



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

SIMULACIÓN DE UNA PLANTA INDUSTRIAL PARA LA PRODUCCIÓN DE DIMETIL ÉTER POR DESHIDRATACIÓN DE METANOL MEDIANTE EL USO DE DWSIM

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: MISHHELL ESTEFANÍA CANDO AGUINSACA

DIRECTOR: Ing. DARÍO FERNANDO GUAMÁN LOZADA

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Mishell Estefanía Cando Aguinsaca.

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, Mishell Estefanía Cando Aguiñaca, 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, 17 de septiembre de 2021

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Mishell Estefanía Cando Aguiñaca', with some stylized flourishes.

Mishell Estefanía Cando Aguiñaca

172575644-7

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo: propuesta tecnológica. **SIMULACIÓN DE UNA PLANTA INDUSTRIAL PARA LA PRODUCCIÓN DE DIMETIL ÉTER POR DESHIDRATACIÓN DE METANOL MEDIANTE EL USO DE DWSIM**, 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. Raúl Leandro Dávalos Monteiro PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	 Firmado electrónicamente por: RAUL LEANDRO DAVALOS MONTEIRO	2021-09-17
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	 Firmado electrónicamente por: DARIO FERNANDO GUAMAN LOZADA	2021-09-17
Ing. Linda Mariuxi Flores Fiallos MIEMBRO DEL TRIBUNAL	LINDA MARIUXI FLORES FIALLOS  Firmado digitalmente por:LINDA MARIUXI FLORES FIALLOS DN: cn=LINDA MARIUXI FLORES FIALLOS, o=ESCUELA POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO, ou=INFORMACIÓN S.A. 1, c=ESTADO DE CERTIFICACION DE INFORMACION Móvil: Soy el autor de este documento Ubicación: Fecha: 2021-10-25 16:32:05-00	2021-09-17

DEDICATORIA

El presente trabajo de titulación está dedicado a Dios por haberme dado la fortaleza y sabiduría para permitirme ser una profesional y a mis pilares fundamentales que son mis padres mi madre Carmen Aguiñaca y a mi padre Fructoso Cando, quienes con su bondad, consejos, amor y apoyo incondicional han permitido que cumpla mi tan anhelado sueño.

Mishell

AGRADECIMIENTO

Agradezco a Dios por bendecirme, por guiarme a lo largo de mi carrera, ser el apoyo y fortaleza en aquellos momentos de dificultad y de debilidad.

A mi Madre y a mi Padre, por haberme dado la oportunidad de formarme en esta prestigiosa universidad, que con su esfuerzo y dedicación me ayudaron a culminar mi carrera universitaria y me dieron el suficiente apoyo durante todo este tiempo para no decaer cuanto todo parecía complicado e imposible.

De igual manera agradezco a mi hermana que con sus palabras y gestos me hacían sentir orgullosa de lo que soy y de lo que le puedo enseñar. Ojalá algún día yo sea su fuerza para que pueda seguir avanzando en su camino.

Finalmente, agradezco a mi director de tesis, que gracias a sus consejos y correcciones hoy puedo culminar este trabajo. A su vez, a los profesores que me han visto crecer como persona, y gracias a sus conocimientos hoy puedo sentirme dichosa.

Mishell

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xii
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xiii
ÍNDICE DE ANEXOS	xiv
RESUMEN	xv
SUMMARY	xvi

CAPÍTULO I

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

CAPÍTULO II

2	MARCO TEÓRICO.....	4
2.1	Estado del Arte	4
2.2	Bases Teóricas.....	5
2.2.1	<i>Dimetil éter (DME)</i>	5
2.2.1.1	<i>Características del dimetil éter</i>	5
2.2.2	<i>Aplicaciones del dimetil éter</i>	6
2.2.3	<i>Producción de DME a escala industrial</i>	8

2.2.3.1	<i>Método indirecto</i>	8
2.2.3.2	<i>Método directo</i>	10
2.2.3.3	<i>Otros métodos de producción de DME</i>	10
2.2.4	<i>DWSIM - El simulador de procesos químicos de código abierto</i>	11
2.2.4.1	<i>Licencia gratuita de DWSIM</i>	11
2.2.5	<i>Redes neuronales artificiales</i>	12
2.2.5.1	<i>Estructura de una red neuronal artificial</i>	12
2.2.5.2	<i>Clasificación de las redes neuronales artificiales</i>	12

CAPÍTULO III

3	METODOLOGÍA	15
3.1	Establecimiento de parámetros óptimos de operación en la planta	16
3.1.1	<i>Descripción general del proceso</i>	17
3.1.2	<i>Sistema de reacción</i>	18
3.1.3	<i>Sistema de separación</i>	19
3.1.4	<i>Sistema de alimentación y recirculación</i>	21
3.1.5	<i>Operacionalización de variables</i>	21
3.1.5.1	<i>Selección de variables</i>	21
3.1.5.2	<i>Operación de variables</i>	22
3.2	Simulación de la producción de dimetil éter en DWSIM	22
3.2.1	<i>Validación de la simulación</i>	25
3.3	Diseño de la red neuronal artificial para predecir la producción de DME ...	25
3.3.1	<i>Recopilación de la base de datos</i>	25
3.3.2	<i>Normalización de la base de datos</i>	26
3.3.3	<i>Desarrollo de la red neuronal en Matlab</i>	27
3.3.4	<i>Entrenamiento de la red neuronal artificial</i>	28
3.3.5	<i>Validación de la red neuronal artificial</i>	31

CAPÍTULO IV

4	GESTIÓN DEL PROYECTO	32
4.1	Cronograma.....	32
4.2	Presupuesto.....	33
4.3	Recursos humanos y materiales.....	33
4.3.1	<i>Talento humano.....</i>	<i>33</i>
4.3.2	<i>Recursos materiales</i>	<i>33</i>
4.4	Resultados	34
4.4.1	<i>Simulación de la planta en DWSIM.....</i>	<i>34</i>
4.4.1.1	<i>Resultados del sistema de reacción</i>	<i>34</i>
4.4.1.2	<i>Resultados del sistema de separación.....</i>	<i>35</i>
4.4.1.3	<i>Balance de masa del sistema de separación</i>	<i>37</i>
4.4.2	<i>Base de datos para la red neuronal artificial</i>	<i>40</i>
4.4.3	<i>Desarrollo de la red neuronal artificial.....</i>	<i>40</i>
4.4.3.1	<i>Lectura y normalización de la base de datos.....</i>	<i>40</i>
4.4.3.2	<i>Entrenamiento de la red neuronal artificial.....</i>	<i>40</i>
4.4.3.3	<i>Validación de la red neuronal artificial.....</i>	<i>42</i>
4.4.4	<i>Análisis estadístico de los datos predichos.....</i>	<i>42</i>
4.4.4.1	<i>Fracción molar de DME en destilado de la primera columna.....</i>	<i>44</i>
	CONCLUSIONES.....	46
	RECOMENDACIONES.....	47
	GLOSARIO	
	BIBLIOGRAFÍA	
	ANEXOS	

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Propiedades del dimetil éter	6
Tabla 2-2. Propiedades fisicoquímicas de DME y combustibles diesel	7
Tabla 1-3. Comparación de las temperaturas de ebullición.....	19
Tabla 2-3. Operación de variables del proceso	22
Tabla 3-3. Condiciones de la corriente de alimentación	22
Tabla 4-3. Condiciones de operación en las columnas.....	23
Tabla 5-3. Validación de la simulación para la producción de DME.....	25
Tabla 6-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial	26
Tabla 7-3. Rangos de operación de las variables de entrada en la RNA	26
Tabla 8-3. Ensayos de selección del número de neuronas y el algoritmo de entrenamiento.....	29
Tabla 9-3. Tabla ANOVA para el análisis de la varianza	31
Tabla 1-4. Cronograma del trabajo de titulación.....	32
Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto.....	33
Tabla 3-4. Equipos y softwares empleados durante el desarrollo del proyecto	33
Tabla 4-4. Corriente de entrada en el reactor	34
Tabla 5-4. Resultados del reactor de conversión.....	34
Tabla 6-4. Corriente de salida del reactor	34
Tabla 7-4. Corriente de alimentación en la columna de separación del dimetil éter.....	35
Tabla 8-4. Corriente de destilado en la columna de separación del dimetil éter	35
Tabla 9-4. Corriente de residuo en la columna de separación del dimetil éter.....	36
Tabla 10-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de metanol.....	36
Tabla 11-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de metanol	37
Tabla 12-4. Resultados de la simulación de la planta de producción	37
Tabla 13-4. Resumen de resultados del balance de masa del proceso	40
Tabla 14-4. Análisis de medias para el flujo molar de destilado	43
Tabla 15-4. Análisis Anova para el flujo molar de destilado en primera columna	43

Tabla 16-4. Análisis de Medias de la fracción molar de DME	44
Tabla 17-4. Análisis Anova de la fracción molar de DME	44

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Producción de dimetil éter	8
Figura 2-2. Estructura básica de una red neuronal artificial.....	12
Figura 1-3. Metodología del proyecto	15
Figura 2-3. Diagrama de flujo de la planta de producción de dimetil éter.....	16
Figura 3-3. Etapas principales del proceso de producción	18
Figura 4-3. Presiones de vapor vs temperatura	20
Figura 5-3. Esquema del sistema de separación	21
Figura 6-3. Planta de producción de dimetil éter en DWSIM.....	24
Figura 7-3. Herramienta Neural Fitting de Matlab.....	27
Figura 8-3. Selección de entradas y salidas normalizadas	27
Figura 9-3. Arquitectura de la red neuronal artificial.....	29
Figura 10-3. Selección del algoritmo de entrenamiento.....	30
Figura 11-3. Proceso de entrenamiento de la red.....	31
Figura 1-4. Arquitectura de red con 465 neuronas en capa oculta	41
Figura 2-4. Regresión lineal con 465 neuronas en capa oculta	41
Figura 3-4. Error cuadrático medio con 465 neuronas en capa oculta.....	41
Figura 4-4. Predicción de la red neuronal artificial con 465 neuronas en capa oculta.....	42

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-4. Error relativo del flujo molar real y predicho de destilado de primera columna	43
Gráfico 2-4. Análisis de medias para el flujo molar real y predicho en destilado	43
Gráfico 3-4. Error relativo de la fracción molar real y predicha de dimetil éter.....	44
Gráfico 4-4. Análisis de medias para la fracción molar real y predicha de DME	44

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. Características importantes del software DWSIM

ANEXO B. Diagrama de flujo de la planta de producción de dimetil éter

ANEXO C. Datos para entrenamiento de la red neuronal artificial por simulación DWSIM

ANEXO D. Datos para la validación de la red neuronal artificial por simulación en DWSIM

ANEXO E. Lectura y normalización de los datos de entrenamiento

ANEXO F. Lectura y normalización de los datos de validación

ANEXO G. Entrenamiento de la red neuronal artificial

ANEXO H. Resultados de la red al entrenarla con diferentes neuronas en la capa oculta

ANEXO I. Resultados del entrenamiento de la red neuronal artificial

ANEXO J. Validación de la red neuronal artificial

ANEXO K. Resultados de validación de la red neuronal artificial

ANEXO L. Gráficos de comparación durante la validación de la red neuronal artificial

RESUMEN

El objetivo del trabajo fue desarrollar una red neuronal artificial capaz de predecir la producción de dimetil éter por deshidratación de metanol. Para el diseño de la red se modeló el proceso en DWSIM empleando parámetros de operación descritos por Dimer y Luyben. 115 datos recopilados mediante simulación se han utilizado para entrenar y validar la red. El diseño de la red se llevó a cabo en Matlab con 6 variables de entrada, 465 neuronas en la capa oculta, 2 variable de salida y los algoritmos de entrenamiento de Levenberg-Marquardt, Regularización-Bayesiana y Scaled-Conjugate-Gradient. La temperatura y fracción molar de metanol en alimentación, conversión en el reactor, relación de reflujo y temperatura del reboiler en la primera columna y la relación de reflujo en la segunda columna se han seleccionado como variables de entrada; mientras que el flujo molar y la fracción molar de dimetil éter en destilado de la primera columna como variables de salida. Un coeficiente de correlación de 0,96941 y error cuadrático medio de 1,56E-02 evidencian el buen desempeño la red durante su entrenamiento con 465 neuronas y el algoritmo de regularización bayesiana. Un valor-p mayor que 0,05 permite validar con un 95% de confianza el modelo de predicción, confirmando que no existe una diferencia estadística significativa entre los datos reales y predichos por la red. Los resultados indican que el modelo de predicción utilizando redes neuronales artificiales es eficiente al predecir la producción de dimetil éter. Demostrando así, que las redes neuronales pueden ser una opción viable en la predicción de resultados de una planta frente a las simulaciones tradicionales que obtienen los resultados en base a ecuaciones previamente establecidas. Logrando, inclusive poder predecir resultados de sistemas de mayor complejidad en menor tiempo. Se recomienda simular y predecir la producción de dimetil éter utilizando gas de síntesis.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGIA QUÍMICA>, <INGENIERÍA DE PROCESOS>, <DWSIM>, <PLANTA DE PRODUCCIÓN>, <DIMETIL ÉTER>, <MATLAB>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES>, <REACTOR DE CONVERSIÓN>, <SIMULACIÓN>, <DESHIDRATACIÓN DE METANOL>

LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento
(DN): c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.04.05 09:56:16
-05'00'



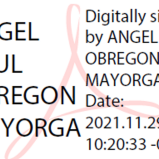
0922-DBRAI-UTP-2021

SUMMARY

The objective of this study was to develop an artificial neural network capable of predicting the production of dimethyl ether by dehydration of methanol. For the design of the network, the process was modelled in DWSIM using operating parameters described by Dimer and Luyben. 115 data collected by simulation were used to train and validate the network. The network design was carried out in Matlab with six input variables, 465 neurons in the hidden layer, two output variables and the Levenberg-Marquardt, Regularization-Bayesian, and Scaled-Conjugate-Gradient training algorithms. The temperature and mole fraction of methanol in feed, conversion in the reactor, reflux ratio and reboiler temperature in the first column and the reflux ratio in the second column have been selected as input variables; while the molar flow and the molar fraction of dimethyl ether in distillate from the first column as output variables. A correlation coefficient of 0.96941 and a mean square error of 1.56E-02 show the good performance of the network during its training with 465 neurons and the Bayesian regularization algorithm. A p-value greater than 0.05 allows the prediction model to be validated with 95% confidence, confirming that there is no statistically significant difference between the real and predicted data by the network. The results indicate that the prediction model using artificial neural networks is efficient in predicting the production of dimethyl ether, demonstrating that neural networks can be a viable option in predicting the results of a plant compared to traditional simulations that obtain the results based on previously established equations, achieving to be able to predict results of more complex systems in less time. It is recommended to simulate and predict the production of dimethyl ether using synthesis gas.

Keywords: <CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <PROCESS ENGINEERING>, <PRODUCTION PLANT>, <DIMETHYL ETHER>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORKS>, <CONVERSION REACTOR>, <SIMULATION>, <METHANOL DEHYDRATION>

ANGEL
PAUL
OBREGON
MAYORGA
Date:
2021.11.29
10:20:33 -05'00'



CAPÍTULO I

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

El dimetiléter (DME) se obtiene convencionalmente mediante un proceso químico basado en reacción, separación y recirculación. La reacción principal que ocurre en dicho proceso es la de deshidratación de metanol para formar DME y agua según la reacción: $2\text{CH}_3\text{OH} \leftrightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{H}_2\text{O}$. La principal aplicación que este compuesto puede tener como combustible cuyo potencial puede sustituir al diésel por su bajo impacto en el medio ambiente. Tiene un índice GWP (Global Warming Potential) de 1,2 para un horizonte de 20 años, de 0,3 para un horizonte de 100 años y de 0,1 para un horizonte de 500 años. No es corrosivo, cancerígeno ni mutagénico (Sánchez, 2018, p.14). Lo que ha incrementado en los últimos años el interés por el mismo. Como consecuencia, también se ha incrementado el número de publicaciones sobre las propiedades y aplicaciones del DME y las posibles mejoras en cuanto a su proceso de obtención.

Turton (2013) presenta una forma clásica del proceso convencional de obtención del DME. No obstante, dada la necesidad de mejora continua, también existen distintas versiones del proceso que plantean adaptaciones tecnológicas con la eficiencia como objeto principal. Bai et al. (2014) presenta una propuesta en el proceso que incluye un reactor adiabático de cinco lechos catalíticos con intercambios intermedios de energía; además, también se presenta un reactor con tres lechos catalíticos e inyección intermedia de alimentación fresca a menor temperatura para mantener la reacción a una temperatura óptima.

Bildea et al. (2017) sobre el proceso convencional de obtención de DME, propone una destilación reactiva que permita realizar las etapas de reacción y separación en un mismo equipo. Finalmente, Luyben (2017) plantea un proceso a partir del convencional defendiendo una viabilidad tanto técnica como económica mayor que en el convencional y en la destilación reactiva.

1.2 Planteamiento del problema

En las últimas décadas, la competencia de los mercados internacionales está imponiendo a las empresas productoras exigencias crecientes de calidad, obligándolas además a esfuerzos de ahorro de energía, y a la adopción de políticas de tipo *just in time*, en un intento de maximización de beneficios. En este contexto, la complejidad de los procesos de producción aumenta, y se traduce en un mayor esfuerzo por parte de los ingenieros, en la etapa de diseño de las unidades de procesamiento (Moreno y Ruiz, 2003, p.2). El dimetil éter (DME) es un compuesto necesario en la producción de acetato de metilo, un producto químico básico con muchas aplicaciones. En dicho proceso, el metanol se deshidrata primero a dimetil éter y luego se carbonila directamente a acetato de metilo. La reacción de deshidratación del metanol para formar dimetil éter y agua se puede llevar a cabo en las fases de vapor o líquida. Sin embargo, en esta ocasión se utilizará un reactor de conversión en fase de vapor, en el cual, el 85% de metanol forma DME y agua. La reacción es exotérmica: $2\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{H}_2\text{O}$. Luego de la conversión el proceso emplea una columna de destilación fraccionada para separar el DME del metanol y el agua, y una segunda columna de recuperación de metanol, para ser recirculado en el proceso, mezclándolo con la alimentación (Diemer y Luyben, 2010, p. 12224).

De acuerdo con el proceso de producción de dimetil éter descrito, se hace evidente el problema que conllevaría llevar a cabo la experimentación en una planta piloto. Por lo tanto, debido al tiempo, costos y gran cantidad de parámetros involucrados, resulta conveniente simular el proceso con la ayuda de programas de simulación disponibles.

1.3 Objetivos

1.3.1 *Objetivo General*

Simular la producción de dimetil éter recuperado por deshidratación de metanol en una planta industrial mediante DWSIM.

1.3.2 *Objetivos Específicos*

- Desarrollar el modelo de producción en DWSIM estableciendo las principales variables y parámetros de operación.
- Validar las composiciones obtenidas en la simulación mediante cálculos y valores reales indicados en bibliografía.
- Diseñar una red neuronal artificial que permita predecir la producción de dimetil éter recuperado por deshidratación de metanol.
- Validar la red neuronal artificial mediante un análisis estadístico de comparación entre los datos obtenidos por simulación de la planta y los resultados predichos por la red neuronal.

1.4 Justificación del proyecto

Actualmente, el uso de simuladores para el modelado, diseño y control de procesos se ha convertido en una herramienta eficaz para el desarrollo y optimización de procesos en la industria química y petroquímica. Esta tecnología está contribuyendo en la investigación, desarrollo e innovación de diferentes plantas de producción (Lladosa, Montón y Burguet, 2011, p.1265). Emplear herramientas tecnológicas es una de las habilidades de un Ingeniero Químico, quien mediante simulación con softwares especializados es capaz de desarrollar cálculos termodinámicos complejos, permitiéndole controlar y simular procesos químicos de manera eficaz, aumentando la eficiencia de los procesos industriales y disminuyendo tiempos de producción.

Simular y controlar una planta de producción para las estimaciones de los datos, cálculos y variables de operación presentes en la producción de dimetil éter es una forma de aportar en el desarrollo tecnológico de la industria y educación. En efecto, éste es un campo de desempeño de un Ingeniero Químico de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, el cual está capacitado para diseñar, simular y evaluar procesos industriales en general, mediante la aplicación de simuladores computacionales. Por lo tanto, es necesario resaltar que, la presente investigación va dirigida a los estudiantes de ingeniería química y carreras afines, así como también a futuros proyectos encaminados hacia el modelado y simulación de plantas industriales. De acuerdo con lo descrito, este proyecto busca simular la planta de producción de dimetil éter por deshidratación de metanol en el software de procesos químicos DWSIM.

1.5 Alcance

La investigación servirá de fundamento teórico y práctico para estudiantes y profesionales de la carrera de Ingeniería Química y afines. Especialmente para estudiantes de la cátedra de ingeniería de procesos, operaciones unitarias y termodinámica de la carrera de Ingeniería Química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo quienes serán los principales beneficiarios de la simulación de procesos en el software de código abierto DWSIM y desarrollo de proyectos a través de la simulación de plantas industriales.

La industria puede beneficiarse al replicar los resultados obtenidos en este trabajo de titulación, puesto que, a nivel industrial se busca constantemente mantener un correcto funcionamiento de las plantas químicas y petroquímicas, lo que implica que el producto mantenga las especificaciones deseadas, la operación sea segura, se mantenga dentro de unos márgenes económicos y sea respetuosa con el medioambiente. Simular el proceso permite a la industria predecir su comportamiento futuro, y evaluar los efectos producidos por cambios en el sistema; sin incurrir en ningún costo.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Estado del Arte

El DME fue desarrollado como propulsor de aerosol en 1963 por Akzo Nobel. A partir de 1970, los precios mundiales del petróleo comenzaron a subir y Amoco fue la primera empresa en invertir en I + D de DME. Hasta 1975, el DME se producía como subproducto (3-5%) junto con metanol en un proceso de producción a alta presión. Una patente alemana presentada en 1980 mencionaba que el DME estaba presente en el combustible a base de metanol. En 1990 se publicó una patente estadounidense sobre el funcionamiento de un motor diésel con 95% de DME (Prabowo et al., 2017, p.31).

En 1995, Haldor Topsoe, Amoco y Navistar International Corporation iniciaron conjuntamente una investigación sobre la síntesis a gran escala de DME y concluyeron que la deshidratación de metanol es una tecnología adecuada para la producción de DME. En 2001 se estableció la Asociación Internacional de DME seguida posteriormente por la Asociación China de DME (CDA), Japón DME Forum (JDF) y Korea DME Forum (KDF) (Mondal y Yadav, 2019, p.301).

El DME puede producirse por síntesis directa de DME a partir del gas de síntesis o por deshidratación del metanol. La síntesis directa se refiere a un solo paso a través del lecho fluidizado circulante o un reactor que utiliza un catalizador bifuncional. Las composiciones de los productos de reacción son complejas en comparación con el proceso de deshidratación del metanol. Sin embargo, todavía se encuentra en la etapa de desarrollo y práctica en la actualidad. La deshidratación de metanol ha demostrado ser más comercial. La aplicación práctica también indica que este método tiene varias ventajas que incluyen menos subproductos, alta selectividad y alta pureza (Bai et al., 2014, p.122).

El modelado y simulación de la producción de DME se ha estudiado para muchas escalas piloto y unidades industriales. Por ejemplo, Hu et al. (2008) modelan y analizan la producción de DME a partir de gas de síntesis en un reactor de carcasa de tubería en la condición de estado estable. Farsi et al. (2011) simulan un reactor industrial de síntesis DME y proponen un modelo que consta de un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales y algebraicas. La buena correlación entre los resultados de la simulación y los datos disponibles de un reactor industrial indica que el modelo

es racional. An et al. (2004) modelan un proceso de destilación catalítica utilizando parámetros cinético determinados por la experimentación; los resultados reflejan que la síntesis de DME de alta pureza se puede lograr utilizando una sola columna de destilación catalítica.

Aunque se han realizado muchos estudios de investigación sobre la simulación del reactor o el modelado del proceso de destilación de la producción de DME, la simulación del proceso de síntesis de DME a partir de la deshidratación del metanol parece poco común. Han et al. (2009) presentaron un proceso de producción para la síntesis de DME con gas de síntesis en un reactor de lecho de lodos. La investigación experimental y el análisis de procesos fueron suficientes para determinar los módulos de la unidad y los métodos de cálculo termodinámico para el proceso de simulación. Luego se simuló todo el proceso de producción y los resultados de la simulación fueron idénticos a los datos experimentales.

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Dimetil éter (DME)

El dimetil éter es el éter más simple, constituido por dos grupos metilo unidos por un átomo de oxígeno ($\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$). Se trata de una molécula de tamaño reducido y en condiciones ambientales se presenta en estado gaseoso.

2.2.1.1 Características del dimetil éter

- Es un gas incoloro que se licua aumentando la presión por encima de 5 veces la atmosférica, pues su presión de vapor es de 6 bar a 25°C. De esta manera, puede ser almacenado y transportado en condiciones similares a las del propano y butano (los llamados GLP). Sin embargo, resulta corrosivo ante una exposición prolongada, de modo que debe ser contenido en materiales inertes como pueda ser el politetrafluoroetileno.
- No ataca a los metales, pero sí a diferentes tipos de plásticos.
- La ausencia de enlaces entre carbonos, así como el elevado contenido en oxígeno y ausencia de S y N, le confieren una combustión limpia, además de silenciosa. Se reduce la formación de inquemados por una combustión más rápida, y las emisiones de SOx, NOx, así como las de CO y otros compuestos orgánicos.
- Como gas, es un 60% más denso que el aire, formando mezclas inflamables con él en un margen entre el 3,4 y el 17% en volumen. Ante un contacto continuado con el oxígeno del aire, puede formar peróxidos explosivos.

- Como líquido, resulta más ligero que el agua en un 30%, pudiéndose disolver en ella en torno a 328 g/L a 20°C.
- Sobre la salud humana, el principal peligro es el efecto narcótico. Concentraciones reducidas puede provocar mareos y pérdidas de consciencia, mientras que exposiciones prolongadas pueden ocasionar asfixia. En estado líquido, el contacto puede causar quemaduras y pérdidas permanentes de visión, en contacto con los ojos (Muñoz, 2018, p.15).

La siguiente tabla muestra las principales características fisicoquímicas del DME.

Tabla 1-2. Propiedades del dimetil éter

Características	Valor	Unidades
Masa molecular	46,069	g/mol
Punto de ebullición (1 atm)	-24,84	°C
Punto de fusión	-141,49	°C
Entalpía de vaporización	21,5089	kJ/mol
Entalpía de fusión	1,17918	kJ/mol
Entalpía de combustión	-1328,4	kJ/mol
Viscosidad (gas, 25°C, 1 atm)	0,110	cP
Densidad (gas, 25°C, 1 atm)	647,85	kg/m ³
Presión crítica	52,9978	atm
Temperatura crítica	126,95	°C
Punto triple	-141,5	°C

Fuente: Aspen Data Base V10, citado en Muñoz, 2018, p.15.

2.2.2 Aplicaciones del dimetil éter

Durante las últimas décadas, se ha prestado cada vez más atención a los problemas relacionados con la energía, como el agotamiento de los combustibles fósiles, la contaminación del medio ambiente y la seguridad energética. La conclusión generalmente aceptada es que se necesitan nuevas fuentes de energía alternativas. Uno de los productos químicos que podría considerarse el combustible del siglo XXI es el dimetiléter (DME) (Debek et al., 2015, p.1212).

El dimetiléter (DME) o metoximetano (nombre IUPAC) se ha considerado un sustituto de combustible alternativo para el diésel ya que reduce las emisiones NO_x, SO_x y compuestos orgánicos volátiles cuando se lleva a cabo la combustión (Mondal y Yadav, 2019, p.300).

Desde mediados de la década de 1990, el DME se ha identificado como una alternativa diésel confiable para el transporte de automóviles. En la Tabla 1 se informa una comparación de propiedades físico-químicas entre el combustible diesel y el DME, lo que permite identificar tanto las ventajas como las desventajas de usar DME como combustible alternativo en dichos motores. Un punto de ebullición más bajo conduce a una evaporación más rápida cuando se inyecta DME líquido en el cilindro del motor, mejorando la combustión. Además, una temperatura de

autoignición más baja permite obtener un índice de cetano más alto para DME que el exhibido por el combustible diesel. Generalmente, un índice de cetano alto da como resultado un encendido fácil, una combustión más completa y gases de escape más limpios; Además, un índice de cetano elevado permite reducir no solo el ruido, sino también el consumo de combustible y las emisiones de gases de escape durante el calentamiento del motor (Catizzone et al., 2018, p.4).

Tabla 2-2. Propiedades fisicoquímicas de DME y combustibles diesel

Propiedad	DME	Diesel	Unidad
Contenido de carbono	55,2	86	% masa
Contenido de hidrógeno	1-3	14	% masa
Contenido de oxígeno	34,8	0	% masa
Relación carbono-hidrógeno	0,337	0,516	-
Densidad Líquido	667	831	kg/m ³
Índice de cetano	>55	40-50	-
Temperatura de autoignición	508	523	K
Relación estequiométrica de masa de aire / combustible	9,6	14,6	-
Punto de ebullición normal	248,1	450-643	K
Entalpía de vaporización	467,1	300	kJ/kg
Valor mínimo de calentamiento	27,6	42,5	MJ/kg
Límites de ignición	3,4 / 18,6	0,6 / 6,5	% vol en aire
Módulos elásticos	6,37 x 10 ⁸	14,86 x 10 ⁸	N/m ²
Viscosidad cinemática líquida	<0,1	3	cSt
Tensión superficial (a 298 K)	0,012	0,027	N/m
Presión de vapor (a 298 K)	530	<10	kPa

Fuente: Arcoumani et al 2008; citado en Catizzone et al., 2018, p.4

Además de utilizarse como combustible, el DME se puede utilizar en muchas otras aplicaciones como:

- a) Sustituto del gas licuado de petróleo (GLP) para uso doméstico
- b) Como precursor en la producción de dimetilsulfato y ácido acético
- c) Como refrigerante
- d) Disolvente en la extracción de compuestos orgánicos (Rahmanpour et al., 2016, p.125).

La aplicación de DME puede abordar varios problemas relacionados con la energía: seguridad, conservación y accesibilidad, así como preocupaciones ambientales (Debek et al., 2015, p.1213).

2.2.3 Producción de DME a escala industrial

Actualmente, existen varios esquemas industriales para la fabricación de DME. El esquema más comúnmente utilizado es la producción indirecta de DME a partir de metanol: deshidratación de metanol a DME. Recientemente, ha habido desarrollos sobre la síntesis directa de DME a partir del gas de síntesis con el objetivo de producirlo a menor costo (Solomon, 2017, p.19).

El DME se puede producir de dos formas diferentes utilizando cualquier materia prima que contenga metano, gas natural, carbón, petróleo, biomasa, etc. El primer método que es el más popular en este momento es el método de síntesis indirecta de DME. Este método primero convierte la materia prima (por ejemplo, gas natural) en gas de síntesis (una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono). En presencia de un catalizador, el gas de síntesis se convierte en metanol; esta es una tecnología muy madura de producción de metanol. El metanol obtenido se deshidrata luego para obtener DME en presencia de otro catalizador. El método es indirecto porque es un proceso de dos pasos que involucra primero la producción de metanol y luego, DME. El segundo método es el método de síntesis directa de DME. Con este método, el DME se produce a partir del gas de síntesis directamente sin el paso intermedio de la producción de metanol (McKone et al., 2015, p.11).

El costo de DME también es menor con la síntesis directa debido a un diseño de reactor más simple. Este método, sin embargo, es más complejo que el método indirecto por deshidratación de metanol por lo que, el método de síntesis directa no era adecuado para fines comerciales, sin embargo, en los últimos años, ha habido un gran progreso hacia la adecuación del método para fines comerciales (Kong et al., 2020, p.18). La Figura 1-2 muestra un esquema de ambos métodos.

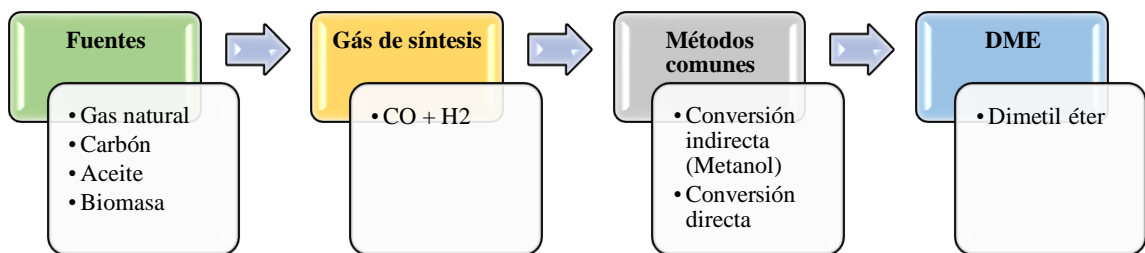


Figura 1-2. Producción de dimetil éter

Fuente: Solomon 2017, p.19.

2.2.3.1 Método indirecto

El proceso indirecto es un proceso catalítico de dos pasos en el que se sintetiza metanol a partir de gas de síntesis y luego se deshidrata para producir DME. Las reacciones para la producción

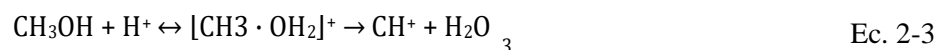
comercial de DME se muestran a continuación. Ec. (2-1) muestra la producción de metanol a partir de gas de síntesis y Ec. (2-2) la deshidratación de metanol a DME (Fleisch et al, 2015, p.96).



En presencia de un catalizador ácido, el metanol se deshidrata a DME, proceso en el que el agua como subproducto actúa como inhibidor de la reacción al competir con el metanol por los protones. Se ha informado de modelos cinéticos de la deshidratación del metanol en la literatura y la mayoría concluye que la reacción de deshidratación del metanol (Ec. 2-2) sigue el modelo cinético de Eley-Rideal o el modelo de Langmuir-Hinshelwood (Armenta et al., 2019, p.7278).

Para el proceso de deshidratación del metanol se han utilizado catalizadores ácidos como zeolita, alúmina y ácido sulfúrico (Mondal y Yadav, 2019, p.301). Por lo tanto, con la tecnología de catalizadores existente, la instalación de una planta de DME es bastante barata, pero el resultado es una mezcla de metanol, agua y DME que debe destilarse para su purificación, separación y reciclaje. El costo del metanol es uno de los factores decisivos para el precio del DME, que generalmente es el doble del costo del metanol (Cassone et al., 2017, p.6).

Según Bandiera y Naccache (1991), el mecanismo de formación de DME por deshidratación del metanol involucra dos sitios adyacentes en la superficie del catalizador, es decir, un sitio ácido (H^+) y otro sitio básico adyacente (O^{2-}). El metanol se protona en el sitio ácido para formar $[\text{CH}_3 \cdot \text{OH}_2]^+$ que se convierte instantáneamente en CH_3^+ y H_2O (Ec. 2-3). Una molécula de metanol se convierte en CH_3O^- y OH^- en el sitio básico adyacente (Ec. 2-4). Finalmente, el DME se forma al combinar las dos especies activadas (CH_3^+ y CH_3O^-) (Ec. 2-5).

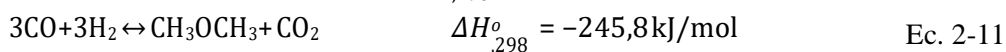
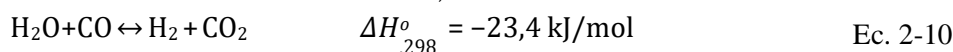
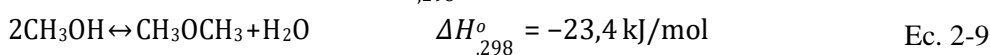
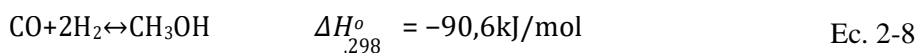


La mayoría de las plantas de DME operan con un proceso de síntesis indirecto en el que se utiliza un catalizador ácido sólido (generalmente alúmina) para la deshidratación en fase vapor del metanol. El H_2SO_4 también se utiliza como catalizador ácido en algunas industrias, p. Ej. Jiutai Energy Group de China. y el mecanismo de reacción se muestra a continuación (Ec. 2-5 y Ec. 2-6). Las ventajas de este proceso son que el ácido sulfúrico se puede reciclar varias veces y el ácido debilitado se utiliza como materia prima en la industria de fertilizantes; este proceso de deshidratación catalítica en fase líquida puede reducir el costo del proceso en un tercio del costo real (Takeishi, 2014, p.219).



2.2.3.2 Método directo

Aunque la síntesis directa de DME a partir del gas de síntesis es un proceso de una sola etapa, implica tres reacciones, es decir, la formación de metanol por hidratación del gas de síntesis, la deshidratación del metanol y la reacción de desplazamiento de agua y gas (WGS) (Ec. 2-8 a Ec. 2-10). El hidrógeno producido en la reacción de WGS se usa en la reacción de síntesis de metanol y el metanol (Ec.2-8) se deshidrata posteriormente a DME. Estas reacciones se llevan a cabo en un solo reactor empacado con un catalizador bifuncional donde ocurren simultáneamente las reacciones. La reacción general del proceso de gas de síntesis a dimetil éter se puede expresar como en la Ec. 2-11 (Takeishi, 2014, p.220).



El método directo de síntesis de DME es más práctico ya que ambas reacciones se realizan en un solo reactor y, por lo tanto, el costo operativo será menor. La integración de la formación de metanol y la reacción de esterificación de metanol hace que todo el proceso sea más favorable termodinámicamente, ya que la formación de metanol a partir de la hidrogenación del gas de síntesis es exotérmica y reversible (Ec. 2-1). La formación de moléculas de agua durante la reacción de deshidratación del metanol (Ec. 2-8) también es beneficiosa para la generación de hidrógeno en la reacción de WGR (Ec. 2-9). Las reacciones Ec 2-7, 2-8 y 2-9 producen un efecto sinérgico sobre el equilibrio de la reacción y, a medida que se convierte más metanol en DME, más metanol se produce mediante la hidratación del gas de síntesis (Takeishi, 2014, p.220).

2.2.3.3 Otros métodos de producción de DME

- *A partir del metano*

El metano tiene un alto potencial para ser utilizado como precursor de la producción de DME mediante un proceso de síntesis de dos pasos. En primer lugar, el metano es transformado en haluro de metilo (como CH_3Cl , CH_3Br) al reaccionar con haluro de hidrógeno mediante una reacción de halogenación oxidativa y luego el haluro de metilo se convierte en hidrocarburos superiores, incluido DME, mediante reacciones de hidrólisis y carbonilación (Mondal y Yadav, 2019, p.302).

- *Por hidrogenación de CO₂*

La hidrogenación de CO₂ (ver Ec. 2-12) es un método innovador que se ha desarrollado para la producción de metanol a partir de la hidrogenación de CO₂ utilizando un catalizador homogéneo o heterogéneo. El hidrógeno necesario para la reacción se puede obtener de la electrólisis del agua utilizando energía renovable y el CO₂ utilizado se puede obtener de los escapes de plantas industriales (plantas de cemento, centrales eléctricas, etc.) o de fuentes naturales como el CO₂ en gas natural o de pozos geotérmicos. Además de estos, el CO₂ también podría capturarse de la atmósfera (Solomon, 2017, p.26).



Utilizar CO₂ para la producción de DME puede ser una excelente alternativa ambiental para prevenir la acumulación de gases de efecto invernadero en el ambiente. Sin embargo, la tecnología actual no está lo suficientemente madura como para convertir CO₂ en DME con mayor tasa de conversión y selectividad (Mondal y Yadav, 2019, p.303).

2.2.4 DWSIM - El simulador de procesos químicos de código abierto

DWSIM es un simulador de procesos químicos multiplataforma compatible con CAPE-OPEN (Ingeniería de procesos asistida por computadora de próxima generación Entorno de simulación abierto, por sus siglas en inglés) disponible para Windows, Linux, Android, macOS e iOS. DWSIM permite a los estudiantes de ingeniería química e ingenieros en ejercicio modelar plantas de proceso utilizando rigurosos modelos termodinámicos y de operaciones unitarias. El potente motor de termodinámica de DWSIM también está disponible como una biblioteca gratuita (Medeiros, 2021). En la tabla del anexo A se detallan las características de DWSIM.

2.2.4.1 Licencia gratuita de DWSIM

DWSIM para Windows, Linux y macOS tiene la licencia GNU General Public License v3 (GPLv3). Mientras que para Android e iOS es de descarga gratuita y se distribuye bajo un modelo de negocio freemium, es decir, de descarga y uso gratuitos, con funciones adicionales que se pueden desbloquear mediante compras dentro de la aplicación (Medeiros, 2021).

Las licencias para la mayoría de software están diseñadas para quitar la libertad de compartir y modificar los trabajos desarrollados. Por el contrario, la General Public License (GNU) está destinada a garantizar la libertad del usuario para compartir y modificar todas las versiones de un programa, y asegurarse de que siga siendo software gratuito para todos sus usuarios (Free Software Foundation, 2020).

2.2.5 Redes neuronales artificiales

Una red neuronal artificial (RNA) es un modelo computacional inspirado en redes de neuronas biológicas, en el que las neuronas calculan valores de salida a partir de entradas. El poder de predicción de una red neuronal resulta de su comportamiento colectivo en una red donde todas las neuronas están interconectadas (Puri et al., 2016, p.4).

Las redes neuronales artificiales son sistemas de procesamiento computacional que se inspiran en gran medida en la forma en que operan los sistemas nerviosos biológicos (como el cerebro humano). Las redes neuronales artificiales se componen principalmente de un gran número de nodos computacionales interconectados (denominados neuronas), de los cuales trabajan entrelazados de manera distribuida para aprender colectivamente de la entrada con el fin de optimizar su salida final (O'Shea y Nash, 2015, p.2).

2.2.5.1 Estructura de una red neuronal artificial

La estructura básica de una red neuronal artificial se puede modelar como se muestra en la figura-2, en la que se representa una red neuronal feedforward de tres capas (FNR), compuesta por una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida (O'Shea y Nash, 2015, p.3).

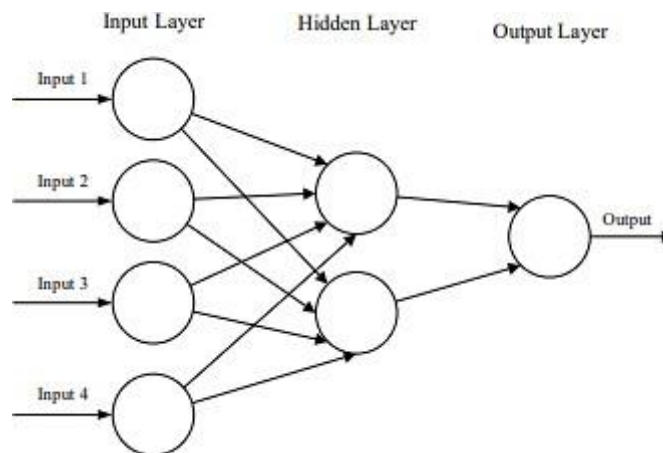


Figura 2-2. Estructura básica de una red neuronal artificial

Fuente: O'Shea y Nash, 2015, p.3

Se ingresan las entradas, generalmente en forma de vector multidimensional (base de datos) en la capa de entrada, la cual la distribuirá a las capas ocultas. Las capas ocultas tomarán decisiones a partir de la capa anterior y evaluarán si el valor obtenido perjudica o mejora el resultado final, y esto se conoce como el proceso de aprendizaje. Tener múltiples capas ocultas apiladas unas sobre otras se denomina comúnmente aprendizaje profundo (Liu, 2014, p.221).

2.2.5.2 Clasificación de las redes neuronales artificiales

Existen dos clasificaciones de las redes neuronales que destacan en función de sus características:

a) *Redes neuronales artificiales según su topología*

La topología de red consiste en la organización y disposición de las neuronas en la red formando capas o agrupaciones de neuronas en la entrada y salida de la red. Por lo que se deberá tener en cuenta el número de capas, número de neuronas por capa, el grado de conectividad y el tipo de conexiones entre neuronas (Hilera y Martínez, 1995, p.90).

Cuando se realiza una clasificación de las redes en según su topología, se suele identificar entre:

- *Redes monocapa:* constituidas por una única capa o nivel de neuronas
- *Redes multicapa:* este tipo de red necesita una capa intermedia para modelar una proyección no lineal entre los espacios de entrada y de salida, pues el aumento del número de neuronas en la red conlleva un aumento en la variación.

En una red multicapa de acuerdo al flujo de datos entre las distintas capas se pueden desarrollar redes unidireccionales, en las cuáles la información circula en un sólo sentido, desde la capa de entrada a la de salida y redes recurrentes o realimentadas, en las que la información puede circular entre capas en cualquier sentido, incluido desde la salida hacia la entrada (López et al., 2007, p.1080).

b) *Redes neuronales artificiales según el tipo de entrenamiento.*

Destacan dos redes neuronales artificiales según la tipología de aprendizaje en las tareas de procesamiento de datos (Lecun et al., 2015, p.436).

- *Aprendizaje supervisado*

El aprendizaje supervisado consiste en aprender a través de un conjunto de entradas y salidas preestablecidas, que actúan como objetivos. Para el entrenamiento, habrá un conjunto de valores de entrada (vectores) y uno o más valores de salida asociados. El objetivo de esta forma de entrenamiento es reducir el error de predicción general de los modelos, mediante el cálculo correcto del valor de salida (Lecun et al., 2015, p.436).

- *Aprendizaje no supervisado*

El aprendizaje no supervisado no requiere ningún conocimiento de los respectivos resultados o salidas deseadas. El éxito de la red dependerá de su capacidad para organizarse cuando existen particularidades entre los elementos que componen el conjunto muestral completo, identificando subconjuntos que presenten similitudes. Sin embargo, es importante tener en cuenta que la mayoría de las tareas de reconocimiento de patrones centradas en bases de datos generalmente dependen del entrenamiento mediante el aprendizaje supervisado (Lecun et al., 2015, p.436).

El proceso de entrenamiento de una red neuronal artificial puede ser desarrollado por el software Matlab a través de sus múltiples herramientas o toolbox incluidos en el programa como *nntool* o *nnfittig*.

CAPÍTULO III

3 METODOLOGÍA

La presente investigación se enfoca en la simulación de la planta de producción de dimetil éter por deshidratación de metanol. Para ello, una breve descripción de la metodología a seguir para el desarrollo del proyecto está comprendida en las siguientes etapas:

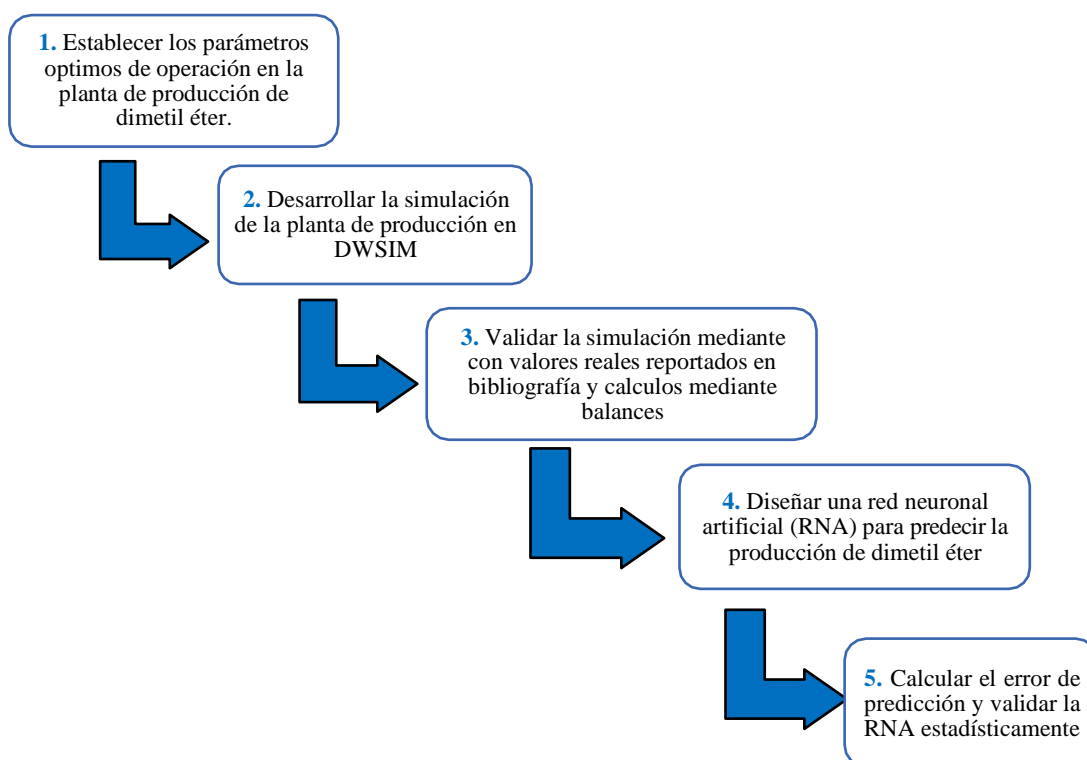


Figura 1-3. Metodología del proyecto

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Este trabajo de titulación primeramente tiene un enfoque cuantitativo esto debido a que, como punto de partida se utilizan los datos obtenidos por simulación del proceso de producción de dimetil éter en DWSIM como medidas numéricas para desarrollar una red neuronal artificial que permita obtener datos predichos de la producción de DME.

Por lo tanto, el proyecto será de tipo predictivo en vista de que se utilizan redes neuronales artificiales para predecir la producción de DME por deshidratación de metanol.

Las principales fuentes de información a utilizar para sustentar el desarrollo de este trabajo son:

- *Primaria*
 - Datos proporcionados por autores que lleven a cabo de forma experimental o por simulación la producción de DME por deshidratación de metanol.
- *Secundaria*
 - Artículos científicos publicados en revistas electrónicas, con información acorde al proceso de producción de DME.
 - Trabajos de titulación con temática similar al proyecto.
 - Páginas web oficiales de los programas computacionales utilizados en la investigación.
 - Libros electrónicos afines con este trabajo.

3.1 Establecimiento de parámetros óptimos de operación en la planta

Para seleccionar los parámetros óptimos de operación en la planta de producción de dimetil éter se tomará como referencia el diseño propuesto por Diemer y Luyben (2010) (Ver Figura 2-3).

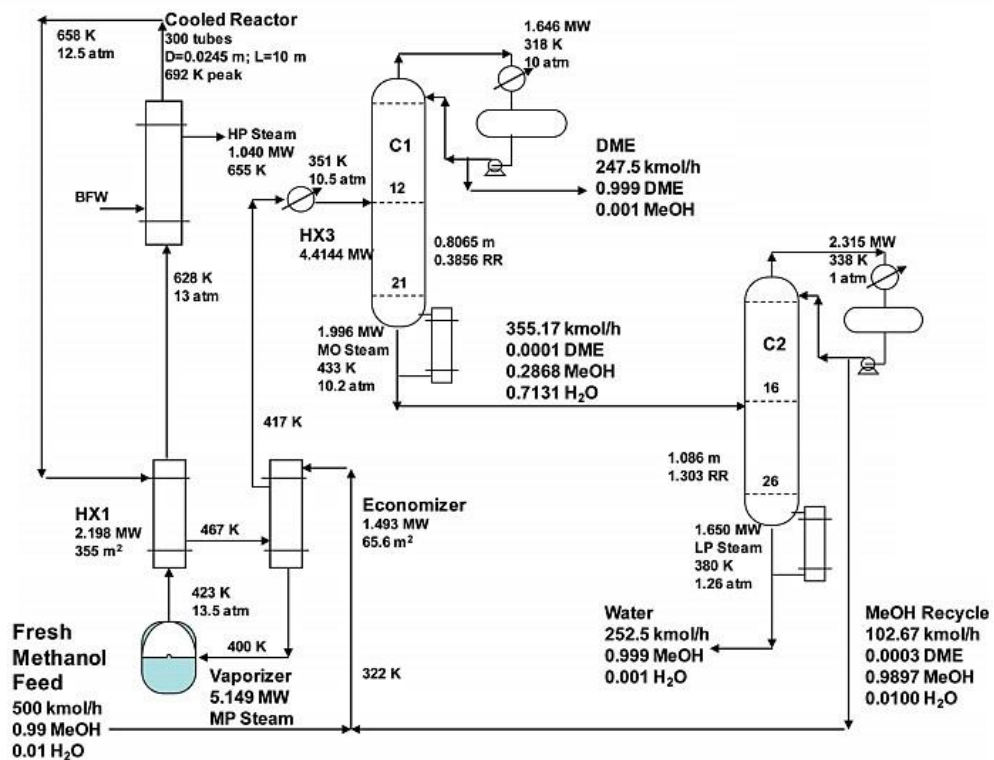


Figura 2-3. Diagrama de flujo de la planta de producción de dimetil éter

Fuente: Diemer y Luyben, 2010, p. 12225.

3.1.1 Descripción general del proceso

Se alimenta metanol fresco a un vaporizador a 500 kmol / h. La composición de la alimentación fresca es 99% en moles de metanol y 1% en moles de agua. También se alimenta una corriente de reciclado de metanol a 102,7 kmol / h al vaporizador, que funciona a 13,5 atm. Esta presión se establece mediante la presión de la columna de destilación aguas abajo de 10 atm, que se determina mediante la presión de vapor de DME a 318 K, de modo que se pueda usar agua de refrigeración en el condensador. La temperatura del vaporizador es de 423 K, lo que requiere vapor a presión media (11 atm, 457 K). El consumo de energía del vaporizador es de 5.149 MW (Diemer y Luyben, 2010, p. 12226).

La corriente de vapor se precalienta en un intercambiador de calor de alimentación-efluente (FEHE) a 628 K antes de ingresar al reactor tubular enfriado. El reactor tiene 300 tubos (0,0245 m de diámetro y 10 m de longitud). La temperatura óptima del medio es 665 K. Se utiliza un coeficiente de transferencia de calor global de 0,28 kW K⁻¹ m⁻². La conversión por pasada de metanol es del 82,9%. El efluente caliente del reactor sale a 658 K y se alimenta al FEHE para precalentar la alimentación del reactor. El FEHE transfiere 2.198 MW y enfría la corriente de vapor a 467 K. Se asume un coeficiente de transferencia de calor total de 0.17 kW K⁻¹ m⁻². La corriente se enfría aún más en un intercambiador de calor (economizador) que precalienta las corrientes de etanol fresco y reciclado a 400 K (coeficiente de transferencia de calor total: 0,28 kW K⁻¹ m⁻²). Luego, la corriente ingresa a un intercambiador de calor enfriado por agua que lo enfría a 351 K antes de ingresar a la primera columna de destilación (transferencia de calor general coeficiente: 0,85 kW K⁻¹ m⁻²) (Diemer y Luyben, 2010, p. 12226).

La columna C1 tiene 22 etapas y se alimenta en la etapa 12. La separación es fácil, por lo que se requieren pocas bandejas y una relación de reflujo de 0,38. El calor de entrada en el calderín es de 1.996 MW usando vapor de presión media ya que la temperatura base es de 433 K. El producto destilado es 99,9% en moles de DME con 0,1% en moles de metanol. Esta corriente de destilado líquido se bombea hasta la presión requerida en la sección de carbonilación de la planta (Diemer y Luyben, 2010, p. 12226).

La corriente de fondo es una mezcla de metanol y agua, que se alimenta a la columna C2 para su separación. La columna C2 produce un destilado de metanol de alta pureza (98,97% en moles de metanol, 0,03% en moles de DME y 1% en moles de agua), que se recicla de nuevo al vaporizador. Los fondos son agua de alta pureza (99,9% en moles). La columna opera a 1 atm, utilizando agua de refrigeración en el condensador y vapor a baja presión en el calderín (1,65 MW) (Diemer y Luyben, 2010, p. 12226).

Para analizar los parámetros de operación en la planta, se divide a la misma en tres partes principales según el diseño original, que serán: (1) sistema de reacción, (2) sistema de separación, (3) sistema de alimentación y recirculación (ver Figura 3-3).

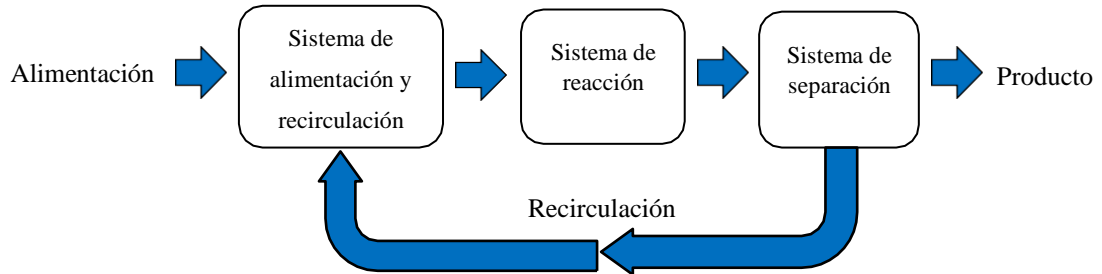


Figura 3-3. Etapas principales del proceso de producción

Fuente: Márquez, 2017, p.13

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

3.1.2 Sistema de reacción

El sistema de reacción será la base para mantener el proceso en marcha, cumpliendo las especificaciones necesarias para que la conversión en el reactor sea la más óptima. Para ello, habrá que indagar acerca de las reacciones químicas que se podrán dar en el reactor, condiciones típicas de operación y rangos, sistema catalítico y equilibrio. El sistema de reacción es, por así decirlo, el corazón de la planta, por lo que hay que especial atención en seleccionar un sistema capaz de cumplir con las especificaciones del proceso, en vistas a reducir la inversión, proteger el catalizador y hacer más sencilla su operabilidad (Márquez, 2017, p.13).

a) Producción de dimetil éter a partir de la deshidratación de metanol

Este proceso realiza la deshidratación en un reactor catalítico, que emplea como reactivo el metanol lo más puro posible para producir dimetil éter. Posterior a la reacción, ya que está limitada por el equilibrio químico, es necesario separar los compuestos en un sistema de destilación que permite recuperar y recircular el metanol que no ha reaccionado. La reacción principal que se lleva a cabo en el reactor es la siguiente:



La reacción es exotérmica, liberándose energía en su transcurso. Debido a esto, en un reactor adiabático la temperatura se incrementaría hasta el momento en el que se alcanzara el equilibrio. Por lo tanto, durante el diseño del sistema es necesario tener en cuenta este incremento de temperatura que se produce (Perez et al, 2018, p.111).

b) Condiciones de operación en el reactor

En vistas a obtener la mayor producción posible, el reactor deberá operar dentro de un margen seguro para mantener un buen funcionamiento de catalizador y una velocidad de reacción rápida, sin que ésta se ralentice demasiado en las últimas etapas de reacción (concentraciones bajas del reactivo), hecho que podría aumentar considerablemente el tamaño y, por tanto, el gasto económico en este equipo. Para ello, Diemer y Luyben (2010) cita la presión a la cual comienza a ser apreciable la pérdida de centros activos en el catalizador, y teniendo en cuenta que a mayor presión en el reactor se obtiene una mejor adsorción del reactivo, opera con una presión de 13 atm, que corresponde a una fracción molar de DME en la superficie del catalizador comprendida entre 0,07 y 0,095. Así se asegura que no hay inhibición en el catalizador por retención de DME. En cuanto a la temperatura de salida del reactor estará limitada por la desactivación del catalizador, que estará en torno a 692 K.

3.1.3 Sistema de separación

A la salida del reactor, se obtiene el producto DME y metanol sin convertir, metanol que será necesario recircular para conseguir un ahorro del gasto de reactivos y una mayor conversión global de la planta. Para separar el producto de los reactivos y obtener una pureza acorde con las exigencias del mercado, será necesario un sistema de separación. Para conseguir esta separación, el diseño de Diemer y Luyben (2010) opta por utilizar dos torres de destilación debido a las temperaturas y presiones de vapor de cada uno de los compuestos, que difieren lo suficiente como para conseguir una separación casi completa, es decir, una pureza muy elevada.

Tabla 1-3. Comparación de las temperaturas de ebullición

Compuesto	Temperatura de ebullición [K]
Dimetil Éter (DME)	249,15
Metanol (MeOH)	329,15
Agua (H ₂ O)	373,15

Fuente: Márquez, 2017, p.15

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

En las condiciones presentadas en la Tabla 1-3, el dimetil éter se presenta como un gas, mientras que el metanol y agua se presentan como líquido, por lo que es más fácil separar dimetil éter de los otros dos compuestos. En la Figura 4-3 puede observarse la presión de vapor de los componentes involucrados.

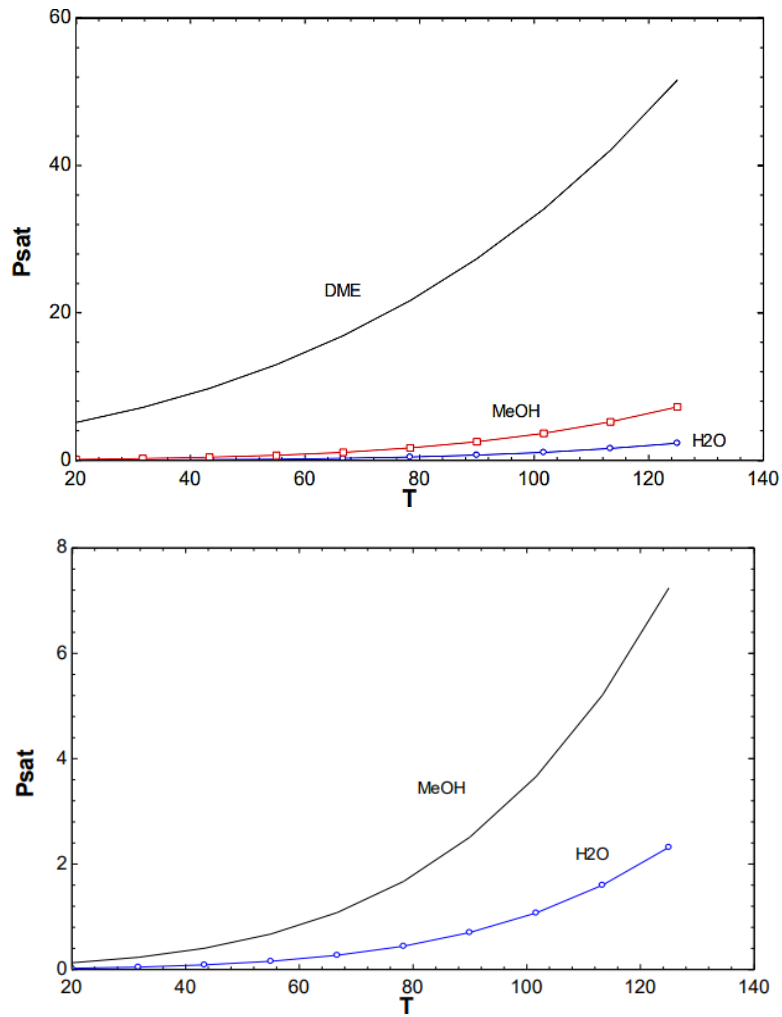


Figura 4-3. Presiones de vapor vs temperatura

Fuente: Márquez, 2017, p.16

Por tanto, la alternativa para llevar a cabo la separación de la mezcla DME – MeOH – H₂O en las que no existen azeótropos, consiste en un sistema conformado por dos torres de destilación.

a) Separar dimetil éter de metanol y agua

El DME en condiciones normales es un gas, a diferencia de los otros dos compuestos, que son líquidos. Esto significa que será fácil separar el DME del MeOH y H₂O ya que la volatilidad relativa es mayor, es decir, será más fácil separar DME del resto de componentes, que es lo que se propone en la Figura 5-3. Por otro lado, al eliminar uno de los tres componentes que se podrán encontrar en el sistema, se deja para la etapa final la separación más compleja (MeOH – H₂O), es decir, cuya volatilidad relativa será menor que la anterior. En la segunda columna, se tendría que separar el agua del metanol, un procedimiento más riguroso que ocurre a 1 atm.

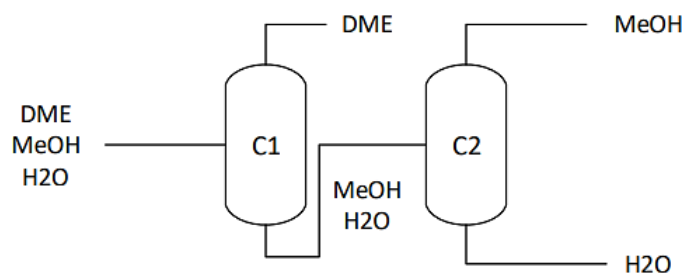


Figura 5-3. Esquema del sistema de separación

Fuente: Márquez, 2017, p.17

El rango de operación en las columnas será de 10 atm en la primera columna y de 1atm en la segunda con temperaturas comprendidas entre los 433 K para la primera columna y 380 K para la segunda.

3.1.4 Sistema de alimentación y recirculación

La alimentación a la planta será de 500 kmol/h, corriente que estará formada por metanol con una pequeña proporción de agua al 1% molar. Esta alimentación será mezclada con la corriente de destilado de la segunda columna, la cual contendrá principalmente metanol, con pequeñas cantidades de DME y H₂O. Esta corriente entrará en un vaporizador donde se producirá un cambio de fase a una presión fija, de 13,5 atm. Posteriormente, pasará por un intercambiador de calor que preparará la mezcla para el sistema de reacción.

3.1.5 Operacionalización de variables

3.1.5.1 Selección de variables

- Variables independientes
 - Temperatura de alimentación
 - Fracción molar de metanol en alimentación
 - Conversión en el reactor
 - Relación de reflujo en la primera columna
 - Temperatura del reboiler en la primera columna
 - Relación de reflujo en la segunda columna
- Variables dependientes
 - Flujo molar de destilado en la primera columna
 - Fracción molar de dimetil éter en destilado de la primera columna

3.1.5.2 Operación de variables

Tabla 2-3. Operación de variables del proceso

Variables			Unidades
Independiente	Temperatura de alimentación	T_F	K
	Fracción molar de metanol en alimentación	X_{MeOH}	adimensional
	Conversión en el reactor	$C_{reactor}$	%
	Relación de reflujo en la primera columna	RR_{C1}	adimensional
	Temperatura del reboiler en la primera columna	TR_{C1}	K
	Relación de reflujo en la segunda columna	RR_{C2}	adimensional
Dependiente	Flujo molar de destilado en la primera columna	D_1	Kmol/h
	Fracción molar de dimetil éter en destilado de la primera columna	$X_{DME,D1}$	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

3.2 Simulación de la producción de dimetil éter en DWSIM

En este apartado se detallan aspectos que se tomaron en cuenta para llevar a cabo la simulación de la planta de producción de dimetil éter (ver Figura 6-3) partiendo de parámetros del proceso descritos por Diemer y Luyben (2010).

Para el sistema de reacción se seleccionó un reactor de conversión donde ocurren reacciones definidas por cantidades de reactivos convertidos en función de la temperatura mediante la siguiente reacción:

- Reacción de producción de dimetil éter por deshidratación de metanol:



El reactor de conversión, al igual que el trabajo realizado por Diemer y Luyben opera con un 85% de la conversión de metanol en fase vapor para formar DME y agua.

La corriente de alimentación del proceso contiene 99% en moles de metanol y 1% en moles de agua, que también se mezcla con la corriente de recirculación de metanol recuperado en el destilado de segunda columna. En la Tabla 3-3, se especifican las condiciones de la corriente de alimentación.

Tabla 3-3. Condiciones de la corriente de alimentación

Parámetro	Valor	Unidad
Paquete de propiedades termodinámicas	Peng Robinson	adimensional
Algoritmo flash termodinámico	Nested Loops (VLE)	adimensional
Temperatura	320	K
Presión	1	atm

Flujo molar	500	kmol/h
Flujo másico	15950,9	kg/h
Flujo volumétrico	20,7214	m ³ /h
Fraccion molar de MeOH	0,99	adimensional
Fraccion molar de H ₂ O	0,01	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Como la reacción ocurre con metanol en fase vapor, antes de ingresar al reactor, la corriente de alimentación se calienta hasta 628 K utilizando un tren de intercambiadores de calor, también se usa una caldera en el circuito de integración de calor para calentar la corriente de alimentación y minimizar el consumo de energía en el proceso.

La corriente de salida del reactor tiene una temperatura de 692K y consta de 14,03% en moles de metanol, 46,22% en moles de agua y 39,75% en moles de DME, esta mezcla se enfría (cede su calor a la corriente de alimentación) en el circuito de integración de calor y también se usa un condensador alternativo en el que la corriente se enfría hasta una temperatura de 351K antes de ingresar en la primera columna.

Para el sistema de separación se utilizaron dos columnas, la primera para separar DME y la segunda para recuperar metanol con las condiciones de operación descritos en la siguiente tabla.

Tabla 4-3. Condiciones de operación en las columnas

Parámetro	Columna de separación de DME	Columna de recuperación de MeOH	Unidad
Valor K	DECHEMA	DECHEMA	adimensional
Coefficiente de actividad	UNIFAC	NRTL	adimensional
Presión de vapor	Antoine	Antoine	adimensional
Presión en el condensador	10	1	atm
Presión en el calderín o reboiler	10,2	1,26	atm
Número de platos	22	27	adimensional
Plato de alimentación	12	16	adimensional
Relación de reflujo	0,3856	1,303	adimensional
Temperatura del condensador	318	338	K
Temperatura del calderín	433	380	K

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

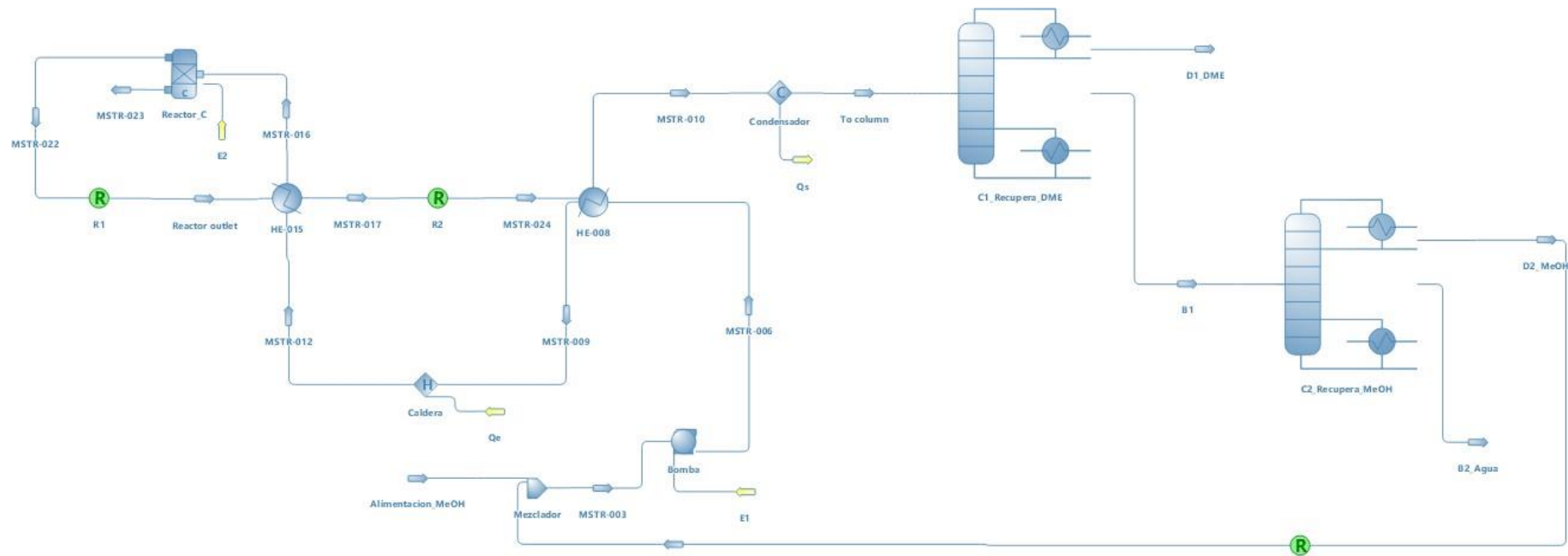


Figura 6-3. Planta de producción de dimetil éter en DWSIM

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

3.2.1 Validación de la simulación

Una vez desarrollada la simulación de la planta de producción de dimetil éter, es necesario validar los resultados obtenidos en DWSIM comparándolos con los resultados reportados por Dimer y Luyben. En la siguiente tabla se muestra la validación de simulación en función del porcentaje de error.

Tabla 5-3. Validación de la simulación para la producción de DME

Corriente de flujo	Variable	Dimer y Luyben (2010)	DWSIM	Error (%)
Destilado de la columna de separación de dimetil éter	Flujo molar	247,5	260,114	5,10
	Fracción molar de DME	0,999	0,907841	9,13

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

De los resultados presentados en la Tabla 5 3 existe un error porcentual promedio de 7,11% en la validación de la simulación para la producción de DME, un error del 5,10% para el flujo molar de destilado en la columna de separación del DME, y un error del 9,13% para la fracción molar de DME está relacionado con el error relativo de valores muy pequeños (menores de 1) para la fracción molar. Estos errores también están relacionados con la simulación en el software libre DWSIM, software que se encuentra en constante actualización, y el método iterativo de Newton que se emplea para el cálculo de los resultados. Sin embargo, según Luna (2020) al comparar los resultados de una simulación con los resultados obtenidos en la literatura, es posible validar una simulación con un margen de error menor al 10%; lo que la convierte a la simulación de la planta y por ende al software DWSIM en una opción viable para la formación de ingenieros químicos y brinda un importante soporte para la toma de decisiones, que puede ser utilizado en la industria química. En un apartado posterior también se realizará una validación de resultados mediante un balance de masa de la columna de separación de DME.

3.3 Diseño de la red neuronal artificial para predecir la producción de DME

3.3.1 Recopilación de la base de datos

Para diseñar una red neuronal artificial que prediga la producción de DME por deshidratación de metanol primero se deben establecer los variables de entrada y salida en el modelo de predicción. Seleccionando las principales condiciones de operación que pueden influir en la cantidad de DME obtenido en la planta, se han establecido 6 variables de entrada y 2 variables de salida como se describe en la siguiente tabla.

Tabla 6-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial

Capa	Variables		Unidades
Entrada	Temperatura de alimentación	T_F	K
	Fracción molar de metanol en alimentación	X_{MeOH}	adimensional
	Conversión en el reactor	$C_{reactor}$	%
	Relación de reflujo en la primera columna	RR_{C1}	adimensional
	Temperatura del reboiler en la primera columna	TR_{C1}	K
	Relación de reflujo en la segunda columna	RR_{C2}	adimensional
Salida	Flujo molar de destilado en la primera columna	D_1	Kmol/h
	Fracción molar de dimetil éter en destilado de la primera columna	$X_{DME,D1}$	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Luego, para diseñar el modelo de predicción es necesario recopilar una base de datos validados y obtenidos por simulación de la planta. Para ello, a partir de las variables y rangos estipulados en la tabla 8-3 se generan 100 datos aleatorios de las variables de entrada, para determinar las salidas mediante la simulación en DWSIM.

Tabla 7-3. Rangos de operación de las variables de entrada en la RNA

Parámetro	Rango	Unidades
Temperatura de alimentación	273 - 330	K
Fracción molar de metanol en alimentación	0,70 - 0,99	adimensional
Conversión en el reactor	80 - 90	%
Relación de reflujo en la primera columna	0,20 - 1,00	adimensional
Temperatura del reboiler en la primera columna	420 - 450	K
Relación de reflujo en la segunda columna	1,00 - 5,00	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

3.3.2 Normalización de la base de datos

Para desarrollar el modelo de predicción se debe reducir la redundancia de los datos mediante una normalización de entradas y salidas. La normalización consiste en representar los valores en otra escala, que está comprendida en el intervalo 0 y 1, este procedimiento es indispensable para mejorar el proceso de aprendizaje de la red neuronal artificial (Rosario, 2020). La ecuación de la normalización de datos es la siguiente:

$$X_N = X \frac{X - X_{\min}}{\max - X_{\min}} \quad \text{Ec. 3-3}$$

Donde:

X_N = valor normalizado

X = valor que se desea normalizar

X_{\min} = valor mínimo

X_{\max} = valor máximo

3.3.3 Desarrollo de la red neuronal en Matlab

Con la base de datos normalizada se procede a seleccionar dentro del toolbox de Matlab a la herramienta Neural Net Fitting, esta opción permite iniciar un asistente de diseño de red. En la Figura 7-3 se muestra una breve descripción sobre la herramienta.

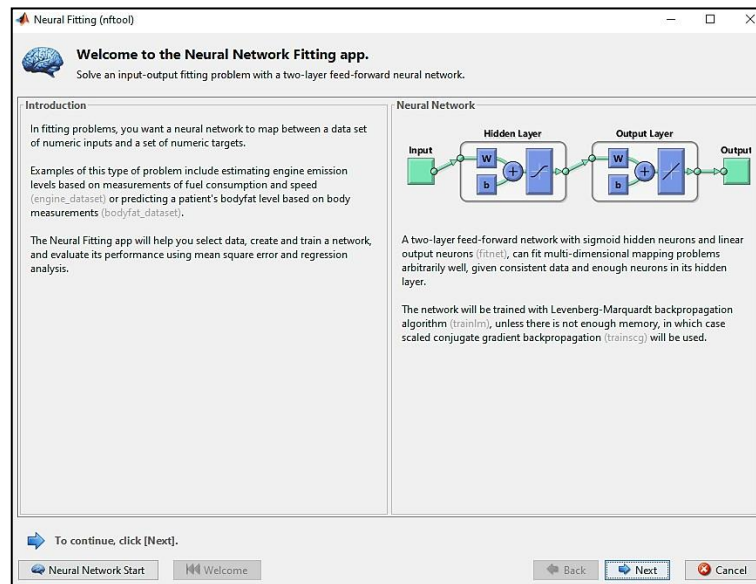


Figura 7-3. Herramienta Neural Fitting de Matlab

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Luego se seleccionan las entradas y salidas normalizadas como se observa en la figura 8-3:

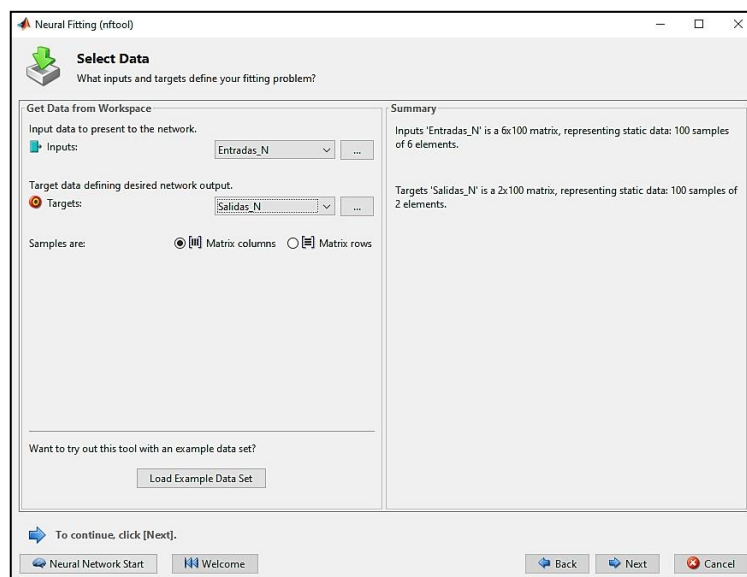


Figura 8-3. Selección de entradas y salidas normalizadas

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

De la Figura 8-3, la variable de los datos de entrada para el diseño de la red neuronal artificial tiene el nombre de Entradas_N, mientras que los datos de salida u objetivos están definidos con la variable Salidas_N. Aquí es importante mencionar que los datos de entrada y salida estén definidos como una matriz de columnas y por tanto ambas variables vinculadas con la base de datos deben tener el mismo número de filas y columnas.

3.3.4 Entrenamiento de la red neuronal artificial

Durante el entrenamiento de la red es indispensable establecer el número óptimo de neuronas en la capa oculta y el algoritmo de entrenamiento (Figura 10-3). Según López et al (2007) una red con una única capa oculta tiene menos variación y proporciona mayor capacidad de generalización; por tanto en este trabajo no se modifica el número de capas ocultas. Se inicia con 10 neuronas en la capa oculta y en función de los indicadores de desempeño de la red se irá aumentando progresivamente el número de neuronas en la capa oculta.

Los indicadores de desempeño son el error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de correlación (R), y sus ecuaciones se detallan a continuación:

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n (y' y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2][n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2]}} \quad \text{Ec. 4-3}$$

Donde:

R = coeficiente de correlación lineal

y = resultados de la simulación de la planta en DWSIM

y' = resultados predichos por la red neuronal artificial

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2 \quad \text{Ec. 5-3}$$

Donde:

n = número de experimentaciones.

y_t = resultados de la simulación de la planta en DWSIM

y'_t = resultados predichos por la red neuronal artificial

Los ensayos realizados para establecer el número óptimo de neuronas en la capa oculta se resumen en la Tabla 8-3 con sus correspondientes indicadores de desempeño. Los indicadores de desempeño se obtuvieron a partir de los gráficos generados por Matlab durante el entrenamiento de la red.

Tabla 8-3. Ensayos de selección del número de neuronas y el algoritmo de entrenamiento.

Arquitectura de red	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
6-10-2	1,53E-02	0,88630	1,08E-02	0,92168	1,26E-02	0,90683
6-15-2	3,48E-02	0,72215	7,78E-03	0,94771	1,92E-02	0,85644
6-17-2	1,37E-02	0,89952	7,99E-03	0,95003	2,90E-02	0,78744
6-20-2	1,93E-02	0,85792	1,64E-02	0,87758	1,53E-02	0,88672
6-25-2	1,20E-02	0,92390	1,21E-02	0,91981	1,46E-02	0,89414
6-27-2	2,17E-02	0,87216	4,41E-03	0,88379	1,68E-02	0,88086
6-30-2	2,16E-02	0,85224	1,64E-02	0,87704	1,60E-02	0,88813
6-50-2	3,19E-02	0,79387	6,53E-03	0,95420	2,36E-02	0,85925
6-65-2	2,18E-02	0,86369	1,15E-02	0,92427	3,91E-02	0,77754
6-88-2	1,15E-02	0,81134	1,03E-02	0,93469	6,39E-02	0,65288
6-120-2	6,22E-02	0,74368	1,59E-02	0,88129	9,94E-02	0,62829
6-150-2	1,63E-01	0,53625	8,64E-03	0,93994	1,46E-01	0,51984
6-235-2	2,67E-01	0,42597	1,00E-02	0,92864	1,85E-01	0,44317
6-285-2	2,98E-01	0,45772	8,29E-03	0,94323	4,21E-01	0,30561
6-340-2	4,64E-01	0,23321	1,59E-02	0,88120	4,12E-01	0,40132
6-400-2	7,03E-01	0,18469	1,42E-02	0,89520	4,71E-01	0,25354
6-465-2	6,07E-01	0,39700	1,56E-02	0,96941	1,25E+00	0,19160
6-535-2	8,32E-01	0,33742	1,32E-02	0,48994	1,02E+00	0,07373

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Se estableció que la mejor arquitectura para la red neuronal tiene los siguientes parámetros de diseño (ver Figura 9-3):

- 6 neuronas de entrada
- 465 neuronas en la capa oculta
- 2 neuronas en la capa de salida

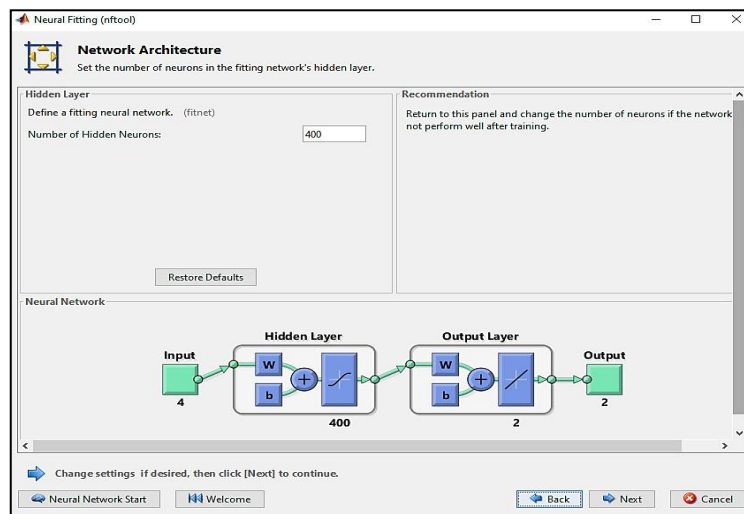


Figura 9-3. Arquitectura de la red neuronal artificial

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Adicionalmente, la red neuronal artificial trabaja con las siguientes funciones de activación, que están configuradas automáticamente por la herramienta Neural Net Fitting:

- Función de transferencia en la capa oculta: Hyperbolic tangent sigmoid (tansig).
- Función de transferencia para la capa de salida: Función lineal (purelin)

Durante el entrenamiento de la red neuronal es importante seleccionar el algoritmo de entrenamiento. Para entrenar la red neuronal artificial, se selecciona el algoritmo de regularización bayesiana porque este algoritmo ayuda a evitar el problema de sobreajuste de los datos y logra resultados de estimación más precisos. El algoritmo de Bayesian Regularization (BR) actualiza los pesos y los valores de sesgo de acuerdo con la optimización de Levenberg-Marquardt (LM) minimizando una combinación de errores al cuadrado y pesos, y luego determina la combinación correcta para producir una red que generalice bien (Pan et al., 2013, p.24).

De los ensayos presentados en la Tabla 8-3, además de establecer la mejor topología de red, también es posible determinar que el algoritmo de regularización bayesiana presenta la mejor correlación (R) y menor error (MSE) a diferencia de los algoritmos Levenberg-Marquardt y Scaled Conjugate Gradient. En la herramienta de diseño de la red neuronal, se presenta al algoritmo Bayesian Regularization como “*trainbr*” (ver Figura 11-3).

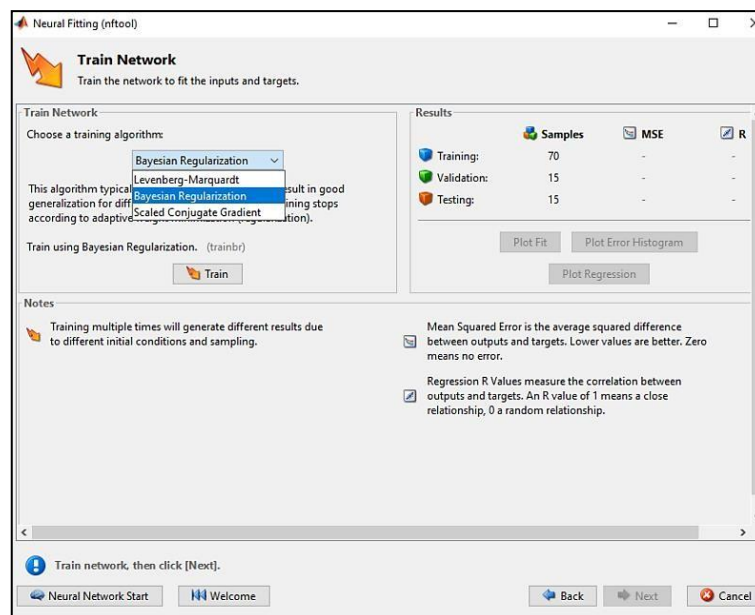


Figura 10-3. Selección del algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

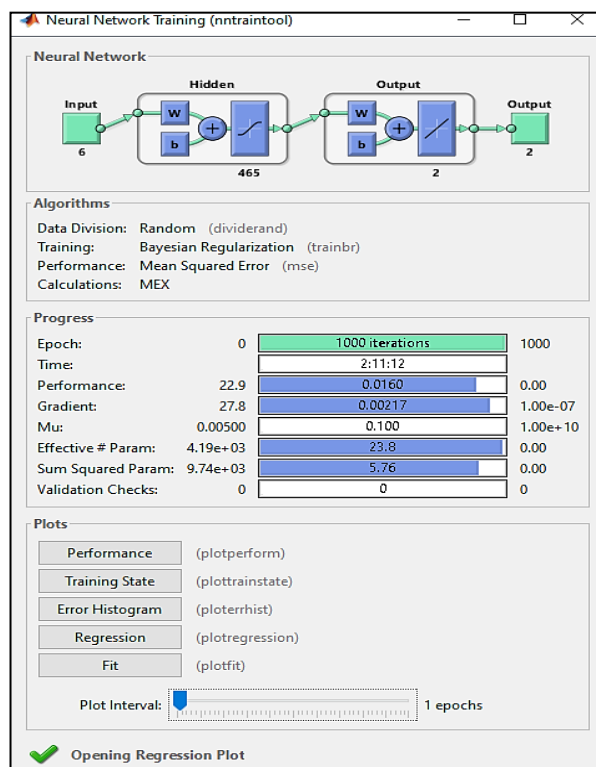


Figura 11-3. Proceso de entrenamiento de la red

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

3.3.5 Validación de la red neuronal artificial

En la validación del modelo de predicción, se comparan los resultados obtenidos por la red con los resultados obtenidos por simulación en DWSIM; empleando un nuevo conjunto conformado por 15 datos y se evalúa la predicción realizando un análisis estadístico.

En este estudio se lleva a cabo un análisis de la varianza (ANOVA), que es un método estadístico utilizado cuando se necesita contrastar la hipótesis de igualdad de medias dentro de un conjunto de dato eligiendo entre dos hipótesis:

- Hipótesis nula: las medias entre los datos a comparar son iguales
- Hipótesis alternativa: al menos una de las medias entre los datos a comparar es diferentes

Tabla 9-3. Tabla ANOVA para el análisis de la varianza

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,0000347763	1	0,0000347763	0,10	0,9612
Intra grupos	0,403204	28	0,0144001		
Total (Corr.)	0,403238	29			

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

El valor clave en la tabla ANOVA es el P-valor. Un valor de P mayor a 0,05 conllevaría a aceptar la hipótesis nula con un 95,0% de confianza y por lo tanto concluir que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables analizadas.

CAPÍTULO IV

4 GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1 Cronograma

Tabla 1-4. Cronograma del trabajo de titulación

ACTIVIDAD	MESES																			
	MES 1				MES 2				MES 3				MES 4				MES 5			
	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 los parámetros óptimos de operación en la planta de producción de DME					■	■	■	■												
Simulación y validación de la planta de producción de DME									■	■	■	■								
Determinación de entradas y salidas para la red neuronal artificial									■	■	■									
Diseño de la red neuronal									■	■	■	■								
Validación de la red mediante análisis estadístico													■	■	■					
Redacción del trabajo final									■	■	■	■	■	■	■	■				
Revisión del documento final									■	■	■	■	■	■	■	■				
Auditoria académica																	■	■		
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.2 Presupuesto

Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto

Concepto	Cantidad	Valor Unitario	Valor Total	Fuente De Financiamiento	
				Interna	Externa (Espoch)
Material de Oficina					
Impresión del documento final	1	30	30,00	x	
Copias e impresiones adicionales	40	0,5	20,00		
Empastados	1	30,00	30,00	x	
Subtotal			80,00		
Logística				x	
Internet	5	125	125,00	x	
Licencia estudiantil de Matlab	1	55	55,00	x	
Imprevistos	1	30	30,00	x	
Subtotal			210,00	x	
Total			290,00	x	

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.3 Recursos humanos y materiales

4.3.1 Talento humano

Estudiante que realiza la propuesta tecnológica: Mishell Cando

Docentes de apoyo: Ing. Darío Fernando Guamán Lozada, Ing. Linda Mariuxi Flores Fiallos.

4.3.2 Recursos materiales

Tabla 3-4. Equipos y softwares empleados durante el desarrollo del proyecto

Equipo y software	Descripción	Uso
Computadora	Procesador Intel (R) Core (TM) i7-10510 U CPU a 1.80 GHz con 8 GB de memoria RAM y un sistema operativo de 64 bits con Windows 10.	- Simulación - Diseño de la red neuronal artificial - Análisis estadístico
DWSIM	Software simulador de procesos químicos.	Simular la planta de producción
Matlab	Software simulador de redes neuronales artificiales.	Diseñar la red neuronal artificial.
SPSS	Software de análisis estadístico.	Validar la red neuronal artificial

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.4 Resultados

4.4.1 Simulación de la planta en DWSIM

Empleando los parámetros iniciales descritos durante la metodología (ver Tabla 3-3 y Tabla 4-4) para simular la planta de producción de dimetil éter por deshidratación de metanol se obtienen los siguientes resultados para el sistema de reacción y el sistema de separación.

4.4.1.1 Resultados del sistema de reacción

Tabla 4-4. Corriente de entrada en el reactor

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	627,526	K
Presión	12,52	atm
Flujo másico	18499,4	kg/h
Flujo molar	594,192	kmol/h
Flujo volumétrico	2378,21	m ³ /h
Peso molecular	31,1338	kg/kmol
Entalpía específica	564,195	kJ/kg
Entropía específica	0,684752	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	17565,5	kJ/kmol
Entropía molar	21,3189	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,0571189	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,935094	adimensional
Fracción molar de agua	0,0648278	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	7,79E-05	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 5-4. Resultados del reactor de conversión

Variable	Valor	Unidades
Delta -T	64,474	K
Energía	11,5318	MW
Conversión de metanol	85	%

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 6-4. Corriente de salida del reactor

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	692	K
Presión	12,52	atm
Flujo másico	18499,4	kg/h
Flujo molar	594,196	kmol/h
Flujo volumétrico	2653,63	m ³ /h
Peso molecular	31,1335	kg/kmol

Entalpía específica	765,093	kJ/kg
Entropía específica	1,2243	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	23820,1	kJ/kmol
Entropía molar	38,1167	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,0641208	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,140264	adimensional
Fracción molar de agua	0,462243	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	0,397493	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.4.1.2 Resultados del sistema de separación

Tabla 7-4. Corriente de alimentación en la columna de separación del dimetil éter

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	351	K
Presión	10,5531	atm
Flujo másico	18470,6	kg/h
Flujo molar	592,597	kmol/h
Flujo volumétrico	626,114	m ³ /h
Peso molecular	31,1689	kg/kmol
Entalpía específica	-676,821	kJ/kg
Entropía específica	-1,96531	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-21095,8	kJ/kmol
Entropía molar	-61,2567	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,251639	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,140645	adimensional
Fracción molar de agua	0,460791	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	0,398564	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 8-4. Corriente de destilado en la columna de separación del dimetil éter

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	321,464	K
Presión	9,86923	atm
Flujo másico	11625,9	kg/h
Flujo molar	260,114	kmol/h
Flujo volumétrico	23,1379	m ³ /h
Peso molecular	44,6954	kg/kmol
Entalpía específica	-410,844	kJ/kg
Entropía específica	-1,5684	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-18362,8	kJ/kmol
Entropía molar	-70,1001	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,0853212	W/ [m. K]

Fracción molar de metanol	0,0864282	adimensional
Fracción molar de agua	0,00573121	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	0,907841	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 9-4. Corriente de residuo en la columna de separación del dimetil éter

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	433,759	K
Presión	10,1653	atm
Flujo másico	6844,75	kg/h
Flujo molar	332,484	kmol/h
Flujo volumétrico	8,15658	m ³ /h
Peso molecular	20,5867	kg/kmol
Entalpía específica	-1557,93	kJ/kg
Entropía específica	-4,15944	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-32072,6	kJ/kmol
Entropía molar	-85,6291	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,448383	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,183061	adimensional
Fracción molar de agua	0,816799	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	0,000139458	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 10-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de metanol

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	342,561	K
Presión	1	atm
Flujo másico	2548,63	kg/h
Flujo molar	94,1951	kmol/h
Flujo volumétrico	3,13287	m ³ /h
Peso molecular	27,057	kg/kmol
Entalpía específica	-1385,87	kJ/kg
Entropía específica	-3,724	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-37497,4	kJ/kmol
Entropía molar	-100,76	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,244848	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,643628	adimensional
Fracción molar de agua	0,355879	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	4,92E-04	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 11-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de metanol

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	380,746	K
Presión	1,26	atm
Flujo másico	4296,12	kg/h
Flujo molar	238,289	kmol/h
Flujo volumétrico	4,51116	m ³ /h
Peso molecular	18,029	kg/kmol
Entalpía específica	-2160,24	kJ/kg
Entropía específica	-5,71848	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-38947	kJ/kmol
Entropía molar	-103,099	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,682142	W/ [m. K]
Fracción molar de metanol	0,001	adimensional
Fracción molar de agua	0,999	adimensional
Fracción molar de dimetil éter	3,89E-21	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.4.1.3 Balance de masa del sistema de separación

Se realiza un balance de masa en el sistema de separación con el propósito de validar por medio de cálculos la cantidad de dimetil éter obtenida por la planta mediante simulación. Las condiciones para realizar el balance se describen en el diagrama de flujo de la planta presentado en el ANEXO B y se resumen en la siguiente tabla.

Tabla 12-4. Resultados de la simulación de la planta de producción

Variable	F ₁	F ₂	D ₁	B ₁	D ₂	B ₂	Unidades
Flujo molar	500	592,597	260,114	332,484	94,195	238,289	kmol/h
Fracción molar MeOH	0,99	0,140645	0,08642	0,183061	0,643628	0,001	adimensional
Fracción molar H ₂ O	0,01	0,460791	0,005731	0,816799	0,355879	0,999	adimensional
Fracción molar DME	-	0,398564	0,907841	0,000139	4,92E-04	3,89E-21	adimensional

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

- *Flujo de alimentación en la planta de producción de dimetil éter*

$$F_1 = 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 1-4}$$

- *Balance de masa en el mezclador*

$$F_1 + D_2 = F_2 \quad \text{Ec. 2-4}$$

$$D_2 = F_2 - 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 3-4}$$

Donde:

F_1 = Flujo molar de alimentación del proceso

F_2 = Flujo molar de alimentación en la primera columna

D_2 = Flujo molar de destilado en la segunda columna

- *Balance de masa en el reactor*

$$E \pm G = S \quad \text{Ec. 4-4}$$

$$F_1 + D_2 = F_2 \pm G \quad \text{Ec. 5-4}$$

$$F_1 + D_2 = F_2 \pm R_1 \quad \text{Ec. 6-4}$$

Donde:

F_1 = Flujo molar de alimentación del proceso

F_2 = Flujo molar de alimentación en la primera columna

D_2 = Flujo molar de destilado en la segunda columna R_1 =

Reacción de deshidratación de metanol



- *Balance de metanol en el reactor*

$$X_{\text{MeOH}}F_1 + X_{\text{MeOH}}D_2 = X_{\text{MeOH}}F_2 - 2R_1 \quad \text{Ec. 8-4}$$

$$\frac{X_{\text{MeOH}}F_2 - X_{\text{MeOH}}F_1 - X_{\text{MeOH}}D_2}{2} R_1 = \quad \text{Ec. 9-4}$$

- *Balance de agua en el reactor*

$$X_{\text{H}_2\text{O}}F_1 + X_{\text{H}_2\text{O}}D_2 = X_{\text{H}_2\text{O}}F_2 + R_1 \quad \text{Ec. 10-4}$$

$$R_1 = X_{\text{H}_2\text{O}}F_2 - X_{\text{H}_2\text{O}}F_1 - X_{\text{H}_2\text{O}}D_2 \quad \text{Ec. 11-4}$$

Iguando Ec. 9-4 con Ec. 11-4, entonces:

$$\frac{X_{\text{MeOH}}F_2 - X_{\text{MeOH}}F_1 - X_{\text{MeOH}}D_2}{2} = X_{\text{H}_2\text{O}}F_2 - X_{\text{H}_2\text{O}}F_1 - X_{\text{H}_2\text{O}}D_2$$

$$\frac{X_{\text{MeOH}}F_2 - X_{\text{MeOH}}F_1 - X_{\text{MeOH}}D_2}{2} = X_{\text{H}_2\text{O}}F_2 - X_{\text{H}_2\text{O}}F_1 - X_{\text{H}_2\text{O}}D_2$$

Reemplazando Ec. 3-4 en D_2 y datos de las fracciones molares:

$$\frac{X_{\text{MeOH}}F_2 - X_{\text{MeOH}}F_1 - X_{\text{MeOH}}(F_2 - F_1)}{2} = [X_{\text{H}_2\text{O}}F_2 - X_{\text{H}_2\text{O}}F_1 - X_{\text{H}_2\text{O}}(F_2 - F_1)]$$

$$\frac{(0.140645)F_2 - (0.99)(500) - (0.643625)(F_2 - 500)}{2} = (0.460791)F_2 - (0.01)(500) - (0.355879)(F_2 - 500)$$

$$F_2 = 589,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 12-4}$$

Reemplazando F_2 en Ec. 3-4

$$D_2 = 589,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$D_2 = 89,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 13-4}$$

- *Balance de masa en la columna de separación de dimetil éter*

$$F_2 = D_1 + B_1 \quad \text{Ec. 14-4}$$

$$D_1 = 589,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - B_1 \quad \text{Ec. 15-4}$$

Donde:

F_2 = Flujo molar de alimentación en la primera columna

D_1 = Flujo molar de destilado en la primera columna

B_1 = Flujo molar de residuo en la primera columna

- *Balance de metanol en la columna de separación de dimetil éter*

$$X_{\text{MeOH}}F_2 = X_{\text{MeOH}}D_1 + X_{\text{MeOH}}B_1 \quad \text{Ec. 16-4}$$

$$(0,140645)(589,0771) = (0,08642)(589,0771 - B_1) + (0,183061)B_1$$

$$B_1 = 330,5295 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 17-4}$$

Reemplazando B_1 en Ec. 15-4

$$D_1 = 589,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 330,5295 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$D_1 = 258,5476 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 18-4}$$

- *Balance de masa en la columna de recuperación de metanol*

$$B_1 = D_2 + B_2 \quad \text{Ec. 19-4}$$

$$B_2 = B_1 - D_2$$

$$B_2 = 330,5295 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 89,0771 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$B_2 = 241,4524 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 20-4}$$

Tabla 13-4. Resumen de resultados del balance de masa del proceso

Variable	Tipo	Alimentación	Columna 1 (Separa DME)			Columna 2 (Recupera MeOH)		Unidades
		F ₁	F ₂	D ₁	B ₁	D ₂	B ₂	
Flujo molar	DWSIM	500	592,597	260,114	332,484	94,195	238,289	kmol/h
	Balance	500	589,077	258,548	330,529	89,077	241,452	kmol/h
	Error		0,594	0,602	0,588	5,433	1,327	%

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Los resultados permiten validar mediante balances de masa, el flujo molar de las corrientes en la planta de producción de DME con un error promedio en la simulación de 1,7088%.

4.4.2 Base de datos para la red neuronal artificial

Mediante simulaciones en DWSIM entre los rangos presentados en la Tabla 7-3 se recopilieron 110 datos para entrenamiento y validación de la red, manteniendo constante el flujo de alimentación, las presiones y temperaturas en el sistema de producción de DME. Los datos presentados en la tabla del ANEXO C se utilizaron para entrenar la red neuronal artificial y los datos presentados en la tabla del ANEXO L son utilizados para validar la red neuronal artificial.

4.4.3 Desarrollo de la red neuronal artificial

4.4.3.1 Lectura y normalización de la base de datos

Como se ha mencionado en la metodología para diseñar la RNA, primero es necesario importar la base de datos al entorno trabajo de Matlab. Una vez importados los datos se deben normalizar entradas y salidas de la red mediante la ecuación de la normalización descrita en el capítulo 3 (Normalización de la base de datos). La programación para lectura y normalización de los datos de entrenamiento y validación se describe en el códigos del ANEXO E y ANEXO L respectivamente.

4.4.3.2 Entrenamiento de la red neuronal artificial

Una vez normalizados los datos, se inicia con el entrenamiento de la red neuronal artificial mediante el código del ANEXO L. En el código de entrenamiento de la red existe una variable "hiddenLayerSize" importante para ir modificando el número de neuronas en la capa oculta con las que aprenderá la red neuronal artificial. En función de coeficiente de correlación R y el error cuadrático medio (MSE) se determinó que una topología de red con 465 neuronas en la capa oculta es ideal para el aprendizaje de la red neuronal artificial. Adicionalmente, en el ANEXO L se presentan algunos de los resultados obtenidos al modificar el número de neuronas en la capa oculta. Los datos predichos durante el entrenamiento de la red neuronal con 465 neuronas se describen en el ANEXO L.

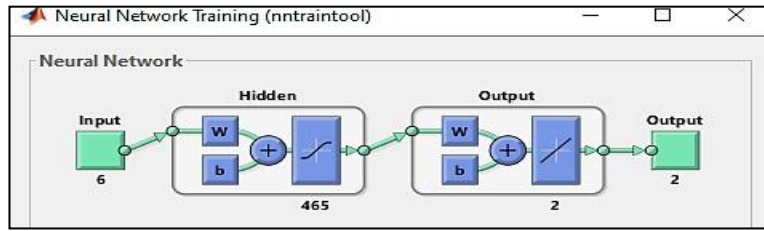


Figura 1-4. Arquitectura de red con 465 neuronas en capa oculta
 Realizado por: Cando, Mishell, 2021

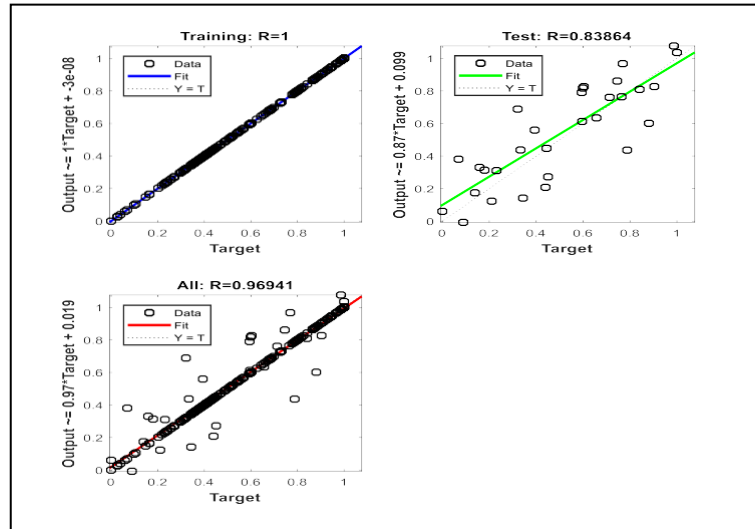


Figura 2-4. Regresión lineal con 465 neuronas en capa oculta
 Realizado por: Cando, Mishell, 2021

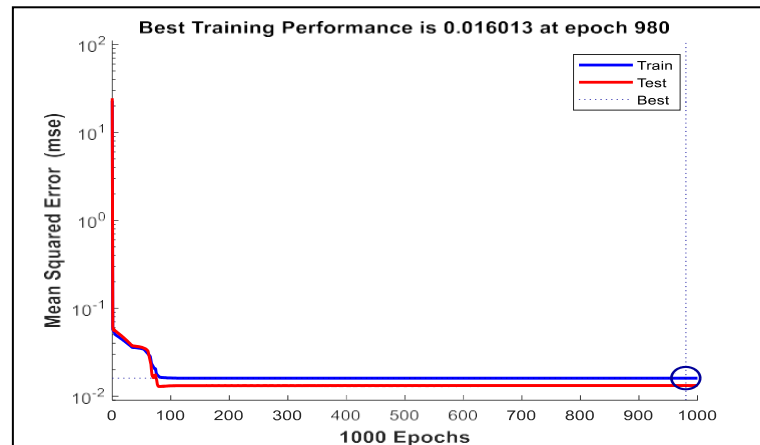


Figura 3-4. Error cuadrático medio con 465 neuronas en capa oculta
 Realizado por: Cando, Mishell, 2021

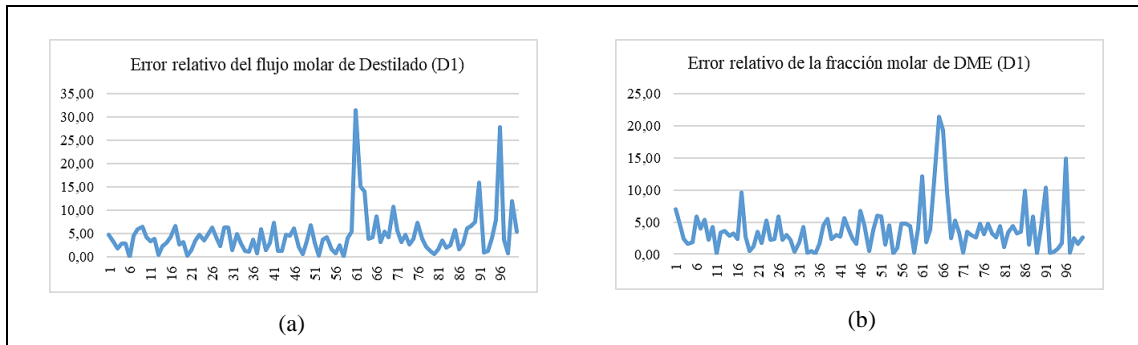


Figura 4-4. Predicción de la red neuronal artificial con 465 neuronas en capa oculta

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.4.3.3 Validación de la red neuronal artificial

Aunque internamente la red durante el entrenamiento realiza una validación, resulta necesario emplear un nuevo conjunto de datos de validación (datos del ANEXO D; **Error! No se encuentra el origen de la referencia.**) como entrada para evaluar por análisis estadístico la efectividad en la predicción de la RNA. Igualmente se realiza un nuevo código para validar la red neuronal y predecir el flujo y la fracción molar de dimetil éter a partir de las propiedades aprendidas por la red neuronal artificial. En el código de validación, la variable “net” contiene las principales propiedades aprendidas por la red durante el entrenamiento (ver ANEXO J) **ANEXO L**. Los datos predichos por la red neuronal para su correspondiente validación por análisis estadístico se describen en el ANEXO L.

4.4.4 Análisis estadístico de los datos predichos

Para evaluar la predicción por parte de la red neuronal artificial se lleva a cabo un análisis estadístico tomando en cuenta los datos reales y predichos para la corriente de flujo en el destilado de la primera columna y la fracción molar de dimetil éter.

a) Flujo molar de destilado en la columna de separación de DME

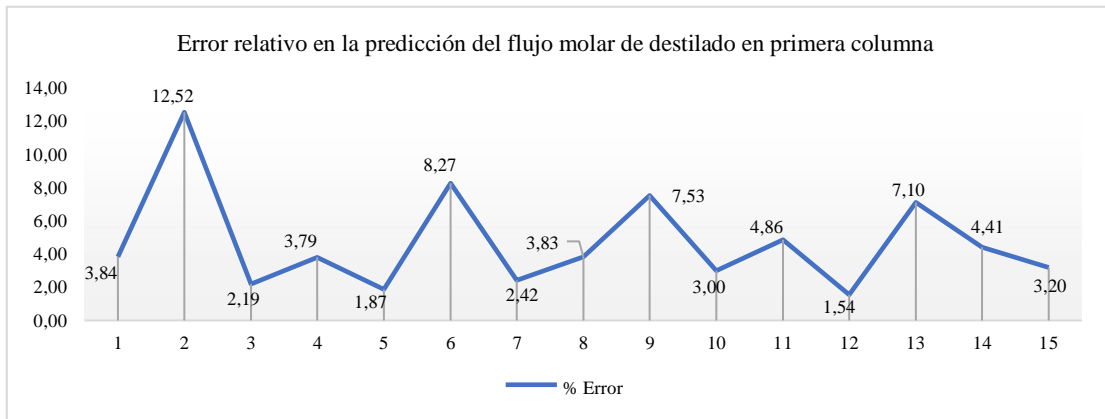


Gráfico 1-4. Error relativo del flujo molar real y predicho de destilado de primera columna

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

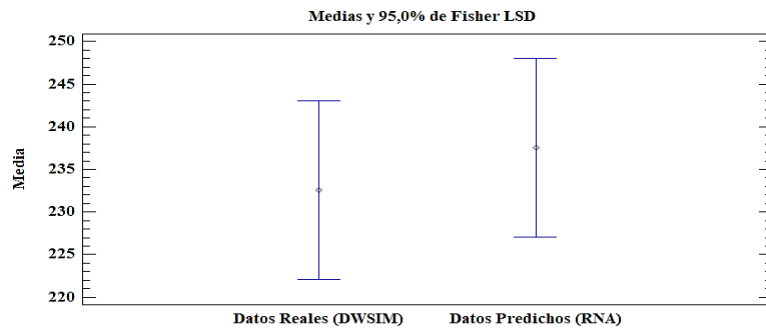


Gráfico 2-4. Análisis de medias para el flujo molar real y predicho en destilado

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 14-4. Análisis de medias para el flujo molar de destilado

Variables a comparar	Casos	Media	Límite Inferior	Límite Superior
Datos Reales de Flujo molar (DWSIM)	15	232,534	222,064	243,004
Datos Predichos de Flujo molar (RNA)	15	237,514	227,044	247,984
Total	30	235,024		

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 15-4. Análisis Anova para el flujo molar de destilado en primera columna

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	186,003	1	186,003	0,24	0,6299
Intra grupos	21943,1	28	783,681		
Total (Corr.)	22129,1	29			

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

4.4.4.1 Fracción molar de DME en destilado de la primera columna.

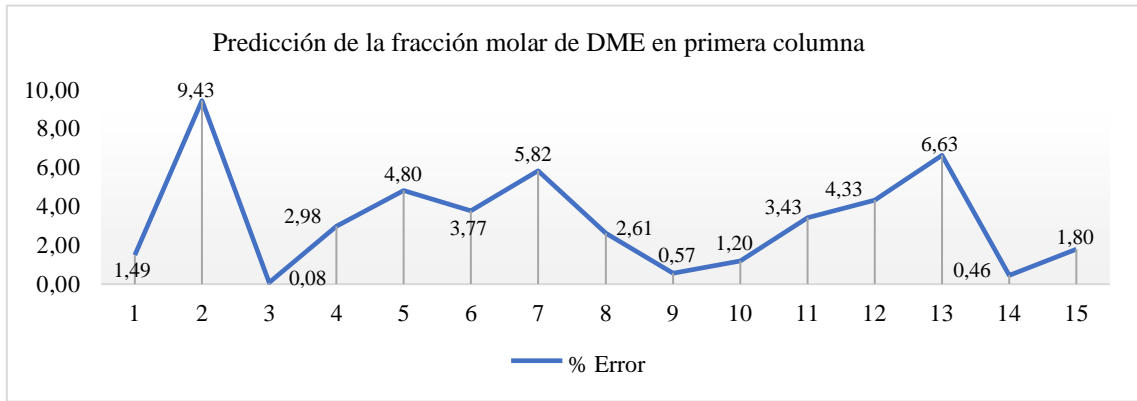


Gráfico 3-4. Error relativo de la fracción molar real y predicha de dimetil éter

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 16-4. Análisis de Medias de la fracción molar de DME

Variable	Casos	Media	Límite Inferior	Límite Superior
Datos Reales de Fracción molar (DWSIM)	15	0,889813	0,844935	0,934692
Datos Predichos de fracción molar (RNA)	15	0,88766	0,842781	0,932539
Total	30	0,888737		

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

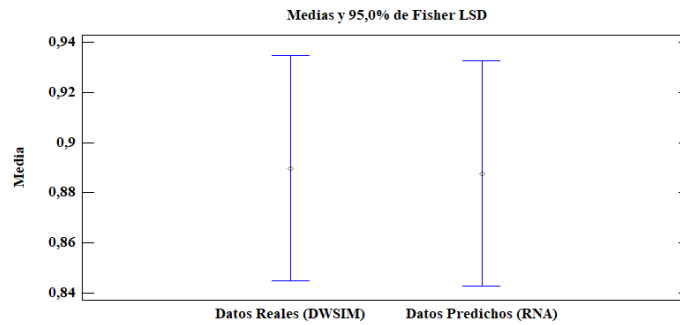


Gráfico 4-4. Análisis de medias para la fracción molar real y predicha de DME

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

Tabla 17-4. Análisis Anova de la fracción molar de DME

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,0000347763	1	0,0000347763	0,002415	0,9612
Intra grupos	0,403204	28	0,0144001		
Total (Corr.)	0,403238	29			

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

En el Gráfico 2-4 y la Tabla 14-4, se puede observar la media de los datos reales y predichos para el flujo molar de destilado en la columna de separación de dimetil éter; mientras que en la Tabla 15-4, se indica un valor-P mayor a 0,05. De manera que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales obtenidos mediante simulación en DWSIM y los datos predichos por la red neuronal para el flujo molar de destilado en la columna de separación de DME. Por otra parte, la Tabla 16-4 y Gráfico 4-4 muestran la media; y la Tabla 17-4 el análisis Anova para la fracción molar de DME separado en la planta de producción. Puesto que el valor-P es mayor que 0,05 en las variables comparadas; se acepta la hipótesis nula, evidenciando que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos por la red neuronal artificial con un 95% de confianza.

CONCLUSIONES

- El modelo de predicción se basa en la simulación en DWSIM de la producción de dimetil éter recuperado por deshidratación de metanol mediante un sistema de reacción, un sistema de separación que utiliza dos columnas, la primera para separar DME y la segunda para recuperar metanol y un sistema de recirculación del metanol en el proceso de producción.
- Para simular la planta de producción de dimetil éter se tomaron en cuenta los parámetros de operación descritos por Diemer y Luyben. En el sistema de reacción se seleccionó un reactor que opera con un 85% de la conversión de metanol en fase vapor para producir DME y agua. Luego, un sistema de separación conformado por una columna de recuperación de DME destila la mezcla de DME-MeOH-H₂O utilizando el modelo termodinámico UNIFAC; y finalmente en una segunda columna, mediante el modelo NRTL se recupera el metanol que recircula en la planta.
- La simulación del proceso de producción de dimetil éter por deshidratación de metanol se validó en función de los resultados reportados por el artículo científico “Design and Control of a Methyl Acetate Process Using Carbonylation of Dimethyl Ether” propuesto por Diemer y Luyben quienes simulan el proceso en Aspen Plus. El error porcentual promedio en la validación de la simulación por bibliografía es de 7,11%. Adicionalmente, el flujo molar en las corrientes de la planta se validó mediante balances de masa, obteniendo 1,7088% de error en la simulación.
- La red neuronal artificial se diseñó con 6 variables de entradas correspondientes a la temperatura y fracción molar de metanol presente en la alimentación, la conversión en el reactor, la relación de reflujo en la primera columna, la temperatura del reboiler en la primera columna y la relación de reflujo en la segunda columna, 465 neuronas en la capa oculta y 2 variables de salida que corresponden al flujo molar de destilado y la fracción molar de dimetil éter recuperado en el destilado de la primera columna. Se utilizó el algoritmo de regularización bayesiana durante el entrenamiento y prueba de la red, obteniéndose la mejor correlación de 0,96941 y un error cuadrático medio de 1,56E-02.
- Un análisis ANOVA permite validar la predicción de la red neuronal artificial con un valor $P > 0,05$ en ambas variables comparadas (el flujo molar de destilado y la fracción molar del dimetil éter obtenido). El análisis estadístico confirma con un 95% de confianza, que no existe una diferencia significativa entre los datos reales (DWSIM) y los datos predichos por la red neuronal artificial.

RECOMENDACIONES

- Simular la producción de DME utilizando gas de síntesis para obtener metanol, que luego, mediante deshidratación produzca el DME. Luego, comparar los resultados obtenidos con los reportados en este trabajo.
- Incluir la predicción de la cantidad de metanol recuperado y recirculado en la planta de producción de DME.
- Aplicar la metodología desarrollada para diseñar redes neuronales que permitan calcular la composición de diferentes productos obtenidos en diferentes plantas químicas; entrenando la red en función de datos reales recopilados de la industria.
- Emplear la red neuronal artificial como herramienta didáctica de simulación en la cátedra de ingeniería de procesos y para proyectos enfocados en la simulación de procesos.

GLOSARIO

Algoritmo de entrenamiento: es un procedimiento bien definido para resolver un problema y mejorar el entrenamiento de una red neuronal artificial. La selección de un algoritmo que pueda obtener sensibilidad de un conjunto conocido de datos de entrenamiento es fundamental en la predicción de una red (Hsieh, 2019, 316).

Análisis de la varianza: La variación total de los datos experimentales se divide en componentes asignables a fuentes específicas mediante el análisis de varianza. Esta técnica estadística es aplicable a datos para los cuales (1) los efectos de las fuentes son aditivos, (2) las variaciones experimentales no controladas o inexplicables (que se agrupan como errores experimentales) son independientes de otras fuentes de variación, (3) la varianza de los errores experimentales es homogénea, y (4) los errores experimentales siguen una distribución normal (Brickley, 2019, p.130).

Destilación: es una técnica ampliamente utilizada para separar la sustancia componente de una mezcla de fluidos miscible mediante evaporación y condensación selectivas (Yang et al. 2017).

Ecuación de estado: una ecuación de estado (EOS) es una relación PVT utilizada para predecir propiedades termodinámicas. Hay varias ecuaciones de estado que se utilizan para diferentes aplicaciones. Por ejemplo, el Peng-Robinson EOS y el Soave-Redlich-Kwong EOS. Otras formas de EOS incluyen las derivadas de la termodinámica estadística como Sanchez-Lacombe y SAFT (Brignole y Pereda, 2016, p.65).

Modelos de coeficiente de actividad: o modelos termodinámicos, son ecuaciones termodinámicas para soluciones líquidas no ideales, la fugacidad de los componentes en la solución se desvía de la del componente puro. La relación entre la fugacidad en solución y la del componente puro se define como la actividad. En DWSIM, hay varios modelos de coeficientes de actividad. Entre los más utilizados se encuentra el NRTL, Wilson, UNIFAC, UNIQUAC. En estos modelos, el enfoque del coeficiente de actividad se utiliza para calcular las propiedades del líquido, mientras que las propiedades de la fase de vapor se calculan mediante una ecuación de estado (Brignole y Pereda, 2016, p.62).

Reactor químico: son equipos en los que la materia prima se convierte en el producto deseado. Al seleccionar reactores químicos para tareas específicas, se deben tener en cuenta los costos económicos, el rendimiento, la pureza y la contaminación. Generalmente, se eligen reactores que cumplan con los requisitos impuestos por los mecanismos de reacción, la velocidad de expresión y la capacidad de producción requerida. Un factor importante en el funcionamiento del reactor es

el grado de conversión de salida. El grado de conversión afecta la economía de separación y los costos de devolver el reactivo no convertido nuevamente a la reacción (Coker 2015, p.1095).

Red neuronal artificial: un modelo computacional que se utiliza para predecir resultados dependiendo de una gran cantidad de datos de entrada desconocidos. Este modelo se está volviendo popular día a día en la industria y muchas ciencias, porque la red neuronal puede aprender de los datos de entrada y reaccionar de acuerdo con la demanda (Kim et al., 2015, p.107).

BIBLIOGRAFÍA

AN, E; et al. "Dehydration of methanol to dimethyl ether by catalytic distillation". *Canadian Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2004, 82 (5), pp. 948-955. [Consulta: 7 enero 2021]. ISSN 00084034. Disponible en [10.1002/cjce.5450820510](https://doi.org/10.1002/cjce.5450820510).

ARMENTA, M; et al. "Thermodynamic and catalytic properties of Cu- and Pd- oxides over mixed Γ -X-Al₂O₃ for methanol dehydration toward dimethyl ether". *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], 2019, 44 (14), pp. 7276-7287. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 03603199. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.243>.

BAI, Z; et al. "Simulation of a multi-stage adiabatic reactor with inter-stage quenching for dimethyl ether synthesis". *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly* [en línea], 2014, 20 (4), pp. 481-490. [Consulta: 5 enero 2020]. ISSN 22177434. Disponible en: <http://www.doiserbia.nb.rs/img/doi/1451-9372/2014/1451-93721300030B.pdf>.

BANDIERA, J; et al. "Kinetics of methanol dehydration on dealuminated H-mordenite: Model with acid and basic active centres". *Applied Catalysis* [en línea], 1991, 69 (1), pp. 139-148. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 01669834. Disponible en: [10.1016/S0166-9834\(00\)83297-2](https://doi.org/10.1016/S0166-9834(00)83297-2).

BILDEA, C; et al. "Optimal design of intensified processes for DME synthesis". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2017, 105, pp. 142-151. [Consulta: 6 enero 2020]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.01.004>.

BRICKLEY, R. "Analysis of variance". *AccessScience* [en línea], 2019, pp. 125-210. [Consulta: 3 marzo 2021]. Disponible en: <https://www.accessscience.com/content/analysis-of-variance/031900>.

BRIGNOLE, E., & PEREDA, S. "Physical properties and thermodynamic models". *Supercritical Fluid Science and Technology* [en línea], 2016, 3, pp. 57-89. [Consulta: 3 marzo 2021] ISSN 22120505. Disponible en: [10.1016/B978-0-444-56364-4.00004-2](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-56364-4.00004-2).

CASSONE, G.; et al. "Novel electrochemical route to cleaner fuel dimethyl ether". *Scientific Reports* [en línea], 2017, 7 (1), pp. 1-9. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 20452322. Disponible en: [10.1038/s41598-017-07187-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-07187-8).

CATIZZONE, E; et al. "CO₂ recycling to dimethyl ether: State of the art and perspectives". *Molecules* [en línea], 2018, 23 (1), pp. 1-28. [Consulta: 7 enero 2021]. ISSN 14203049. Disponible en: [10.3390/molecules23010031](https://doi.org/10.3390/molecules23010031).

COKER, A; et al. *Industrial and Laboratory Reactors – Chemical Reaction Hazards and Process Integration of Reactors*. S.l.: s.n. ISBN 9780750685245.

DEBEK, R; et al. "Dehydration of methanol to dimethyl ether over modified vermiculites". *Comptes Rendus Chimie* [en línea], 2015, 18 (11), pp. 1211-1222. [Consulta: 6 enero 2021]. ISSN 16310748. Disponible en: [10.1016/j.crci.2015.05.003](https://doi.org/10.1016/j.crci.2015.05.003).

DIEMER, R., & LUYBEN, W. "Design and control of a methyl acetate process using carbonylation of dimethyl ether". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2010, 49 (23), pp. 12224-12241. [Consulta: 14 noviembre 2020]. ISSN 08885885. Disponible en [10.1021/ie101583j](https://doi.org/10.1021/ie101583j).

FARSI, M; et al. "Modeling, simulation and control of dimethyl ether synthesis in an industrial fixed-bed reactor". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2011, 50 (1), pp. 85-94. [Consulta: 6 enero 2021]. ISSN 02552701. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2010.11.013>.

FLEISCH, T; et al. "Introduction and advancement of a new clean global fuel: The status of DME developments in China and beyond". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* [en línea], 2015, 9, pp. 94-107. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 18755100. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2012.05.012>.

FREE SOFTWARE FOUNDATION. *GNU General Public License*. [Blog], 2020. [Consulta: 10 enero 2021]. Disponible en: <http://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html>.

HAN, Y; et al. "Modeling and Simulation of Production Process on Dimethyl Ether Synthesized from Coal-based Syngas by One-step Method". *Chinese Journal of Chemical Engineering* [en línea], vol. 17, no. 1, pp. 108-112. [Consulta: 7 enero 2021]. ISSN 10049541. DOI 10.1016/S1004-9541(09)60041-0. Disponible en: [http://dx.doi.org/10.1016/S1004-9541\(09\)60041-0](http://dx.doi.org/10.1016/S1004-9541(09)60041-0).

HILERA, J., & MARTÍNEZ, V. *Redes neuronales artificiales. Fundamentos, modelos y aplicaciones*. Wilmington, EEUU: RA-MA. 1995. ISBN 020187895X.

HSIEH, S. Algorithm. *AccessScience* [en línea], 2019, pp. 310-420. [Consulta: 3 marzo 2021]. DOI 10.1036/1097-8542.022150. Disponible en: <https://www.accessscience.com/content/algorithm/022150>.

HU, Y., NIE, Z., & FANG, D. "Simulation and model design of pipe-shell reactor for the direct synthesis of dimethyl ether from syngas". *Journal of Natural Gas Chemistry* [en línea], 2008, 17 (2), pp. 195-200. [Consulta: 6 enero 2021]. ISSN 10039953. Disponible en: [10.1016/S1003-9953\(08\)60051-1](https://doi.org/10.1016/S1003-9953(08)60051-1).

KIM, D; et al. "Nonlinear Vibration Control of 3D Irregular Structures Subjected to Seismic Loads". *IGI Global* [en línea], 2015, pp. 103-119. [Consulta: 9 enero 2021]. Disponible en: 10.4018/978-1-4666-9479-8.ch003.

KONG, F. "Process Analysis of Chemical Looping Systems for Dimethyl Ether Synthesis from Coal". *Transactions of the Indian National Academy of Engineering* [en línea], 2020, 5(1), pp. 17-26. [Consulta: 7 enero 2021]. ISSN 2662-5415. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s41403-020-00085-y>.

LECUN, Y; et al. "Deep learning". *Nature*, 2015, 521(7553), pp. 436-444. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 14764687. DOI 10.1038/nature14539.

LIU, B. *Application of artificial neural networks in computer-aided diagnosis*. 2014. S.l.: s.n. ISBN 9781493922390.

LLADOSA, E. "Separation of di-n-propyl ether and n-propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2011, 50 (11-12), pp. 1266-1274. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 02552701. Disponible en 10.1016/j.cep.2011.07.010.

LÓPEZ, P., VELO, R., & MASEDA, F. "Estimación de la velocidad del viento mediante redes neuronales". *XI Congreso Internacional De Ingeniería De Proyectos* [en línea], 2007, pp. 1083-1092. [Consulta: 20 enero 2021]. Disponible en: https://www.aepro.com/files/congresos/2007lugo/ciip07_1083_1092.501.pdf.

LUNA, Jesús. Implementación de un módulo de cálculo en ASPEN HYSYS® para la simulación de evaporadores de múltiple efecto en la industria azucarera [en línea], 2020. Lambayeque, Perú: Universidad Nacional Pedro Ruiz Gallo. [Consulta: 29 marzo 2021]. Disponible en: <http://repositorio.unprg.edu.pe/handle/UNPRG/9023>.

LUYBEN, W. "Improving the conventional reactor/separation/recycle DME process". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2017, 106, pp. 17-22. [Consulta: 6 enero 2021]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.05.008>.

MÁRQUEZ, Á. *Diseño básico, optimización y control de una planta de producción de Dimetil Éter*, 2017. Sevilla, España: Universidad de Sevilla.

MCKONE, T; et al. "California dimethyl ether multimedia evaluation: Tier I". *The University of California* [en línea], 2015, 02, pp. 164. [Consulta: 7 enero 2021]. Disponible en: https://ww3.arb.ca.gov/fuels/multimedia/meetings/dmetierireport_feb2015.pdf.

MEDEIROS, D. *DWSIM Simulator*. [Blog], 2021. [Consulta: 10 enero 2021]. Disponible en: <https://dwsim.inforside.com.br/new/>.

MONDAL, U., & YADAV, G. "Perspective of dimethyl ether as fuel: Part II- analysis of reactor systems and industrial processes". *Journal of CO2 Utilization* [en línea], 2019, 32 (1), pp. 299-320. [Consulta: 6 enero 2021]. ISSN 22129820. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.02.003>.

MORENO, R. & RUIZ, M. "Modelado, simulación y supervisión de una planta piloto de producción en el entorno ecosim - labview". [en línea], 2003, pp. 6. [Consulta: 14 noviembre 2020]. Disponible en: https://www.ecosimpro.com/wp-content/uploads/2015/02/C02_04_es.pdf.

MUÑOZ, C. *Análisis y diseño del proceso de obtención de dimetil éter por vía directa* [en línea], 2018, Madrid, España: Universidad Politécnica de Madrid.

O'SHEA, K. & NASH, R. "An Introduction to Convolutional Neural Networks". *Neural and Evolutionary Computing* [en línea], 2015, 1, pp. 1-11. [Consulta: 10 enero 2021]. Disponible en: <http://arxiv.org/abs/1511.08458>.

PAN, X., LEE, B. & ZHANG, C. "A comparison of neural network backpropagation algorithms for electricity load forecasting". *Proceedings - 2013 IEEE International Workshop on Intelligent Energy Systems, IWIES 2013* [en línea], 2013, pp. 22-27. [Consulta: 14 enero 2021]. Disponible en: 10.1109/IWIES.2013.6698556.

PEREZ, L; et al. "Producción De Dimetil Éter Por Deshidratación Catalítica De Metanol- Estudio De Prefactibilidad". [en línea], 2018, pp. 281. [Consulta: 2 diciembre 2020]. Disponible en: http://www.bdigital.uncuyo.edu.ar/objetos_digitales/10771/produccion-de-dimetil-eter.pdf.

PRABOWO, B. "State of the art of global dimethyl ether production and it's potential application in Indonesia". *Proceedings of the Pakistan Academy of Sciences: Part B* [en línea], 2017, 54 (1B), pp. 29-39. [Consulta: 9 enero 2021]. ISSN 2518427X. Disponible en: <https://www.paspk.org/wp-content/uploads/2017/03/State-of-the-Art-of-Global-Dimethyl-Ether-Production.pdf>

PURI, M; et al. *Introduction to Artificial Neural Network (ANN) as a Predictive Tool for Drug Design, Discovery, Delivery, and Disposition: Basic Concepts and Modeling. Basic Concepts and Modeling* [en línea], 2016. S.l.: Elsevier Inc. [Consulta: 10 enero 2021]. ISBN 9780128015599. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-801559-9.00001-6>.

RAHMANPOUR, O; et al. "New Method for Synthesis Nano Size γ -Al₂O₃ Catalyst for Dehydration of Methanol to Dimethyl Ether". *Int. J. Chem. Eng. App.* [en línea], 2016, 3(2), pp. 125-128. [Consulta: 7 enero 2021]. ISSN 2010-0221. Disponible en 10.7763 / IJCEA.2012.V3.172.

ROSARIO, Brayan. Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2020.

SÁNCHEZ, E. *Diseño mejorado del proceso de producción de dimetiléter* [en línea], 2018. Madrid, España: Universidad Politécnica de Madrid. [Consulta: 6 enero 2021]. Disponible en: http://oa.upm.es/51990/1/TFG_EDUARDO_SANCHEZ_NOCETE.pdf.

SOLOMON, D. *Investigation of Production of Dimethyl Ether (DME) from Renewable Resources and its Integration into the Oil Production System* [en línea], 2017. Países Bajos, Europa: Delft University of Technology. [Consulta: 7 enero 2021]. Disponible en: <http://repository.tudelft.nl/>.

TAKEISHI, K. "Dimethyl ether and catalyst development for production from syngas". *Biofuels* [en línea], 2014, 1(1), pp. 217-226. [Consulta: 29 marzo 2021]. ISSN 17597269. Disponible en: 10.4155/bfs.09.16.

TURTON, R. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes Fourth Edition*, 2013. S.l.: s.n. ISBN 9788578110796.

YANG, R; et al. "A comprehensive review of micro-distillation methods". *Chemical Engineering Journal* [en línea], 2017, 313, pp. 1509-1520. [Consulta: 3 marzo 2021]. ISSN 13858947. DOI 10.1016/j.cej.2016.11.041. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2016.11.041>.

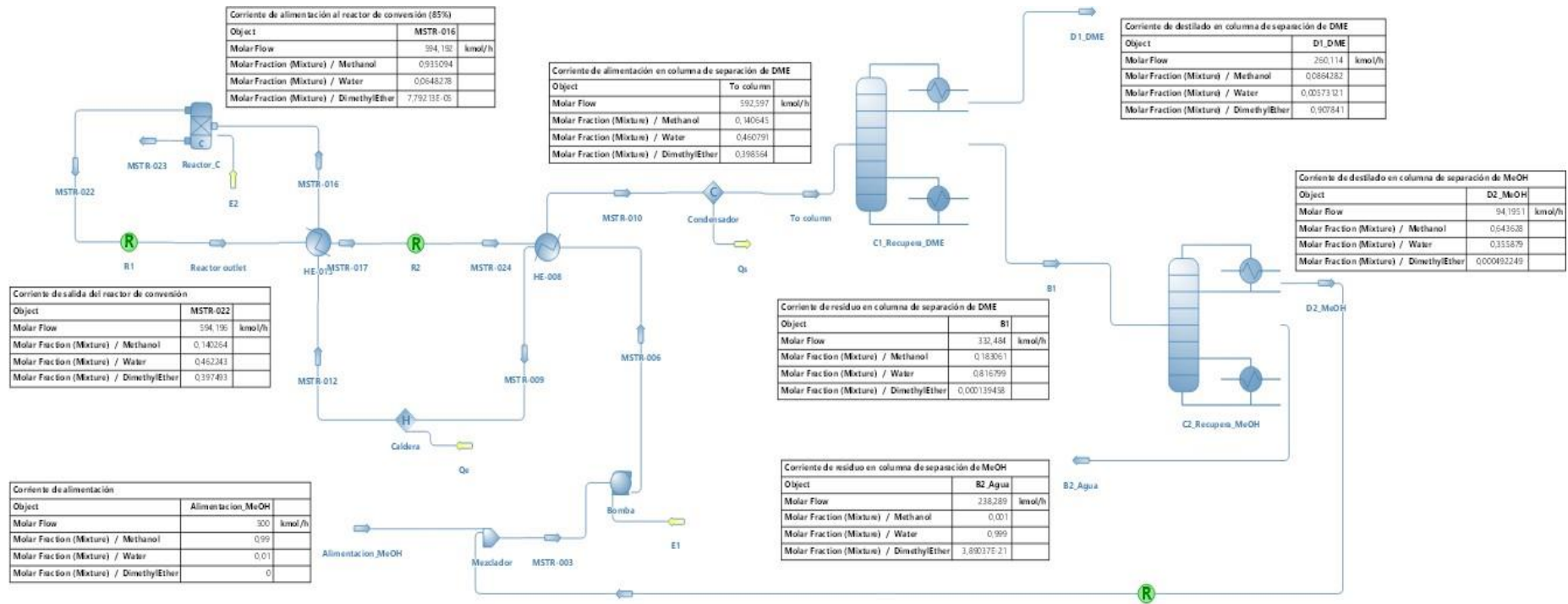
ANEXOS

ANEXO A. Características importantes del software DWSIM

CARACTERÍSTICA	DESCRIPCIÓN
<i>Compatibilidad CAPE-OPEN</i>	Socket de paquete de propiedades Thermo 1.0 / 1.1, Servidor de paquete de propiedades Thermo 1.1, Socket de operación de unidad y soporte de objetos de monitoreo de diagrama de flujo. DWSIM expone su operación de unidad Python Script (personalizada) para todos los simuladores compatibles con CAPE-OPEN
<i>Modelos termodinámicos</i>	GERG-2008, PC-SAFT, CoolProp, Peng-Robinson, Peng-Robinson (1978), Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler, Lee-Kesler-Plöcker, UNIFAC, UNIFAC modificado (Dortmund), UNIQUAC, NRTL, Chao-Seader, Grayson-Streed, Ley de Raoult, Tablas de vapor IAPWS-IF97, Agua de mar IAPWS-08, Aceite negro, Agua agria y electrolitos acuosos.
<i>Modelado y simulaciones dinámicas</i>	Controlador PID, Programador de eventos, Variables supervisadas, Integrador configurable, Matrices de causa y efecto, Modo de panel de control (tiempo real), Indicadores, Medidores analógicos y digitales, Campos de entrada e interruptores
<i>Operaciones de la unidad (estado estable)</i>	Mezcladores, Divisores, Separadores, Bombas, Compresores, Expansores, Calderas, Condensadores, Válvulas, Segmento de tuberías, Columna de acceso directo, Intercambiadores de calor, Conversión / equilibrio / reactores de Gibbs, PFR, CSTR, Separador de componentes, Orificio Placa, Columnas de destilación / absorción, Separador de sólidos, Filtro de torta, Hoja de cálculo, secuencia de comandos de Python y operación de la unidad de hoja de flujo
<i>Operaciones de la unidad (dinámica):</i>	Mezcladores, Divisores, Separadores, Bombas, Compresor, Expansores, Calderas, Condensadores, Válvulas, Reactores PFR, CSTR, Intercambiadores de calor, Hoja de cálculo y script de Python.
<i>Utilidades</i>	Envolvente de fase, Cálculos de hidratos, Propiedades de componentes puros, Punto crítico, Dimensionamiento de PSV, Dimensionamiento de recipientes, Hoja de cálculo, Propiedades de flujo frío de petróleo
<i>Herramientas</i>	Ajuste del controlador PID, Regresión de datos binarios, Creador de compuestos, C7 + a granel y Curvas de destilación, Asistente de caracterización y reacciones del petróleo
<i>Análisis de procesos</i>	Análisis de sensibilidad y optimización restringida multivariante
<i>Extras</i>	Interfaz de complementos y sistema de secuencias de comandos Python / IronPython

Fuente: Medeiros, 2021.

ANEXO B. Diagrama de flujo de la planta de producción de dimetil éter



ANEXO C. Datos para entrenamiento de la red neuronal artificial por simulación DWSIM

No	Entradas de la Red Neuronal Artificial					Salidas de la Red Neuronal Artificial		
	Temperatura (Alim)	Fracción molar MeOH (Alim)	Conversión en Reactor	Relación de reflujo (C1)	Temperatura Reboiler (C1)	Relación de reflujo (C2)	Flujo molar de Destilado (D1)	Fracción molar DME (D1)
1	320	0,99	85	0,39	433	1,30	260,11	0,9078
2	328	0,74	87	0,45	445	3,45	256,52	0,7884
3	288	0,84	90	0,26	437	2,42	251,79	0,9029
4	281	0,86	83	0,78	424	3,48	230,79	0,9798
5	313	0,74	90	0,76	440	1,16	233,80	0,9507
6	311	0,87	90	0,66	431	1,92	241,44	0,9807
7	295	0,83	82	0,49	441	4,46	272,38	0,7369
8	281	0,89	84	0,88	445	2,04	274,08	0,7626
9	294	0,75	84	0,51	422	1,98	234,80	0,9305
10	289	0,99	85	0,28	440	1,53	293,81	0,7544
11	283	0,94	83	0,90	449	2,14	286,31	0,7248
12	296	0,82	85	0,51	439	4,29	254,64	0,8262
13	318	0,84	80	0,70	425	2,02	235,93	0,9578
14	330	0,83	90	0,75	420	2,30	236,06	0,9954
15	284	0,91	84	0,63	438	4,90	260,10	0,8174
16	295	0,76	81	0,67	434	2,25	243,23	0,8548
17	303	0,99	86	0,39	444	3,72	305,88	0,6737
18	314	0,97	82	0,32	445	4,60	306,32	0,6705
19	303	0,90	88	0,30	446	3,47	282,15	0,7619
20	290	0,89	85	0,42	428	4,09	242,47	0,9145
21	322	0,92	85	0,97	447	4,23	270,51	0,7672
22	275	0,79	83	0,68	450	2,74	270,14	0,7170
23	312	0,79	82	0,82	442	3,78	261,16	0,7556

24	323	0,80	80	0,74	435	3,88	255,47	0,7971
25	327	0,70	84	0,96	429	2,90	218,18	1,0000
26	296	0,81	85	0,78	441	1,67	257,26	0,8211
27	307	0,94	85	0,20	441	3,04	294,79	0,7250
28	284	0,94	84	0,61	427	4,97	245,73	0,9538
29	309	0,88	81	0,29	447	4,53	307,87	0,6382
30	279	0,76	89	0,34	421	2,15	241,93	0,9164
31	319	0,81	90	0,63	433	3,83	233,26	0,9750
32	306	0,72	87	0,52	448	1,42	259,78	0,7737
33	308	0,88	87	0,98	421	3,45	230,50	1,0000
34	311	0,95	83	0,27	422	2,24	260,59	0,8744
35	320	0,70	89	0,53	440	3,09	227,39	0,9271
36	328	0,71	85	0,87	430	2,40	220,45	0,9964
37	306	0,74	80	0,68	429	2,20	226,48	0,9515
38	285	0,70	88	0,55	443	4,79	236,53	0,8564
39	324	0,78	88	0,60	447	3,37	253,60	0,8152
40	306	0,94	86	0,23	448	4,43	300,93	0,6978
41	323	0,76	85	0,69	420	4,87	228,10	0,9703
42	282	0,91	82	0,90	429	4,55	235,27	0,9906
43	292	0,74	80	0,56	430	2,29	230,76	0,9263
44	320	0,92	80	0,22	439	4,25	303,70	0,6596
45	295	0,75	90	0,41	426	1,05	240,98	0,9331
46	326	0,71	81	0,90	439	1,60	250,42	0,7867
47	303	0,84	85	0,80	429	1,74	236,14	0,9880
48	299	0,90	84	0,94	432	4,41	231,78	0,9369
49	326	0,79	82	0,72	436	3,08	250,99	0,8259
50	318	0,77	87	0,22	428	4,62	247,43	0,8779

51	312	0,99	88	0,52	450	2,19	281,61	0,7820
52	313	0,95	80	0,68	434	1,16	270,91	0,8028
53	310	0,77	84	0,51	441	3,79	256,78	0,7853
54	327	0,70	87	0,72	431	4,13	220,16	0,9788
55	294	0,88	89	0,60	422	4,61	235,22	0,9670
56	296	0,81	89	0,53	435	2,03	238,59	0,9518
57	330	0,93	87	0,66	433	4,43	242,29	0,9660
58	292	0,89	81	0,82	426	3,60	232,23	0,9810
59	308	0,79	82	0,73	433	4,79	241,35	0,8849
60	278	0,70	83	0,50	425	3,40	198,36	0,9232
61	324	0,87	88	0,83	450	4,65	198,36	0,9232
62	304	0,96	86	0,50	439	2,59	232,88	0,8345
63	301	0,87	89	0,59	425	2,44	208,89	0,9650
64	322	0,95	88	0,89	433	1,41	260,50	0,8232
65	290	0,92	86	0,77	424	1,66	250,80	0,7627
66	273	0,74	85	0,68	448	3,84	221,96	0,9967
67	280	0,85	89	0,78	426	1,90	238,21	0,8548
68	322	0,83	80	0,25	428	4,81	238,21	0,8548
69	274	0,77	82	0,66	443	4,54	234,76	0,7450
70	291	0,92	80	0,38	424	2,18	227,48	0,8879
71	288	0,75	82	0,60	427	3,10	206,57	0,9423
72	280	0,76	83	0,50	424	3,84	209,57	0,9247
73	299	0,79	85	0,48	444	1,73	243,53	0,7659
74	310	0,82	88	0,96	423	1,16	218,41	1,0000
75	284	0,86	85	0,55	429	1,41	230,77	0,9429
76	289	0,76	90	0,63	430	2,26	207,65	0,9736
77	324	0,83	80	0,80	442	1,98	254,56	0,7205

78	298	0,77	80	0,99	436	4,94	226,63	0,7907
79	300	0,94	86	0,55	447	1,41	276,13	0,7691
80	294	0,86	84	0,20	422	3,96	238,15	0,8644
81	275	0,91	85	0,28	428	2,88	245,11	0,8843
82	273	0,81	86	0,62	446	2,97	239,67	0,7878
83	303	0,79	85	0,29	445	1,09	260,32	0,7144
84	313	0,85	86	0,21	426	3,75	237,18	0,8709
85	273	0,80	89	0,59	434	3,41	214,04	0,9638
86	281	0,76	80	1,00	443	2,14	237,28	0,7215
87	291	0,85	88	0,43	420	1,49	232,29	0,9292
88	313	0,73	84	0,27	428	4,79	211,40	0,8758
89	324	0,70	89	0,94	431	5,00	190,22	1,0000
90	290	0,72	81	0,57	443	4,42	229,43	0,7218
91	310	0,70	89	1,00	434	4,70	240,70	0,9006
92	289	0,86	85	0,35	423	1,00	240,49	0,9006
93	277	0,90	85	0,27	428	4,09	242,83	0,8818
94	317	0,76	90	0,94	430	4,46	202,67	1,0000
95	277	0,70	90	0,68	423	2,01	194,86	0,9814
96	301	0,76	83	0,48	440	2,32	193,38	0,9551
97	279	0,85	82	0,52	420	2,41	221,85	0,9269
98	286	0,90	87	1,00	432	4,48	224,95	1,0000
99	322	0,71	82	0,67	428	3,30	193,38	0,9551
100	320	0,76	81	0,93	438	4,74	225,47	0,7835

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

ANEXO D. Datos para la validación de la red neuronal artificial por simulación en DWSIM

No	Entradas de la Red Neuronal Artificial						Salidas de la Red Neuronal Artificial	
	Temperatura (Alim)	Fracción molar MeOH (Alim)	Conversión en Reactor	Relación de reflujo (C1)	Temperatura Reboiler (C1)	Relación de reflujo (C2)	Flujo molar de Destilado (D1)	Fracción molar DME (D1)
1	311	0,95	83	0,21	444	1,19	309,47	0,6680
2	278	0,76	86	0,93	449	1,90	271,26	0,7733
3	306	0,79	85	0,90	423	4,00	207,28	1,0000
4	280	0,80	80	0,93	424	2,02	207,78	0,9950
5	294	0,92	90	0,90	434	3,94	231,99	1,0000
6	314	0,72	82	0,24	436	4,90	225,68	0,7754
7	300	0,95	84	0,72	425	2,22	239,66	0,9743
8	280	0,79	82	0,77	428	3,67	210,09	0,9745
9	329	0,81	83	0,47	428	2,87	220,96	0,9181
10	287	0,78	86	0,63	425	3,83	210,58	0,9621
11	302	0,74	85	0,31	450	1,51	254,79	0,6795
12	287	0,78	87	0,25	450	4,90	259,05	0,7017
13	315	0,89	90	0,75	435	2,91	225,76	0,9951
14	317	0,85	81	0,55	423	4,00	223,55	0,9302
15	299	0,70	89	1,00	421	4,63	190,11	1,0000

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

ANEXO E. Lectura y normalización de los datos de entrenamiento

%01. Lectura de la base de datos

```
Extraer=readtable('Base de datos.xlsx','Sheet','Datos de entrenamiento');  
BaseDatos = table2array(Extraer);
```

%02. Normalización de los datos de entrenamiento

%Parámetros de entrada

```
entradas=BaseDatos(1:6,:);
```

%Temperatura de alimentación

```
T_max=max(entradas(1,:));  
T_min=min(entradas(1,:));  
T_N =[(entradas(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
```

%Flujo molar de MeOH en alimentación

```
XMeOH_max=max(entradas(2,:));  
XMeOH_min=min(entradas(2,:));  
XMeOH_N =[(entradas(2,1:end)-XMeOH_min)/(XMeOH_max-XMeOH_min)];
```

%Porcentaje de conversión en Reactor

```
C_max=max(entradas(3,:));  
C_min=min(entradas(3,:));  
C_N =[(entradas(3,1:end)-C_min)/(C_max-C_min)];
```

%Relación de reflujo en primera columna

```
RR1_max=max(entradas(4,:));  
RR1_min=min(entradas(4,:));  
RR1_N =[(entradas(4,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];
```

%Temperatura de reboiler en primera columna

```
TR1_max=max(entradas(5,:));  
TR1_min=min(entradas(5,:));  
TR1_N =[(entradas(5,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];
```

%Relación de reflujo en segunda columna

```
RR2_max=max(entradas(6,:));  
RR2_min=min(entradas(6,:));  
RR2_N =[(entradas(6,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];
```

%Entradas normalizadas

```
Entradas_N=[T_N;XMeOH_N;C_N;RR1_N;TR1_N;RR2_N];
```

%Parámetros de salida

```
salidas=BaseDatos(7:8,:);
```

%Flujo molar de destilado en primera columna

```
D1_max=max(salidas(1,:));
```

```
D1_min=min(salidas(1,:));
```

```
D1_N =[(salidas(1,1:end)-D1_min)/(D1_max-D1_min)];
```

%Fracción molar de DME obtenido en primera columna

```
XDME_D1_max=max(salidas(2,:));
```

```
XDME_D1_min=min(salidas(2,:));
```

```
XDME_D1_N =[(salidas(2,1:end)-XDME_D1_min)/(XDME_D1_max-XDME_D1_min)];
```

%salidas normalizadas

```
Salidas_N=[D1_N;XDME_D1_N];
```

ANEXO F. Lectura y normalización de los datos de validación

%Lectura de los datos de validación

```
Extraer=readtable('Base de datos.xlsx','Sheet','Datos de validación');
```

```
Datosvalidacion = table2array(Extraer);
```

Cargar archivo net y parámetros máximos y mínimos de la Salida de la red neuronal

```
load('Red465BR.mat');
```

%Normalización de datos de entrada

```
entradasvalidacion=Datosvalidacion(1:6,:);
```

%Temperatura de alimentación

```
T_Nv =[(entradasvalidacion(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
```

%Flujo molar de MeOH en alimentación

```
XMeOH_Nv =[(entradasvalidacion(2,1:end)-XMeOH_min)/(XMeOH_max-XMeOH_min)];
```

%Porcentaje de conversión en Reactor

```
C_Nv =[(entradasvalidacion(3,1:end)-C_min)/(C_max-C_min)];
```

%Relación de reflujo en primera columna

```
RR1_Nv =[(entradasvalidacion(4,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];
```

%Temperatura de reboiler en primera columna

```
TR1_Nv =[(entradasvalidacion(5,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];
```

%Relación de reflujo en segunda columna

```
RR2_Nv =[(entradasvalidacion(6,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];
```

%Entradas normalizadas

```
Entradas_Nvalidacion=[T_Nv;XMeOH_Nv;C_Nv;RR1_Nv;TR1_Nv;RR2_Nv];
```

%Cálculos de la red neuronal artificial

```
DatosPred_validacion = net(Entradas_Nvalidacion(1:end,:));
```

%Resultados de la red neuronal artificial

%Flujo másico de destilado en primera columna predicho

```
D1_predicho_val = DatosPred_validacion(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min';
```



```
%Fracción molar de DME recuperado en primera columna predicho
XDME_D1_predichoval = DatosPred_validacion(2,:).*(XDME_D1_max-
XDME_D1_min)+XDME_D1_min';
```

```
%Resultados predichos
```

```
Datos_Predvalidacion=[D1_predichoval;XDME_D1_predichoval]';
```

```
%Gráficos de la red neuronal artificial
```

```
%Parámetros de salida
```

```
salidasvalidacion=Datosvalidacion(7:8,:);
```

```
Datos_Realesval=salidasvalidacion';
```

```
%Valores reales por DWSIM y valores predichos por la RNA
```

```
Realvalidacion= Datos_Realesval';
```

```
Prediccionvalidacion= Datos_Predvalidacion';
```

```
%Flujo másico de destilado en primera columna
```

```
figure;
```

```
plot(Realvalidacion(1,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccionvalidacion(1,:));grid;legend('Real','Predicción')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de validación')
```

```
ylabel('Flujo molar de destilado en primera columna (Kmol/h)')
```

```
title('Predicción del flujo molar de destilado en primera columna')
```

```
%Fracción molar de DME recuperado en primera columna
```

```
figure;
```

```
plot(Realvalidacion(2,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccionvalidacion(2,:));grid;legend('Real','Predicción')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de validación')
```

```
ylabel('Fracción molar de DME obtenido en primera columna')
```

```
title('Predicción de la fracción molar de DME obtenido en primera columna')
```

ANEXO G. Entrenamiento de la red neuronal artificial

%03 Programación de la red neuronal artificial

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

% Script generated by Neural Fitting app

% Created 22-ene-2021 13:01:43

% This script assumes these variables are defined:

% Entradas_Norm - input data.

% Salida_Norm - target data.

x = Entradas_N;

t = Salidas_N;

% 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'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

% Create a Fitting Network

hiddenLayerSize = 465;

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)

%04. Resultados de la red neuronal artificial

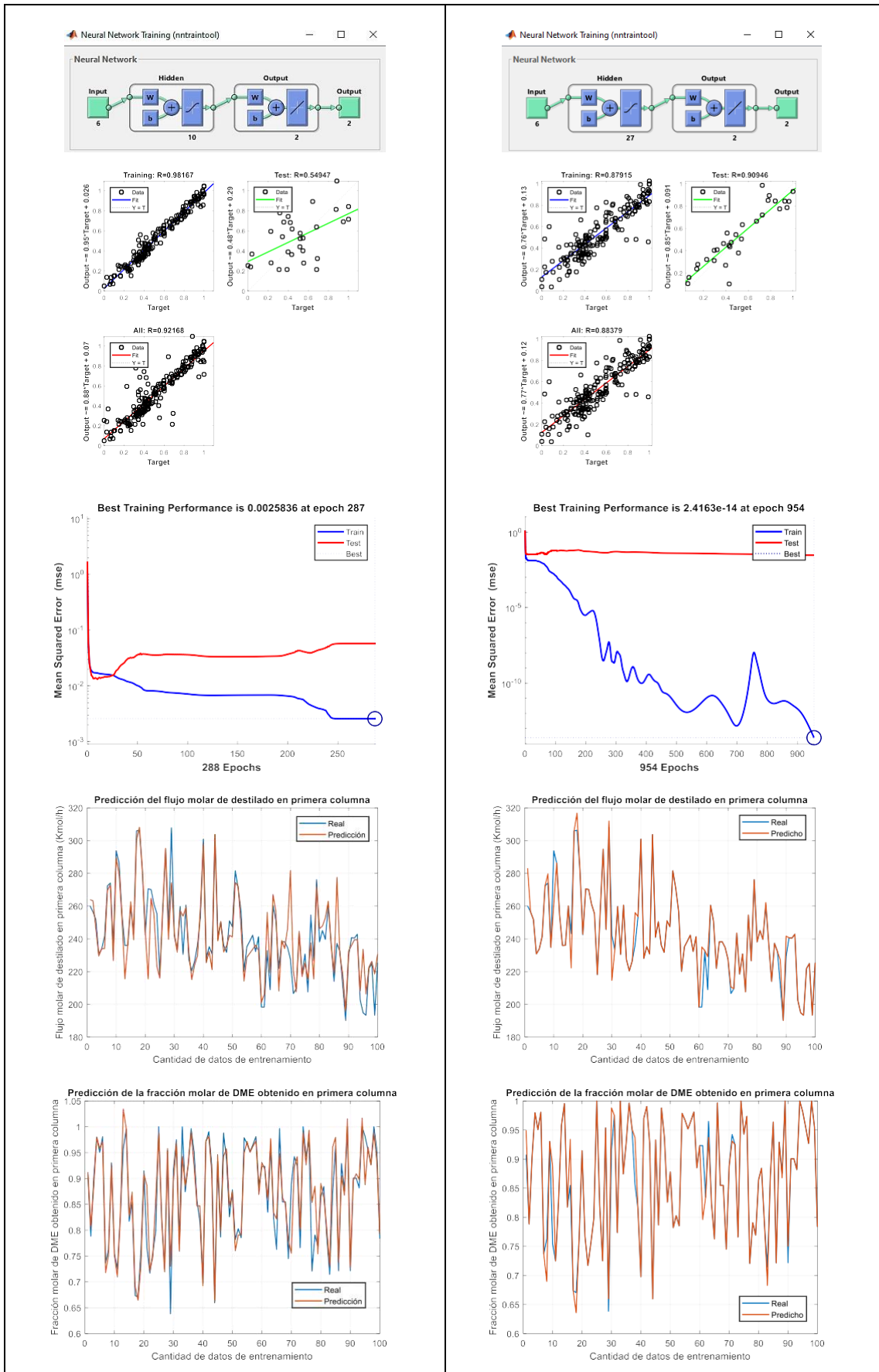
DatosPredichos = net(Entradas_N(1:end,:))

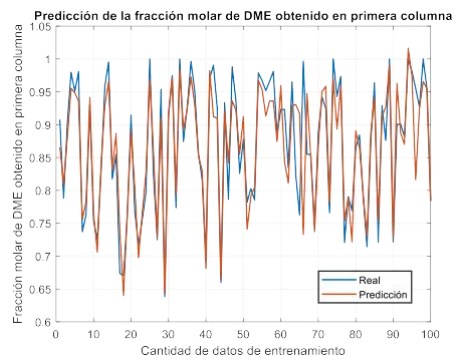
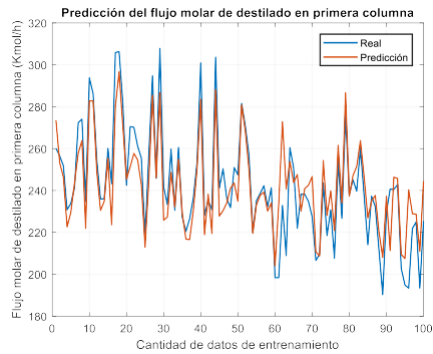
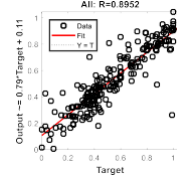
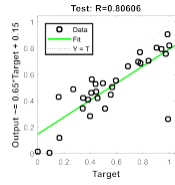
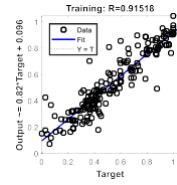
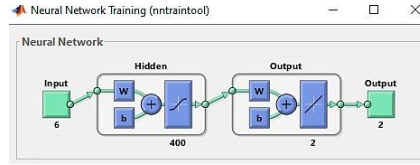
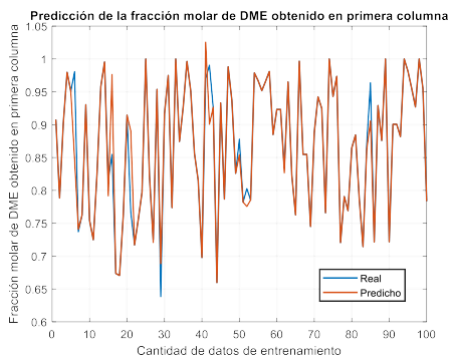
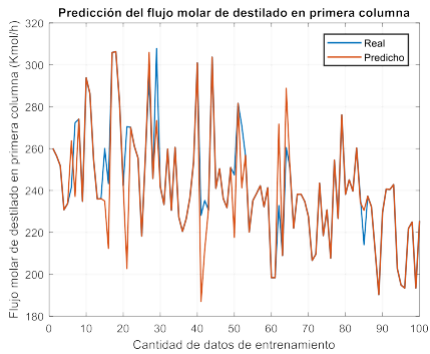
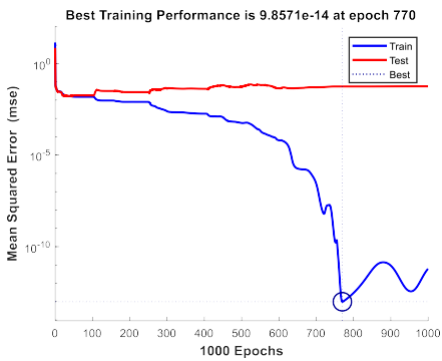
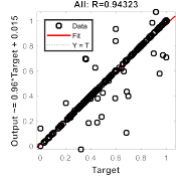
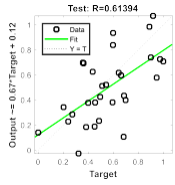
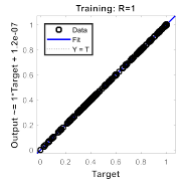
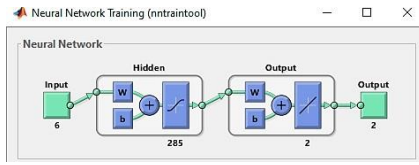
%Flujo másico de destilado en primera columna predicho
D1_predicho = DatosPredichos(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min';

%Fracción molar de DME obtenido en primera columna predicho
XDME_D1_predicho = DatosPredichos(2,:).*(XDME_D1_max-XDME_D1_min)+XDME_D1_min';

%Resultados predichos
Resultados_Predichos=[D1_predicho;XDME_D1_predicho]';
```

ANEXO H. Resultados de la red al entrenarla con diferentes neuronas en la capa oculta





ANEXO I. Resultados del entrenamiento de la red neuronal artificial

No.	Flujo Molar de Destilado (D1)		Fracción Molar de DME (D1)	
	Datos Reales (DWSIM)	Datos Predichos (RNA)	Datos Reales (DWSIM)	Datos Predichos (RNA)
1	260,11	272,36	0,9078	0,8446
2	256,52	248,12	0,7884	0,8255
3	251,79	247,21	0,9029	0,8810
4	230,79	224,08	0,9798	0,9640
5	233,80	226,95	0,9507	0,9335
6	241,44	241,49	0,9807	0,9226
7	272,38	259,73	0,7369	0,7660
8	274,08	257,56	0,7626	0,8034
9	234,80	219,71	0,9305	0,9510
10	293,81	281,37	0,7544	0,7862
11	286,31	276,55	0,7248	0,7243
12	254,64	244,62	0,8262	0,8536
13	235,93	234,98	0,9578	0,9234
14	236,06	230,43	0,9954	0,9670
15	260,10	252,20	0,8174	0,8441
16	243,23	232,67	0,8548	0,8755
17	305,88	285,44	0,6737	0,7384
18	306,32	297,90	0,6705	0,6520
19	282,15	273,07	0,7619	0,7655
20	242,47	241,61	0,9145	0,9032
21	270,51	266,30	0,7672	0,7938
22	270,14	260,31	0,7170	0,7299
23	261,16	248,81	0,7556	0,7956
24	255,47	246,54	0,7971	0,8148
25	218,18	207,45	1,0000	0,9761
26	257,26	240,98	0,8211	0,8693
27	294,79	282,14	0,7250	0,7411
28	245,73	240,11	0,9538	0,9257
29	307,87	288,18	0,6382	0,6529
30	241,93	226,79	0,9164	0,9197
31	233,26	229,73	0,9750	0,9563
32	259,78	246,95	0,7737	0,8067
33	230,50	224,05	1,0000	0,9980
34	260,59	257,21	0,8744	0,8788
35	227,39	224,93	0,9271	0,9281
36	220,45	212,04	0,9964	0,9805
37	226,48	224,72	0,9515	0,9091
38	236,53	222,25	0,8564	0,9032
39	253,60	249,64	0,8152	0,8350
40	300,93	291,81	0,6978	0,6771
41	228,10	211,22	0,9703	0,9971

42	235,27	232,08	0,9906	0,9354
43	230,76	227,69	0,9263	0,8896
44	303,70	289,23	0,6596	0,6762
45	240,98	229,92	0,9331	0,9184
46	250,42	234,94	0,7867	0,8401
47	236,14	230,82	0,9880	0,9439
48	231,78	233,26	0,9369	0,9419
49	250,99	242,27	0,8259	0,8568
50	247,43	230,36	0,8779	0,9312
51	281,61	290,33	0,7820	0,7359
52	270,91	269,89	0,8028	0,7905
53	256,78	247,20	0,7853	0,8206
54	220,16	210,89	0,9788	0,9803
55	235,22	231,36	0,9670	0,9569
56	238,59	236,50	0,9518	0,9065
57	242,29	248,30	0,9660	0,9205
58	232,23	232,00	0,9810	0,9384
59	241,35	231,31	0,8849	0,8828
60	198,36	209,08	0,9232	0,9618
61	198,36	260,78	0,9232	0,8109
62	232,88	268,10	0,8345	0,8188
63	208,89	238,30	0,9650	0,9273
64	260,50	250,16	0,8232	0,9187
65	250,80	240,12	0,7627	0,9267
66	221,96	241,24	0,9967	0,8040
67	238,21	230,57	0,8548	0,9371
68	238,21	251,32	0,8548	0,8329
69	234,76	244,87	0,7450	0,7840
70	227,48	252,15	0,8879	0,8580
71	206,57	218,15	0,9423	0,9441
72	209,57	216,29	0,9247	0,9569
73	243,53	255,15	0,7659	0,7888
74	218,41	224,37	1,0000	0,9743
75	230,77	239,93	0,9429	0,8977
76	207,65	222,88	0,9736	0,9435
77	254,56	264,70	0,7205	0,7546
78	226,63	231,46	0,7907	0,8167
79	276,13	279,70	0,7691	0,7486
80	238,15	239,73	0,8644	0,9026
81	245,11	249,40	0,8843	0,8745
82	239,67	248,04	0,7878	0,8140
83	260,32	265,49	0,7144	0,7457
84	237,18	243,18	0,8709	0,8994
85	214,04	226,57	0,9638	0,9298
86	237,28	241,21	0,7215	0,7932

87	232,29	239,07	0,9292	0,9154
88	211,40	224,48	0,8758	0,9269
89	190,22	203,00	1,0000	0,9988
90	229,43	246,67	0,7218	0,7516
91	240,70	202,30	0,9006	0,9948
92	240,49	243,00	0,9006	0,8988
93	242,83	246,04	0,8818	0,8787
94	202,67	210,85	1,0000	1,0087
95	194,86	210,69	0,9814	0,9647
96	193,38	247,27	0,9551	0,8121
97	221,85	230,26	0,9269	0,9288
98	224,95	226,89	1,0000	0,9749
99	193,38	216,71	0,9551	0,9396
100	225,47	237,64	0,7835	0,8037

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

ANEXO J. Validación de la red neuronal artificial

%Lectura de los datos de validación

```
Extraer=readtable('Base de datos.xlsx','Sheet','Datos de validación');
```

```
Datosvalidacion = table2array(Extraer);
```

%Cargar archivo net y parámetros maximos y minimos de la salida de la red neuronal

```
load('Red465BR.mat');
```

%Normalización de datos de entrada

```
entradasvalidacion=Datosvalidacion(1:6,:);
```

%Temperatura de alimentación

```
T_Nv =[(entradasvalidacion(1,1:end)-T_min)/(T_max-T_min)];
```

%Flujo molar de MeOH en alimentación

```
XMeOH_Nv =[(entradasvalidacion(2,1:end)-XMeOH_min)/(XMeOH_max-XMeOH_min)];
```

%Porcentaje de conversión en Reactor

```
C_Nv =[(entradasvalidacion(3,1:end)-C_min)/(C_max-C_min)];
```

%Relación de reflujo en primera columna

```
RR1_Nv =[(entradasvalidacion(4,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];
```

%Temperatura de reboiler en primera columna

```
TR1_Nv =[(entradasvalidacion(5,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];
```

%Relación de reflujo en segunda columna

```
RR2_Nv =[(entradasvalidacion(6,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];
```

%Entradas normalizadas

```
Entradas_Nvalidacion=[T_Nv;XMeOH_Nv;C_Nv;RR1_Nv;TR1_Nv;RR2_Nv];
```

%Calculos de la red neuronal artificial

```
DatosPred_validacion = net(Entradas_Nvalidacion(1:end,:));
```

%Resultados de la red neuronal artificial

%Flujo másico de destilado en primera columna predicho

```
D1_predichoal = DatosPred_validacion(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min';
```

```
%Fracción molar de DME recuperado en primera columna predicho
```

```
XDME_D1_predichoval = DatosPred_validacion(2,:).*(XDME_D1_max-  
XDME_D1_min)+XDME_D1_min';
```

```
%Resultados predichos
```

```
Datos_Predvalidacion=[D1_predichoval;XDME_D1_predichoval]';
```

```
%Gráficos de la red neuronal artificial
```

```
%Parámetros de salida
```

```
salidasvalidacion=Datosvalidacion(7:8,:);
```

```
Datos_Realesval=salidasvalidacion';
```

```
%Valores reales por DWSIM y valores predichos por la RNA
```

```
Realvalidacion= Datos_Realesval';
```

```
Prediccionvalidacion= Datos_Predvalidacion';
```

```
%Flujo másico de destilado en primera columna
```

```
figure;
```

```
plot(Realvalidacion(1,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccionvalidacion(1,:));grid;legend('Real','Predicción')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de validación')
```

```
ylabel('Flujo molar de destilado en primera columna (Kmol/h)')
```

```
title('Predicción del flujo molar de destilado en primera columna')
```

```
%Fracción molar de DME recuperado en primera columna
```

```
figure;
```

```
plot(Realvalidacion(2,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Prediccionvalidacion(2,:));grid;legend('Real','Predicción')
```

```
xlabel('Cantidad de datos de validación')
```

```
ylabel('Fracción molar de DME obtenido en primera columna')
```

```
title('Predicción de la fracción molar de DME obtenido en primera columna')
```

ANEXO K. Resultados de validación de la red neuronal artificial

No.	Flujo Molar de Destilado (D1)		Error (%)	Fracción Molar de DME (D1)		Error (%)
	Datos Reales (DWSIM)	Datos Predichos (RNA)		Datos Reales (DWSIM)	Datos Predichos (RNA)	
1	309,47	297,58	3,84	0,6680	0,6779	1,49
2	271,26	237,29	12,52	0,7733	0,8463	9,43
3	207,28	211,82	2,19	1,0000	0,9992	0,08
4	207,78	215,65	3,79	0,9950	0,9653	2,98
5	231,99	236,33	1,87	1,0000	0,9520	4,80
6	225,68	244,34	8,27	0,7754	0,8046	3,77
7	239,66	245,46	2,42	0,9743	0,9176	5,82
8	210,09	218,13	3,83	0,9745	0,9490	2,61
9	220,96	237,60	7,53	0,9181	0,9129	0,57
10	210,58	216,91	3,00	0,9621	0,9737	1,20
11	254,79	267,17	4,86	0,6795	0,7028	3,43
12	259,05	263,05	1,54	0,7017	0,7321	4,33
13	225,76	241,78	7,10	0,9951	0,9291	6,63
14	223,55	233,40	4,41	0,9302	0,9344	0,46
15	190,11	196,20	3,20	1,0000	1,0180	1,80

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

ANEXO L. Gráficos de comparación durante la validación de la red neuronal artificial

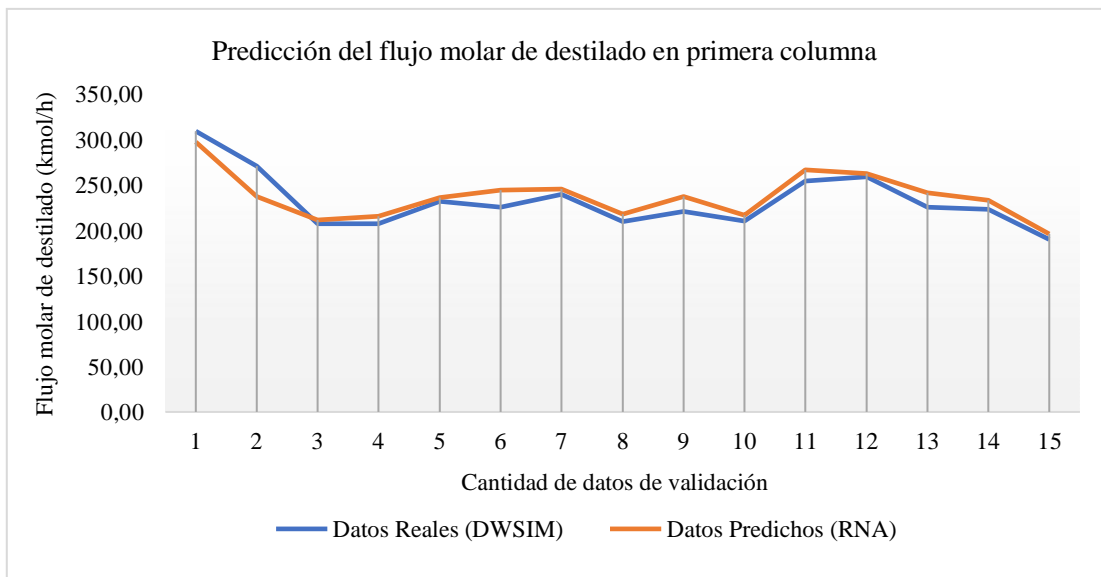


Gráfico 1. Flujo molar real y predicho de destilado en la columna de separación de DME.

Realizado por: Cando, Mishell, 2021

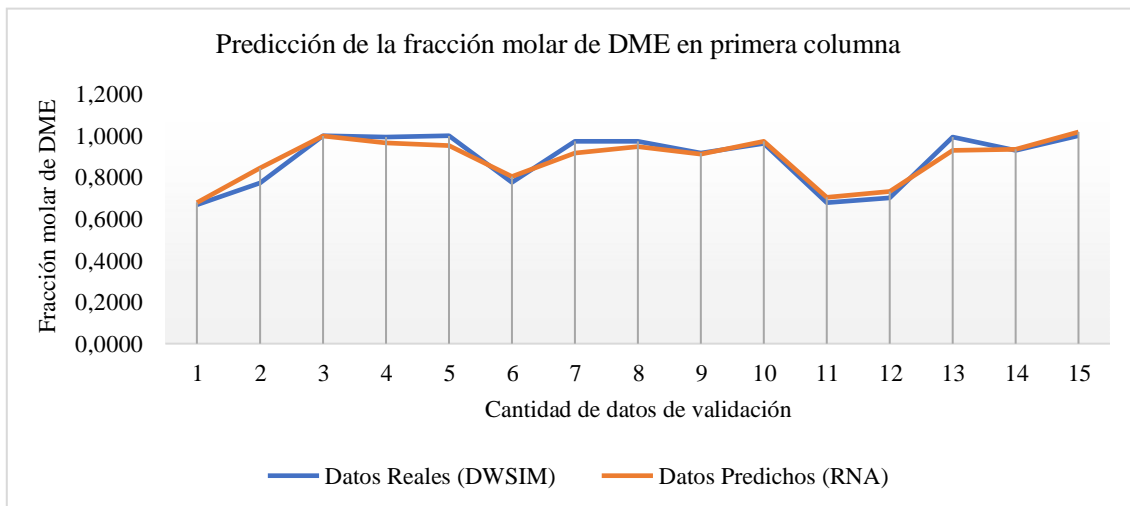


Gráfico 2. Fracción molar real y predicha del dimetil éter separado en la primera columna.

Realizado por: Cando, Mishell, 2021



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: 28 / 10 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Mishell Estefanía Cando Aguinsaca</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniero Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.</i>

**LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**

Firmado digitalmente por
LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Nombre de reconocimiento
(DN): c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.10.28 10:05:12
-05'00'



0922-DBRAI-UTP-2021