



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

**DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA PREDICCIÓN DE LA  
DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA POR OSCILACIÓN DE PRESIÓN  
PARA LA SEPARACIÓN DE ISOPROPANOL**

**Trabajo de Integración Curricular**

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar el grado académico de:

**INGENIERA QUÍMICA**

**AUTORA: ADRIANA LIZBETH CASTILLO CEVALLOS**  
**DIRECTOR: ING. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO, Mgs.**

Riobamba- Ecuador

2023

© 2023, Adriana Lizbeth Castillo Cevallos

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

Yo, Adriana Lizbeth Castillo Cevallos, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular es de mi autoría y los resultados de este 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 Integración Curricular. El patrimonio intelectual a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 27 de noviembre de 2023



**Adriana Lizbeth Castillo Cevallos**

**220015305-0**

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

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: el Trabajo de Integración Curricular; tipo: Proyecto Técnico, **DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA PREDICCIÓN DE LA DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA POR OSCILACIÓN DE PRESIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE ISOPROPANOL**, realizado por la señorita: **ADRIANA LIZBETH CASTILLO CEVALLOS**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	<b>FIRMA</b>	<b>FECHA</b>
Ing. Camilo Pavel Haro Barroso, Mgs <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>		27-11-2023
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco, Mgs <b>DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR</b>		27-11-2023
Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy, Mgs <b>ASESOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR</b>		27-11-2023

## **DEDICATORIA**

A Dios, a mis padres, a mis hermanos, familiares y enamorado quienes han sido mi apoyo incondicional a lo largo de esta travesía académica, le dedico este logro con todo mi amor y gratitud.

Adriana

## **AGRADECIMIENTO**

Quiero expresar mi sincero agradecimiento a las personas que han sido fundamental en mi viaje académico y personal:

A mis padres, Javier y Rosita, por su amor, sacrificio y apoyo constante. Sin ustedes, este logro no sería posibles.

A mis queridos hermanos, Jefferson y Arleth, por ser fuente de inspiración y compañía en cada etapa de mi vida.

A mi abuelita, María, por su amor incondicional y sabios consejos que siempre me han guiado.

A mis tías, Lily y Paty, por su cariño y apoyo en los momentos más importantes.

A mis amistades, Nayeli, Katherine y Angie, por su amistad sincera y por estar a mi lado en las buenas y en las malas.

Y a mi enamorado, Giancarlo, por ser mi refugio, mi motivación y mi mayor fanático. Tu amor siempre ha sido fuente de fuerza.

A todos ustedes, les dedico este logro con profundo agradecimiento. Su presencia en mi vida ha hecho que este camino sea aún más valioso.

Adriana

## ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS .....	xiii
RESUMEN.....	xiv
SUMARY/ABSTRACT .....	xv
INTRODUCCIÓN .....	1

## CAPÍTULO 1

1.     DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA .....	2
1.1   Planteamiento del problema .....	2
1.2   Justificación .....	3
1.3   Objetivos .....	4
1.3.1 <i>Objetivo General</i> .....	4
1.3.2 <i>Objetivos Específicos</i> .....	4

## CAPÍTULO 2

2.     MARCO TEÓRICO .....	5
2.1   Antecedentes de investigación.....	5
2.1.1 <i>Procesos para la producción del isopropanol</i> .....	5
2.1.2 <i>Simulación de procesos de destilación</i> .....	6
2.1.3 <i>Redes Neuronales Artificiales en la Industria química</i> .....	7
2.2   Referencias Teóricas.....	8
2.2.1 <i>Isopropanol</i> .....	8
2.2.2 <i>Producción del isopropanol</i> .....	9
2.2.3 <i>Destilación</i> .....	9
2.2.4 <i>Azeótropos</i> .....	10
2.2.5 <i>Destilación azeotrópica</i> .....	12
2.2.6 <i>DWSIM</i> .....	13

<b>2.2.9</b>	<i>ChemSep (cape-open)</i> .....	16
<b>2.2.10</b>	<i>Redes Neuronales Artificiales</i> .....	16
<b>2.2.11</b>	<i>Aplicaciones de las Redes Neuronales Artificiales</i> .....	17
<b>2.2.12</b>	<i>Redes neuronales artificiales de una capa y multicapa</i> .....	18

## CAPÍTULO 3

<b>3.</b>	<b>MARCO METODOLÓGICO</b> .....	20
<b>3.1</b>	<b>Etapas de la metodología</b> .....	20
<b>3.2</b>	<b>Descripción del proceso</b> .....	21
<b>3.3</b>	<b>Parámetros de funcionamiento</b> .....	22
<b>3.4</b>	<b>Simulación de DWSIM</b> .....	24
<b>3.5</b>	<b>Análisis de sensibilidad</b> .....	33
<b>3.6</b>	<b>Tratamiento de datos</b> .....	33
<b>3.7</b>	<b>Diseño de la RNA en MATLAB</b> .....	34
<b>3.8</b>	<b>Instrucción de la RNA</b> .....	35
<b>3.9</b>	<b>Validación de los resultados</b> .....	36
<b>3.10</b>	<b>Análisis estadístico</b> .....	36

## CAPÍTULO 4

<b>4.</b>	<b>MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE DATOS</b> .....	38
<b>4.1</b>	<b>Resultados de la simulación en DWSIM</b> .....	38
<b>4.2</b>	<b>Validación de los resultados de la simulación</b> .....	38
<b>4.3</b>	<b>Balance de masa del sistema</b> .....	39
<b>4.4</b>	<b>Análisis de sensibilidad</b> .....	46
<b>4.1.1</b>	<i>Resultados del análisis de sensibilidad de las tres columnas de destilación</i> ....	47
<b>4.5</b>	<b>Resultados del adiestramiento de la ANN</b> .....	51
<b>4.6</b>	<b>Resultados del diseño del ANN</b> .....	53
<b>4.7</b>	<b>Rendimiento de la RNA</b> .....	54
<b>4.8</b>	<b>Resultados alcanzados por la predicción de la ANN</b> .....	56

<b>4.8.1</b>	<i>Estudio de las predicciones de la ANN .....</i>	56
<b>4.8.2</b>	<i>Datos predichos en la validación externa .....</i>	58
<b>4.9</b>	<b>Análisis ANOVA .....</b>	60
<b>4.10</b>	<b>Resultados del análisis de optimización .....</b>	65

**CONCLUSIONES.....** ..... 67

**RECOMENDACIONES.....** ..... 68

**BIBLIOGRAFÍA**

**ANEXOS**

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-3:</b> Condiciones operativas iniciales para el sistema de estudio.....	22
<b>Tabla 2-3:</b> Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación C-1 .....	23
<b>Tabla 3-3:</b> Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación C-2.....	23
<b>Tabla 4-3:</b> Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación C-3 .....	24
<b>Tabla 5-3:</b> Parámetros operativos empleados en la simulación de DWSIM.....	25
<b>Tabla 6-3:</b> Parámetros operativos de TCHSPS para el análisis operativo. ....	33
<b>Tabla 7-3:</b> Parámetros de entradas de RNA. ....	33
<b>Tabla 8-3:</b> Parámetros de salida de RNA.....	34
<b>Tabla 1-4:</b> Flujos molares obtenidos en el DWSIM.....	38
<b>Tabla 2-4:</b> Verificación de las fracciones molares DWSIM vs Artículo.....	39
<b>Tabla 3-4:</b> Verificación de las temperaturas DWSIM vs Artículo.....	39
<b>Tabla 4-4:</b> Corrientes de alimentación de las tres columnas de destilación azeotrópica. ....	39
<b>Tabla 4-5:</b> Variables para el análisis de sensibilidad .....	46
<b>Tabla 5-4:</b> Análisis de sensibilidad de las tres columnas de destilación.....	46
<b>Tabla 6-4:</b> Resultados del adiestramiento de la RNA en MATLAB.....	51
<b>Tabla 7-4:</b> Error cuadrático medio del entrenamiento final RNA.....	54
<b>Tabla 8-4:</b> Tabla ANOVA para IPA del fondo de la Col-2. ....	61
<b>Tabla 9-4:</b> Tabla ANOVA para DIPE del fondo de la Col-3.....	62
<b>Tabla 10-4:</b> Tabla ANOVA para IPA del destilado de la Col-1. ....	63
<b>Tabla 11-4:</b> Tabla ANOVA para DIPE del destilado de la Col-3.....	64
<b>Tabla 12-4:</b> Resultados de la optimización de la separación IPA/DIPE. ....	66

## ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

<b>Ilustración 1-2:</b> Estructura del isopropanol .....	9
<b>Ilustración 2-2:</b> Azeótropos.....	10
<b>Ilustración 3-2:</b> Desviaciones positivas de la Ley de Raoult.....	11
<b>Ilustración 4-1:</b> Desviaciones positivas de la Ley de Raoult.....	12
<b>Ilustración 5-2:</b> Interfaz DWSIM. ....	14
<b>Ilustración 6-2:</b> Esquema básico de una RNA.....	17
<b>Ilustración 7-2:</b> RNA en una sola capa.....	18
<b>Ilustración 8-2:</b> RNA multicapa. ....	19
<b>Ilustración 1-3:</b> Metodología para el desarrollo de la RNA .....	20
<b>Ilustración 2-3:</b> Diagrama de la destilación azeotrópica por oscilación de presión. ....	21
<b>Ilustración 3-3:</b> Esquema de la separación de isopropanol en DWSIM. ....	24
<b>Ilustración 4-3:</b> Entorno para la selección de componentes en DWSIM.....	26
<b>Ilustración 5-3:</b> Entorno para la selección de unidades de medida en DWSIM. ....	26
<b>Ilustración 6-3:</b> Especificaciones de presiones en ChemSep de C1.....	27
<b>Ilustración 7-3:</b> Propiedades termodinámicas de C1.....	27
<b>Ilustración 8-3:</b> Configuración operativa de C1.....	28
<b>Ilustración 9-3:</b> Especificaciones de condiciones para C1. ....	28
<b>Ilustración 10-3:</b> Especificaciones de presiones en ChemSep de C2. ....	29
<b>Ilustración 11-3:</b> Propiedades termodinámicas de la C2. ....	29
<b>Ilustración 12-3:</b> Configuración operativa para C2.....	30
<b>Ilustración 13-3:</b> Especificaciones de condiciones para C2. ....	30
<b>Ilustración 14-3:</b> Especificaciones de presiones en ChemSep de C3. ....	31
<b>Ilustración 15-3:</b> Propiedades termodinámicas de C3. ....	31
<b>Ilustración 16-3:</b> Configuración operativa para C3 .....	32
<b>Ilustración 17-3:</b> Especificaciones de condiciones para C3 .....	32
<b>Ilustración 18-3:</b> Diagrama de flujo para el diseño de la RNA .....	34
<b>Ilustración 1-4:</b> Esquema de balance general de la Col-1. ....	40
<b>Ilustración 2-4:</b> Esquema de balance general de la Col-2. ....	42
<b>Ilustración 3-4:</b> Esquema de balance general de la Col-3. ....	44
<b>Ilustración 4-4:</b> Resultados del análisis A_1 .....	48
<b>Ilustración 5-4:</b> Resultados del análisis A_2 .....	48
<b>Ilustración 6-4:</b> Resultados del análisis A_3 .....	49
<b>Ilustración 7-4:</b> Resultados del análisis A_4 .....	49
<b>Ilustración 8-4:</b> Resultados del análisis A_5 .....	50

<b>Ilustración 9-4:</b> Resultados del análisis A_6 .....	50
<b>Ilustración 10-4:</b> Entrenamiento de Leverberg-Marquardt con 90 capas ocultas.....	52
<b>Ilustración 11-4:</b> Entrenamiento de Bayesian Regularization con 50 capas ocultas. ....	53
<b>Ilustración 12-4:</b> Entrenamiento de Scaled Conjugate Gradient con 90 capas ocultas. ....	53
<b>Ilustración 13-4:</b> Estructura de la RNA diseñada en MATLAB. ....	54
<b>Ilustración 14-4:</b> Progreso del MSE durante el entrenamiento. ....	55
<b>Ilustración 15-4:</b> Resultados de la capacidad predictiva de la RNA. ....	55
<b>Ilustración 16-4:</b> Predicción de la fracción molar de IPA en el entrenamiento.....	56
<b>Ilustración 17-4:</b> Predicción de la fracción molar de DIPE en el entrenamiento. ....	57
<b>Ilustración 18-4:</b> Predicción de la fracción molar de IPA en el entrenamiento.....	57
<b>Ilustración 19-4:</b> Predicción de la fracción molar de DIPE en el entrenamiento. ....	58
<b>Ilustración 20-4:</b> Predicción de la fracción molar de IPA en la validación externa. ....	58
<b>Ilustración 21-4:</b> Predicción de la fracción molar de DIPE en la validación externa.....	59
<b>Ilustración 22-4:</b> Predicción de la fracción molar de IPA en la validación externa. ....	59
<b>Ilustración 23-4:</b> Predicción de la fracción molar de DIPE en la validación externa.....	60
<b>Ilustración 24-4:</b> Gráfico de medias para la XIPA de la Col-2. ....	61
<b>Ilustración 25-4:</b> Gráfico de caja y bigote para la XIPA de la Col-2. ....	61
<b>Ilustración 26-4:</b> Gráfico de medias para la XDIPE de la Col-3. ....	62
<b>Ilustración 27-4:</b> Gráfico de caja y bigote para la XDIPE de la Col-3. ....	63
<b>Ilustración 28-4:</b> Gráfico de medias para la XIPA de la Col-1. ....	64
<b>Ilustración 29-4:</b> Gráfico de caja y bigote para la XIPA de la Col-1. ....	64
<b>Ilustración 30-4:</b> Gráfico de medias para la XDIPE de la Col-3. ....	65
<b>Ilustración 31-4:</b> Gráfico de caja y bigote para la XDIPE de la Col-3. ....	65

## **ÍNDICE DE ANEXOS**

**ANEXO A:** BASE DE DATOS CREADA PARA EL ENTRENAMIENTO DE LA RNA

**ANEXO B:** VARIABLES USADAS EN EL CÓDIGO DE PROGRAMACIÓN DE LA RNA EN  
MATLAB

**ANEXO C:**CÓDIGO PARA EL DISEÑO, ADIESTRAMIENTO Y VALIDACIÓN DE LA  
RNA

**ANEXO D:** ERRORES PORCENTUALES REGISTRADOS EN EL ADIESTRAMIENTO DE  
LA RNA

**ANEXO E:** BASE DE DATOS PARA ALA VALIDACIÓN EXTERNA

**ANEXO G:** ERRORES PORCENTUALES REGISTRADOS EN LA VALIDCIÓN EXTERNA DE  
LA RNA

## RESUMEN

El objetivo fundamental de este estudio consiste en realizar una simulación y validación de un sistema de destilación por oscilación de presión, ampliamente empleado en la industria química y farmacéutica con el fin de separar la mezcla azeotrópica de isopropanol-agua. El objetivo central fue el desarrollo de una Red Neuronal Artificial (RNA) con la capacidad de pronosticar las concentraciones molares de isopropanol y diisopropil éter en las corrientes de salidas del destilado y del fondo de las tres columnas. Para desarrollar la RNA, se ha empleado una base de datos a partir del simulador DWSIM. Esta base de dato consta de 400 registros, con seis variables de entrada incluyendo la temperatura de alimentación, fracción molar de alimentación de IPA, fracción molar de DIPE en la entrada, las presiones de las tres columnas de destilación (Col-1, Col-2, Col-3). Asimismo, se obtuvieron cuatro variables de salidas que comprenden las concentraciones de IPA y DIPE en el destilado y residuo. En el proceso del desarrollo, adiestramiento, validación y pruebas de la RNA se empleó en el software MATLAB junto con la aplicación Neural Net Fitting. La arquitectura de la red se basó en el algoritmo de Bayesian Regularization, con seis entradas y cuatro salidas, y se configuró con una capa oculta que consta de 50 neuronas. La RNA alcanzó un Error Cuadrático Medio de 0,00075905 y un coeficiente de regresión lineal R de 0,99188, lo que indica un buen rendimiento. Sin embargo, para evaluar la confiabilidad de la red, se calculó el error porcentual entre las predicciones de la RNA y los valores reales obtenidos en DWSIM. Este análisis incluyó una validación interna y externa. Además, se utilizó un programa estadístico para realizar el ANOVA para respaldar los resultados obtenidos. Finalmente, se realizó una mejora del proceso con el propósito de determinar las condiciones de operación que permitieron la separación de isopropanol-agua obteniendo un IPA y DIPE de alta pureza.

**Palabras clave:** <DWSIM (SOFTWARE)>, <ISOPROPANOL>, <RED NEURONAL ARTIFICIAL>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD>, <BAYESIAN REGULARIZATION (ALGORITMO)>, <DIISOPROPIL ÉTER>.

2083-DBRA-UPT-2023



## ABSTRACT

The main objective of this study is to perform a simulation and validation of a pressure swing distillation system, widely used in the chemical and pharmaceutical industry to separate the azeotropic isopropanol-water mixture. The central objective consisted of the development of an Artificial Neural Network (ANN) with the ability to predict the molar concentrations of isopropanol and diisopropyl ether in the distillate outlet streams and the bottom of the three columns. To develop the ANN, a database from the DWSIM simulator was used. This database consists of 400 records, with six input variables including feed temperature, IPA feed mole fraction, DIPE mole fraction at the inlet and the pressures of the three distillation columns (Col-1, Col-2, Col-3). Four output variables comprising the concentrations of IPA and DIPE in the distillate and residue were also obtained. In the process of development, training, validation and testing of the ANN, MATLAB software was used in conjunction with the Neural Net Fitting application. The network architecture was based on the Bayesian Regularization algorithm, with six inputs and four outputs, and was configured with a hidden layer consisting of 50 neurons. The ANN achieved a (MSE)Mean Squared Error of 0.00075905 and a linear regression coefficient R of 0.99188, indicating good performance. However, to assess the reliability of the network, the percentage error between ANN predictions and the actual values obtained in DWSIM was calculated. This analysis included internal and external validation. In addition, a statistical program was used to perform ANOVA to support the results obtained. Finally, a process improvement was performed with the purpose of determining the operating conditions that allowed the separation of isopropanol-water obtaining a high purity IPA and DIPE.

**Key words:** <DWSIM (SOFTWARE)>, <ISOPROPANOL>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <SENSITIVITY ANALYSIS>, <BAYESIAN REGULARIZATION (ALGORITHM)>, <DIISOPROPYL ETHER>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.

1103696132

## **INTRODUCCIÓN**

La separación de mezclas azeotrópicas representa un importante desafío en diversos sectores a nivel industrial, especialmente en química y farmacéutica. Los azeótropos son combinaciones que tiene un punto de ebullición constante, lo que hace que la separación mediante destilación convencional sea complicada, y no se obtenga los productos en alta pureza. Un ejemplo problemático es el azeótropo de isopropanol-agua, que se encuentra en numerosas aplicaciones industriales.

Recientemente, se ha buscado superar las limitaciones de los métodos de destilación tradicionales mediante el desarrollo de técnicas y tecnologías innovadoras y eficientes. Una estrategia prometedora es la destilación por oscilación de presión, que aprovecha las variaciones en el equilibrio líquido-vapor bajo diferentes presiones para separar mezclas azeotrópicas. Al modificar las condiciones de presión durante la destilación, es posible superar la naturaleza azeotrópica y mejorar la eficiencia de la separación.

Para lograr un rendimiento óptimo en la destilación por oscilación de presión y separar azeótropos de isopropanol-agua de manera eficaz, es esencial la incorporación de herramientas predictivas avanzadas. En este contexto, las Redes Neuronales Artificiales (RNA) emergen como una solución destacada. Las RNA son una rama de inteligencia artificial que se especializa en modelar y predecir datos temporales complejos, lo que las hace especialmente adecuadas para capturar el comportamiento dinámico de los sistemas de destilación.

## CAPÍTULO I

### 1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

#### 1.1 Planteamiento del problema

El 2-propanol, también denominado alcohol isopropílico, isopropanol o IPA; es considerado un solvente ampliamente utilizado en las industrias química, petroquímica y farmacéutica debido a sus propiedades versátiles. Es un tipo de alcohol que presenta características particulares como su olor intenso, su color incoloro y la capacidad para mezclarse fácilmente con el agua. Es un alcohol iso porque, aunque comparte la misma composición básica que el alcohol propílico, su estructura atómica es diferente, lo que da lugar a sus propiedades fisicoquímicas distintivas (Moreno et al., 2019, p.119).

El 2-propanol, conocido como alcohol isopropílico o isopropanol, se produce principalmente a través de una reacción de hidratación que implica la mezcla de agua y propileno. También es posible obtenerlo en una medida más pequeña a través de la hidrogenación de acetona. En este proceso de hidratación, existen dos métodos de fabricación comunes: uno indirecto haciendo uso ácido sulfúrico y otro directo que involucra catalizadores soportados, el propileno, en este contexto, es esencialmente una mezcla ternaria que incluye éter di isopropílico, isopropanol y agua en concentraciones variables. Sin embargo, la presencia de múltiples de azeótropos en esta mezcla hace que la producción de isopropanol requiera un alto consumo de energía. Estos azeótropos son responsables de la complejidad del proceso y de la necesidad de una mayor energía para separar los componentes y obtener isopropanol puro (Moreno et al., 2019, p.120).

En su estudio, (Guang et al., 2019, p.1) presentan una innovadora propuesta para mejorar el proceso de destilación. Esta mejora se basa en la combinación de un cambio de presión y uso de heteroazeótropo en tres columnas de destilación, y se intensifica aún más mediante la aplicación de tecnologías como las columnas de pared divisoria (DWC) y la recompresión de vapor (VRC). Esta estrategia conduce a dos procesamientos que se destacan por su eficiencia energética.

Con el fin de mejorar la eficiencia del proceso y reducir costos de producción, se propone como proyecto de titulación la simulación y verificación del proceso de producción de isopropanol a través del empleo de las nuevas tecnologías como la destilación azeotrópica por oscilación de presión (Guang et al., 2019, p.1). Para llevar a cabo esta simulación, se utilizará el software libre DWSIM. Para verificar la presión de los resultados obtenidos, se realizará una combinación de los resultados de estudios previos que utilizaron software de simulación con licencia. Además, se

planea crear una base de datos a partir de los resultados obtenidos en la simulación realizada con DWSIM. Esta información será de gran utilidad para desarrollar una Red Neuronal Artificial (RNA) utilizando el software MATLAB. La RNA tendrá la capacidad de predecir los flujos de alimentación, fracciones molares y concentraciones de los compuestos involucrados en el proceso de obtención de isopropanol. Este enfoque permitirá optimizar el proceso y tomar decisiones más informadas en la producción de IPA.

## 1.2 Justificación

La síntesis de isopropanol, también conocido como IPA, se puede llevar a cabo a través de varios mecanismos, siendo dos de los más destacados el procedimiento directo y el procedimiento indirecto. En el método directo, el isopropanol se produce mediante la reacción de propano y el agua en presencia de un catalizador sólido. Por otro lado, en el método indirecto, el propileno reacciona con ácido sulfúrico para formar una clase de ésteres de sulfato generando como productos secundarios agua, alcohol isopropílico y éter di isopropílico.

La corriente de isopropanol obtenida a través de la hidratación directa del propileno se compone de una mezcla ternaria que incluye éter di isopropílico, isopropanol y agua, aunque con la concentración relativamente baja. Sin embargo, la presencia de varios azeótropos en esta mezcla plantea un desafío significativo en términos de consumo de energía durante el posterior procesamiento de isopropanol. Para abordar este problema, se ha propuesto un innovador proceso de destilación que implica un cambio de presión y la utilización de hetero azeótropos en tres columnas de corriente de vapor de destilación, específicamente diseñadas para oscilación de presión heterogénea. Logrando como resultado un proceso altamente eficiente desde el punto e vista energético para separación de isopropanol.

No obstante, llevar a cabo estudios para determinar las variables adecuadas en el proceso implica costos significativos en términos de inversión de capital. Por esta razón, se ha optado por la decisión de utilizar software de código abierto, como DWSIM, que no solo representa un ahorro económico considerables, sino que también permite realizar simulaciones exhaustivas. Los resultados obtenidos a través de estas simulaciones rigurosas serán sometidos a una comparación con los cálculos utilizados en el influyente artículo científico de referencia. Los datos derivados de estas simulaciones servirán como conjunto de entrenamiento para desarrollar una Red Neuronal Artificial (RNA) empleando las capacidades del conjunto de herramientas de MATLAB, una plataforma de cálculo numérico. Este enfoque permitirá realizar predicciones precisas de las proporciones molares de los distintos compuestos necesarios en la síntesis del IPA.

## **1.3 Objetivos**

### ***1.3.1 Objetivo General***

- Desarrollar una Red Neuronal Artificial para la predicción de la concentración del isopropanol mediante destilación azeotrópica por oscilación de presión.

### ***1.3.2 Objetivos Específicos***

- Determinar las variables de funcionamiento de las columnas de destilación.
- Validar la simulación del proceso productivo para la síntesis de isopropanol y agua con baja concentración comparándolo los resultados obtenidos y los presentados en el artículo científico de alto impacto.
- Diseñar una Red Neuronal Artificial (RNA) que facilite la predicción de la composición molar del isopropanol y los costos respectivos de su producción.
- Efectuar un análisis estadístico entre los valores reales en artículos científicos y predichos por la simulación para comprobar con exactitud de la Red Neuronal Artificial.

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1 Antecedentes de investigación

##### 2.1.1 Procesos para la producción del isopropanol

El alcohol propílico (IPA) o también conocido isopropanol, es considerado un solvente extensamente empleado en la industria debido a sus propiedades físicos-químicas. Su principal método de producción es la hidratación directa de propileno, que es una reacción exotérmica reversible que ocurre en presencia de un agente catalizador ácido, el cual puede ser polímeros de intercambio catiónico como el ácido molibdofosfórico, el titanio, y los óxidos de zinc (Zhang et al., 2019, p.1).

La destilación convencional no es recomendable para obtener IPA/DIPE, ya que es incapaz de lograr esta separación dado a la presencia de homo y hetero azeótropos. Por lo tanto, (Wang et al., 2006, p.386), propone adoptar la destilación extractiva la cual consiste en introducir un solvente que altera la volatilidad relativa del azeotrópico, esta destilación necesita agregar un agente conductor para generar un nuevo azeótropo de mínima ebullición, ayudando a obtener el IPA y DIPE.

Para mejorar la eficiencia general del proceso, (Chua et al., 2017, p.108), propone utilizar la destilación reactiva para la producción de IPA de dos maneras diferentes: utilizando un exceso de propileno para generar IPA puro sin requerir la separación de aguas debajo de la mezcla azeotrópica, pero esta alternativa es muy difícil y costosa, y con exceso de agua, requiere una mayor separación de IPA y agua que involucra un azeótropo con el fin de evitar la separación propileno-propano y así logrando una conversión casi completa de propileno.

Según (Xu et al., 2002, p.687), para la producción de IPA mediante la destilación catalítica que cuenta con lechos de catalizador duales, que operan a una presión de 2MPa, en el proceso de hidratación de CD, el agua será consumida de manera continua por propileno fresco y se producirá una corriente rica en IPA. Una de las ventajas de la destilación catalítica es que ayuda a reducir los costos operativos para la producción de IPA, ya que no se requiere enfriar o calentar el reactor.

Con el fin de obtener la separación de IPA/agua, (Arifin y Chien, 2007, p.2535) emplearon una destilación azeotrópica utilizando ciclohexano como agente de arrastre. Desarrollaron diferentes

diseños que funcionan a una atm con una alimentación proporcional de IPA/agua, los estudios analizan separaciones azeotrópicas binarias.

Finalmente, (Guang et al., 2019, p.2) exploró la posibilidad de producir IPA con el fin de separar el IPA Y DIPE por cambio de presión empleando la destilación extractiva, este tipo de destilación tiene una mejor capacidad de control, para lo cual se incorpora un solvente con el objetivo de separar esta mezcla. No obstante, al introducir un solvente tendría la posibilidad en causar grandes daños ambientales.

### ***2.1.2 Simulación de procesos de destilación***

La simulación de procesos químicos es considerada como una técnica que permite representar, mediante un modelo o réplica, las operaciones que están interrelacionadas con cualquier proceso real, los cuales pueden ser de carácter natural o artificial, con el fin de conocer el comportamiento de dicho sistema ante las modificaciones de las variables del proceso(Ciro, Ocaña 2005, p.10).

La metodología heurística planteada por (Niu, Rangaiah, 2016, p.A), es una excelente opción para optimizar las condiciones operativas, consta de cuatro pasos: análisis de caso base, generación de una simulación mejorada sin inversión de capital, generación de soluciones integradas y comparación de soluciones de reacondicionamiento. Esta nueva tecnología es empleada en la producción de IPA, porque implica reacciones principales y secundarias, las que están gobernadas por el equilibrio químico, por ende, su proceso de separación incluye reacciones complicadas. La simulación de IPA se realiza utilizando Aspen Plus donde ingresa una corriente de propileno fresco a (-47,6°C y 101.325KPa) y propileno reciclado se mezcla en una proporción molar de 4,65:1, se presurizan y se precalienta antes de ingresar al reactor de lecho percolador. Mientras, otra agua reactiva se presuriza a una presión de 7500 KPa para alimentar el reactor (Niu, Rangaiah,2016, p.H).

Según (Xu, Chuang y Sanger 2002, p.687), en la planificación del proceso destinado a la fabricación de isopropanol utilizó ecuaciones MESH ( balance de materia, equilibrio vapor-líquido, sumas de fracciones molares y balance de energía). La hidratación del propileno y éter, para obtener IPA se alimentan a un lecho catalizador. El método UNIFAC ha sido empleado con éxito para predecir los coeficientes de actividad en fase líquida y las expresiones constantes de equilibrio de sistemas no ideales. Para ello se ha utilizado la ecuación de estado Redlich-Kwing con el fin de predecir el comportamiento de fase vapor no ideal del sistema. Aspen Plus es el software con éxito que se ha empleado en la destilación catalítica, donde se obtuvieron resultados convergentes más fáciles

para el proceso de hidratación de propileno, se utilizó la unidad de destilación RadFrac integrada para obtener todos los datos informativos del proceso (Xu, Chuang y Sanger, 2002, p.688).

Con el propósito de generar IPA, (Arifin y Chien, 2007, p.2535), proponen una destilación/ absorción para separar mezclas líquidas binarias con azeótropos homogéneos, donde utilizaron el simulador comercial de estado estacionario Aspen Plus, donde se realizaron los balances de masa y energía ( ecuaciones de transferencia de masa y energía, y la isoterma de equilibrio). Acoplaron el proceso continuo de destilación con los procesos de absorción cíclica, se usaron cantidades promedio correspondientes al ciclo de ADSIM como flujo de alimentación a las columnas de destilación de Aspen Plus.

### ***2.1.3 Redes Neuronales Artificiales en la Industria química***

La aplicación de las redes neuronales artificiales en el ámbito industrial de los procesos químicos presenta varias ventajas, en particular de alta eficiencia lograda y la obtención rápida de resultados. Las RNA brindan una variedad de técnicas nuevas para dar solución a problemas en el análisis de datos de sensores, detección de fallas y control de procesos, utilizándose en la ingeniería química. Por ello (Pirdashti et al., 2013, p.205), presenta un esquema de clasificación sistemática, el cual descubre, clasifica e interpreta los trabajos presentes relacionados con las metodología y aplicaciones de los modelos neuronales computacionales.

Para (Himmelblau, 2000, p.373) , las redes neuronales artificiales son capaces de resolver tareas de carácter complejo, entre ellos: detección de fallas, predicción de la calidad del polímero, rectificación de datos y modelado.

Según la evaluación computacional neuronal de (Panerati et al., 2019, sin pg), es considerado como una herramienta muy poderosa asistida por la inteligencia artificial, los ingenieros químicos han aprovechado esta herramienta durante épocas para innumerables aplicaciones. Las RNA son implementos computacionales que brindan un modelo matemático minimalista de neurales funciones junto a datos sin procesar mediante un algoritmo de aprendizaje, puede ser empleados a tareas como modelado, clasificación y la predicción. Los ingenieros químicos han aplicado las RNA en un amplio campo: energía, producción industrial de químicos, alimentos, productos farmacéuticos, biotecnología y agua.

En los últimos años, el control avanzado de procesos, como el control predictivo de modelos se ha introducido en la industria de los procesos químicos con el fin de mejorar la eficiencia

operativa. (Shin, Smith, Hwang, 2020, p.2), ha utilizado un modelo lineal para menguar la carga de trabajo informática para la simulación y la mejora en un periodo largo, pero no se consiguió una alta precisión en el sistema de supervisión en una columna de destilación. Por ello se adoptó un modelo de red neuronal artificial en lugar de utilizar el modelo lineal para incrementar la velocidad de optimización y precisión del modelo, en el presente estudio se simuló un despropanizador mediante el software Aspen HYSYS, considerando todos los escenarios de operación factibles para generar masivas de datos de simulación dinámica, incorporando un modelo algoritmo de optimización en el sistema MPC. Con el fin de comprobar su rendimiento se realizaron cambios en el punto de ajuste y perturbaciones al modelo, comparando la eficiencia del MPC con el control convencional, como lo es la retroalimentación PID.

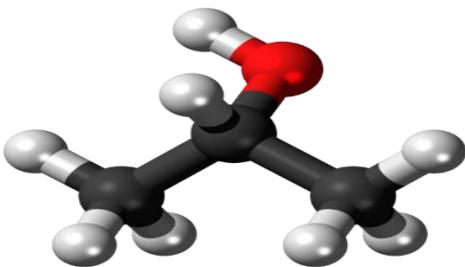
Con el propósito de mejora en los sistemas de destilación crudo con calor integrado, (Ochoa-Estopier, Jobson y Smith, 2013, p.179) en su estudio consideró un nuevo procedimiento, donde emplea un modelo neuronas artificiales para figurar una torre de destilación, donde los planteamientos de la torre de destilación y los intercambiadores de calor se adaptan a un marco de optimización logrando definir de manera metódica las condiciones de operación que contribuyen a la mejora económica de producción.

El procedimiento para obtener el modelo ANN adecuado de una torre de destilación proveniente de crudo de alta densidad, comprende de tres fases. En la primera etapa, consiste en construir muestras utilizadas como base de datos de conocimiento para la ANN, en el segundo paso se debe seleccionar la estructura y los parámetros de la ANN, y finalmente en el tercer paso se realiza el entrenamiento de la ANN. Una vez que se haya seleccionado el método para entrenar la red, los datos obtenidos a partir de simulaciones rigurosas se emplean para realizar la regresión de la columna de destilación.

## **2.2 Referencias Teóricas**

### ***2.2.1 Isopropanol***

El isopropanol (IPA) o también llamado 2-propanol o alcohol isopropílico, con formula química C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O, debido a que el IPA presenta características físicas compatibles con las del alcohol, el agua y los hidrocarburos, lo convierte en un solvente versátil, económico utilizado en las industrias químicas y cosmética. El IPA constituye el insumo principal en la producción de acetona y otros compuestos, es utilizado ampliamente como antiséptico, desinfectante con fines domésticos, hospitalarios e industriales (Chua, Rangaiah, Hidajat 2017, p.108).



**Ilustración 1-2:**Estructura del isopropanol

Fuente: Jynto, from Wikimedia Commons

### **2.2.2 Producción del isopropanol**

El alcohol isopropanol (IPA) fue el primer petroquímico sintético moderno. Existen varios métodos disponibles para la fabricación de IPA. Los métodos más empleados son la hidratación directa e indirecta de propileno. Estos dos procesos utilizan propileno y agua como materia prima (Xu, Chuang, Sanger, 2002, p.686).

La hidratación directa es un proceso que consiste en dos etapas en el que se forma un éster, posteriormente se hidroliza al alcohol correspondiente. El éter diisopropílico (DIPE) es el primer subproducto de esta reacción (Xu, Chuang y Sanger, 2002, p.687).

Mientras que la hidratación indirecta es catalizada por ácido de propileno a IPA, es una reacción reversible y exotérmica. El DIPE es nuevamente el principal subproducto (Xu, Chuang y Sanger, 2002, p.687).

### **2.2.3 Destilación**

La destilación hace referencia a la ebullición selectiva y la posterior condensación de un componente en una mezcla líquida. Por ello la destilación es considerada como una Operación Unitaria de gran importancia en la Industria química, petroquímica, farmacéutica y cosmética. La tecnología de destilación se ha desarrollado con la finalidad para la separación y purificación de mezclas en la Industria Química, debido a sus ventajas en la operación y control (De, Química 2021, p.10).

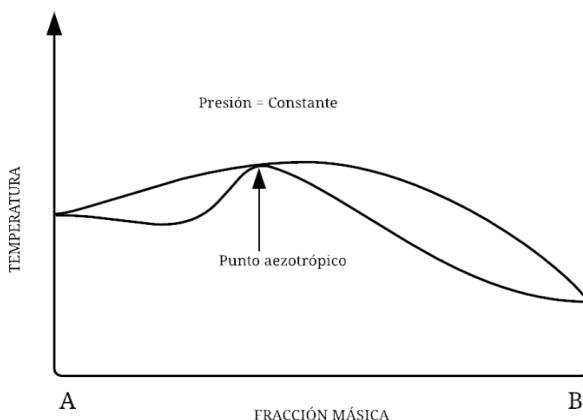
La destilación representa el principal procedimiento para purificar líquidos, es empleado para separar un líquido de las sustancias no volátiles no deseadas mediante la vaporación, esta separación consiste en capitalizar las variaciones en las presiones de vapor de los elementos de la mezcla a una temperatura estipulada (Palacio González et al., 2013, p.6).

Al momento en que las etapas líquidas y gaseosas interaccionan, la destilación se denomina rectificación, mientras que en ausencia de interacción entre las fases se denomina destilación simple. En la zona de rectificación, donde las fases al interactúan, la fase gaseosa aumenta su contenido del componente más volátil, mientras que la fase líquida lo hace con el componente más pesado (Palacio González et al., 2013, p.6).

Sin embargo, un gran inconveniente de la destilación convencional es que requiere un alto consumo de energía para poder separar las mezclas. Además, las grandes cantidades de emisiones de CO<sub>2</sub> contribuyen al calentamiento global, por ello los procesos de destilación reforzados deben desenvolverse para dar soluciones a los problemas anteriores y así lograr el rendimiento de ahorro de energía, y protegiendo el medio ambiente (Xia et al., 2017, p.10).

#### **2.2.4 Azeótropos**

El término azeótropo, de las palabras griegas (a-sin, zeo-hervir y tropos-cambio), que significa “ebullición sin cambio”, denota una mezcla de dos o más componentes en los que el componente ELV se encuentran a una temperatura y presiones establecidas. Un azeótropo se distingue de un componente puro al momento en que existe una variación de presión, cambiando la temperatura de ebullición, y la composición de la mezcla (de Química, 2006, p.11).



**Ilustración 2-2:Azeótropos.**

**Fuente:** (Kiva, Hilmen, Skogestad 2003).

En 1911, Waden y Merriam introdujeron el término de mezcla azeotrópica para designar a aquellas mezclas caracterizadas por una temperatura de ebullición mínima o máxima a presión constante o también conocidas como condiciones isotérmicas. El término se ha utilizado para sistemas líquidos que forman uno o más azeótropos (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1905).

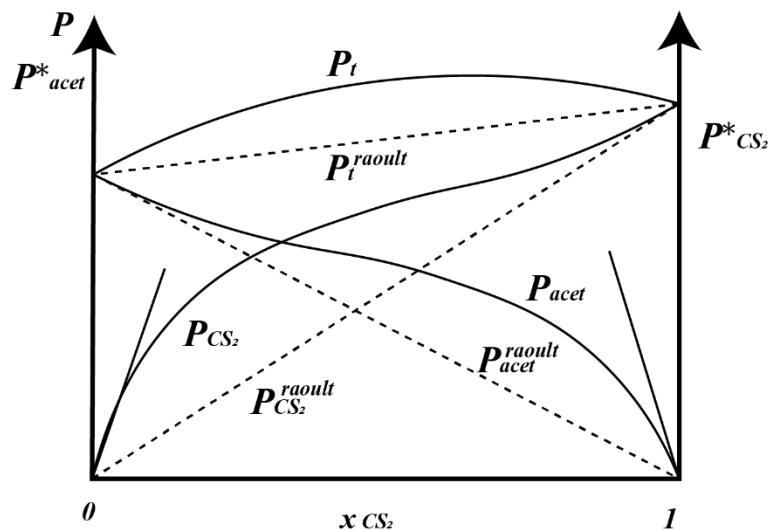
Una mezcla cuya composición corresponde al punto en el que las fases líquida y gaseosa están en equilibrio y tienen la misma composición se denomina azeótropo. En el caso de componentes puros de una mezcla, dependiendo de la temperatura de ebullición, se consideran dos factores:

- Azeótropos con puntos de ebullición mínimo o también denominados azeótropo positivo, según la desviación positiva de la Ley de Raoult.
- Azeótropos con puntos de ebullición máxima o también considerados azeótropos negativos, según la desviación negativa de la Ley de Raoult.

(Kiva, Hilmen y Skogestad.,2003, p.1905).

#### **2.2.4.1 Desviaciones positivas de la Ley de Raoult.**

Se manifiesta que un sistema demuestra una desviación positiva respecto a la Ley de Raoult, ocurre cuando las fuerzas de interacción intermoleculares respecto a los componentes son más débiles que las existentes en los componentes puros por separado, y, como resultado, la presión de vapor en la mezcla es mayor (De, Química, 2021, p.11).

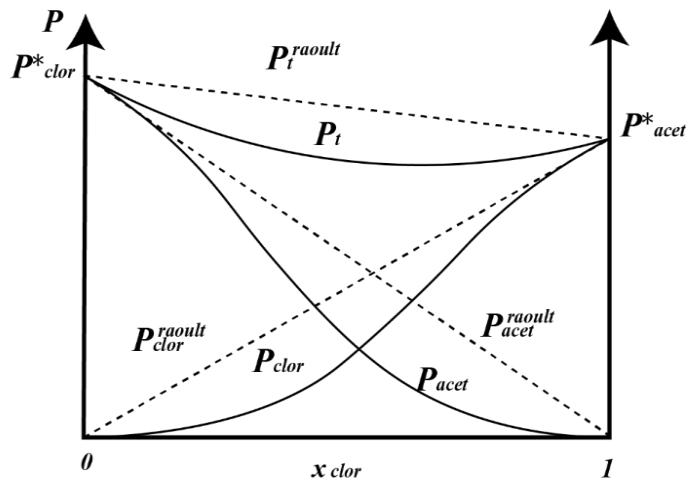


**Ilustración 3-2:** Desviaciones positivas de la Ley de Raoult.

**Fuente:** (Kiva, Hilmen, Skogestad 2003).

#### 2.2.4.2 Desviaciones negativas de la Ley de Raoult.

Se considera que un sistema demuestra una disminución con respecto a la Ley de Raoult, cuando las soluciones de las moléculas de distintas clases tienden a atraerse entre sí, entorpeciendo la tendencia al escape de las moléculas en la vaporización (De, Química, 2021, p.11).



**Ilustración 4-1:**Desviaciones positivas de la Ley de Raoult.

Fuente: (Kiva, Hilmen y Skogestad , 2003)

#### 2.2.5 Destilación azeotrópica

La separación fundamentada en la destilación puede ser muy compleja si se desea separar mezclas altamente no ideales. Existen diferentes operaciones unitarias desarrolladas con éxito, pero siempre existe una posibilidad de mejorar la técnica de destilación y ampliar su barra de herramientas (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1905).

La intensificación de los procesos representa una gran tendencia dominante en la ingeniería de procesos químicos para el desglose de combinación azeotrópicas. La destilación azeotrópica es una técnica empleada para fraccionar a un compuesto que presenta comportamiento de azeótropo (Kiva, Hilmen y Skogestad, 2003, p.1906).

Dentro del ámbito de los procedimientos de separación, el tema de mezclas azeotrópica despierta un gran interés en la industria química, especialmente en aquellas donde se utilizan disolventes. Esto se debe a que una gran cantidad de disolventes forman parte de sistemas no ideales que a menudo implican en la formación de azeótropos (Kiva, Hilmen, Skogestad 2003, p.1906).

Las mezclas azeotrópicas pueden ser separadas de manera eficaz mediante una destilación azeotrópica o extractiva, debido a la adición de un material ajeno o llamado “arrastrar” al sistema de destilación, permitiendo el rompimiento de azeótropos, siendo una excelente opción para la separación y purificación de los componentes involucrados (Jhoany Acosta Esquijarosa y Auxiliar, 2005, p.2).

#### ***2.2.5.1 Destilación azeotrópica por oscilación de presión***

La destilación azeotrópica por cambio de presión se usa ampliamente como un proceso eficaz para la separación de azeótropos sensibles a la presión en procesos industriales químicos. Ya que este tipo de destilación es menos costosa a comparación de los métodos tradicionales como la destilación extractiva sin necesidad de un disolvente extra para lograr el desglose. La destilación azeotrópica por cambio de presión implica la separación de mezclas utilizando dos columnas que operan a diferentes presiones. Para ello, se requiere un producto de alta pureza en un extremo de las columnas, mientras que en el otro extremo se utiliza un reciclado de composición cercana a los dos azeótropos (Daniel et al., p.2).

La destilación por cambio de presión (PSD) de mezclas azeotrópicas funciona según el principio de que una variación en la presión puede cambiar la volatilidad relativa de una mezcla líquida. A medida que la presión de trabajo se incrementa, el punto azeotrópico se modifica para reducir el valor de composición de los componentes ligeros. Permitiendo la separación sin el uso de agentes separadores cuando aumenta la volatilidad y ocurre un cambio positivo significativo en el punto azeotrópico (Daniel et al., p.2).

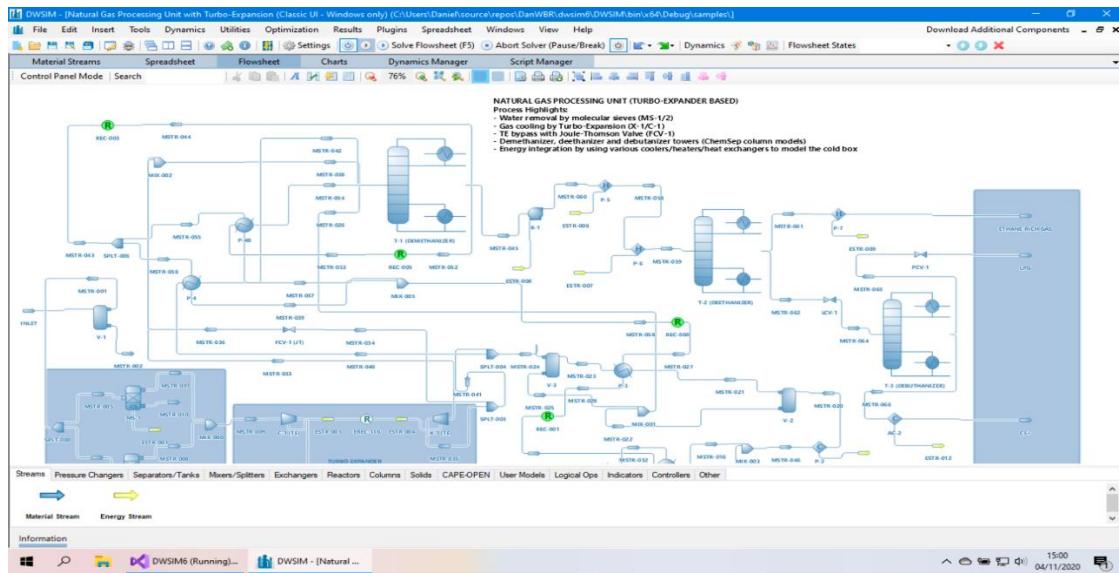
#### ***2.2.5.2 Mezcla azeotrópica isopropanol/agua.***

Un azeótropo de isopropanol y agua es una mezcla de estos dos líquidos con una composición constante y un punto de ebullición mínimo. La mezcla tiene un 87% de isopropanol y un 13% de agua, y un punto de ebullición de 80,4 °C a 1 atm. Esto hace que la separación por destilación convencional sea difícil, ya que los componentes de la mezcla no se pueden separar fácilmente (Maalem et al., 2020, p.2).

#### ***2.2.6 DWSIM***

El software libre DWSIM es empleado para simulación de una variedad de procesos químicos, los cuales pueden ser duplicados a escala industrial. DWSIM cumple con el estándar Cape-Open permitiendo la interoperabilidad de soluciones, lo que le da al usuario la opción de intercalar interfaces de modelamiento de diferentes softwares (DWSIM,2022).

DWSIM cuenta con dos interfaces gráficas de usuario, la primera es un interfaz de usuario clásica (IU) y la segunda es una interfaz de usuario multiplataforma, la interfaz gráfica está basada en la librería gráfica de clase de Windows Forms (DWSIM, 2022).



**Ilustración 5-2:** Interfaz DWSIM.

Fuente: (DWSIM, 2022)

### 2.2.7 Paquetes Termodinámicos

Los paquetes termodinámicos son el conjunto de ecuaciones matemáticas y datos que son empleados en los programas de simulación de procesos con el fin de modelar el comportamiento termodinámico de los componentes o mezclas de sustancias en una Operación Unitaria (Rodriguez, 2013, p.106).

Es importante seleccionar el paquete termodinámico adecuado para un proceso en específico ya que asegura la exactitud y confiabilidad de los resultados de la simulación. Se deben considerar varios factores para poder seleccionar el paquete termodinámico adecuado, como la composición de la mezcla, la presión y temperatura de operación, las características físicas y químicas de los elementos, y el tipo de Operación Unitaria (Rodriguez, 2013, p.107).

Hay varios paquetes termodinámicos a disposición, cada uno con sus propios ventajas y desventajas. Algunos paquetes termodinámicos con mayor frecuencia empleados en la simulación de procesos de destilación y separación incluyen:

- NRTL: el modelo NRTL (Non-Random Two Liquid) se usa para simular la mezcla de electrolitos y no electrolitos.
- UNIQUAC: el modelo UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) se utiliza para simular una mezcla de líquidos electrolíticos y no electrolíticos, comúnmente utilizados en la industria química.
- SRK: el modelo SRK (Soave-Redlich-Kwong) se usa para simular mezclas de gases y líquidos a presiones moderadas.
- PR: el modelo PR (Peng-Robison) se usa para simular mezclas de gases y líquidos a presiones altas.
- ELECNTRL: el modelo ELECNTRL (Electrolyte NRTL) se usa para simular mezclas de líquidos electrolíticos.

La selección del paquete termodinámico más adecuado dependerá del proceso específico y de los objetivos de la simulación. La validación y las pruebas de ajuste de los modelos termodinámicos seleccionados son importantes para garantizar resultados de simulación precisos y fiables (Rodriguez, 2013, p.108)

### ***2.2.8 Paquetes termodinámicos para mezclas azeotrópicas***

Para simular azeótropos se utilizan modelos termodinámicos que representan la existencia de azeótropos, es decir, mezclas que tienen una composición constante durante la destilación y que no pueden separarse completamente mediante columnas de destilación convencionales.

Los modelos termodinámicos para modelar azeótropos incluyen:

- Modelo de Wilson: este modelo se basa en la suposición de que las interacciones entre las moléculas de una mezcla son diferentes en las dos fases y que la entalpia de la mezcla depende de la composición y la temperatura.
- Modelo NRTL: este modelo se basa en la suposición de que las moléculas de una mezcla tienen interacciones no aleatorias y que la entalpia de la mezcla depende de su composición y temperatura.
- Modelo UNIQUAC: este modelo se basa en la suposición de que las moléculas de una mezcla tienen interacciones no aleatorias y que la entalpia de la mezcla depende de la composición y la temperatura.

(Maalem et al., 2020, p.2).

### **2.2.9 ChemSep (*cape-open*)**

ChemSep es una aplicación de simulación de columnas que se utiliza para llevar a cabo procesos diferentes de destilación aplicados a nivel industrial. Ofrece una interfaz sencilla y fácil de manipular que combina un modelo convencional de columna de etapas de equilibrio con otro de columnas de no equilibrio. Esta herramienta incluye una base de datos con aproximadamente 400 registros de sustancia químicas (ChemSep, 2020).

Las columnas de ChemSep se pueden integrar diversos paquetes de hojas de cálculos compatibles con CAPE.OPEN de DWSIM, los cuales pueden adaptarse para resolver problemas específicos de separación (ChemSep, 2020).

### **2.2.10 Redes Neuronales Artificiales**

Los modelos neuronales computacionales representan un enfoque de la inteligencia artificial que guía las computadoras en el procesamiento de datos, tomando inspiración de cómo funciona el cerebro humano. Este enfoque se fundamenta en un tipo de proceso de aprendizaje de carácter automático conocido como aprendizaje profundo, que involucra la utilización de nodos o neuronas interconectadas en una arquitectura de capas ocultas. Esto da lugar a un sistema adaptable que las computadoras emplean para reconocer sus propios errores y dar una mejora continua. Las Redes neuronales son importantes porque ayudan en la toma de decisiones inteligentes con asistencia humana limitada (Ding et al., 2013, p.252).

La red neuronal artificial fue diseñada para “imitar” las características de funcionamiento de una neuronal biológica. Se aplican un conjunto de entradas a la neurona, las cuales representan una salida de otra neurona. Cada entrada se multiplica por su ponderación que corresponde al análogo del grado de conexión de la sinapsis. Al final todas las entradas ponderadas se suman para determinar el nivel de excitación de cada neurona. Se representa de manera vectorial el funcionamiento básico de una neurona artificial en la siguiente ecuación (Ding et al., 2013, p.253).

$$NET = X * W \quad \text{Ec (1-2)}$$

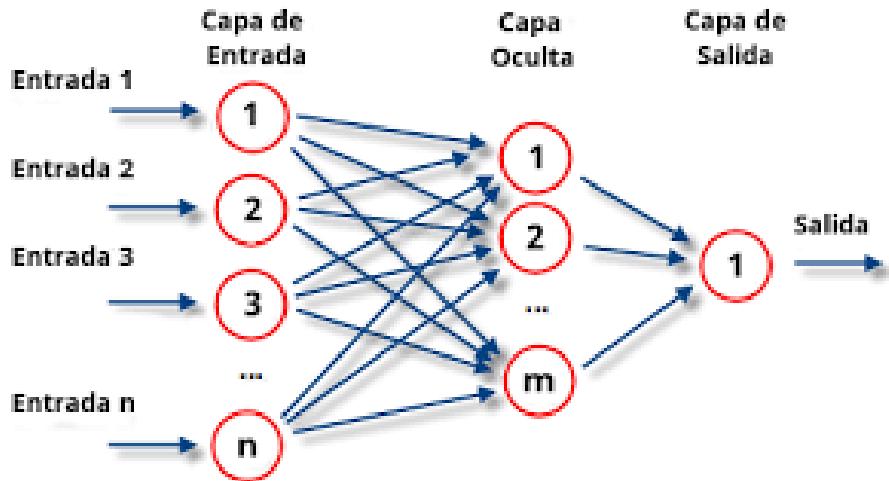
**Donde:**

**NET:** Representa la salida

**X:** el vector de entrada

**W:** vector de pesos

Según, los elementos principales que requiere una Red Neuronal Artificial son:



**Ilustración 6-2:** Esquema básico de una RNA.

Fuente: (Ding et al. 2013).

- Neuronas o unidades de procesamiento : Constituyen un conjunto de unidades encargadas del procesamiento.
- Reglas de propagación: Representa un componente esencial con múltiples modalidades, como lineal, cuadrática, no lineal o basadas en distancias.
- Patrón de conectividad entre nodos: Estas conexiones se caracteriza por tener un valor de peso que permite determinar la influencia de las entradas en las salidas.
- Función de activación o transferencia: Esta función determina el nuevo nivel de activación al considerar la entrada y el nivel actual.

(Li, Zhang y Liu, 2017, p.4).

### **2.2.11 Aplicaciones de las Redes Neuronales Artificiales**

Los atributos relevantes de los modelos de computaciones neuronal aceptan que sea empleada esta nueva técnica de cálculos en una amplia variedad de aplicaciones.

La computación neuronal facilita un mayor acercamiento al reconocimiento y percepción subjetiva en comparación con los métodos de cálculos convencionales, ya que las redes neuronales artificiales proporcionan resultados consistentes y plausibles en situaciones en las que las entradas pueden generar interferencias. Las RNA se aplican en las siguientes áreas:

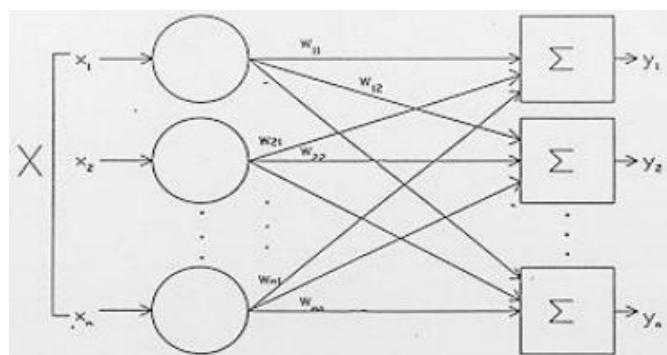
- Examen y tratamiento de señales.
- Supervisión de procesos.

- Automatización de maquinaria.
- Evaluación médica.
- Identificación de imágenes.
- Eliminación de interferencias.
- Manipulación de lenguaje.
- Otras aplicaciones.

(Pirdashti et al., 2013, p.206).

### **2.2.12 Redes neuronales artificiales de una capa y multicapa**

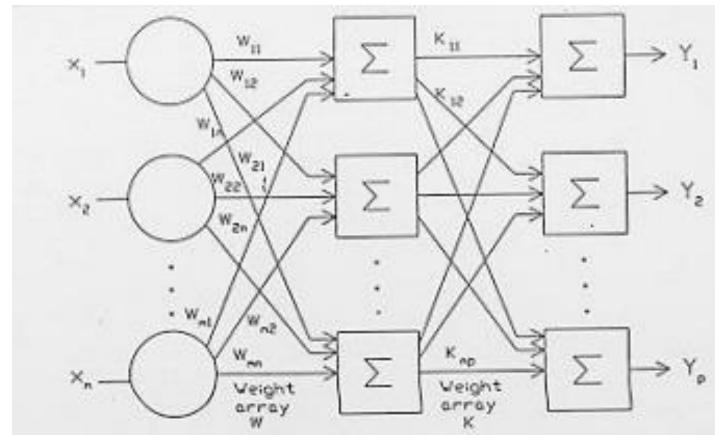
Los responsables de la capacidad de cálculo y potencia de la red neuronal en las numerosas conexiones entre las neuronas artificiales que forman las redes ANN. La red sencilla está compuesta por un conjunto de neuronas organizadas en una única capa, donde los nodos circulares funcionan como distribuidores de las entradas y no se consideran como elementos constituyentes de una capa. Donde cada una de las entradas se encuentran interconectadas mediante de peso asignado a cada neurona artificial (Himmelblau, 2000, p.374).



**Ilustración 7-2:**RNA en una sola capa.

Fuente: (Himmelblau 2000)

Las redes multicapa se forman con varios grupos de capas simples en forma de cascada. La salida de una capa es la entrada de la siguiente, las redes multicapa exhiben atributos superiores en comparación con las redes de una sola capa (Himmelblau, 2000, p.376).



**Ilustración 8-2:** RNA multicapa.

Fuente: (Himmelblau,2000)

### 2.2.13 Ventajas de una RNA

Los analistas (Rivas, Bertha, Olivo, 2017, p.16), menciona algunas ventajas de las Redes Neuronales:

- Capacidad de gestionar extensas colecciones de datos: Las redes neuronales tienen la habilidad de gestionar volúmenes considerables de información y son especialmente efectivas cuando se trata de datos no estructurados como imágenes y texto.
- Capacidad de aprender sin supervisión: Las redes neuronales pueden aprender sin supervisión, lo que significa que pueden describir patrones en los datos sin necesidad de un conjunto de datos etiquetados.
- Habilidad de aplicar conceptos generales: Las redes neuronales tienen la capacidad de aplicar conceptos aprendidos a nuevas situaciones y conjuntos de datos.
- Versatilidad: Las redes neuronales son adaptables a una variedad de tipos de datos y problemas.
- Aprendizaje adaptivo: Las redes neuronales son capaces de instruirse a partir de un conjunto de datos que se representan mediante entradas y ponderaciones.

## CAPÍTULO III

### 3. MARCO METODOLÓGICO

#### 3.1 Etapas de la metodología

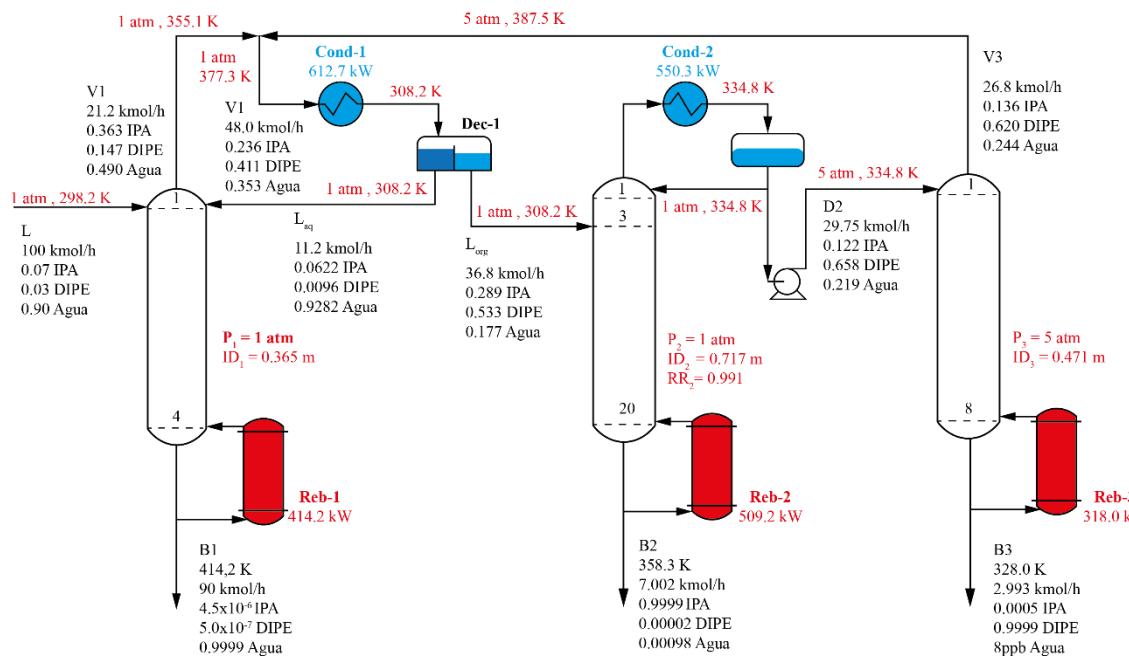
El estudio actual de titulación está basado en una propuesta tecnológica, el cual consiste en simular y predicción de la destilación azeotrópica por oscilación de presión para la separación de isopropanol (IPA), cuya metodología es descrita a continuación:



**Ilustración 1-3:** Metodología para el desarrollo de la RNA

### 3.2 Descripción del proceso

Para simular este proceso fuertemente no ideal, se selecciona UNIQUAC como paquete termodinámico de propiedad adecuado para las simulaciones de carácter riguroso. El diagrama de flujo del proceso TCHPSD empleado para separar una mezcla acuosa ternaria de IPA, DIPE y agua. Donde la alimentación fresca (F) ingresa hacia el plato superior de la columna de agua (Col-1) la cual opera a 1 atm de presión, y el agua se elimina como producto de fondo. Cuando el vapor superior (V3) de la columna de alta presión (Col-3) se mezcla con el vapor superior (V1) de la columna de baja presión (Col-1), se crea una corriente líquida heterogénea que alimenta al decantador (Dec-1) después de enfriar el líquido acuoso (Lac) se regresa al primer plato de la columna de baja presión (Col-1), y el líquido orgánico alimenta la columna de baja presión (Col-2) en el plato intermedio. En el fondo de la columna (Col-2) se obtiene el producto IPA. El destilado (D2) alimenta la parte superior de la columna (Col-3), el DIPE de alta pureza se lo obtiene en la columna (Col-3) como producto de fondo (B3), y este se recicla V3 (Guang et al., 2019, p.3).



**Ilustración 2-3:** Diagrama de la destilación azeotrópica por oscilación de presión.

Fuente: (Guang et al., 2020, p.4)

### **3.3 Parámetros de funcionamiento**

La simulación de la separación de isopropanol se realizó en base a los datos del artículo científico titulado: “Optimal design and performance enhancement of heteroazeotropic and pressure-swing coupling distillation for downstream isopropanol separation” propuesto por la revista “ Separation and Purification Technology” el cual fue desarrollado por Guang, Zho, Zhang, Gao y Li, investigadores de la Facultad de Ingeniería Química y Biológica de la Universidad de Ciencia y Tecnología de Shandong (Guang et al., 2019, p.1).

#### **3.3.1 Generalidades del proceso**

El flujo que ingresa al sistema, que consiste en alimentación fresca, es de 100 kmol/h con una composición molar de 7% IPA, 3% DIPE y 90% Agua.

Las condiciones operativas son:

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

Parámetro	Cantidad	Unidad
Presión	1	atm
Temperatura	298,2	K
Base de alimentación (flujo molar)	100	kmol/h
Composición inicial de IPA	7	%
Composición inicial de DIPE	3	%
Composición inicial de Agua	90	%

Fuente: (Guang et al. 2019).

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

#### **3.3.2 Secuencia directa convencional**

La ilustración representa la secuencia directa de las tres columnas de destilación por oscilación de presión empleada para separar la mezcla ternaria de eter diisopropílico, isopropanol y agua con una baja concentración y varios azeotrópicos. Esta información se basa en los datos proporcionados por (Guang et al.,2019).

En la primera columna el agua se elimina como producto del fondo. Al mezclarse el vapor superior de la columna de alta presión Col-3 con el vapor superior (V1) de la Col-1, donde se genera una corriente líquida heterogénea que se alimenta al decantador, luego de enfriar el líquido acuoso vuelve a Col-1 en la primera placa y el líquido orgánico es el flujo de alimentación de baja presión Col-2 en la placa intermedia el producto IPA se obtiene en el fondo de la Col-2,y el

destilado se alimenta a la parte superior de Col-3, el DIPE de alta pureza se obtiene en Col-3 como producto fondo.

**Tabla 2-3:** Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación Col-1.

Parámetros de Col-1	Cantidad	Unidad
Presión	1	Atm
Número de plato de la columna	5	-
Número de plato de entrada de la alimentación	1	-
Flujo de alimentación	100	kmol/h
Fracción molar IPA (destilado)	36,6	%
Fracción molar IPA (fondo)	0,00045	%
Fracción molar DIPE (destilado)	14,7	%
Fracción molar DIPE (fondo)	0,00005	%
Fracción molar Agua (destilado)	49,0	%
Fracción molar Agua (fondo)	99,99	%
Flujo molar del destilado	21,2	kmol/h
Flujo molar del fondo	90	kmol/h
Carga térmica en el condensador	612,7	K
Carga térmica en el reboiler	414,2	K

Fuente: (Guang et al. 2019).

Realizado por: Castillo, Adriana,2023.

**Tabla 3-3:** Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación Col-2.

Parámetros de Col-2	Cantidad	Unidad
Presión	1	atm
Número de plato de la columna	21	-
Número de plato de la entrada de la alimentación	3	-
Flujo de alimentación	36,8	kmol/h
Fracción molar IPA (fondo)	99,99	%
Fracción molar DIPE (fondo)	0,002	%
Fracción molar Agua (fondo)	0,098	%
Flujo molar del fondo	7,007	kmol/h
Carga térmica en el condensador	550,3	K
Carga térmica en el reboiler	609,2	K
Relación de reflujo	0,991	-

**Fuente:** (Guang et al. 2019).

**Realizado por:** Castillo, A.,2023.

**Tabla 4-3:** Parámetros de funcionamiento de la columna de destilación Col-3.

Parámetros de Col-3	Cantidad	Unidad
Presión	5	atm
Número de plato de la columna	9	-
Numero de plato de entrada de la alimentación	1	-
Flujo de alimentación	29,793	kmol/h
Fracción molar IPA (destilado)	13,6	-
Fracción molar IPA (fondo)	0,005	-
Fracción molar DIPE (destilado)	6,20	-
Fracción molar DIPE (fondo)	99,99	-
Fracción molar Agua (destilado)	24,4	-
Fracción molar Agua (fondo)	0,000000008	-
Flujo molar del destilado	26,8	kmol/h
Flujo molar del fondo	2,993	kmol/h
Carga térmica en el reboiler	318,0	K

**Fuente:** (Guang et al. 2019).

**Realizado por:** Castillo, Adriana,2023

### 3.4 Simulación de DWSIM



**Ilustración 3-3:** Esquema de la separación de isopropanol en DWSIM.

**Realizado por:** Castillo, Adriana,2023.

#### 3.4.1 Selección del paquete termodinámico

Para la simulación de la separación azeotrópica por variación de presión de IPA, para parámetros de interacción binaria se seleccionó UNIQUAC como paquete termodinámico para simulaciones rigurosas. Dado por su alto grado de consistencia entre la predicción y los datos experimentales sobre los equilibrios de la fase líquido-vapor y líquido-líquido a distintas presiones.

Se presentan los valores empleados en el simulador. Para emplear las columnas de destilación en ChempSep, se requiere definir dos condiciones de operación adicionales al valor de la presión. En consecuencia, es necesario llevar a cabo evaluaciones con el fin de determinar las condiciones óptimas.

**Tabla 5-3:** Parámetros operativos empleados en la simulación de DWSIM.

Parámetros	Entrada	Columna-1	Columna-2	Columna-3	Recirculación V3
Presión (atm)	1	1	1	5	5
Temperatura (K)	298,2	298,2	308,2	334,8	----
Nº de platos	----	5	21	9	----
Nº de platos de alimentación	----	1	1,3	1	----
IPA (%)	7	----	----	----	13,6
DIPE (%)	3	----	----	----	6,20
Agua (%)	90	----	----	----	24,4
Flujo molar de la corriente (kmol/h)		----	----	----	----
	100				
Flujo molar de fondo (kmol/h)	----	90	7,007	2,993	----
Flujo molar del destilado (kmol/h)	----	21,2	29,793	26,8	----
Carga térmica en el reboiler fondo (kW)	----	414,2	609,2	318,0	----

Realizador por: Castillo, Adriana,2023.

En la Tabla 5-3, se presentan los valores empleados en el simulador. Para hacer uso de las columnas de destilación en ChempSep es necesario especificar dos parámetros de funcionamiento adicional al valor de presión.

Por lo tanto, se deben realizar pruebas con el fin de determinar las condiciones óptimas para el funcionamiento de la simulación.

Settings

Compuestos | Termodinámica | Reacciones | Balances de masa y energía | Sistema de Unidades | Comportamiento | Propiedades del objeto | Información

Componentes / Compuestos

Añadido	Nombre	Tag	Número CAS	Fórmula	Base de datos	CP
<input checked="" type="checkbox"/>	Isopropanol		67-63-0	CH3CH(OH)CH3	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Water		7732-18-5	HOH	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	Diisopropyl ether		108-20-3	CH3CH(CH3)OCH(CH3)...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Air		132259-10-0	(N2)0.781 (O2)0.209 (A...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Argon		7440-37-1	Ar	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Bromine		7726-95-6	BrBr	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Carbon tetrachloride		56-23-5	CCl4	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Carbon monoxide		630-08-0	CO	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Carbon dioxide		124-38-9	OCO	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Carbon disulfide		75-15-0	SCS	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Phosgene		75-44-5	COCl2	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Trichloroacetyl chloride		76-02-8	CCl3COCl	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Hydrogen chloride		7647-01-0	HCl	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Chlorine		7782-50-5	Cl2	ChemSep	<input type="checkbox"/>

Buscar  X

Ver compuesto Importar desde En línea JSON Termo/Productos Ordenar compuestos po Default (As Added)

Fracciones de petróleo

Iniciar Bulk C7+ Petroleum Characterization Utility

Inicio Curvas de destilación Utilidad de caracterización del petróleo Abrir el Administrador de ensayos

**Ilustración 4-3:** Entorno para la selección de componentes en DWSIM.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

Settings

Compuestos | Termodinámica | Reacciones | Balances de masa y energía | Sistema de Unidades | Comportamiento | Propiedades del objeto | Información

Unidades

Sistema de Unidades SI\_48

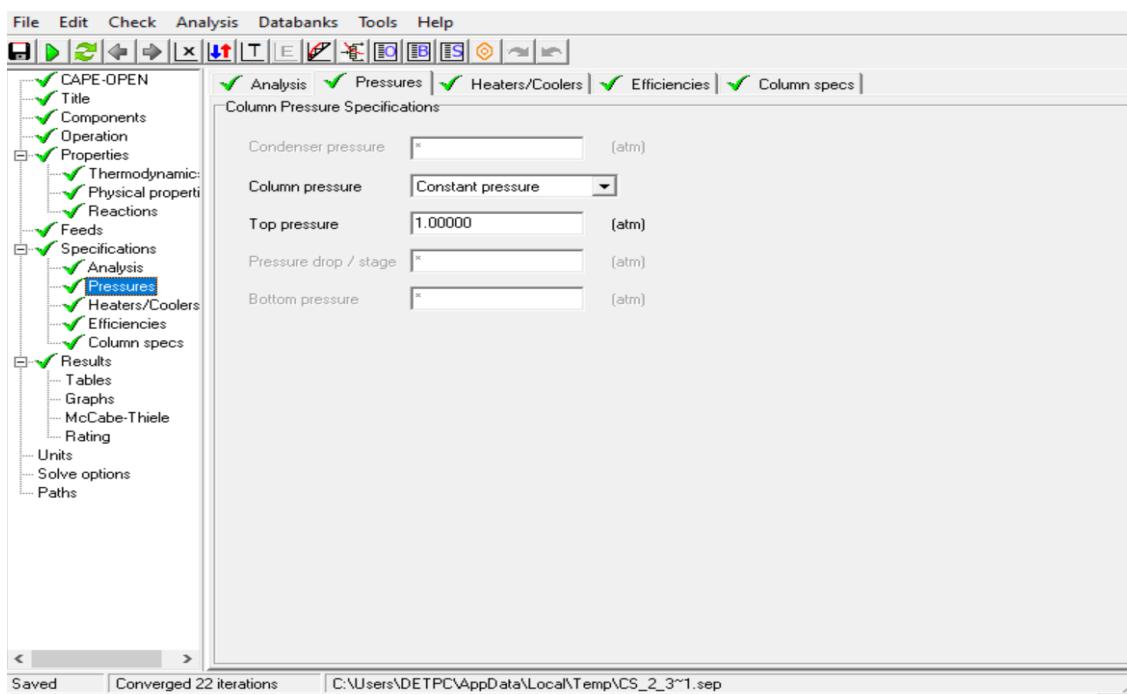
Propiedad	Unidad	Propiedad	Unidad
Temperatura	K	Presión	atm
Caudal mísico	kg/s	Caudal molar	kmol/h
Caudal volumétrico	m <sup>3</sup> /s	Entalpía específica	kJ/kg
Entropía específica	kJ/[kg.K]	Peso molecular	kg/kmol
Densidad	kg/m <sup>3</sup>	Tensión superficial	N/m
Capacidad térmica	kJ/[kg.K]	Conductividad térmica	W/[m.K]
Viscosidad cinemática	m <sup>2</sup> /s	Viscosidad dinámica	Pa.s
Diferencia de temperatura	K.	Diferencia de presión	Pa
Longitud/Cabeza	m	Flujo de energía	kW
Hora	s	Volumen	m <sup>3</sup>
Volumen molar	m <sup>3</sup> /kmol	Área	m <sup>2</sup>
Diámetro/Espesor	mm	Fuerza	N
Aceleración	m/s <sup>2</sup>	Coeficiente de transferencia de calor	W/[m <sup>2</sup> .K]
Concentración molar	mol/m <sup>3</sup>	Concentración de masa	kg/m <sup>3</sup>
Velocidad de reacción	mol/[m <sup>3</sup> .s]	Volumen específico	m <sup>3</sup> /kg
Entalpía molar	kJ/kmol	Entropía molar	kJ/[kmol.K]
Velocidad	m/s	Factor de ensuciamiento	K.m <sup>2</sup> /W

Tareas

Crear nuevo... Clon seleccionado Eliminar seleccionado Cargar desde archivo Guardar en archivo

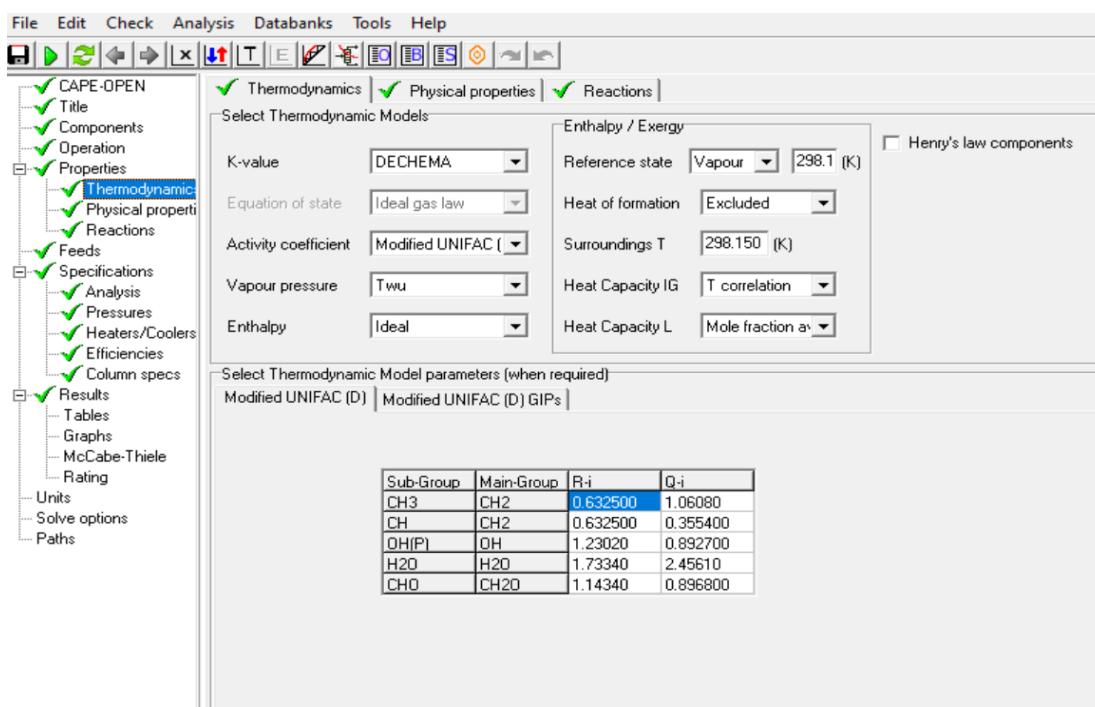
**Ilustración 5-3:** Entorno para la selección de unidades de medida en DWSIM.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



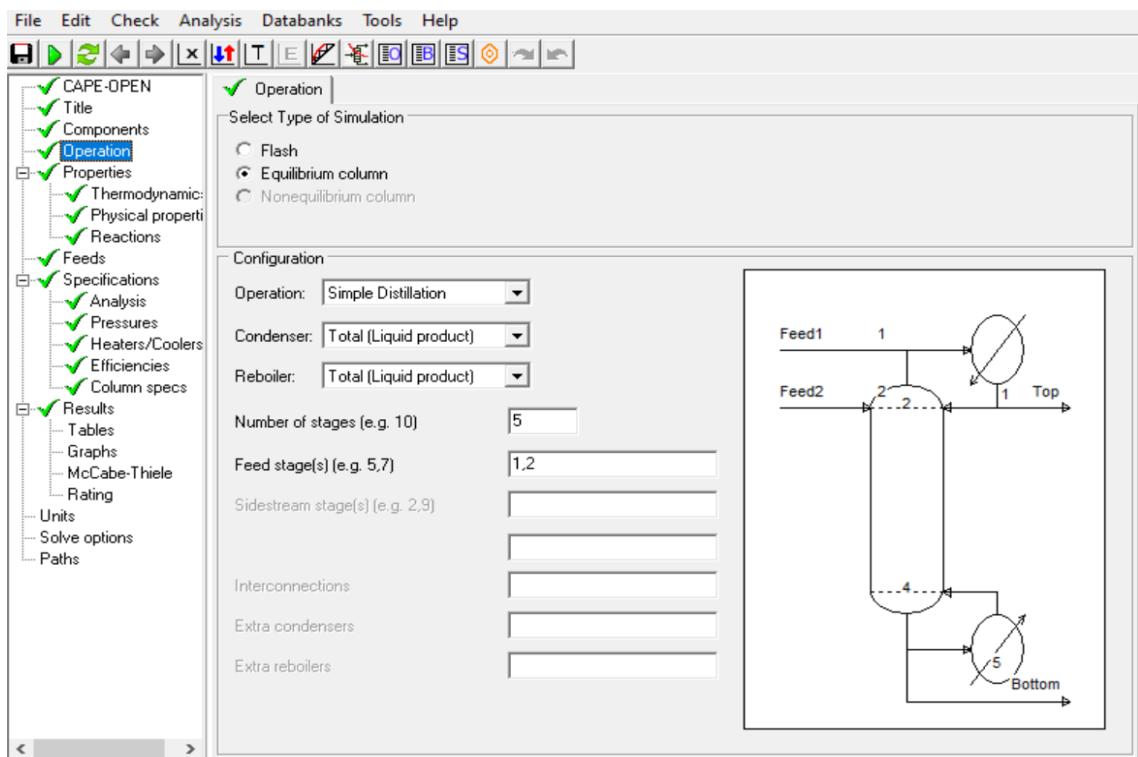
**Ilustración 6-3:** Especificaciones de presiones en ChemSep de Col-1.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



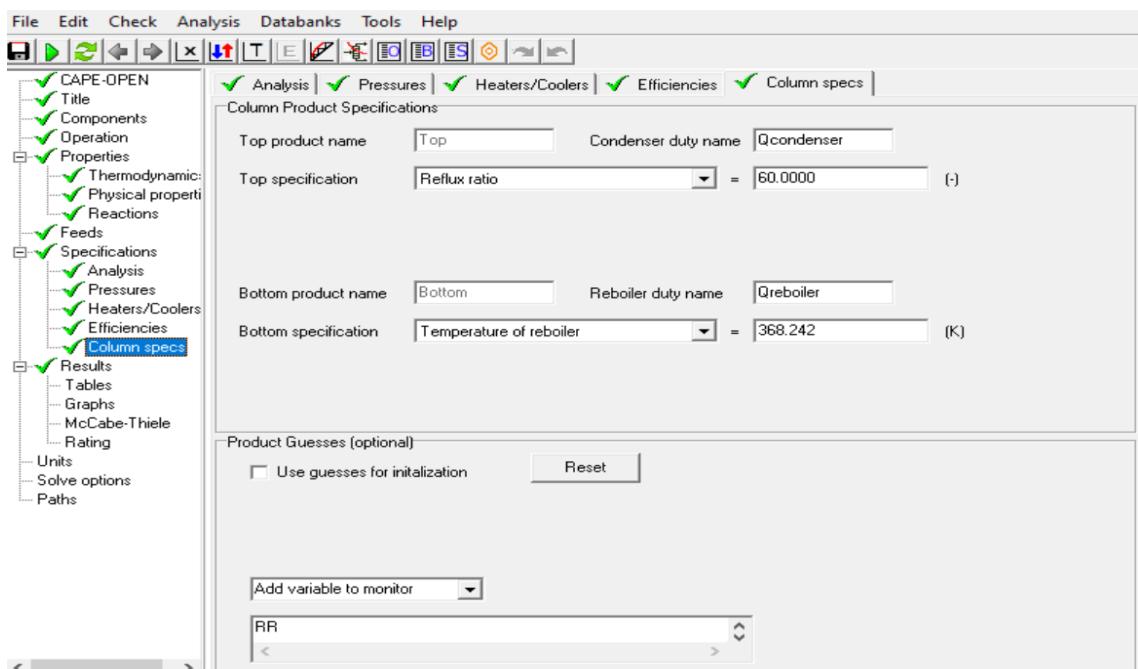
**Ilustración 7-3:** Propiedades termodinámicas de Col-1.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023



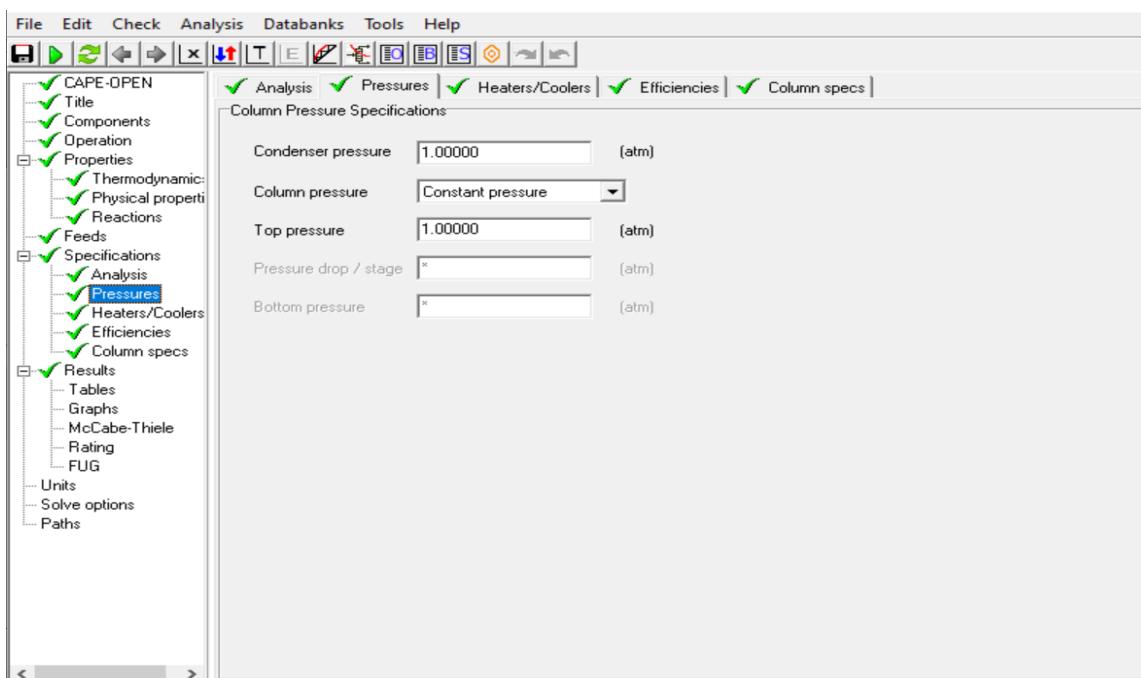
**Ilustración 8-3:** Configuración operativa de Col-1.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



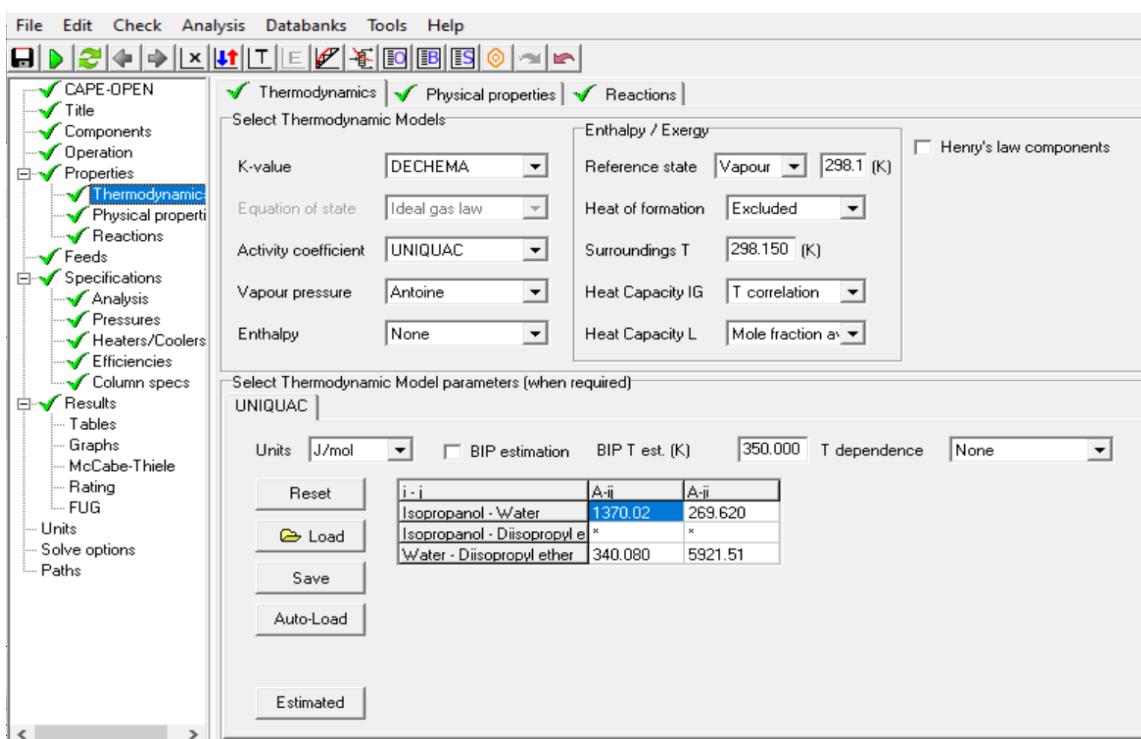
**Ilustración 9-3:** Especificaciones de condiciones para Col-1.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



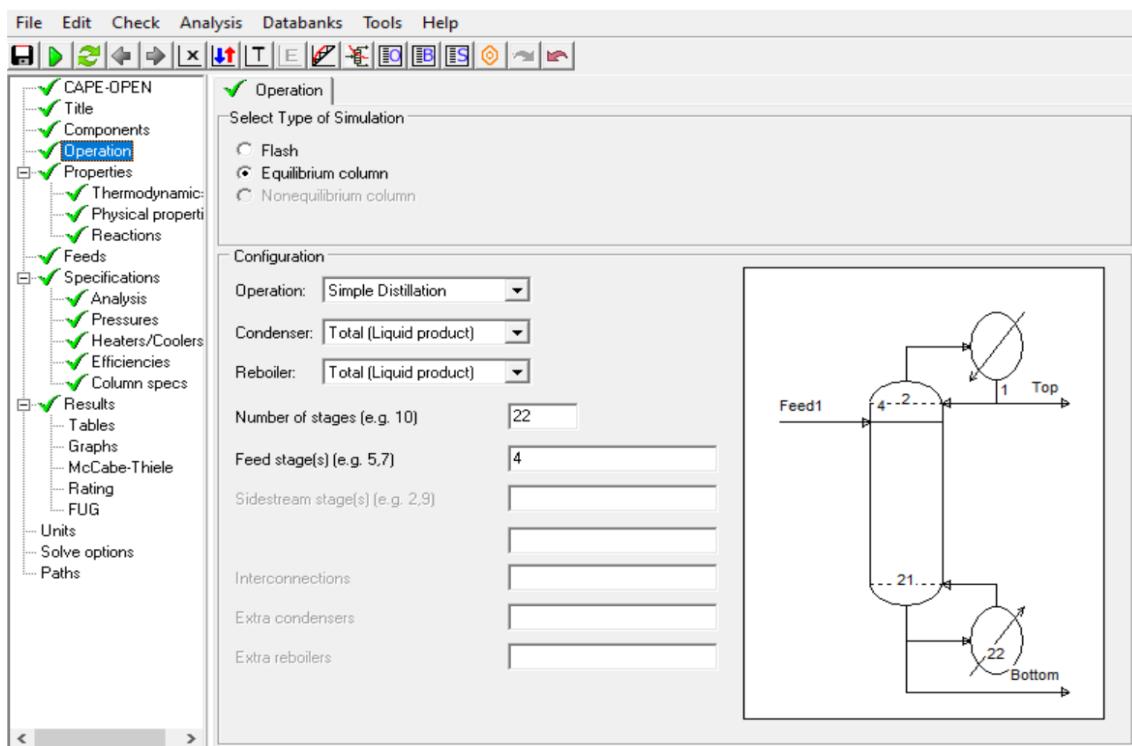
**Ilustración 10-3:** Especificaciones de presiones en ChemSep de Col-2.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



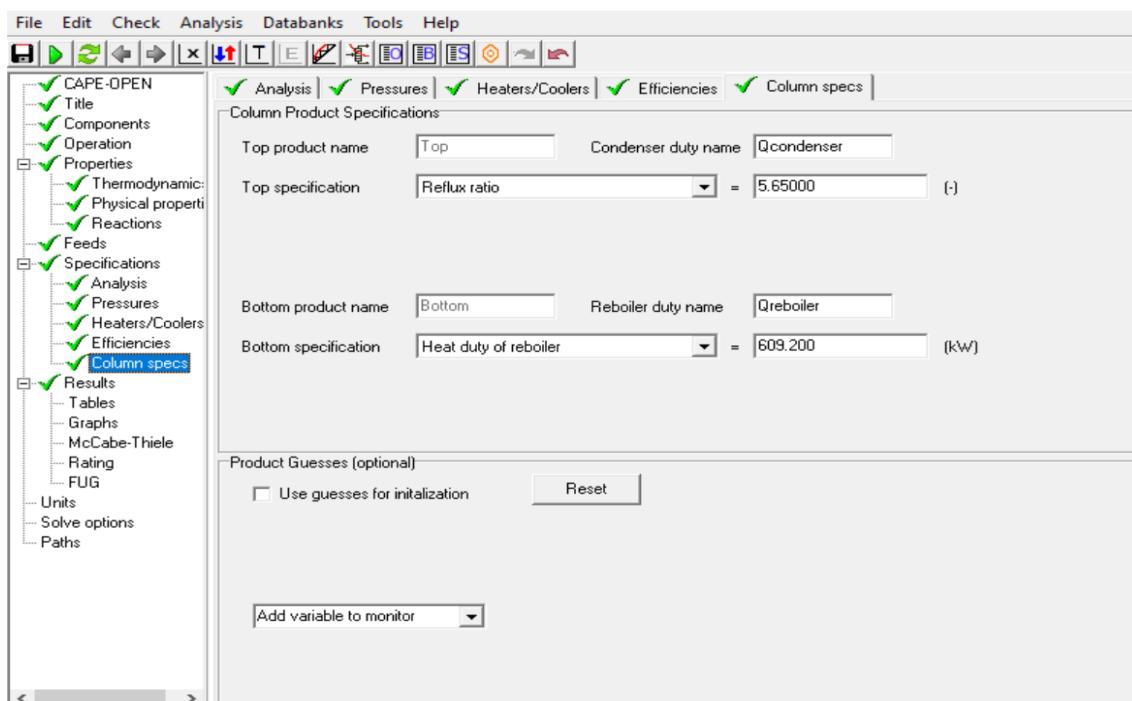
**Ilustración 11-3:** Propiedades termodinámicas de la Col-2.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



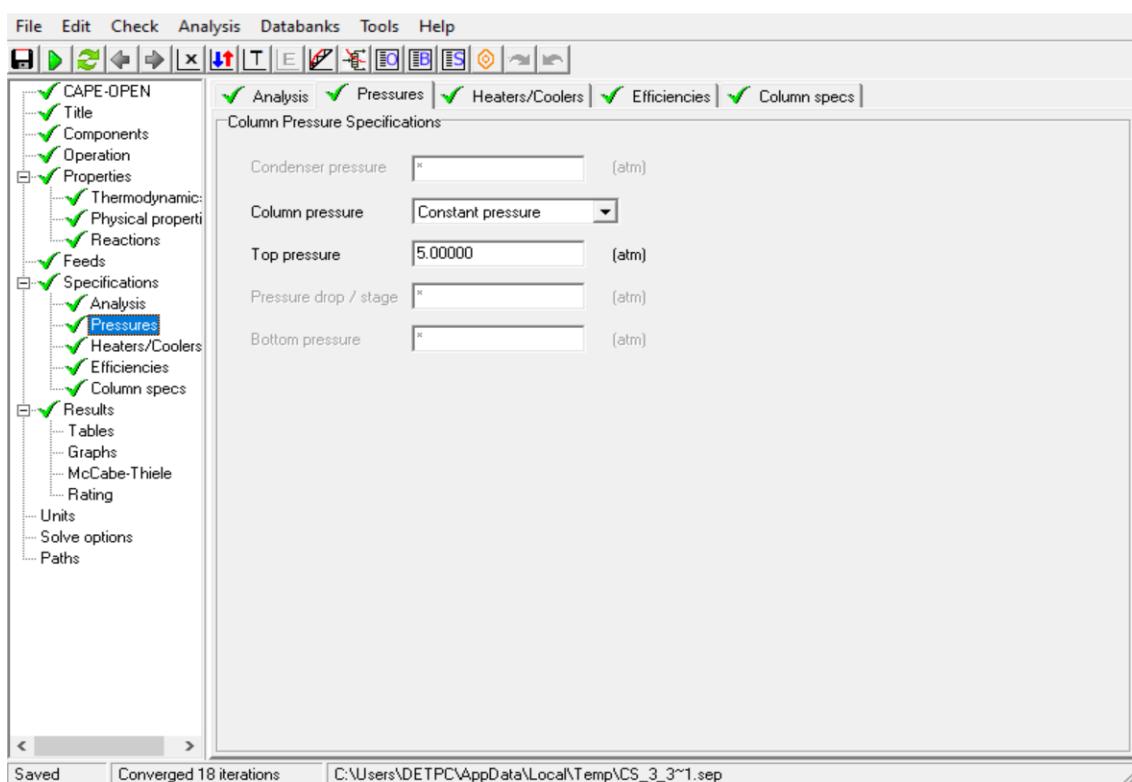
**Ilustración 12-3:** Configuración operativa para Col-2.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



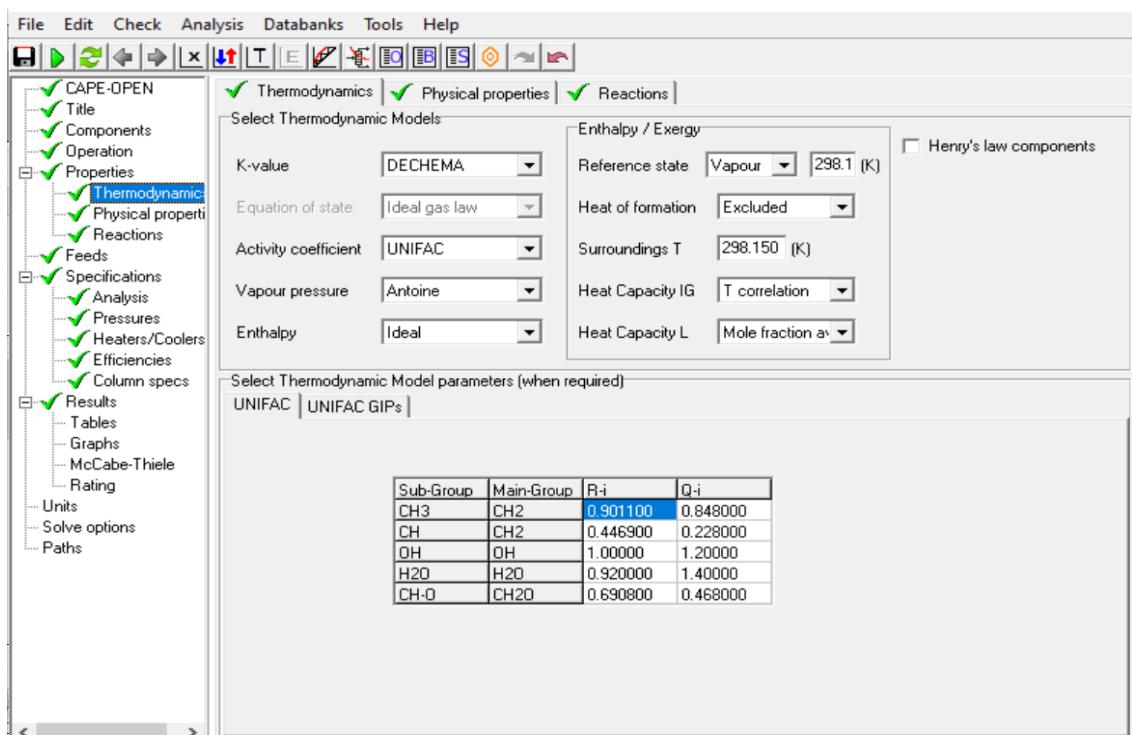
**Ilustración 13-3:** Especificaciones de condiciones para Col-2.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



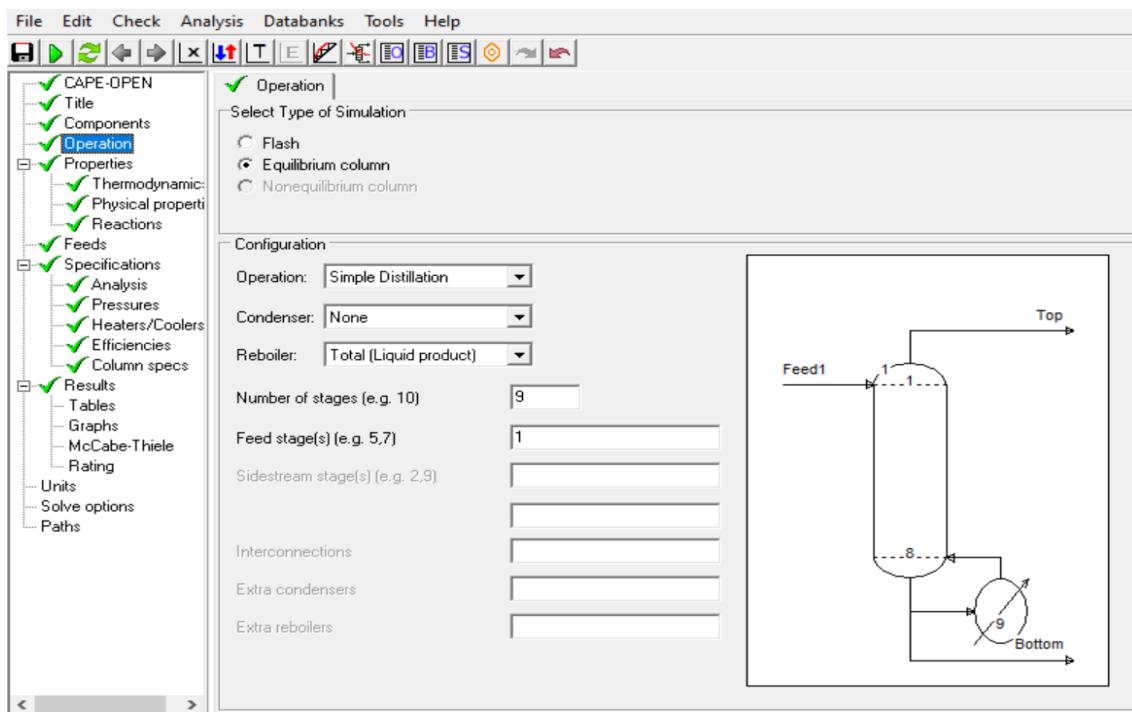
**Ilustración 14-3:** Especificaciones de presiones en ChemSep de Col-3.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



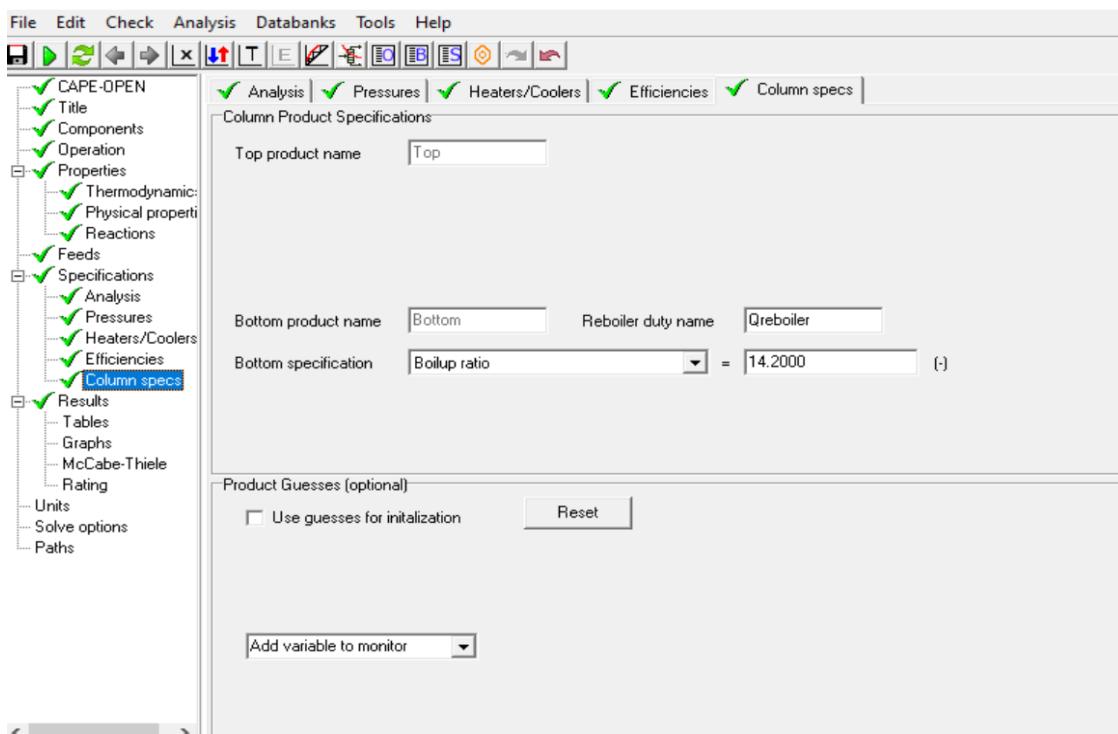
**Ilustración 15-3:** Propiedades termodinámicas de C3.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 16-3:** Configuración operativa para Col-3.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 17-3:** Especificaciones de condiciones para Col-3.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

### 3.5 Análisis de sensibilidad

La evaluación sensibilidad se desarrolló en base a los parámetros de alimentación y de las presiones de las tres columnas operativas debido que son los responsables de la separación de IPA puro, por ellos las propiedades fisicoquímicas de los compuestos involucrados en la destilación con el fin de facilitar la identificación de las variables operativas que influyen sobre la concentración y cantidad de IPA separado siendo el principal objetivo de este estudio.

En el DWSIM no se pudo obtener el análisis de sensibilidad, se procedió a realizar variaciones aleatorias de los parámetros con el fin de identificar los rangos de variación, selección de variables, el número de repeticiones y análisis, los cuales son detallados en la Tabla 6-3.

**Tabla 6-3:** Parámetros operativos de TCHSPS para el análisis operativo.

Nº Análisis	Parámetro	Rango	Identificación	Unidad
1	Temperatura	200 - 315	T-in	K
2	IPA	0,06 – 0,250	IPA-in	%
3	DIPE	0,06 – 0,250	DIPE-in	%
4	Columna 1	1,00– 3,00	P-C1	atm
5	Columna 2	1,00 – 3,00	P-C2	atm
6	Columna 3	2,00– 8,00	P-C3	atm

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

### 3.6 Tratamiento de datos

Después de haber culminado la simulación, el análisis de sensibilidad y validar los resultados con el artículo científico de alto impacto del proceso para la separación de isopropanol por oscilación de presión, se establecen las entradas y salidas respectivas para la creación de la RNA con el propósito de generar una fuente de datos, la simulación será efectuada 250 veces donde se realizará una variación de los valores establecidos como entradas para la RNA, posterior se anotarán los datos obtenidos a la salida de esta manera se consigue los datos requeridos para el entrenamiento de la red neuronal.

**Tabla 7-3:** Parámetros de entradas de RNA.

ENTRADAS			
Variable	Detalle	Rango	Unidad
T-in	Temperatura de alimentación de todas las corrientes	200 - 315	K
IPA-in	Fracción molar del flujo de alimentación de IPA	0,06 – 0,250	%
DIPE-in	Fracción molar del flujo de alimentación de DIPE	0,06 – 0,250	%
P-C1	Presión de la columna 1	1,00 – 3,00	atm
P-C2	Presión de la columna 2	1,00 – 3,00	atm

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

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

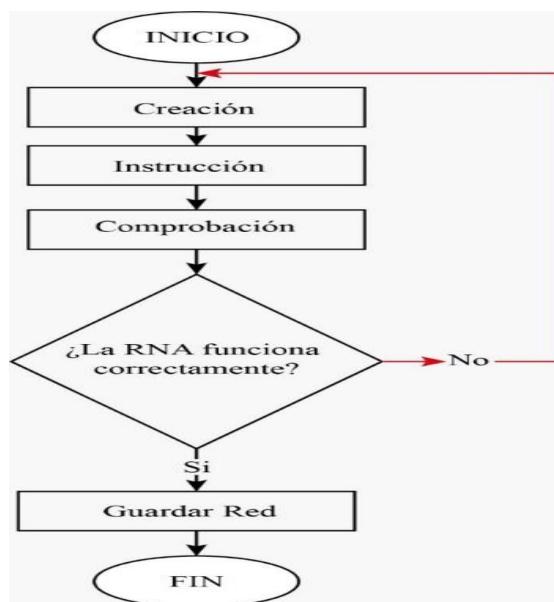
SALIDAS				
Ubicación	Columna-1	Columna-2	Columna-3	
	L-org	Fondo	Destilado	Fondo
Fracciones molares	IPA	IPA	DIPE	DIPE
Identificación	IPA_Col-1	IPA_Col-2	DIPE_Col-3	DIPE_Col-3
Unidades	-	-	-	-

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

Se generó una fuente de datos que contiene 400 valores destinados a entrenar la Red Neuronal Artificial utilizando MATLAB. Los 25 valores restante se reservaron específicamente para llevar a cabo una validación externa, con el propósito de evaluar el rendimiento de la red.

### 3.7 Diseño de la RNA en MATLAB

Para el diseño de la RNA se hace uso de la aplicación Neural Net Fitting (nftool) que se encuentra disponible en el software MATLAB, esta herramienta permite la creación y entrenamiento de la red neuronal bajo tres algoritmos distintos, sus aplicaciones dependen del ajuste a la base de datos. En la Ilustración 17-4 se indica el diagrama de flujo correspondiente a la creación de la RNA.



**Ilustración 18-3:** Diagrama de flujo para el diseño de la RNA.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

El proceso inicia con la etapa de creación, donde se configura la estructura de la RNA la cual consta de seis entradas: temperatura de alimentación, fracción molar IPA, fracción molar DIPE y presiones. De la misma manera, los parámetros de salida: flujo molar destilado DIPE-IPA, fondo de IPA-DIPE correspondientes de las tres columnas de destilación según se establece en las Tablas 7-3 y 8-3.

### 3.8 Instrucción de la RNA

La aplicación “Neural Net Fitting” de la plataforma de programación MATLAB tiene tres algoritmos disponibles, son métodos matemáticos que sirven para guiar las redes neuronales, tales como: Levenberg-Maequart (LM), Scaled Conjugate Gradient (SCG) y Bayesian Regularization (BR). El empleo de cada algoritmo depende de cómo opere la base de datos, parte de la versatilidad que ofrece el programa es capaz de especificar la cantidad de capas internas y la posibilidad en distribuir la base de datos para cada fase de instrucción de la RNA, las cuales se describen a continuación:

Entrenamiento: Se indica a la red durante la instrucción, y se acopla la red según su error.

Validación: Se emplea para calcular la capacidad de la red para aplicarse en diferentes situaciones e interrumpir el entrenamiento cuando la generalización deja de mejorar.

Prueba: No tienen resultados durante el proceso de instrucción proporciona una evaluación objetiva del desempeño de la red durante y después del adiestramiento.

Para la elección del algoritmo de la RNA, se deben considerar los siguientes factores:

- Levenberg-Maequart: Normalmente, demandan una mayor capacidad de almacenamiento, pero reducen el tiempo necesario para el entrenamiento. El proceso se interrumpe automáticamente cuando no se observa mejora en la generalización, evaluada según el incremento en el error cuadrático medio en las muestras de validación.
- Scaled Conjugate Gradient: Necesita una cantidad menor de memoria. El proceso de entrenamiento se interrumpe automáticamente cuando la generalización deje de mejorar, lo cual se refleja en un aumento en el error cuadrático medio de las muestras de validación.
- Bayesian Regularization: Por lo general, requiere mayor tiempo de entrenamiento, pero logra una buena generalización en conjuntos de datos complicados, de tamaño reducido con ruido. La terminación del proceso de entrenamiento se basa en la minimización adaptiva de los pesos, aplicando regularización.

Para la instrucción de la RNA requiere de la adecuada elección del algoritmo matemático, la distribución de los 400 datos asignados para las fases del entrenamiento de la red se los clasifica de manera aleatoria; utilizando el 70% para el entrenamiento (280 datos), el 15% para la prueba (60 datos) y 15% para la validación (60 datos).

El modelo de la RNA implica la interconexión completa de todas sus capas. Esto se debe a que el número de entradas es de seis, lo que simplifica el proceso de entrenamiento y permite signar funciones de activación a cada neurona sin una excesiva complejidad.

### **3.9 Validación de los resultados**

Después de obtener y entrenar la configuración RNA óptima, se debe demostrar la confiabilidad que posee para la predicción de la separación de isopropanol en la corriente del fondo de la Col-2.

Las medidas de rendimiento de la aplicación se incluyen en MATLAB, p. como: error cuadrático medio (MSE) y coeficiente de regresión (R).

- El MSE es el error cuadrático medio aplicado entre la salida obtenida y el objetivo. Aunque el valor tiende a cero, mejores resultados RNA.
- El valor R calcula la correlación entre el objetivo y el producto. Y cuanto más cerca esté el valor de R de 1, mejor será la relación y, por lo tanto, más preciso será el resultado de RNA.

MATLAB no realiza la validación interna de los datos de entrada (400 datos), la validación externa se realizará en los nuevos registros adicionales que no se utilicen para la formación de RNA. Estos son los últimos 25 datos en la base de datos y tienen como objetivo demostrar un método para probar la habilidad de anticipación de la red al comparar los resultados de salida pronosticados por la RNA en comparación a los obtenidos al simular en DWSIM.

### **3.10 Análisis estadístico**

El análisis se realizó después de la validación externa de la RNA, se procede a realizar un análisis estadístico basado en las comparaciones de las fracciones molares del IPA y DIPE que fueron obtenidos en el simulador DWSIM y los resultados redichos por la red neuronal, este proceso se lo efectuó haciendo uso del software, el cual utiliza la prueba estadística ANOVA para realizar el análisis de los resultados.

ANOVA: Conocido como análisis de varianza, tiene como objetivo probar si se observa una disparidad considerable entre las medias de dos o más conjuntos de grupos. Esta prueba analiza la variabilidad. Con base en las diferencias aleatorias presentes, los resultados alcanzados en cada

uno de los ejemplares se presentan con valores P para la cuantificación de fiabilidad estadística para cada grupo (Statgraphics Technologies,2020, p. 206).

## CAPÍTULO IV

### 4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE DATOS

#### 4.1 Resultados de la simulación en DWSIM

La Ilustración 2-3 se puede evidenciar la simulación completa acerca del proceso para la separación de isopropanol mediante una destilación azeotrópica por oscilación de presión. En la presente simulación se realizaron diferentes modificaciones, se adaptó un divisor de flujo donde ingresan las corrientes del vapor superior (V1) de la columna de alta presión (Col-3) con el vapor superior (V3) de Col-1, generando una corriente heterogénea, que es alimentada al enfriador, después de enfriar el líquido acuoso ingresa al separador compuesto con el objetivo de obtener resultados aproximados a la simulación al artículo de alto impacto . Los resultados obtenidos son representados en la Tabla 1-4, 2-4 y 3-4 donde se pueden visualizar que los resultados obtenidos en DWSIM se asemejan a los obtenidos por Guang et al., (2019) los cuales simularon en Aspen Plus V.7. En la simulación realizada se logró una concentración de IPA ( $X_{IPA}$ ) de 0.978 en el fondo de Col-2, en el fondo de la Col-3 se consiguió una concentración de DIPE( $X_{DIPE}$ ) de 0.999 y en el vapor (V3) se obtuvo una concentración de DIPE( $X_{DIPE}$ ) de 0.608.

**Tabla 1-4:** Flujos molares obtenidos en el DWSIM.

Propiedades de los flujos	Col-1		Col-2		Col-3		Unidad
	L-org	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	
Temperatura	334.475	368.517	355.053	354.803	387.006	403.13	K
Presión	1	1	1	1	5	5	atm
Flujo molar	35.827	91.125	29.981	5.846	26.951	3.029	kmol/h
$X_{IPA}$	0.254	0.011	0.109	0.993	0.122	1.76E-05	-
$X_{AGUA}$	0.204	4.35E-07	0.244	2.09E-06	0.272	4.76E-07	-
$X_{DIPE}$	0.541	0.988	0.645	0.006	0.605	0.999	-

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.2 Validación de los resultados de la simulación

Después de obtener los resultados mediante la simulación DWSIM, se requiere la realización de validar los resultados obtenidos de la bibliografía del artículo de alto impacto ya establecida, a través del cálculo de error porcentual (**Ec 1-4**) se calcula el error entre estos. La comparación entre los datos obtenidos en la simulación y los valores de bibliografía, evidencia ciertos valores

anormales en el porcentaje de error. Esto es debido a que los datos tanto en la referencia como en la simulación son pequeños, considerándolos despreciables.

$$\text{Error porcentual} = \left| \frac{V_{\text{artículo}} - V_{\text{DWSIM}}}{V_{\text{artículo}}} \right| * 100 \quad (\text{Ec 1-4})$$

**Tabla 2-4:** Verificación de las fracciones molares DWSIM vs Artículo.

Resultados	Col-1		Col-2		Col-3	
	L org	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
IPA DWSIM	0.254	0.01	0.109	0.993	0.122	1.70E-05
IPA (deseado)	0.289	Trace	0.123	0.999	0.136	0.00005
<b>Error(%)</b>	<b>12.11</b>	-	<b>11.02</b>	<b>0.60</b>	<b>10.29</b>	-
DIPE DWSIM	0.541	4.35E-07	0.645	0.006	0.605	0.999
DIPE (deseado)	0.533	Trace	0.658	0.000002	0.620	0.999
<b>Error(%)</b>	<b>1.501</b>	-	<b>2.020</b>	-	<b>2.419</b>	<b>0.000</b>
Agua DWSIM	0.204	9.88E-01	0.244	2.09E-06	0.272	4.75E-07
Agua deseada	0.177	0.999995	0.219	0.00098	0.244	Trace
<b>Error(%)</b>	<b>15.254</b>	<b>1.200</b>	<b>11.314</b>	-	<b>11.475</b>	-

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

**Tabla 3-4:** Verificación de las temperaturas DWSIM vs Artículo.

Resultados	Col-1		Col-2		Col-3	
	L-org	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
T DWSIM	308.020	414.200	355.053	353.324	387.006	403.133
T (deseado)	308.200	368.517	334.800	354.803	387.500	328.000
<b>Error (%)</b>	<b>0.058</b>	<b>12.396</b>	<b>6.049</b>	<b>0.417</b>	<b>0.127</b>	<b>22.906</b>

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.3 Balance de masa del sistema

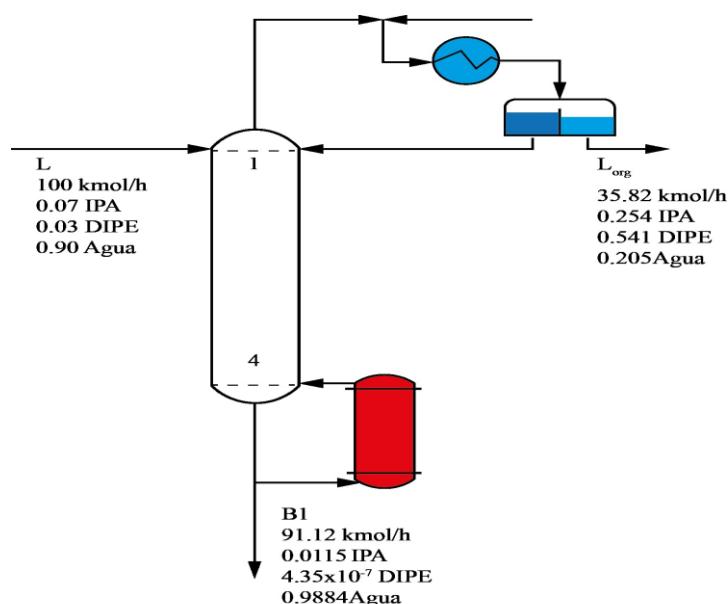
Con el fin de comprobar la simulación se realiza el balance de masa de las tres columnas de destilación, ya que influyen directamente en la obtención de IPA de alta pureza.

**Tabla 4-4:** Corrientes de alimentación de las tres columnas de destilación azeotrópica.

Col-1		Col-2		Col-3	
Flujo molar (kmol/h)	100	Flujo molar (kmol/h)	25.827	Flujo molar (kmol/h)	29.981
X <sub>IPA</sub> L-org	0.254	X <sub>IPA</sub> Destilado	0.109	X <sub>IPA</sub> Destilado	0.122
X <sub>IPA</sub> Fondo	0.011	X <sub>IPA</sub> Fondo	0.993	X <sub>IPA</sub> Fondo	1.76E-05
X <sub>DIPE</sub> Destilado	0.541	X <sub>DIPE</sub> Destilado	0.645	X <sub>DIPE</sub> Destilado	0.605

XDIPE Fondo	4.35E-07	XDIPE Fondo	0.006	XDIPE Fondo	0.999
XAGUA Destilado	0.204	XAGUA Destilado	0.244	XAGUA Destilado	0.272
XAGUA Fondo	0.988	XAGUA Fondo	2.09E-06	XAGUA Fondo	4.75E-07

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 1-4:** Esquema de balance general de la Col-1.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

### Balance de masa global

$$F_1 = D_1 + B_1 \quad (\text{Ec 2-4})$$

$$100 = D_1 + B_1 \quad (\text{Ec 3-4})$$

Donde:

**F1**= Flujo de alimentación de la Col-1

**D1**= Flujo molar del destilado de la Col-1

**B1**=Flujo molar del fondo de la Col-1

Balance de masa por componentes

- Col-1

IPA

$$FX_{IPA} = DX_{IPA} + BX_{IPA} \quad (\text{Ec 4-4})$$

$$100 * 0,07 = 0,254 * D + 0,011 * B$$

$$7 = 0,254 * D + 0,011 * B$$

Dipe

$$FX_{Dipe} = DX_{Dipe} + BX_{Dipe} \quad (\text{Ec 5-4})$$

$$100 * 0,03 = 0,541 * D + 4,35 \times 10^{-7} * B$$

$$3 = 0,541 * D + 4,35 \times 10^{-7} * B$$

AGUA

$$FX_{Agua} = DX_{Agua} + BX_{Agua} \quad (\text{Ec 6-4})$$

$$100 * 0,90 = 0,204 * D + 0,988 * B$$

$$90 = 0,204 * D + 0,988 * B$$

**Sistema de ecuaciones**

$$\begin{aligned} (-0,204) \quad & \{ 0,254 * D + 0,011 * B = 7 \\ (0,254) \quad & \{ 0,204 * D + 0,988 * B = 90 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{rcl} -0,051 * D - 0,0002 * B = -1,428 \\ \underline{0,051 * D + 0,251 * B = 22,860} \end{array} \rightarrow 0,251 * B = 21,432$$

$$B = \frac{21,432}{0,251}$$

$$\boxed{B = 85,386 \text{ kmol/h}}$$

**Calcular el valor de D1**

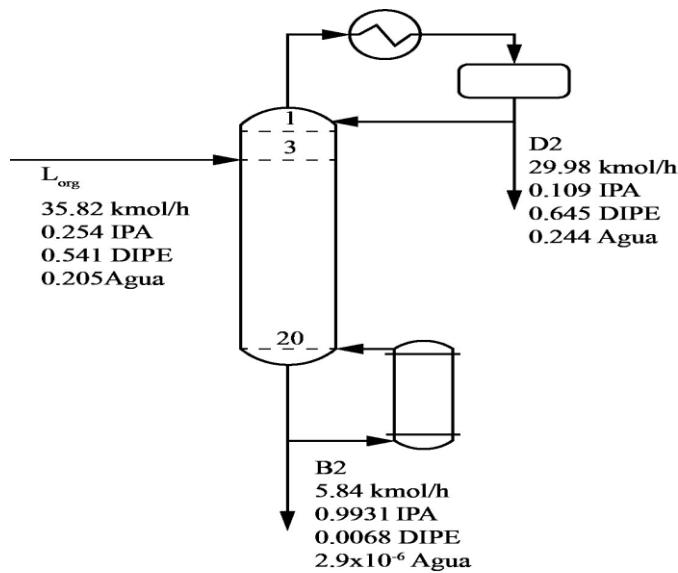
$$7 = 0,254 * D + 0,011 * B$$

$$D_1 = \frac{7 - 0,011 * B}{0,254}$$

$$D_1 = \frac{7 - 0,011 * 85,386}{0,254}$$

$$D_1 = 23,861 \text{ kmol/h}$$

- Col-2



**Ilustración 2-4:** Esquema de balance general de la Col-2.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

### Balance de masa global

$$F_2 = D_2 + B_2 \quad (\text{Ec 7-4})$$

$$35,827 = D_2 + B_2 \quad (\text{Ec 8-4})$$

**Donde:**

**F2**= Flujo de alimentación de la Col-2

**D2**= Flujo molar del destilado de la Col-2

**B2**=Flujo molar del fondo de la Col-2

### Balance por componentes

IPA

$$FX_{IPA2} = DX_{IPA2} + BX_{IPA2} \quad (\text{Ec 9-4})$$

$$35,827 * 0,254 = 0,109 * D + 0,993 * B$$

$$9,10 = 0,109 * D + 0,993 * B$$

DIPE

$$FX_{DIPE2} = DX_{DIPE2} + BX_{DIPE2} \quad (\text{Ec 10-4})$$

$$35,827 * 0,541 = 0,645 * D + 0,006 * B$$

$$19,382 = 0,645 * D + 0,006 * B$$

AGUA

$$FX_{AGUA2} = DX_{AGUA2} + BX_{AGUA2} \quad (\text{Ec 11-4})$$

$$35,827 * 0,204 = 0,244 * D + 2,09 \times 10^{-6} * B$$

$$7,308 = 0,244 * D + 2,09 \times 10^{-6} * B$$

### Sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} -0,645 & 0,109 * D + 0,993 * B = 9,10 \\ 0,109 & 0,645 * D + 0,006 * B = 19,382 \end{cases}$$

$$\begin{array}{l} -0,070 * D - 0,640 * B = -5,869 \\ \underline{0,070 * D + 6,54 \times 10^{-4} * B = 2,112} \end{array} \rightarrow -0,639 * B = -3,757$$

$$B = \frac{-3,757}{-0,639}$$

$$B = 5,876 \text{ kmol/h}$$

### Calcular el valor de D2

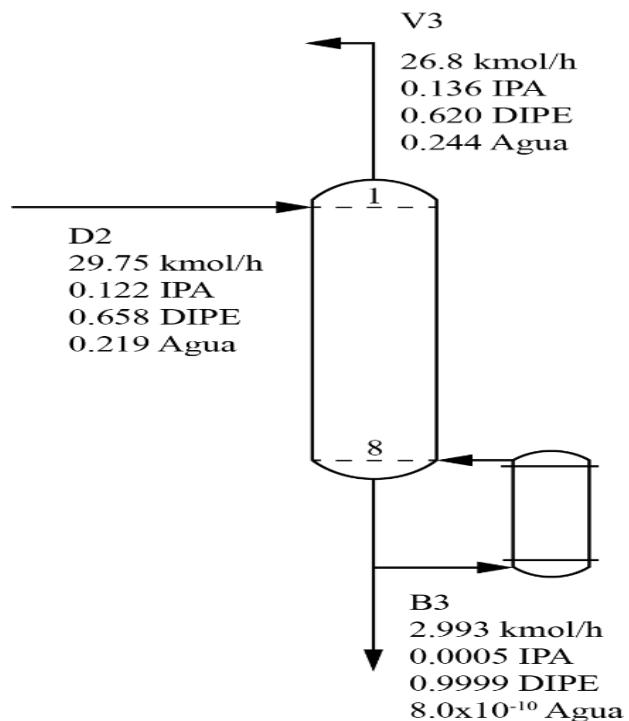
$$9,10 = 0,109 * D + 0,993 * B$$

$$D_2 = \frac{9,10 - 0,993 * B}{0,109}$$

$$D_2 = \frac{9,10 - 0,993 * 5,876}{0,109}$$

$$D_2 = 29,955 \text{ kmol/h}$$

- Col-3



**Ilustración 3-4:** Esquema de balance general de la Col-3.

Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

### Balance de masa global

$$F_3 = D_3 + B_3 \quad (\text{Ec 12-4})$$

$$29,79 = D_3 + B_3 \quad (\text{Ec 13-4})$$

**Donde:**

**F3**= Flujo de alimentación de la Col-3

**D3**= Flujo molar del destilado de la Col-1

**B3**=Flujo molar del fondo de la Col-1

### Balance por componentes

IPA

$$FX_{IPA3} = DX_{IPA3} + BX_{IPA3} \quad (\text{Ec 14-4})$$

$$29,981 * 0,109 = 0,122 * D + 1,76 \times 10^{-5} * B$$

$$3,267 = 0,122 * D + 1,76 \times 10^{-5} * B$$

DIPE

$$FX_{DIPE3} = DX_{DIPE3} + BX_{DIPE3} \quad (\text{Ec 15-4})$$

$$29,981 * 0,645 = 0,605 * D + 0,999 * B$$

$$19,337 = 0,605 * D + 0,999 * B$$

AGUA

$$FX_{AGUA3} = DX_{AGUA3} + BX_{AGUA3} \quad (\text{Ec 16-4})$$

$$29,981 * 0,244 = 0,272 * D + 4,75 \times 10^{-5} * B$$

$$7,315 = 0,272 * D + 4,75 \times 10^{-5} * B$$

### Sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} (-0,605) \\ (0,122) \end{cases} \begin{cases} 0,122 * D + 1,76 \times 10^{-5} * B = 3,267 \\ 0,605 * D + 0,999 * B = 19,337 \end{cases}$$

$$\begin{array}{l} -0,074 * D - 1,06 \times 10^{-5} * B = -1,976 \\ \underline{0,074 * D + 0,122 * B = 2,359} \end{array} \rightarrow 0,122 * B = 0,383$$

$$B = \frac{0,383}{0,122}$$

$$B = 3,14 \text{ kmol/h}$$

### Calcular el valor de D3

$$3,267 = 0,122 * D + 1,76 \times 10^{-5} * B$$

$$D_3 = \frac{3,267 - 1,76 \times 10^{-5} * B}{0,122}$$

$$D_3 = \frac{3,267 - 1,76 \times 10^{-5} * 3,14}{0,122}$$

$$D_3 = 26,778 \text{ kmol/h}$$

#### 4.4 Análisis de sensibilidad

Las variables relevantes en destilación azeotrópica fueron seleccionadas con el propósito ver la influencia sobre las salidas del proceso, se enfatizó el estudio en la destilación por oscilación de presión desarrollada en las tres columnas, equipos fundamentales en la separación del IPA. Las variables independientes, los rangos y repeticiones correspondientes son detalladas en la Tabla 4-5.

**Tabla 4-5:** Variables para el análisis de sensibilidad

Enfoque	Nomenclatura	Descripción	Unidad
Columna 1	T-in	Temperatura de alimentación de la columna 1	K
	IPA-in	Fracción molar de IPA en la corriente de alimentación	-
	DIPE-in	Fracción molar de DIPE en la corriente de alimentación	-
	P-C1	Presión de la columna 1	atm
Columna 2	P-C2	Presión de la columna 2	atm
Columna 3	P-C3	Presión de la columna 3	atm
Salidas	X <sub>IPAD1</sub>	Fracción molar de IPA del destilado 1	-
	X <sub>IPAB2</sub>	Fracción molar de IPA del fondo 2	-
	X <sub>DIPED3</sub>	Fracción molar de DIPE en el destilado 3	-
	X <sub>DIPEB3</sub>	Fracción molar de DIPE en el fondo 3	-

. Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

**Tabla 5-4:** Análisis de sensibilidad de las tres columnas de destilación.

Destilación azeotrópica por oscilación de presión			
Rotulado	Variable independiente	Descripción	Variable dependiente
A-1	T-in	Análisis del efecto de la temperatura de alimentación en la concentración de IPA.	X <sub>IPA L-org</sub>
A-2	IPA-in	Análisis de la influencia de la alimentación de IPA en la concentración del producto.	X <sub>IPA L-org</sub>

A-3	DIPE-in	Análisis de cómo afecta la alimentación de DIPE en la concentración de la concentración del destilado.	$X_{IPA\ L-org}$
A-4	P-C1	Análisis del efecto que tiene la modificación de la presión en la concentración del líquido orgánico.	$X_{IPA\ L-org}$
A-5	P-C2	Análisis del efecto de presiones bajas en la concentración del fondo.	$X_{IPAB2}$
A-6	P-C3	Análisis de como afectar aumentar la presión de la tercera columna, en la concentración del destilado y fondo.	$X_{DIPED3}$ $X_{DIPEB3}$

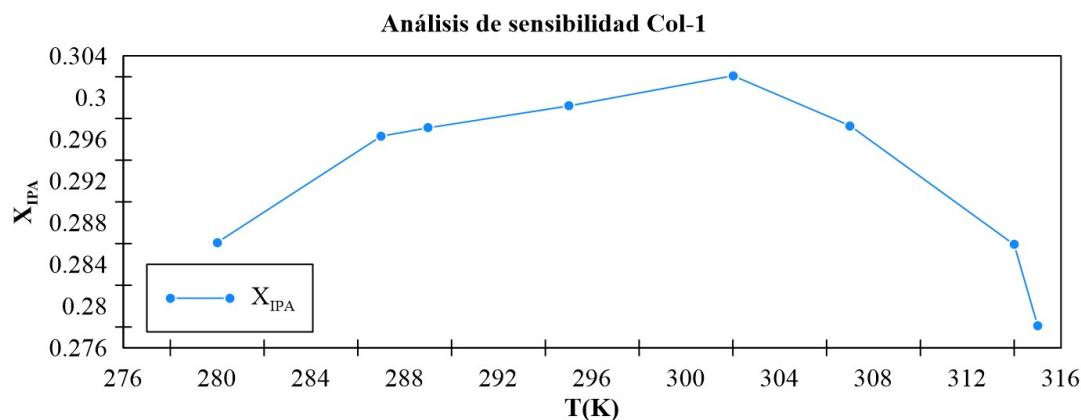
. Realizado por: Castillo, Adriana, 2023.

#### **4.1.2 Resultados del análisis de sensibilidad de las tres columnas de destilación**

En la Col-1 se consideró la modificación de cuatro variables independientes como: la fracción molar de los compuestos de alimentación (IPA, DIPE), temperatura y la presión de la columna, con el objetivo de realizar un excelente análisis de sensibilidad, cada parámetro fue etiquetado y se especificó en la Tabla 6-3. En el simulador DWSIM no se logró obtener el análisis de sensibilidad, por ello se procedió a realizar variaciones aleatorias de los parámetros escogidos con el fin de identificar los rangos de variación.

##### **- Resultados del análisis Col-1**

Para el análisis A-1 se realizó la variación de la Temperatura de alimentación, se consideró un rango de operación de 200-315 K respectivamente, estos valores fueron los apropiados para evidenciar cual es el efecto de esta variable independiente sobre la concentración del producto objetivo, en la Ilustración 4-4 se puede observar que la fracción molar del IPA en el líquido orgánico fue disminuyendo esto es debido que el aumento de temperatura está relacionado con la naturaleza de las reacciones químicas y propiedades físicas, el IPA es una sustancia volátil, lo que significa que tiene tendencia a evaporarse con facilidad.

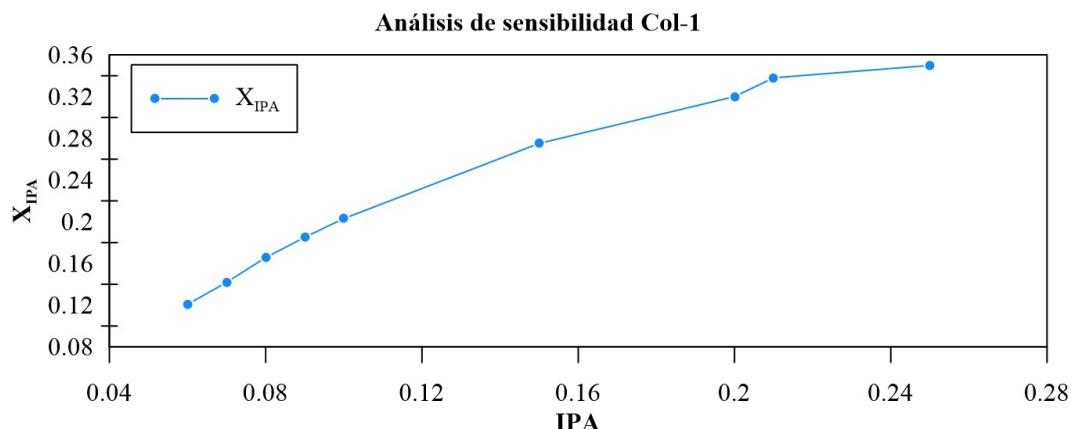


**Ilustración 4-4 :** Resultados del análisis A\_1

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - **Resultados análisis Col-1**

Para el análisis de la fracción molar IPA de alimentación se estableció un rango de 0,06 a 0,250 respectivamente. En la Ilustración 5-4 se puede evidenciar que la X<sub>IPA</sub> en el destilado presenta cambios graduales debido a la naturaleza de la destilación azeotrópica, y la forma en que se separan los componentes en función del punto de ebullición.

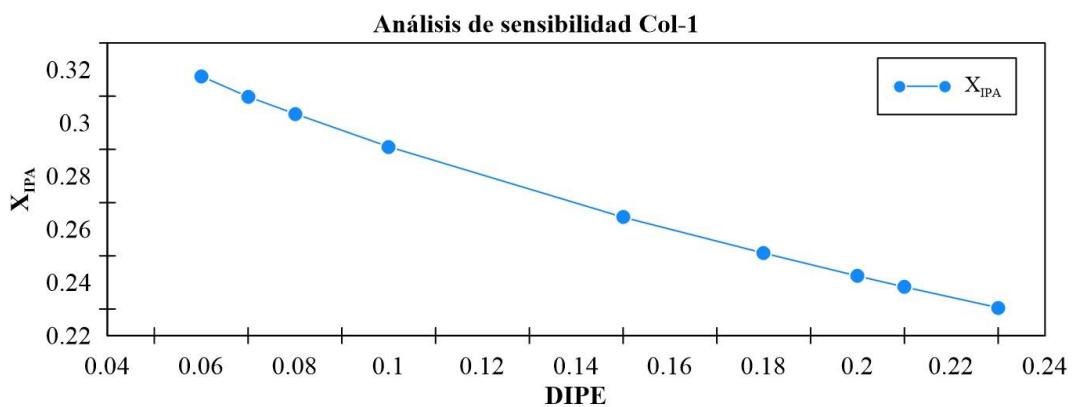


**Ilustración 5-4 :** Resultados del análisis A\_2

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - *Resultados análisis A-3*

En el tercer análisis en la alimentación se utilizó un rango de 0,06 a 0,250 de XDIPE respectivamente, debido a los cambios en el comportamiento del azeótropo, y las relaciones vapor-líquido en la columna de destilación, la concentración de IPA en el destilado va disminuyendo debido a que se forma una composición más rica en DIPE.

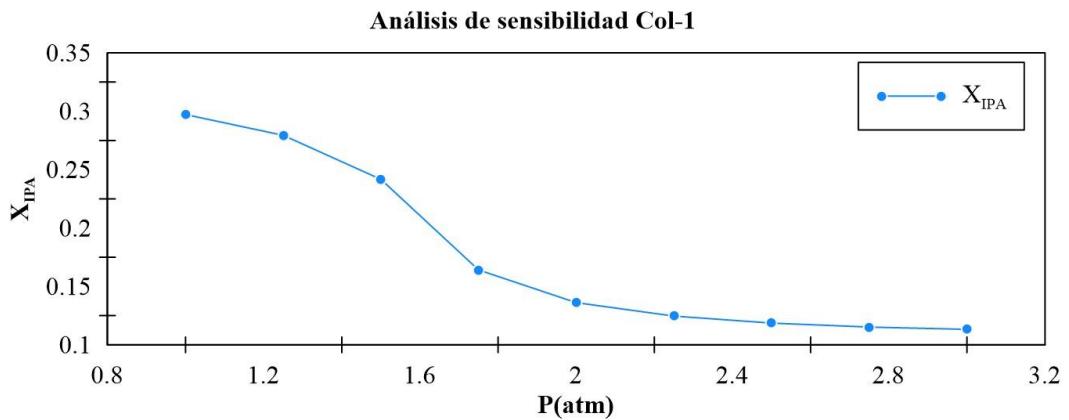


**Ilustración 6-4 :** Resultados del análisis A\_3

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### -     **Resultados Análisis Col-1**

En el análisis A-4 se empleó un rango de 1,00 a 3,00 atm de presión, estos valores se emplearon en la columna 1 de destilación azeotrópica, favorece a la formación del azeótropo cuando se aumenta, y se rompe cuando disminuye, debido a esto se puede apreciar la variabilidad de la fracción molar del IPA.



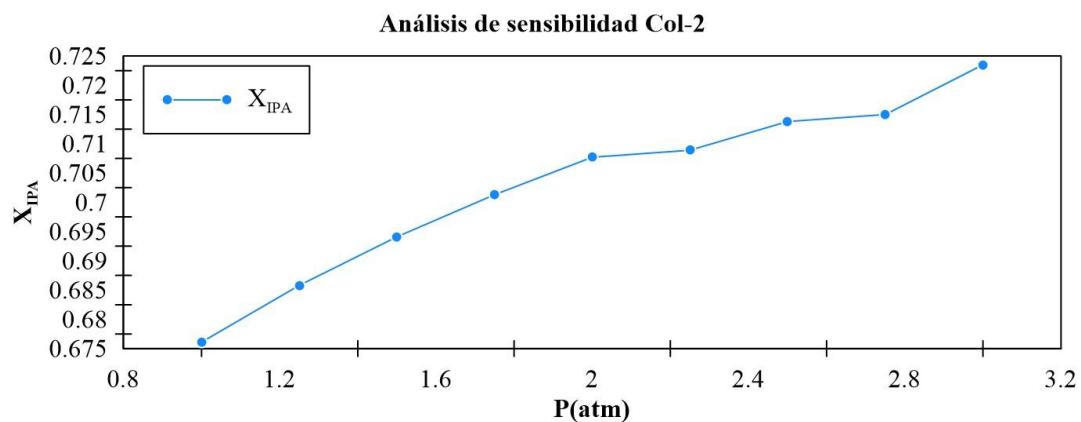
**Ilustración 7-4 :** Resultados del análisis A\_4

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### -     **Resultados del análisis Col-2**

En la columna de destilación (Col-2) se aplicó un análisis de sensibilidad respecto a la presión en un rango de 1,00 a 3,00 atm, esta columna opera a bajas presiones, en la Ilustración 8-4 se puede

visualizar como afecta la temperatura en la fracción molar de IPA, debido a la naturaleza del azeótropo de la mezcla azeotrópica.

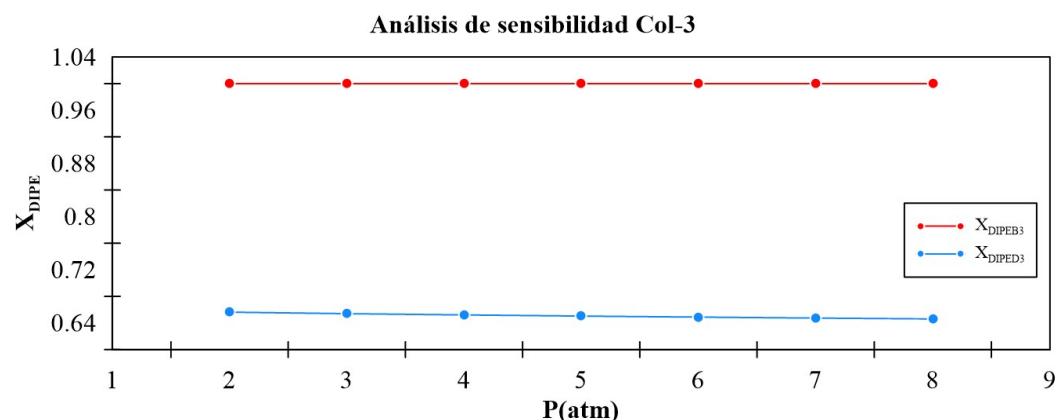


#### Ilustración 8-4 : Resultados del análisis A\_5

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

- **Resultado del análisis Col-3**

En el análisis se estudió la influencia de aumentar la presión de la tercera columna de destilación entre un rango de 2,00 a 8,00 atm, en la Ilustración 9-4 se puede visualizar que, al elevar la temperatura en la columna de destilación, se obtiene destilados con mayor concentración de DIPE debido al aumento en la volatilidad, pero a la naturaleza del componente la concentración puede tener una disminución significativa.



#### Ilustración 9-4 : Resultados del análisis A\_6

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.5 Resultados del adiestramiento de la ANN

Para el entrenamiento de la ANN se utilizó los algoritmos de adiestramiento disponibles en MATLAB realizando modificaciones en su configuración, se consideró un rango de 10 a 100 redes ocultas, se evaluaron el error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de regresión lineal (R) de los resultados obtenidos en cada entrenamiento, la variación de estos resultados depende del tipo de algoritmo empleado (Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization, Scaled Conjugate Gradient). Los resultados obtenidos en cada entrenamiento se detallan en la tabla 6-4.

**Tabla 6-4:** Resultados del adiestramiento de la RNA en MATLAB.

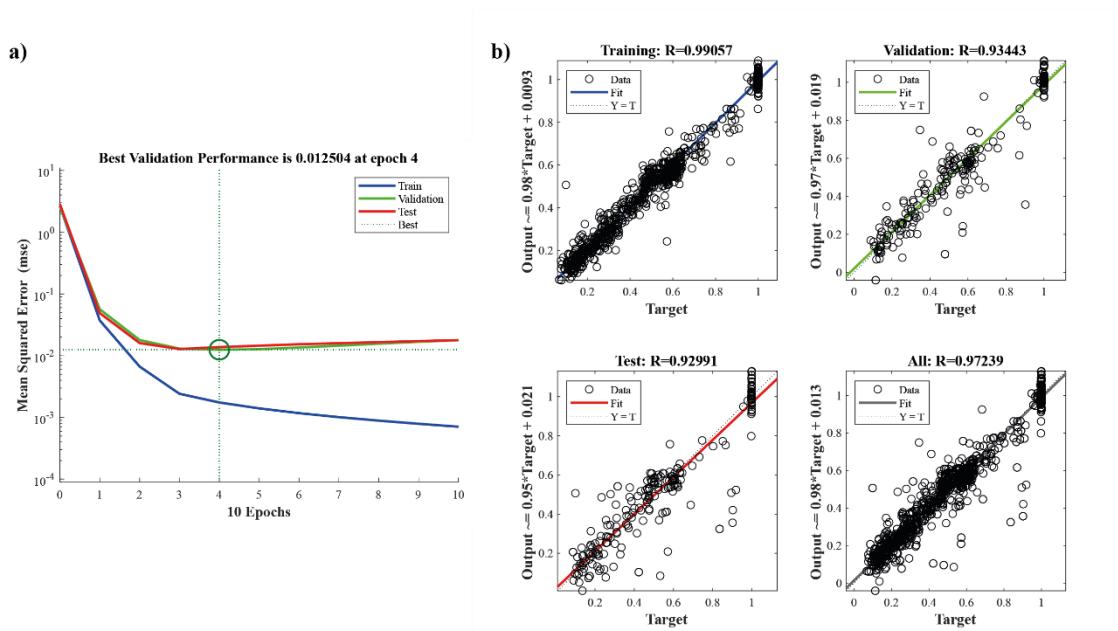
Nº Neuronas	Levenberg-Marquat				Bayesian Regularization				Scale Conjugate Gradient			
	R Train	R Test	MSE train	MSE test	R Rain	R Test	MSE train	MSE test	R Rain	R test	MSE train	MSE test
10	9.74E-01	9.56E-01	4.83E-03	8.11E-03	9.71E-01	9.67E-01	5.33E-03	5.99E-03	9.56E-01	9.66E-01	8.15E-03	6.27E-03
20	9.64E-01	9.66E-01	6.46E-03	6.56E-03	9.88E-01	9.39E-01	2.28E-03	1.15E-02	9.62E-02	9.68E-01	6.89E-03	5.97E-03
30	9.81E-01	9.55E-01	3.42E-03	8.34E-03	9.90E-01	9.48E-01	1.80E-03	9.82E-03	9.68E-01	9.53E-01	5.90E-03	8.59E-03
40	9.71E-01	9.61E-01	5.26E-03	7.19E-03	9.94E-01	9.57E-01	1.15E-03	8.23E-03	9.68E-01	9.54E-01	5.90E-03	8.32E-03
50	9.73E-01	9.54E-01	5.05E-03	8.33E-03	9.97E-01	9.64E-01	7.60E-04	1.86E-03	9.72E-01	9.58E-01	4.82E-03	1.25E-02
60	9.76E-01	9.53E-01	4.42E-03	8.57E-03	9.38E-01	9.55E-01	4.14E-04	8.57E-03	9.73E-01	9.31E-01	4.85E-03	1.31E-02
70	9.08E-01	8.09E-01	1.51E-02	3.25E-02	9.50E-01	8.42E-01	3.31E-03	4.97E-02	8.92E-02	8.47E-01	1.73E-02	2.54E-02
80	9.47E-01	7.29E-01	8.79E-03	4.88E-02	9.87E-01	8.26E-01	2.18E-03	5.40E-02	8.89E-01	8.42E-01	1.83E-02	2.44E-02
90	9.91E-01	9.30E-01	1.75E-03	1.38E-02	9.93E-01	8.08E-01	1.24E-03	9.94E-02	9.72E-01	9.58E-02	1.10E-02	2.44E-02
100	9.31E-01	8.40E-01	1.10E-02	2.73E-02	9.09E-01	8.65E-01	5.36E-05	1.11E-01	9.30E-01	7.96E-02	1.12E-02	3.68E-02

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

Luego de concluir el proceso de adiestramiento de la red empleando los tres algoritmos respectivos, se lograron identificar los ajustes óptimos para cada uno. Para el algoritmo Levenberg-Marquardt, se determinó que el entrenamiento adecuado se manifestó con un valor de MSE de 0,012504 y un R de 0,97239. Por su parte, en el enfoque de Bayesian Regularization, el mejor rendimiento se obtuvo al emplear 50 neuronas en la capa interna, logrando un MSE de 0,00075905 y un R de 0,99188. Finalmente, bajo el algoritmo de Scaled Conjugate Gradient, se observó un MSE de 0,01099 y un R de 0.96499.

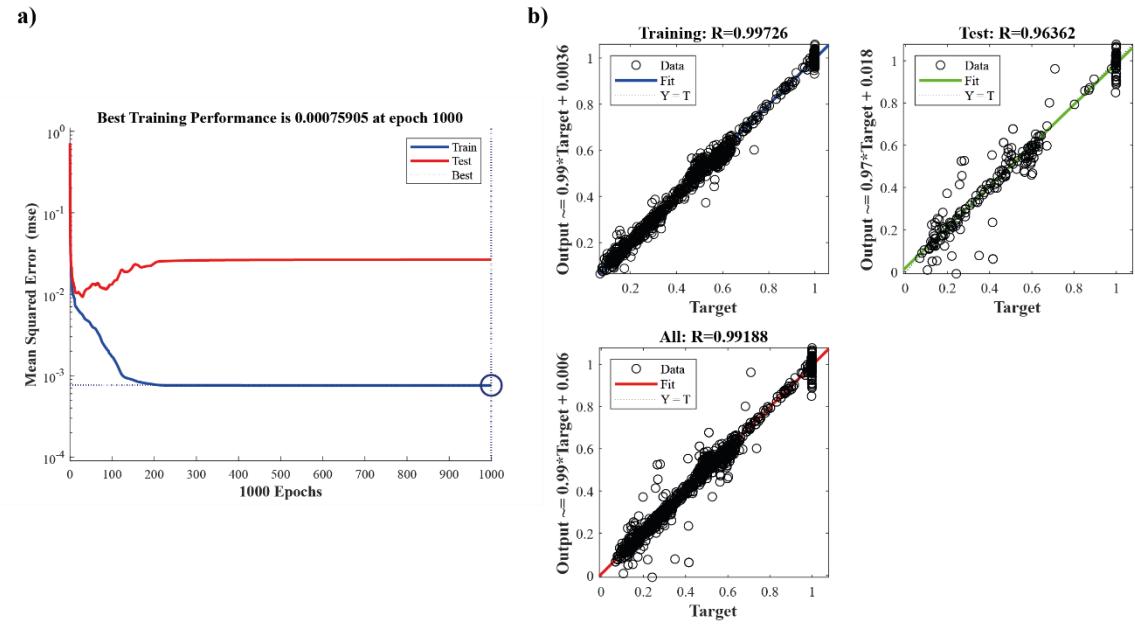
En la Ilustraciones 10-4, 11-4 y 12-4 en el literal a, se puede visualizar los esquemas correspondientes de los errores en el proceso de entrenamiento, validación y prueba para cada algoritmo. Las gráficas de la regresión lineal se encuentras detallada en la Ilustración 10-4, 11-4 y 12-4 en el literal b. Se pudo deducir que el mejor ajuste se produce cuando las salidas de la red son iguales o se aproximan al valor de R igual a 1.

Se llevó a cabo una comparación entre los resultados logrados a través de distintos algoritmos de entrenamiento. Se seleccionó el RNA creado mediante el empleo del algoritmo Bayesian Regularization, ya que brindó eficiencia tanto en su desempeño general como en la calidad de los resultados generados. La capacidad para prever situaciones futuras se logra mediante un proceso de validación externa, acompañado de un análisis estadístico con el propósito de asegurar la confiabilidad de las predicciones efectuadas.



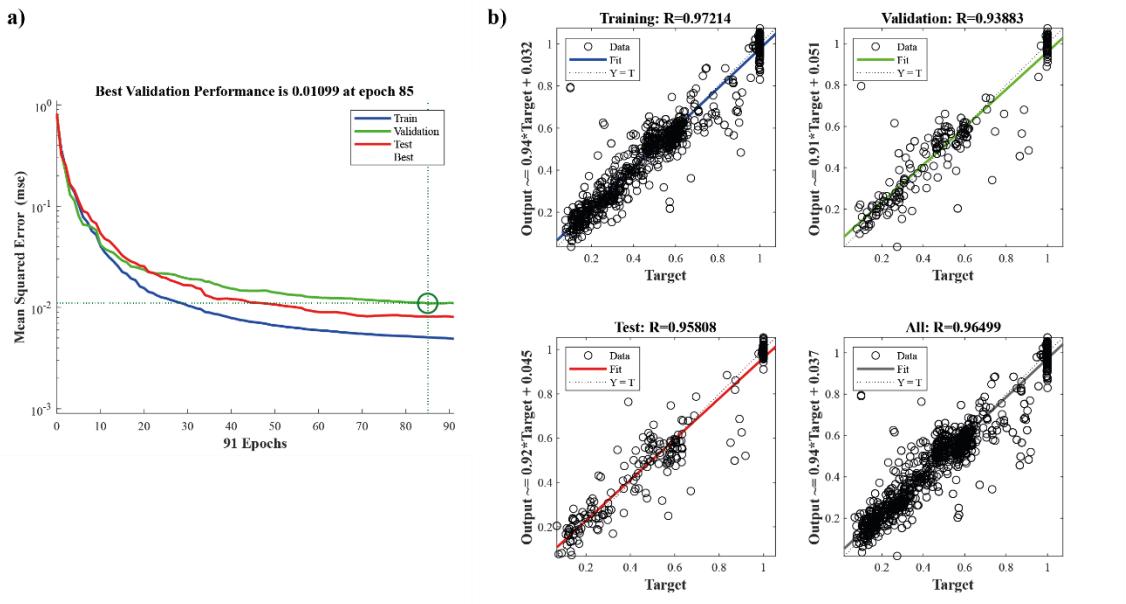
**Ilustración 10-4:** Entrenamiento de Levenberg-Marquardt con 90 capas ocultas.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 11-4:** Entrenamiento de Bayesian Regularization con 50 capas ocultas.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



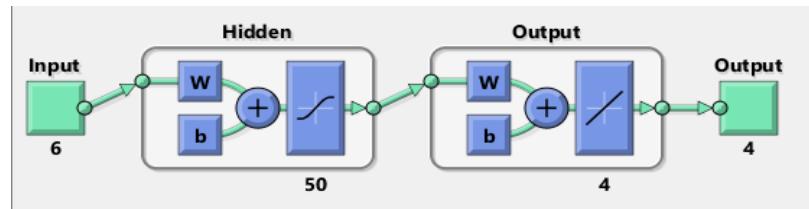
**Ilustración 12-4:** Entrenamiento de Scaled Conjugate Gradient con 90 capas ocultas.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.6 Resultados del diseño del ANN

Se procedió a entrenar la red utilizando el algoritmo de Bayesian Regularization con 50 capas ocultas. Este proceso de entrenamiento se llevó a cabo utilizando un conjunto de 400 datos, en el

que cada uno consta de 6 entradas y se esperan 4 salidas como resultado. La ejecución del entrenamiento se completó en un tiempo total de 14 segundos.



**Ilustración 13-4:** Estructura de la RNA diseñada en MATLAB.

**Realizador por:** Castillo, Adriana, 2023.

Los resultados obtenidos de los errores cuadráticos medios (MSE) en cada etapa del entrenamiento y prueba se detallan en la tabla 7-4, al obtener valores cercanos al objetivo de estudio se puede establecer que presentan la tolerancia suficiente para una eficiente ejecución de la ANN.

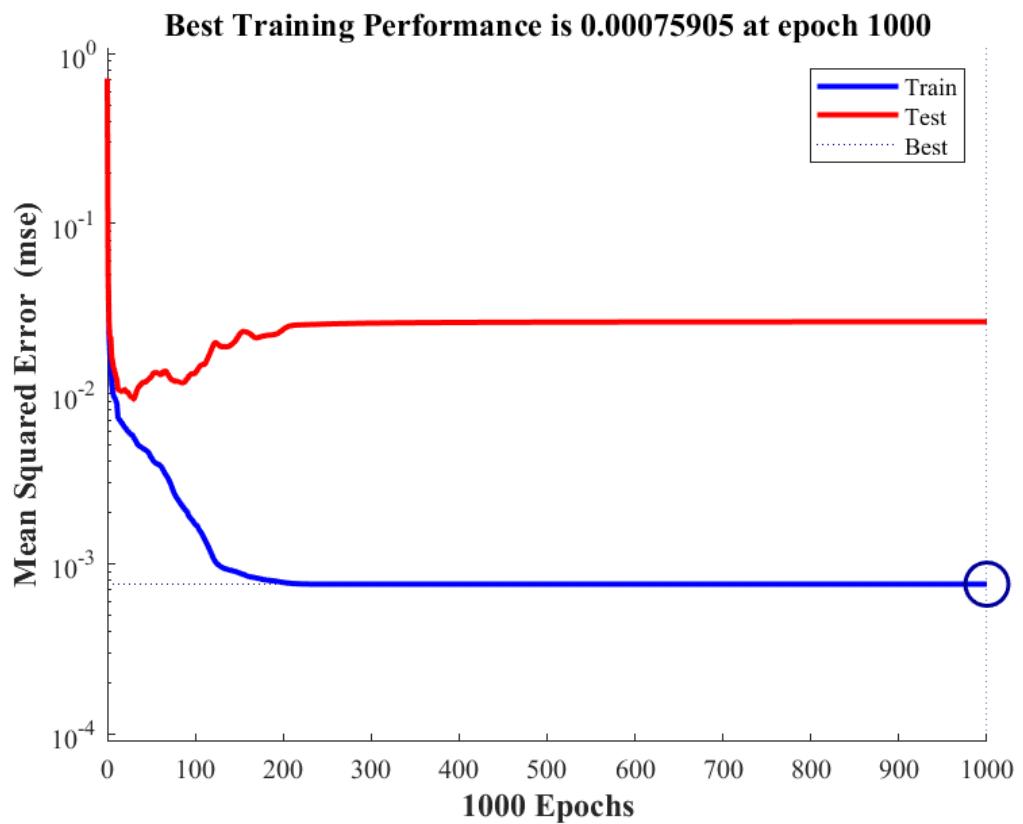
**Tabla 7-4:** Error cuadrático medio del entrenamiento final RNA.

Etapa	MSE
Training	7.60E-04
Testing	1.86E-03

**Realizador por:** Castillo, Adriana, 2023.

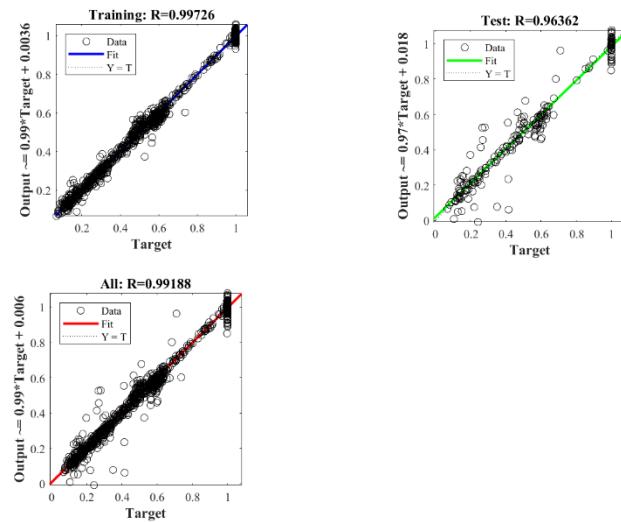
#### 4.7 Rendimiento de la RNA

En la Ilustración 14-4 se indica los resultados para medir el desempeño de la RNA, revelando la disminución del error cuadrático medio en las diferentes etapas del entrenamiento, conforme fueron aumentando el número de capas ocultas, se estableció que el mejor MSE (7.60e-04). En la Ilustración 15-4 se indica que existe una correlación lineal respecto a las entradas de la red alcanzando un coeficiente total de regresión lineal de 0,99188.



**Ilustración 14-4:** Progreso del MSE durante el entrenamiento.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 15-4:** Resultados de la capacidad predictiva de la RNA.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

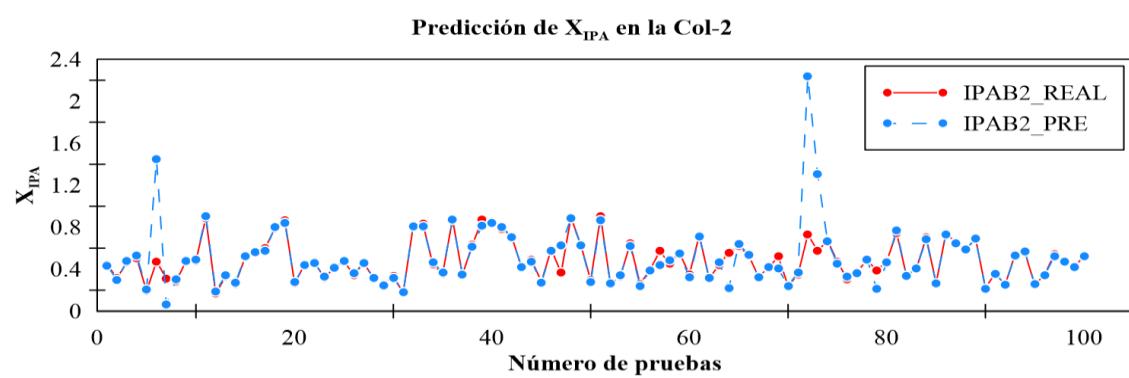
## 4.8 Resultados alcanzados por la predicción de la ANN

### 4.8.1 Estudio de las predicciones de la ANN

Al obtener los resultados predichos por la RNA se realizó una interpretación mediante gráficos donde se compararon los resultados experimentales obtenidos en DWSIM con los resultados predichos por la RNA, dividido en dos secciones: 400 datos empleados en el entrenamiento y 25 datos para la validación externa.

#### - Fracción molar de IPA en el fondo Col-2

La concentración molar final del  $X_{IPA}$  durante en el proceso de entrenamiento de la RNA tuvo un error promedio de 6,220% debido a la presencia de datos atípicos como se observa en la Ilustración 16-4 se observa el ajuste de los datos predichos en la RNA con los datos simulados.

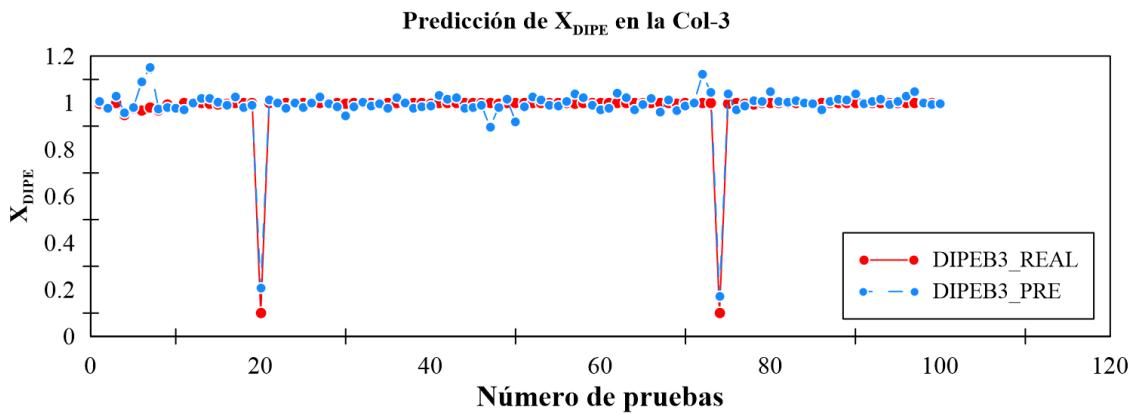


**Ilustración 16-4:** Predicción de la fracción molar de IPA en el entrenamiento.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - Fracción molar de DIPE en el fondo Col-3

En la Ilustración 17-4 se observa que la concentración  $X_{DIPE}$  predicho en el entrenamiento de la RNA encajan con los datos de la simulación, sin presentar mayores irregularidades presentando un error promedio del 2,539 % indicando que hubo un buen entrenamiento de la RNA.

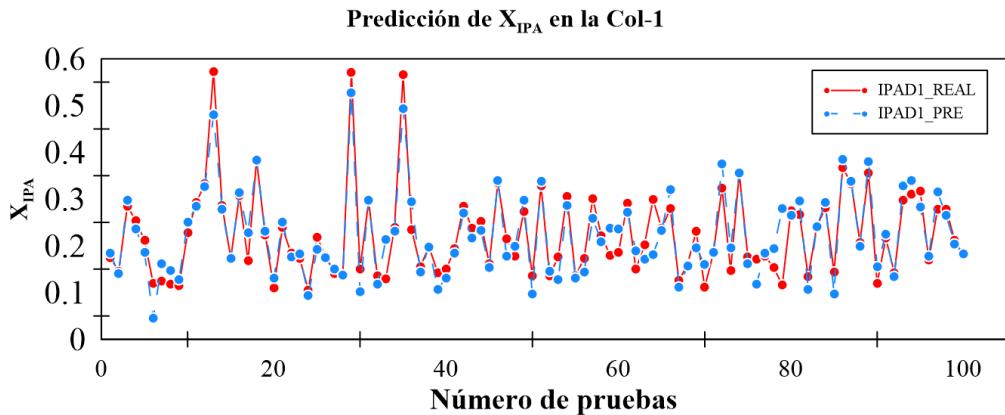


**Ilustración 17-4:** Predicción de la fracción molar de DIPE en el entrenamiento.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - Fracción molar de IPA del líquido orgánico Col-1

Par la fracción molar del IPA en el líquido orgánico de la Col-1, predicha en el entrenamiento presenta un error promedio del 12,285% debido a las bajas concentraciones obtenidas en la simulación, a pesar de las irregularidades encajan bien los valores predichos como se puede conservar en la Ilustración 18-4.

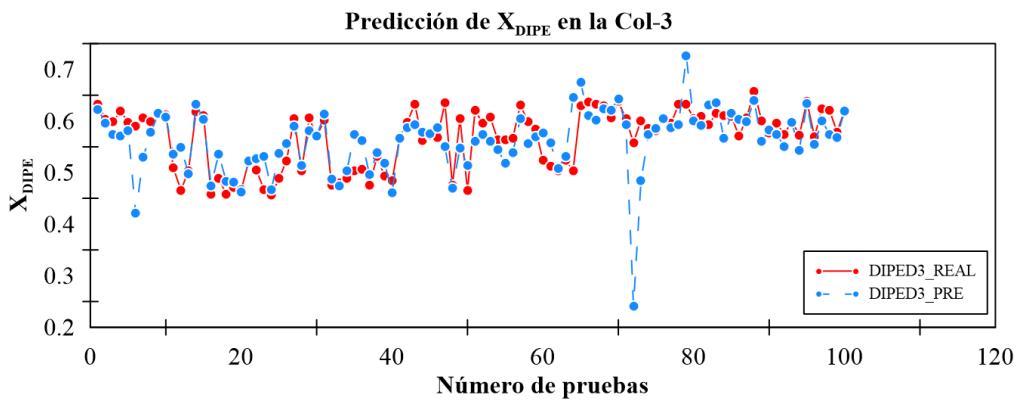


**Ilustración 18-4:** Predicción de la fracción molar de IPA en el entrenamiento.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - Fracción molar de DIPE en el destilado Col-3

En el destilado de la Col-3, se aprecia un error del 4,802% respecto a la predicción molar de DIPE, como se indica en la Ilustración 19-4, provocado por las bajas concentraciones obtenidas en la simulación, a pesar de presentar un poco de irregularidades encajan los valores dado al bajo porcentaje de error, ya que no supera el 12%.



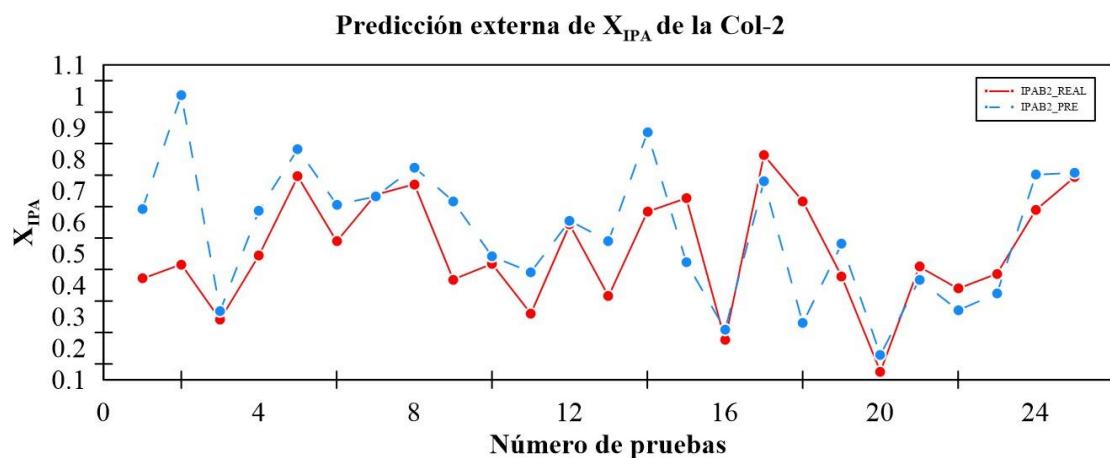
**Ilustración 19-4:** Predicción de la fracción molar de DIPE en el entrenamiento.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.8.2 Datos predichos en la validación externa

##### - Fracción molar de IPA en el fondo Col-2

En la Ilustración 20-4 se presenta la predicción de la concentración de XIPA en la corriente del fondo de la Col-2, comparando los datos de DWSIM con la predicción realizada por la RNA. Se observa una relación significativa entre ambos conjuntos de datos con un error promedio del 22,264%.

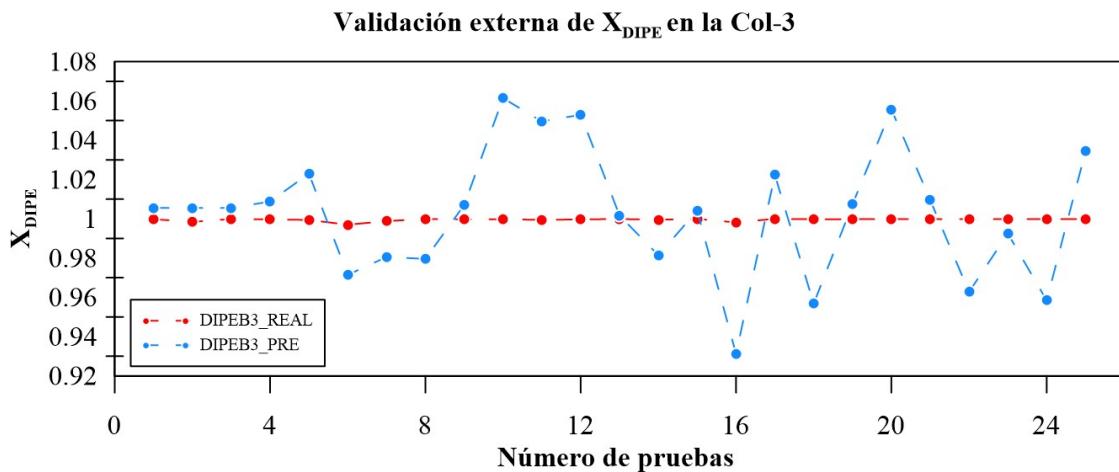


**Ilustración 20-4:** Predicción de la fracción molar de IPA en la validación externa.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

### - Fracción molar de DIPE en el fondo Col-3

La relación entre los datos predichos por la RNA y los valores registrados en DWSIM para la concentración de DIPE en el fondo de la Col-3 muestra una variación irregular, resultando en un error promedio del 2,551%. Este error evidencia la presencia de valores atípicos que afectan la precisión de la predicción. Los resultados se observan en la Ilustración 21-4.

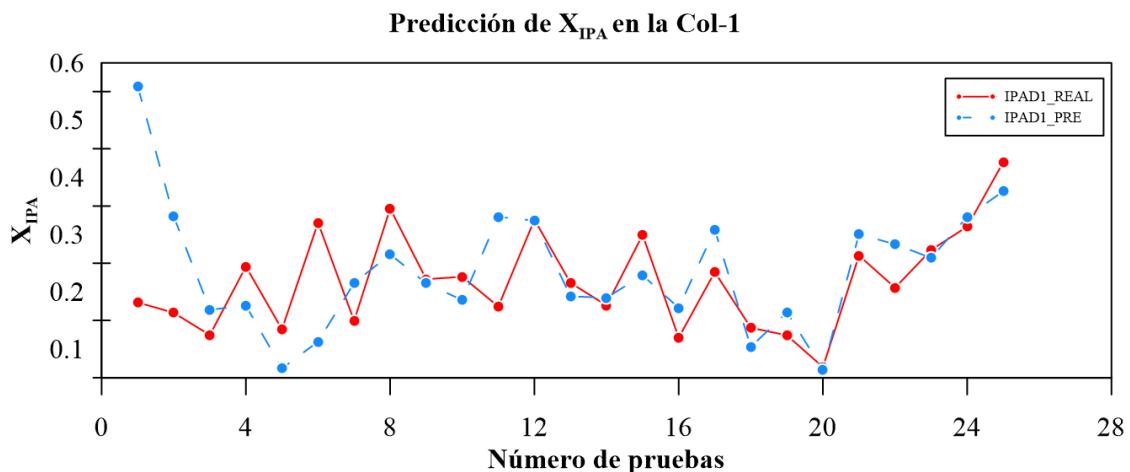


**Ilustración 21-4:** Predicción de la fracción molar de DIPE en la validación externa.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

### - Fracción molar de IPA del líquido orgánico Col-1

En la Ilustración 22-4 para la corriente del líquido orgánico de XIPA de la Col-1 se puede apreciar cómo los datos predichos por la RNA se ajustan a los datos reales obtenidos en DWSIM. Sin embargo, es importante destacar que se obtuvo un error promedio del 22,705% debido a la presencia de datos atípicos. Estos valores anuales han influido de manera significativa en la precisión de la predicción.

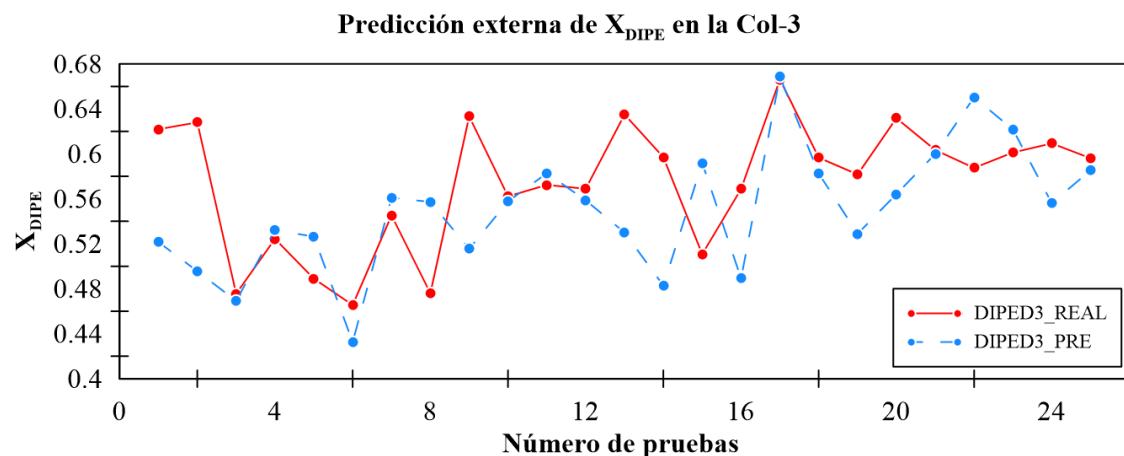


**Ilustración 22-4:** Predicción de la fracción molar de IPA en la validación externa.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### - Fracción molar de DIPE en el destilado Col-3

En la predicción realizada por la RNA para la corriente del destilado de la Col-3, en la Ilustración 23-4 se ha identificado la presencia de datos anómalos, lo cual ha afectado la precisión de la coincidencia entre los datos predichos y los datos reales. Como resultado, se ha observado un error promedio del 8,438%. Es necesario abordar estos datos atípicos para mejorar la calidad de la predicción con el fin de obtener resultados más precisos.



**Ilustración 23-4:** Predicción de la fracción molar de DIPE en la validación externa.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

## 4.9 Análisis ANOVA

Con el objetivo en demostrar la fiabilidad de los resultados pronosticados por la RNA y resaltar su capacidad predictiva, se efectúo una evaluación estadística comparativa entre las predicciones y los valore reales obtenidos en DWSIM. Este análisis permitirá establecer el nivel de confianza en la predicción de la fracción molar del IPA en el fondo de la Col-2, DIPE en el fondo de la Col-3, IPA en el destilado de la Col-1 y DIPE en el destilado de la Col-3 respectivamente.

El análisis estadístico se llevó a cabo haciendo uso de un software estadístico, utilizando los datos obtenidos en la validación eterna de la RNA como muestra.

#### - Análisis ANOVA para XIPA en la Col-2

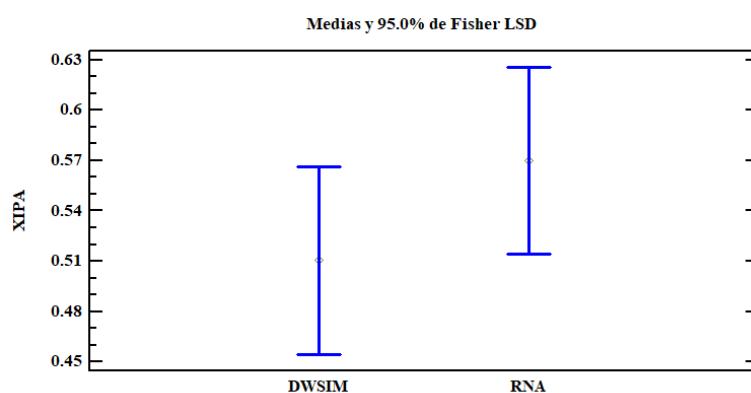
La tabla de análisis de varianza (ANOVA) descomponen la variabilidad de XIPA en el fondo de la Col-2 en dos partes: una parte entre grupos y otra dentro de los grupos. La razón-F, que esta

situación es de 1,16156, es la relación entre el componente entre grupos por el componente dentro de grupos. Dado que el valor-P de la razón-F es mayor o igual a 0,05, es decir no existe diferencia estadística significativa entre las medias de XIPA, con un nivel de confianza del 95%.

**Tabla 8-4:** Tabla ANOVA para IPA del fondo de la Col-2.

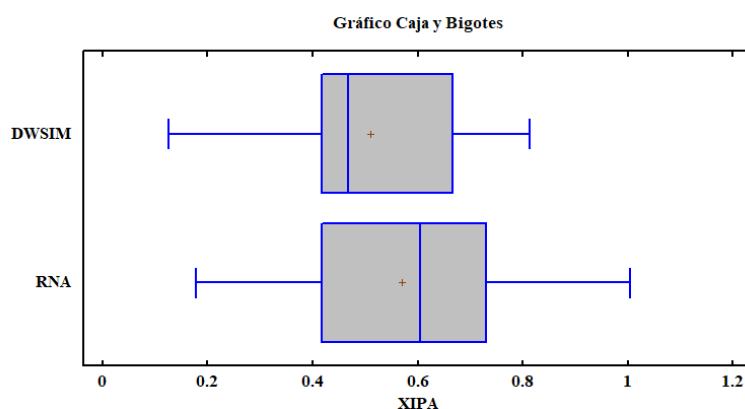
Fuente	Suma de cuadrados	GL	Cuadrado medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0.0446808	1	0.0446808	1.16	0.2865
Intra grupos	1.84638	48	0.0384663		
Total(Corr)	1.89106	49			

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 24-4:** Gráfico de medias para la XIPA de la Col-2.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 25-4:** Gráfico de caja y bigote para la XIPA de la Col-2.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

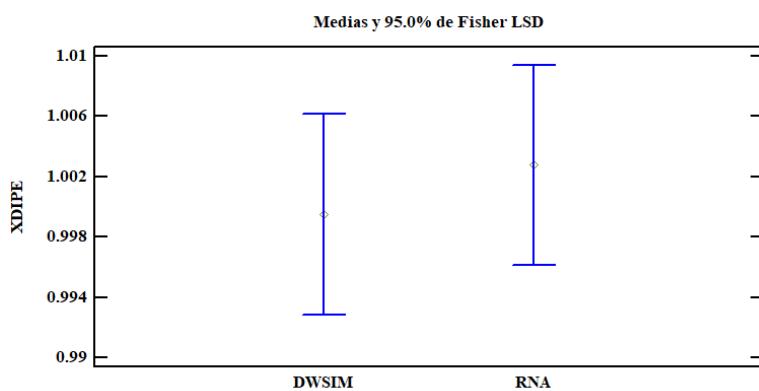
### - Análisis ANOVA para XDIPE en la Col-3

La tabla de análisis de varianza (ANOVA) descomponen la variabilidad de XIPDE en el fondo de la Col-3 en dos partes: una parte entre grupos y otra dentro de los grupos. La razón-F, en esta situación es de 0.243928, es la relación entre el componente entre grupos por el componente dentro de grupos. Dado que el valor-P de la razón-F es mayor o igual a 0,05 no existe diferencia estadísticamente significativa entre las medias de XDIPE, con un nivel de confianza del 95%.

**Tabla 9-4:** Tabla ANOVA para DIPE del fondo de la Col-3.

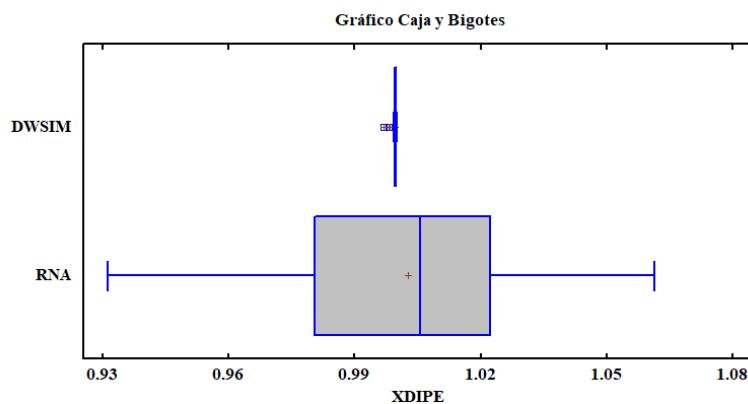
Fuente	Suma de cuadrados	GL	Cuadrado medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0.000133588	1	0.000133588	0.24	0.6236
Intra grupos	0.0262873	48	0.000547651		
Total(Corr)	0.0264209	49			

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 26-4:** Gráfico de medias para la XDIPE de la Col-3.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 27-4:** Gráfico de caja y bigote para la XDIPE de la Col-3.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

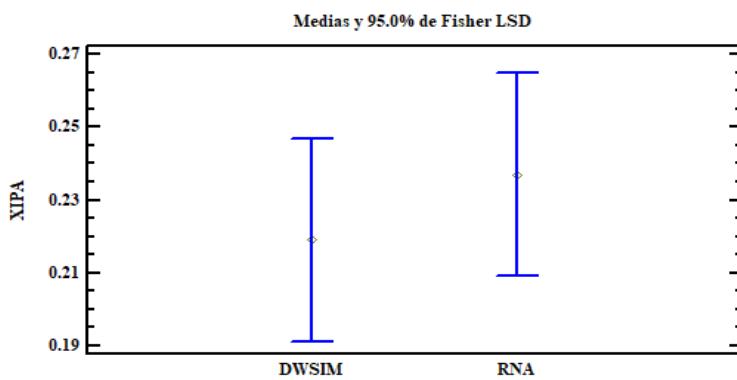
#### - Análisis ANOVA para XIPA en la Col-1

La tabla de análisis de varianza (ANOVA) descomponen la variabilidad de XIPA del líquido orgánico de la Col-1 en dos partes: una parte entre grupos y otra dentro de los grupos. La razón-F, en esta situación es de 2.23558, es la relación entre el componente por el componente dentro de los grupos. Dado que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0,05 no hay diferencia estadísticamente significativa entre la media de XIPA, con un nivel de confianza del 95%.

**Tabla 10-4:** Tabla ANOVA para IPA del líquido orgánico de la Col-1.

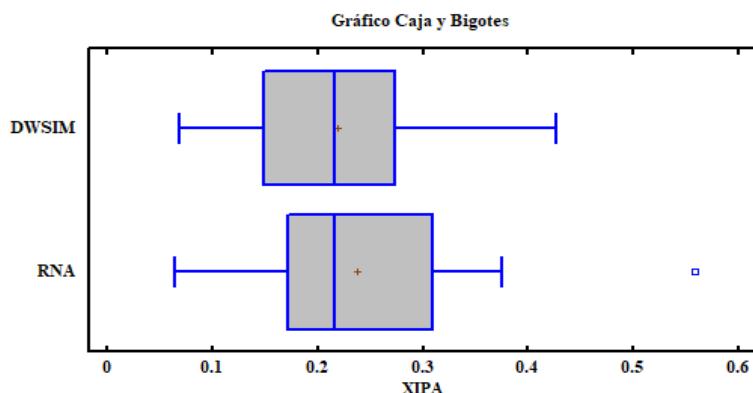
Fuente	Suma de cuadrados	GL	Cuadrado medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0.00408015	1	0.00408015	0.42	0.5207
Intra grupos	0.467761	48	0.00974502		
Total(Corr)	0.471841	49			

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 28-4:** Gráfico de medias para la XIPA de la Col-1.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 29-4:** Gráfico de caja y bigote para la XIPA de la Col-1.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

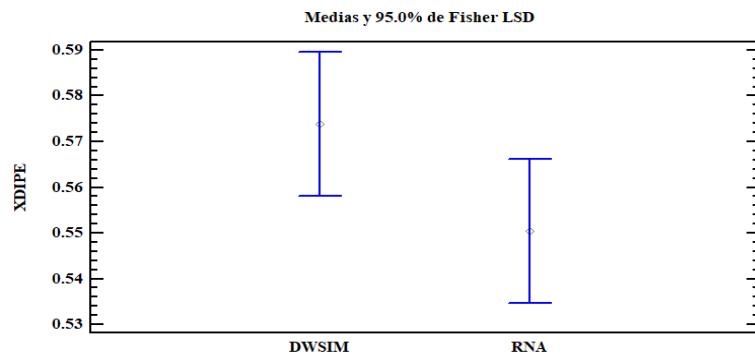
#### - Análisis ANOVA para XDIPE en la Col-3

La tabla de análisis de varianza (ANOVA) descomponen la variabilidad de XDIPE en el destilado de la Col-1 en dos partes: una parte entre grupos y otra dentro de los grupos. La razón-F, en esta situación es de 2.23558, es la relación entre el componente por el componente dentro de los grupos. Dado que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0,05 no hay diferencia estadísticamente significativa entre la media de XIPA, con un nivel de confianza del 95%.

**Tabla 11-4:** Tabla ANOVA para DIPE del destilado de la Col-3.

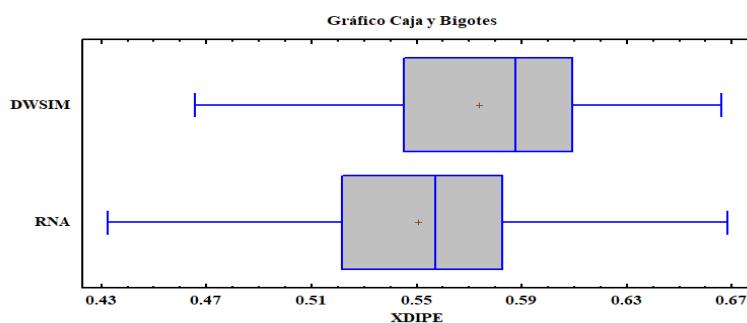
Fuente	Suma de cuadrados	GL	Cuadrado medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0.00685952	1	0.00685952	2.24	0.1414
Intra grupos	0.14728	48	0.00306834		
Total(Corr)	0.15414	49			

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 30-4:** Gráfico de medias para la XDIPE de la Col-3.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.



**Ilustración 31-4:** Gráfico de caja y bigote para la XDIPE de la Col-3.

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

#### 4.10 Resultados del análisis de optimización

Se realizó una evaluación de optimización basado en los datos empleados en la validación externa. Se extrajeron las condiciones de operación para la separación de IPA y DIPE, obteniendo una

fracción molar pura en el fondo de la Col-2 de 0,978 de IPA. Mientras en el fondo de la Col-3 se obtuvo una pureza de 0,999. Estos datos se encuentran detallados en la tabla 11-4.

**Tabla 12-4:** Resultados de la optimización de la separación IPA/DIPE.

Condiciones operativas	Valor	Unidad
Fracción molar de $X_{IPA}$	0.978	-
Fracción molar de $X_{DIPE}$	0.999	-
Presión de la Col-1 y Col-2	1	atm
Presión Col-3	5	atm
<b>Cambios en la Col-1</b>		
Diámetro	0.34	m
Altura	9.74	m
Costo de operación	123	(k\$/año)
<b>Cambios en la Col-2</b>		
Diámetro	0.77	m
Altura	13.76	m
Costo de operación	207	(k\$/año)
<b>Cambios en la Col-3</b>		
Diámetro	0.58	
Altura	10.75	
Costo de operación	100	(k\$/año)

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

Se obtuvo la separación de IPA y DIPE, debido a las variaciones controladas de la presión en las columnas de destilación permitiendo la separación del azeótropo, teniendo como resultado un IPA puro en la Col-2 y DIPE totalmente puro en la Col-3. Esto se logra dado a que cada columna está diseñada para atrapar uno de los componentes mientras que el otro se separa gracias a la variación en las condiciones de presión.

## CONCLUSIONES

- Se establecieron especificaciones cruciales para cada columna, lo que desencadenó en los resultados destacados en el artículo de gran relevancia. En la Col-1, se alcanzó la convergencia con un valor de 0,364 en la fracción molar de XIPA del líquido orgánico y un requerimiento de energía Q reboiler de 418,678kW. Respecto a la Col-2, se obtuvo una fracción molar de XIPA en el fondo de 0,978 y una demanda de energía Q reboiler de 609,20 kW. Por último, en la Col-3 de alta presión, se logró un XDIPE en el fondo de 0,999 y una necesidad de energía Q reboiler de 287,04kW.
- La simulación del proceso de separación de IPA Y DIPE, se validó al comparar los resultados adquiridos en DWSIM con los datos presentados en el artículo científico. Esto dio como resultado un error del 2,10% para la composición molar de IPA en el fondo de la Col-2. En cuanto a XDIPE en el fondo de la Col-3, se registró un error del 0%. En consecuencia, los resultados de la simulación se consideran válidos y aceptables.
- Se desarrolló una Red Neuronal Artificial (RNA) con la capacidad de pronosticar las concentraciones molares de IPA Y DIPE en las corrientes del destilado y fondo de las tres columnas de destilación (Col-1, Col-2, Col-3) que forman parte del proceso de separación de IPA por oscilación de presión. Esta RNA fue diseñada utilizando la herramienta de ajuste de redes neuronales de MATLAB y se eligió en algoritmo de Bayesian Regularization (BR) con una capa oculta de 50 neuronas. El MSE y R calculados fueron de 7.60e-04 y 0.99188 respectivamente.
- Se realizó un análisis de varianza (ANOVA) con un nivel de confianza del 95% al comparar los valores predichos en la RNA con los valores simulados en DWSIM de cada una de las salidas. Como resultado, se obtuvo un valor-p > 0,05 en todas las salidas. En consecuencia, no se observan diferencias significativas estadísticamente entre los valores predichos y los valores reales. Esto respalda con firmeza la confiabilidad de los resultados proporcionados por la RNA.

## **RECOMENDACIONES**

- Realizar de manera correcta la evaluación de sensibilidad antes de seleccionar las variables, con el propósito de evitar problemas al momento de obtener la información de la base de datos para el proceso del entrenamiento de la RNA.
- Para obtener un mejor entrenamiento de la RNA, es esencial ampliar la base de datos de las variables seleccionadas.
- Trabajar con números enteros las entradas seleccionadas para el entrenamiento de la RNA con el fin de obtener interpretación clara y directa.
- Es importante examinar y adquirir conocimientos sobre el lenguaje de programación que se va a utilizar para evitar posibles errores de sintaxis al escribir el código.

## BIBLIOGRAFÍA

**ARIFIN, Saiful and CHIEN, I. Lung,** 2007. Combined preconcentrator/recovery column design for isopropyl alcohol dehydration process. In : *Industrial and Engineering Chemistry Research*, pp. 2535–2543. 11 April 2007. DOI 10.1021/ie061446c.

**CHUA, W. J., RANGAIAH, G. P. and HIDAJAT, K.,** 2017. Design and optimization of isopropanol process based on two alternatives for reactive distillation. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. Vol. 118, pp. 108–116. DOI 10.1016/j.cep.2017.04.021.

**CIRO, Jorge and OCAÑA, Jimenez.** *SIMULACIÓN DE PROCESOS*. .

**DANIEL, Alor et al.** *Modelación De Destilación Azeotrópica Con Cambio De Presión*.

**DE, Carrera and QUÍMICA, Ingeniería,** 2021. *ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO FACULTAD DE CIENCIAS “SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN PROCESO DE DESHIDRATACIÓN DE tert-BUTANOL UTILIZANDO UN PROCESO DE COLUMNA DE PARED DIVISORIA MEDIANTE DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA HETEROGRÉNEA”.*

**DE QUÍMICA, Facultad,** 2006. *TESIS: SELECCIÓN DE UN ARRASTRADOR PARA LA SEPARACIÓN DE UNA MEZCLA AZEOTRÓPICA.*

**DING, Shifei et al.,** 2013. *Evolutionary artificial neural networks: A review*. Artificial Intelligence Review 39. DOI 10.1007/s10462-011-9270-6.

**GUANG, Chao et al.,** 2019. Comparison of heterogeneous azeotropic and pressure-swing distillations for separating the diisopropylether/isopropanol/water mixtures. *Chemical Engineering Research and Design*. Vol. 143, pp. 249–260. DOI 10.1016/j.cherd.2019.01.021.

**GUANG, Chao et al.,** 2020. Optimal design and performance enhancement of heteroazeotropic and pressure-swing coupling distillation for downstream isopropanol

separation. *Separation and Purification Technology*. Vol. 242. DOI 10.1016/j.seppur.2020.116836.

**HIMMELBLAU, David M,** 2000. *Applications of Artificial Neural Networks in Chemical Engineering*.

**JHOANY ACOSTA ESQUIJAROSA, Ing and AUXILIAR, Investigador,** 2005. *APLICACION DE AGENTES SEPARADORES HETEROGENEOS A LA DESTILACION AZEOTROPICA Y EXTRACTIVA DISCONTINUA.* .

**KIVA, V. N., HILMEN, E. K. and SKOGESTAD, S.,** 2003. Azeotropic phase equilibrium diagrams: A survey. *Chemical Engineering Science*. Vol. 58, no. 10, pp. 1903–1953. DOI 10.1016/S0009-2509(03)00018-6.

**LI, Hao, ZHANG, Zhien and LIU, Zhijian,** 2017. *Application of artificial neural networks for catalysis: A review*. MDPI. Catalysts 7. DOI 10.3390/catal7100306.

**MAALEM, Youcef et al.,** 2020. Prediction of thermodynamic properties of the ternary azeotropic mixtures. *Fluid Phase Equilibria*. Vol. 517. DOI 10.1016/j.fluid.2020.112613.

**MORENO-CEDEÑO, Greysi et al.,** 2019. *Tech note: technologies for the production of isopropyl alcohol (IPA) / Nota técnica: tecnologías para la producción de alcohol isopropílico (IPA)*.

**NIU, Mark Wendou and RANGAIAH, G. P.,** 2016. Process Retrofitting via Intensification: A Heuristic Methodology and Its Application to Isopropyl Alcohol Process. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. Vol. 55, no. 12, pp. 3614–3629. DOI 10.1021/acs.iecr.5b02707.

**OCHOA-ESTOPIER, Lluvia M., JOBSON, Megan and SMITH, Robin,** 2013. Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks. *Computers and Chemical Engineering*. Vol. 59, pp. 178–185. DOI 10.1016/j.compchemeng.2013.05.030.

**PALACIO GONZÁLEZ, Erika et al.**, 2013. *Separación ternaria de una mezcla azeotrópica isopropanol - agua.*

**PANERATI, Jacopo et al.**, 2019. *Experimental methods in chemical engineering: Artificial neural networks–ANNs*. Wiley-Liss Inc. Canadian Journal of Chemical Engineering 97. DOI 10.1002/cjce.23507.

**PIRDASHTI, Mohsen et al.**, 2013. Artificial neural networks: Applications in chemical engineering. *Reviews in Chemical Engineering*. Vol. 29, no. 4, pp. 205–239. DOI 10.1515/revce-2013-0013.

**RIVAS, Wilmer, BERTHA, Asanza and OLIVO, Mazón.** *Redes neuronales artificiales aplicadas al reconocimiento de patrones.*

**SHIN, Yeonju, SMITH, Robin and HWANG, Sungwon**, 2020. Development of model predictive control system using an artificial neural network: A case study with a distillation column. *Journal of Cleaner Production*. Vol. 277. DOI 10.1016/j.jclepro.2020.124124.

**STATGRAPHICS TECHNOLOGIES, 2020.** STATGRAPHICS® Centurion 19 User Manual. [online]. 2020. Retrieved from : [https://402067.fs1.hubspotusercontent-na1.net/hubfs/402067/Manuals/Statgraphics\\_Centurion\\_19\\_User\\_Guide.pdf](https://402067.fs1.hubspotusercontent-na1.net/hubfs/402067/Manuals/Statgraphics_Centurion_19_User_Guide.pdf).

**WANG, San Jang and WONG, David S.H.**, 2006. Control of reactive distillation production of high-purity isopropanol. *Journal of Process Control*. Vol. 16, no. 4, pp. 385–394. DOI 10.1016/j.jprocont.2005.06.015.

**XIA, Hui et al.**, 2017. A novel energy-saving pressure swing distillation process based on self-heat recuperation technology. *Energy*. Vol. 141, pp. 770–781. DOI 10.1016/j.energy.2017.09.108.

**XU, Y., CHUANG, K. T. and SANGER, A. R.**, 2002a. Design of a process for production of isopropyl alcohol by hydration of propylene in a catalytic distillation

column. *Chemical Engineering Research and Design*. Vol. 80, no. 6, pp. 686–694. DOI 10.1205/026387602760312908.

**XU, Y., CHUANG, K. T. and SANGER, A. R.**, 2002b. Design of a process for production of isoprophyl alcohol by hydration of propylene in a catalytic distillation column. *Chemical Engineering Research and Design*. Vol. 80, no. 6, pp. 686–694. DOI 10.1205/026387602760312908.

**XU, Y., CHUANG, K. T. and SANGER, A. R.**, 2002c. Design of a process for production of isoprophyl alcohol by hydration of propylene in a catalytic distillation column. *Chemical Engineering Research and Design*. Vol. 80, no. 6, pp. 686–694. DOI 10.1205/026387602760312908.

**ZHANG, Yi et al.**, 2019. Vapour–liquid equilibrium and extractive distillation for separation of azeotrope isopropyl alcohol and diisopropyl ether. *Journal of Chemical Thermodynamics*. Vol. 131, pp. 294–302. DOI 10.1016/j.jct.2018.11.013.





















**ANEXO B: VARIABLES USADAS EN EL CÓDIGO DE PROGRAMACIÓN DE LA RNA EN MATLAB.**

Variable	Descripción
XIPA	Fracción molar de isopropanol en la alimentación
XDIPE	Fracción molar de diisopropil éter en la alimentación
IPAB2	Concentración de isopropanol del residuo
DIPEB3	Concentración de diisopropil éter en el residuo
IPAD1	Concentración de isopropanol del destilado
DIPED3	Concentración de diisopropil éter en el destilado
P1	Presión en la columna 1
P2	Presión en la columna 2
P3	Presión en la columna 3
Col-1	Columna de destilación 1
Col-2	Columna de destilación 2
Col-3	Columna de destilación 3
RNA2	Base de 400 datos para el entrenamiento
ANN	Datos en forma de vector para el entrenamiento
Temp	Temperatura de alimentación
Entradas	Matriz de todas las entradas
Salidas	Matriz de todas las salidas
IPA_Val	Fracción molar de isopropanol en la alimentación
DIPE_Val	Fracción molar de diisopropil éter en la alimentación
C1_Val	Columna de destilación 1
C2_Val	Columna de destilación 2
C3_Val	Columna de destilación 3
PropPred	Matriz que contiene las concentraciones de IPA y DIPE predichas por la red

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.

## ANEXO C: CÓDIGO PARA EL DISEÑO, ADIESTRAMIENTO Y VALIDACIÓN DE LA RNA.

```
1 %DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA PREDICCIÓN
2 clear all
3 clc
4
5 %Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
6 Extraer=readtable('RNA_IPA2.xlsx','Sheet','ANN');
7
8 %Convertir la tabla a Matriz Numérica
9 Datos = table2array(Extraer);
10
11 %-----VARIABLES DE ENTRADA-----
12 %Neuronas de entrada
13 %Parametros de entrada Temperatura
14 Temp = Datos(1,:);
15 Temp_N= normalize(Temp(1,:),'range');
16
17 %Fracción molar de IPA inicial
18 XDIPE = Datos(2,:);
19 XDIPE_N= normalize(XDIPE(1,:),'range');
20
21 %Fracción molar de DIPE inicial
22 XIPA = Datos(3,:);
23 XIPA_N= normalize(XIPA(1,:),'range');
24
25 %Presión de la primera columna
26 P1 = Datos(4,:);
27 P1_N= normalize(P1(1,:),'range');
28
29 %Presión de la segunda columna
30 P2 = Datos(5,:);
31 P2_N=normalize(P2(1,:),'range');
32
33 %Presión de la tercera columna
34 P3 = Datos(6,:);
35 P3_N=normalize(P3(1,:),'range');
36
37 %Entradas finales
38
39 Entradas =[Temp;XDIPE;XIPA;P1;P2;P3];
40
41 %Entradas normalizadas
```

```

42
43 Entradas_N=[Temp_N; XDIPE_N; XIPA_N;P1_N; P2_N; P3_N];
44
45
46
47 %-----VALORES DE SALIDA-----
48 salidas= Datos(7:10,:);
49
50 %Concentración del IPA en el fondo 2
51
52 IPAB2=salidas(1,:);
53 IPAB2_N=normalize(salidas(1,:),'range');
54 IPAB2_max=max(salidas(1,:));
55 IPAB2_min=min(salidas(1,:));
56
57 %Concentración del DIPE en el fondo 3
58
59 DIPEB3=salidas(2,:);
60 DIPEB3_N=normalize(salidas(2,:),'range');
61 DIPEB3_max=max(salidas(2,:));
62 DIPEB3_min=min(salidas(2,:));
63
64 %Concentración del IPA en el destilado 1
65
66 IPAD1=salidas(3,:);
67 IPAD1_N=normalize(salidas(3,:),'range');
68 IPAD1_max=max(salidas(3,:));
69 IPAD1_min=min(salidas(3,:));
70
71
72 %Concentración del DIPE en el destilado 3
73
74 DIPED3=salidas(4,:);
75 DIPED3_N=normalize(salidas(4,:),'range');
76 DIPED3_max=max(salidas(4,:));
77 DIPED3_min=min(salidas(4,:));
78
79 %Salidas finales
80
81 Salidas =[IPAB2;DIPEB3;IPAD1;DIPED3];
82
83 %Salidas normalizadas
84

```

```

85 Salidas_N=[IPAB2_N;DIPEB3_N;IPAD1_N;DIPED3_N];
86
87 %-----RED NEURONAL-----%
88 % Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
89 % Script generated by Neural Fitting app
90 % Created 12-Aug-2023 07:54:57
91 %
92 % This script assumes these variables are defined:
93 %
94 % Entradas - input data.
95 % Salidas - target data.
96
97 x = Entradas;
98 t = Salidas;
99
100 % Choose a Training Function
101 % For a list of all training functions type: help nntrain
102 % 'trainlm' is usually fastest.
103 % 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
104 % 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
105 trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.
106
107 % Create a Fitting Network
108 hiddenLayerSize = 50;
109 net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
110
111 % Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
112 % For a list of all processing functions type: help nnprocess
113 net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
114 net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
115
116 % Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
117 % For a list of all data division functions type: help nndivision
118 net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
119 net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
120 net.divideParam.trainRatio = 70/100;
121 net.divideParam.valRatio = 15/100;
122 net.divideParam.testRatio = 15/100;
123
124 % Choose a Performance Function
125 % For a list of all performance functions type: help nnperformance
126 net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error
127

```

```

128 % Choose Plot Functions
129 % For a list of all plot functions type: help nnplot
130 net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
131     'plotregression', 'plotfit'};
132
133 % Train the Network
134 [net,tr] = train(net,x,t);
135
136 % Test the Network
137 y = net(x);
138 e = gsubtract(t,y);
139 performance = perform(net,t,y)
140
141 % Recalculate Training, Validation and Test Performance
142 trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
143 valTargets = t .* tr.valMask{1};
144 testTargets = t .* tr.testMask{1};
145 trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
146 valPerformance = perform(net,valTargets,y)
147 testPerformance = perform(net,testTargets,y)
148
149 % View the Network
150 view(net)
151
152 % Plots
153 % Uncomment these lines to enable various plots.
154 %figure, plotperform(tr)
155 %figure, plottrainstate(tr)
156 %figure, ploterrhist(e)
157 %figure, plotregression(t,y)
158 %figure, plotfit(net,x,t)
159
160 % Deployment
161 % Change the (false) values to (true) to enable the following code blocks.
162 % See the help for each generation function for more information.
163 if (false)
164     % Generate MATLAB function for neural network for application
165     % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
166     % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
167     % network performs.
168     genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
169     y = myNeuralNetworkFunction(x);
170 end

```

```

171 if (false)
172 % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
173 % generation with MATLAB Coder tools.
174 genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
175 y = myNeuralNetworkFunction(x);
176 end
177 if (false)
178 % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
179 % Simulink Coder tools.
180 gensim(net);
181 end
182
183
184 %-----PREDICCIÓN DE DATOS-----%
185
186 %Val_pred=net(Entradas);
187 %Val_reales=(Salidas);
188
189 %-----VALIDACIÓN DE DATOS-----%
190
191 %Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
192
193 Ex=readtable('RNA_IPA2.xlsx','Sheet','RNA');
194
195 %Convertir la tabla a Matriz Numérica
196
197 Datos_2 = table2array(Ex);
198
199 %Datos de entrada
200
201 Entra_v=Datos_2(1:6,:);
202
203 %Temperatura de alimentación
204
205 Tem_Val=Entra_v(1,:);
206
207 %Tem_ValN=normalize(Tem_Val(1,:), 'range');
208
209 %Fracción de DIPE
210
211 DIPE_Val=Entra_v(2,:);
212
213 DIPE_ValN=normalize(DIPE_Val(1,:),'range');

```

```

214
215 %Fracción de IPA
216
217 IPA_Val=Entra_v(3,:);
218
219 IPA_ValN=normalize(IPA_Val(1,:),'range');
220
221 %Columna 1
222
223 C1_Val=Entra_v(4,:);
224
225 C1_ValN=normalize(C1_Val(1,:),'range');
226
227 %Columna 2
228
229 C2_Val=Entra_v(5,:);
230
231 C2_ValN=normalize(C2_Val(1,:),'range');
232
233 %Columna 3
234
235 C3_Val=Entra_v(6,:);
236
237 C3_ValN=normalize(C3_Val(1,:),'range');
238
239 %Entradas totales
240
241 EntraVal_total=[Tem_Val;DIPE_Val;IPA_Val;C1_Val;C2_Val;C3_Val];
242
243 %Salidas DWSIM
244
245 Sal_v=Datos_2(7:10,:);
246
247 %-----VALIDACIÓN RED NEURONAL-----%
248
249 %Prop_Pred entradas
250
251 Prop_PredV = net(EntraVal_total);

```

**Realizador por:** Castillo, Adriana, 2023.























393	0.793	0.791	0.28 4	0.984	1.000	1.61 4	0.404	0.393	2.97 3	0.501	0.477	5.03 8
394	0.859	0.874	1.66 1	0.989	0.997	0.81 1	0.149	0.133	12.1 59	0.504	0.479	5.13 0
395	0.367	0.366	0.20 9	1.010	1.000	1.05 8	0.180	0.172	4.84 1	0.563	0.523	7.72 8
396	0.392	0.392	0.12 1	0.999	0.998	0.02 4	0.198	0.186	6.11 6	0.482	0.466	3.34 1
397	0.276	0.281	1.99 2	1.009	1.000	0.89 1	0.088	0.095	7.53 5	0.433	0.466	7.10 4
398	0.912	0.909	0.29 4	0.995	1.000	0.46 7	0.098	0.088	11.8 87	0.477	0.476	0.08 4
399	0.463	0.464	0.05 6	1.010	1.000	0.99 3	0.281	0.272	3.47 1	0.485	0.488	0.74 9
400	0.432	0.434	0.52 4	0.996	1.000	0.34 8	0.219	0.216	1.03 0	0.619	0.645	3.94 7
<b>Error promedio (%)</b>			6.22 0	<b>Error promedio (%)</b>			2.53 9	<b>Error promedio (%)</b>			12.2 85	<b>Error promedio (%)</b> 4.80 2

Realizador por: Castillo, Adriana, 2023.







**esPOCH**

**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:** 18 / 02/ 2024

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> Adriana Lizbeth Castillo Cevallos
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> Ciencias
<b>Carrera:</b> Ingeniería Química
<b>Título a optar:</b> Ingeniera Química
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo

2083-DBRA-UPT-2023

