



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

**MODELO DE PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE
ACETONA DURANTE EL PROCESO DE DESTILACIÓN
EXTRACTIVA DE UNA MEZCLA ACETONA-METANOL**

Trabajo de Titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTOR: MAYRA LORENA VALDIVIEZO VALDIVIESO

DIRECTOR: ING. MAYRA PAOLA ZAMBRANO VINUEZA Mgs.

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Mayra Lorena Valdiviezo Valdivieso

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

Yo, Mayra Lorena Valdiviezo Valdivieso, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

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

Riobamba, 08 de septiembre del 2021

Mayra Lorena Valdiviezo Valdivieso

0604788703

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

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El Trabajo de Titulación; Tipo: Propuesta Tecnológica, **MODELO DE PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE ACETONA DURANTE EL PROCESO DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA DE UNA MEZCLA ACETONA-METANOL**, realizado por el señor: **MAYRA LORENA VALDIVIEZO VALDIVIESO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Luis Santiago Carrera Almendáriz Mg. PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-08
Ing. Mayra Paola Zambrano Vinueza Mgs DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	_____	2021-09-08
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada MsC. MIEMBRO DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-08

DEDICATORIA

Con mucha alegría dedico este trabajo a mis padres Rodrigo y María quienes han sido el pilar fundamental en mi vida y son los que me han dado el empujoncito para llegar a cumplir esta meta tan importante mi vida.

A mis hijos Jhostin y Sofía por ser mi principal fuente de inspiración y a mi esposo Alfredo por el apoyo brindado todos estos años.

A mis hermanos Eduardo, Erika y Tatiana por confiar en mí.

Mayra

AGRADECIMIENTO

En primer lugar, agradezco a Dios por la salud y la vida por permitirme terminar esta etapa profesional, a mis padres Rodrigo y María que me ha apoyado en todos los aspectos y por siempre aconsejarme y así poder llegar a ser una profesional, a mi esposo Alfredo y mis hijos Jhostin y Sofía porque ellos estuvieron junto a mí en este largo camino apoyándome, a mis hermanos Eduardo, Erika y Tatiana por brindarme su ayuda día a día en el transcurso de la carrera. A mis amigos Wendy, Yólida, Brayan, Ximena y Cristian por acompañarme, aconsejarme y ayudarme a cumplir todos mis objetivos.

Agradezco también a mi directora del trabajo de titulación la Ing. Mayra Zambrano, así como al Ing. Darío Guamán por guiarme y ayudarme a concluir este trabajo de titulación.

Finalmente agradezco a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo por la oportunidad de prepararme en tan prestigiosa institución.

Mayra.

TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS	viii
ÍNDICE DE FIGURAS	ix
ÍNDICE DE GRÁFICOS	x
ÍNDICE DE ANEXOS	xi
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	xii
RESUMEN	xiii
SUMMARY	xiv
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1.1.	Antecedentes	15
1.2.	Planteamiento del problema	16
1.3.	Objetivos	17
1.3.1.	Objetivo General	17
1.3.2.	Objetivos Específicos	17
1.4.	Justificación del proyecto	17
1.5.	Alcance	18

CAPÍTULO II

2.	MARCO TEÓRICO	19
2.1.	Estado del Arte	19
2.2.	Bases Teóricas	20
2.2.1.	Compuestos químicos	20
2.2.2.	Compuestos azeotrópicos	21
2.2.3.	Destilación Extractiva	22
2.2.4.	Descripción del proceso	23
2.2.5.	Software DWSIM	24
2.2.6.	Red neuronal artificial (RNA)	25

CAPÍTULO III

3.	METODOLOGÍA	28
----	-------------------	----

3.1.	Etapas de metodología	28
3.2.	Establecimiento de parámetros	29
3.2.1.	Operacionalización de variables	29
3.3.	Simulación en DWSIM	30
3.4.	Validación de la simulación	36
3.5.	Base de datos.....	37
3.5.1.	Parámetros considerados en la base de datos	40
3.6.	Diseño de la red neuronal artificial	40
3.7.	Validación de la Red neuronal artificial	44
3.8.	Análisis estadístico.....	45

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	46
4.1.	Presupuesto.....	46
4.2.	Cronograma.....	47
4.3.	Recursos materiales.....	48
4.4.	Análisis de sensibilidad	48
4.5.	Resultados de la simulación en DWSIM	52
4.6.	Validación de la simulación	54
4.7.	Balance de materia y energía.....	55
4.7.1.	Balance de materia de la columna de extracción.....	55
4.7.2.	Balance de materia de la columna de recuperación	57
4.7.3.	Balance de energía del intercambiador de energía	58
4.8.	Resultados de la red neuronal artificial propuesta	59
4.8.1.	Análisis de los resultados obtenidos en Matlab	61
4.8.2.	Análisis gráfico de los resultados obtenidos de la RNA	64
4.9.	Análisis estadístico.....	75

CONCLUSIONES

RECOMENDACIONES

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Aplicaciones de la destilación extractiva.....	22
Tabla 2-1. Características de DWSIM.....	24
Tabla 1-3: Condiciones de los diferentes flujos del proceso.....	30
Tabla 2-3: Diseño de las columnas de destilación.....	30
Tabla 3-3: Variables operativas utilizadas en DWSIM	31
Tabla 4-3: Base de datos	37
Tabla 1-4: Matriz de presupuesto.....	46
Tabla 2-4. Cronograma	47
Tabla 3-4: Resultados de la columna de destilación extractiva	53
Tabla 4-4: Resultados de la columna de destilación de recuperación	54
Tabla 5-4: Validación de la columna azeotrópica	54
Tabla 6-4: Validación de la columna de recuperación	55
Tabla 7-4: Resultados de las variables fracción molar de acetona y metanol (E)	70
Tabla 8-4: Resultados de las variables fracción molar de acetona y agua (E)	71
Tabla 9-4: Resultados de las variables flujo molar de acetona y metanol (E).....	73
Tabla 10-4: Resumen estadístico de fracción molar de acetona y metanol.....	76
Tabla 11-4: Resumen estadístico de las variables flujo molar de acetona y metanol.....	77
Tabla 12-4: ANOVA.....	77
Tabla 13-4: Medias con intervalos de confianza 95 %	78
Tabla 14-4: Prueba de Kruskal-Wallis	79

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Proceso de destilación extractiva	23
Figura 1-3: Selección de compuestos químicos en DWSIM	32
Figura 2-3: Selección del paquete termodinámico	32
Figura 3-3: Neural Fitting app	40
Figura 4-3: Selección de inputs y targets	41
Figura 5-3: Porcentajes destinado a las etapas de la RNA	42
Figura 6-3: Selección de algoritmo matemático.....	43
Figura 7-3: Selección de neuronas en la capa oculta	44
Figura 1-4: Simulación del proceso de la concentración de la acetona.....	53

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de titulación.....	28
Gráfico 2-3: Diagrama del proceso de separación de la acetona	29
Gráfico 3-3: Diseño de la columna de destilación reactiva.....	33
Gráfico 4-3: Propiedades termodinámicas de la columna reactiva	33
Gráfico 5-3: Especificaciones de la columna reactiva	34
Gráfico 6-3: Diseño de la columna de destilación de recuperación	34
Gráfico 7-3: Propiedades termodinámicas de la columna reactiva	35
Gráfico 8-3: Especificaciones de la columna de recuperación	35
Gráfico 9-3: Simulación del proceso de concentración de la acetona.....	36
Gráfico 10-3: Tablas de propiedades de DWSIM	36
Gráfico 1-4. Flujo molar de agua vs Fracción molar de acetona	48
Gráfico 2-4. Flujo molar de agua vs Fracción molar de metanol.....	49
Gráfico 3-4. Número de platos de la columna de extracción vs Fracción molar de acetona	49
Gráfico 4-4. Número de platos de alimentación vs Fracción molar de acetona, C-1	50
Gráfico 5-4. Valores de Reflux Ratio y Reboil Ratio vs Fracción molar de acetona, C-1	50
Gráfica 6-4. Número de platos de la columna de recuperación vs Fracción molar de acetona ..	51
Gráfico 7-4. Número de plato de alimentación vs Fracción molar de metanol, C-2	51
Gráfico 8-4. Valor de Reflux Ratio y Reboil Ratio vs Fracción molar de metanol, C-2.....	52
Gráfico 22-4: Resultados de flujo molar de “Metanol” DWSIM vs RNA en C-1	69
Gráfico 24-4: Resultados de fracción molar de metanol DWSIM vs RNA	71
Gráfico 25-4: Resultados de fracción molar de acetona DWSIM vs RNA en C-2	72
Gráfico 26-4: Resultados de fracción molar de agua DWSIM vs RNA	73
Gráfico 27-4: Resultados de flujo molar de “Acetona” DWSIM vs RNA en C-1	74
Gráfico 28-4: Resultados de flujo molar de “Metanol” DWSIM vs RNA en C-2	75

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. ERRORES PORCENTUALES DE FRACCIÓN MOLAR DE ACETONA Y METANOL

ANEXO B. ERRORES PORCENTUALES DE FRACCIÓN DE ACETONA Y AGUA

ANEXO C. ERRORES PORCENTUALES DEL FLUJO “ACETONA” Y “METANOL”

ANEXO D. SCRIPT DEL DISEÑO DE LA FASE DE ENTRENAMIENTO, VALIDACIÓN Y PRUEBA

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

C₃H₆O	Acetona
C-1	Columna de extracción
C-2	Columna de recuperación
UNIQUAC	Universal Quasi-Chemical Activity Coefficients
NRTL	Non Random Two Liquids
Kmol/h	Unidad de flujo molar, kilomol por hora
RNA	Red neuronal artificial
H₂O	Agua
CH₃OH	Metanol
R	Regresión lineal
MSE	Error cuadrático medio

RESUMEN

La finalidad del presente trabajo de investigación fue simular el proceso de destilación extractiva para separar la mezcla azeotrópica acetona-metanol mediante el software de código abierto DWSIM y validarlo con un referente bibliográfico, con el propósito de ser la base para la creación de una Red Neuronal Artificial (RNA) que sea capaz de predecir fracciones y flujos molares de los compuestos químicos del proceso. En cuanto al diseño de la RNA se realizó una base de datos a partir de 100 simulaciones del proceso donde las variables manipulables fueron presión, relación de solvente/alimentación y fracción molar de acetona en la alimentación; las variables de salida o estudiadas son la fracción molar de acetona y flujo molar del destilado de la columna de extracción, las fracciones molares de acetona, metanol, agua y el flujo molar de destilado de la columna de recuperación. La RNA cuenta con una estructura de 3-55-6 siendo entradas, neuronas y salidas respectivamente, se utilizó el algoritmo matemático “Regularización Bayesiana”, además se llevó a cabo una validación externa con 17 datos para asegurar la confiabilidad de la red ante nuevos datos. Se obtuvo un error cuadrático medio de 2.4804×10^{-7} y una regresión lineal en la prueba de $R = 0.9994$. Se realizó un análisis estadístico comparativo resultando una confiabilidad del 95 %, sin la presencia de valores atípicos y con valores máximos de 3.22 % en errores porcentuales promedio en los datos predichos por la RNA. La cantidad de acetona extraída fue de 76.087 kmol/h mientras que el metanol conseguido fue de 24.913 kmol/h a partir de 100 kmol/h de mezcla azeotrópica. Se recomienda realizar a cabo estudios sobre nuevas variables de operación del proceso para observar la influencia que estas tienen en la obtención de acetona y metanol de la mezcla azeotrópica.

Palabras clave: <RED NEURONAL ARTIFICIAL(RNA)>, <DWSIM(SOFTWARE)>, <ERROR PORCENTUAL>, <MEZCLA AZEOTRÓPICA>, <DESTILACIÓN EXTRACTIVA>.



1628-DBRA-UTP-2021

SUMMARY

The purpose of this research work was to simulate the extractive distillation process to separate the azeotropic acetone-methanol mixture using the open code software DWSIM and validate it with a bibliographic reference, with the purpose of being the basis for the creation of an Artificial Neural Network (ANN) that is capable of predicting fractions and molar fluxes of the process chemical compounds. Regarding the design of the ANN, a database was made from 100 simulations of the process where the manipulable variables were pressure, solvent / feed ratio and molar fraction of acetone in the feed; the output or studied variables are the acetone molar fraction and the molar flow of the distillate from the extraction column, the molar fractions of acetone, methanol, water and the molar flow of distillate from the recovery column. The ANN has a structure of 3-55-6 being inputs, neurons and outputs respectively; the mathematical algorithm "Bayesian Regularization" was used; in addition, an external validation was carried out with 17 data to ensure the reliability of the network with new data. A mean square error of 2.4804×10^{-7} and a linear regression in the test of $R = 0.9994$ were obtained. A comparative statistical analysis was performed, resulting in a reliability of 95%, without the presence of atypical values and with maximum values of 3.22% in mean percentage errors in the data predicted by the ANN. The amount of acetone extracted was 76,087 kmol / h while the methanol obtained was 24,913 kmol / h from 100 kmol / h of azeotropic mixture. It is recommended to carry out studies on new operating variables of the process to observe the influence they have on obtaining acetone and methanol of the azeotropic mixture.

Key words: <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK (ANN)>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <PERCENTAGE ERROR>, <AZEOTROPIC MIXTURE>, <DISTILLATION EXTRACTIVE>.

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

La acetona es una sustancia química que se encuentra naturalmente en el medio ambiente y también es producida por las industrias. Los niveles bajos de acetona normalmente están presentes en el cuerpo debido a la descomposición de la grasa; el cuerpo puede usarlo en procesos normales que producen azúcar y grasa. En 1991, 12 empresas en 14 ubicaciones producían acetona en los Estados Unidos los cuales producían en total 3 148 millones de libras al año (Hansen y & Wilbur 1994, p. 140).

La acetona es un compuesto orgánico volátil (COV) al cual se lo considera de baja toxicidad, sin embargo, el uso inadecuado puede causar algunos problemas graves en la salud de las personas. Existen diferentes aplicaciones de la acetona, como en productos químicos, disolventes y quitaesmalte de uñas. Además de los productos químicos y los disolventes, existen otras aplicaciones de la acetona como la producción de cosméticos y productos para el hogar, así como el cuidado personal (Mohamed; et al 2017, pp. 1-8).

Hasta la Primera Guerra Mundial, la acetona se producía por el proceso de la destilación en seco de acetato de calcio, lo cual se lo lograba neutralizando el ácido piroleñoso (destilado de madera) con la cal y evaporando hasta secar casi totalmente. Sin embargo, al comienzo de la Primera Guerra Mundial, se investigaron nuevos métodos de producción. El acetato de calcio se puede fabricar a partir de ácido acético el cual se ha producido por fermentación de alcohol o de acetileno. Sin embargo, este método no estaba en la capacidad de competir con el proceso de fermentación desarrollado por Weizmann y Hamlyn para la transformación de carbohidratos como almidón de maíz o melaza en acetona, alcohol butílico y etílico mediante el uso de un bacilo especial (Mohamed; et al 2017, pp. 1-8).

Hoy en día la acetona se produce en su mayoría por el proceso Cumeno, el cual emplea benceno y propileno como reactivos, donde el fenol es un coproducto de esta síntesis. La síntesis de acetona a partir del etanol es bastante interesante debido a que no solo el alcohol es una materia prima renovable, sino que además no genera fenol como un subproducto. En la actualidad se ha sugerido que la acetona es el intermedio de las síntesis de propileno e isobuteno a partir del etanol. Seguramente, la comprensión de la síntesis de acetona apoyará futuros desarrollos relacionados con estos temas (Clarissa; et al 2017, p. 1).

1.2. Planteamiento del problema

Actualmente, la acetona y el metanol juegan un papel importante tanto a nivel industrial como en los laboratorios de química orgánica debido a amplia aplicabilidad. La acetona, por ejemplo, es un solvente que frecuentemente se emplea para disolver plásticos, como agente de secado, y además es el principal componente del quitaesmalte de uñas. El metanol también es un solvente de uso común, y sus mezclas con acetona son usuales por lo cual resulta necesario separar estos compuestos volátiles para futuras aplicaciones (Gil et al., 2009, p.1)

La destilación es uno de los procesos de separación de mayor importancia en Ingeniería Química que se basa en la diferencia de volatilidad de los componentes que integran una mezcla. No obstante, cuando se trata de recuperación de disolventes volátiles con un punto de ebullición cercano o sistemas azeotrópicos resulta imposible mediante técnicas de destilación convencionales. Por lo cual, se recurre a técnicas más avanzadas como la destilación por oscilación de presión, la destilación reactiva y la destilación extractiva para realizar la separación de dichas mezclas. (Gil et al., 2009, p.1).

Cuando se realiza una destilación extractiva se requiere un tercer componente conocido como agente de arrastre, el cual modifica la volatilidad relativa de los componentes de la mezcla. Sin embargo, la selección del tipo de agente de arrastre es un paso importante puesto que la efectividad de la separación depende de las interacciones entre este componente y la mezcla azeotrópica (Gil et al., 2009, p.1).

El sistema de acetona-metanol presenta un azeótropo de punto de ebullición mínima, siendo la destilación extractiva un método efectivo para su separación. Consecuentemente, muchas investigaciones se han dedicado a estudiar el equilibrio vapor-líquido de este sistema, sugiriendo al agua como un elemento de arrastre factible (Gil et al., 2009, p.2).

El presente proyecto de titulación propone inicialmente llevar a cabo la simulación del sistema de destilación extractiva de una mezcla de acetona-metanol utilizando agua como agente de retención, basado en una configuración convencional de dos columnas de destilación mediante la multiplataforma para procesos químicos DWSIM, cuyos resultados se compararán con los datos provenientes de la modelación del sistema en mención proveniente de un referente bibliográfico. Posteriormente se generará una base de datos para el diseño de una Red Neuronal Artificial (RNA) empleando MATLAB, misma que será capaz de predecir la fracción molar de acetona, metanol y agua obtenidos en las respectivas columnas de destilación a partir de las condiciones de presión, temperatura y fracción molar de la acetona en la alimentación.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Simular un sistema de destilación extractiva para la predicción de la concentración de acetona presente en una mezcla azeotrópica acetona-metanol mediante una red neuronal artificial

1.3.2. Objetivos Específicos

- Diseñar una red neuronal artificial que permita predecir las fracciones molares de acetona, metanol y agua en el sistema de destilación propuesto a partir de las condiciones de funcionamiento: presión, temperatura y fracción molar de la acetona en la alimentación.
- Cuantificar la cantidad de acetona extraída y la cantidad de metanol recuperado por el sistema de destilación propuesto.
- Validar el funcionamiento de la red neuronal artificial mediante un análisis estadístico comparativo entre los valores predichos y los reales.

1.4. Justificación del proyecto

Un ingeniero químico tiene la capacidad de ejercer su función en una gran variedad de campos, }entre los que destaca el uso de herramientas tecnológicas como softwares especializados que sirven para modelar, predecir, estudiar, controlar y simular procesos químicos o industriales, optimizándolos y disminuyendo principalmente costos de operación y tiempos de ejecución.

Adicionalmente, en los últimos años el interés por el desarrollo y estudio de redes neuronales artificiales ha incrementado considerablemente en el ámbito de la ciencia y tecnología. Una red neuronal artificial (RNA) imita la funcionalidad de las neuronas biológicas y simplifica el método experimental ya que puede aprender fácilmente y es capaz de resolver problemas complejos de ingeniería a través de un buen entrenamiento. Por este motivo, diseñar una RNA para predecir variables en procesos de destilación contribuye al aprendizaje y progreso investigativo tanto de estudiantes como de profesionales de Ingeniería Química.

Bajo este argumento, se simulará un sistema convencional de destilación extractiva para la separación de la mezcla azeotrópica acetona-metanol con la adición de agua como agente de retención, a través del software libre DWSIM.

Consecuentemente, los resultados permitirán el diseño de una red neuronal artificial utilizando el Toolbox de MATLAB, como una herramienta didáctica, confiable y rápida capaz de predecir la fracción molar de la acetona, metanol y agua en el sistema de estudio a partir de tres condiciones de entrada: presión, temperatura y fracción molar de la acetona en la alimentación. De esta manera

se puede analizar, controlar y/o estudiar el comportamiento del proceso mediante la variación de sus condiciones de forma directa y simplificada.

Debido a que el software empleado para la simulación (DWSIM) es de código abierto, se pretende que la información sea de acceso para todas las personas que deseen utilizar este trabajo como base para el desarrollo de futuros proyectos de investigación.

1.5. Alcance

En este trabajo de titulación se modela la predicción de la concentración de la acetona durante el proceso de destilación extractiva de una mezcla de acetona-metanol, la cual consiste en simular el proceso separación de la acetona del metanol, por lo cual se requiere de una columna de destilación extractiva utilizando al agua como solvente, mientras que la segunda columna de destilación está destinada a la recuperación del solvente para ser recirculado a la primera torre.

La simulación se la lleva a cabo en el software de procesos químicos DWSIM, con lo cual se valida el proceso de concentración de la acetona de fuente bibliográfica, posteriormente se desarrolla una base de datos obtenida de varias simulaciones, la cual se utiliza en el diseño de la red neuronal artificial (RNA) en MATLAB con la finalidad de predecir las fracciones molares de acetona, metanol y agua, así como los flujos de acetona y de metanol a la salida de cada columna de separación a partir de la variación de la presión, relación S/A y fracción molar de acetona.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del Arte

Se desarrolla un sistema de control inteligente basado en la red neuronal artificial para la extracción del etanol anhidro a partir de etilenglicol como disolvente. Las entradas de la RNA son fracción molar de etanol, temperatura y caudal de la alimentación azeotrópica y como salidas las temperaturas de las bandejas de la columna C-1 (columna de extracción) y C-2 (columna de recuperación) y la relación de solvente/alimentación, a partir de 1000 datos obtenidos de la simulación realizada en Aspen Plus Dynamics, utilizando el logaritmo de entrenamiento Levenberg-Marquardt para la presente RNA con 15 neuronas en la capa oculta con un MSE de 2.18×10^{-6} en la etapa de entrenamiento de la red (Neves; et al 2020, p.20).

Para la mezcla azeotrópica de acetona-metanol se utiliza un agente de arrastre el cual puede ser el compuesto químico trifluorometanosulfonato de 1-etil-3-metilimidazolio mediante destilación extractiva, los cálculos se llevaron a cabo en un programa patentado construido en Matlab, además se utilizó la ecuación NRTL, se realizaron varios ciclos de optimización para obtener la mayor pureza posible de acetona y metanol. La regeneración del líquido iónico requiere más energía en comparación a un agente de arrastre convencional además se la realiza mediante evaporación a baja presión de 20 kPa. La pureza obtenida de acetona fue 99.74% en moles mientras que la pureza de metanol fue 99.07% (Graczová y Vavrušová, 2018,p.1).

Se determina el efecto que tiene el cloruro de litio como un agente extractivo para poder separar la mezcla azeotrópica acetona-metanol. Se prepara dos mezclas con diferentes concentraciones másicas de acetona-metanol, en cada una de las mezclas se dosificó cloruro de litio a diferentes concentraciones para poder identificar con cual proporción se tiene mayor rendimiento. Los resultados determinaron que la concentración de 2.3 moles de cloruro de litio por cada kilogramo de mezcla tiene un mayor impacto en la mezcla azeotrópica, por lo cual se determina es posible separar mezcla de acetona-metanol mediante la aplicación de cloruro de litio (Francisco; et al, 2003,p.3).

Se ha desarrollado un estudio del desplazamiento de la composición azeotrópica del sistema acetona/metanol a partir de un agente de arrastre como el agua a partir de diferentes proporciones molares de disolvente S/F como 1, 2.5, 3 combinando una reducción de presión a 75 kPa. Se utilizaron paquetes termodinámicos Wilson, NRTL y UNIQUAC. El paquete que más se ajusto es el caso de UNIQUAC debido a que se obtuvo un error medio temperatura inferior. La proporción de disolvente que eliminó el punto azeotrópico fue (S/F) 1, lo cual implica un ahorro de costes debido a que se utiliza una menor cantidad de agua (Diana; et al, 2010, p.1).

Los procesos químicos de separación de una columna extractiva de una mezcla de acetona-metanol, acetato de metilo-metanol y metanol-cloroformo se lograron llevar a cabo en el software HYSYS, con la finalidad de investigar los efectos de las etapas de la entrada de alimentación de solvente. En cada una de las simulaciones se llegó a utilizar al agua como disolvente. Donde se estableció una simulación rigurosa del sistema de acetona-metanol donde se incluye una columna de separación secundaria para recircular el solvente a la primera columna. Mediante esta simulación se realiza una evaluación económica del proceso donde se encontró que las mezclas de alimentos que presentaban un 25, 50 y 75 % en moles de metanol, sus relaciones de reflujo óptimas son 3,5, 3,5 y 4,2, respectivamente, con lo cual el presente diseño de la columna podría separar alimentaciones binarias con una composición variable de 25 al 75% de metanol. Además, se determinó que el número de platos óptimos para una alimentación binaria equimolar son 73 (Paul; et al 2004, p. 1).

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Compuestos químicos

2.2.1.1. Acetona

La acetona es un compuesto químico líquido e incoloro el cual es un solvente muy importante para varios tipos de fibras y plásticos. La acetona es uno de los materiales más relevantes ya que está presente en múltiples usos y propósitos. El principal uso de la acetona se encuentra en la producción de metacrilato de metilo y bisfenol A. La acetona también puede ser usada como un solvente en la industria farmacéutica y en la producción de fibras sintéticas, así como en la preparación de metal antes de los acabados finales, en la aplicación de investigación biológica, y además en la limpieza de diversos materiales y superficies, lo cual incluye la limpieza de residuos de vidrio, herramientas de laboratorio, fibras y de quitaesmalte de uñas. Cabe mencionar que la acetona es tóxica e inflamable por su naturaleza química inflamable, por lo cual se recomienda mantenerse alejado de cualquier fuente de fuego o ignición. Por lo cual este debe ser almacenado en un ambiente seguro, y las mujeres embarazadas deben evitar trabajar con este compuesto químico. Las personas que trabajen con acetona en forma de gas deben tener cuidado debido a que la acetona puede reseca la piel y además causar otros problemas de salud como sensibilidad ocular (Neamah 2017, p. 5).

La producción más alta de acetona se produce mediante uno de los siguientes procesos: la peroxidación de cumeno o la hidrogenación de isopropanol. En el caso de la peroxidación, el cumeno se oxida a hidroperóxido, que se separa para obtener acetona y fenol. Mientras que, en el proceso de deshidrogenación, el isopropanol se deshidrogena catalíticamente con la finalidad de producir acetona e hidrógeno. Además, se puede recuperar cantidades relativamente pequeñas de

acetona como subproducto de la producción de hidroquinona y oxidación del óxido de propileno (Hansen y & Wilbur 1994, p. 190).

2.2.1.2. Metanol

El metanol o también conocido como alcohol metílico, es un compuesto orgánico, con un peso molecular igual a 32.042 g/mol. Es un compuesto químico ligeramente soluble en grasas y aceites, representa una de las materias primas químicas más importantes en la industria. El principal uso del metanol es en la industria química, bien sea como materia prima, disolvente o codisolvente. Cerca del 65% del metanol producido en todo el mundo es consumido para la producción de ácido acético, acetatos de metilo y vinilo, metacrilato de metilo, metilaminas, metil ter butil éter (MTBE), aditivos para combustibles y otras sustancias químicas (Francesco; et al 2018, pp. 2-4).

Debido a la creciente producción industrial de metanol, se ha comenzado a utilizarse en varios sectores industriales. En 1973 la Organización de Países Exportadores de Petróleo (OPEP) en los EE. UU y los Países Bajos aumentó el interés en el metanol con la finalidad de utilizarlo como un nuevo combustible alternativo para automóviles. Sin embargo, la Ley de Aire Limpio de los Estados Unidos se aprobó en 1990, la cual sancionó las reducciones de las emisiones de ozono y monóxido de carbono, las cuales son consideradas como productos de combustión del metanol. Por lo cual se llegó a prohibir el uso de metanol como combustible. Sin embargo, a partir de la década de 1990, la demanda del compuesto volvió a crecer (Francesco; et al 2018, pp. 2-4).

2.2.2. Compuestos azeotrópicos

Las mezclas azeotrópicas, o azeótropos, son consideradas una clase especial de sistemas de disolventes multicomponente, los cuales tienen un valor muy importante a nivel industrial y que además son difíciles de estudiar desde el punto de vista científico. La principal característica distintiva de un azeótropo es que ebulle a una temperatura constante además sus compuestos químicos no pueden separarse mediante una destilación simple. Aquel problema se genera porque la proporción de los disolventes constituyentes en la fase de vapor es igual que en la fase líquida. Las mezclas azeotrópicas binarias las cuales están conformadas por dos componentes líquidos ocurren con mayor frecuencia; por lo general los componentes están presentes en fase líquida y son muy polares que tiene una pronunciada capacidad para formar puentes de hidrógeno. Los azeótropos ternarios (mezcla de 3 compuestos) también son comunes, por ejemplo, las mezclas de acetonitrilo (44%), metanol (52%) y agua (4%) (Ma y & Li 2012 ,pp. 1-5).

2.2.3. Destilación Extractiva

La destilación es el principal método para la separación de compuestos químicos utilizada en las grandes industrias, la cual es un proceso físico destinada a la separación de mezclas líquidas, con diferentes puntos de ebullición o volatilidad relativa de los componentes constituyentes de la mezcla. Pero para la separación de mezclas azeotrópicas el punto de ebullición es muy cercano entre los componentes (con menos de 20 C de diferencia en los puntos de ebullición) por lo cual no es factible realizarlo en una columna de destilación convencional. Cuando la mezcla azeotrópica no es sensible a los cambios de presiones, no se puede llevar a cabo la destilación por cambio de presión (PSD). Por lo tanto, se requiere de la adición de algún otro componente, a los cuales se los conoce como agentes de arrastres o separadores de masa (MSA), donde su propósito es la de alterar la volatilidad relativa de los componentes químicos de ebullición cercana. Los agentes de arrastre conocidos pueden ser disolventes líquidos, sales sólidas, una mezcla de disolvente líquido y sales sólidas. Algunos ejemplos de procesos de separación de compuestos químicos los cuales utilizan solventes son por ejemplo extracción líquido-líquido, destilación azeotrópica y destilación extractiva (ED) (Gerbaud y & Rodriguez-Donis 2019, pp. 1-7).

Tabla 1-2. Aplicaciones de la destilación extractiva

<i>Application</i>	<i>Separation</i>	<i>Solvent/entrainer</i>
Recovery of toluene from paraffins	Toluene/paraffins	Phenol
Aromatics purification	Aromatics/ nonaromatics Cyclohexane/toluene Toluene, methyl- cyclohexane	Diethylene glycol (DEG), triethylene glycol (TEG), dimethyl sulfoxide (DMSO), <i>N</i> -methyl pyrrolidone (NMP), sulfolane, <i>N</i> -formyl morpholine (NFM) IL: [bmim] ⁺ [AlCl ₄] ⁻ NMP, IL: [HMIM][TCB], [BMIM][TCB]
Cyclohexane recovery from naphtha or NGL	Cyclohexane/C7 isomers	Ethylene glycol (EG), TEG, NMP, sulfolane, MIST (mixed solvent by Philips)
Monomer separation	Ethylbenzene/styrene	Sulfolane, IL: [3-mebupy] [B(CN)(4)], [4-mebupy] [BF ₄], [EMIM] [SCN]
Light olefins and paraffins separation	Isobutane/butene-1 <i>n</i> -Butane/butene-2 Butene-1/butadiene <i>n</i> -Pentane/1-pentene <i>n</i> -Hexane/1-hexene Cyclohexane/benzene	Sulfolane, furfural, acetone, and water NMP, CHOL, NMEP or combinations NMP, IL: [HMIM][TCB] Acetone
Cycloparaffins and aromatics separation	Cyclopentane/2,2- dimethylbutane	<i>N</i> -(<i>b</i> -Mercaptoethyl)-2-pyrrolidone (NMEP), NMP, cyclohexanol (CHOL)
Cycloparaffins and paraffins separation	Acetic acid/water	Sulfolane, adiponitrile, benzophenone, dimethyl sulfoxide, pelargonic acid, cinnamic acid, neodecanoic acid, methyl salicylate, heptanoic acid and isophorone, acetophenone and nitrobenzene I Tributylamine (extractive reactive distillation)
Acetic acid dehydration	Mono-/dichloroacetic acid	Sulfolane, glymes: diethylene glycol dipentyl ether, DGDP, DGDB, TGDE
Organic acids separation	HNO ₃ /water	Magnesium nitrate, sulfuric acid
Nitric acid dehydration	<i>n</i> -Propyl alcohol/ <i>sec</i> - butyl alcohol	Sulfolane, others
Close-boiling alcohols	Isopropenyl styrene/ <i>tert</i> -butyl styrene	Sulfolane, others
Monomers separation	Propylene/propane	Acetonitrile (ACN)
C3 splitting	C4 hydrocarbons	Acetone, acetonitrile, <i>N,N</i> -dimethylformamide (DMF), NMP, NFM
C4 splitting	C5 hydrocarbons	<i>N,N</i> -Dimethylformamide (DMF)
C5 splitting	Methanol/methyl acetate	Water
Methyl acetate synthesis	Acetone/methanol	Water, ethylene glycol
Acetone–methanol separation	Ethanol, isopropanol, <i>tert</i> -butanol/water	Ethylene glycol, DMF, EG with salts, CaCl ₂ (salt distillation), IL: [EMIM][DCA]
Alcohols dehydration	Ethanol/water	Ethylene glycol (EG), EG with salts: NaCl, CaCl ₂ , SrCl ₂ , AlCl ₃ , KNO ₃ , Cu(NO ₃) ₂ , Al(NO ₃) ₃ , CH ₃ COOK, K ₂ CO ₃ I glycerol, hyperbranched polymers, ionic liquids
Bioethanol dehydration		

Fuente: Gerbaud & Rodriguez-Donis. 2019.

La destilación extractiva se la lleva a cabo mediante la implementación de una columna de destilación extractiva y una columna de recuperación de disolvente. Un componente se retira en la parte superior de la columna extractiva, mientras que el otro compuesto en conjunto con el disolvente se elimina como un producto de residuo. El residuo entra en la torre de recuperación, en la cual el disolvente se podrá recuperar y ser reciclado hacia la primera columna. (Gerbaud y & Rodriguez-Donis 2019, pp. 1-7).

2.2.4. Descripción del proceso

El diagrama de flujo del proceso de destilación extractiva se presenta en la Figura 1-2. El proceso consta de dos columnas, una para la separación extractiva y otra para la recuperación del solvente. La mezcla azeotrópica (acetona-metanol) y el solvente (agua) se alimentan a la primera columna de destilación, donde los componentes hierven separados lo cual permite que los compuestos menos volátiles (metanol-agua) se acumulen en los fondos y en la parte superior de la columna el compuesto más volátil (acetona). El producto del fondo alimenta a la segunda columna donde se recupera el disolvente y se lo recircula de nuevo a la columna de destilación extractiva (Gil et al., 2009, p.4858).

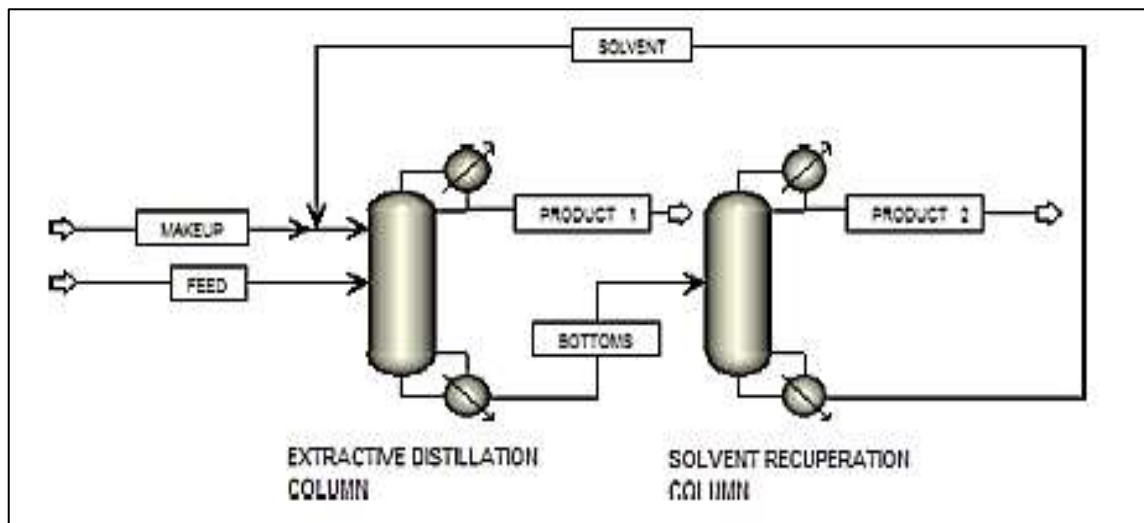


Figura 1-2. Proceso de destilación extractiva.

Fuente: Gil et al. 2009.

El agente de arrastre debe tener características especiales para lograr la separación deseada por lo cual debe presentar las siguientes características: estabilidad térmica, baja toxicidad, puntos de ebullición más altos, fácil recuperación, cambio de la volatilidad relativa entre los componentes clave y selectividad (Gil et al., 2009, p.1).

La mezcla azeotrópica de acetona (pe. 56,14° C) y metanol (pe. 64,53° C) presenta un punto de ebullición mínimo a 55,24 ° C y 1 atm, el agua es un agente de arrastre factible para la separación

de acetona-metanol porque el mapa de la curva de residuos tiene la configuración óptima para la destilación extractiva (Gil et al., 2009, p.2).

2.2.5. Software DWSIM

La propuesta tecnológica se desarrollará empleando el software libre DWSIM, mismo que posee una rica interfaz gráfica de usuario en donde se pueden simular diferentes tipos de procesos químicos. DWSIM es muy útil no solo para estudiantes de la carrera de ingeniería química sino también para profesionales afines a esta área, debido a que es un software gratuito, de fácil uso e instalación (Medeiros, 2020,p.11)

A través de DWSIM se podrá simular el sistema convencional de destilación extractiva para la separación de azeótropos de acetona-metanol.

2.2.5.1. Características.

DWSIM es capaz de simular procesos de equilibrio vapor-líquido-sólido en estado estacionario con los siguientes modelos termodinámicos y operaciones unitarias.

Tabla 2-1. Características de DWSIM

Modelos termodinámicos	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Peng – Robinson ▪ Peng – Robinson – Stryjek – Vera 2 ▪ Soave – Redlich – Kwong ▪ Lee – Kesler ▪ Lee – Kesler – Plöcker ▪ UNIFAC (-LL) ▪ UNIFAC modificado (Dortmund) ▪ UNIQUAC ▪ NRTL ▪ COSMO – SAC ▪ Chao – Seader ▪ Grayson – Streed ▪ LIQUAC ▪ Extended UNIQUAC ▪ Raoult's Law ▪ IAPWS – 97 Steam Tables ▪ IAPWS – 08 Seawater ▪ Black – Oil
-------------------------------	--

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Sour Water
Operaciones Unitarias	Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores (conversión, PFR, CSTR, equilibrio y Gibbs), columna de destilación, Absorbentes simples, refluidos y rebobinados, separador de componentes, placa de orificio, separador de sólidos, filtro de torta continuo; Operaciones de la Unidad Excel, Script y Flowsheet.
Utilidades	Envolvente de fase, hidratos de gas natural, propiedades de componentes puros, punto crítico verdadero, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de vasos, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.
Herramientas	Creador compuesto, Bulk C7+ / Curvas de destilación Caracterización de petróleo, Gerente de análisis de petróleo, Gerente de reacciones.
Análisis y optimización de procesos	Utilidad de análisis de sensibilidad, optimizador multivariante con restricciones limitadas.
Extras	Regresión de datos binarios VLE / LLE / SLE, soporte para scripts de tiempo de ejecución, complementos y objetos de monitoreo de hoja de flujo CAPE-OPEN.

Fuente: Medeiros. 2020.

2.2.6. Red neuronal artificial (RNA)

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) son técnicas de programación que tratan de imitar el comportamiento de aprendizaje y procesamiento en forma automática de una neurona humana. Hecho importante porque permite solucionar problemas con un alto nivel de complejidad (Varela y Campbells, 2011, p.18).

De esta manera, el objetivo de las redes neuronales, no es resolver problemas complejos como secuencia de pasos, sino como la evolución de un sistema computacional inspirado en el cerebro humano, además constituyen una parte muy importante en el estudio y desarrollo de la inteligencia artificial (Varela y Campbells, 2011, p.19).

Desde un enfoque biológico la unión de dos o más neuronas se conoce como sinapsis, este mecanismo de comunicación es direccional, es decir en un solo sentido. Cada neurona recibe impulsos eléctricos de otras a través de las dendritas y estas se conectan a las salidas de otras para producir la sinapsis. Durante este proceso se altera la efectividad de la señal transmitida debido a un parámetro conocido como el peso. El aprendizaje es el resultado de la modificación de estos pesos y junto con el procesamiento de la información se genera el mecanismo básico de la memoria (Villanueva, 2002, p.18).

2.2.6.1. Definición de RNA.

Una red neuronal artificial (ANN en inglés o RNA en español) consiste en unidades de procesamiento interconectadas de manera densa, llamadas neuronas. Las unidades de procesamiento reciben, procesan y transmiten señales, tal como ocurre en el sistema nervioso de los seres humanos (Varela y Campbells, 2011, p.21).

Los componentes principales del funcionamiento de una red neuronal son:

- Un conjunto de unidades de procesamiento (neuronas);
- Un estado de activación (variable de estado);
- Una función de salida para cada unidad;
- Un conjunto de conexiones (patrón de conectividad);
- Un conjunto de reglas para propagar las señales de salida a través de la RNA.
- Una regla de combinación;
- Una regla de activación;
- Una regla de modificación;
- Un ambiente en el cual opera la RNA

(Varela y Campbells, 2011, p.21-22)

2.2.6.2. Elementos de una RNA.

Las redes neuronales son modelos que intentan reproducir el comportamiento del cerebro. Una elección adecuada de sus características, más una estructura conveniente, es el procedimiento convencional utilizado para construir redes capaces de realizar una determinada tarea. Un modelo de red neuronal consta de dispositivos elementales de proceso: las neuronas. A partir de ellas se

pueden generar representaciones específicas, de modo que un estado conjunto de ellas puede representar una letra, un número o cualquier objeto (Villanueva, 2002, p.23).

Según Villanueva, 2002, p.23 se pueden encontrar tres tipos de neuronas:

- a) Aquellas que reciben estímulos externos, relacionadas con el aparato sensorial, que toman la información de entrada.
- b) Esta información se trasmite a ciertos elementos internos que se ocupan de su procesamiento. Es en las sinapsis y neuronas de este segundo nivel donde se genera cualquier tipo de representación interna de la información. Puesto que no tienen relación directa con la información de entrada ni con la de salida, estos elementos se denominan unidades ocultas.
- c) Una vez que ha finalizado el procesamiento, la información llega a las unidades de salida, cuya misión es dar la respuesta del sistema.

2.2.6.3. Clasificación de las RNA.

En la actualidad se clasifican a partir de sus características más significativas:

Según su Topología:

- Red Feedforward y Backforward: que son dos tipos de redes de propagación hacia adelante o acíclicas en las que las señales van desde la capa de entrada hacia la de salida, sin existir ciclos ni conexiones, entre neuronas de la misma capa (Varela y Campbells, 2011, p.25).

En función de su estructura pueden ser de dos clases:

- Monocapa: (Ejemplo: Perceptrón o el Adeline)
 - Multicapa: (Ejemplo: Perceptrón Multicapa)
- (Varela y Campbells, 2011, p.25)

Según su Algoritmo de Aprendizaje:

En este caso se clasifican en 4 modelos propuestos:

- Aprendizaje Supervisado: Se Necesita información preliminar de entrada previamente clasificado o cuya respuesta sea conocida, por ejemplo: Perceptrón simple, Backpropagation, Perceptrón multicapa, Memoria Asociativa Bidireccional.
- Aprendizaje Auto organizado: No necesitan un conjunto de datos previamente organizados. Por ejemplo: Memorias Asociativas, Hopfield, La máquina de Boltzman y la máquina de Cauchy, redes de aprendizaje competitivo, Kohonen y redes de resonancia adaptativa (ART).
- Redes Híbridas: Es una combinación de las 2 anteriores en donde se emplea una función de mejora para facilitar la convergencia: Por ejemplo, las redes de base radial.
- Aprendizaje Reforzado: Están ubicadas entre el supervisado y el auto organizado.

(Varela y Campbells, 2011, p.25).

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

3.1. Etapas de metodología

El presente trabajo de titulación denominado “Modelo de predicción de la concentración de acetona durante el proceso de destilación extractiva de una mezcla acetona-metanol” el cual es una propuesta tecnológica tiene la siguiente metodología propuesta:

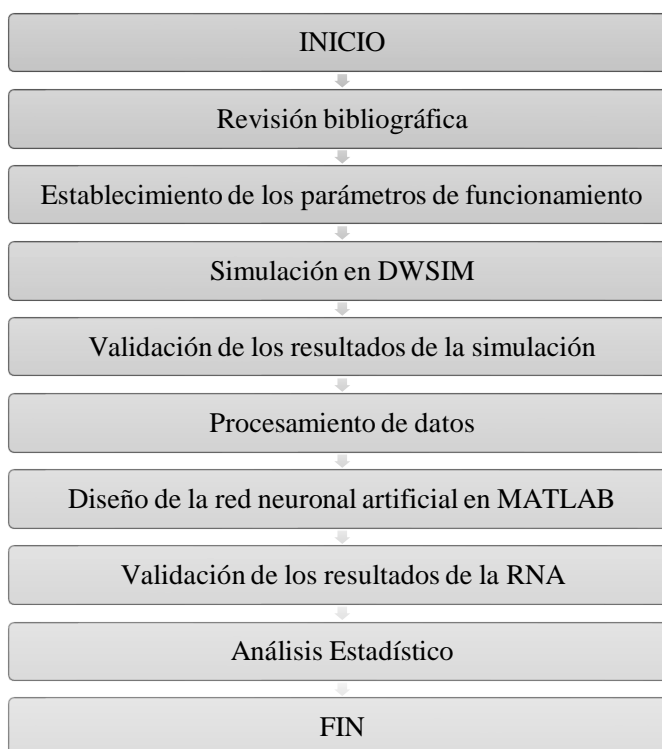


Gráfico 1-3. Metodología del trabajo de titulación

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se utiliza el programa de procesos químicos DWSIM para simular y generar una base de datos en Excel, mediante la manipulación de variables del proceso, la cual fue utilizada para el modelado de la red neuronal artificial (RNA), con la finalidad de predecir los flujos y fracciones molares de la acetona y metanol a la salida de las torres de destilación, por lo cual esta investigación posee un enfoque cuantitativo ya que se usa una base de datos en matriz numérica.

Para validar la RNA se llevó a cabo un análisis estadístico de los resultados obtenidos de la simulación y de los predichos por la red neuronal artificial, mediante el MSE (error cuadrático medio), regresión lineal entre otros más.

Se ha recopilado información de fuentes bibliográficas como de:

- Sitios webs oficiales de DWSIM y Matlab
- Artículos científicos relevantes obtenidos de “Science Direct”, “Scielo” y “Google Académico”.
- Documentos digitales de internet (pdf).

3.2. Establecimiento de parámetros

La información que se usó como base para la simulación en DWSIM fue obtenida del artículo científico titulado “Extractive Distillation of Acetone/Methanol Mixture Using Water as Entrainer”, el cual fue propuesto por Iván D. Gil, Diana C. Botía, Pablo Ortiz y Oscar F. Sánchez (2009) del Grupo de Procesos Químicos y Bioquímicos, del Departamento de Ingeniería Química y ambiental de la Universidad Nacional de Colombia.

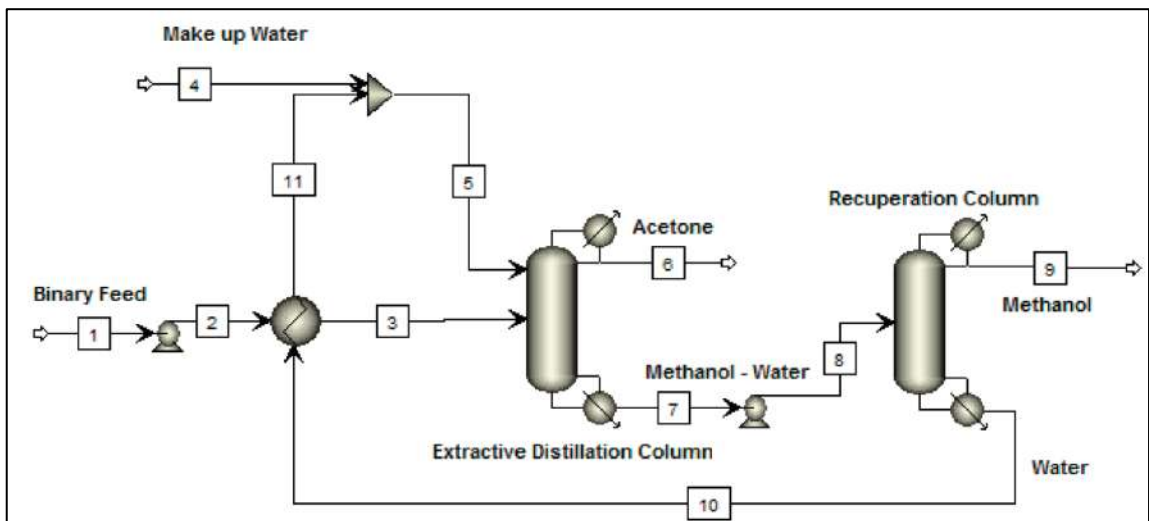


Gráfico 2-3: Diagrama del proceso de separación de la acetona

Fuente: Gil et al., 2009, p.3.

3.2.1. Operacionalización de variables

La Tabla 1-3, muestra las temperatura, flujo molar y fracción molar de cada uno de los flujos que intervienen en el proceso de separación azeotrópica de la mezcla acetona-metanol. El flujo 1 (mezcla acetona-metanol) entra a la columna de destilación extractiva junto con el Flujo 4 (agua), donde se obtendrá el destilado rico en acetona (Flujo 6) mientras que el residuo será una mezcla de metanol y agua (Flujo 7) que entrará a la columna de recuperación con la finalidad de lograr recircular el agua (Flujo 10) mientras que se tendrá un destilado de metanol (Flujo 9).

Tabla 1-3: Condiciones de los diferentes flujos del proceso

Fracción molar					
Flujo	T (°C)	Flujo molar (kmol/h)	Acetona	Metanol	Agua
1	20	100	0.778	0.223	0
2	20	100	0.778	0.223	0
3	64	100	0.778	0.223	0
4	47	1	0	0	1
5	47	200	0	0	1
6	56	76	0.995	0.003	0.003
7	94	224	0.01	0.098	0.892
8	94	224	0.01	0.098	0.892
9	62	25	0.086	0.882	0.032
10	104	199	0	0	1
11	47	199	0	0	1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

Fuente: Gil et al., 2009, p.3.

En la siguiente tabla se detalla el diseño tanto de la columna extractiva como de la columna de recuperación del proceso de separación de acetona de la mezcla azeotrópica acetona-metanol.

Tabla 2-3: Diseño de las columnas de destilación

Parámetro	Columna extractiva	Columna de recuperación
Número de platos	52	26
Plato de alimentación	48	14
Plato de alimentación del solvente	22	-
Relación de reflujo	5	3
Condensador	Total	Total
Presión de la columna	1	1
Flujo molar del destilado	76	25

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

Fuente: Gil et al., 2009, p.2.

3.3. Simulación en DWSIM

La simulación del proceso de “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol” se la llevo a cabo con el paquete termodinámico “UNIQUAC” para cada uno de los flujos. La torre destilación extractiva y de recuperación se encuentran diseñadas por el coeficiente de actividad “UNIQUAC” y k-value “DECHEMA”, las cuales son utilizadas en CHEMSEP un simulador de columna de destilación incorporado en DWSIM.

En un estudio se analizaron modelos termodinámicos como Wilson, NRTL y UNIQUAC con la finalidad de determinar el modelo más apropiado para predecir el rendimiento de la mezcla azeotrópica. Los resultados muestran que el modelo UNIQUAC tiene una mayor precisión debido a que se tiene un error absoluto medio de $0,009 \pm 0,015$ y $0,246 \pm 0,114$ °C en cuanto a composición y temperatura respectivamente, mientras que para Wilson se tiene un error absoluto medio obtenido de $0,012 \pm 0,015$ y 0.417 ± 0.190 °C mientras que para el modelo NRTL se tiene valores de 0.011 ± 0.015 y 0.494 ± 0.213 °C. Por lo cual el modelo UNIQUAC es el más indicado para predecir las propiedades físicas en la simulación de acetona-metanol (Gil et al., 2009, p.1).

Tabla 3-3: Variables operativas utilizadas en DWSIM

Variables	Flujo 1	Flujo 4	Columna extractiva	Columna de recuperación
Temperatura (°C)	20	47	-	-
Presión (atm)	1	1	1	1
Número de platos	-	-	52	26
Número de platos de alimentación	-	-	48, 22	14
Relación de reflujo	-	-	9.3	3
Relación de ebullición	-	-	3.5	-
Flujo molar (kmol/h)	100	1	-	-
Fracción molar de C3H6O	0.87	0	-	-
Fracción molar H2O	0	1	-	-
Fracción molar CH3OH	0.13	0	-	-
Flujo de destilado (kmol/h)	-	-	76.087	24.913
Flujo de residuo (kmol/h)	-	-	223.913	199

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

Fuente: Gil et al., 2009, p.2.

En la siguientes figuras y gráficas, se aprecia los compuestos seleccionados en DWSIM los cuales son acetona, metanol y agua, con su respectivo número de CAS (número de identificación) y formula química del compuesto, así como el diseño de las columnas de destilación las cuales han sido modificadas hasta obtener un error porcentual menor entre la simulación y la referencia bibliográfica, la selección de las propiedades termodinámicas se seleccionaron de acuerdo a bibliografía en función de los compuestos químicos.

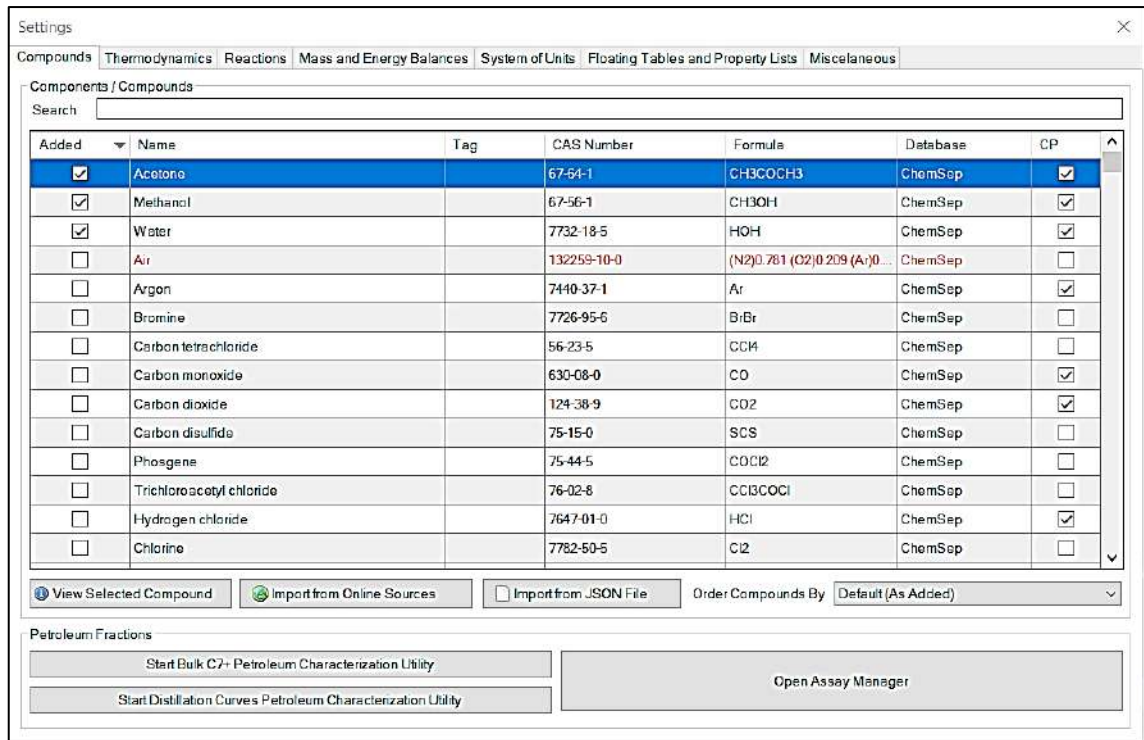


Figura 1-3: Selección de compuestos químicos en DWSIM

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

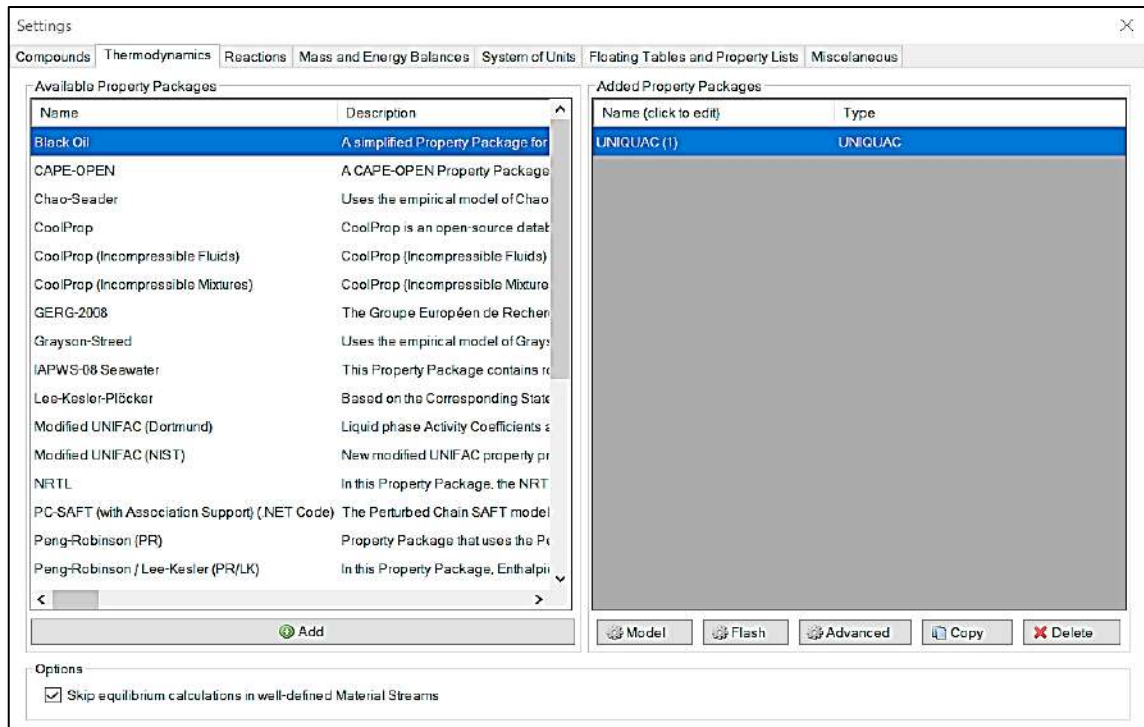


Figura 2-3: Selección del paquete termodinámico

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

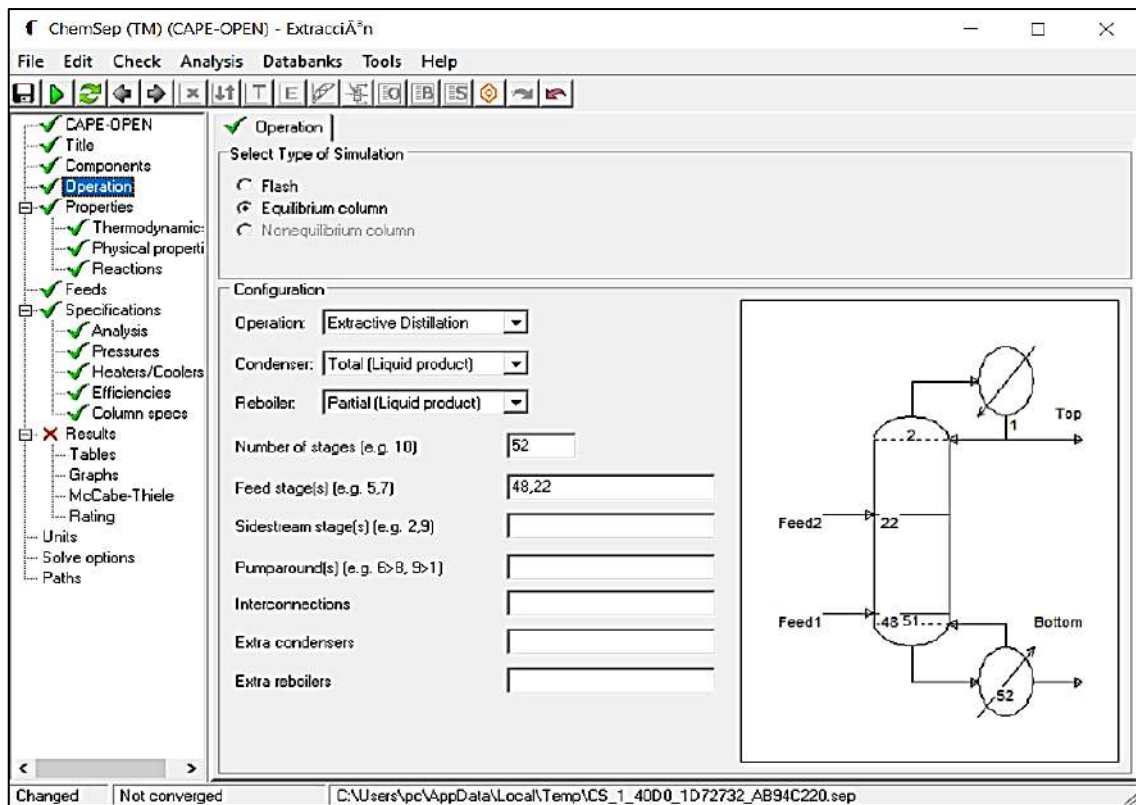


Gráfico 3-3: Diseño de la columna extractiva

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

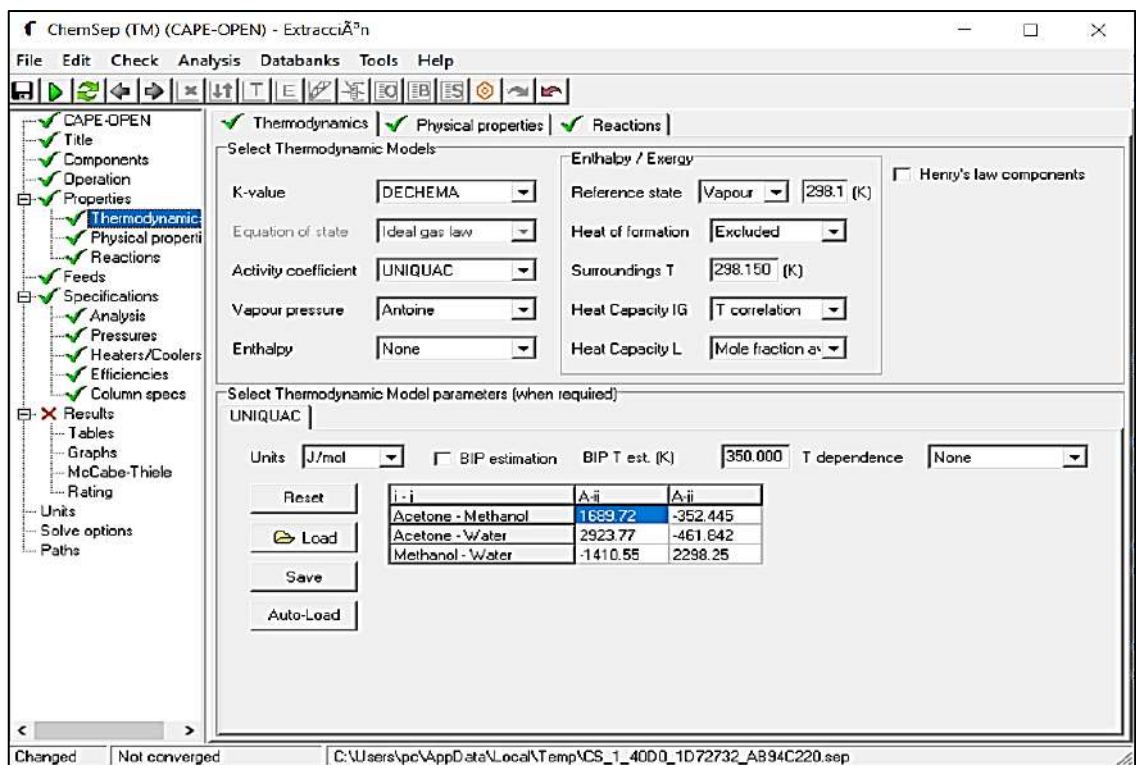


Gráfico 4-3: Propiedades termodinámicas de la columna extractiva

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

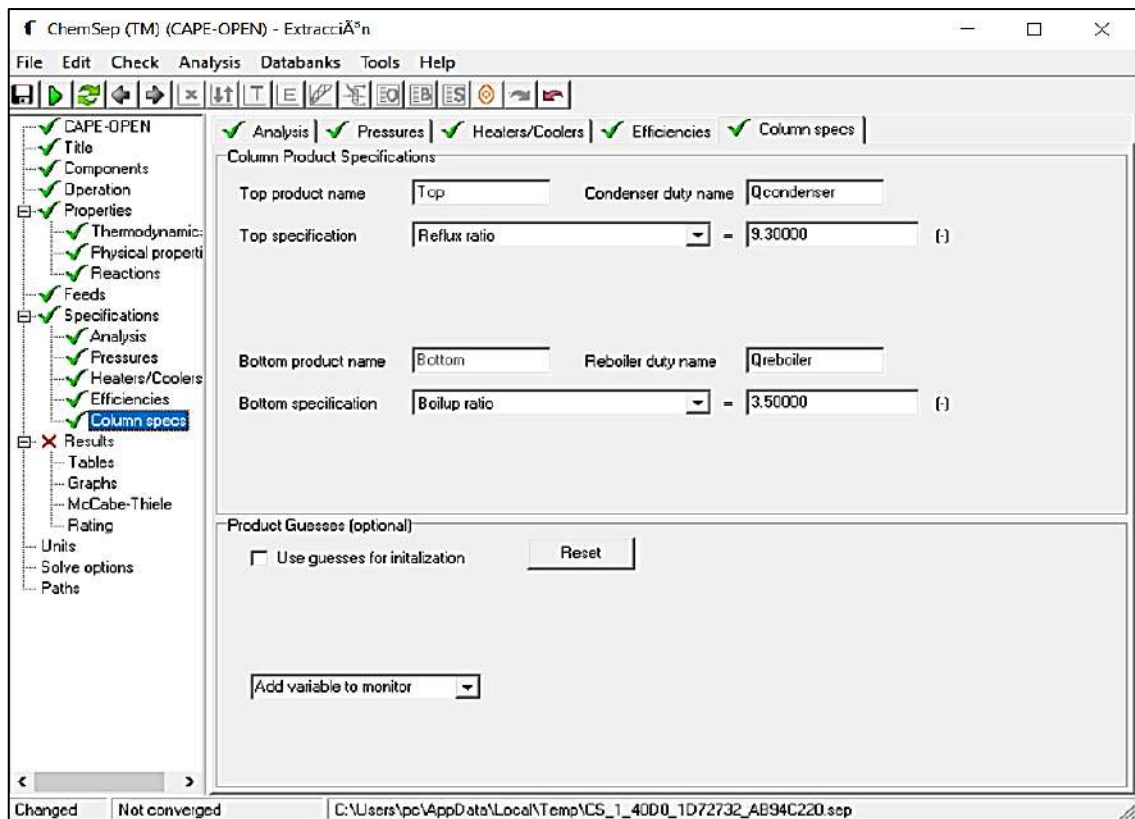


Gráfico 5-3: Especificaciones de la columna extractiva

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

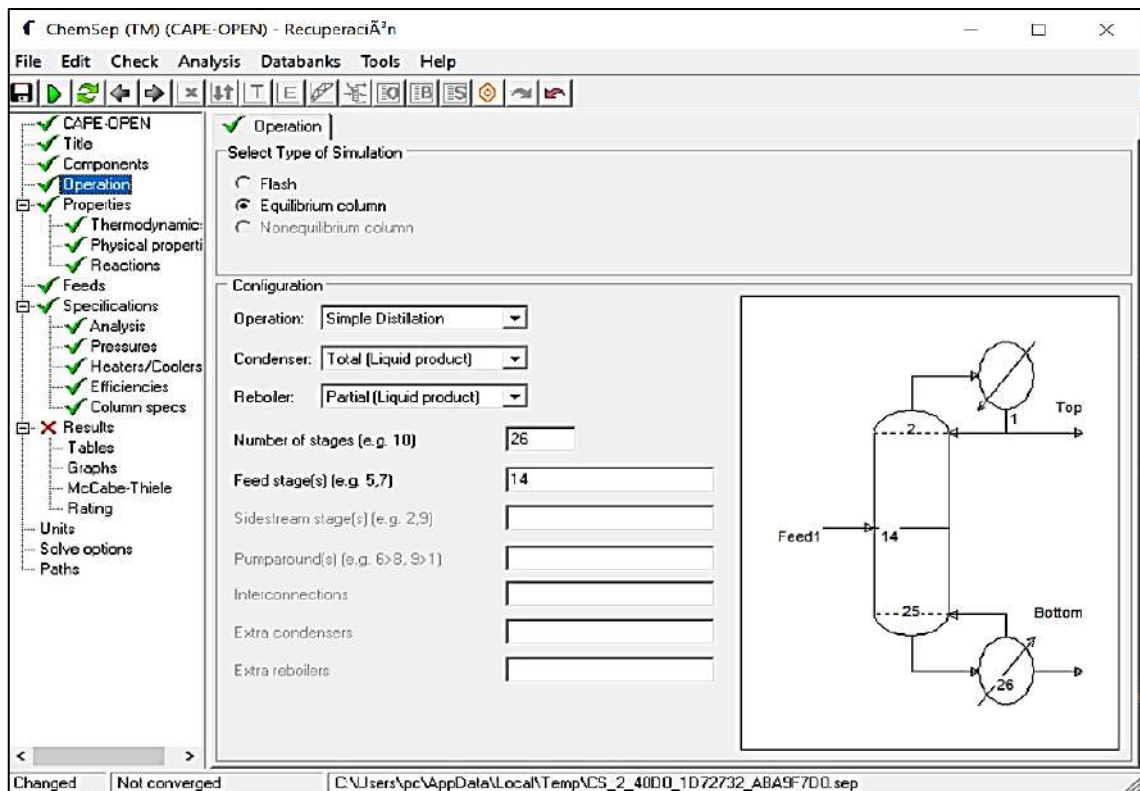


Gráfico 6-3: Diseño de la columna de destilación de recuperación

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

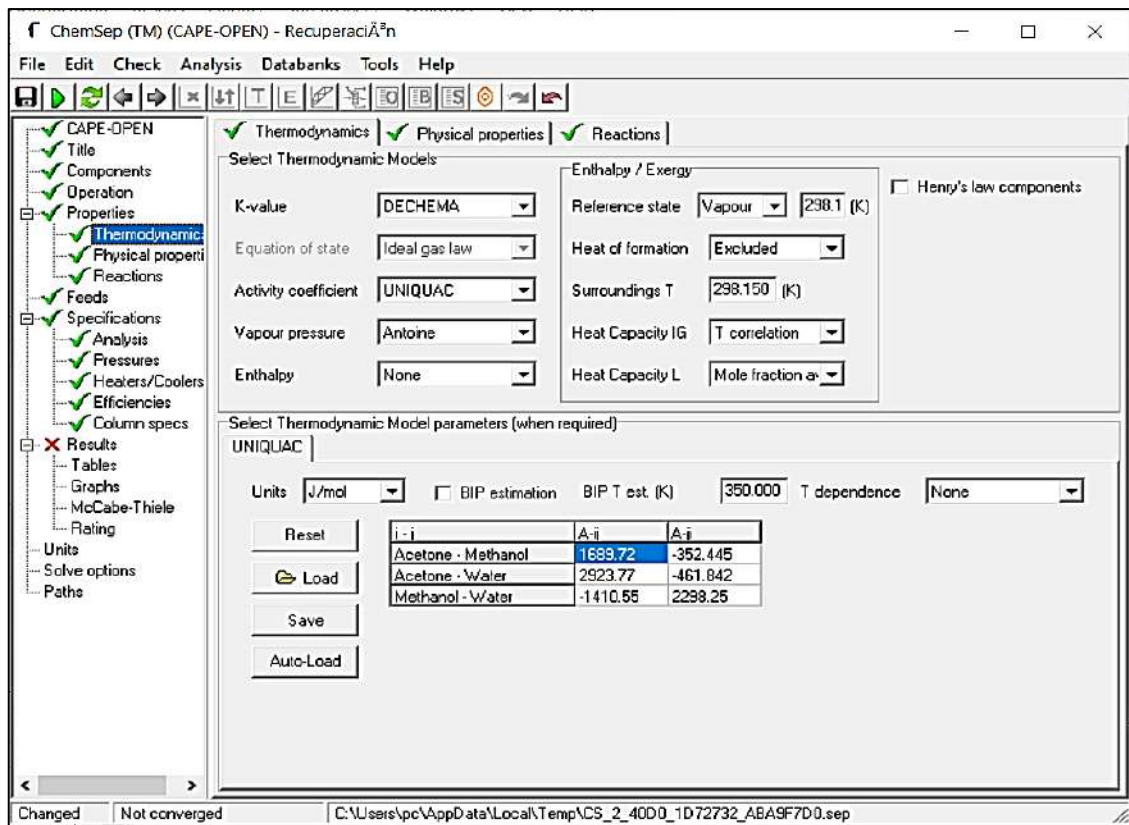


Gráfico 7-3: Propiedades termodinámicas de la columna de recuperación

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

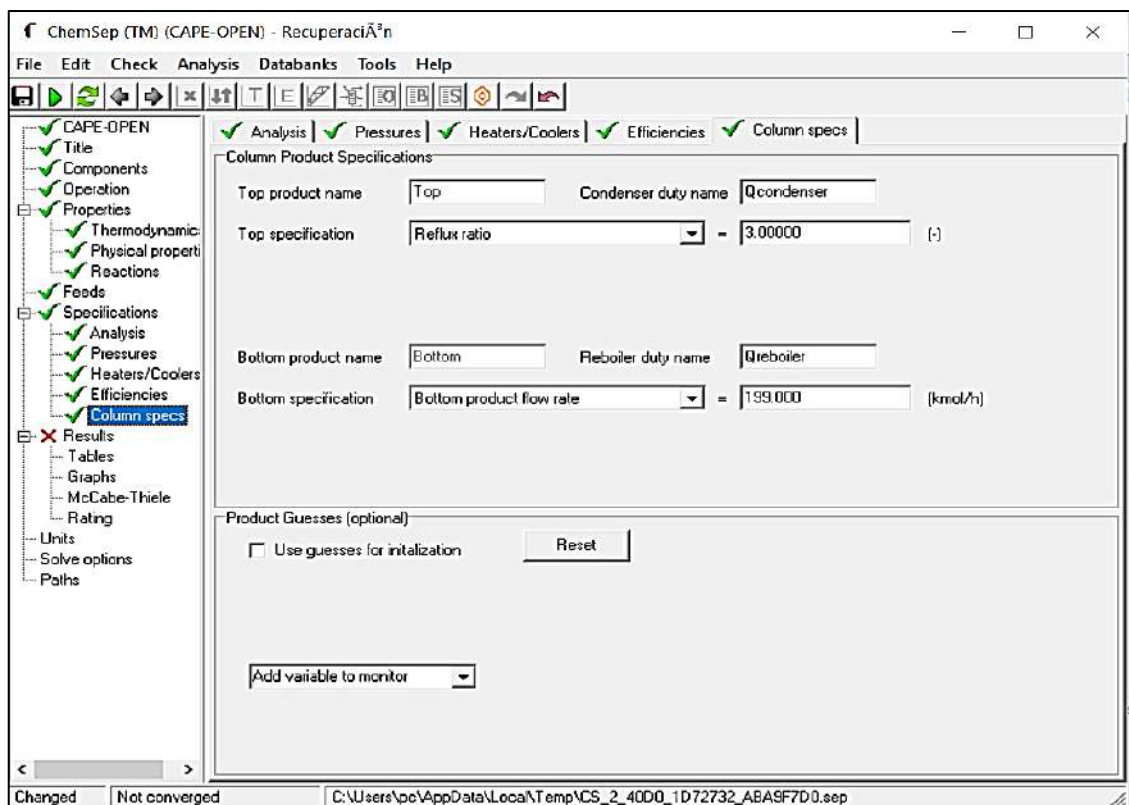


Gráfico 8-3: Especificaciones de la columna de recuperación

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

3.4. Validación de la simulación

Los resultados de la simulación son demostrados mediante el uso de tablas de propiedades del simulador de DWSIM, donde las variables significativas resultan ser: fracción molar de acetona y flujo molar del destilado además de la fracción molar de la acetona y agua del residuo de la columna de destilación extractiva, la fracción molar de metanol y acetona del destilado de la columna de recuperación, así como su flujo molar.

Se logra validar la simulación con un error porcentual menor al 5% entre los valores simulados en DWSIM y los valores establecidos en la fuente bibliografía, con la finalidad de asegurar la confiabilidad del proceso de separación extractiva de la mezcla acetona-metanol.

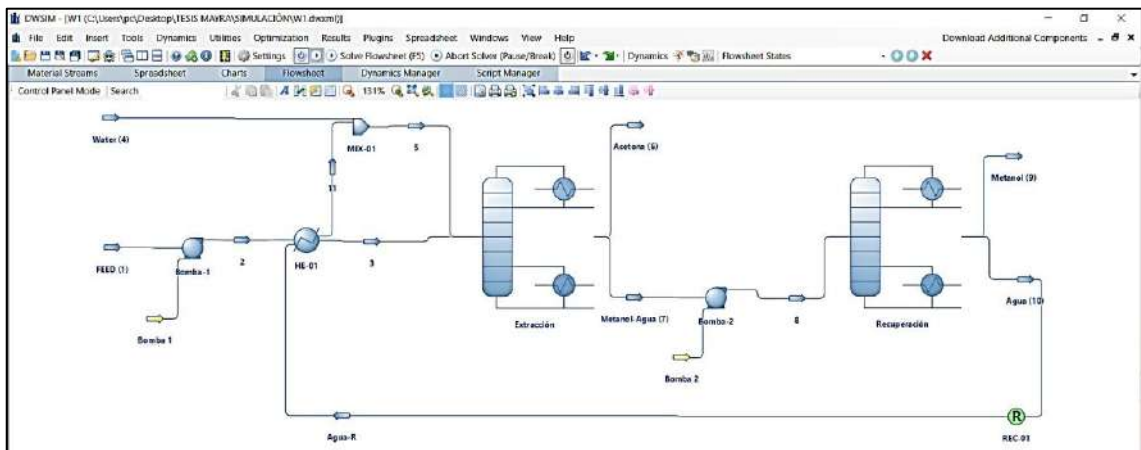


Gráfico 9-3: Simulación del proceso de concentración de la acetona

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Corrientes de entrada	
Object	Water (W) FIED (1)
Temperature	47 20 C
Pressure	1 1 atm
Molar Flow	1 190 kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Acetone	0 0.87
Molar Fraction (Mixture) / Methanol	0 0.13
Molar Fraction (Mixture) / Water	1 0

Master Property Table										
Object	Metanol-Agua (7)	Metanol (9)	Agua (10)	Acetona (6)	8	9	2	11		
Temperature	75.3601	53.0875	50.9823	36.1128	75.3608	80.728	20	50.9823		
Molar Flow	223.913	24.913	199	26.087	223.913	200	199	199		
Molar Fraction (Mixture) / Acetone	0.0207938	0.454835	0.28150E-15	0.999979	0.0207938	0.23413E-15	0.87	0.28150E-15		
Molar Fraction (Mixture) / Methanol	0.038927	0.521799	0.35490E-07	5.11377E-06	0.038927	6.30787E-07	0.13	0.35490E-07		
Molar Fraction (Mixture) / Water	0.81159	0.0217663	0.999999	0.0081159	0.81159	0.999999	0	0.999999		

Gráfico 10-3: Tablas de propiedades de DWSIM

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

3.5. Base de datos

Se elaboró una base de datos del proceso de concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol mediante la manipulación de variables de operación como relación de solvente/alimentación, presión y fracción de acetona en la alimentación, con la finalidad de diseñar una red neuronal artificial en el software Matlab para predecir los valores de fracción molar de acetona del destilado en la columna extractiva, fracción molar de acetona, metanol y agua del destilado de la columna de recuperación y los flujos molares del destilado de las dos columnas de separación obteniendo así un diseño de 3 variables de entrada y 6 variables de salida, la base de datos está conformada por 117 pares de datos, donde 100 datos son destinados para el entrenamiento y validación de la RNA en Matlab mientras que los 17 restantes son utilizados para una validación externa para comprobar la exactitud de la red propuesta.

Tabla 4-3: Base de datos

S/A	Presión	$X_{C_3H_6O-A}$	$X_{C_3H_6O-C1}$	$X_{C_3H_6O-C2}$	$X_{C_3H_6O-C2}$	X_{H_2O-C2}	Flujo molar C_3H_6O	Flujo molar CH_3OH
0.005	1	0.77	0.9939652	0.9066266	0.0916156	0.0017577	75.9602	24.5398
0.01	1	0.77	0.9939647	0.8930444	0.0851854	0.0217701	76.087	24.913
0.015	1	0.77	0.9939641	0.8798628	0.0789451	0.0411919	76.2138	25.2862
0.02	1	0.77	0.9939632	0.8670644	0.0728866	0.0600488	76.3406	25.6594
0.025	1	0.77	0.9939627	0.8546328	0.0670020	0.0783651	76.4674	26.0326
0.03	1	0.77	0.9939619	0.8425522	0.0612841	0.0961636	76.5942	26.4058
0.035	1	0.77	0.9939610	0.8308081	0.0557257	0.1134661	76.721	26.779
0.04	1	0.77	0.9939600	0.8193864	0.0503206	0.1302930	76.8478	27.1522
0.045	1	0.77	0.9939588	0.8082742	0.0450625	0.1466634	76.9747	27.5253
0.05	1	0.77	0.9939575	0.7974581	0.0399454	0.1625965	77.1015	27.8985
0.055	1	0.77	0.9939558	0.7869271	0.0349643	0.1781087	77.228	28.2717
0.06	1	0.77	0.9939538	0.7766694	0.0301139	0.1932168	77.3551	28.6449
0.065	1	0.77	0.9939513	0.7666740	0.0253896	0.2079364	77.4819	29.0181
0.07	1	0.77	0.9939480	0.7569302	0.0207874	0.2222824	77.6087	29.3913
0.075	1	0.77	0.9939435	0.7474270	0.0163041	0.2362690	77.7355	29.7645
0.08	1	0.77	0.9939364	0.7381521	0.0119381	0.2499098	77.8623	30.1377
0.085	1	0.77	0.9939233	0.7290872	0.0076945	0.2632183	77.9892	30.5108
0.09	1	0.77	0.9938535	0.720004	0.0036970	0.2762990	78.116	30.884
0.015	2	0.77	0.9424828	0.9921652	0.0066131	0.0012217	82.3606	19.1394
0.02	2	0.77	0.9470864	0.9693114	0.0296852	0.0010035	81.4498	20.5502
0.025	2	0.77	0.9494254	0.9318493	0.0672535	0.0008972	80.3205	22.1795
0.03	2	0.77	0.9683104	0.8409206	0.1356906	0.0234328	76.5942	26.4058
0.035	2	0.77	0.9683104	0.8291520	0.1292143	0.0416337	76.721	26.779
0.045	2	0.77	0.9682985	0.8066218	0.1168217	0.0765565	76.9747	27.5253
0.05	2	0.77	0.9682917	0.7958066	0.1108763	0.0933171	77.1015	27.8985
0.055	2	0.77	0.9682845	0.7852748	0.1050893	0.1096360	77.2283	28.2717

0.06	2	0.77	0.9682767	0.7750153	0.0994546	0.1255301	77.3551	28.6449
0.065	2	0.77	0.9682683	0.7650175	0.0939666	0.1410160	77.4819	29.0181
0.07	2	0.77	0.9682591	0.7552710	0.0886199	0.1561091	77.6087	29.3913
0.075	2	0.77	0.9682492	0.7457663	0.0834094	0.1708243	77.7355	29.7645
0.08	2	0.77	0.9682384	0.7364939	0.0783304	0.1851756	77.8623	30.1377
0.085	2	0.77	0.9682266	0.7274448	0.0733783	0.1991769	77.9892	30.5108
0.09	2	0.77	0.9682136	0.7186106	0.0685489	0.2128406	78.116	30.884
0.02	3	0.77	0.8393435	0.6433212	0.3559191	0.0007597	85.7376	16.2624
0.025	3	0.77	0.8420889	0.6559207	0.3433026	0.0007768	85.3303	17.1697
0.03	3	0.77	0.8456119	0.6662838	0.3329250	0.0007912	84.767	18.233
0.035	3	0.77	0.8726582	0.7396634	0.2593812	0.0009554	83.0034	20.4966
0.04	3	0.77	0.8970336	0.7695513	0.2294083	0.0010404	80.7212	23.2788
0.045	3	0.77	0.9204343	0.7673345	0.2316301	0.0010354	77.7357	26.7643
0.05	3	0.77	0.9329639	0.7903678	0.2085096	0.0011226	77.1015	27.8985
0.055	3	0.77	0.9375026	0.7779389	0.1891743	0.0328868	77.2283	28.2717
0.06	3	0.77	0.9374909	0.7677443	0.1825912	0.0496645	77.3551	28.6449
0.065	3	0.77	0.9374783	0.7578091	0.1761796	0.0660114	77.4819	29.0181
0.07	3	0.77	0.9374650	0.7481231	0.1699329	0.0819440	77.6087	29.3913
0.075	3	0.77	0.9374509	0.7386769	0.1638451	0.0974780	77.7355	29.7645
0.08	3	0.77	0.9374359	0.7294613	0.1579104	0.1126282	77.8623	30.1377
0.085	3	0.77	0.9374212	0.7204677	0.1521233	0.1274091	77.9892	30.5108
0.09	3	0.77	0.9374032	0.7116880	0.1464785	0.1418331	78.116	30.884
0.005	1	0.82	0.9939749	0.7334714	0.2647736	0.0017550	75.9602	24.5398
0.01	1	0.82	0.9939748	0.7224844	0.2557482	0.0217674	76.087	24.913
0.015	1	0.82	0.9939747	0.7118217	0.2469893	0.0411891	76.2138	25.2862
0.02	1	0.82	0.9939746	0.7014690	0.2384852	0.0600458	76.3406	25.6594
0.025	1	0.82	0.9939744	0.6914135	0.2302250	0.0783615	76.4674	26.0326
0.03	1	0.82	0.9939742	0.6816421	0.2221983	0.0961596	76.5942	26.4058
0.035	1	0.82	0.9939740	0.6721430	0.2143954	0.1134616	76.721	26.779
0.04	1	0.82	0.9939738	0.6629049	0.2068070	0.1302881	76.8478	27.1522
0.045	1	0.82	0.9939736	0.6539173	0.1994243	0.1466584	76.9747	27.265
0.05	1	0.82	0.9939734	0.6451701	0.1922391	0.1625908	77.1015	27.8985
0.055	1	0.82	0.9939732	0.6366538	0.1852437	0.1781025	77.2283	28.2717
0.06	1	0.82	0.9939730	0.6283594	0.1784305	0.1932101	77.3551	28.6449
0.065	1	0.82	0.9939728	0.6202783	0.1717926	0.2079292	77.4819	29.0181
0.07	1	0.82	0.9939726	0.6124023	0.1653232	0.2222744	77.6087	29.3913
0.075	1	0.82	0.9939724	0.6047239	0.1590161	0.2362600	77.7355	29.7645
0.08	1	0.82	0.9939722	0.5972355	0.1528652	0.2498992	77.8623	30.1377
0.085	1	0.82	0.9939720	0.5899304	0.1468648	0.2632048	77.9892	30.5108
0.09	1	0.82	0.9939718	0.5828017	0.1410094	0.2761888	78.116	30.884
0.015	2	0.82	0.9371259	0.8184785	0.1808083	0.0007133	84.1551	17.3449
0.02	2	0.82	0.9370629	0.7834746	0.2158948	0.0006306	83.1689	18.8311
0.025	2	0.82	0.9395036	0.7597157	0.2397043	0.0005799	82.0668	20.4332
0.03	2	0.82	0.9685292	0.6807334	0.2960057	0.0232609	76.5942	26.4058
0.035	2	0.82	0.9685286	0.6712439	0.2872958	0.0414603	76.721	26.779
0.04	2	0.82	0.9685281	0.6620158	0.2788251	0.0591593	76.8478	27.1522

0.045	2	0.82	0.9685276	0.6530376	0.2705842	0.0763782	76.9747	27.5253
0.05	2	0.82	0.9685269	0.6442998	0.2625642	0.093136	77.1015	27.8985
0.055	2	0.82	0.9685261	0.6357924	0.2547561	0.1094515	77.2283	28.2717
0.06	2	0.82	0.9685254	0.6275064	0.2471515	0.1253421	77.3551	28.6449
0.065	2	0.82	0.9685248	0.6194321	0.2397420	0.1408259	77.4819	29.0181
0.07	2	0.82	0.9685238	0.6115639	0.2325216	0.1559144	77.6087	29.3913
0.075	2	0.82	0.9685229	0.6038926	0.2254826	0.1706250	77.7355	29.7645
0.08	2	0.82	0.9685219	0.5964111	0.2186175	0.1849714	77.8623	30.1377
0.085	2	0.82	0.9685208	0.5891123	0.2119208	0.1989669	77.9892	30.5108
0.09	2	0.82	0.9685199	0.5819888	0.2053856	0.2126256	78.116	30.884
0.025	3	0.82	0.8480254	0.4306322	0.5679990	0.0013688	80.8038	21.6962
0.03	3	0.82	0.8707244	0.5254656	0.4737891	0.0007453	83.6401	19.3599
0.035	3	0.82	0.8929493	0.5819876	0.4172621	0.0007503	81.5943	21.9057
0.04	3	0.82	0.9152788	0.6070867	0.3921386	0.0007747	78.788	25.2112
0.045	3	0.82	0.9349283	0.6346334	0.3645447	0.0008219	76.9747	27.5253
0.05	3	0.82	0.9384151	0.6396139	0.3457823	0.0146038	77.1015	27.8985
0.055	3	0.82	0.9384150	0.6311622	0.3370091	0.0318287	77.2283	28.2717
0.06	3	0.82	0.9384147	0.6229300	0.3284649	0.0486051	77.3551	28.6449
0.065	3	0.82	0.9384142	0.6149087	0.3201411	0.0649502	77.4819	29.0181
0.07	3	0.82	0.9384135	0.6070904	0.3120291	0.0808805	77.6087	29.3913
0.075	3	0.82	0.9384126	0.5994675	0.3041210	0.0964115	77.7355	29.7645
0.08	3	0.82	0.9384115	0.5920327	0.2964093	0.1115580	77.8623	30.1377
0.085	3	0.82	0.9384103	0.5847791	0.2888867	0.1263323	77.9882	30.5108
0.09	3	0.82	0.9384089	0.5777000	0.2815464	0.1407536	78.116	30.884
0.03	4	0.77	0.7710662	0.2693895	0.7052645	0.0253460	77.935	25.065
0.035	4	0.77	0.8079168	0.4881467	0.5098682	0.0019851	83.8044	19.6956
0.04	4	0.77	0.8245700	0.5531222	0.4455307	0.0013471	82.8801	21.1199
0.045	4	0.77	0.8428951	0.6059257	0.3927935	0.0012808	81.544	22.956
0.05	4	0.77	0.8608712	0.6435198	0.3551667	0.0013135	80.0022	24.9978
0.055	4	0.77	0.8782102	0.6683321	0.3303137	0.0013542	78.3029	27.1971
0.06	4	0.77	0.8940035	0.6985404	0.300028	0.0014316	77.3551	26.6649
0.065	4	0.77	0.9066499	0.7399174	0.2584951	0.0015875	77.4819	29.0181
0.07	4	0.77	0.9071501	0.7317617	0.2499808	0.0182578	77.6087	29.3913
0.075	4	0.77	0.9071376	0.7224967	0.2430144	0.0344894	77.7355	29.7645
0.085	4	0.77	0.9071098	0.7046354	0.2295995	0.0657651	77.9892	30.5108
0.09	4	0.77	0.9070945	0.6960229	0.2231391	0.0808380	78.116	30.884
0.04	4	0.82	0.8010619	0.2142495	0.7485069	0.0372436	78.6517	25.3483
0.05	4	0.82	0.8624475	0.4782597	0.5194643	0.0022760	80.0513	24.9487
0.055	4	0.82	0.8775840	0.5136931	0.4846333	0.0016736	78.5625	26.9375
0.06	4	0.82	0.8938292	0.5496963	0.4488673	0.0014364	77.3551	28.6449
0.065	4	0.82	0.9064463	0.5931193	0.4054993	0.0013814	77.4819	29.0181
0.07	4	0.82	0.9092605	0.5956771	0.3890086	0.0153144	77.6087	29.3913
0.075	4	0.82	0.9092627	0.5881908	0.3802514	0.0315578	77.7355	29.7645
0.085	4	0.82	0.9092661	0.5737636	0.3633824	0.0628540	77.9892	30.5108
0.09	4	0.82	0.9092673	0.5668095	0.3552550	0.0779355	78.116	30.884

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

3.5.1. Parámetros considerados en la base de datos

- La variable de presión del proceso tiene como valor máximo 4 atm y el mínimo 1 atm.
- La fracción molar de la acetona en la alimentación es 0.77 y 0.82, valores fuera de este rango no son posibles en el simulador DWSIM.
- La relación de solvente/alimentación va en función de la presión del proceso desde 0.005 a 0.09 en el paso de 1 atm, 0.015 a 0.09 para 2 atm, de 0.02 a 0.09 para el caso de 3 atm y de 0.03 a 0.09 para 4 atm. A una relación S/A menor a la mínima para cada presión (1 a 4 atm) no funciona el proceso en DWSIM ya que se tiene errores al momento de simular.

3.6. Diseño de la red neuronal artificial

La red neuronal artificial se encuentra conformada por 3 variables de entrada las cuales son relación de solvente/alimentación, presión del proceso y fracción molar de acetona en la alimentación, mientras que las variables de salida son 6, fracción molar de acetona del destilado de la columna de destilación extractiva, fracción molar de acetona, metanol y agua de la torre de destilación de recuperación de agua y los flujos molares del destilado de cada una de las columnas de separación.

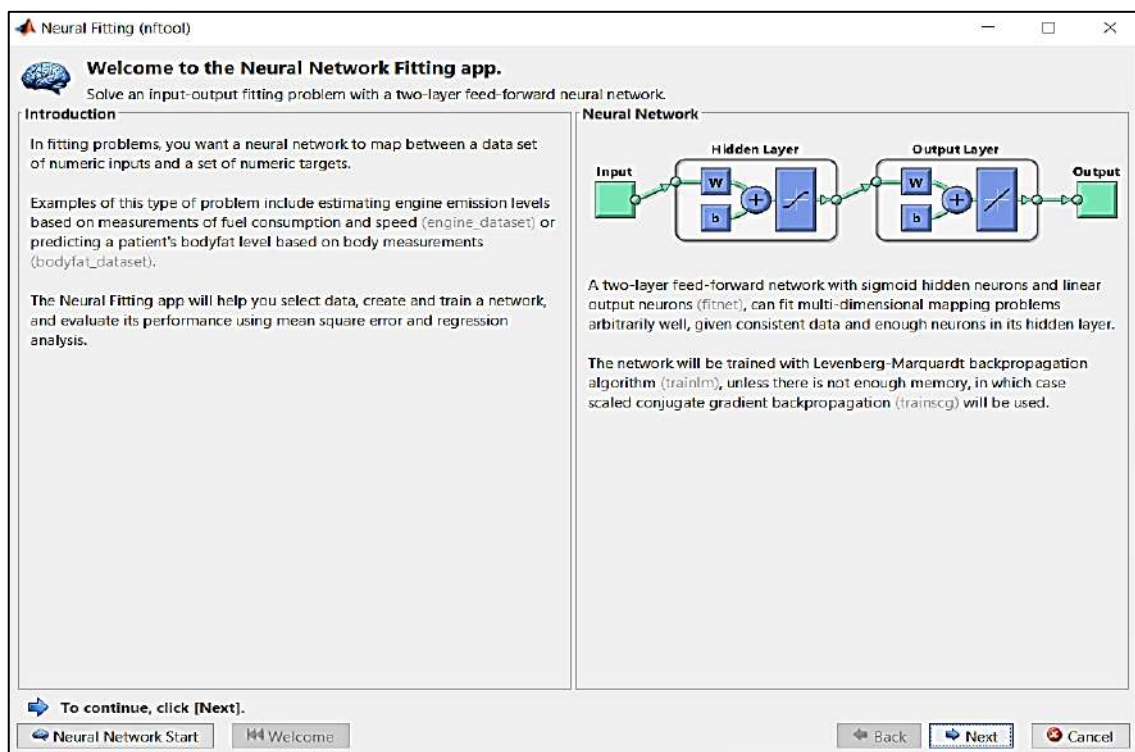


Figura 3-3: Neural Fitting app

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

La RNA se llevó a cabo en el software Matlab, el cual cuenta con una aplicación directa conocida como “Neuronal Net Fiting” encargada de la creación y diseño de la red neuronal artificial, donde se podrá ingresar las variables de entrada y salida, parámetros de entrenamiento y validación, así como el algoritmo matemático más adecuado para la red y además cuenta con herramientas de análisis como error cuadrático medio, histograma de error y regresión lineal para evaluar el rendimiento.

Las variables de entrada y salida son ingresadas en inputs y targets respectivamente, mediante el uso de un libro de Excel se ingresan las entradas y salidas donde cada una de ellas son ingresadas en una hoja del libro diferente y colocados en una matriz numérica horizontal, todo aquello con la finalidad de importar la base de datos al software Matlab para su respectivo procesamiento.

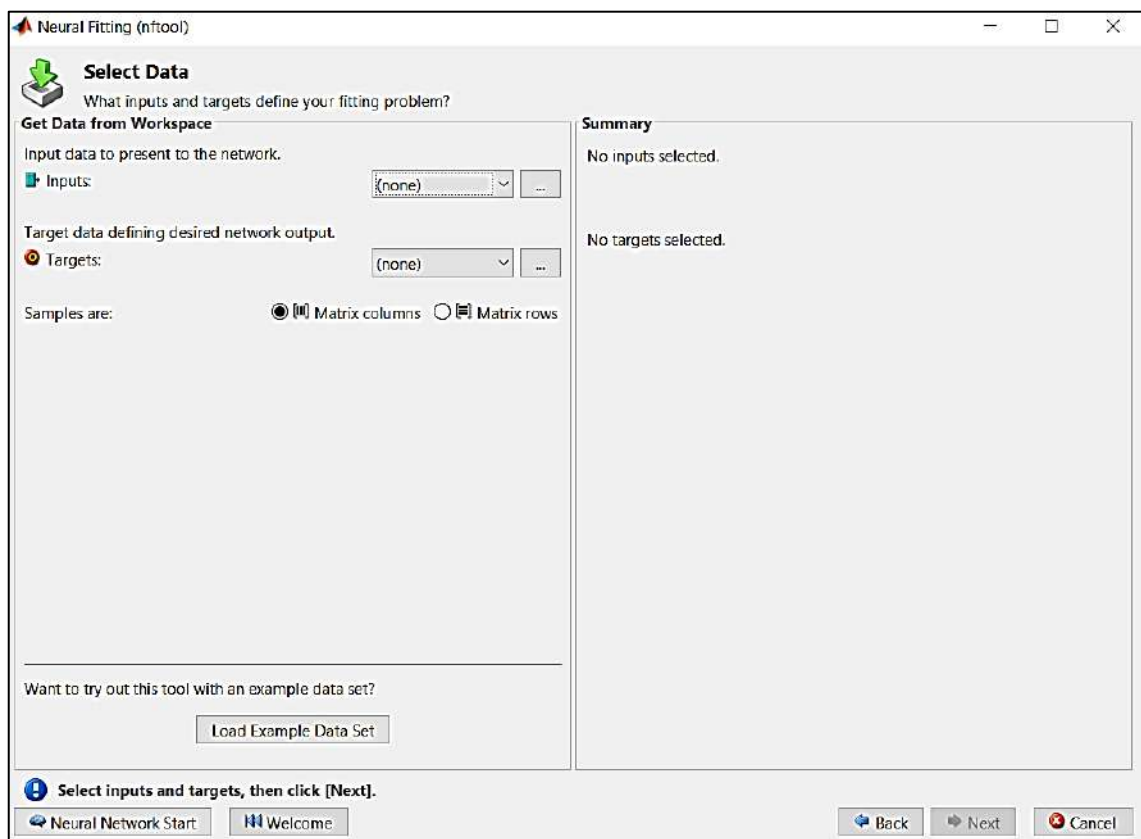


Figura 4-3: Selección de inputs y targets

Realizado por: Valdiviezo, Mayra.2021.

Se establece el porcentaje respectivo para las fases de entrenamiento, validación y prueba, donde se mantiene fijo el porcentaje de entrenamiento siendo un 70% de la base de datos, a cambio el porcentaje de la validación y prueba pueden ser modificados según lo que se requiera.

Entrenamiento: Es la fase encargada de entrenar a la red neuronal artificial mediante el algoritmo de aprendizaje establecido, ajustándose de esta forma en fusión del error que se presente entre los datos de DWSIM y la RNA.

Validación: El propósito de la validación es medir la generalización de la red neuronal para así detener la fase de entrenamiento en el momento que la generalización alcance un punto óptimo y estable.

Prueba: Esta etapa tiene como finalidad proporcionar una medida cuantitativa del rendimiento de la RNA, mediante el uso de datos “nuevos”, aquellos que no han sido utilizados en la fase de entrenamiento y validación.

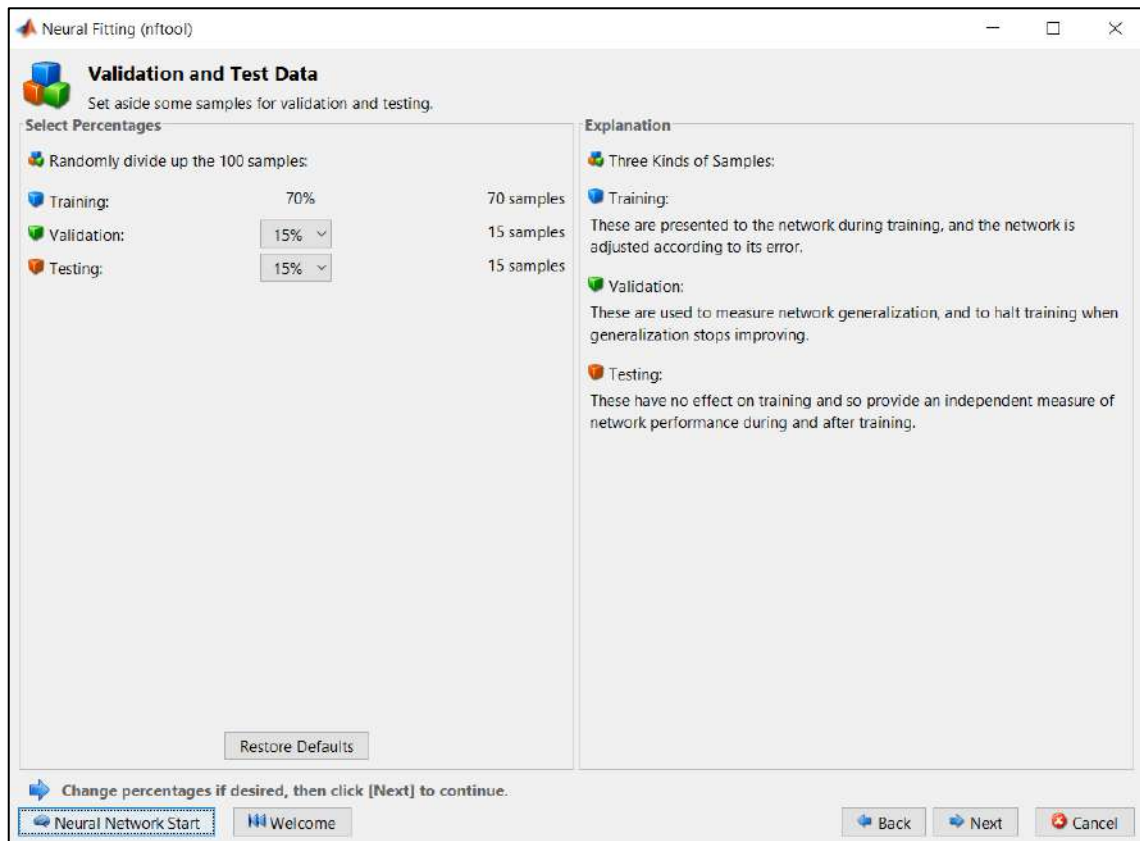


Figura 5-3: Porcentajes destinado a las etapas de la RNA

Realizado por: Valdiviezo, Mayra.2021.

El algoritmo de entrenamiento es un parámetro muy importante en el diseño de la red neuronal artificial, ya que es aquel que se encarga de los cálculos matemáticos en la fase de entrenamiento por lo cual se debe experimentar con cada algoritmo para encontrar el que mejor se ajuste al proceso de “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol”. Matlab ofrece tres algoritmos matemáticos que serán descritos a continuación. Levenberg-Marquardt: A este algoritmo también se lo conoce como método de mínimos cuadrados amortiguados, es un algoritmo que requiere de más memoria de procesamiento sin embargo de menor tiempo. Cuyo algoritmo es utilizado para problemas genéricos de ajuste de curvas.

Bayesian Regularization: Este algoritmo es muy utilizado en la resolución de problemas que se tenga una base de datos con valores pequeños y ruidosos los cuales son difíciles de procesar, requiere de un mayor tiempo de procesamiento de datos.

Scaled Conjugate Gradiente: Es un algoritmo con un bajo requerimiento de memoria y su entrenamiento acaba cuando la generalización deja de presentar una mejoría. (MATLAB)

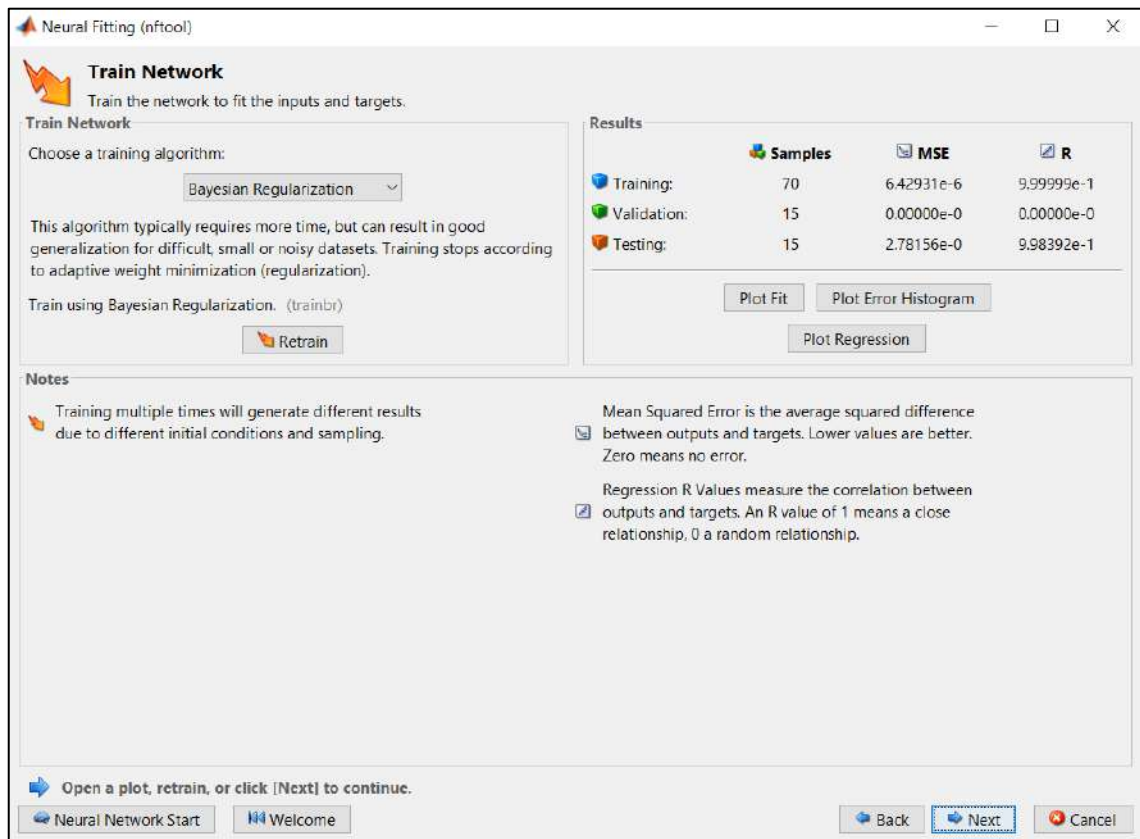


Figura 6-3: Selección de algoritmo matemático

Realizado por: Valdiviezo, Mayra.2021.

En el siguiente gráfico se puede apreciar que en Matlab se puede establecer el número de neuronas que se encontraran en la capa oculta de la red neuronal artificial, es un aspecto muy importante a determinar ya que depende en gran parte a aquello la eficiencia de la red neuronal artificial al momento de predecir los valores de las variables de salida teniendo un valor pequeño de error cuadrático medio. La forma de determinar el número de neuronas optimas es mediante experimentos de prueba y error donde se analiza la regresión lineal, el diagrama de error y el MSE obtenido en cada caso.

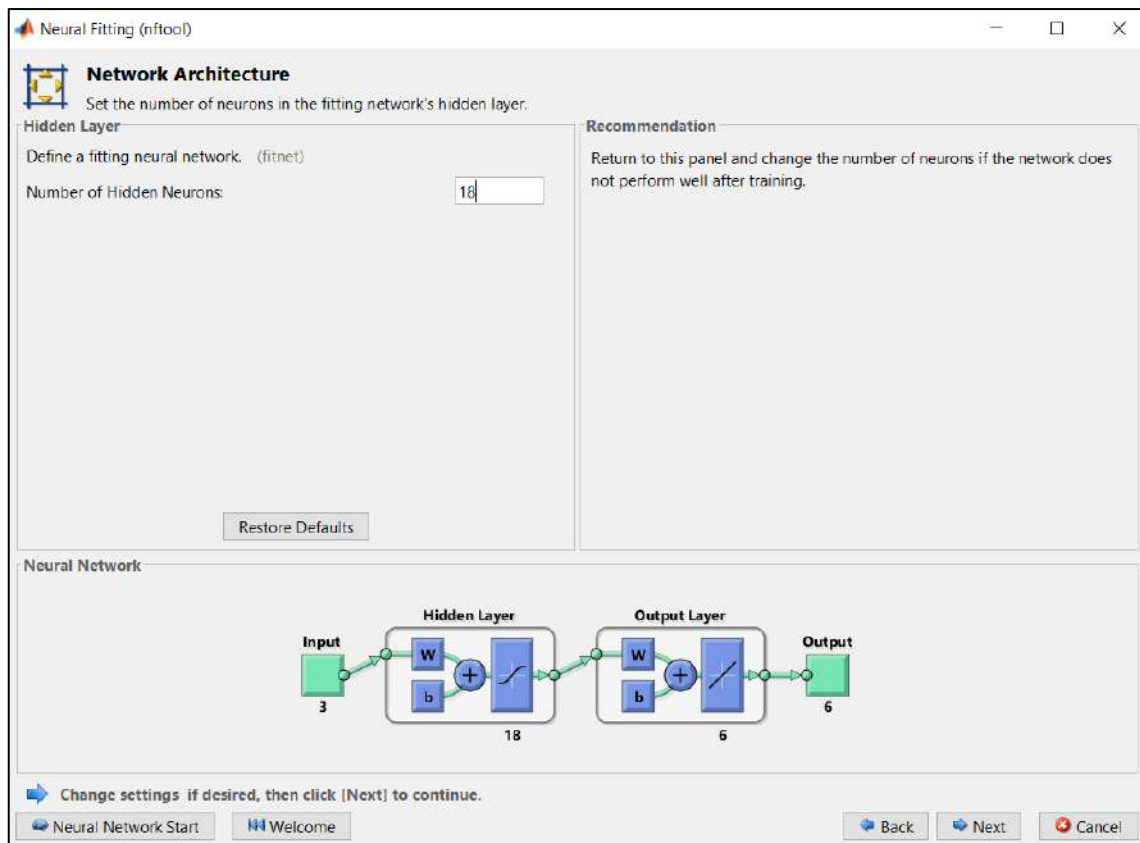


Figura 7-3: Selección de neuronas en la capa oculta

Realizado por: Valdiviezo, Mayra.2021.

3.7. Validación de la Red neuronal artificial

La validación de la Red Neuronal Artificial consiste en asegurar la confiabilidad de los resultados predichos por la red, por lo cual se hace uso de varias herramientas como:

- La regresión lineal encargada de mostrar la correlación lineal que existe entre los datos de entrada y salida, cuyo valor de R^2 debe ser igual o bastante cercano a 1 para tener una correlación de datos óptimos se recomienda un valor mayor a 0.99, un valor cercano a 0 indica que no existe ninguna correlación lineal en los datos ingresados por lo cual presenta una relación aleatoria inadecuada.
- El MSE también conocido como error cuadrático medio, es el error existente entre los valores de DWSIM simulados y los predichos por la red neuronal artificial, el cual es elevado al cuadrado para tener valores solo positivos y mantener su representación en el sistema, un valor cercano a 0 indica que existe un menor error en los datos, mientras más alto sea el número menor eficiente será la red neuronal artificial para predecir nuevos datos de entrada en el futuro.
- El uso del histograma de error, es importante para identificar la frecuencia de los errores y la magnitud de estos analizando de esta forma la influencia de errores atípicos que pueden existir

en la red neuronal, para así lograr evitar que se produzca una dispersión significativa en nuestro proceso, se recomienda que los valores de los errores en la gráfica sean pequeños y que su frecuencia se centre en medio de esta.

Aparte de las herramientas que ofrece Matlab para validar internamente la RNA se puede hacer uso de una validación externa ya que con aquello se puede asegurar mucho más la eficacia de la red debido a que se ingresan nuevos datos que no fueron ingresados en la fase de entrenamiento, validación y prueba corroborando nuevamente la gran exactitud de predecir valores, por lo cual se utilizó 17 datos de los 117 totales de la base de datos para dicho análisis.

3.8. Análisis estadístico

Se realizó un análisis estadístico del presente trabajo de integración curricular con la ayuda del software “*STATGRAPHICS*”, es una gran herramienta tecnológica de análisis de datos la cual es una mezcla de procedimientos analíticos con una extraordinaria cantidad de gráficos interactivos, además incluye funciones estadísticas avanzadas por lo tanto tiene la capacidad de ofrecer rigurosos análisis y a su vez cuenta con una interface intuitiva mediante una simplicidad efectiva en el software. Statgraphics cuenta con más de 230 procedimientos estadísticos para:

- Diseño de experimentos
- Análisis exploratorio de datos
- Ajuste de distribuciones
- Control estadístico de procesos
- Seis sigmas
- Análisis de la fiabilidad y datos de vida
- Análisis de series temporales y predicción
- Métodos multivariantes
- Técnicas no paramétricas
- Análisis de la varianza y regresión

Para el proceso de “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol” se utilizaron los siguientes casos:

- Resumen estadístico
- Anova
- Medios con intervalos de confianza 95%
- Prueba de Kruskal Wallis

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Presupuesto

Tabla 1-4: Matriz de presupuesto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Investigación y aprendizaje (internet)	\$120	X	
Impresión del documento final	\$20	X	
Copias e impresiones adicionales	\$10	X	
Empastado y CDs	\$30	X	
TOTAL		\$180	

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.2. Cronograma

Tabla 2-4. Cronograma

ACTIVIDAD	MESES																			
	Abril				Mayo				Junio				Julio				Agosto			
	SEMANAS																			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■								
Elaboración del anteproyecto	■	■																		
Determinación de variables			■	■	■	■														
Simulación del sistema de destilación extractiva							■	■	■	■										
Obtención y validación de datos experimentales										■	■									
Diseño de la red neuronal artificial											■	■	■	■						
Validación de la RNA y análisis estadístico													■	■	■					
Estudio técnico y económico											■	■								
Redacción del trabajo final	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Análisis de costos													■	■	■					
Revisión del documento final															■	■				
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.3. Recursos materiales

En el presente proyecto se emplearán los siguientes softwares:

- **DWSIM:** simulador de procesos químicos para el sistema de destilación extractiva para la separación de azeótropos de acetona-metanol.
- **CAPE-OPEN y ChemSep:** complementos asociados a DWSIM especializado en columna de destilación de todo tipo.
- **MATLAB:** software de procesamiento de datos para el diseño de la red neuronal artificial.
- **STATGRAPHICS:** herramienta estadística para el respectivo análisis estadístico de la RNA.

La inversión realizada para el uso de DWSIM es aproximadamente \$30 mensuales, haciendo referencia al costo del internet ya que es un software libre.

4.4. Análisis de sensibilidad

Se realizó un análisis de sensibilidad para corroborar que los parámetros de proceso sean los más adecuados para la destilación extractiva de la mezcla acetona-metanol.

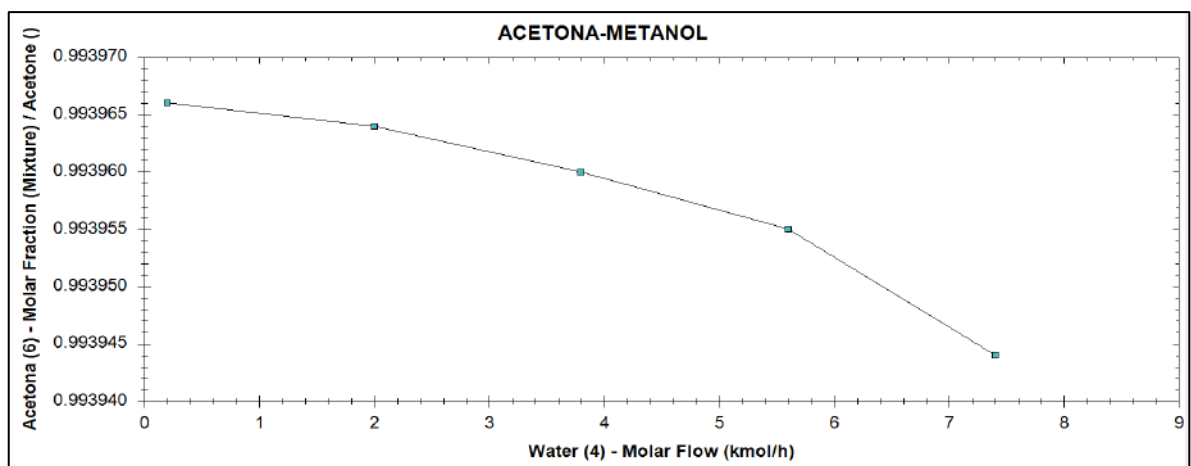


Gráfico 1-4. Flujo molar de agua vs Fracción molar de acetona

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

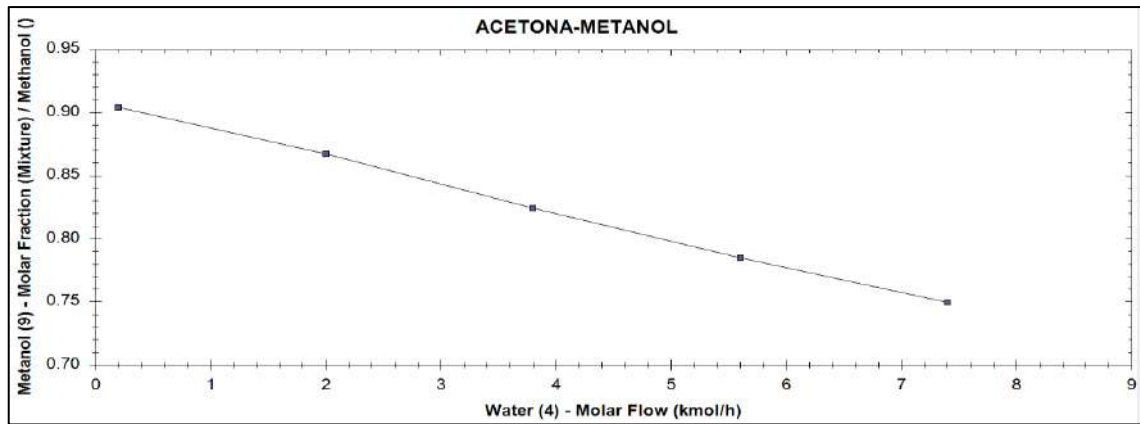


Gráfico 2-4. Flujo molar de agua vs Fracción molar de metanol

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se analizó el flujo molar de agua de ingreso al proceso y su influencia en la fracción molar de metanol y acetona, con lo cual se puede apreciar que a mayor cantidad de agua se produce una reducción en el valor de fracción molar del acetona y metanol siendo más considerable en el último caso, por lo cual no es recomendable elevar el flujo molar de agua.

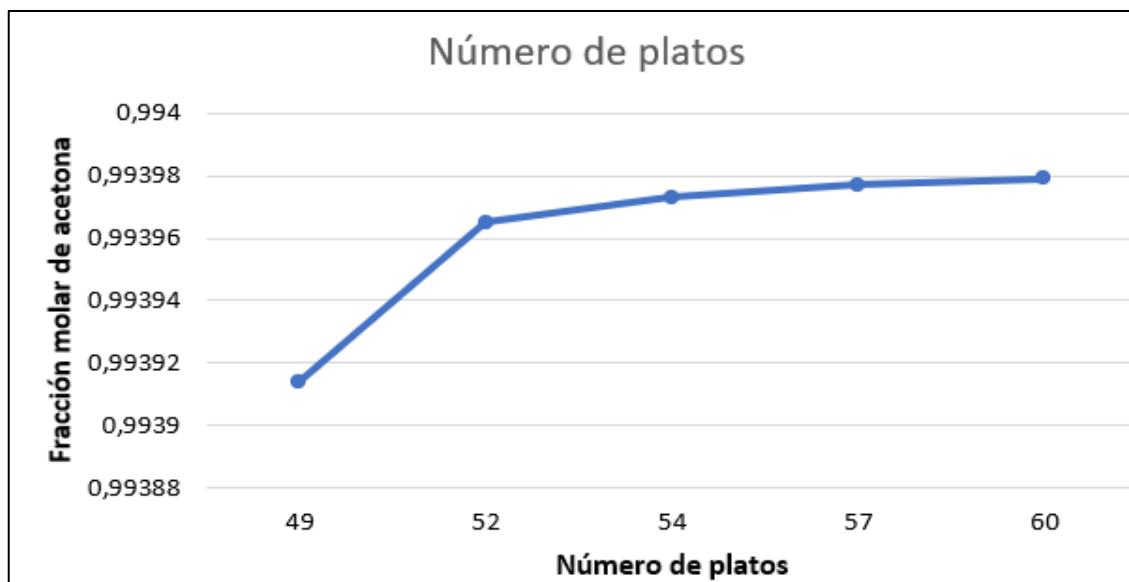


Gráfico 3-4. Número de platos de la columna de extracción vs Fracción molar de acetona

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se observa que el número de platos de la torre de extracción superior a 49 platos no tiene un efecto significativo en la fracción molar de acetona, por lo cual no es recomendable aumentar el número de platos para obtener un mejor rendimiento.

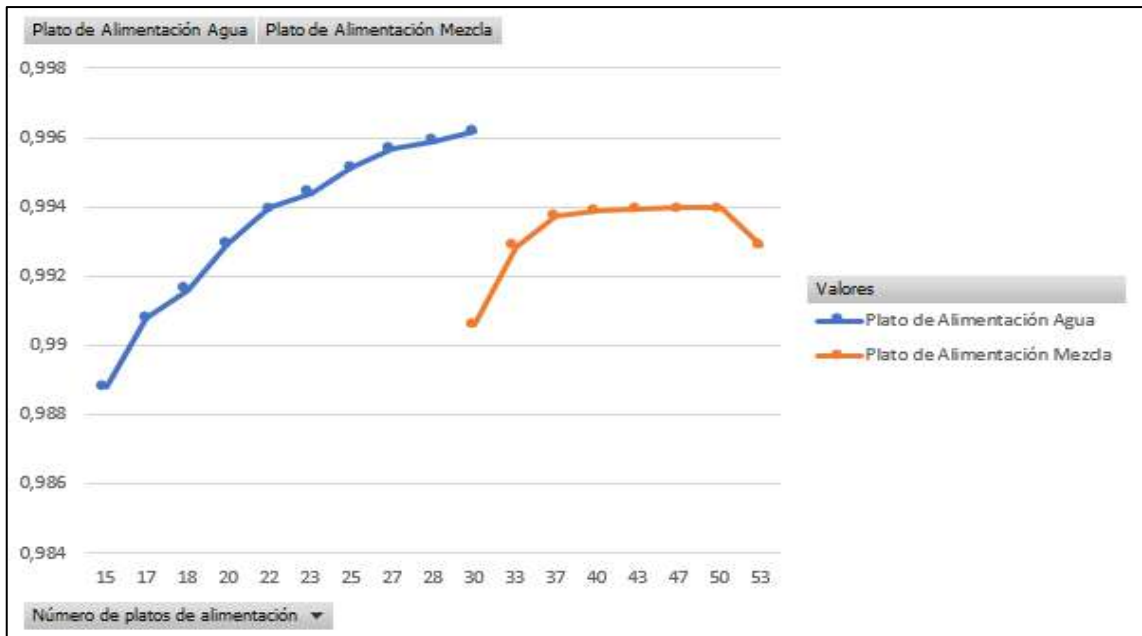


Gráfico 4-4. Número de platos de alimentación vs Fracción molar de acetona, C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

La fracción molar de acetona incrementa en pequeños valores en función que se aumenta el número de platos de alimentación del agua, para el caso de 22 platos se tiene una fracción molar de acetona de 0.994, platos superiores a 15 no representan un aumento significativo. La fracción molar de acetona para el caso del número de platos de alimentación de la mezcla de igual manera no se observa un incremento ni una disminución significativa para el proceso químico, para el plato número 48 se tiene una fracción molar de 0.994.

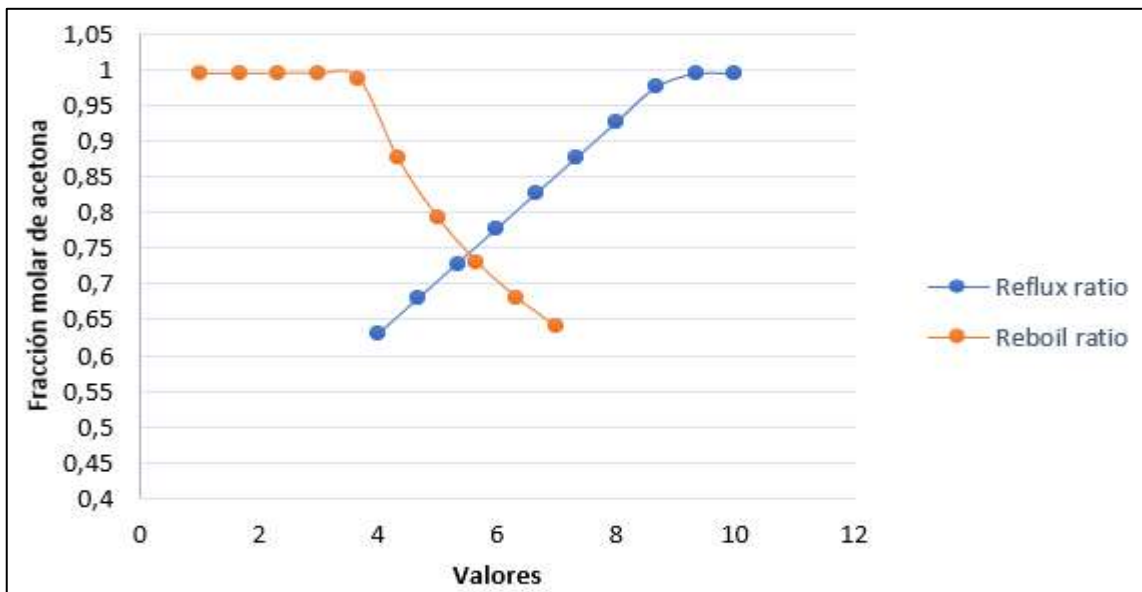


Gráfico 5-4. Valores de Reflux Ratio y Reboil Ratio vs Fracción molar de acetona, C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se analizaron el Reflux Ratio y el Reboil Ratio, donde para el primer caso se observa un incremento notable en la fracción molar de acetona en cuanto se vaya aumentando el Reflujo, llegando un máximo de 0.994 para un valor de 9.3 donde posteriormente se mantendrá constante. En cuanto al Reboil Ratio mientras este aumenta la fracción molar acetona se ve ampliamente reducido, por lo cual un valor óptimo se encuentra en el rango de 1 a 3.50.

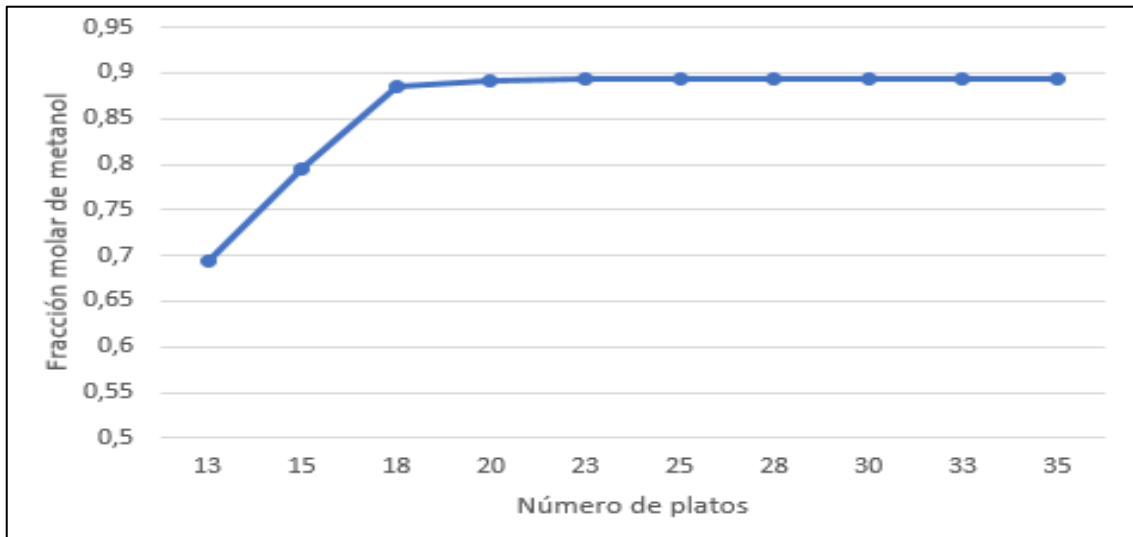


Gráfico 6-4. Número de platos de la columna de recuperación vs Fracción molar de acetona

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En esta gráfica se observa la influencia del número de platos de la columna de recuperación sobre la fracción molar de metanol, donde se puede apreciar un incremento hasta el plato número 18 donde posteriormente se mantendrá constante sin importar el número de platos teniendo un valor de 0.89 en cuanto a la fracción molar de metanol.

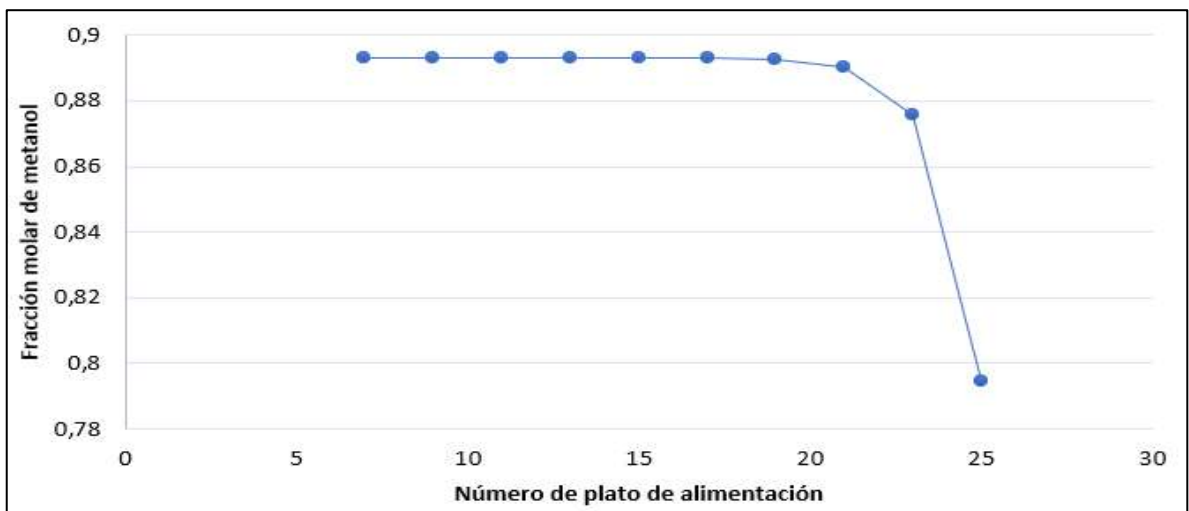


Gráfico 7-4. Número de plato de alimentación vs Fracción molar de metanol, C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se puede apreciar que hasta el plato de alimentación 22 se tiene un buen valor de fracción molar de metanol aproximadamente de 0.89, valores mayores de plato producen un descenso brusco en la fracción molar de metanol, por lo cual el punto óptimo se encuentra desde el plato 7 hasta el plato 22, donde se obtiene un mejor rendimiento.

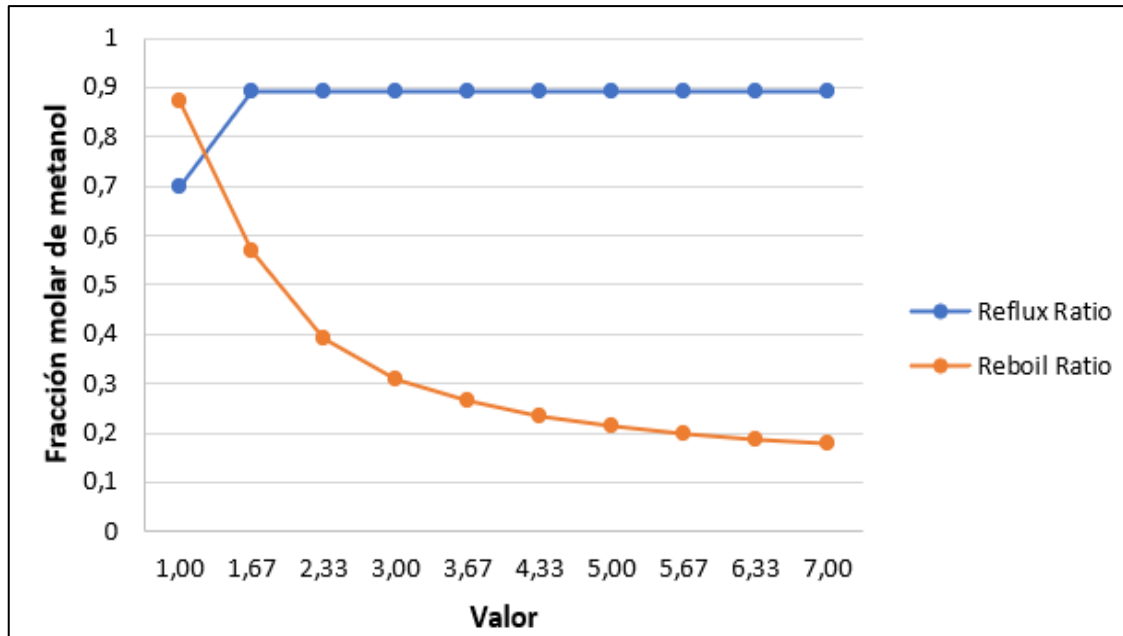


Gráfico 8-4. Valor de Reflux Ratio y Reboil Ratio vs Fracción molar de metanol, C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En esta gráfica se aprecia la interacción del Reflux Ratio de la torre de recuperación vs fracción molar de metanol, donde se tiene un incremento significativo en el rango de 1 a 1.67, sin embargo, a valores mayores de RR se mantiene constante la fracción molar de metanol siendo 0.89. Para el caso de Reboil Ratio se observa una disminución significativa en el valor de fracción molar de metanol llegando hasta un mínimo de 0.18 para un valor de 7.

4.5. Resultados de la simulación en DWSIM

A continuación, se muestra el esquema de la simulación en DWSIM del proceso “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol”.

Se realizaron pequeñas modificaciones en el proceso planteado en bibliografía, la cual recae en las especificaciones de las columnas de separación, donde se utilizó una relación de reflujo de 9.30 y una relación de ebullición de 3.50 en la columna de destilación extractiva mientras en la columna de recuperación fue una relación de reflujo de 3 y un flujo molar del residuo de 199 kmol/h, en el documento bibliográfico usado de base se lleva a cabo con una relación de reflujo

de 5 y 3 y con un flujo molar de destilado de 76 kmol/h y 25 kmol/h respectivamente para cada una de las torres de destilación.

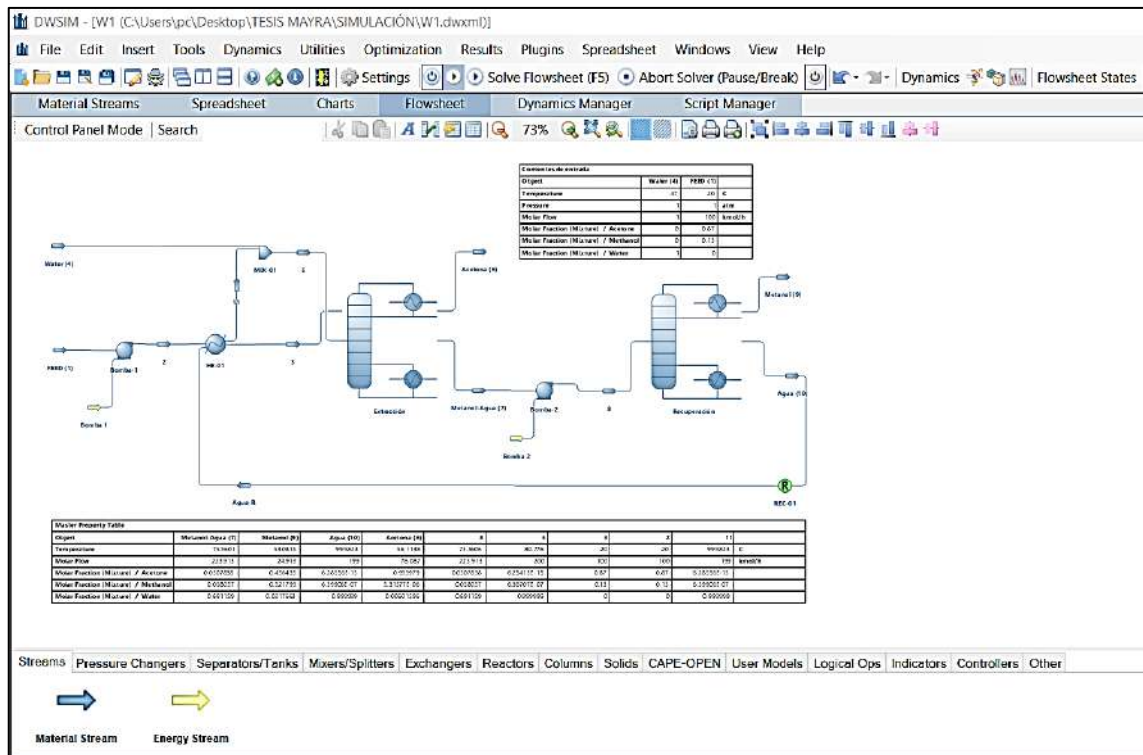


Figura 1–4: Simulación del proceso de la concentración de la acetona
Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En las siguientes tablas se registra los resultados obtenidos de la simulación del proceso “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol” realizada en el software DWSIM de las diferentes corrientes de destilado y de residuo de las columnas de destilación extractiva y de recuperación, así como sus respectivas corrientes de alimentación.

Tabla 3-4: Resultados de la columna de destilación extractiva

Columna de destilación extractiva		
Corrientes	Destilado	Residuo
Flujo molar (kmol/h)	76.087	223.913
Temperatura (°C)	56.1137	84.0983
Presión (atm)	1	1
Fracción molar		
XC3H6O	0.99396476	0.0094779
XH2O	0.00601468	0.89115982
XCH3OH	2.06E-05	0.09936228

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Tabla 4-4: Resultados de la columna de destilación de recuperación

Columna de destilación de recuperación		
Corrientes	Destilado	Residuo
Flujo molar (kmol/h)	24.913	199
Temperatura (°C)	54.2632	99.9823
Presión (atm)	1	1
Fracción molar		
XC3H6O	0.08518541	5.93E-16
XH2O	0.02177018	0.9999996
XCH3OH	0.89304442	4.02E-07

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.6. Validación de la simulación

Mediante un análisis comparativo de los resultados obtenidos de la simulación en DWSIM con los resultados presentes en la bibliografía de Gil; et al, 2009 se logró validar la simulación de “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol” debido a que se presentó un error porcentual menor al 5% en las variables más significativas del proceso de separación tales como las fracciones molares de acetona, metanol y agua del destilado y residuo de la columna de destilación azeotrópica y de la columna de destilación de recuperación así como su flujo molar de los dos destilados, no se toma en consideración las fracciones molares muy pequeñas como del agua del destilado de la columna de recuperación debido a que tienen un valor pequeño por lo cual es más difícil lograr una mayor exactitud, sin embargo los valores son muy similares entre sí.

En las dos siguientes tablas se puede apreciar el error porcentual del proceso de concentración de acetona, donde se compara las diferentes variables de interés.

Tabla 5-4: Validación de la columna azeotrópica

Análisis comparativo	Columna de destilación azeotrópica			
	C-1 destilado	C-1 residuo		Flujo acetona
	XC3H6O	XCH3OH	XH2O	kmol/h
Deseado	0,995	0,098	0,892	76
DWSIM	0,99396476	0,09936228	0,89115982	76,087
Error porcentual	0,10404422	1,39008163	0,09419058	0,11447368

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Tabla 6-4: Validación de la columna de recuperación

Análisis comparativo	Columna de destilación azeotrópica			Flujo acetona kmol/h
	C-1 destilado		C-1 residuo	
	XC3H6O	XCH3OH	XH2O	
Deseado	0,995	0,098	0,892	76
DWSIM	0,99396476	0,09936228	0,89115982	76,087
Error porcentual	0,10404422	1,39008163	0,09419058	0,11447368

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.7. Balance de materia y energía

4.7.1. Balance de materia de la columna de extracción

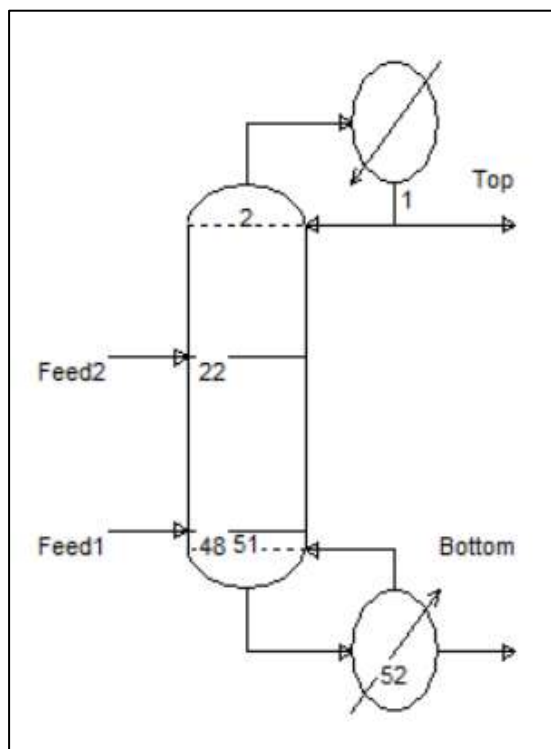


Gráfico 9-4: Columna de extracción

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Flujo 5 (Feed2)

Flujo molar = 200 kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 5.8974848 \times 10^{-16}$$

$$X_{CH_3OH} = 4.0011845 \times 10^{-07}$$

$$X_{H_2O} = 0.9999996$$

Flujo 3 (Feed1)

Flujo molar = 100 kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 0.7775$$

$$X_{CH_3OH} = 0.2225$$

$$X_{H_2O} = 0$$

Flujo acetona (Top)

Flujo molar = ? kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 0.99396476$$

$$X_{CH_3OH} = 2.0551445 \times 10^{-5}$$

$$X_{H_2O} = 0.006014684$$

Flujo metanol-agua (Bottom)

Flujo molar = ? kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 0.0094779$$

$$X_{CH_3OH} = 0.099362279$$

$$X_{H_2O} = 0.89115982$$

Balance general

$$F_2 + F_1 = F_{Top} + F_{Bottom}$$

$$200 \text{ kmol/h} + 100 \text{ kmol/h} = F_{Top} + F_{Bottom}$$

$$F_{Top} = 300 \text{ kmol/h} - F_{Bottom}$$

$$F_{Top} = 300 \text{ kmol/h} - 224.1669615 \text{ kmol/h}$$

$$F_{Top} = 75.8330385 \text{ kmol/h}$$

Balance del compuesto de acetona

$$F_2 X_{C_3H_6O} + F_1 X_{C_3H_6O} = F_{Top} X_{C_3H_6O} + F_{Bottom} X_{C_3H_6O}$$

$$200 \text{ kmol/h} (0) + 100 \text{ kmol/h} (0.775) = F_{Top} (0.99396476) + F_{Bottom} (0.0094779)$$

$$77.5 \text{ kmol/h} = F_{Top} (0.99396476) + F_{Bottom} (0.0094779)$$

$$77.5 \text{ kmol/h} = (300 \text{ kmol/h} - F_{Bottom}) (0.99396476) + F_{Bottom} (0.0094779)$$

$$77.5 \text{ kmol/h} = 298.189428 \text{ kmol/h} - (0.99396476) F_{Bottom} + (0.0094779) F_{Bottom}$$

$$-220.689428 \text{ kmol/h} = -(0.98448686) F_{Bottom}$$

$$224.1669615 \text{ kmol/h} = F_{Bottom}$$

4.7.2. Balance de materia de la columna de recuperación

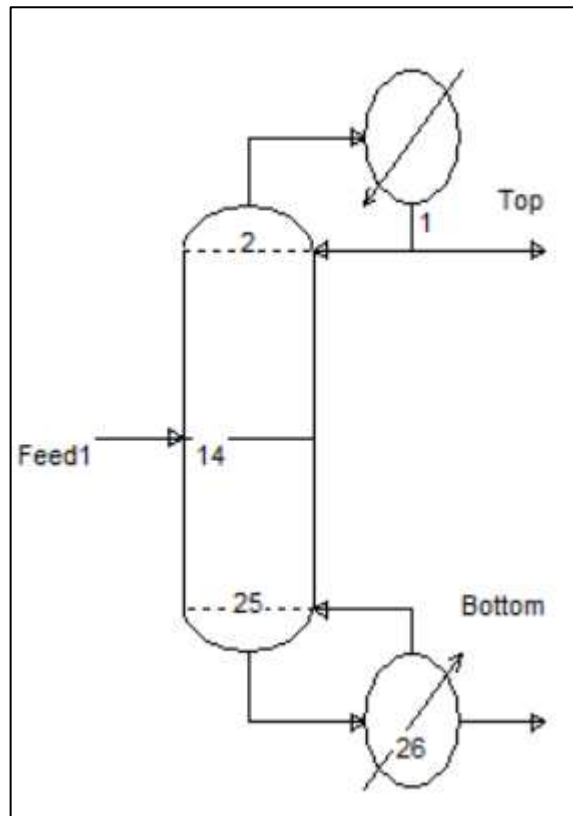


Gráfico 10-4: Columna de recuperación

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Flujo 8 (Feed1)

Flujo molar = 223.913 kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 0.0094779$$

$$X_{CH_3OH} = 0.099362279$$

$$X_{H_2O} = 0.89115982$$

Flujo metanol (Top)

Flujo molar = ? kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 0.085185407$$

$$X_{CH_3OH} = 0.89304442$$

$$X_{H_2O} = 0.021770175$$

Flujo agua (Bottom)

Flujo molar = ? kmol/h

Fracción molar

$$X_{C_3H_6O} = 5.9271433E-16$$

$$X_{CH_3OH} = 4.0212974E-07$$

$$X_{H_2O} = 0.9999996$$

Balance general

$$F_1 = F_{Top} + F_{Bottom}$$

$$223.913 \text{ kmol/h} = F_{Top} + F_{Bottom}$$

$$F_{Top} = 223.913 \text{ kmol/h} - F_{Bottom}$$

$$F_{Bottom} = 223.913 \text{ kmol/h} - F_{Top}$$

$$F_{Bottom} = 223.913 \text{ kmol/h} - 24.91301148 \text{ kmol/h}$$

$$F_{Bottom} = 198.9999885 \text{ kmol/h}$$

Balance del compuesto de acetona

$$F_1 X_{C_3H_6O} = F_{Top} X_{C_3H_6O} + F_{Bottom} X_{C_3H_6O}$$

$$223.913 \text{ kmol/h} (0.0094779) = F_{Top} (0.085185407) + F_{Bottom} (0)$$

$$2.122225023 \text{ kmol/h} = F_{Top} (0.085185407)$$

$$24.91301148 \text{ kmol/h} = F_{Top}$$

4.7.3. Balance de energía del intercambiador de energía

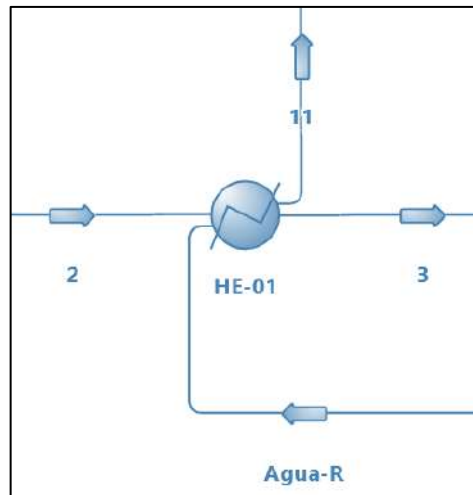


Gráfico 11-4: Intercambiador de calor

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Flujo 2

$$\text{Flujo másico} = 5228.58 \text{ kg/h}$$

$$\text{Entalpia} = -662.3335 \text{ kJ/kg}$$

$$\text{Temperatura} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$$

Flujo Agua-R

Flujo másico = ? kmol/h

Entalpia = -2230.89 kJ/kg

Temperatura= 99.9823 °C

Flujo 3

Flujo másico = 5228.58 kmol/h

Entalpia = -578.445 kJ/kg

Temperatura= 53 °C

Flujo 11

Flujo másico = ? kmol/h

Entalpia = -2353.24 kJ/kg

Temperatura= 77.0552 °C

$$\begin{aligned}F_2 H_2 + F_{\text{Agua-R}} H_{\text{Agua-R}} &= F_3 H_3 + F_{11} H_{11} \\F_2 H_2 - F_3 H_3 &= F_{11} H_{11} - F_{\text{Agua-R}} H_{\text{Agua-R}} \\F_2 (H_2 - H_3) &= F_{11} (H_{11} - H_{\text{Agua-R}}) \\5228.58 \text{ kg/h} (-662.3335 \text{ kJ/kg} + 578.445 \text{ kJ/kg}) \\&= F_{11} (-2353.24 \text{ kJ/kg} + 2230.89 \text{ kJ/kg}) \\-438617.7333 \text{ kJ/h} &= F_{11} (-122.35 \text{ kJ/kg}) \\3584.942651 \text{ kg/h} &= F_{11}\end{aligned}$$

Flujo Agua-R

$X_{\text{C}_3\text{H}_6\text{O}} = 5.9271342\text{E-}16$

$X_{\text{CH}_3\text{OH}} = 4.0212967\text{E-}07$

$X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.9999996$

$$3584.942651 \text{ kg/h} * \frac{1 \text{ kmol H}_2\text{O}}{18 \text{ kg}} = 199.1634806 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

4.8. Resultados de la red neuronal artificial propuesta

La red neuronal artificial propuesta para la “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol” fue diseñada a partir de 55 neuronas en la capa oculta, utilizando el algoritmo matemático “Bayesian Regularization”, conformada por 3 variables de entrada (fracción molar de acetona de la alimentación, presión y S/A) y 6 variables de salida (fracción molar de acetona de C-1, fracciones molares de acetona, metanol y agua de C-

2, flujos molares de “Acetona” y “Metanol”) a partir de una base de datos de 100 conjuntos de datos destinados a las etapas de entrenamiento, validación y prueba de la red neuronal artificial.

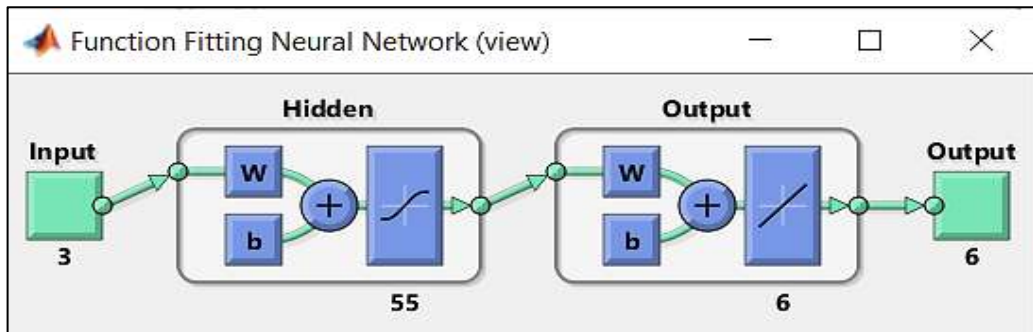


Gráfico 12-4: Diseño de la Red Neuronal Artificial

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.



Gráfico 13-4: Interfaz de los resultados de la red neuronal artificial

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.8.1. Análisis de los resultados obtenidos en Matlab

Se presenta las diferentes gráficas (error cuadrático medio, error de histograma y regresión lineal) obtenidas del diseño de la red neuronal artificial en el programa Matlab para su respectivo análisis y posterior validación de los resultados predichos por la RNA.

4.8.1.1. Análisis de regresión lineal

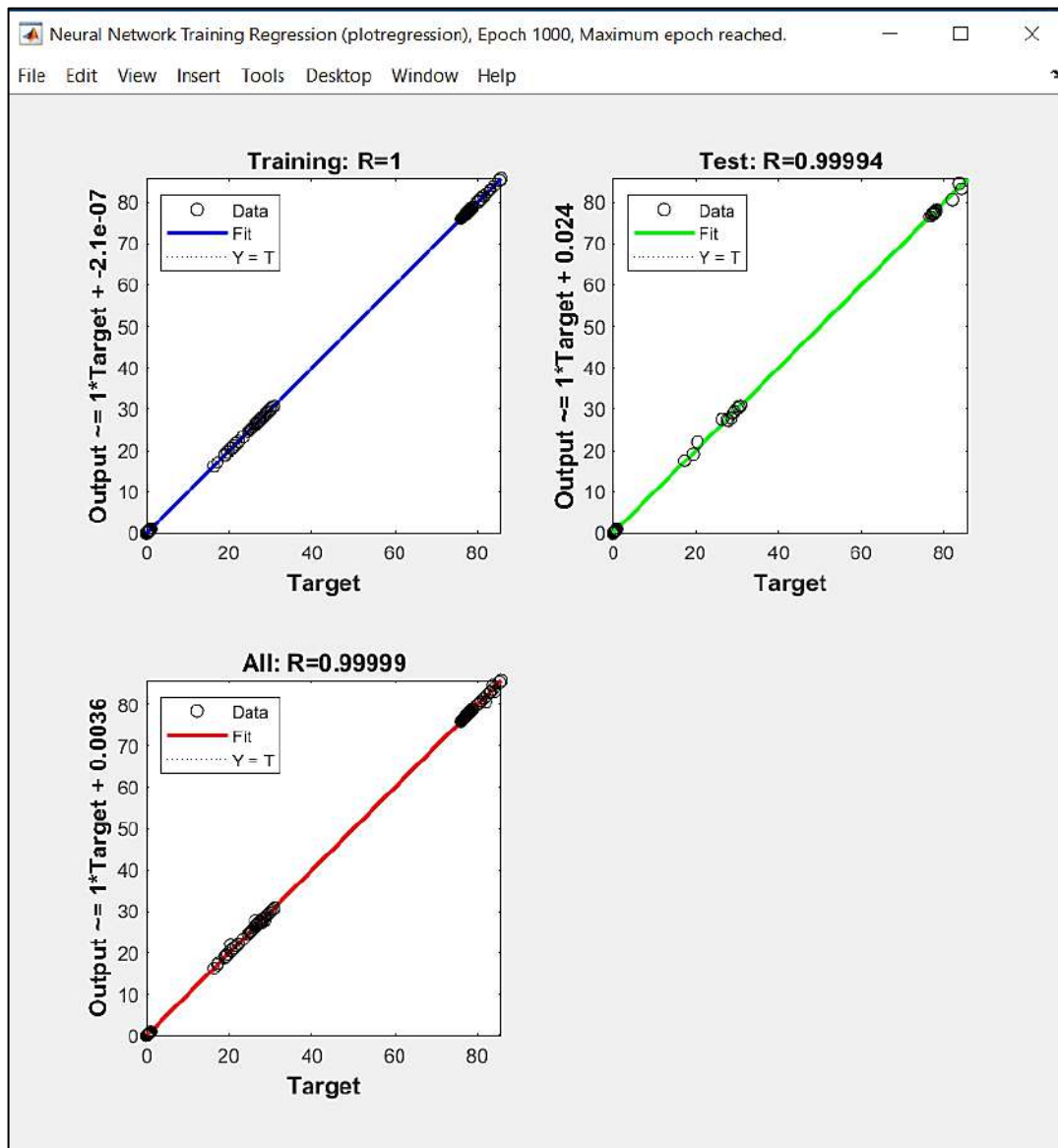


Gráfico 14-4: Regresión lineal de la etapa de entrenamiento y prueba

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se obtuvo una regresión lineal de $R= 1$ en la etapa de entrenamiento de la red neuronal artificial y un valor de $R= 0.99994$ en la etapa de prueba, lo cual es muy satisfactorio ya que es un valor muy cercano a 1, representa que existe una excelente correlación entre los datos de entrada de la base de datos y de la salida predichos por la red, lo cual es un buen indicio de que la red neuronal artificial diseñada tiene una gran eficiencia para predecir las variables de salida teniendo más confianza en la RNA.

4.8.1.2. Análisis del error cuadrático medio

En la siguiente gráfica se aprecia el error cuadrático medio obtenido de la Red Neuronal Artificial el cual fue de 2.4804×10^{-7} obtenido al momento de llegar a las 1000 épocas (número máximo de épocas) en la etapa de entrenamiento, presentar un error cuadrático medio muy cercano a 0 indica que existe un menor error entre los datos de variables de salida de la base de datos y los valores predichos por la RNA propuesta, proporcionando una mayor confiabilidad en la red diseñada.

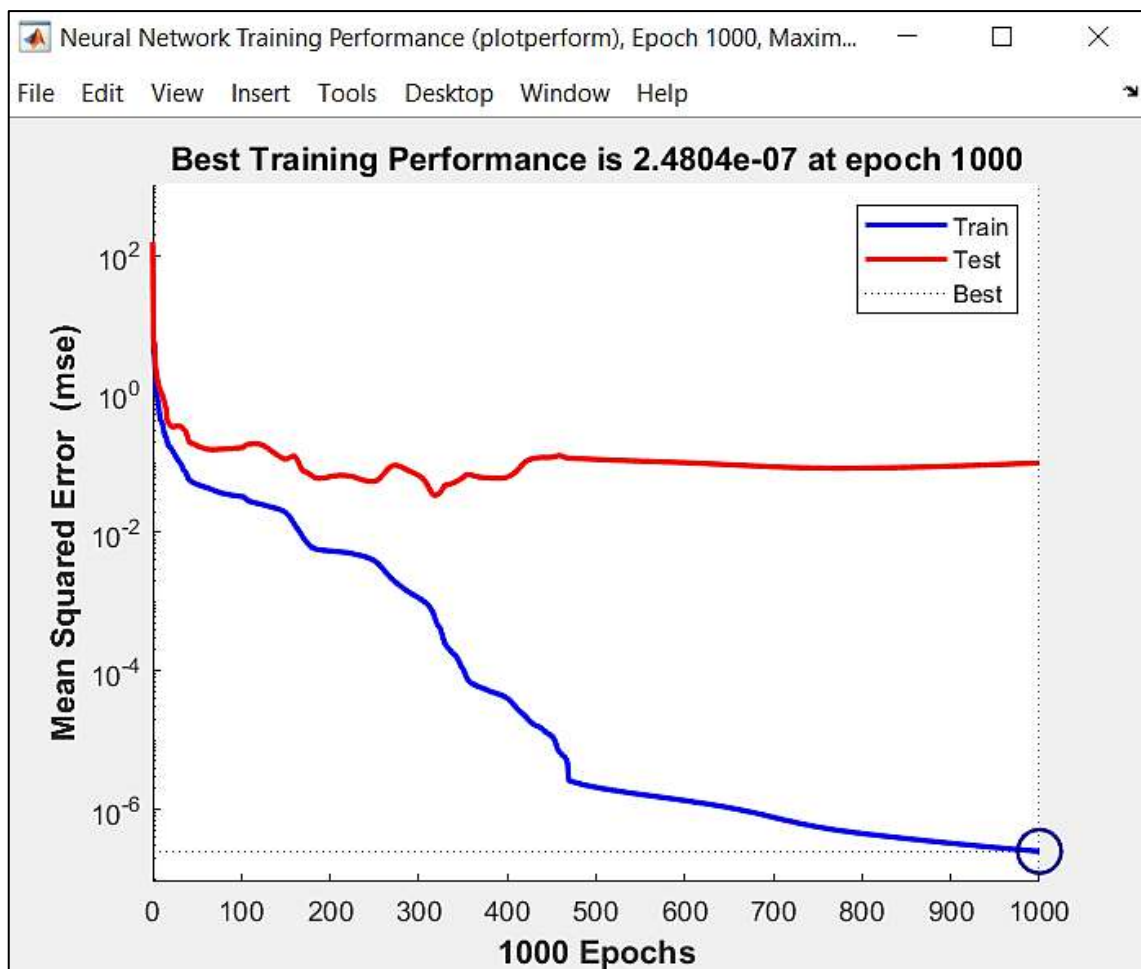


Gráfico 15-4: MSE de la red neuronal artificial

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

4.8.1.3. Histograma del error

A continuación se presenta la gráfica del histograma del error donde se aprecia un error con valor de 0.02319 con la presencia total en este error lo cual nos indica que la mayor cantidad de errores de los datos predichos se encuentran en estos valores, lo cual es algo bueno debido a que los valores de esos errores son sumamente bajos tanto para la etapa de entrenamiento como de prueba, el error más alto que se presenta es de -1.534 sin embargo tiene una baja frecuencia y además no es considerado un dato atípico debido a que presenta un error similar a los antes mencionados.

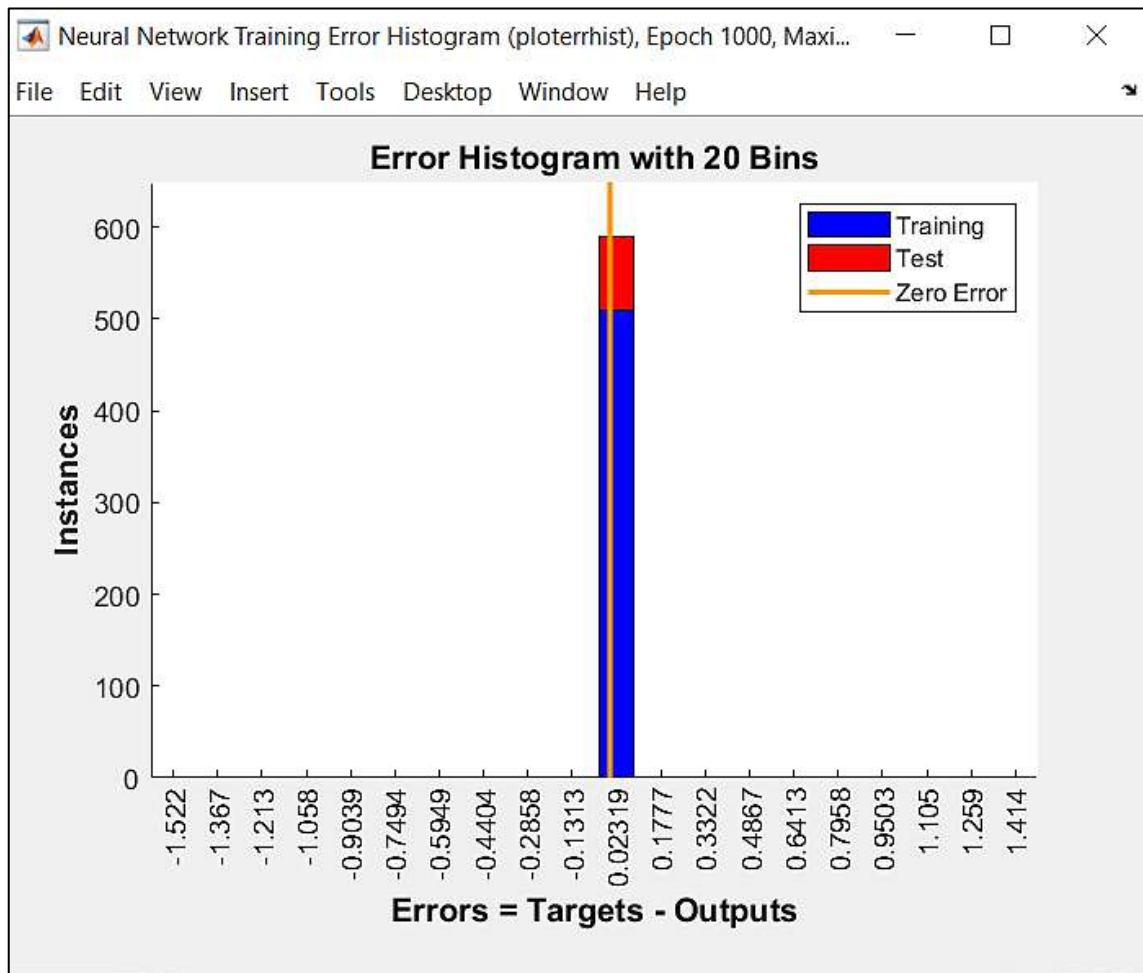


Gráfico 16-4: Histograma del error de la red neuronal artificial

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

4.8.2. Análisis gráfico de los resultados obtenidos de la RNA

4.8.2.1. Análisis gráfico de la validación interna

A continuación se detallara las gráficas elaboradas en Matlab de los resultados de DWSIM vs los predichos por la Red Neuronal Artificial, considerando las variables de fracción molar de acetona del destilado de la columna de extracción, fracción molar de la acetona, fracción molar de metanol y de agua del destilado de la torre de recuperación, así como los flujos molares de la línea de “Acetona” y “Metanol” en unidades de kmol/h con la finalidad de poder analizar y observar el error porcentual presente y su impacto en la eficacia de la RNA, los valores de dichas variables se encuentran en las tablas presentes en el apartado de ANEXOS.

En la siguiente gráfica se aprecia los resultados de DWSIM (línea azul) vs los resultados de la red neuronal artificial (línea roja) de la variable de salida de fracción molar de acetona del destilado de la columna de extracción, obteniendo de esta manera un error porcentual promedio de 0.081578902 % cuyo valor es pequeño, lo cual nos quiere decir que existe una pequeña diferencia entre los dos conjunto de resultados, lo cual se ve recalcado en la gráfica ya que ambas líneas se superponen totalmente entre sí.

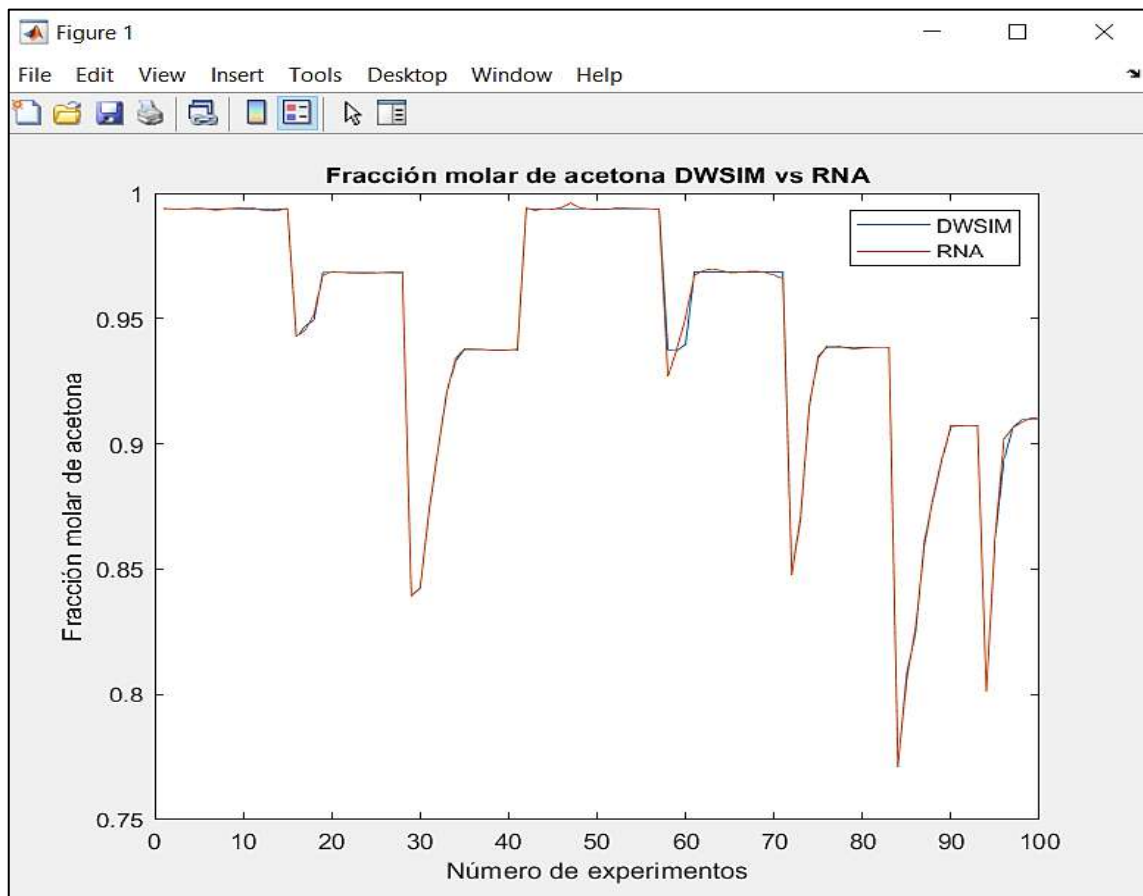


Gráfico 17-4: Resultados de fracción molar de acetona DWSIM vs RNA en C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

El error potencial promedio presente en la variable de fracción molar del destilado de la columna de recuperación es de solamente de 0.744474586 % manteniéndose dentro del margen del 5 % necesario para validar la red neuronal artificial, el valor del error porcentual se ve reflejado en la siguiente gráfica donde se observa que ambas líneas siguen la misma tendencia.

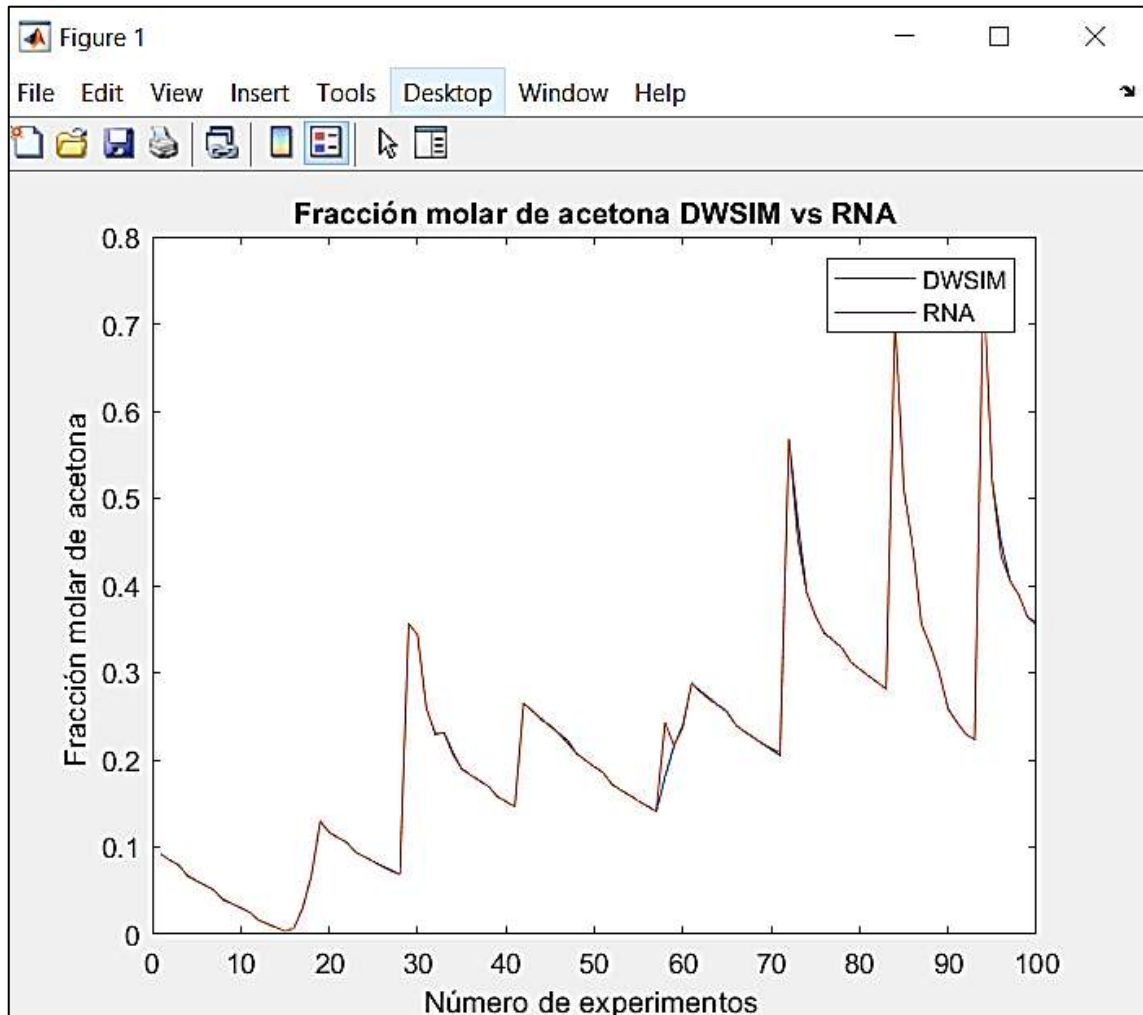


Gráfico 18-4: Resultados de fracción molar de acetona DWSIM vs RNA en C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En la siguiente Gráfica se aprecia los resultados de DWSIM (línea azul) vs los resultados predichos por la red neuronal artificial (línea roja) donde, se puede apreciar que las dos líneas siguen la misma tendencia y prácticamente se superponen la una con la otra, sin embargo, se presenta un error porcentual promedio de 3.830780971 % omitiendo algunos errores porcentuales proveniente de valores predichos por la RNA debido a que ciertos valores de la variable de fracción molar del agua del destilado de la columna de recuperación son demasiados pequeños, por lo cual al momento de calcular el error da un error excesivamente alto pero en realidad no

existe una diferencia significativa como por ejemplo 0.000633908 (RNA) y 0.000774718 (DWSIM) ambos prácticamente dan a entender que casi no existe nada de agua en el flujo del destilado de la columna de recuperación pero al tratarse de un valor sumamente pequeño cualquier diferencia mínima produce un error excesivamente alto.

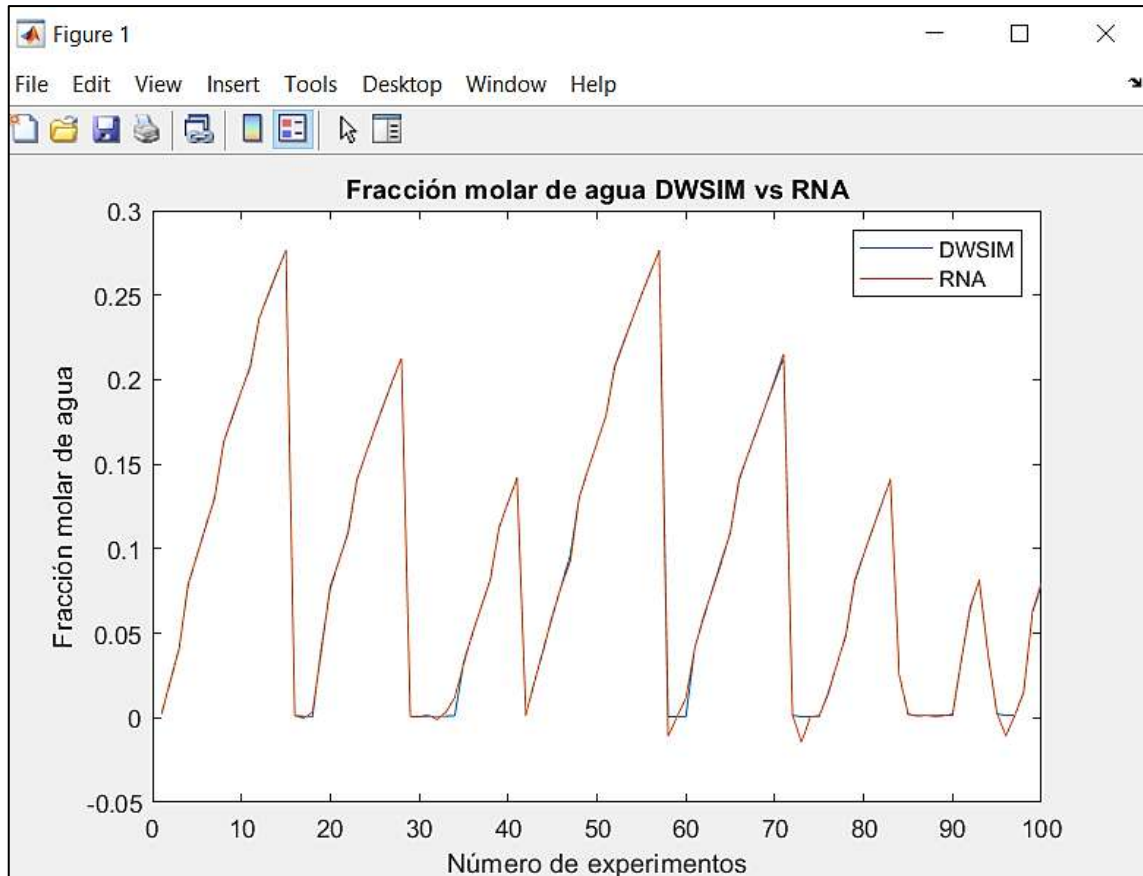


Gráfico 19-4: Resultados de fracción molar de agua DWSIM vs RNA en C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

El error porcentual promedio de la variable de fracción molar de metanol del destilado de la columna de recuperación es de 0.303184921 % lo cual es un valor de error extremadamente pequeño que está dentro del margen aceptable, en la siguiente gráfica se puede apreciar que las líneas de DWSIM y RNA siguen la misma tendencia y además se superponen prácticamente la una con la otra lo cual nos quiere decir que no existe una diferencia entre ambos.

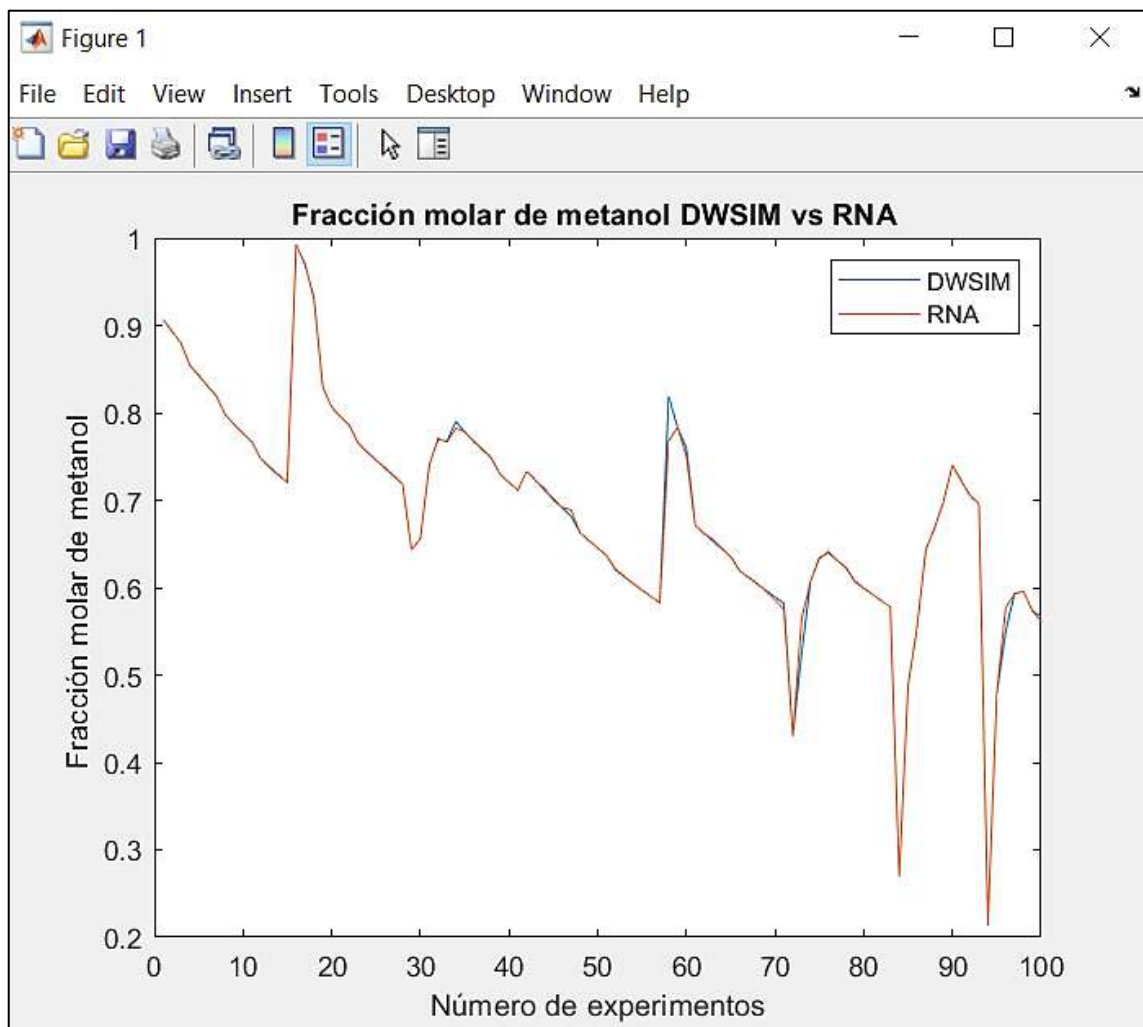


Gráfico 20-4: Resultados de fracción molar de metanol DWSIM vs RNA en C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En la siguiente gráfica se observa que la línea de resultados del flujo molar “Acetona” de la simulación en DWSIM (línea roja) y los resultados predichos por la red neuronal artificial (línea azul) se superponen una con otra y además prácticamente ambas siguen la misma tendencia, esto es debido a que se presenta un error porcentual promedio de 0.04426831 % lo cual nos indica que no hay una diferencia significativa en los resultados.

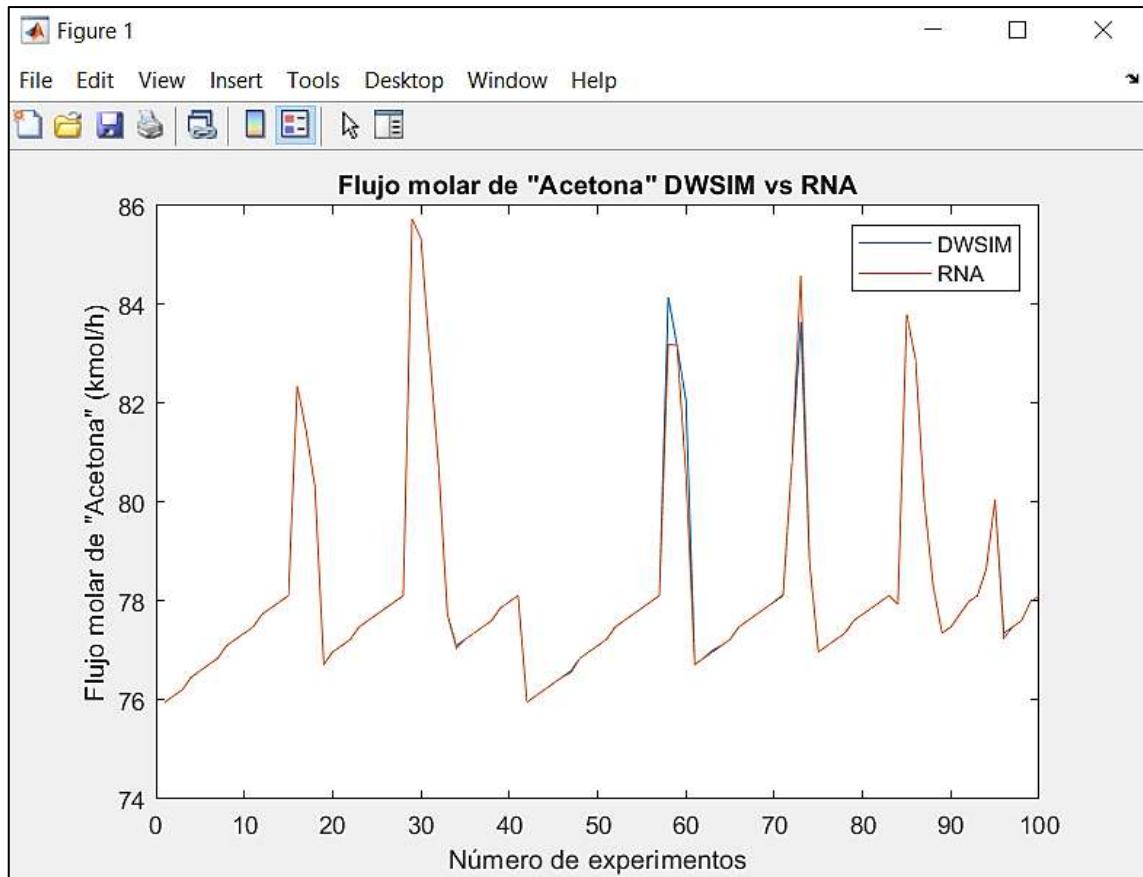


Gráfico 21-4: Resultados de flujo molar de “Acetona” DWSIM vs RNA en C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

El error porcentual promedio de la variable flujo molar de “Metanol” es 0.195588431 % lo cual es un valor sumamente pequeño por lo cual las líneas de DWSIM y RNA se superponen totalmente dando a entender que los valores de ambos son casi idénticos y la red neuronal artificial se acopla perfectamente al problema de estudio.

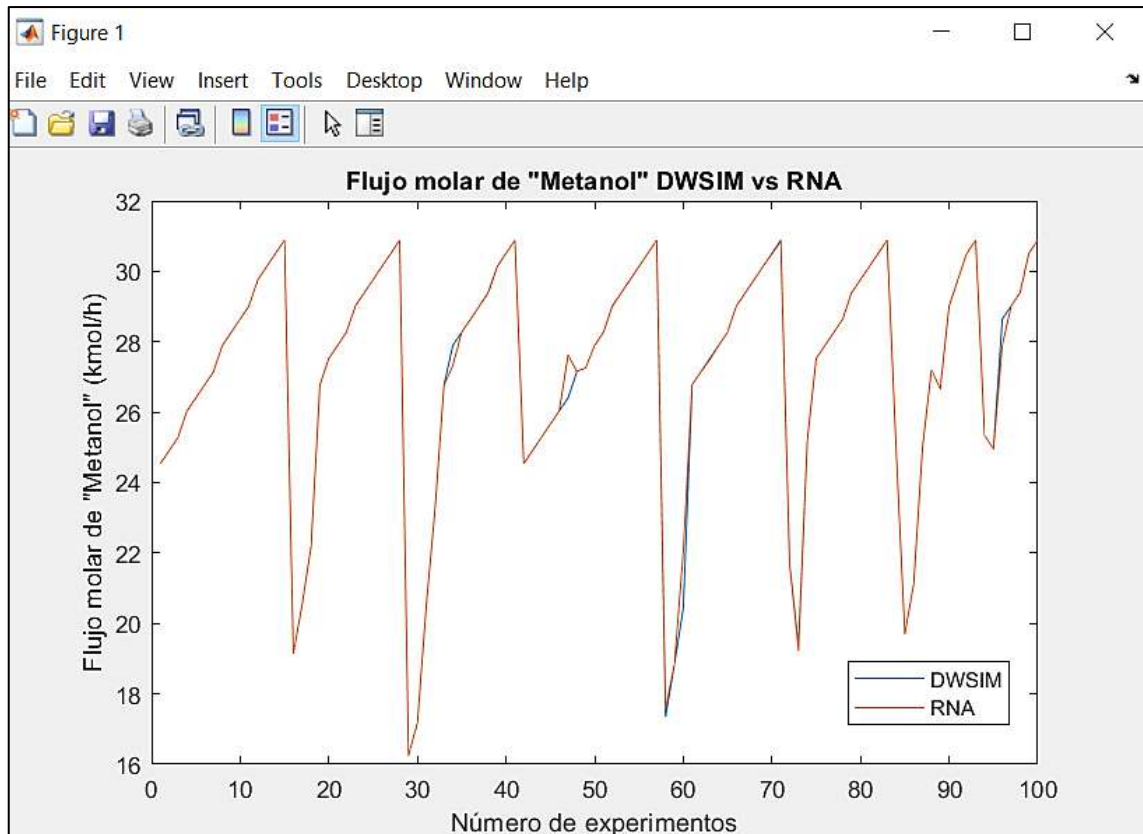


Gráfico 22-4: Resultados de flujo molar de “Metanol” DWSIM vs RNA en C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

1.1.1.3 Análisis gráfico de la validación externa

Se realizó una validación externa para comprobar el rendimiento de la Red Neuronal Artificial y asegurar que los resultados que prediga sean confiables, se utilizaron 17 pares de datos con sus respectivas variables de entrada y salida para llevar a cabo dicho análisis se calculó el error porcentual y su respectiva gráfica

En la variable de fracción molar de acetona de la columna de extracción se obtuvieron los siguientes resultados predichos por la red neuronal, la cual tuvo un error porcentual promedio de 0.24396055 % lo cual da a entender que no existe un error significativo entre los valores de la red y los de la simulación en DWSIM esto se logra apreciar en la gráfica donde se superponen.

Tabla 7-4: Resultados de las variables fracción molar de acetona y metanol (E)

$X_{C_6H_6O}$ (RNA)	$X_{C_6H_6O}$ (DWSIM)	Error (%)	X_{CH_3OH} (RNA)	X_{CH_3OH} (DWSIM)	Error (%)
0.99512325	0.99396352	0.11667714	0.86450805	0.86706445	0.2948339
0.99366221	0.99395882	0.02984169	0.80886024	0.80827415	0.0725109
0.99406811	0.99394803	0.0120807	0.75764438	0.75693017	0.09435655
0.95970897	0.96831044	0.88829639	0.8719024	0.84092056	3.68427621
0.96809493	0.96827669	0.01877188	0.77553123	0.77501531	0.06656861
0.85247885	0.84561193	0.81206521	0.67942277	0.66628383	1.97197363
0.93708734	0.93745085	0.03877656	0.73883381	0.73867687	0.02124583
0.9956469	0.99397399	0.16830497	0.67909617	0.67214299	1.0344791
0.99398089	0.99397302	0.00079195	0.62872982	0.62835938	0.05895398
0.96411962	0.96852918	0.4552846	0.70496749	0.68073339	3.55999806
0.96804104	0.96852535	0.05000483	0.62638872	0.62750642	0.17811734
0.89007321	0.89294927	0.32208585	0.59720914	0.58198758	2.61544485
0.93776612	0.93841415	0.0690561	0.61405652	0.61490871	0.13858873
0.84200307	0.8428951	0.1058297	0.58809087	0.60592567	2.94339803
0.90674133	0.90715008	0.04505848	0.72923082	0.73176169	0.34585938
0.88579742	0.87758399	0.93591416	0.50887929	0.51369308	0.93709369
0.90997639	0.90926272	0.07848918	0.59470857	0.58819079	1.10810612
Error porcentual promedio		0.24396055	Error porcentual promedio		1.12504735

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

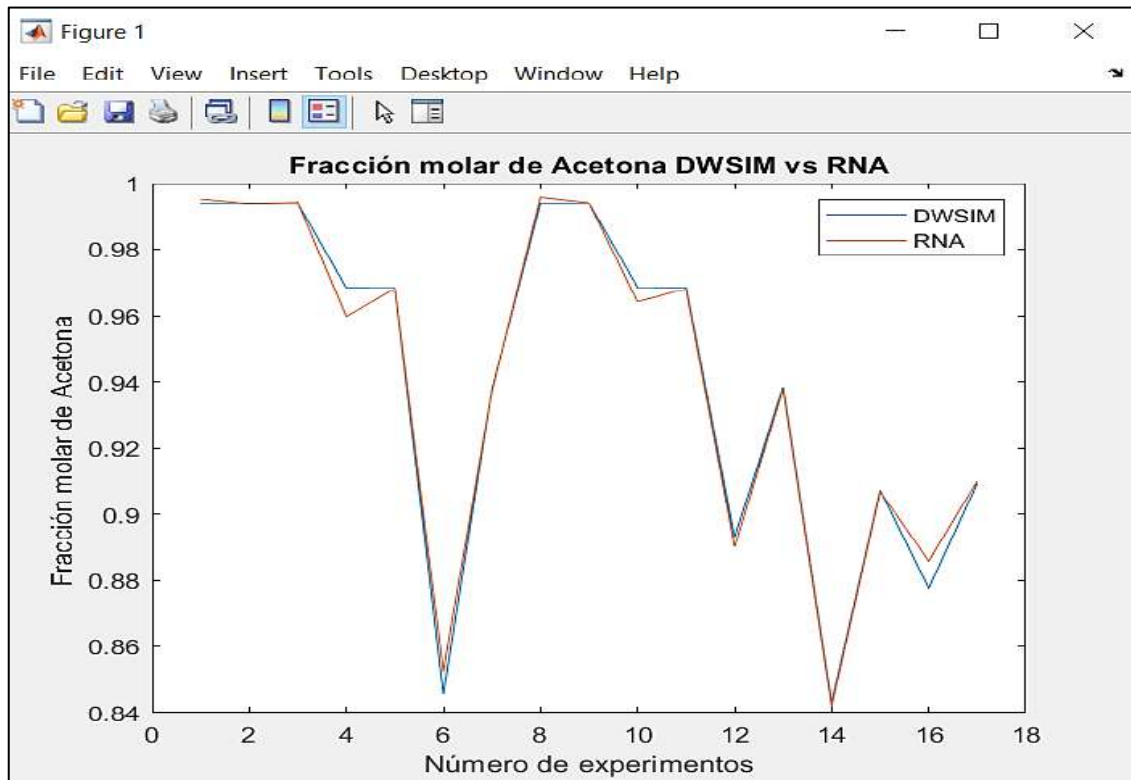


Gráfico 23-4: Resultados de fracción molar de acetona DWSIM vs RNA

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En la variable de fracción molar de metanol del destilado de la columna de recuperación se obtuvo un error máximo de 3.68427621% y un error porcentual promedio de 1.12504735%, en la gráfica de a continuación se observa que ambas líneas de RNA y DWSIM siguen la misma tendencia con pequeñas excepciones.

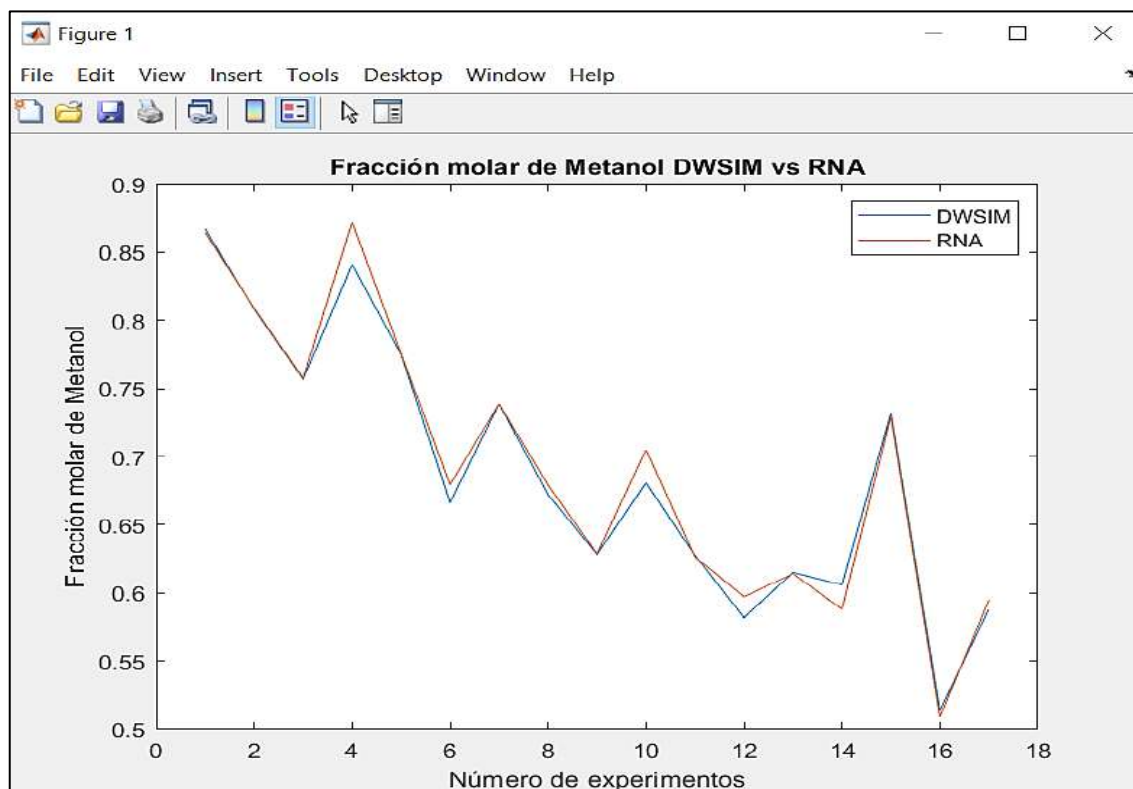


Gráfico 24-4: Resultados de fracción molar de metanol DWSIM vs RNA

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

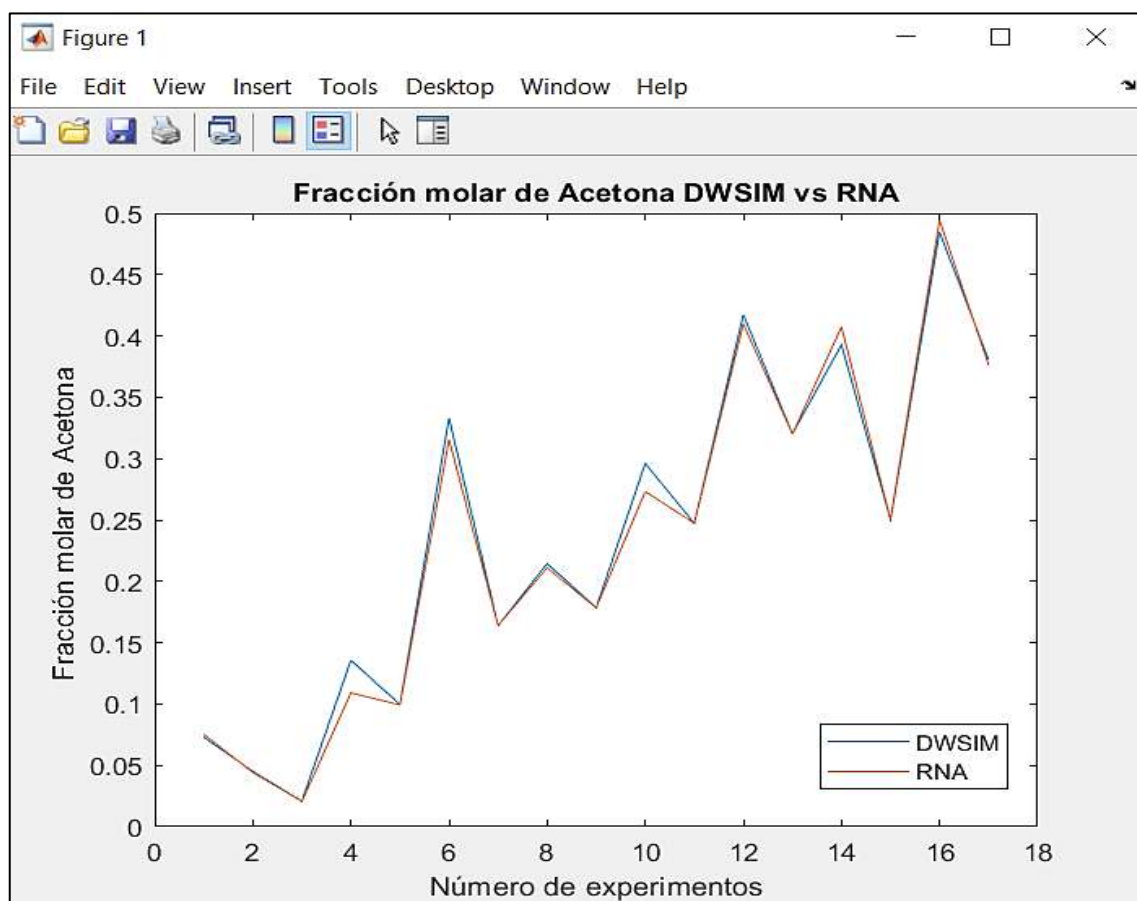
La variable de fracción molar de acetona del destilado de la columna de recuperación presenta un error porcentual promedio de 2.91242867 %, aunque presentan datos con valores de errores mayores, sin embargo, el error promedio está dentro del rango tolerable.

Tabla 8-4: Resultados de las variables fracción molar de acetona y agua (E)

$X_{C_6H_6O}$ (RNA)	$X_{C_6H_6O}$ (DWSIM)	Error (%)	X_{H_2O} (RNA)	X_{H_2O} (DWSIM)	Error (%)
0.07520206	0.07288668	3.17669406	0.05987983	0.06004887	0.28150399
0.04423903	0.04506247	1.82732517	0.14659802	0.14666338	0.04456284
0.02053031	0.02078744	1.23694833	0.22157635	0.22228239	0.31763042
0.10904635	0.13569055	19.6360044	0.01854804	0.02343281	20.8458536
0.09924532	0.09945456	0.21039322	0.12469953	0.12553013	0.66167623
0.31551988	0.33292494	5.22792226	0.00472507	0.00079123	0
0.16399667	0.16384512	0.09249851	0.09741516	0.09747801	0.06447503
0.21097117	0.21439539	1.59715095	0.11015582	0.11346161	2.91358019

0.17832865	0.1784305	0.05707991	0.19290865	0.19321012	0.15603242
0.27315589	0.29600568	7.71937515	0.02157297	0.02326093	7.25665977
0.24730613	0.2471515	0.06256349	0.12658979	0.12534208	0.99544419
0.40981088	0.41726214	1.78575051	-0.00609954	0.00075028	0
0.31998729	0.32014107	0.04803365	0.06581594	0.06495022	1.33289187
0.40734646	0.3927935	3.70499033	0.00424982	0.00128083	0
0.2503982	0.24998047	0.16710351	0.02043162	0.01825784	11.9060316
0.49410863	0.48463333	1.95514868	-0.00355373	0.00167358	0
0.37642492	0.38025141	1.00630521	0.0290272	0.0315578	8.01893269
Error porcentual promedio		2.91242867	Error porcentual promedio		3.22325146

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.



Gráfica 25-4: Resultados de fracción molar de acetona DWSIM vs RNA en C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

En la gráfica de la variable de fracción molar de agua se observa que las dos líneas de RNA (línea azul) y DWSIM (línea roja) se superponen casi totalmente una con la otra siguiendo la misma tendencia, sin embargo se presenta un error porcentual promedio de 3.22325146 % y se eliminaron ciertos errores porcentuales debido a que eran demasiado elevados ya que los valores de DWSIM y RNA son sumamente bajo como por ejemplo 0.00079123 y 0.00472507

respectivamente lo que ocasiona que se tenga un error porcentual grande por cualquier pequeña diferencia.

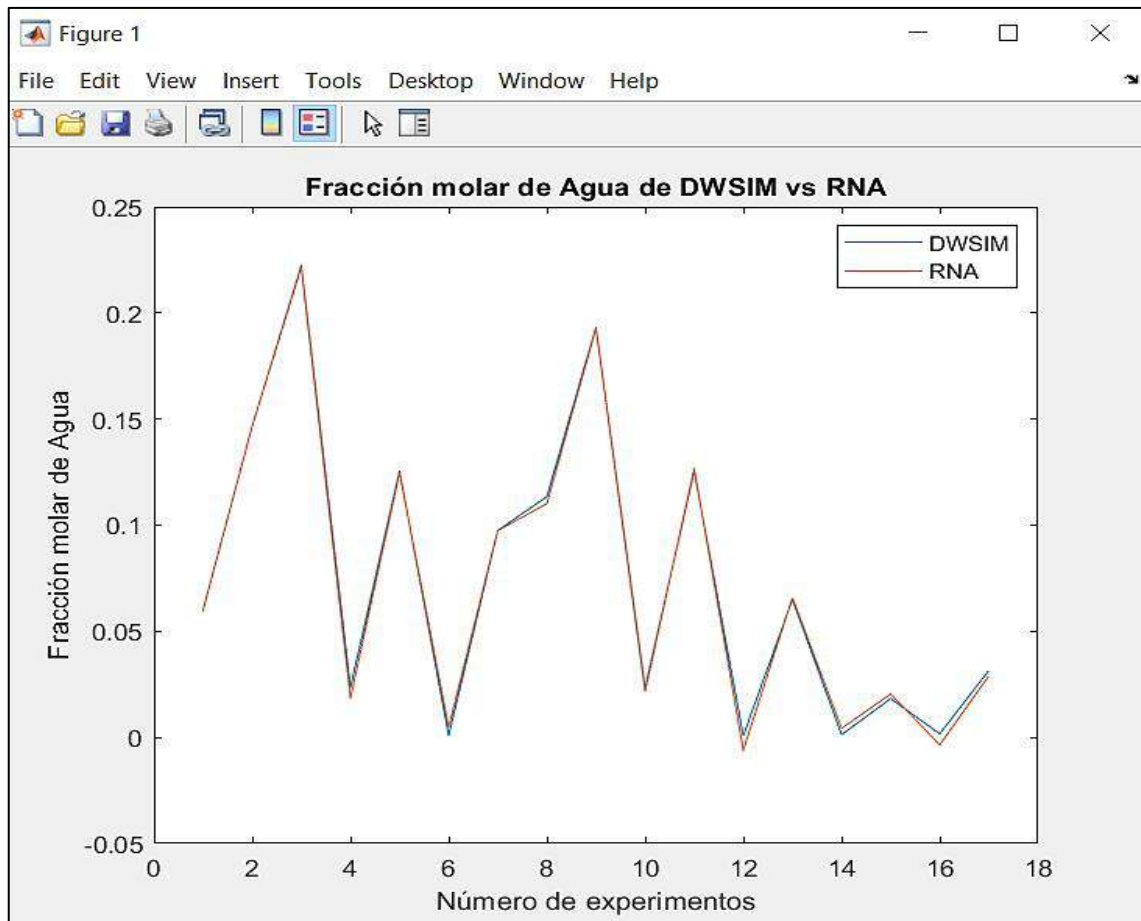


Gráfico 26-4: Resultados de fracción molar de agua DWSIM vs RNA

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Se presenta un error porcentual promedio de 0.5234992 % en la variable flujo molar de “Acetona” que es el destilado de la columna de extracción, tiene un error porcentual pequeño sin embargo presenta una pequeña variación en los experimentos 4, 10 y 16 de la base de datos.

Tabla 9-4: Resultados de las variables flujo molar de acetona y metanol (E)

Flujo molar "ACETONA" (RNA)	Flujo molar "ACETONA" (DWSIM)	Error (%)	Flujo molar "METANOL" (RNA)	Flujo molar "METANOL" (DWSIM)	Error (%)
76.1164553	76.3406	0.2936113	26.4005646	25.6594	2.8884719
76.9664032	76.9747	0.01077861	27.5417252	27.5253	0.0596732
77.6086595	77.6087	5.213E-05	29.3913454	29.3913	0.0001545
78.3093828	76.5942	2.23931161	24.9081549	26.4058	5.6716519
77.3570852	77.3551	0.00256631	28.6489665	28.6449	0.0141969
84.0208446	84.767	0.88024279	18.8203378	18.233	3.2212900
77.7347354	77.7355	0.00098359	29.7698032	29.7645	0.0178173

76.7587792	76.721	0.04924232	27.870261	26.779	4.0750626
77.3485518	77.3551	0.00846512	28.6211285	28.6449	0.082987
77.6449566	76.5942	1.37184879	26.2943427	26.4058	0.4220941
77.3550475	77.3551	6.7909E-05	28.6454372	28.6449	0.0018753
82.7504937	81.5943	1.41700307	20.3736474	21.9057	6.9938537
77.4816934	77.4819	0.00026669	29.0226717	29.0181	0.0157546
80.8207353	81.544	0.88696247	23.6989374	22.956	3.2363539
77.6157806	77.6087	0.00912343	29.6621149	29.3913	0.9214119
77.2097694	78.5625	1.72185276	27.046871	26.9375	0.4060174
77.7299751	77.7355	0.00710734	29.7805893	29.7645	0.0540554
Error porcentual promedio		0.5234992	Error porcentual promedio		1.6519248

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

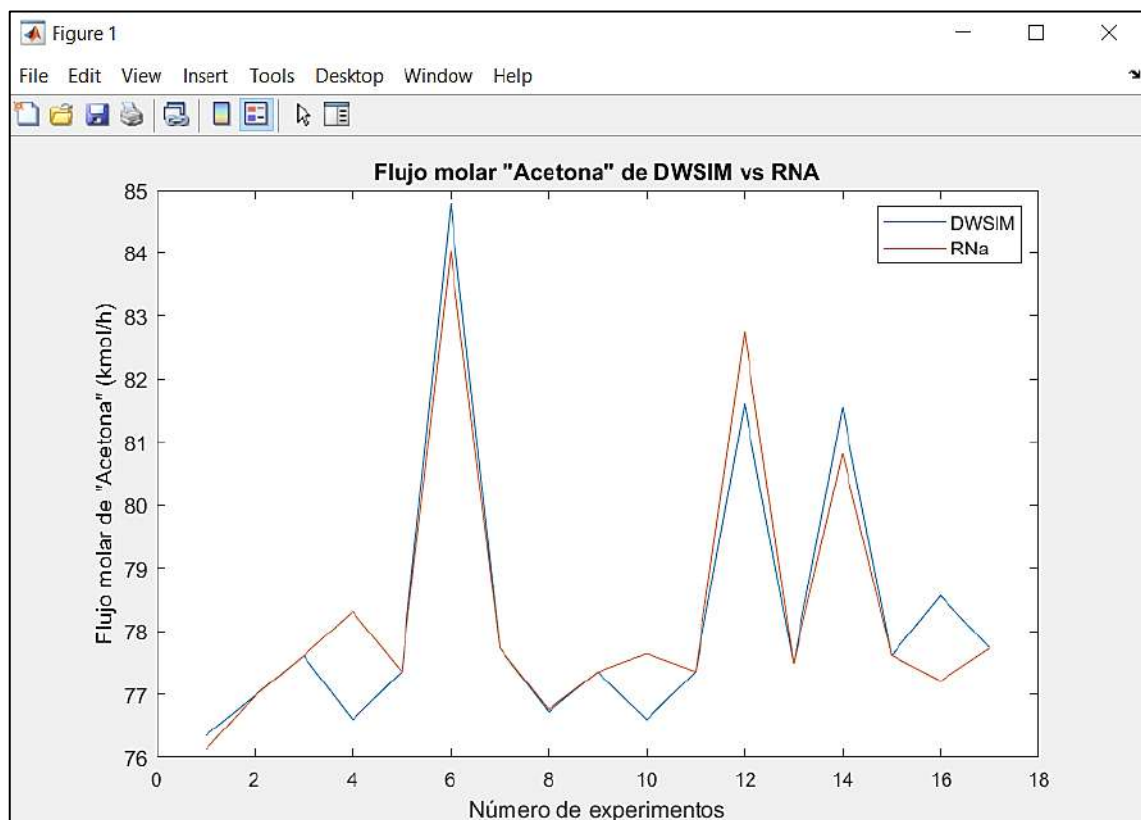


Gráfico 27-4: Resultados de flujo molar de “Acetona” DWSIM vs RNA en C-1

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

El error porcentual promedio de la variable flujo molar “Metanol” correspondiente al destilado de la columna de recuperación es 1.6519248 %, y que además la línea azul y roja se superponen casi totalmente por excepción del experimento 4 y 8 de la base de datos que experimentan una pequeña diferencia entre RNA y DWSIM.

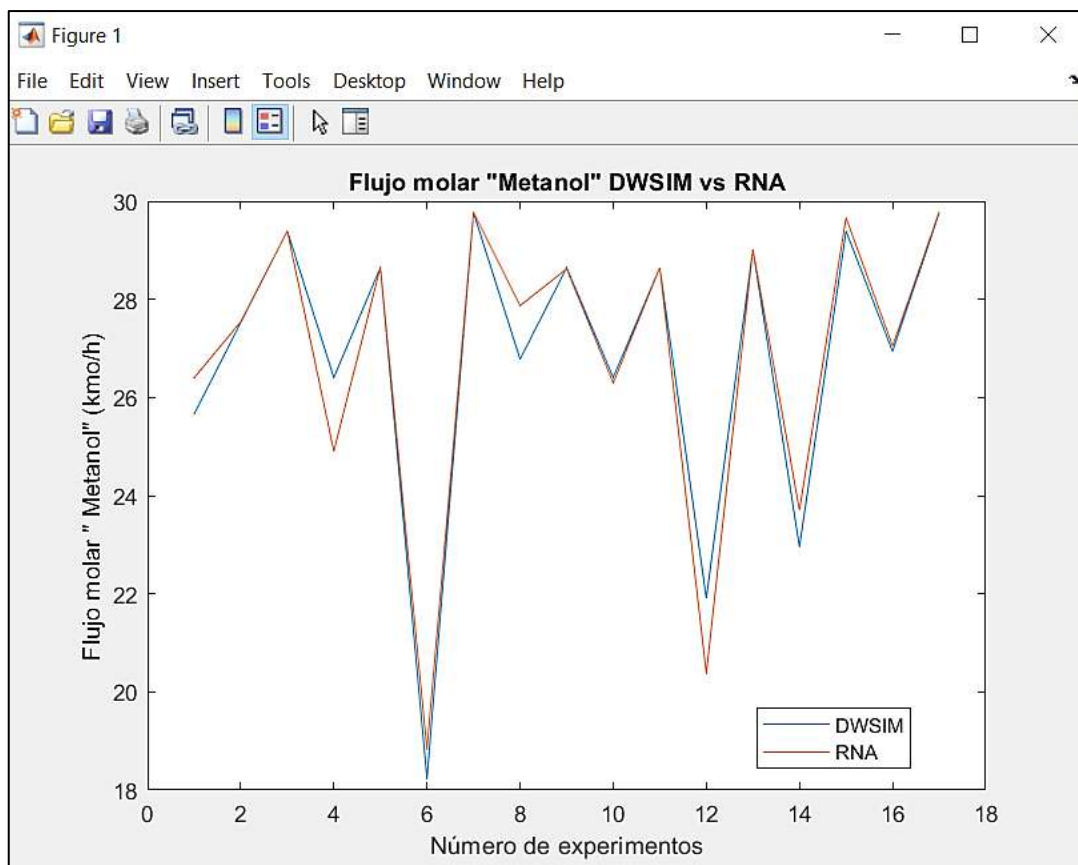


Gráfico 28-4: Resultados de flujo molar de “Metanol” DWSIM vs RNA en C-2

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

1.8 Análisis estadístico

Se realizó el estudio estadístico de los resultados predichos por la Red Neuronal Artificial y los resultados del Software DWSIM, para asegurar la capacidad de la red prediciendo nuevos experimentos para el proceso de “Concentración de la acetona mediante destilación extractiva de la mezcla azeotrópica acetona-metanol”

Se hace uso del software Statgraphics el cual es una potente herramienta de análisis de datos que además contiene 260 procedimientos estadísticos, pudiendo realizar análisis descriptivos de una o varias variables, mediante gráficos que explican la distribución o medidas características

En las siguientes tablas de resumen estadístico se puede observar la desviación estándar, coeficiente de variación, los mínimos, máximos, sesgo estandarizado y curtosis estandarizada, donde se resalta el estudio de los dos últimos los cuales debe mantener un rango de -2 a +2 para presentar una distribución normal, en los casos de fracciones molares de acetona, metanol, agua y acetona C-2 se mantienen dentro del rango, sin embargo las variables de flujo molar de “Acetona” y “Metanol” se encuentran fuera del rango por lo cual se procede a realizar la prueba de Kruskal-Wallis para analizar la presencia de datos atípicos.

Tabla 10-4: Resumen estadístico de fracción molar de acetona y metanol

Variables	Fracción molar de acetona RNA	Fracción molar de acetona DWSIM	Total	Fracción molar de metanol RNA	Fracción molar de metanol DWSIM	Total
Recuento	17	17	34	17	17	34
Promedio	0.940845	0.940869	0.940857	0.692239	0.68814	0.69018
Desviación estándar	0.0512962	0.0525934	0.051155	0.102562	0.0994908	0.09951
Coefficiente de variación	5.45%	5.59%	5.44%	14.82%	14.46%	14.42%
Mínimo	0.842003	0.842895	0.842003	0.508879	0.513693	0.50887
Máximo	0.995647	0.993974	0.995647	0.871902	0.867064	0.87190
Rango	0.153644	0.151079	0.153644	0.363023	0.353371	0.36302
Sesgo estandarizado	-1.05141	-1.15262	-1.48659	3.76E-01	0.401735	0.52758
Curtosis estandarizada	-0.670068	-0.672488	-1.02867	-0.533447	-0.636083	-0.9186

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Tabla 11-4: Resumen estadístico de las variables fracción molar de acetona y agua

Variables	Fracción molar de acetona RNA	Fracción molar de acetona DWSIM	Total	Fracción molar de agua RNA	Fracción molar de agua DWSIM	Total
Recuento	17	17	34	17	17	34
Promedio	0.235036	0.238335	0.236686	0.07262	0.0735278	0.0730739
Desviación Estándar	0.140089	0.138619	0.137238	0.0713374	0.0709029	0.0700361
Coefficiente de variación	59.60%	58.16%	57.98%	98.23%	96.43%	95.84%
Mínimo	0.020530	0.0207874	0.020530	-0.006099	0.0007503	-0.006099
Máximo	0.494109	0.484633	0.494109	0.221576	0.222282	0.222282
Rango	0.473578	0.463846	0.473578	0.227676	0.221532	0.228382
Sesgo estandarizado	0.256194	0.105375	0.244006	1.22703	1.25014	1.66708
Curtosis estandarizada	-0.78159	-0.851061	-1.20573	-43.98%	-42.14%	-74.13%

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Tabla 11-4: Resumen estadístico de las variables flujo molar de acetona y metanol

Variables	Flujo molar "Acetona" RNA	Flujo molar "Acetona" DWSIM	Total	Flujo molar "Metanol" RNA	Flujo molar "Metanol" DWSIM	Total
Recuento	17	17	34	17	17	34
Promedio	78.2841	78.2311	78.2576	78.2841	78.2311	78.2576
Desviación estándar	2.15598	2.26434	2.17723	2.15598	2.26434	2.17723
Coefficiente de variación	2.75%	2.89%	2.78%	2.75%	2.89%	2.78%
Mínimo	76.1165	76.3406	76.1165	76.1165	76.3406	76.1165
Máximo	84.0208	84.767	84.767	84.0208	84.767	84.767
Rango	7.90439	8.4264	8.65054	7.90439	8.4264	8.65054
Sesgo estandarizado	3.24591	3.38421	4.46865	3.24591	3.38421	4.46865
Curtosis estandarizada	2.44811	3.07589	3.13309	2.44811	3.07589	3.13309

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

La tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente dentro-de-grupos y otro componente entre-grupos. La razón-F en todos los casos tiene un valor muy cercano a 0. Debido a que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0.05 en todos los casos de las variables analizadas, no presenta una diferencia estadísticamente significativa entre las medias, con un nivel del 95.0% de confianza.

Tabla 12-4: ANOVA

Variables	Fuente	Suma de cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón F	Valor-P
Fracción molar de acetona	Entre grupos	4.88E-09	1	4.88E-09	0	0.9989
	Intra grupos	0.0863578	32	0.00269868		
	Total	0.0863578	33			
Fracción molar de metanol	Entre grupos	0.00014283	1	0.00014283	0.01	0.9066
	Intra grupos	0.326678	32	0.0102087		
	Total	0.32682	33			
Fracción molar de acetona	Entre grupos	9.2495E-05	1	9.2495E-05	0	0.9454
	Intra grupos	0.62144	32	0.01942		
	Total (Corr.)	0.621533	33			
Fracción molar de agua	Entre grupos	7.0039E-06	1	7.0039E-06	0	0.9705
	Intra grupos	0.16186	32	0.00505812		
	Total (Corr.)	0.161867	33			
	Entre grupos	0.0238897	1	0.0238897	0	0.9447

Flujo molar "Acetona"	Intra grupos	156.407	32	4.88772		
	Total (Corr.)	156.431	33			
Flujo molar "Metanol"	Entre grupos	0.0238897	1	0.0238897	0	0.9447
	Intra grupos	156.407	32	4.88772		
	Total (Corr.)	156.431	33			

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

En la siguiente tabla se muestra la media para cada una de las variables de estudio, así como el error estándar de cada media, límite inferior y superior. Los intervalos están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95.0% de las veces lo cual es el nivel de confianza que existe entre los datos.

Tabla 13-4: Medias con intervalos de confianza 95 %

Variables	Casos	Media	Error Est.	Límite inferior	Límite superior
Fracción molar de acetona RNA	17	0.940845	0.0125994	0.922698	0.958993
Fracción molar de acetona DWSIM	17	0.940869	0.0125994	0.922722	0.959017
TOTAL	34	0.940857			
Fracción molar de metanol RNA	17	0.692239	0.0245053	0.656943	0.727535
Fracción molar de metanol DWSIM	17	0.68814	0.0245053	0.652844	0.723435
TOTAL	34	0.690189			
Fracción molar de acetona RNA	17	0.235036	0.0337987	0.186355	0.283718
Fracción molar de acetona DWSIM	17	0.238335	0.0337987	0.189654	0.287016
TOTAL	34	0.236686			
Fracción molar de agua RNA	17	0.07262	0.0172492	0.0477754	0.0974647
Fracción molar de agua DWSIM	17	0.0735278	0.0172492	0.0486831	0.0983724
TOTAL	34	0.0730739			
Flujo molar "Acetona" RNA	17	78.2841	0.536203	77.5118	79.0564
Flujo molar "Acetona" DWSIM	17	78.2311	0.536203	77.4588	79.0034
TOTAL	34	78.2576			
Flujo molar "Metanol" RNA	17	78.2841	0.536203	77.5118	79.0564
Flujo molar "Metanol" DWSIM	17	78.2311	0.536203	77.4588	79.0034
TOTAL	34	78.2576			

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

Debido a la preocupación por la presencia de datos atípicos se hace uso de la prueba de Kruskal-Wallis la cual evalúa la hipótesis nula de la mediana dentro de cada una de las columnas de cada uno.

Se presenta un valor-P mayor a 0.05 en cada caso de las variables que se analizan (fracciones molares y flujos molares) por lo cual no existe la presencia de datos atípicos en los datos predichos por Red Neuronal Artificial y DWSIM.

Tabla 14-4: Prueba de Kruskal-Wallis

Variable	Tamaño de muestra	Rango promedio	Estadístico	Valor-P
Fracción molar de acetona RNA	17	17.4118	0.0026693	0.958795
Fracción molar de acetona DWSIM	17	17.5882		
Fracción molar de metanol RNA	17	17.7647	0.0240237	0.876825
Fracción molar de metanol DWSIM	17	17.2353		
Fracción molar de acetona RNA	17	17.2841	0.0145329	0.904046
Fracción molar de acetona DWSIM	17	17.7059		
Fracción molar de agua RNA	17	17.2353	0.0240237	0.876825
Fracción molar de agua DWSIM	17	17.7647		
Flujo molar "Acetona" RNA	17	17.8824	0.0501772	0.822755
Flujo molar "Acetona" DWSIM	17	17.1176		
Flujo molar "Metanol" RNA	17	17.8824	0.0501772	0.822755
Flujo molar "Metanol" DWSIM	17	17.1176		

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021.

CONCLUSIONES

- Mediante el uso de DWSIM se simuló un sistema de destilación extractiva que sirvió para obtener una base de datos que se implementó en la RNA creada en MATLAB con el propósito de entrenarla y ajustarla con el menor error posible, prediciendo de esta manera la concentración de acetona obtenida de una mezcla azeotrópica acetona metanol.
- Se simuló el sistema de destilación extractiva para la predicción de la concentración de acetona presente en una mezcla azeotrópica acetona-metanol en el software DWSIM, cuyo proceso fue propuesto por Gil et al. (2009), la simulación logró presentar resultados muy idénticos a los valores establecidos en la fuente bibliográfica, obteniendo de esa manera errores porcentuales con valores como 1.39008163 %, 1.25220181 %, 0.94719767 % entre otros más que se mantenían dentro del rango tolerable del 10 %, con los cuales se validó la simulación realizada, lo cual se usó como base para el diseño de la Red Neuronal Artificial en Matlab.
- En el Software Matlab y su aplicación Neural Net Fitting se diseñó la Red Neuronal Artificial con 55 neuronas en la capa oculta mediante la implementación del algoritmo matemático “Regularización Bayesiana”, a partir de una base de datos de 117 pares, donde 100 datos fueron destinados a la etapa de entrenamiento y validación interna mientras que los 17 restantes a una validación externa de la red, se utilizaron 3 variables de entradas siendo presión, relación de solvente/alimentación y fracción molar de acetona en la alimentación mientras que se establecieron 6 salidas siendo fracción molar de acetona y el flujo molar del destilado de la columna de extracción, la fracción molar de acetona, metanol y agua del destilado de la columna de recuperación así como también su flujo molar.
- La cantidad de acetona extraída por el sistema de destilación propuesta es de 76.087 kmol/h y la cantidad de metanol recuperado que se logró es de 24.913 kmol/h a partir de 100 kmol/h de mezcla azeotrópica de Acetona-Metanol.
- Se validó el funcionamiento de la red neuronal artificial, mediante el error cuadrático medio de 2.4804×10^{-7} , una regresión lineal en el entrenamiento de $R=1$, además se implementó una validación externa donde se consiguió errores porcentuales con valores máximos de 3.22 % el cual es un error sumamente pequeño, y además se llevó a cabo un análisis estadístico donde se puede decir que se tiene un valor de confiabilidad general del 95 % por lo cual no existe una diferencia significativa entre los datos predichos vs simulados además no presenta datos atípicos en los resultados.

RECOMENDACIONES

- Al momento de validar la red realizar una validación externa para observar cómo reacciona la red neuronal artificial diseñada ante nuevos valores que no estaban presentes en la base de datos de entrenamiento debido a que ahí se pueden presentar datos atípicos o errores porcentuales sumamente altos.
- Llevar a cabo varios experimentos cambiando el número de neuronas y el algoritmo matemático utilizado para conseguir que nuestra RNA sea sumamente confiable al momento de predecir nuevos valores, mediante la ayuda del error porcentual promedio, histograma de error y gráficas de RNA vs DWSIM.
- Realizar la simulación en diferentes versiones de DWSIM ya que en muchas versiones a veces no funciona el proceso químico que se quiere simular por problemas en las actualizaciones del software.
- Llevar estudios sobre nuevas variables de operación del proceso para observar la influencia que estas tienen en la obtención de Acetona y Metanol de la mezcla azeotrópica mejorando su obtención.

BIBLIOGRAFÍA

CLARISSA; ET AL, 2017. Chemicals from ethanol: The acetone synthesis from ethanol employing Ce_{0.75}Zr_{0.25}O₂, ZrO₂ and Cu/ZnO/Al₂O₃. *Chemistry Central Journal*, vol. 11, no. 1, pp. 1. ISSN 1752153X. DOI 10.1186/s13065-017-0249-5.

DIANA; ET AL, 2010. Vapor - Liquid Equilibrium in Extractive Distillation of the Acetone / Methanol System Using Water as Entrainer and Pressure Reduction. , pp. 1.

FRANCESCO; ET AL, 2018. *Methanol Production and Applications: An Overview*. S.I.: Elsevier B.V. ISBN 9780444640109.

FRANCISCO; ET AL, 2003. Información tecnológica Separación de la Mezcla Azeotrópica Acetona-Metanol con Cloruro de Litio Separation of an Azeotropic Acetone - Methanol Mixture Using Lithium. *Información Tecnológica*, vol. 15, no. December, pp. 3. DOI 10.4067/S0718-07642004000200020.

GERBAUD, V. & RODRIGUEZ-DONIS, I., 2019. Advances in Extractive Distillation. *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, no. February, pp. 1-7. DOI 10.1016/b978-0-12-409547-2.05949-7.

GIL; ET AL, 2009. Extractive distillation of acetone/methanol mixture using water as entrainer. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 48, no. 10, pp. 4858-4865. ISSN 08885885. DOI 10.1021/ie801637h.

GRACZOVÁ, E. & VAVRUŠOVÁ, M., 2018. Extractive Distillation of Acetone – Methanol Mixture using 1-. , vol. 70, no. 2007, pp. 1. DOI 10.3303/CET1870199.

HANSEN, H. & WILBUR, S., 1994. Toxicological Profile for Acetone. *Agency for Toxic Substances and Disease Registry*, no. May, pp. 190. DOI 10.1201/9781420061888_ch24.

MA, S. & LI, S., 2012. Comment on «boiling points of ternary azeotropic mixtures modeled with the use of the universal solvation equation and neural networks». *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 52, no. 1, pp. 1-5. ISSN 08885885. DOI 10.1021/ie302909b.

MEDEIROS, D., 2020a. DWSIM - Open Source Chemical Process Simulator User Guide. , no. October, pp. 11.

MEDEIROS, D., 2020b. DWSIM - Open Source Process Simulator Web Site. .

MOHAMED; ET AL, 2017. *Production of Acetone from isopropanol*. S.l.: s.n.

NEAMAH, A.I., 2017. Acetone Production. *The Hilltop Review*, vol. 9, no. 2, pp. 5. ISSN 2151-7401.

NEVES; ET AL, 2020. ANN-based intelligent control system for simultaneous feed disturbances rejection and product specification changes in extractive distillation process. *Separation and Purification Technology*, vol. 259, pp. 20. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.118104.

PAUL; ET AL, 2004. Simulation and optimisation of extractive distillation with water as solvent. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 44, no. 3, pp. 1. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2004.05.008.

VARELA, E. & CAMPBELLS, E., 2011. Redes Neuronales Artificiales: Una Revisión del Estado del Arte, Aplicaciones y Tendencias Futuras. *Investigación y Desarrollo en TIC*, vol. 2, no. 1, pp. 18-27.

VILLANUEVA, M. del R., 2002. *Universidad Nacional Mayor de San Marcos*. S.l.: Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

ANEXOS

ANEXO A. ERRORES PORCENTUALES DE FRACCIÓN MOLAR DE ACETONA Y METANOL

XC6H6O-C1 (RNA)	XC6H6O (DWSIM)	Error	XCH3OH (RNA)	XCH3OH (DWSIM)	Error
0.993935053	0.99396529	0.003042	0.903683404	0.90662667	0.3246392
0.994336772	0.99396476	0.037427	0.895395569	0.89304442	0.2632734
0.994157337	0.99396417	0.019434	0.881375366	0.87986285	0.1719036
0.994049813	0.99396279	0.008755	0.855267403	0.8546328	0.0742545
0.99309713	0.99396198	0.087010	0.840599484	0.84255228	0.2317714
0.993142001	0.99396107	0.082404	0.828485652	0.83080811	0.2795420
0.99386856	0.99396003	0.009202	0.818358896	0.81938639	0.1253979
0.995541041	0.99395746	0.159320	0.799067157	0.7974581	0.2017732
0.995818664	0.99395582	0.187417	0.788254836	0.78692706	0.1687292
0.995659453	0.99395383	0.171599	0.776777748	0.77666936	0.0139554
0.995210798	0.99395132	0.126714	0.765255787	0.76667399	0.1849812
0.994145979	0.99394345	0.020376	0.74452334	0.74742696	0.3884821
0.993763398	0.99393639	0.017404	0.736022505	0.73815209	0.2885022
0.993533206	0.99392329	0.039246	0.728852311	0.72908717	0.0322127
0.993438755	0.99385348	0.041728	0.722877924	0.720004	0.3991538
0.941048344	0.94248284	0.152203	0.997697559	0.99216517	0.5576076
0.948724934	0.94708644	0.173003	0.965352927	0.96931136	0.4083758
0.938662188	0.94942539	1.133654	0.887604594	0.93184928	4.7480517
0.964356573	0.96831037	0.408319	0.830395439	0.82915195	0.1499711
0.969521552	0.96829845	0.126314	0.810946526	0.80662175	0.5361591
0.969019317	0.9682917	0.075144	0.796897418	0.79580658	0.1370733
0.968332578	0.96828448	0.004967	0.78397769	0.78527478	0.1651765
0.967287267	0.96826826	0.101314	0.762353165	0.76501747	0.3482672
0.9669612	0.96825913	0.134047	0.75315756	0.75527103	0.2798293
0.966714224	0.9682492	0.158531	0.744622892	0.74576626	0.1533144
0.966495116	0.96823836	0.180042	0.736446669	0.73649393	0.0064170
0.966258038	0.96822655	0.203311	0.728363244	0.72744481	0.1262547
0.965967599	0.96821357	0.231970	0.720154639	0.7186106	0.2148644
0.837660576	0.83934349	0.200503	0.643181784	0.64332121	0.0216728
0.869512464	0.84208894	3.256606	0.753294644	0.65592065	14.845392
0.874714576	0.87265823	0.235641	0.741281422	0.73966341	0.2187498
0.897931083	0.89703361	0.100048	0.76194187	0.7695513	0.9888138
0.923024224	0.92043426	0.281385	0.76435394	0.76733448	0.3884277
0.934266684	0.93296391	0.139638	0.78054446	0.79036779	1.2428808
0.9375105	0.93750264	0.000838	0.779011939	0.77793888	0.1379362
0.937964936	0.93749086	0.050568	0.769876241	0.76774428	0.2776915
0.937731617	0.93747831	0.027019	0.759349338	0.75780907	0.2032527

0.937371465	0.93746498	0.009975	0.749022696	0.74812311	0.1202457
0.936641046	0.93743587	0.084787	0.729578699	0.7294613	0.0160939
0.936270689	0.93742	0.122603	0.720189879	0.72046774	0.0385667
0.935866145	0.93740319	0.163968	0.710688077	0.71168795	0.1404932
1.005071713	0.99397491	1.116406	0.923389885	0.7334714	25.893100
0.992963755	0.99397481	0.101718	0.719514054	0.72248441	0.4111307
0.994320701	0.99397469	0.034810	0.713759091	0.71182165	0.2721807
0.993696043	0.99397455	0.028019	0.70535102	0.70146901	0.5534114
0.992770965	0.99397437	0.121070	0.69307627	0.69141349	0.2404899
0.992465023	0.99397418	0.151836	0.680714953	0.68164211	0.1360182
0.993537548	0.9939738	0.043889	0.661473608	0.66290494	0.2159182
0.994385016	0.99397361	0.041390	0.653638921	0.65391733	0.0425756
0.994964237	0.99397342	0.099682	0.645605619	0.64517013	0.0674999
0.995219007	0.99397322	0.125334	0.637186039	0.63665382	0.0835963
0.99512634	0.99397282	0.116051	0.620144979	0.62027826	0.0214873
0.994968805	0.99397261	0.100223	0.612025242	0.61240232	0.0615735
0.994810247	0.9939724	0.084292	0.604362247	0.60472386	0.0597979
0.994671919	0.99397219	0.070397	0.59720609	0.59723554	0.0049310
0.994560242	0.99397197	0.059183	0.590565845	0.58993038	0.1077186
0.994474036	0.99397175	0.050533	0.584429098	0.58280174	0.2792302
0.937208452	0.93712591	0.008807	0.817790942	0.81847846	0.0839994
0.938299499	0.93706288	0.131967	0.782824304	0.78347459	0.0830002
0.946527309	0.93950357	0.747600	0.7562635	0.75971573	0.4544107
0.963494349	0.96852858	0.519741	0.668253104	0.67124389	0.4455587
0.967772292	0.9685281	0.078036	0.663241383	0.66201575	0.1851365
0.969296368	0.96852756	0.079379	0.654257076	0.6530376	0.1867390
0.969706593	0.96852687	0.1218025	0.644923099	0.64429982	0.0967374
0.969729427	0.96852614	0.1242318	0.636159717	0.63579242	0.0577699
0.969381785	0.96852477	0.0884816	0.619916653	0.61943207	0.0782301
0.969115908	0.96852383	0.0611312	0.612094563	0.61156394	0.0867649
0.968808093	0.96852289	0.0294417	0.604317743	0.60389264	0.0703938
0.968460112	0.96852189	0.0063718	0.596507711	0.59641109	0.0162003
0.968069812	0.96852083	0.0465617	0.58860024	0.58911232	0.0869240
0.967633357	0.96851989	0.0915314	0.580539266	0.58198883	0.2490707
0.84749265	0.84802536	0.0628117	0.368548574	0.43063222	14.416860
0.868924004	0.8707244	0.2067619	0.531689505	0.52546557	1.1844609
0.913414642	0.91527875	0.2036615	0.607466002	0.60708667	0.0624840
0.929206647	0.93492827	0.6119815	0.622148287	0.63463343	1.9672999
0.93771	0.93841508	0.0751315	0.639950611	0.63961394	0.0526366
0.940431536	0.93841497	0.2148910	0.638916165	0.63116222	1.2285185
0.940661179	0.93841466	0.2393925	0.630717418	0.62292996	1.2501338
0.939474432	0.93841347	0.1130529	0.610707068	0.60709044	0.5957312
0.938797951	0.93841259	0.0410615	0.601024184	0.59946752	0.2596743

0.938163341	0.93841153	0.0264417	0.591802256	0.59203269	0.0389224
0.937574086	0.93841029	0.0891018	0.582983723	0.58477905	0.3070095
0.937013822	0.93840885	0.1486528	0.574400531	0.57770001	0.5711405
0.775883807	0.77106617	0.6248002	0.271685386	0.26938949	0.8522590
0.804473729	0.80791676	0.4261601	0.483325583	0.48814672	0.9876408
0.822577511	0.82457004	0.2416446	0.555130626	0.55312218	0.3631107
0.839404148	0.8608712	2.4936426	0.650956515	0.64351981	1.1556295
0.879219496	0.8782102	0.1149264	0.672682901	0.66833212	0.6509907
0.899015899	0.89400353	0.5606654	0.709829126	0.69854038	1.6160476
0.90596222	0.90664994	0.0758529	0.722247944	0.73991741	2.3880321
0.908674499	0.90713757	0.1694262	0.717401672	0.72249666	0.7051919
0.909019869	0.90710982	0.2105642	0.705528251	0.70463543	0.1267068
0.909086152	0.90709454	0.2195594	0.698889466	0.69602289	0.4118507
0.800486264	0.80106188	0.0718565	0.21088177	0.2142495	1.5718730
0.861838505	0.8624475	0.0706123	0.482066768	0.4782597	0.7960252
0.899963979	0.89382916	0.6863525	0.564784226	0.54969632	2.7447712
0.906133876	0.90644625	0.0344613	0.5810504	0.59311927	2.0348133
0.908115188	0.90926048	0.1259586	0.583667447	0.59567705	2.0161265
0.908921936	0.90926613	0.0378540	0.575218762	0.57376361	0.2536153
0.908976061	0.90926732	0.0320322	0.57128792	0.56680954	0.7901031
Error porcentual promedio		0.214768	Error porcentual promedio		1.0188010

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

ANEXO B. ERRORES PORCENTUALES DE FRACCIÓN DE ACETONA Y AGUA

X _{C₆H₆O} (RNA)	X _{C₆H₆O} (DWSIM)	Error (%)	X _{H₂O} (RNA)	X _{H₂O} (DWSIM)	Error (%)
0.091622642	0.091615631	0.007652614	0.00231598	0.001757697	
0.08505587	0.085185407	0.152065139	0.021258541	0.021770175	2.350162064
0.079257342	0.078945191	0.395402199	0.040846154	0.041191962	0.839502594
0.066551524	0.067002093	0.672470007	0.079101279	0.078365105	0.939415922
0.061256022	0.061284099	0.045814849	0.095798865	0.096163623	0.379310119
0.056209804	0.055725764	0.868609997	0.113231084	0.11346612	0.207142111
0.050385582	0.050320575	0.129186046	0.130049491	0.13029303	0.186916361
0.03923642	0.039945433	1.774954399	0.162970938	0.16259646	0.230311144
0.035093399	0.034964284	0.369277941	0.178661743	0.17810866	0.310531501
0.030517478	0.030113887	1.340214794	0.193307155	0.19321675	0.046789512
0.025401628	0.02538964	0.047217463	0.207350052	0.20793637	0.281969846
0.01626504	0.016304059	0.239321653	0.236111782	0.23626898	0.066533529
0.012138154	0.011938133	1.675476088	0.250401383	0.24990978	0.196712024
0.007750972	0.007694524	0.733615975	0.263775094	0.2632183	0.211533136
0.003586671	0.003697034	2.985176294	0.275870802	0.27629896	0.154961689
0.006552881	0.006613092	0.910480548	0.001288395	0.001221734	
0.02992446	0.029685194	0.80601002	-0.000248604	0.001003451	
0.066800822	0.067253535	0.673143885	0.003387218	0.000897181	
0.129754724	0.12921433	0.418215608	0.039484872	0.041633714	5.161302537
0.116565558	0.11682172	0.219275685	0.077993919	0.076556533	1.877548002
0.110823255	0.11087633	0.047868795	0.093391868	0.093317087	0.080136984
0.105012504	0.10508925	0.073028912	0.108782991	0.10963597	0.778009887
0.094066911	0.093966572	0.106781433	0.140641692	0.14101596	0.265408036
0.088978397	0.088619888	0.404547325	0.156144647	0.15610908	0.022783544
0.083398671	0.083409425	0.012892647	0.17108857	0.17082432	0.154691161
0.077558074	0.078330446	0.986043066	0.18549575	0.18517563	0.172873522
0.072403758	0.073378275	1.328072617	0.199407166	0.19917692	0.115598492
0.068990543	0.068548846	0.644353678	0.212840323	0.21284055	0.000106486
0.355946441	0.35591912	0.007676244	0.000703907	0.000759674	
0.343384552	0.34330259	0.023874667	0.000423506	0.00077676	
0.258921424	0.25938115	0.17723967	0.0019279	0.000955439	
0.230402691	0.22940827	0.433471989	-0.001066673	0.001040429	
0.230574857	0.23163009	0.455568072	0.003286715	0.001035429	217.4253382
0.205941968	0.2085096	1.231421471	0.01200181	0.001122602	
0.189815395	0.18917431	0.338885779	0.031720768	0.032886812	3.545627526
0.182720419	0.18259119	0.070775308	0.050322831	0.049664536	1.325482494
0.17573083	0.17617957	0.254706168	0.065856974	0.066011363	0.233882183
0.16971265	0.16993292	0.129621949	0.081577185	0.081943978	0.447614451
0.158139139	0.1579104	0.14485342	0.112786772	0.1126283	0.140703253
0.152189902	0.15212326	0.043808094	0.12747706	0.127409	0.053418796

0.146277617	0.1464785	0.137141942	0.14149482	0.14183355	0.238822221
0.26474149	0.26477364	0.012142421	0.001466454	0.001754962	
0.256166845	0.25574823	0.163682528	0.022333444	0.021767359	2.600615902
0.245899817	0.24698929	0.441101309	0.040443187	0.041189054	1.810838017
0.23945688	0.23848517	0.407451121	0.060947927	0.060045818	1.502368516
0.229879596	0.23022501	0.150033387	0.077969532	0.078361497	0.500201513
0.218479219	0.22219834	1.673784166	0.092637253	0.096159554	3.662975453
0.207128779	0.20680695	0.155617948	0.130089104	0.13028812	0.152750819
0.199401862	0.19942427	0.01123619	0.146953005	0.14665839	0.200885061
0.191934944	0.19223912	0.158228092	0.162464081	0.16259075	0.077906416
0.185087144	0.18524367	0.084497237	0.17820252	0.17810251	0.056153001
0.171765129	0.17179258	0.015978926	0.207250338	0.20792917	0.326472945
0.165512344	0.16532323	0.11439024	0.221757246	0.22227444	0.232682703
0.159237615	0.15901613	0.139284753	0.23621902	0.23626001	0.017349583
0.152843457	0.15286523	0.014243323	0.250227725	0.24989923	0.131451125
0.146644608	0.14686482	0.149942251	0.263511736	0.26320481	0.116611269
0.141046935	0.14100943	0.026597292	0.27595447	0.27618883	0.084854809
0.242595954	0.18080825	34.17305584	-0.010916505	0.000713293	
0.216019134	0.21589478	0.057599474	0.00053334	0.00063063	
0.237363967	0.23970434	0.976358273	0.011640906	0.000579933	
0.287591674	0.28729584	0.102971789	0.040971096	0.041460274	1.179870825
0.277852392	0.27882508	0.348852242	0.06035971	0.059159172	2.029335784
0.269184305	0.27058419	0.517356437	0.075768043	0.076378207	0.798872368
0.26315422	0.26256419	0.22471822	0.091923019	0.093135995	1.302370568
0.255156934	0.25475605	0.157359998	0.10977078	0.10945153	0.291681835
0.239683138	0.23974202	0.024560497	0.141663894	0.14082591	0.595049461
0.23220651	0.23252163	0.135522927	0.155882274	0.15591443	0.020624199
0.22518835	0.22548233	0.130378276	0.170189531	0.17062503	0.255237731
0.218906988	0.21861752	0.132408243	0.184982122	0.18497139	0.005801812
0.213428572	0.21192079	0.711483773	0.200177015	0.19896689	0.608204258
0.208676522	0.2053856	1.602313741	0.215431736	0.21262556	1.319773391
0.567911337	0.56799895	0.015424765	0.001430949	0.001368833	
0.452429464	0.47378913	4.508264314	-0.014411339	0.000745304	
0.391872528	0.39213862	0.067856663	0.000633908	0.000774718	
0.365491356	0.36454466	0.259692622	0.001232028	0.000821915	
0.34511503	0.34578231	0.192976784	0.013889229	0.014603749	4.892718813
0.33703431	0.33700905	0.007495216	0.03177413	0.031828725	0.171528118
0.328356786	0.32846492	0.032921048	0.04905842	0.048605117	0.932623559
0.312015425	0.3120291	0.00438262	0.08158122	0.080880463	0.866410201
0.30417105	0.30412104	0.016444105	0.096562303	0.096411447	0.156470687
0.296441224	0.29640931	0.010766791	0.111284508	0.11155801	0.245166096
0.288893342	0.28888671	0.002295647	0.126083834	0.12633425	0.19821707
0.281572991	0.2815464	0.009444598	0.140995914	0.14075359	0.172161958

0.705261532	0.70526454	0.000426506	0.025387263	0.025345972	0.16291062
0.509852424	0.5098682	0.003094035	0.002406563	0.001985076	
0.445478277	0.44553069	0.011764083	0.000979493	0.001347129	
0.355258813	0.35516668	0.025940836	0.001477013	0.001313509	12.44788559
0.330405484	0.33031371	0.027783904	0.000808407	0.001354171	
0.300054532	0.300028	0.008843144	0.001112897	0.001431618	
0.258152319	0.25849511	0.132610316	0.002309552	0.001587476	
0.24323127	0.24301397	0.089418842	0.034654607	0.034489371	0.479092394
0.2296364	0.2295995	0.016071586	0.064857803	0.065765064	1.379548227
0.223076282	0.22313913	0.028165222	0.081478763	0.080837983	0.79267251
0.748585708	0.74850692	0.010525971	0.037073748	0.03724358	0.45600216
0.51935867	0.51946428	0.020330578	0.002655619	0.002276017	
0.433437131	0.44886732	3.437583521	-0.010669545	0.001436361	
0.405600106	0.40549934	0.024849783	0.001394972	0.001381387	
0.388988392	0.38900857	0.005186961	0.014928346	0.015314382	2.520740623
0.363344728	0.36338243	0.010375174	0.063080953	0.062853961	0.361141299
0.358584279	0.35525498	0.937157586	0.080079641	0.077935477	2.751204132
Error porcentual promedio		0.744474586	Error porcentual promedio		3.830780971

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

ANEXO C. ERRORES PORCENTUALES DEL FLUJO “ACETONA” Y “METANOL”

Flujo molar "ACETONA" (RNA)	Flujo molar "ACETONA" (DWSIM)	Error (%)	Flujo molar "METANOL" (RNA)	Flujo molar "METANOL" (DWSIM)	Error (%)
75.96020122	75.9602	1.60041E-06	24.53978803	24.5398	4.87692E-05
76.0869979	76.087	2.76221E-06	24.91299023	24.913	3.92026E-05
76.21380849	76.2138	1.1143E-05	25.28618645	25.2862	5.35911E-05
76.46741002	76.4674	1.31086E-05	26.03259569	26.0326	1.65662E-05
76.59418559	76.5942	1.88157E-05	26.40578509	26.4058	5.64738E-05
76.72096582	76.721	4.45529E-05	26.77897764	26.779	8.34987E-05
76.84790793	76.8478	0.000140445	27.15221255	27.1522	4.62076E-05
77.10125361	77.1015	0.000319562	27.89843492	27.8985	0.00023328
77.22840499	77.228	0.000524403	28.2718731	28.2717	0.00061226
77.35467805	77.3551	0.000545466	28.64458723	28.6449	0.001091872
77.48221998	77.4819	0.000412977	29.01834134	29.0181	0.000831678
77.73532097	77.7355	0.000230312	29.76437622	29.7645	0.000415848
77.86267413	77.8623	0.000480506	30.13783086	30.1377	0.000434194
77.98936385	77.9892	0.000210099	30.51093196	30.5108	0.000432492
78.11592397	78.116	9.73271E-05	30.88393109	30.884	0.000223126
82.36061016	82.3606	1.23309E-05	19.13939414	19.1394	3.06108E-05
81.44975564	81.4498	5.44678E-05	20.55017853	20.5502	0.000104452
80.32055348	80.3205	6.65779E-05	22.17950776	22.1795	3.49869E-05
76.72098163	76.721	2.39402E-05	26.77897894	26.779	7.86289E-05
76.97469013	76.9747	1.28177E-05	27.52531054	27.5253	3.82755E-05
77.10147891	77.1015	2.73562E-05	27.89845158	27.8985	0.00017354
77.22844723	77.2283	0.000190641	28.27177124	28.2717	0.000251978
77.48164274	77.4819	0.00033203	29.0180789	29.0181	7.2701E-05
77.60856753	77.6087	0.000170693	29.39097685	29.3913	0.001099458
77.73626621	77.7355	0.000985664	29.76518263	29.7645	0.002293436
77.86173302	77.8623	0.000728179	30.13724356	30.1377	0.00151453
77.9870434	77.9892	0.002765253	30.50934378	30.5108	0.004772815
78.1160923	78.116	0.000118163	30.88407762	30.884	0.000251337
85.73760526	85.7376	6.1366E-06	16.26239589	16.2624	2.52574E-05
85.33030196	85.3303	2.30214E-06	17.16970167	17.1697	9.74204E-06
83.00339419	83.0034	7.00149E-06	20.49658807	20.4966	5.81865E-05
80.72120638	80.7212	7.90906E-06	23.27880121	23.2788	5.19675E-06
77.73570268	77.7357	3.44292E-06	26.76431083	26.7643	4.04715E-05
77.05442437	77.1015	0.061056699	27.32311883	27.8985	2.062408993
77.22840389	77.2283	0.000134526	28.27169994	28.2717	2.19442E-07
77.35487266	77.3551	0.000293894	28.64487512	28.6449	8.68407E-05
77.48207066	77.4819	0.000220258	29.01812572	29.0181	8.8649E-05
77.60871275	77.6087	1.64308E-05	29.40068731	29.3913	0.031939066
77.86205038	77.8623	0.000320593	30.13763706	30.1377	0.000208841

77.98957953	77.9892	0.000486644	30.51092249	30.5108	0.000401478
78.11582844	78.116	0.000219621	30.88394182	30.884	0.000188371
75.96019688	75.9602	4.11256E-06	24.53979483	24.5398	2.10734E-05
76.08704195	76.087	5.51314E-05	24.9129961	24.913	1.56453E-05
76.2137014	76.2138	0.000129369	25.28618422	25.2862	6.24236E-05
76.34069818	76.3406	0.000128602	25.65940723	25.6594	2.81822E-05
76.46737832	76.4674	2.83535E-05	26.03259392	26.0326	2.3357E-05
76.56001201	76.5942	0.044635223	27.6140657	26.4058	4.575758719
76.84783436	76.8478	4.47087E-05	27.15218869	27.1522	4.16713E-05
76.97466595	76.9747	4.4229E-05	27.26508712	27.265	0.00031952
77.10147636	77.1015	3.06635E-05	27.89825501	27.8985	0.000878131
77.22838967	77.2283	0.000116111	28.2719627	28.2717	0.000929209
77.47722047	77.4819	0.00603952	29.00500317	29.0181	0.045133308
77.6083617	77.6087	0.000435899	29.39063844	29.3913	0.00225088
77.73600564	77.7355	0.000650465	29.76563662	29.7645	0.003818716
77.86200151	77.8623	0.00038335	30.13694522	30.1377	0.002504429
77.98931322	77.9892	0.000145176	30.51100049	30.5108	0.000657119
78.11596121	78.116	4.96619E-05	30.88399788	30.884	6.85961E-06
83.20150355	84.1551	1.133141604	17.59359965	17.3449	1.433848841
83.16889945	83.1689	6.55973E-07	18.83109734	18.8311	1.41274E-05
80.57569955	82.0668	1.816935045	22.03244305	20.4332	7.826689156
76.72098925	76.721	1.40088E-05	26.77900911	26.779	3.40343E-05
76.84781532	76.8478	1.99377E-05	27.15218608	27.1522	5.12628E-05
77.01458149	76.9747	0.051811166	27.49397023	27.5253	0.113821734
77.10138271	77.1015	0.000152122	27.89850857	27.8985	3.07239E-05
77.22848693	77.2283	0.000242044	28.27168858	28.2717	4.04057E-05
77.48171944	77.4819	0.00023303	29.01827668	29.0181	0.000608877
77.60899294	77.6087	0.000377456	29.39093337	29.3913	0.001247402
77.73518544	77.7355	0.00040466	29.76482129	29.7645	0.001079454
77.86242848	77.8623	0.000165013	30.13761102	30.1377	0.000295259
77.9944922	77.9892	0.006785806	30.50049809	30.5108	0.033764804
78.13399904	78.116	0.02304142	30.83947636	30.884	0.144164101
80.8037974	80.8038	3.21851E-06	21.69620273	21.6962	1.26059E-05
84.59182268	83.6401	1.137878454	19.23561169	19.3599	0.641988381
78.78797117	78.788	3.65857E-05	25.2111976	25.2112	9.53097E-06
76.97484002	76.9747	0.000181909	27.52531572	27.5253	5.7104E-05
77.10121287	77.1015	0.000372408	27.89847369	27.8985	9.43061E-05
77.22870347	77.2283	0.000522442	28.27175943	28.2717	0.000210205
77.35476544	77.3551	0.000432494	28.64481459	28.6449	0.000298172
77.60843735	77.6087	0.000338433	29.39375289	29.3913	0.008345637
77.7357847	77.7355	0.000366244	29.76472035	29.7645	0.000740328
77.86214172	77.8623	0.000203276	30.1374386	30.1377	0.000867357
77.98810412	77.9882	0.000122941	30.51088092	30.5108	0.000265217

78.11606321	78.116	8.09211E-05	30.88401764	30.884	5.71307E-05
77.93500286	77.935	3.66806E-06	25.06499665	25.065	1.3349E-05
83.80441336	83.8044	1.59433E-05	19.695614	19.6956	7.10892E-05
82.88009328	82.8801	8.10717E-06	21.11988994	21.1199	4.76108E-05
80.00222846	80.0022	3.55787E-05	24.99781199	24.9978	4.79559E-05
78.3028655	78.3029	4.40615E-05	27.19708617	27.1971	5.08568E-05
77.35511149	77.3551	1.48591E-05	26.66490537	26.6649	2.01253E-05
77.48186568	77.4819	4.42934E-05	29.01808517	29.0181	5.10965E-05
77.73561762	77.7355	0.000151305	29.76455202	29.7645	0.000174771
77.98899588	77.9892	0.000261728	30.51070741	30.5108	0.000303474
78.11611599	78.116	0.000148486	30.88405415	30.884	0.000175341
78.65170072	78.6517	9.19581E-07	25.34829989	25.3483	4.5059E-07
80.05128826	80.0513	1.46697E-05	24.94869541	24.9487	1.83967E-05
77.25663379	77.3551	0.127291168	27.90466108	28.6449	2.58419098
77.48192828	77.4819	3.64928E-05	29.01811988	29.0181	6.85115E-05
77.60867429	77.6087	3.31309E-05	29.39128309	29.3913	5.75404E-05
77.98920491	77.9892	6.29661E-06	30.51081005	30.5108	3.29497E-05
78.11648416	78.116	0.000619799	30.89068208	30.884	0.021636049
Error porcentual promedio		0.04426831	Error porcentual promedio		0.195588431

Realizado por: Valdiviezo, Mayra. 2021

ANEXO D. SCRIPT DEL DISEÑO DE LA FASE DE ENTRENAMIENTO, VALIDACIÓN Y PRUEBA

```
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 06-May-2021 05:30:48
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% Entrada - input data.
% Salida - target data.

x = Entrada;
t = Salida;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help nntrain
% 'trainlm' is usually fastest.
% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 55;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

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

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

```
% View the Network
view(net)

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

%% applying thenetwork on test data set
SalidaVal=net(Val_entrada)
```



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

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

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 22 / 09 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Mayra Lorena Valdiviezo Valdivieso</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniera Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO
FABIO MEDINA
NUSTE**

Firmado digitalmente por LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Nombre de reconocimiento (DN): c=EC,
o=BANCO CENTRAL DEL ECUADOR,
ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE
INFORMACION-ECIBCE, l=QUITO,
serialNumber=0000621485, cn=LEONARDO
FABIO MEDINA NUSTE
Fecha: 2021.09.22 08:52:52 -05'00'



1628-DBRA-UTP-2021