3} + F_3 * X_{H_2O.Fon3} \quad (\text{Ec 12-4})$$

Donde:

$X_{H_2O.Fon2}$  = Fracción molar del agua en el fondo 2.

$X_{H_2O.Des3}$  = Fracción molar del agua en el destilado 3.

$X_{H_2O.Fon3}$  = Fracción molar del agua en el fondo 3.

$$F_3 = \frac{F_2 * X_{H_2O.Fon2} - D_3 * X_{H_2O.Des3}}{X_{H_2O.Fon3}}$$

$$F_3 = \frac{170,066 \frac{Kmol}{h} * 0,2123 - D_3 * 0,9999}{1E - 5} \quad (\text{Ec 13-4})$$

Entonces igualando la Ec 11-4 con la Ec 13-4,

$$170,066 \frac{Kmol}{h} - D_3 = \frac{170,066 \frac{Kmol}{h} * 0,3123 - D_3 * 0,9999}{1E - 5}$$

$$(170,066 - D_3) * 1E - 5 = 170,066 * 0,3123 - D_3 * 0,9999$$

$$170,066 * (1E - 5) - D_3 * 1E - 5 = 170,066 * 0,3123 - D_3 * 0,9999$$

$$(1,7007E - 3) - (1E - 5)D_3 = 53,1116 - 0,9999D_3$$

$$53,1116 - (1,7007E - 3) = 0,9999D_3 - (1E - 5)D_3$$

$$53,1099 = 0,99991D_3$$

$$D_3 = \frac{53,1099}{0,99991}$$

$$D_3 = 53,1147 \frac{Kmol}{h}$$

Finalmente, se reemplaza en la Ec 11-4

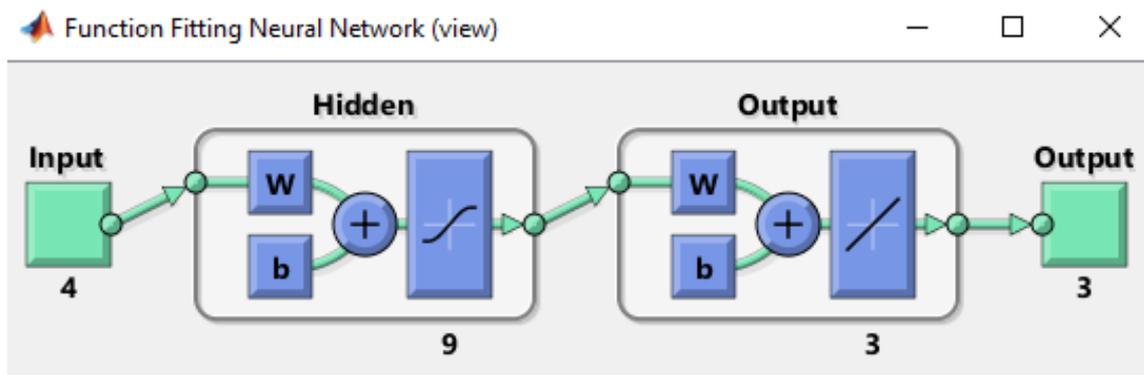
$$170,066 \frac{Kmol}{h} - D_3 = F_3$$

$$170,066 \frac{Kmol}{h} - 53,1147 \frac{Kmol}{h} = F_3$$

$$F_3 = 116,9513 \frac{Kmol}{h}$$

#### 4.7. Reporte de resultados de la red neuronal artificial (RNA)

La presente red neuronal artificial diseñada en MATLAB posee 13 neuronas ocultas y se entrenó con una base de datos de 100 datos con 4 entradas y 3 salidas mediante algoritmos de Bayesian regularization.



**Figura 6-4.** Esquema de la red neuronal artificial diseñada en MATLAB.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

#### 4.7.1. Error cuadrático medio (MSE)

**Tabla 8-4.** Error cuadrático medio del diseño de la RNA.

FASE	MSE
<b>TrainPerformance (Entrenamiento)</b>	1,0834e-06
<b>TestPerformance (Prueba)</b>	3,0723e-05
<b>ValPerformance (Validación)</b>	NaN

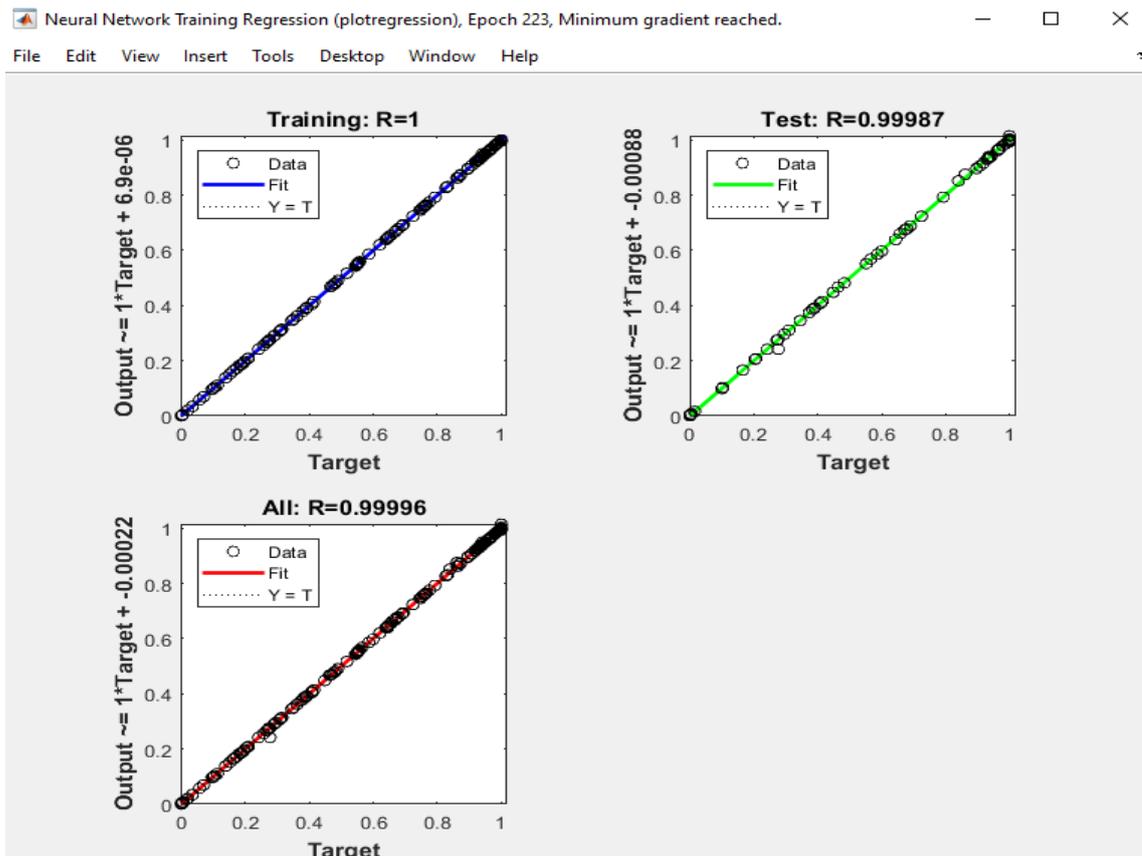
Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la Tabla 8-4 se puede observar valores del error cuadrático medio (MSE) de la red neuronal artificial (RNA) tanto para el entrenamiento como la prueba. En el presente caso no se observa el error de la validación, debido que se usó el algoritmo Bayesian Regularization que omite la validación de los valores.

También se debe mencionar que los errores cuadráticos medios deben ser lo más cercano a cero para que sea eficaz la red neuronal propuesta. Como se puede observar los valores que se obtuvo son muy cercanos a cero.

#### 4.7.2. Gráficos sobre el comportamiento de la RNA

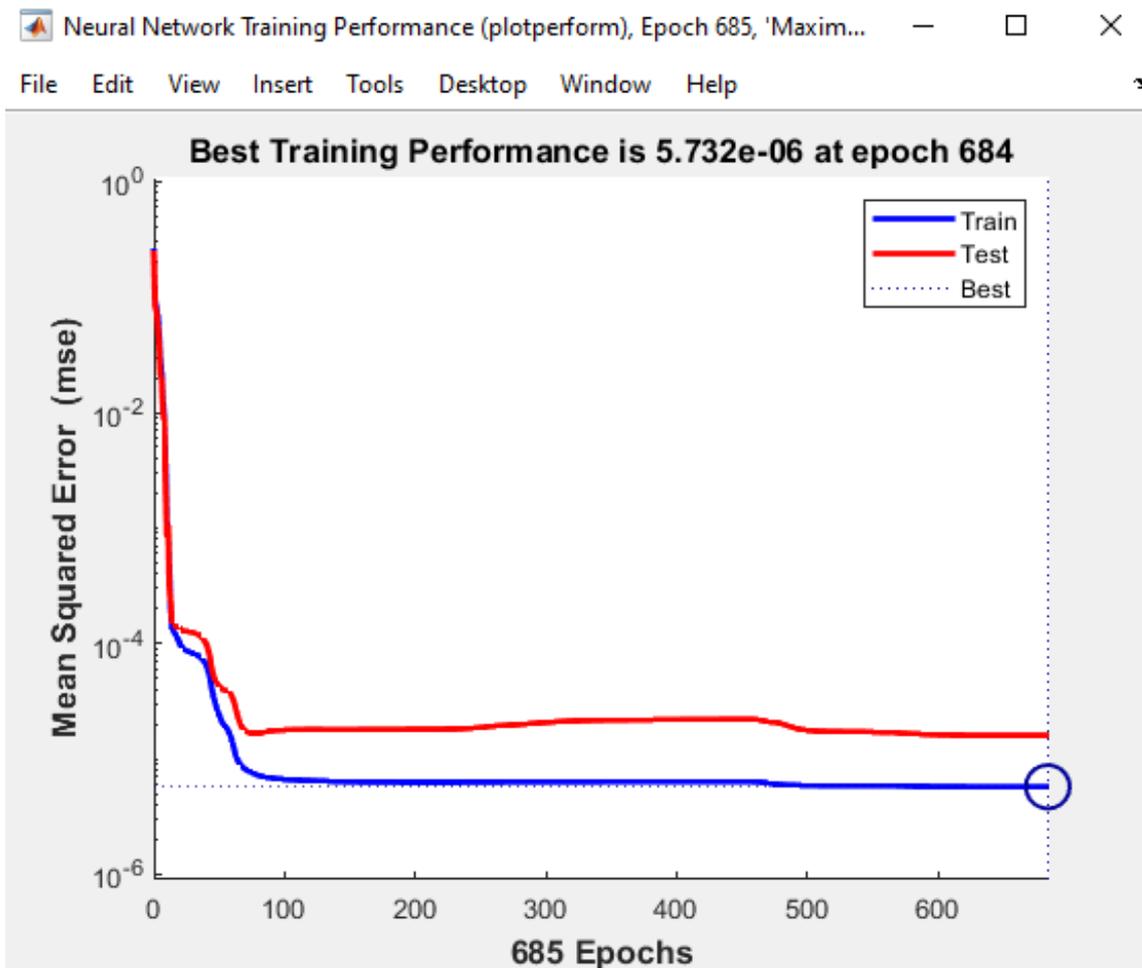
En el Gráfico 1-4 se puede observar el valor del coeficiente de regresión para cada sección de la red neuronal artificial en MATLAB en cada sección se especifica el coeficiente:



**Gráfico 1-4.** Regresión del entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

Se puede observar que existe una dispersión moderada entre las salidas y objetos de la RNA en la fase de entrenamiento. Sin embargo, se obtiene los valores de regresión como 1 y 0,99987 que corresponde al testeo, esto se debe que al usar el modelo Bayesian Regularization no realiza la validación. Y la regresión general es de 0,99996 dando como una buena correlación.



**Gráfico 2-4.** Rendimiento del entrenamiento de la RNA.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

El Gráfico 2-4 muestra el error cuadrático medio durante el entrenamiento de la red neuronal artificial, con un MSE final de  $5,732e-6$ . Un dato importante es que las curvas de entrenamiento (curva de color azul) y la curva de prueba (curva de color rojo) deben ser cercanas para que tenga una buena capacidad predictiva.

#### 4.7.3. Gráficas de comparación entre las salidas predichas y las deseadas

En la presente sección se analiza dos grupos: el conjunto de 100 valores con 4 entradas y 3 salidas que se utilizaron para el entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial. El otro conjunto contempla 20 valores externos para demostrar el aprendizaje y eficacia de la red neuronal.

4.7.3.1. Análisis gráfico de la base de datos interna empleada durante el diseño y entrenamiento de la RNA

La Tabla 9-4 se muestra los valores obtenidos en la simulación realizada en DWSIM, los valores predichos por la RNA y el error porcentual asociados a ellos.

**Tabla 9-4.** Valores reales vs predichos en la columna de recuperación (C3).

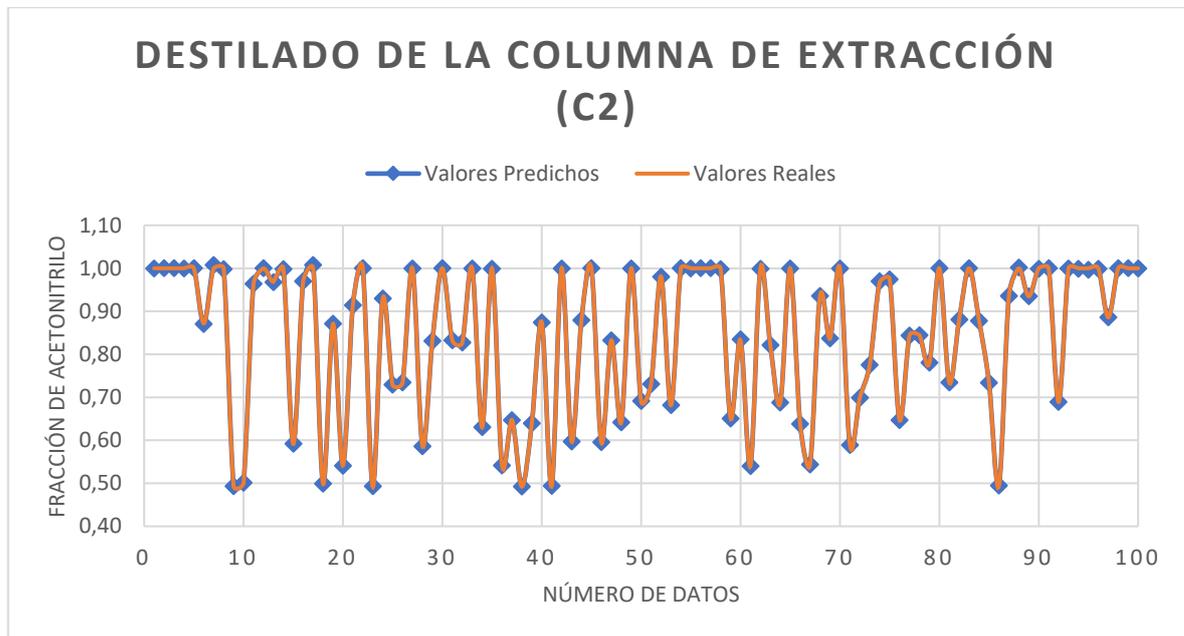
<b>Datos</b>	<b>Valores Reales</b> Fracción molar EG (D3) <b>(DWSIM)</b>	<b>Valores Predichos</b> Fracción molar EG (D3) <b>(RNA)</b>	<b>Error (%)</b>	<b>Valores Reales</b> Fracción molar de agua (D3) <b>(DWSIM)</b>	<b>Valores Predichos</b> Fracción molar de agua (D3) <b>(RNA)</b>	<b>Error (%)</b>
1	0,79845	0,79851	0,00687	0,28260	0,28161	0,35010
2	0,89582	0,89580	0,00295	0,05077	0,05034	0,83287
3	0,81792	0,81790	0,00259	0,55156	0,55305	0,26943
4	0,73029	0,73030	0,00203	0,54681	0,54701	0,03585
5	0,78871	0,78877	0,00762	0,05367	0,05316	0,93477
6	0,70108	0,70103	0,00650	0,87954	0,88087	0,15156
7	0,88609	0,88597	0,01244	0,82788	0,84090	1,57304
8	0,83740	0,83740	0,00020	0,63166	0,62738	0,67682
9	0,76924	0,76922	0,00285	0,94617	0,94627	0,01062
10	0,90556	0,90550	0,00620	0,95264	0,95271	0,00676
11	0,68160	0,68163	0,00344	0,85841	0,85971	0,15169
12	0,70108	0,70108	0,00010	0,36716	0,36617	0,26898
13	0,70108	0,70102	0,00858	0,85826	0,85830	0,00412
14	0,87635	0,87636	0,00124	0,10144	0,10261	1,14880
15	0,89582	0,89597	0,01693	0,94318	0,94343	0,02655
16	0,75950	0,75954	0,00475	0,86864	0,86795	0,07881
17	0,79845	0,79845	0,00005	0,80885	0,81965	1,33503
18	0,87635	0,87628	0,00813	0,95172	0,95196	0,02566
19	0,71082	0,71077	0,00570	0,88168	0,88082	0,09719
20	0,76924	0,76926	0,00227	0,93972	0,93986	0,01526
21	0,68160	0,68167	0,00920	0,86947	0,86892	0,06237
22	0,84714	0,84706	0,00883	0,29620	0,29639	0,06575
23	0,80819	0,80813	0,00659	0,94935	0,95011	0,08005

24	0,87635	0,87637	0,00294	0,89441	0,89558	0,13077
25	0,71082	0,71076	0,00764	0,90691	0,90689	0,00199
26	0,87635	0,87648	0,01500	0,92417	0,92335	0,08847
27	0,95425	0,95416	0,00891	0,29211	0,29132	0,26785
28	0,68160	0,68163	0,00447	0,92628	0,92584	0,04686
29	0,87635	0,87639	0,00468	0,90004	0,90780	0,86169
30	0,70108	0,70106	0,00231	0,62751	0,62692	0,09417
31	0,92593	0,92535	0,06265	0,91637	0,91508	0,14101
32	0,75976	0,74985	1,30447	0,89462	0,89490	0,03119
33	0,87635	0,87628	0,00734	0,19652	0,19778	0,64020
34	0,68160	0,68161	0,00124	0,92075	0,92087	0,01348
35	0,75950	0,75952	0,00195	0,66242	0,66288	0,07035
36	0,88609	0,88606	0,00333	0,94836	0,94806	0,03148
37	0,87635	0,87632	0,00349	0,93271	0,93287	0,01708
38	0,83740	0,83725	0,01762	0,95105	0,95108	0,00295
39	0,69134	0,69134	0,00008	0,91657	0,91698	0,04515
40	0,78871	0,78880	0,01147	0,89170	0,89015	0,17383
41	0,81792	0,81784	0,01094	0,94956	0,94990	0,03674
42	0,70108	0,70103	0,00668	0,21554	0,21732	0,82580
43	0,88609	0,88612	0,00376	0,94041	0,94063	0,02361
44	0,82766	0,82769	0,00393	0,89553	0,89462	0,10133
45	0,74976	0,74983	0,00839	0,37680	0,37740	0,15949
46	0,80819	0,80820	0,00195	0,93409	0,93476	0,07123
47	0,72055	0,72056	0,00055	0,88657	0,88650	0,00779
48	0,76924	0,76931	0,00974	0,92414	0,92478	0,06962
49	0,90556	0,90559	0,00327	0,54185	0,54041	0,26517
50	0,96398	0,96401	0,00243	0,93807	0,93848	0,04401
51	0,68160	0,68168	0,01171	0,90194	0,90229	0,03884
52	0,91530	0,91541	0,01283	0,89179	0,89005	0,19509
53	0,74976	0,74981	0,00582	0,91856	0,91821	0,03762
54	0,84714	0,84709	0,00533	0,72912	0,72945	0,04546
55	0,77898	0,77906	0,01071	0,49183	0,49390	0,42231
56	0,90556	0,90554	0,00206	0,63089	0,63108	0,03039
57	0,93477	0,93493	0,01690	0,40256	0,40387	0,32527
58	0,93477	0,93480	0,00324	0,66277	0,66196	0,12176

59	0,91530	0,91532	0,00272	0,93512	0,93533	0,02219
60	0,74003	0,74009	0,00854	0,88889	0,88978	0,09998
61	0,83740	0,83730	0,01170	0,94518	0,94505	0,01337
62	0,74003	0,74011	0,01065	0,18701	0,18719	0,09206
63	0,74976	0,74984	0,01003	0,89697	0,89610	0,09727
64	0,76924	0,76934	0,01324	0,91826	0,91925	0,10779
65	0,85687	0,85688	0,00081	0,29047	0,28998	0,16830
66	0,87635	0,87635	0,00067	0,93596	0,93526	0,07464
67	0,77898	0,77900	0,00294	0,93953	0,93972	0,02093
68	0,95425	0,95419	0,00560	0,90500	0,90630	0,14350
69	0,81792	0,81794	0,00145	0,89870	0,89836	0,03819
70	0,90556	0,90562	0,00615	0,19975	0,20008	0,16774
71	0,82766	0,82760	0,00806	0,93783	0,93748	0,03788
72	0,95425	0,95427	0,00256	0,93428	0,93502	0,07964
73	0,73029	0,73029	0,00018	0,90216	0,90160	0,06209
74	0,80819	0,80822	0,00369	0,87895	0,87794	0,11481
75	0,72055	0,72052	0,00437	0,85861	0,85777	0,09748
76	0,90556	0,90562	0,00714	0,93576	0,93573	0,00352
77	0,94451	0,94454	0,00335	0,91437	0,91306	0,14399
78	0,95425	0,95424	0,00038	0,91585	0,91502	0,09076
79	0,68160	0,68169	0,01222	0,89275	0,89401	0,14158
80	0,81792	0,81789	0,00404	0,54952	0,55088	0,24748
81	0,82766	0,82767	0,00059	0,91834	0,91750	0,09214
82	0,84714	0,84713	0,00073	0,89780	0,89641	0,15427
83	0,89582	0,89585	0,00360	0,83627	0,83647	0,02446
84	0,83740	0,83743	0,00335	0,89745	0,89643	0,11303
85	0,71082	0,71078	0,00569	0,90453	0,90546	0,10314
86	0,71082	0,71069	0,01699	0,94153	0,94131	0,02321
87	0,83740	0,83736	0,00455	0,88426	0,88556	0,14598
88	0,95425	0,95416	0,00904	0,46848	0,47229	0,81333
89	0,86661	0,86655	0,00693	0,88979	0,89031	0,05841
90	0,70108	0,70106	0,00250	0,54461	0,54351	0,20169
91	0,71082	0,71074	0,01103	0,15199	0,15041	1,03580
92	0,93477	0,93501	0,02605	0,93545	0,93502	0,04574
93	0,92503	0,92510	0,00671	0,21603	0,21596	0,03177

94	0,84714	0,84708	0,00669	0,63379	0,63247	0,20839
95	0,94451	0,94455	0,00409	0,59184	0,58988	0,33246
96	0,82766	0,82761	0,00655	0,41842	0,41522	0,76448
97	0,79845	0,79852	0,00890	0,88727	0,88671	0,06327
98	0,71082	0,71077	0,00601	0,29802	0,29894	0,30827
99	0,84714	0,84709	0,00543	0,40346	0,40372	0,06457
100	0,77898	0,77908	0,01375	0,54824	0,54834	0,01919
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>0,01976</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>0,20351</b>

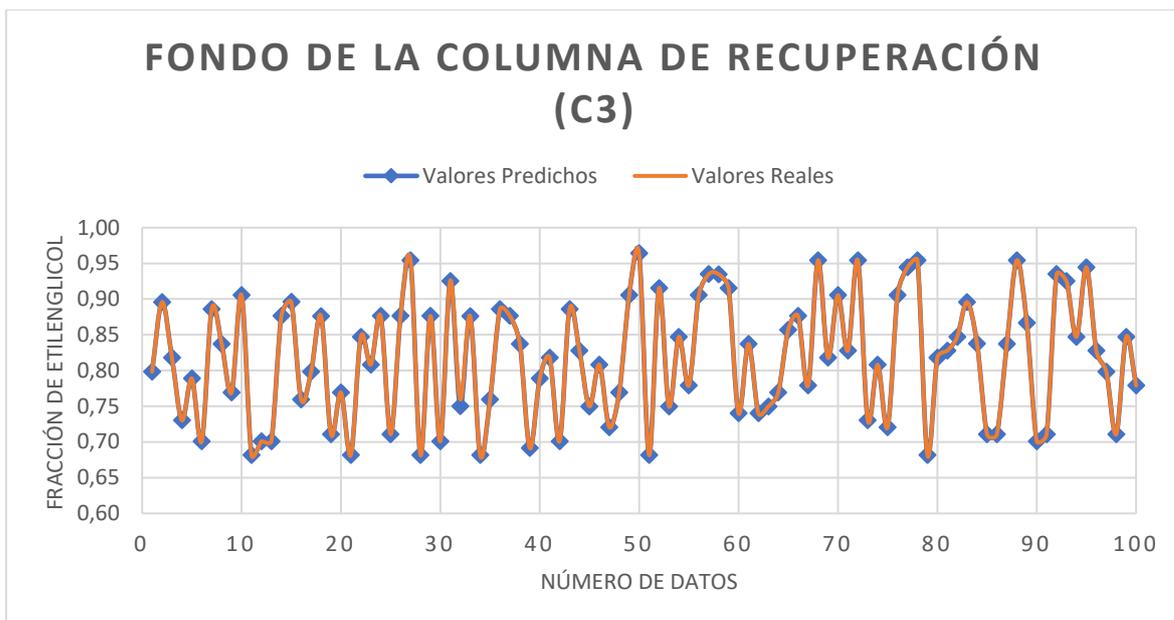
Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Gráfico 3-4.** Fracción molar de Acetonitrilo real vs el predicho en la columna de extracción (C2).

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

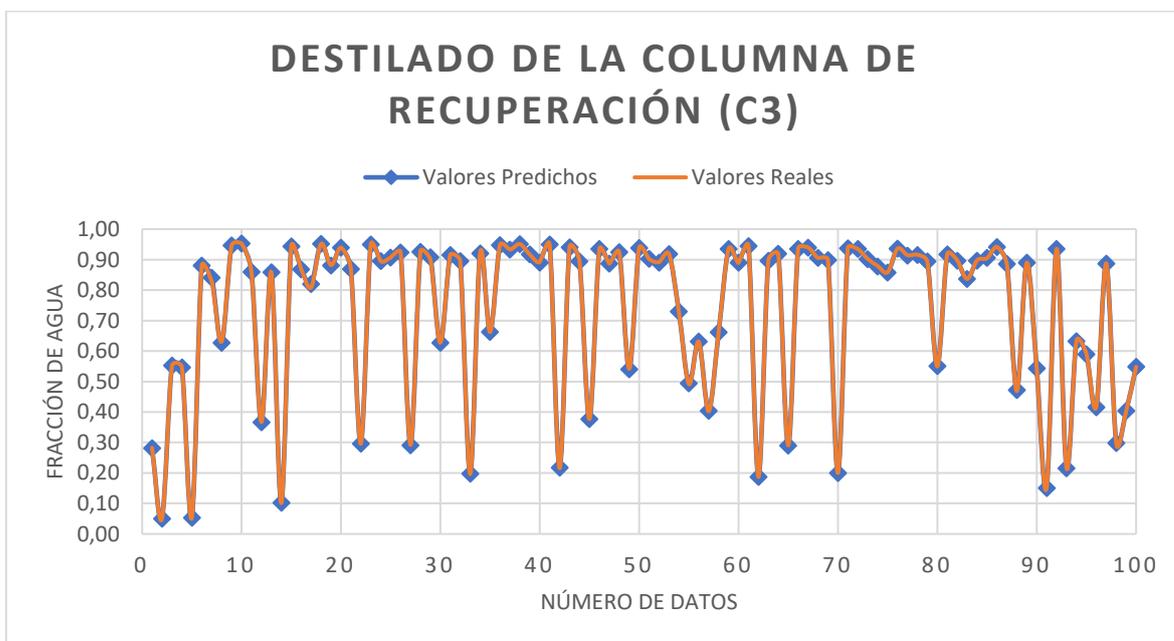
El Gráfico 3-4 se muestra los valores reales (color naranja) y valores predichos (color azul), se tiene las líneas sobre puestas. Además, se tiene un error porcentual para la fracción molar de Acetonitrilo en el destilado de la columna de extracción es de 0,09096%.



**Gráfico 4-4.** Fracción molar de Etilenglicol real vs predicho en la columna de recuperación (C3).

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

El Gráfico 4-4 refleja los valores reales (color naranja) y valores predichos (color azul), las líneas están sobrepuestas en donde se entiende que tiene un error mínimo. El error porcentual de la fracción molar del etilenglicol en el fondo de la columna de recuperación (C3) es de 0,01976%, dicho valor está reflejado en la Tabla 9-4.



**Gráfico 5-4.** Fracción molar de agua real vs el predicho en la columna de recuperación (C3).

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

En el Gráfico 5-4 se tiene un error porcentual de la fracción molar en el fondo de la columna de recuperación (C3) de 0,20351%, el valor se representa en la Tabla 9-4.

#### 4.7.3.2. Análisis gráfico de la base de datos externa para la validación de la red neuronal artificial

Se debe validar el funcionamiento de la RNA para usar como herramienta alternativa en la predicción durante la separación de acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva con el uso de etilenglicol. Para ellos se ingresó pares de datos externos que permitió evaluar el aprendizaje y la capacidad predictiva.

Se seleccionaron 20 pares de datos adicionales diferentes (con 4 entradas T,  $X_{ACN}$ ,  $X_{EG}$ , P) para obtener los productos predichos de dos columnas (extractiva y recuperación). Además, dichos valores predichos se comparan con los datos obtenidos en la simulación de DWSIM.

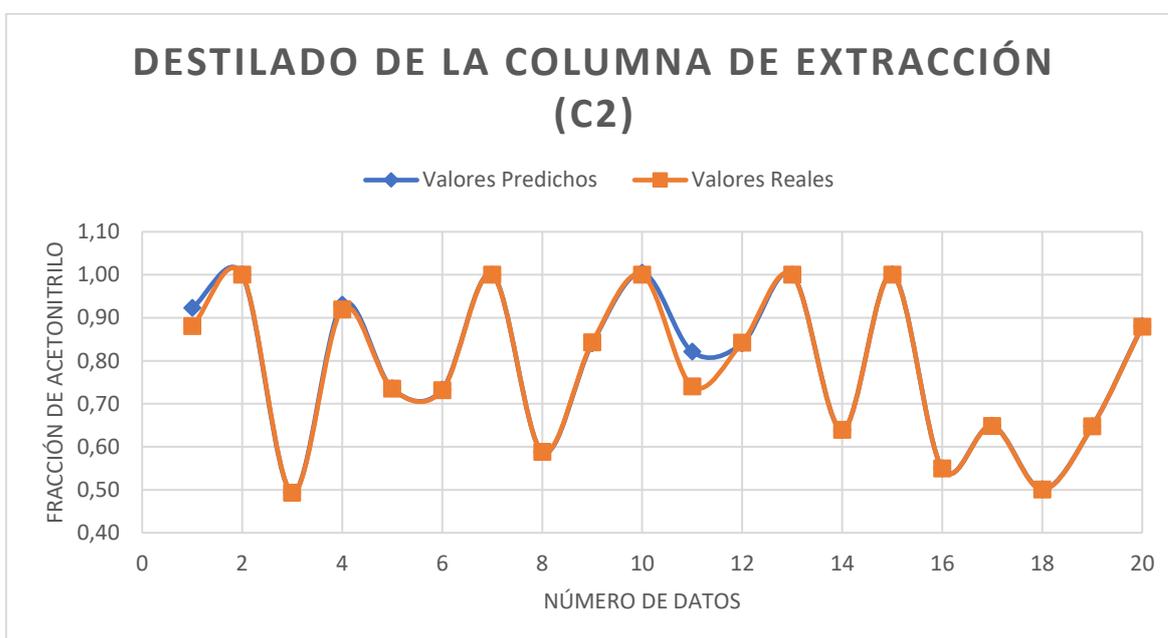
**Tabla 10-4.** Valores reales vs predichos en la columna de extracción (C2) para validación de la RNA.

<b>Datos</b>	<b>Valor Real de Acetonitrilo (C2) (DWSIM)</b>	<b>Valor Predicho de Acetonitrilo (C2) (RNA)</b>	<b>Error (%)</b>
1	0,88040	0,92291	4,82756
2	0,99997	1,00064	0,06752
3	0,49309	0,49310	0,00261
4	0,91956	0,93024	1,16088
5	0,73487	0,73563	0,10338
6	0,73135	0,73307	0,23431
7	0,99997	1,00053	0,05619
8	0,58819	0,58788	0,05251
9	0,84240	0,84037	0,24115
10	1,00000	1,00453	0,45333
11	0,74048	0,82088	10,85825
12	0,84238	0,84027	0,25146
13	0,99997	1,00044	0,04625
14	0,63921	0,63919	0,00204
15	0,99998	1,00092	0,09409
16	0,54937	0,54930	0,01272
17	0,64822	0,64889	0,10348

18	0,50014	0,50140	0,25074
19	0,64730	0,64740	0,01552
20	0,87882	0,88041	0,18127
<b>Error promedio (%)</b>			<b>0,95076</b>

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la Tabla 10-4 se tiene un error promedio de 0,95076%, dicho valor corresponde a los 20 pares de datos que se ingresó a la RNA para la predicción y validación de la misma. Además, los valores obtenidos de la validación de la red neuronal artificial se comparan con los valores obtenidos en la simulación realizada en DWSIM obteniendo el error porcentual.



**Gráfico 6-4.** Fracción molar de acetonitrilo de la columna de extracción en la validación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la Gráfica 6-4 se muestra que la RNA obtenida es eficiente para la predicción de nuevos pares de datos.

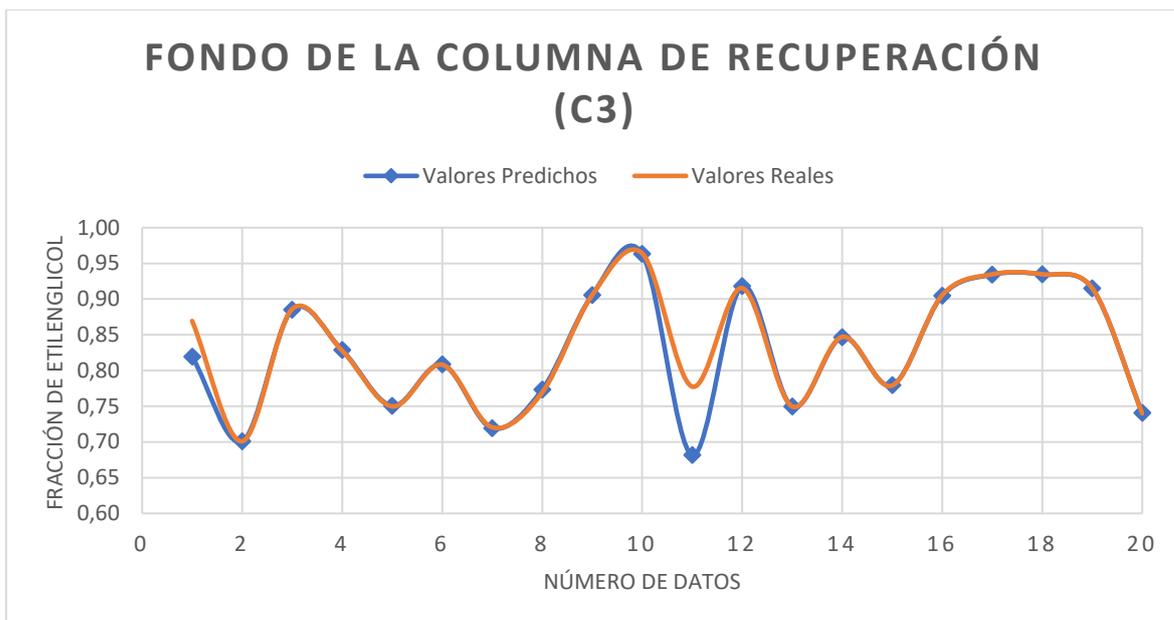
**Tabla 11-4.** Valores reales vs predichos en la columna de recuperación (C3) para la validación de la RNA.

Datos	Fracción molar EG (DWSIM)	Fracción molar EG (MATLAB)	Error (%)	Fracción molar de agua (D3)	Fracción molar de agua (D3)	Error (%)
1	0,86936	0,81952	5,73269	0,90167	0,89119	1,16249
2	0,70108	0,70087	0,02991	0,27649	0,27668	0,06844

3	0,88609	0,88490	0,13331	0,95408	0,95489	0,08501
4	0,82766	0,82849	0,09967	0,88797	0,89026	0,25783
5	0,74976	0,75066	0,11935	0,90812	0,90896	0,09196
6	0,80819	0,80859	0,04937	0,91716	0,91727	0,01227
7	0,72055	0,71927	0,17733	0,28963	0,29276	1,08187
8	0,76924	0,77310	0,50253	0,93335	0,93611	0,29552
9	0,90556	0,90573	0,01847	0,90903	0,90652	0,27600
10	0,96398	0,96324	0,07661	0,64360	0,65210	1,32113
11	0,77751	0,68165	12,32833	0,91077	0,88783	2,51956
12	0,91530	0,91795	0,28950	0,91060	0,90961	0,10853
13	0,74974	0,74976	0,00184	0,24761	0,24169	2,39059
14	0,84714	0,84647	0,07857	0,93294	0,93413	0,12745
15	0,77898	0,77949	0,06538	0,63064	0,62981	0,13063
16	0,90556	0,90480	0,08355	0,94774	0,94786	0,01241
17	0,93477	0,93424	0,05722	0,93861	0,94134	0,29029
18	0,93477	0,93447	0,03196	0,95564	0,95852	0,30188
19	0,91530	0,91508	0,02389	0,93694	0,93807	0,12056
20	0,74003	0,74074	0,09629	0,88067	0,88490	0,48070
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>0,99979</b>	<b>Error promedio (%)</b>		<b>0,55675</b>

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

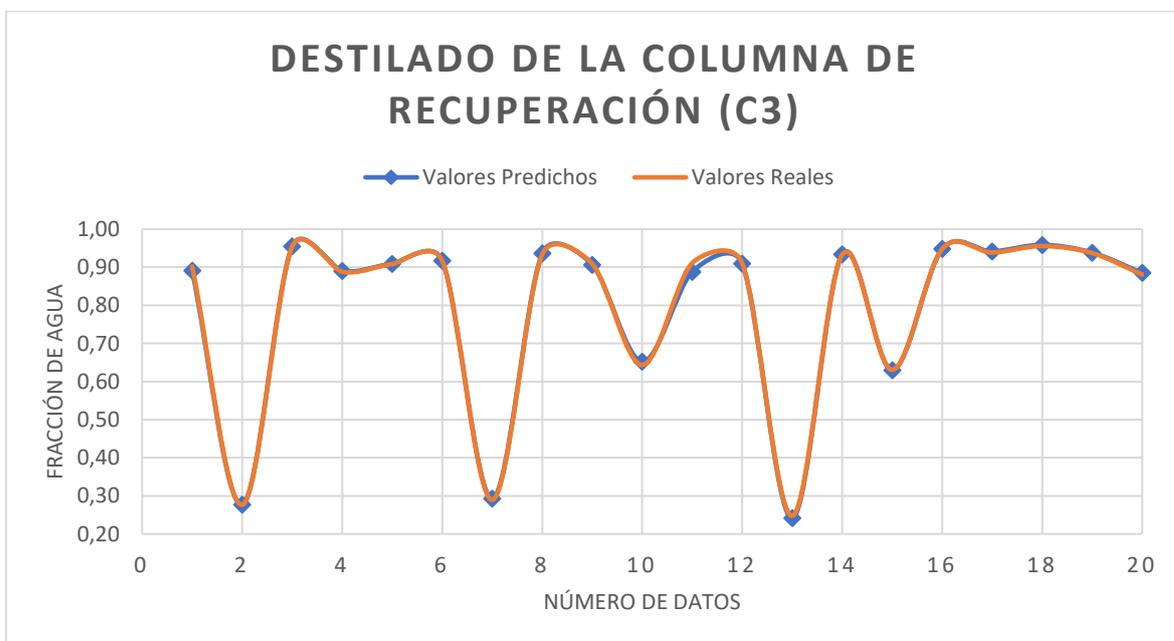
En la Tabla 11-4 se muestra el error promedio de la columna de recuperación en la obtención de agua y etilenglicol con 0,99979 y 0,55675 respectivamente. Además, se tiene un error atípico de 12,32833% pero se incluye en el error promedio.



**Gráfico 7-4.** Fracción molar de etilenglicol de la columna de recuperación en la validación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la Gráfica 7-4 se puede observar la tendencia de los valores predichos (línea azul) y valores reales (línea naranja). Además, se observa el error atípico de la línea azul que representa el 12,32833%. La RNA tiene una buena capacidad predictiva de los productos al ingresar los nuevos pares de datos.



**Gráfico 8-4.** Fracción molar de agua de la columna de recuperación (C3) en la validación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la Gráfica 8-4 se observa la predicción de la RNA entrenada, que tiene gran capacidad predictiva. Los valores reales (línea naranja) están sobre puestas sobre la línea azul (valores predichos).

#### 4.8. Resultados del análisis estadístico en SPSS

Los valores y gráficos que se obtuvieron en la RNA suponen resultados buenos, es necesario llevar a cabo un análisis estadístico de estos resultados para conocer el nivel de confiabilidad en la predicción de fracciones molares de acetonitrilo, etilenglicol y agua.

El presente análisis estadístico se realizó en el programa SPSS, como se muestra a continuación.

**Tabla 12-4.** ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
<b>Fracción Molar de acetonitrilo en el destilado de la columna 2</b>					
Entre grupos	0,00050645	1	0,00050645	0,02	0,9005
Intra grupos	1,21478	38	0,0319679		
Total (Corr.)	1,21529	39			
<b>Fracción Molar de etilenglicol en el fondo de la columna 3</b>					
Entre grupos	0,00050091	1	0,00050091	0,07	0,7945
Intra grupos	0,276505	38	0,00727646		
Total (Corr.)	0,277006	39			
<b>Fracción Molar de agua en el destilado de la columna 3</b>					
Entre grupos	4,0704E-06	1	4,0704E-06	0	0,9934
Intra grupos	2,24216	38	0,0590043		
Total (Corr.)	2,24217	39			

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente entre-grupos y un componente dentro-de-grupos. La razón-F, para la fracción molar de acetonitrilo en destilado de la columna 2 es de 0,0158423, en la fracción molar de etilenglicol del fondo de la columna 3 es de 0,0688398 y para la fracción molar del agua en el destilado de la columna tres es de 0,0000689855, el cual es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos. Puesto que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0,05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las 2 variables con un nivel del 95,0% de confianza.

**Tabla 13-4.** Medias con intervalos de confianza del 95%

<b>Fracción Molar de acetonitrilo en el destilado de la columna 2</b>					
	<b>Casos</b>	<b>Media</b>	<b>(s agrupada)</b>	<b>Límite Inferior</b>	<b>Límite Superior</b>
<b>Valor Real C2 (ACN)</b>	20	0,781783	0,03998	0,724554	0,839013
<b>Valor Predicho C2 (ACN)</b>	20	0,7889	0,03998	0,73167	0,84613
<b>Total</b>	40	0,785342			
<b>Fracción Molar de etilenglicol en el fondo de la columna 3</b>					
	<b>Casos</b>	<b>Media</b>	<b>(s agrupada)</b>	<b>Límite Inferior</b>	<b>Límite Superior</b>
<b>Valor Real C3 (EG)</b>	20	0,835028	0,0190741	0,807725	0,862332
<b>Valor Predicho C3 (EG)</b>	20	0,827951	0,0190741	0,800647	0,855255
<b>Total</b>	40	0,83149			
<b>Fracción Molar de agua en el destilado de la columna 3</b>					
	<b>Casos</b>	<b>Media</b>	<b>(s agrupada)</b>	<b>Límite Inferior</b>	<b>Límite Superior</b>
<b>Valor Real C3 (AGUA)</b>	20	0,795663	0,0543159	0,717912	0,873414
<b>Valor Predicho C3 (AGUA)</b>	20	0,795025	0,0543159	0,717274	0,872776
<b>Total</b>	40	0,795344			

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

En la tabla 13-4 muestra la media para cada columna de datos. También muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. El error estándar es el resultado de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel.

Además, la tabla muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95,0% de las veces.

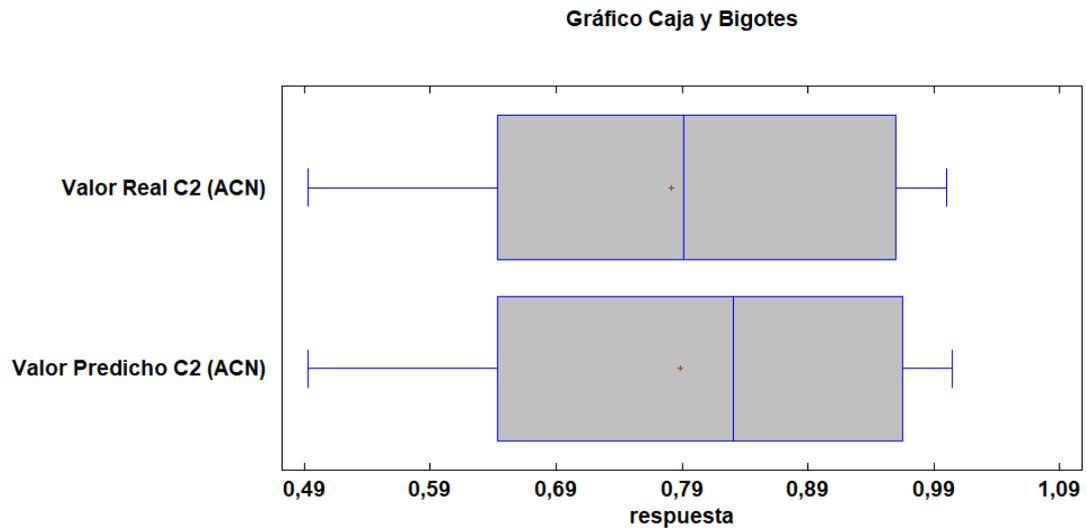
**Tabla 14-4.** Prueba de Kruskal-Wallis.

<b>Fracción Molar de acetonitrilo en el destilado de la columna 2</b>		
	<b>Tamaño de Muestra</b>	<b>Rango Promedio</b>
<b>Valor Real C2 (ACN)</b>	20	19,7
<b>Valor Predicho C2 (ACN)</b>	20	21,3
Estadístico = 0,187387 Valor-P = 0,6651		
<b>Fracción Molar de etilenglicol en el fondo de la columna 3</b>		
	<b>Tamaño de Muestra</b>	<b>Rango Promedio</b>
<b>Valor Real C3 (EG)</b>	20	20,975
<b>Valor Predicho C3 (EG)</b>	20	20,025
Estadístico = 0,0660614 Valor-P = 0,79716		
<b>Fracción Molar de agua en el destilado de la columna 3</b>		
	<b>Tamaño de Muestra</b>	<b>Rango Promedio</b>
<b>Valor Real C3 (AGUA)</b>	20	20,55
<b>Valor Predicho C3 (AGUA)</b>	20	20,45
Estadístico = 0,000731707 Valor-P = 0,97842		

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

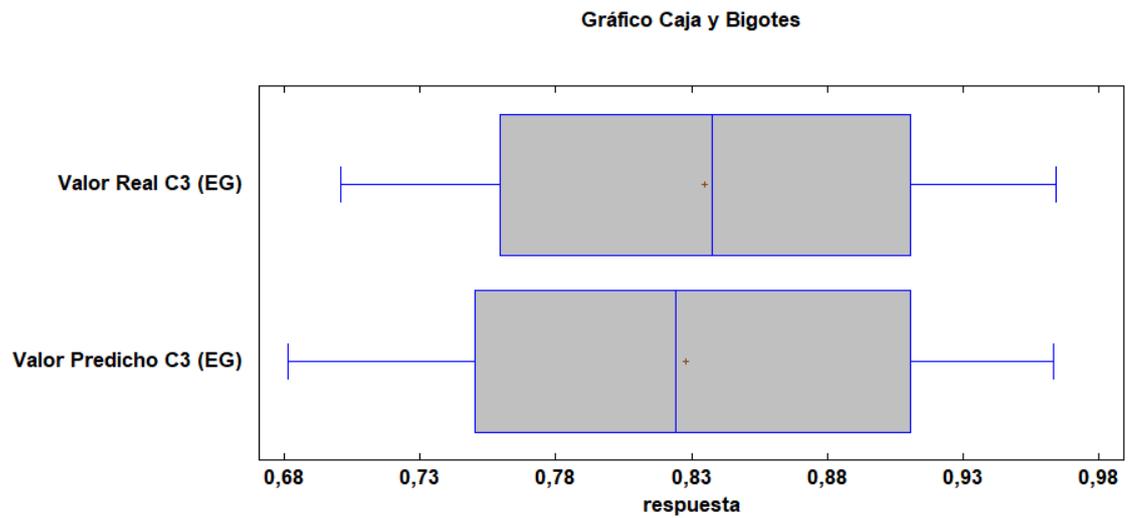
En la Tabla 14-4 se muestra la prueba de Kruskal-Wallis, en la cual se evalúa la hipótesis nula de que las medianas dentro de cada una de las 2 columnas es la misma.

Primero se combinan los datos de todas las columnas y se ordenan de menor a mayor. Después, se calcula el rango (rank) promedio para los datos de cada columna. Puesto que el valor-P es mayor o igual que 0,05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel del 95,0% de confianza.



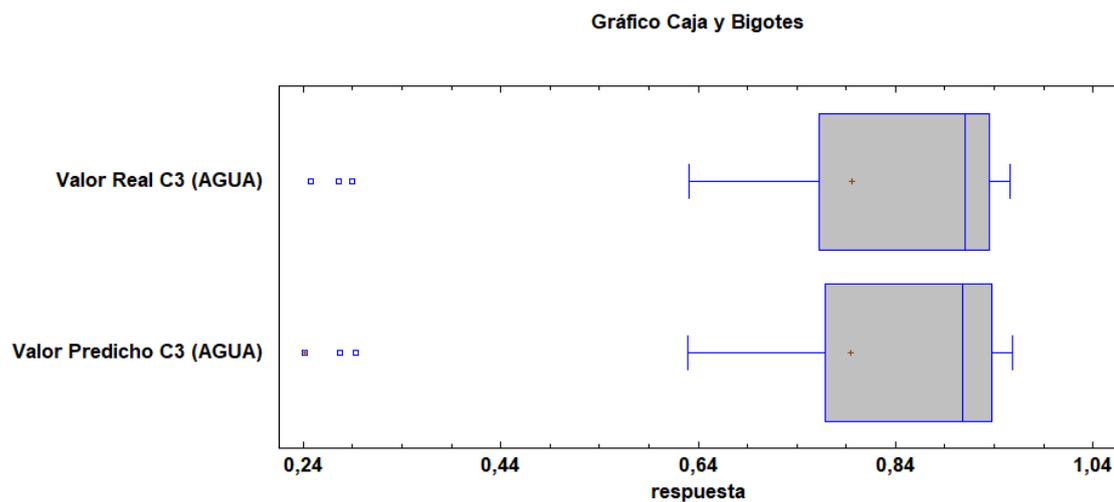
**Gráfico 9-4.** Caja y bigotes para la fracción del acetonitrilo C2

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Gráfico 10-4.** Caja y bigotes para la fracción de etilenglicol C3

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.



**Gráfico 11-4.** Caja y bigotes de la fracción de agua C3.

**Realizado por:** Edwin, Medina, 2021.

En los gráficos de cajas y bigotes muestran donde se concentran la mayoría de los datos de los analizados, las líneas verticales de los extremos indica el inferior y superior que toman los datos. Además, los puntos que se indican en los extremos son los datos atípicos que se tienen en la base de datos que se usó para la validación de la RNA. Como se aprecia en los gráficos las cajas y bigotes tienen poca similitud entre los valores reales y valor predicho.

## CONCLUSIONES

- Mediante el uso de DWSIM se realizó la simulación del proceso de separación de la mezcla acetonitrilo-agua mediante destilación extractiva, propuesto por CUI, C. y SUN, J., 2019, mismo que sirvió como base que proporcionó datos, equipos y esquema de funcionamiento de la simulación. Se modificó el esquema eliminando la recirculación del flujo de etilenglicol a la columna 2.
- Se validó la simulación comparando los resultados proporcionados por la investigación de referencia y los datos obtenidos en el simulador DWSIM. Además, se verificó que el error porcentual que existe entre los resultados es menor al 10%, dichos errores fueron del análisis de las fracciones molares de acetonitrilo, etilenglicol y agua correspondiente a la columna 2 y 3.
- Se realizó un análisis de sensibilidad para determinar las entradas y salidas a la red neuronal artificial. El análisis se realizó en el simulador DWSIM para obtener resultados rápidos y precisos, obteniendo así; temperatura del flujo de alimentación al proceso, fracción molar de acetonitrilo de alimentación, presión de la columna de preconcentración (Columna 1) y fracción molar del disolvente (etilenglicol) como entradas para la RNA y fracción molar de acetonitrilo (Destilado de la columna 2), fracción molar de etilenglicol (Fondo de la columna 3) y fracción molar del agua (Destilado de la columna 3) como salidas de la RNA.
- Mediante el software de MATLAB y una base de datos provenientes de la simulación en DWSIM, se elaboró una red neuronal artificial capaz de predecir las fracciones molares de los productos (acetonitrilo, etilenglicol y agua). La red fue diseñada con 9 neuronas ocultas y se usó el algoritmo Bayesian Regularization, con un MSE de  $3,0723e-05$  y un coeficiente de regresión total de 0,99996.
- Se evaluó la predicción de la RNA mediante un análisis estadístico ANOVA, en donde se compara los valores reales de las fracciones molares de acetonitrilo, etilenglicol y agua proporcionados por el simulador y los valores predichos por la red neuronal artificial, teniendo un valor de confiabilidad del 95%.

## RECOMENDACIONES

- Para realizar el análisis de sensibilidad resulta óptimo combinar variables, debido que individualmente no se observa variaciones significativas de los resultados en la simulación. Al combinar variables la variación es mejor. Normalizar los datos en caso de ser superiores a 1 tanto en entradas como salidas, para un mejor aprendizaje de la red neuronal artificial. Dicha normalización se puede realizar en el Software MATLAB o en la Herramienta Excel.
- Realizar un correcto procesamiento de datos para evitar la aparición de datos atípicos, los cuales pueden influir en la red neuronal artificial. En caso de tener datos atípicos resulta óptimo descartar dichos valores.
- Además del MSE y  $R^2$  que se obtiene en el Software MATLAB se puede optar por otras herramientas estadísticas como ANOVA, gráfico de cajas y bigotes, gráfico de medias, entre otros para validar la red neuronal artificial.

## GLOSARIO

**Destilación:** Operación unitaria que se encarga de la separación de una mezcla, líquida o vapor.

**Extracción:** Realiza el tratamiento de mezclas de dos o más componentes, empleando un tercer que disuelve a uno de ellos y solubiliza una fracción pequeña del otro haciendo que se presenten dos fases.

**Azeótropo:** Al vaporizar una mezcla a cierta temperatura y presión, las fases de líquido y vapor poseen las mismas composiciones.

**Redes neuronales:** Son técnicas de inteligencia computacional, para reconocimiento de patrones y modelado de sistemas. Se puede mencionar que son similares a las neuronas humanas.

**Entrenamiento bayesiano:** Mediante la suposición de una función de densidad a priori y a medida que obtiene los datos, calcula la densidad de los posteriores pesos.

**Normalización:** Proceso de organizar datos para minimizar redundancia y eliminar ambigüedades, dichos datos comprenderán entre 1 el valor más alto y 0 el valor mínimo.

**Etilenglicol:** Líquido incoloro, higroscópico y miscible con muchos disolventes polares.

**Regularización Bayesiana:** Pretende resolver el problema de optimización de los pesos de la red neuronal simultáneamente con el problema de la generalización.

**Acetonitrilo:** Líquido incoloro, conocido como el nitrilo orgánico más simple.

## BIBLIOGRAFÍA

**AGATONOVIC-KUSTRIN, S. y BERESFORD, R.**, Basic concepts of artificial neural network (ANN) modeling and its application in pharmaceutical research. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2000, vol. 22, no. 5, pp. 717-727. ISSN 07317085. DOI 10.1016/S0731-7085(99)00272-1.

**CHEN, Y., LIU, C. y GENG, Z.**, Design and control of fully heat-integrated pressure swing distillation with a side withdrawal for separating the methanol/methyl acetate/acetaldehyde ternary mixture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2018, vol. 123, pp. 233-248. [Consulta: 6 noviembre 2020]. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2017.11.013. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2017.11.013>.

**CUI, C. y SUN, J.**, Rigorous design and simultaneous optimization of extractive distillation systems considering the effect of column pressures. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification* [en línea], 2019, vol. 139, no. April, pp. 68-77. [Consulta: 7 noviembre 2020]. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2019.04.001. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2019.04.001>.

**DIXIT, S., SINGHAL, V., AGARWAL, A. y PRASADA RAO, A.K.**, Multi-label phaseprediction in high-entropy-alloys using Artificial-Neural-Network. *Materials Letters* [en línea], 2020, vol. 268, pp. 127606. ISSN 18734979. DOI 10.1016/j.matlet.2020.127606. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.127606>.

**GEANKOPLIS, C.J.**, *Procesos de transporte y operaciones unitarias* [en línea]. S.l.: CECSA. [Consulta: 7 noviembre 2020], 1982, ISBN 9789682603006. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=KrL6OgAACAAJ>.

**GERBAUD, V., RODRIGUEZ-DONIS, I., HEGELY, L., LANG, P., DENES, F. y YOU, X.Q.**, Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2019, vol. 141, pp. 229-271. [Consulta: 6 noviembre 2020]. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.09.020. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.09.020>.

**HOSGOR, E., KUCUK, T., OKSAL, I.N. y KAYMAK, D.B.**, Design and control of distillation processes for methanol-chloroform separation. *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2014, vol. 67, pp. 166-177. ISSN 00981354. DOI

10.1016/j.compchemeng.2014.03.026.

Disponible

en:

<http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.03.026>.

**KIM, K.J., DIWEKAR, U.M. y TOMAZI, K.G.**, Entrainer selection and solvent recycling in complex batch distillation. *Chemical Engineering Communications*, 2004, vol. 191, no. 12, pp. 1606-1633. ISSN 00986445. DOI 10.1080/00986440490472724.

**LI, D., GAO, Z., VASUDEVAN, N.K., LI, H., GAO, X., LI, X. y XI, L.**, Molecular Mechanism for Azeotrope Formation in Ethanol/Benzene Binary Mixtures through Gibbs Ensemble Monte Carlo Simulation. *Journal of Physical Chemistry B*, 2020, vol. 124, no. 16, pp. 3371-3386. ISSN 15205207. DOI 10.1021/acs.jpcc.9b12013.

**LLADOSA, E., MONTÓN, J.B. y BURGNET, M.C.**, Separation of di-n-propyl ether and n-propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2011, vol. 50, no. 11-12, pp. 1266-1274. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.ccep.2011.07.010.

**LUYBEN, W. y CHIEN, I.**, *Design and Control of Distillation Systems for Separating Azeotropes* [en línea]. 2011, S.l.: Wiley. [Consulta: 6 noviembre 2020]. ISBN 9781118209837. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=vR8BNxZy5WQC>.

**MAALEM, Y., ZARFA, A., TAMENE, Y., FEDALI, S. y MADANI, H.**, Prediction of thermodynamic properties of the ternary azeotropic mixtures. *Fluid Phase Equilibria* [en línea], 2020, vol. 517, pp. 112613. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2020.112613. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2020.112613>.

**NAJAFI-MARGHMALEKI, A., KHOSRAVI-NIKOU, M.R. y BARATI-HAROONI, A.**, A new model for prediction of binary mixture of ionic liquids + water density using artificial neural network. *Journal of Molecular Liquids*, 2016, vol. 220, pp. 232-237. ISSN 01677322. DOI 10.1016/j.molliq.2016.04.085.

**WASEWAR, K., KUMAR, S., ANTO, I., MALVIYA, J. y KUMAR, M.**, Artificial Neural Network (ANN) Modeling of Reactive Distillation. *The IUP Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2009, vol. 1, no. 1, pp. 54-64. [Consulta: 6 noviembre 2020]. Disponible en: <https://ssrn.com/abstract=1487497>.

**WILLIS, M.J., DI MASSIMO, C., MONTAGUE, G.A., THAM, M.T. y MORRIS, A.J.,** Artificial neural networks in process engineering. *IEE Proceedings D: Control Theory and Applications*, 1991, vol. 138, no. 3, pp. 256-266. ISSN 01437054. DOI 10.1049/ip-d.1991.0036.

**YOU, X., GU, J., GERBAUD, V., PENG, C. y LIU, H.,** Optimization of preconcentration, entrainer recycle and pressure selection for the extractive distillation of acetonitrile-water with ethylene glycol. *Chemical Engineering Science* [en línea], 2018, vol. 177, pp. 354-368. ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2017.11.035. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2017.11.035>.

**ZHANG, Z.,** A gentle introduction to artificial neural networks. *Annals of Translational Medicine*, 2016, vol. 4, no. 19, pp. 1-6. ISSN 23055847. DOI 10.21037/atm.2016.06.20.

**ZHAO, Y., GONG, M., DONG, X., ZHANG, H., GUO, H. y WU, J.,** Prediction of ternary azeotropic refrigerants with a simple method. *Fluid Phase Equilibria* [en línea], 2016, vol. 425, pp. 72-83. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2016.05.010. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2016.05.010>.

## ANEXOS

### ANEXO A. NOMBRES DE LAS VARIABLES USADAS PARA EL DISEÑO DE LA RNA.

<b>DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA</b>	
<b>VARIABLE</b>	<b>DESCRIPCIÓN</b>
<b>Datos</b>	Asociar el documento de Excel a MATLAB
<b>Normalizados</b>	Busca la hoja especifica que contiene los pares de datos.
<b>Matriz</b>	Extrae los valores del Excel.
<b>Entrada</b>	Valores de temperatura de alimentación, fracción molar del acetonitrilo, presión de la columna 1 y fracción molar del etilenglicol.
<b>Salidas</b>	Fracciones molares de: acetonitrilo, etilenglicol y agua.
<b>PropPred</b>	Valores predichos por la RNA.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

**ANEXO B. NOMBRES DE LAS VARIABLES USADAS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA.**

<b>VALIDACIÓN DE LA RNA</b>	
<b>VARIABLE</b>	<b>DESCRIPCIÓN</b>
<b>Datos</b>	Asociar el documento de Excel a MATLAB.
<b>validacion</b>	Busca la hoja especifica que contiene los pares de datos.
<b>matrizval</b>	Extrae los valores del Excel.
<b>matriz.mat</b>	Parámetros de la RNA diseñada.
<b>entval</b>	Valores de temperatura de alimentación, fracción molar del acetonitrilo, presión de la columna 1 y fracción molar del etilenglicol.
<b>Val</b>	Valores predichos por la RNA para la validación.

Realizado por: Edwin, Medina, 2021.

## ANEXO C. SCRIPT PARA DISEÑO Y ENTRENAMIENTO DE LA RNA.

%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel

```
Obtener=readtable('Datos.xlsx','Sheet','normalizados');
```

%Convertir la tabla a Matriz Numérica

```
Matriz = table2array(Obtener);
```

%Parámetro de Entrada Presión

```
Entrada=Matriz(1:4,:);
```

%Parámetro de Salida Presión

```
Salidas=Matriz(5:7,:);
```

% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network

% Script generated by Neural Fitting app

% Created 27-Jan-2021 17:42:00

%

% This script assumes these variables are defined:

%

% Entrada - input data.

% Salidas - target data.

```
x = Entrada;
```

```
t = Salidas;
```

% Choose a Training Function

% For a list of all training functions type: help nntrain

% 'trainlm' is usually fastest.

% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.

% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.

```
trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.
```

% Create a Fitting Network

```
hiddenLayerSize = 9;
```

```
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
```

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions

```

% For a list of all processing functions type: help nprocess
net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% For a list of all data division functions type: help nndivision
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 5/100;
net.divideParam.testRatio = 25/100;

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

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

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

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

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

```

```

% View the Network
view(net)

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

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

PropPred = net(Entrada(1:end,:))

```

## ANEXO D. SCRIPT PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA.

%obtener los datos desde la hoja de excell

```
obtener=readtable('Datos.xlsx','sheet','validacion');
```

%Convertir la tabla de datos a Matriz Numérica

```
matrizval=table2array(obtener);
```

% Cargar archivo net y workspace del entrenamiento

```
load('matriz.mat');
```

%Entrada de las nuevas entradas para validar

```
entval=(matrizval(1:4,:));
```

%Obtener salidas con las nuevas entradas

```
Val=net(entval(1:end,:));
```

**ANEXO E. VALORES REALES VS PREDICHOS EN LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN (C2).**

<b>Datos</b>	<b>Valor Real de Acetonitrilo (C2) (DWSIM)</b>	<b>Valor Predicho de Acetonitrilo (C2) (RNA)</b>	<b>Error (%)</b>
1	0,99998	0,99981	0,01719
2	0,99999	1,00059	0,06023
3	0,99998	1,00047	0,04880
4	0,99997	0,99993	0,00380
5	0,99998	1,00057	0,05862
6	0,87190	0,87072	0,13561
7	0,99999	1,00801	0,80210
8	0,99998	0,99789	0,20918
9	0,49310	0,49347	0,07620
10	0,50117	0,50164	0,09301
11	0,96352	0,96415	0,06537
12	1,00000	1,00024	0,02456
13	0,96856	0,96817	0,04027
14	0,99999	0,99854	0,14444
15	0,59154	0,59179	0,04105
16	0,97035	0,96967	0,07042
17	0,99998	1,00768	0,76953
18	0,49883	0,49940	0,11375
19	0,87096	0,87102	0,00674
20	0,54122	0,54098	0,04436
21	0,91486	0,91443	0,04731
22	0,99999	1,00038	0,03956
23	0,49125	0,49313	0,38228
24	0,92970	0,93023	0,05772
25	0,72858	0,72964	0,14542
26	0,73368	0,73429	0,08336
27	1,00000	1,00005	0,00527
28	0,58683	0,58607	0,13004
29	0,83190	0,83131	0,07062
30	0,99997	1,00034	0,03748
31	0,83280	0,83239	0,04996
32	0,82632	0,82779	0,17771

33	0,99999	1,00002	0,00277
34	0,62978	0,63096	0,18684
35	0,99998	0,99931	0,06677
36	0,54212	0,54125	0,16071
37	0,64732	0,64731	0,00188
38	0,49222	0,49256	0,07025
39	0,63918	0,63938	0,03141
40	0,87480	0,87435	0,05159
41	0,49298	0,49373	0,15298
42	0,99997	1,00001	0,00446
43	0,59762	0,59738	0,04046
44	0,87937	0,87932	0,00521
45	0,99997	1,00062	0,06488
46	0,59492	0,59545	0,08910
47	0,83238	0,83258	0,02352
48	0,64158	0,64193	0,05425
49	0,99999	0,99983	0,01580
50	0,69083	0,69135	0,07495
51	0,73043	0,73081	0,05144
52	0,98128	0,98040	0,08962
53	0,68154	0,68195	0,05900
54	0,99999	1,00050	0,05137
55	0,99998	0,99957	0,04069
56	0,99999	1,00041	0,04181
57	1,00000	1,00031	0,03186
58	1,00000	0,99801	0,19864
59	0,65101	0,65112	0,01722
60	0,83308	0,83457	0,17920
61	0,54017	0,53998	0,03535
62	0,99997	0,99924	0,07342
63	0,82123	0,82180	0,06926
64	0,68645	0,68782	0,19995
65	0,99999	0,99984	0,01485
66	0,63887	0,63837	0,07882
67	0,54367	0,54349	0,03233

68	0,93563	0,93600	0,03991
69	0,83630	0,83680	0,05946
70	0,99999	0,99968	0,03117
71	0,58975	0,58887	0,14921
72	0,69863	0,69887	0,03478
73	0,77455	0,77559	0,13473
74	0,96717	0,96981	0,27304
75	0,97513	0,97471	0,04355
76	0,64768	0,64698	0,10799
77	0,84408	0,84354	0,06378
78	0,84430	0,84430	0,00051
79	0,77886	0,78045	0,20383
80	0,99998	1,00058	0,05984
81	0,73407	0,73446	0,05367
82	0,88099	0,88057	0,04771
83	0,99999	1,00028	0,02865
84	0,87850	0,87831	0,02141
85	0,73425	0,73377	0,06555
86	0,49357	0,49501	0,29169
87	0,93529	0,93620	0,09784
88	1,00000	1,00199	0,19970
89	0,93475	0,93494	0,02021
90	0,99997	0,99933	0,06415
91	0,99997	1,00024	0,02731
92	0,68919	0,68920	0,00028
93	0,99999	1,00005	0,00565
94	0,99999	0,99932	0,06653
95	1,00000	0,99679	0,32077
96	0,99998	0,99920	0,07880
97	0,88586	0,88595	0,00966
98	0,99997	1,00026	0,02864
99	0,99999	1,00024	0,02589
100	0,99998	0,99972	0,02529
	<b>Error promedio (%)</b>		<b>0,09096</b>



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE  
UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL**

**REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA**

**Fecha de entrega:** 01 / 09 / 2021

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> <i>Edwin Paul Medina Guaman</i>
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> <i>Ciencias</i>
<b>Carrera:</b> <i>Ingeniería Química</i>
<b>Título a optar:</b> <i>Ingeniero Químico</i>
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO  
FABIO MEDINA  
NUSTE**

Firmado digitalmente por LEONARDO  
FABIO MEDINA NUSTE  
Nombre de reconocimiento (DN): c=EC,  
o=BANCO CENTRAL DEL ECUADOR,  
ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE  
INFORMACION-ECIBCE, l=QUITO,  
serialNumber=0000621485,  
cn=LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE  
Fecha: 2021.09.01 09:12:51 -05'00'



**1574-DBRA-UTP-2021**