



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA RECUPERACIÓN Y
DESHIDRATACIÓN DE BIOETANOL EN UN PROCESO DE
DESTILACIÓN POR OSCILACIÓN DE VAPOR ASISTIDA POR
BOMBA DE CALOR**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTOR: JHOANA NICOLE ALVAREZ UVIDIA

DIRECTOR(A): ING. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO

Riobamba – Ecuador

2023

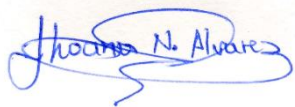
© 2023, **Jhoana Nicole Alvarez Uvidia.**

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

Yo, Jhoana Nicole Alvarez Uvidia, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular 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 autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Trabajo de Integración Curricular; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 25 de mayo del 2023



Jhoana Nicole Alvarez Uvidia

060425253-5

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; tipo: Proyecto Técnico, **SIMULACIÓN PARA LA DESHIDRATACIÓN Y RECUPERACIÓN DE BIOETANOL EN UN PROCESO DE DESTILACIÓN POR OSCILACIÓN DE VAPOR ASISTIDA POR BOMBA DE CALOR**, realizado por la señorita: **JHOANA NICOLE ALVAREZ UVIDIA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA



Ing. Mabel Maribel Parada Rivera
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL

2023-05-25



Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco
DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR

2023-05-25



Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy
ASESOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR

2023-05-25

DEDICATORIA

El presente trabajo lo dedico principalmente a Dios y a mi familia, especialmente a mis padres Marilú y Yovany por todo su esfuerzo y dedicación para que todo sea posible, sin dejar de lado a todas las personas que han formado parte de este gran sueño y que confiaron en mí, por el apoyo incondicional durante cada etapa de mi vida y con el cual he podido culminar mi carrera profesional.

Nicole

AGRADECIMIENTO

Agradezco a Dios, por otorgarme el regalo de la vida y por todas aquellas oportunidades que ha existido en mi camino para convertirme en una mejor persona y llegar a ser una profesional, por bendecirme con salud y buenos valores que me han forjado como la persona que soy.

Gracias infinitas a mis padres Marilú y Yovany por su entrega incondicional, por la confianza, tiempo y apoyo económico, moral y emocional. Por sus enseñanzas y por inculcarme que no hay mejor herencia que me pueden brindar que no sea la educación. A mi hermana Dayana por ser mi amiga y confidente, por su apoyo desinteresado, pero siempre muy acertado. De igual manera un agradecimiento especial a José Luis por su apoyo, amistad y amor incondicional, impulsándome a mejorar y continuar.

Por otra parte, agradezco al Ing. Daniel Chuquín por la confianza y oportunidad que me brindo para desarrollar mi proyecto de titulación, por su guía, motivación y enseñanzas. Agradezco también al Ing. Ramiro Cepeda y al Ing. David Rosario por su acertado apoyo en cada etapa de este proyecto.

Inmensa gratitud a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, en especial a la Escuela de Ingeniería Química por ser la carrera que me forjo profesionalmente, por abrirme sus puertas y brindarme todos los conocimientos, porque allí conocí, aprendí y compartí con mis docentes, amigos y compañeros. Así también, al Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería, “GISAI”, por permitir la ejecución de esta investigación.

Finalmente, agradezco a todas aquellas personas que formaron parte de este arduo trayecto, quienes me brindaron sonrisas, lecciones, trabajos en equipo y a todos aquellos que creyeron en mí un gracias de corazón.

Nicole

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
RESUMEN.....	xiv
SUMMARY.....	xvi
INTRODUCCIÓN.....	1

CAPÍTULO I

1. DIAGNOSTICO DEL PROBLEMA.....	2
1.1. Antecedentes.....	2
1.2. Planteamiento del Problema.....	3
1.3. Justificación.....	5
1.4. Objetivos.....	7
1.4.1. <i>Objetivo General</i>	7
1.4.2. <i>Objetivos Específicos</i>	7

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	8
2.1. Antecedentes de investigación.....	8
2.1.1. <i>Simulación de procesos en la producción de biocombustibles</i>	8
2.1.2. <i>Redes neuronales artificiales en los procesos químicos</i>	11
2.2. Referencias teóricas.....	13
2.2.1. <i>Bio etanol</i>	13
2.2.2. <i>Alcohol etílico</i>	15
2.2.3. <i>Azeótropo</i>	15
2.2.4. <i>Separación o ruptura de un azeótropo</i>	16
2.2.5. <i>Destilación</i>	16
2.2.6. <i>Producción de bioetanol</i>	17
2.2.7. <i>Software de simulación de procesos</i>	19
2.2.8. <i>ChemSep</i>	21
2.2.9. <i>Red Neuronal Artificial</i>	21

2.2.10. <i>Matlab</i>	24
-----------------------------	----

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO.....	26
3.1. Método de estudio.....	26
3.2. Selección del simulador.....	26
3.2.1. <i>Principales características de DWSIM</i>	27
3.3. Ingeniería del proyecto	29
3.4. Establecer parámetros de funcionamiento.....	29
3.4.1. <i>Descripción del proceso</i>	30
3.4.2. <i>Descripción de la integración de calor en el proceso</i>	31
3.4.3. <i>Paquete de propiedades termodinámicas</i>	32
3.5. Simulación en DWSIM	33
3.5.1. <i>Proceso aplicado en DWSIM</i>	33
3.5.2. <i>Condiciones de la alimentación</i>	33
3.5.3. <i>Condiciones de la primera columna de alta presión</i>	34
3.5.4. <i>Condiciones de la segunda columna de baja presión</i>	35
3.5.5. <i>Condiciones de la tercera columna de absorción</i>	37
3.6. Validación de los resultados de la simulación con bibliografía.....	39
3.7. Análisis de optimización del proceso simulado.....	39
3.8. Tratamiento de datos	40
3.9. Desarrollo de la red neuronal artificial	40
3.9.1. <i>Entradas y salidas de la red neuronal artificial</i>	40
3.9.2. <i>Diseño de la red neuronal artificial</i>	41
3.10. Entrenamiento de la red neuronal artificial	41
3.11. Validación de resultados.....	44
3.12. Análisis estadístico.....	44
3.12.1. <i>Formulación de la hipótesis nula y la hipótesis alternativa</i>	44
3.12.2. <i>Regla de decisión</i>	45

CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS.....	46
4.1. Simulación del proceso en DWSIM	46
4.2. Validación de la simulación.....	53
4.2.1. <i>Simulación del proceso en ASPEN HYSYS</i>	53

4.2.2.	<i>Balance de masa del proceso</i>	53
4.2.3.	<i>Balance de energía del sistema</i>	62
4.2.4.	<i>Balance de energía en el intercambiador de calor</i>	65
4.3.	Red neuronal artificial	67
4.3.1.	<i>Base de datos de la RNA</i>	67
4.3.2.	<i>Desarrollo de la RNA</i>	67
4.3.3.	<i>Entrenamiento de la RNA</i>	67
4.4.	Validación por análisis estadístico	70
4.5.	Interfaz gráfica de usuario	70
CONCLUSIONES		76
RECOMENDACIONES		77
GLOSARIO		
BIBLIOGRAFÍA		
ANEXOS		

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Propiedades del etanol la gasolina.....	14
Tabla 2-2: Ventajas y desventajas de la RNA.....	23
Tabla 1-3: Principales características de DWSM.....	28
Tabla 2-3: Caudal másico y composiciones en principales flujos del proceso.	31
Tabla 3-3: Parámetros de diseño del proceso.....	31
Tabla 4-3: Descripción energética del proceso	32
Tabla 5-3: Condiciones de la alimentación.....	33
Tabla 6-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial.	40
Tabla 1-4: Resultados de la primera columna de destilación.....	48
Tabla 2-4: Resultados de la segunda columna de destilación.	49
Tabla 3-4: Resultados de la tercera columna de destilación.	50
Tabla 4-4: Resultados del separador (desgasificador).	51
Tabla 5-4: Resultados de las corrientes producto.	52
Tabla 6-4: Validación de la simulación.	53
Tabla 7-4: Pruebas de entrenamiento.....	68
Tabla 8-4: Medias de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.....	70
Tabla 9-4: ANOVA de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.	70
Tabla 10-4: Medias de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.....	71
Tabla 11-4: ANOVA de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.	71
Tabla 12-4: Medias de la fracción másica de dióxido de carbono.....	72
Tabla 13-4: ANOVA de la fracción másica de dióxido de carbono.	72
Tabla 14-4: Medias de la fracción másica de dióxido de carbono.....	73
Tabla 15-4: ANOVA de la fracción másica de dióxido de carbono.	73
Tabla 16-4: Resumen estadístico de la validación de la predicción.....	74
Tabla 17-4: Predicción de la GUI.	75

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1-2: Estructura química del alcohol etílico.....	15
Ilustración 2-2: Diagrama esquemático de una columna de destilación	17
Ilustración 3-2: Curva de destilación azeótropo etanol – agua.....	18
Ilustración 4-2: Ejemplo de RNA.....	22
Ilustración 1-3: Interfaz del simulador	27
Ilustración 2-3: Metodología para el desarrollo de la RNA	29
Ilustración 3-3: Diseño óptimo de la recuperación y deshidratación de bioetanol.....	30
Ilustración 4-3: Procesos de simulación en DWSIM aplicado	33
Ilustración 5-3: Parámetros de operación en la primera columna	34
Ilustración 6-3: Propiedades termodinámicas en la primera columna.....	34
Ilustración 7-3: Especificaciones en la primera columna.....	35
Ilustración 8-3: Parámetros de operación en la segunda columna.....	36
Ilustración 9-3: Propiedades termodinámicas en la segunda columna.....	36
Ilustración 10-3: Especificaciones en la segunda columna	37
Ilustración 11-3: Parámetros de operación en la tercera columna.....	38
Ilustración 12-3: Propiedades termodinámicas en la tercera columna	38
Ilustración 13-3: Especificaciones en la tercera columna	39
Ilustración 14-3: Neural Network Fitting.....	41
Ilustración 15-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial	42
Ilustración 16-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial	42
Ilustración 17-3: Arquitectura de la red neuronal.....	43
Ilustración 18-3: Algoritmos de entrenamiento de la red	44
Ilustración 19-3: Panel de creación de la GUI.....	46
Ilustración 1-4: Simulación del proceso de recuperación y deshidratación de bioetanol.....	47
Ilustración 2-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de alta presión CD1	54
Ilustración 3-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de baja presión CD 2 ...	56
Ilustración 4-4: Diagrama de balance general de masa en el separador gas - líquido	58
Ilustración 5-4: Diagrama de balance general de masa en el absorbedor.....	60
Ilustración 6-4: Diagrama de balance general de masa en el mezclador.....	61
Ilustración 7-4: Diagrama de balance general de energía en la bomba	63
Ilustración 8-4: Diagrama de balance general de energía en el intercambiador de calor	65
Ilustración 9-4: Diagrama de balance general de energía en el compresor	66
Ilustración 10-4: Arquitectura de la RNA.	67
Ilustración 11-4: Correlación del aprendizaje de la RNA con 40 neuronas.	69

Ilustración 12-4: Error de predicción de la RNA con 40 neuronas.	69
Ilustración 13-4: Predicción de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.....	70
Ilustración 14-4: Predicción de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.	71
Ilustración 15-4: Predicción de la fracción másica de dióxido de carbono.	72
Ilustración 16-4: Predicción de la fracción másica de agua.	73
Ilustración 17-4: Resultado de la interfaz gráfica de usuario.	73

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: DATOS PARA ENTRENAMIENTO DE LA RNA

ANEXO B: DATOS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

ANEXO C: PROGRAMACIÓN DE LA RNA

ANEXO D: RESULTADOS DEL ENTRENAMIENTO DE LA RNA

ANEXO E: PROGRAMACIÓN DE LA VALIDACIÓN DE LA RNA

ANEXO F: RESULTADOS DE LA VALIDACIÓN DE LA RNA

ANEXO G: GRÁFICOS DE RESULTADOS ESTADÍSTICOS

ANEXO H: PROGRAMACIÓN DE LA INTERFAZ GRÁFICA PARA LA RNA

RESUMEN

El objetivo del trabajo fue desarrollar una red neuronal artificial del proceso de recuperación y deshidratación de bioetanol en un proceso de destilación por oscilación de vapor asistida por bomba de calor. En DWSIM se simulan la destilación asistida por bomba de calor para la recuperación de bioetanol seguida de adsorción por oscilación de presión para la deshidratación de bioetanol, utilizando columnas de destilación ChemSep y el modelo no aleatorio de dos líquidos (NRTL) para modelar termodinámicamente las fugacidades en fase líquida de la mezcla azeotrópica agua – etanol. Una red neuronal artificial de aprendizaje supervisado se entrenó con el algoritmo de Bayesian Regularization y una arquitectura conformada por 6 neuronas de entrada, 40 neuronas en la capa oculta y 4 neuronas en la capa de salida. A través del análisis de optimización se obtuvo una base de 201 datos para desarrollar la red neuronal artificial. Se utilizaron 150 datos para entrenar y 51 datos para validar la predicción. La capacidad de predicción durante el entrenamiento de la red se evaluó a través del error cuadrático medio óptimo ($2,81E-08$) y la correlación entre los datos reales y predichos a través del coeficiente de Pearson (0,99). Un valor-P superior al nivel de significancia en todas las variables comparadas permitió concluir que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los resultados reales y predichos por la red neuronal artificial.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGIA QUÍMICA>, <SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS>, <RED NEURONAL ARTIFICIAL>, <AZEÓTROPO>, <BIOETANOL>.



D.B.A.T.
Ind. Química



1312-DBRA-UPT-2023

SUMMARY

The objective of the work was to develop an artificial neural network of the bioethanol recovery and dehydration process in a heat pump assisted steam swing distillation process. Heat pump assisted distillation for bioethanol recovery followed by pressure swing adsorption for bioethanol dehydration is simulated in DWSIM using ChemSep distillation columns and the non-random two-liquid model (NRTL) to thermodynamically model the liquid phase fugaciousness of the azeotropic water-ethanol mixture. A supervised learning artificial neural network was trained with the Bayesian Regularization algorithm and an architecture consisting of 6 input neurons, 40 neurons in the hidden layer and 4 neurons in the output layer. Through the optimization analysis, a base of 201 data was obtained to develop the artificial neural network. A total of 150 data were used for training and 51 data were used to validate the prediction. The prediction capability during the training of the network was evaluated through the optimal mean square error ($2.81E-08$) and the correlation between the actual and predicted data through Pearson's coefficient (0.99). A P-value above the significance level for all the variables compared allowed us to conclude that there is no statistically significant difference between the means of the actual and predicted results by the artificial neural network.

Keywords: <CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <SIMULATION OF CHEMICAL PROCESSES>, <ARTIFICIAL NEURON NETWORK>, <DWSIM>, <AZEOTROPE>, <BIOETHANOL>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.
Ced: 1103696132

INTRODUCCIÓN

El presente Trabajo de Integración Curricular tiene como finalidad simular un proceso de destilación de bioetanol y desarrollar una Red Neuronal Artificial (RNA), que sea capaz de predecir la concentración final del mismo.

El bioetanol es un biocombustible que se lo puede obtener de manera sostenible a partir de la fermentación de materiales orgánicos que son considerados fuentes de energías renovables. Producto de la fermentación no es adecuado para uso como combustible es por eso que es sometido al proceso de recuperación y deshidratación para la separación de mezcla etanol y agua por medio de un proceso de destilación por oscilación de presión asistida por bomba de calor, para finalmente mediante la simulación de su proceso industrial en DWSIM identificar las variables críticas de los procesos que nos servirán más adelante para colocarlas como entradas de la RNA.

Destaca hoy en día la simulación de procesos como una herramienta principal y en auge para la investigación, diseño y optimización de procesos. En la actualidad este campo se combina con la aplicación de inteligencias artificiales, en este trabajo se usará una de estas como son las Redes Neuronales Artificiales.

El simulador empleado cuenta con la ventaja de ser código libre, es decir, que se encuentra disponible de manera gratuita, también cuenta con un espacio de trabajo intuitivo que facilita su aprendizaje lo que lo convierte en un simulador competitivo en el mercado. Las Redes Neuronales Artificiales son usadas en los procesos industriales como una herramienta predictiva, la ventaja de usarlo se ver resaltada en la capacidad de poder usar cualquier parámetro de entrada y obtener resultados con un alto porcentaje de confiabilidad.

Para este trabajo se empleará Neuronal Fitting (nftool) disponible en MATLAB, esta herramienta permite elegir los datos que se pueden usar, diseñar y entrenar una RNA y valorar su rendimiento mediante pruebas estadísticas como: el error cuadrático medio (MSE) y un análisis de regresión (R). El análisis estadístico nos dará un respaldo externo de validación para ello se usará ANOVA con el propósito de poner en evidencia la capacidad predictiva de la RNA y demostrando la confiabilidad que posee la misma.

CAPÍTULO I

1 DIAGNOSTICO DEL PROBLEMA

1.1 Antecedentes

El clima tal como lo conocemos está cambiando vinculado a la emisión acumulativa de gases de efecto invernadero (GEI) de las actividades humanas. Las emisiones fugitivas relacionadas con la energía de los combustibles y la quema de combustibles son responsables de aproximadamente el 74% de las emisiones antropogénicas de GEI globales en 2017. Las emisiones globales de CO₂ relacionadas con la energía alcanzaron alrededor de 33 gigatoneladas en 2019, 10 gigatoneladas más que en 2000, por lo tanto, las políticas climáticas priorizan acciones para reducir las emisiones relacionadas con la energía con la transición a la energía renovable (Holmatov et al., 2021, pp. 1-2).

El Acuerdo de París ha destacado y confirmado la descarbonización como el objetivo global de las fuentes de energía que sustentan el desarrollo y el estilo de vida de la sociedad, en este sentido, el desarrollo de las energías renovables se ha convertido en un tema importante para el desarrollo de las políticas energéticas (Bonifacino et al., 2021, p.1). Esto debido principalmente a la disminución de los recursos fósiles, en combinación con la contaminación ambiental asociada con la explotación de estos recursos, hace necesario que se considere una transición hacia los recursos renovables (Sanusi, Suinyuy y Kana, 2021, p.1-2).

La energía renovable según Holmatov et al (2021, pp. 1-2) está definida como cualquier forma de energía obtenida de fuentes biológicas, solares o geofísicas. En 2017, la participación de las energías renovables fue de casi el 14 % del suministro total de energía primaria del mundo, siendo la bioenergía responsable del 68 % de las energías renovables. La bioenergía es energía derivada de varias materias primas de biomasa. La biomasa puede ser un material biológico generado a partir de organismos vivos o vivos recientemente. En comparación con las fuentes renovables variables, como las tecnologías solar y eólica, la bioenergía es más confiable y más fácil de enviar cuando se necesita porque, a diferencia de la energía solar y eólica, puede almacenarse como fuentes de energía fósil (Holmatov et al., 2021, pp. 2-3).

La producción de bioetanol a partir de material lignocelulósico no procedente de cultivos ha alcanzado la escala comercial y se recomienda como una posible solución para descarbonizar el sector del transporte, la cantidad de combustibles fósiles relacionados con el transporte utilizados actualmente que se pueden reemplazar con bioetanol lignocelulósico utilizando residuos de cultivos generando el ahorro de emisiones de gases de efecto invernadero y reduciendo las huellas de carbono (Holmatov et al., 2021, pp 1).

Los biocombustibles son un recurso energético prometedor que puede reducir la demanda de petróleo y gasolina, además, disminuir las emisiones de CO₂ de los vehículos. Los motores de los automóviles pueden quemar gasolina mezclada con 5% a 10% de bioetanol con pocas o ninguna modificación. El bioetanol y el biodiesel son los dos biocombustibles más populares que se utilizan como sustitutos de la gasolina y el diésel regulares (Mahmud et al., 2022, pp. 1741-1742).

El bioetanol se produce por fermentación de muchos residuos orgánicos o recursos de biomasa en medios acuosos diluidos. Desafortunadamente, el bioetanol para uso como combustible debe tener un bajo contenido de agua y su recuperación es una operación intensiva en energía. La destilación azeotrópica heterogénea (HAD) es una opción adecuada bien conocida para la deshidratación de alcoholes, por ejemplo, etanol (Plesu et al., 2021, pp. 3-4).

La innovación de los procesos químicos y la necesidad de encontrar mejoras para poder cubrir las demandas existentes a nivel mundial, hacen que nos veamos en la necesidad de buscar nuevas alternativas que ayuden a solventar de manera más eficaz y con un bajo costo de producción las condiciones de operación en las que funciona el equipo y es con la tecnología actual que se puede afrontar todos los problemas que se dan a nivel industrial, así como en las demás áreas.

1.2 Planteamiento del Problema

Los actuales problemas ambientales y la sobre explotación petrolífera, ponen de manifiesto la necesidad de buscar combustibles más ecológicos, renovables y de producción natural tales como el biodiesel y el bioetanol, productos que han sido promovidos mediante políticas gubernamentales que además de apoyar la agricultura y el desarrollo rural, garantizan seguridad energética y mitigación del cambio climático dada la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero (Silva, Bermúdez y Castiblanco, 2012, p. 8).

El aumento de la demanda de energía y la volatilidad de los precios del petróleo, han llevado a buscar fuentes alternativas de energía que sean a la vez económicamente eficientes y ambientalmente sustentables (Saulino, 2011, p. 7). La viabilidad económica de los biocombustibles depende de los costos de la opción alternativa, que son los combustibles fósiles. Pero los precios de los derivados del petróleo son conocidos por su inestabilidad e incertidumbre, en el corto plazo la volatilidad puede ser pequeña, pero en el largo plazo es prácticamente imposible prever precios con razonable seguridad por tres o más años (Young y Steffen, 2008, p. 3).

Los combustibles de origen biológico pueden sustituir parte del consumo en combustibles fósiles tradicionales, como el petróleo o el carbón, aplicando las técnicas agrícolas y las estrategias de procesamiento apropiadas, los biocombustibles pueden ofrecer ahorros en las emisiones de al menos el 50%, comparando con combustibles fósiles como el gasóleo o la gasolina (Serna, Barrera y Montiel, 2011, p. 2). Además, los biocombustibles se producen a partir de cultivos agrícolas, que son fuentes renovables de energía (Serna, Barrera y Montiel, 2011, p. 2). En la actualidad representan

una fuente potencial de energía renovable; además de que podrían generar nuevos y grandes mercados para los productores agrícolas, no obstante, sólo algunos de los biocombustibles son viables y la mayoría implica altos costos sociales e irónicamente ambientales (Serna, Barrera y Montiel, 2011, p. 2). Los efectos económicos, ambientales y sociales de los biocombustibles deben debatirse ampliamente y es necesario evaluarlos cuidadosamente hacia programas de biocombustibles en gran escala (Serna, Barrera y Montiel, 2011, p. 2).

Dentro de estas nuevas fuentes de energía, los biocombustibles han atraído atención a nivel mundial por ser una alternativa que ya se encuentra disponible y que a la vez permitiría el abastecimiento del sistema de transporte, contribuiría a mitigar el cambio climático, y promovería el desarrollo de las áreas rurales (Saulino, 2011, p. 7).

De acuerdo con Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 2), el bioetanol puede ser utilizado para producir biocombustibles de alto poder energético con características similares a las de la gasolina los cuales conllevan a una importante reducción de las emisiones contaminantes en los motores tradicionales de combustión, este tipo de combustible, además de ser usado como sustituto de la gasolina, puede ser mezclado con esta en concentraciones del 5 o el 10%. El término bioetanol pareciera que encierra la aplicación de una tecnología complicada; sin embargo, la realidad se hace distinta gracias a que este combustible se produce a partir de la fermentación de productos agrícolas tales como maíz, trigo, cebada, remolacha, caña de azúcar, sorgo, entre otros (Albarracín, Jaramillo y Albuja, 2015, pp. 2-4).

En la actualidad, existen varias tecnologías para la recuperación y deshidratación de bioetanol a fin de producir > 99,5 % en peso de bioetanol a partir de un rango diluido de 5 a 20 % en peso de etanol y agua restante. Destacan entre ellos la destilación por compresión de vapor seguida de destilación extractiva a base de sal, columna de pared divisoria extractiva simple asistida por bomba de calor, doble efecto destilación con tres paredes divisorias y destilación seguida de permeación de vapor. Aunque las tecnologías de destilación asistida por bomba de calor reciben una señal verde en la práctica de la industria, según la aplicabilidad de estas tecnologías aún está por verse en la industria del bioetanol (Singh, da Cunha y Rangaiah, 2019, pp. 3-6).

El bioetanol obtenido de la fermentación de biomasa está diluido y no es adecuado para uso como combustible para automóviles. Para la recuperación (preconcentración 5 o el 10%) y deshidratación (purificación) de bioetanol del caldo de fermentación, la destilación es ampliamente utilizada aunque la separación de etanol y agua por destilación es compleja debido a la presencia de un azeótropo de mínima ebullición (Ptraşcu, Bildea y Kiss, 2017, pp. 67-68).

1.3 Justificación

Al darse el proceso de obtención de bioetanol se presentan varios productos secundarios debido a la hidrogenación del etanol que es la principal reacción para la producción de bioetanol, estos productos afectan de manera directa a la concentración del producto final ya que al presentarse en forma de mezclas hacen complicado la obtención de un etanol de 99.8 % en concentración del producto final, la propuesta presentada para este proyecto es usar proceso de deshidratación del etanol por oscilación de presión seguido de una destilación asistida por bomba de calor para mejorar la eficiencia energética, se usa un proceso adjunto de desgasificación para recuperar el etanol que sale de la primera torre de destilación junto con el CO₂ como vapor de cabeza, además posee un doble proceso de compresión uno de tres etapas y otro de dos etapas que buscan recuperar todo el etanol en su máxima concentración. Una vez finalizado el proceso se obtiene un bioetanol de alta concentración como producto final, las operaciones adjuntas a los procesos principales y las condiciones de funcionamiento del equipo se buscan sean las óptimas para que produzcan los mejores resultados.

En la actualidad uno de los puntos más importantes es ahorrar recursos energéticos para evitar consumos innecesarios, en todo proceso siempre que sea posible y factible se debe buscar la manera de optimizarlo con el fin de mejorar el proceso y producir la mayor cantidad de producto con un menor consumo de recursos económicos y a su vez para evitar causar impactos directos en el medio ambiente. Al producirse de manera sostenible, el bioetanol es un combustible que se puede generar para aplicarlo en diferentes sectores industriales que conlleven el uso de diésel y gasolina, por eso se debe buscar el proceso óptimo para obtenerlo con su más alto nivel de concentración.

La simulación de procesos y el uso de redes neuronales son la opción más relevante para dar solución a los desafíos que se nos presentan y de esta manera poder llegar a alcanzar una solución y análisis de manera detallada y concisa del proceso, así como manteniendo un bajo costo económico. La simulación tiene su fundamento en el análisis matemático de un problema real que se pueda predecir con la ayuda de una herramienta tecnológica, existen software tanto de libre acceso como de paga, con diferentes características propias de cada uno que ayudan a recrear el proceso con sus condiciones y parámetros de operación, en la actualidad les convierte en un instrumento confiable y fácil de usar, colocándolo como un medio para evaluar, controlar y optimizar procesos industriales.

El presente estudio está centrado en la simulación de procesos aplicando el simulador DWSIM, aquí se va a estudiar el comportamiento de todo el sistema de manera detallada, tomando en cuenta que son 2 procesos y se debe considerar para cada proceso y equipo sus propias condiciones de funcionamiento, variables críticas y parámetros que se deben controlar en el proceso para que se

lleve a cabo de forma óptima. De esta manera se encontrarán resultados que sean válidos estadísticamente y puedan ser validados con los resultados establecidos en bibliografía.

Dado que el software DWSIM es una multiplataforma para procesos químicos, su código es completamente abierto, toda persona interesada en el tema y cuenta con la oportunidad de acceder a él de manera completamente libre para futuros estudios, para poder fortificar los estudios sobre la producción de bioetanol a nivel industrial, por esto se pretende que toda esta información sea de libre acceso para todo aquello que quiera usar este trabajo como una guía para desarrollar futuros proyectos. Una de las grandes ventajas del uso de la simulación de procesos químicos es la facilidad con la que se pueden manipular todas las variables que se lleguen a presentar al momento de realizar cualquier tipo de producción de cualquier producto, en este caso se podrá manipular todas las variables presentes en la producción de bioetanol.

Una vez obtenida la validación del proceso la ase datos que la simulación nos da se podrá utilizar para el entrenamiento de la red neuronal artificial utilizando el Toolbox disponible en MATLAB, que es una herramienta pedagógica, confiable y rápida para poder predecir los resultados de concentraciones del bioetanol, fracciones molares de todos los compuestos que estén involucrados de forma directa o indirecta, mediante las condiciones de funcionamiento del proceso temperatura y presión principalmente. De esta manera se puede estudiar la variación de las condiciones de forma inmediata y simplificada.

Finalmente, el actual proyecto de titulación se encuentra centrado en la línea de modelado y simulación computacional de procesos industriales de la carrera de Ingeniería Química y del Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH "GISAI".

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Simular el proceso de deshidratación y recuperación de bioetanol en un proceso de destilación por oscilación de vapor asistida por bomba de calor.

1.4.2 Objetivos Específicos

- Establecer los parámetros de funcionamiento del proceso de destilación por oscilación de presión asistida por bomba de calor.
- Validar la simulación del proceso para la recuperación de bioetanol con referencias bibliográficas.
- Diseñar una RNA para la predicción de la concentración de bioetanol en una mezcla cercana al azeótropo de etanol - agua.
- Validar el funcionamiento de la RNA por medio de un análisis estadístico entre valores reales y predichos.
- Realizar un análisis de optimización del proceso de destilación asistida por bomba de calor.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes de investigación

2.1.1 *Simulación de procesos en la producción de biocombustibles*

El uso de simuladores en procesos químicos ha cobrado impacto en los últimos años esto debido a su versatilidad y aplicabilidad en la obtención de productos químicos usando procesos conocidos, tomando en consideración que se conocen los datos iniciales y condiciones de funcionamiento en las que operan todos los equipos involucrados. Mediante simulación de procesos se estudian diferentes opciones para reducir la demanda energética de un proceso (Ferchichi, Hegely y Lang, 2022, p.1).

Nhien, Long y Lee (2017, pp. 367-368) presentan un nuevo diseño de biorrefinería mejorada y térmicamente integrada para la producción de etanol celulósico a partir de biomasa lignocelulósica. En la sección de preconcentración, se evaluaron la destilación asistida por bomba de calor y la integración térmica de doble efecto, mientras que se utilizó una columna compartimentada de extracción (EDWC) combinada con tecnología térmica integrada y tecnología de intensificación para mejorar la eficiencia energética y la rentabilidad del sistema del proceso de purificación. La glicerina, un biodisolvente que se puede producir a partir de la producción de biodiésel, se utiliza como disolvente de extracción en la EDWC para garantizar una alta integración en el entorno de la biorrefinería. Todas las alternativas de configuración se simularon minuciosamente con Aspen Plus en función de la demanda de energía, el costo total anual (TAC) y las emisiones totales de dióxido de carbono (TCE). Los resultados de la simulación muestran que el proceso avanzado térmicamente integrado propuesto puede ahorrar hasta un 47,6 % y un 56,9 % de TAC y TCE en la sección de purificación, respectivamente, en comparación con el proceso de purificación convencional (Nhien, Long y Lee, 2017, p 368).

Taqvi, Dendena y Muhadizir (2016, p. 979) argumentan que a medida que los precios de la energía continúan aumentando, la demanda mundial de energía aumenta y es necesario mejorar la producción y la eficiencia de la energía, y la conservación de la energía es una preocupación clave en todos los sectores. La destilación es probablemente la operación unitaria más estudiada en términos de optimización y control (Taqvi, Dendena y Muhadizir, 2016, p. 979). Dado que las columnas de destilación son el principal equipo que consume mucha energía en las plantas químicas y considerando el aumento reciente en los costos de combustible, los ingenieros deben encontrar mejores estrategias operativas y sistemas de control (Taqvi, Dendena y Muhadizir, 2016, p. 979).

El proceso de recuperación de bioetanol ofrece una nueva alternativa a la destilación simple mediante la destilación de doble efecto y la destilación con bomba de calor para mejorar la eficiencia energética, muy utilizada en la industria para encontrar el proceso óptimo antes de la deshidratación del bioetanol optimizando las fluctuaciones de presión. Optimización del consumo de energía y los costos operativos (Singh, da Cunha y Rangaiah, 2019, pp. 2-5).

Entre las tecnologías de separación híbrida, la industria de los EE. UU., que es uno de los mayores productores de bioetanol, utiliza comúnmente la destilación seguida de la adsorción por cambio de presión para la recuperación y deshidratación del bioetanol (Patraşcu, Bildea y Kiss, 2017, p. 69). En este contexto, Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 2) mencionan que un estudio del proceso llevó al descubrimiento de que el bioetanol se producía al costo más bajo en comparación con dos técnicas ampliamente estudiadas, a saber, la destilación seguida de extracción Usos de la destilación etileno glicol (16% más caro) y destilación con bomba de calor utilizando etilenglicol (49% más caro, principalmente costes de producción de disolventes).

La purificación del bioetanol como combustible requiere un proceso de separación que demanda energía para concentrar las corrientes diluidas obtenidas en la etapa de fermentación y superar el comportamiento azeotrópico de la mezcla de etanol y agua. La secuencia de separación clásica consiste en tres columnas de destilación que realizan varias tareas que demandan energía: preconcentración de etanol, destilación extractiva y recuperación de solventes (Kiss, Luo y Bildea, 2015, p. 1307).

Kiss, Luo y Bildea (2015, pp. 1308-1309) presentaron un nuevo proceso de destilación extractiva asistida por bomba de calor en una columna de pared divisoria (DWC). En esta configuración, la corriente de vapor de etanol superior del DWC de extracción se vuelve a comprimir desde la presión atmosférica a más de 3,1 bar (por lo tanto, a una temperatura más alta) y se utiliza para alimentar la caldera lateral del DWC responsable de la evaporación del agua. Los resultados mostraron que la demanda de energía específica disminuyó de 2,07 kWh/kg (secuencia clásica) a solo 1,24 kWh/kg de etanol (CVD de extracción asistida por VRC), lo que resultó en un ahorro de energía de más del 40 % y una reducción del 24 % en los costos totales de producción anual (Kiss, Luo y Bildea, 2015, p. 1311).

Patraşcu, Bildea y Kiss (2017, p. 67) propusieron un nuevo proceso de destilación extractiva con bomba de calor que tiene lugar en una columna divisoria para la deshidratación de bioetanol. Este diseño integrado combina tres columnas de destilación en una sola unidad, ahorrando más del 40 % de energía con una demanda de energía específica de solo 1,24 kWh/kg de etanol.

La columna de partición extractiva (E-DWC) es una alternativa prometedora a los procesos actuales de recuperación y purificación de bioetanol y ha atraído el interés de la comunidad investigadora (Loy, Lee y Rangaiah, 2015, p. 413). En un estudio realizado por Loy, Lee y Rangaiah (2015, p. 414), se investigaron continuamente los procesos de E-DWC y adsorción por oscilación

de presión (PSA) para la recuperación/purificación de bioetanol y se realizó una evaluación económica después de la integración térmica y la optimización.

Para esto, se consideró una corriente de alimentación real que contenía 10% en peso de etanol, 89,9% en peso de agua y 0,1% en peso de dióxido de carbono y ambos procesos se simularon en Aspen HYSYS. El proceso de PSA consiste en eliminar la mayor parte del agua por destilación antes de deshidratar el PSA. En los últimos años, los bioproductos derivados de biomasa han despertado un gran interés en el desarrollo industrial de nuevos bioproductos, siendo necesario evaluar su potencial mediante el predesarrollo de biorrefinerías conocidas. Se han propuesto varios estudios para producir biocombustibles. En los recientes años los bioproductos obtenidos de biomasa han cobrado un gran interés en los desarrollos industriales de la producción de nuevos bioproductos, la estimación de su potencial es necesaria mediante un prediseño de las conocidas biorrefinerías. Se proponen varias investigaciones para obtención de biocombustibles.

Según Lee, Woo y Kim (2022, p. 1) el bioetanol se recupera comúnmente por destilación debido a la disponibilidad de abundantes biorresiduos como fuente de energía. La extracción es un proceso energéticamente eficiente conocido claramente que puede reemplazar a la destilación, no se han desarrollado solventes apropiados para la recuperación de etanol, se realizaron nuevas propuestas como disolvente de extracción un alcohol ramificado de cadena larga, 2-metil pentanol. Los modelos termodinámicos de sistemas de equilibrio vapor-líquido (VLE) y líquido-líquido (LLE) son usados en simulaciones moleculares y resultados experimentales para el desarrollo del proceso de extracción y concentración de etanol usando destilación extractiva de etilenglicol.

Un proceso de destilación por oscilación de presión parcialmente integrado por calor está diseñado para la separación de un azeótropo. Rui et al. (2016, pp. 2-3) manifiesta que un azeótropo de etilendiamina/agua de punto de ebullición máximo se puede diseñar en el simulador Aspen Plus y Aspen Dynamics para estudiar simulaciones dinámicas y de estado estacionario rigurosas.

La producción de etilenglicol (EG) por medio de gas de síntesis derivado del carbón ha sido una alternativa a la ruta del petróleo, donde una cantidad determinada de producto de la mezcla de EG y 1,2-butanodiol (BDO) se produce inevitablemente como un producto de bajo valor agregado. Por lo tanto, es muy deseable diseñar un proceso de separación con un alto rendimiento económico para esta mezcla azeotrópica (Mao et al., 2020, pp. 2-3).

Mediante el uso de Aspen Plus se diseñan y simulan procesos de destilación por oscilación de presión (PSD) sin y con ayuda de integración de calor para recuperar EG y BDO de alta pureza del producto de la mezcla (Mao et al., 2020, p. 3). El mejor rendimiento económico tiene el proceso de destilación por oscilación de presión integrado a calor completo, con una disminución del TAC del 35 %, mientras que el mejor rendimiento medioambiental tiene el proceso de destilación por oscilación de presión flash de fondo, con una disminución de las emisiones de CO₂ de un 95 % (Mao et al., 2020, p. 4).

Lee, You y Chen (2022, pp. 2-3) presentan un desarrollo conceptual y un método de optimización para un proceso de destilación reactiva/cambio de presión sostenible y eficiente desde el punto de vista energético para la separación de mezclas ternarias de tetrahidrofurano/etanol. /agua y tres azeótropos, primero elimine el componente de agua del sistema ternario agregando reactivos a una columna de destilación reactiva y luego separe la mezcla azeotrópica binaria restante mediante destilación por oscilación de presión. Además, el enfoque utilizado es la integración de calor para reducir aún más el consumo de energía. Las evaluaciones muestran que el costo anual total y las emisiones de CO₂ del proceso propuesto de destilación por oscilación de presión/reactiva con (y sin) esquemas de integración de calor se pueden reducir significativamente en un 50,16 % (54,80 %) y un 53,00 % (59,11 %) y el ingreso neto total podría reducirse adecuadamente aumentando en un 12,19% (Yang et al., 2020, p.2).

Yang et al (2020, pp.2-3) propusieron un diseño energéticamente eficiente de un proceso de fermentación de acetona-butanol para purificar biobutanol, que tiene un gran potencial como combustible para el transporte. La fermentación de acetona-butanol-etanol (ABE) es un método actual para la producción de biobutanol, y se propone una secuencia de separación eficiente para purificar los componentes individuales de la fermentación. Según el uso actual de modelos termodinámicos, existen varias alternativas a la acetona, como primera propuesta es la integración de la rectificación y la purificación del etanol reduce los costes anuales totales en un 57 % y un 52 %, respectivamente, y el butanol, la acetona y el etanol alcanzan un objetivo de pureza del 99,5 %.

2.1.2 Redes neuronales artificiales en los procesos químicos

Las redes neuronales artificiales (RNA) se utilizan en una gran variedad de aplicaciones de procesamiento de datos, donde se requiere la extracción de información y el análisis de los datos en tiempo real. (Jesús et al., 2016, p. 213). Son un conjunto interconectado de elementos de procesamiento simples, las neuronas, que pueden operar relaciones complejas y no lineales entre los datos de entrada y salida sin poseer conocimiento previo de estas relaciones (Manohar y Divakar 2005, p. 3375). Una de las principales ventajas de las redes neuronales es que la mayor carga computacional se requiere únicamente en la etapa de entrenamiento. Una vez que la red neuronal se entrena para una tarea en particular, su operación es relativamente rápida y con ello se pueden identificar rápidamente muestras desconocidas (Jesús et al., 2016, p. 213).

En un artículo de Sánchez et al (2017, p.138) propusieron que las redes neuronales artificiales (ANN) son técnicas de modelado de alta potencia inspiradas en cómo las neuronas biológicas realizan funciones de aprendizaje y memoria. Las redes neuronales artificiales ofrecen varias ventajas sobre los métodos de modelado tradicionales, ya que pueden modelar sin hacer suposiciones sobre la naturaleza de los mecanismos fenomenológicos, comprender la base

matemática del problema que subyace al proceso y aprender relaciones tanto lineales como no lineales.

El ARN, un modelo computacional capaz de imitar las propiedades fundamentales del cerebro humano, como la adaptación, la auto organización y la tolerancia a fallas, ha experimentado un aumento exponencial en las aplicaciones en casi todos los campos de investigación, ya que aborda los desafíos a los que se han enfrentado los enfoques tradicionales a datos estadísticos. Se puede resumir que han sido ampliamente utilizados para la identificación, análisis, predicción, identificación y optimización del diseño de modelos de sistemas (Huatangari, Toledo y Valverde, 2020, p. 110).

Ekpenyong et al (2021, p. 476) llevaron a cabo el análisis de ARN de una cepa basófila de agua dulce de *Pseudomonas aeruginosa* cultivada en medio basal con residuos de aceite de cocina produjo un metabolito tensioactivo identificado como glicolipopéptido. Las condiciones del bioproceso consideradas son la temperatura, el pH, la agitación y la duración, y el modelado comparativo se realiza utilizando técnicas de redes neuronales artificiales y estadísticas (ANN) para predecir y optimizar el rendimiento del producto utilizando una matriz de diseño de rotación compuesta central (CCRD). El modelo de glucopéptidos se predijo mediante la significancia de RSM ($P < 0,001$, $R^2 0,9923$) al cuadrado con un error cuadrático medio de 3,6661. Por otro lado, el modelo de red neuronal devuelve un valor R^2 de 0,9964 con un error cuadrático medio de 1,7844. Sharma y Singh (2012, p.9), proporcionaron una revisión profunda sobre el uso de las redes neuronales en el control de procesos químicos mediante una simulación dinámica para comprender las particularidades del proceso, en de obtención del Éter etil tert-amílico mediante la aplicación de una columna de destilación reactiva.

La gran versatilidad de las aplicaciones de las Redes Neuronales Artificiales les permite ser capaces de predecir con precisión el rendimiento por destilación por membrana por cámara de aire para diferentes condiciones de funcionamiento, se logró demostrar que dichas predicciones de la RNA y los datos experimentales están en concordancia mostrando un coeficiente de correlación de 0.992, para evidenciar de manera detallada se realiza un análisis de la varianza (ANOVA), según la prueba ANOVA, el modelo RNA es estadísticamente válido y puede emplearse para la predicción del índice de rendimiento (Khayet y Cojocar, 2012, p.179).

Mulero et al (2017, p. 49), modelaron una RNA para la obtención del cálculo y la predicción de la tensión superficial de los alcoholes. Para el entrenamiento, validación y la prueba del modelo de red se consideró 4316 valores de tensión superficial de 147 alcoholes, el 70% de los datos se utilizaron en entrenamiento de la RNA y el 10% para comprobar la capacidad de predicción del modelo propuesto. Luego de probar varias arquitecturas, la que dio mejores resultados incluye una capa de entrada que usa temperatura, temperatura del punto crítico, densidad crítica y radio de giro (cuatro variables independientes). El modelo propuesto se considera como una herramienta muy precisa para reproducir los datos de tensión superficial actualmente disponibles

para los alcoholes con el potencial de poder predecirlos (Eze y Masuku, 2018, p. 84). Los resultados obtenidos demostraron tener menores desviaciones de los datos experimentales comparados con resultados anteriores expuestos en literatura relevante. El modelo fue capaz de trazar la relación entre los parámetros de interacción binaria, dicha relación se puede aplicar para la predicción de solubilidades gas-líquido desconocidas sin necesidad de ejecutar nuevos experimentos detallados (Eze y Masuku, 2018, p. 84).

2.2 Referencias teóricas

2.2.1 Bio etanol

El bioetanol es un biocombustible de origen vegetal que se produce a partir de la fermentación de materia orgánica rica en azúcar y de la transformación en azúcar del almidón presente en los cereales. Principalmente es usada en motores de explosión como sustituto de la gasolina o aditivo. El bioetanol basa su producción en el proceso conocido como fermentación alcohólica. En todos los casos se parte de almidón o celulosa (dependiendo de la materia prima). Una vez hidrolizados para obtener la glucosa, ésta se somete a fermentación de donde se obtiene el etanol (Inteligencia, 2017, p. 14).

2.2.1.1 Especificaciones

El etanol es un excelente combustible para motores ya que presenta las siguientes características (Inteligencia, 2017, p. 14):

- Tiene un índice octano mayor que la gasolina.
- Su presión de vapor es menor al de la gasolina, lo que resulta en una emisión por evaporación menor.
- Es menos inflamable que la gasolina, lo cual reduce el número y la severidad de los incendios de los vehículos.
- El contenido energético del etanol es menor que la gasolina (aproximadamente 2/3 partes), pero su rendimiento es similar
- La comparación de las propiedades del etanol y la gasolina se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 1-2: Propiedades del etanol la gasolina.

PROPIEDAD	GASOLINA	ETANOL
Peso molecular	100-105	46.7
Carbono % peso	85-88	52.2
Hidrógeno % peso	12-15	13.1
Oxígeno % peso	0	34.7
Presión de vapor Reid, psi	8-15	2.3
Índice de octano	100/90	108/92
(R + M)/2	86-94	100
Solubilidad en agua a 70°F, % Vol	-	100
Punto de congelación, °F	-40	-173.2
Flash point, °F	-45	55
Temperatura de autoignición	495	793

Fuente: Inteligencia (2017, p. 15).

2.2.1.2 Aplicaciones del bioetanol

Es utilizado principalmente como combustible en mezcla con gasolina aunque el bioetanol tiene otras aplicaciones como las siguientes (Inteligencia, 2017, p. 19):

- Combustible para celdas por medio de reacción termoquímica.
- Combustible para generar electricidad por medio de combustión térmica.
- Sistemas de co-generación.
- Materia prima en la industria química
- Combustible de transporte para sustituir o mezclar con gasolina
- El bioetanol puede usarse como oxigenante en gasolinas (6%)
- Mezcla gasolina (85%)
- Sustituto de gasolina en vehículos Flex Fuel (Brasil)

El bioetanol es un alcohol etílico de alta pureza, anticorrosivo y oxigenante que es empleado como combustible mezclándolo con las naftas en diferentes proporciones, considerado una energía renovable y su empleo disminuye la emisión de gases contaminantes a la atmósfera de forma más amplia, lo que es un gran aporte para disminuir la contaminación ambiental y como consecuencia, el calentamiento global (Bioetanol Rio Cuarto S.A., 2017).

2.2.2 Alcohol etílico

El alcohol etílico también conocido como etanol, alcohol vínico y alcohol de melazas, es un líquido incoloro y volátil de olor agradable, que puede ser obtenido por dos métodos principales: la fermentación de las azúcares y un método sintético a partir del etileno (Téllez y Cote, 2006, p. 33).

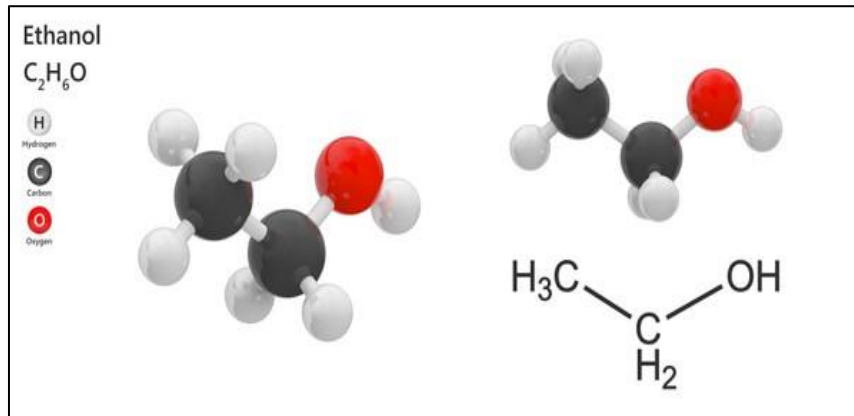


Ilustración 1-2: Estructura química del alcohol etílico

Fuente: Téllez y Cote (2006, p. 33).

Se activa con algunos solventes y derivados de celulosa y forma azeótropos binarios y ternarios con el agua y los principales acetatos, facilitando procesos de impresión y pintado. Es de gran aplicación en la industria por su bajo contenido de humedad y se utiliza como materia prima en procesos de síntesis orgánica e industria química (Cornejo, 2021).

2.2.3 Azeótropo

Es una mezcla líquida de dos o más compuestos químicos que tienen un comportamiento similar a como si estuvieran formados de manera individual y con características de punto de ebullición definidos. Los puntos de ebullición en estas mezclas suelen ser más bajos o más altos que los de cualquier componente que forme parte de la mezcla, por esta razón no es posible modificar su composición por etapas sucesivas de evaporación y condensación (destilación fraccionada) (Cavendish Marshall Corporation, 2003, p.663).

Mantiene su composición y punto de ebullición durante un proceso de destilación. Este comportamiento de los azeótropos se puede producir cuando una mezcla hierve o ebulle para producir vapor, el cual, cuenta con la misma composición del líquido (Noguera, 2020).

Noguera (2020) considera que el punto de ebullición de un azeótropo puede llegar a una temperatura media, más baja o incluso mayor a la de cada uno de los componentes por separado, de este modo se puede decir que, sigue siendo una mezcla líquida y puede conservar la misma composición que tenía al inicio de la ebullición.

2.2.4 Separación o ruptura de un azeótropo

La destilación fraccionada no suele ser de mucha utilidad a la hora de separar los componentes de un azeótropo o romper la mezcla azeotrópica. Para ello, se requiere el uso de técnicas de separación o métodos más elaborados, entre los cuales tenemos los siguientes:

- **Destilación por oscilación de presión:** Bastante común para romper una mezcla azeotrópica, es un método físico, para ello, se varía la presión de destilación con el fin de cambiar la composición de la mezcla y poder enriquecer el destilado con el componente deseado (saltarse el azeótropo) al final del proceso (Noguera, 2020).
- **Destilación azeotrópica:** Método químico muy eficiente que consiste en adicionar un componente de arrastre, que tenga la particularidad de alterar la interacción de las moléculas (volatilidad) de los componentes del azeótropo. El componente de arrastre puede reaccionar con uno de los componentes en algunos casos, generando un compuesto no volátil y haciendo más fácil la separación. El método posee una desventaja, se tiene que retirar el componente de arrastre de la mezcla (Noguera, 2020).
- **Pervaporación:** Es un método de separación utilizado para mezclas líquidas miscibles, hace uso de membranas y se basa en obtener dos corrientes líquidas, concentradas cada una de ellas en los componentes de la mezcla inicial, a partir de una corriente de alimentación de la mezcla a separar. Se utiliza una membrana más permeable a un componente de la mezcla que al otro, de esta manera, se logra la separación con una especie de filtrado (Noguera, 2020).

2.2.5 Destilación

Es una operación unitaria con el objetivo de separar los componentes de mezclas, pueden ser líquidas o vapor (Maroto Valiente y Muñoz, 2013, p. 252). La destilación es el proceso de separación más significativo en la industria química, a pesar de consumir mucha energía (Chia, Duanmu y Sorensen, 2021, p.153).

De manera práctica, la destilación se puede dar por dos métodos principales. El primero se basa en la producción de vapor mediante la ebullición de la mezcla líquida a separar y la condensación de los vapores, sin dejar que exista ningún tipo de recirculamiento. Para este método no existe reflujo.

El segundo se basa en el retorno de una porción del condensado a la columna de destilación en condiciones tales que este líquido se encuentra en íntimo contacto con los vapores en su camino, ambos métodos se pueden realizar como un proceso continuo (McCabe, Smith y Harriott, 2017, p. 663).

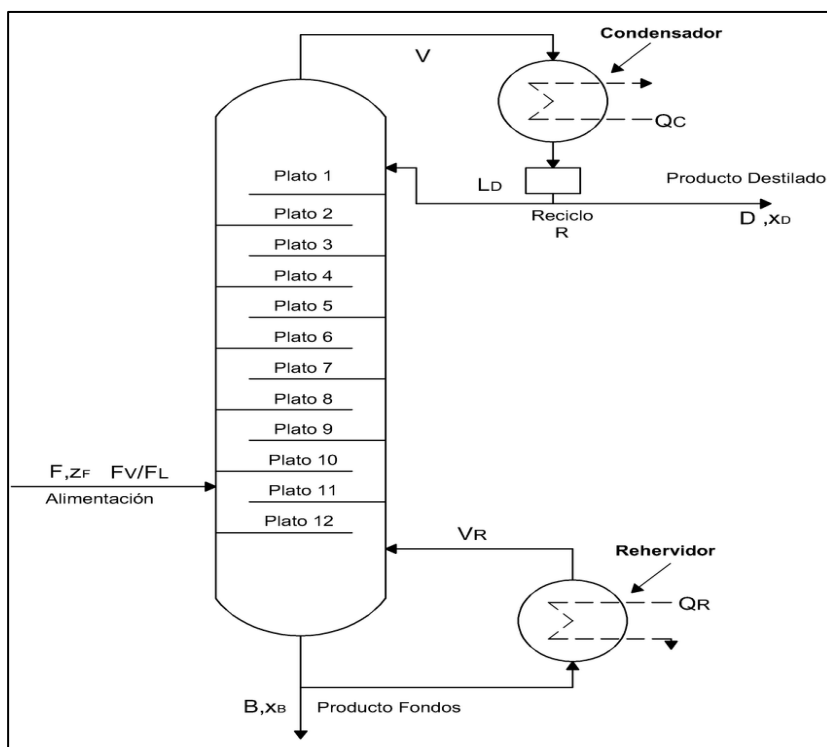


Ilustración 2-2: Diagrama esquemático de una columna de destilación

Fuente: Alzate (2010, p. 8).

2.2.6 Producción de bioetanol

El bioetanol se produce por fermentación alcohólica de levadura. La levadura fermenta azúcares simples a partir de biomasa y produce etanol y dióxido de carbono. En el caso del maíz, el almidón del grano es el único componente que se convierte en alcohol. Para ello se utilizan enzimas especiales que hidrolizan el almidón en azúcares simples como la glucosa (Bietanol Rio Cuarto S.A., 2017).

El alcohol obtenido como resultado de la fermentación alcohólica se destila. El objetivo de la destilación es obtener alcohol de suficiente calidad y concentración (95% v/v). Este alcohol luego se deshidrata y el agua se absorbe a través de los tamices moleculares donde la concentración del alcohol destilado es 99.5% v/v. Es la limpieza requerida para el uso de combustible (Bietanol Rio Cuarto S.A., 2017). Se consideran dos importantes procesos de producción de bioetanol.

2.2.6.1 Fermentación

En esta fase, la glucosa y algo de fructosa se fermentan en etanol y dióxido de carbono mediante la circulación continua de *Saccharomyces cerevisiae* desde una centrífuga ubicadas aguas abajo del recipiente de fermentación. Además de la producción de etanol, se considera la producción estequiométrica de biomasa y otras sustancias como acetaldehído, glicerol y alcoholes de fusel.

Los gases formados durante la fermentación se eliminan y se envían a una columna de adsorción, donde se debe recuperar en masa el 98% del etanol transportado (Cardona Alzate et al., 2005, p. 189).

2.2.6.2 Separación y deshidratación

El etanol se extrae del caldo de fermentación por destilación y adsorción por tamiz molecular para obtener etanol con una pureza del 99,5% en peso. La destilación se realiza en dos columnas, la primera separa el CO₂ disuelto (que se envía a la columna de absorción) y la mayor parte del agua, resultando un destilado con un contenido de etanol del 50 % en peso y una composición inferior al 0,1 %; El etanol obtenido por absorción del gas de fermentación se añade a esta columna con el caldo de fermentación. En la segunda columna, el etanol se concentra hasta una composición casi azeotrópica. El agua restante se eliminó de la mezcla mediante adsorción en fase gaseosa en dos tamices moleculares. El producto de recuperación del tamiz se recicla a la segunda columna de destilación (Cardona Alzate et al., 2005, p. 189).

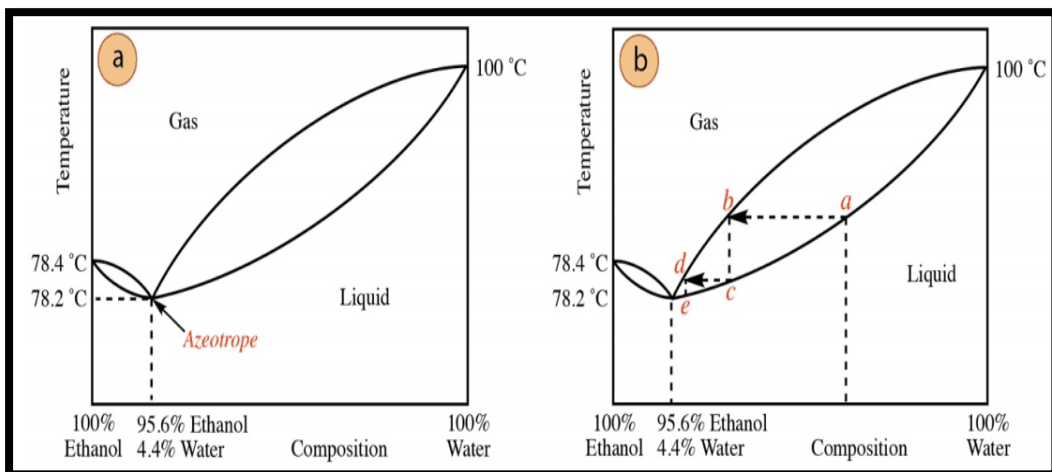


Ilustración 3-2: Curva de destilación azeótropo etanol – agua

Fuente: Bautista (2017, p. 52).

El azeótropo etanol- agua es considerado de punto mínimo de ebullición representado por la intersección de las dos formas de lágrimas, como se indica en la ilustración, esta curva demuestra por qué no se puede destilar una mezcla de etanol y agua para producir un destilado con una concentración superior al 95,6% etanol. Las concentraciones superiores al 95,6% sólo se pueden destilar cuando ya no hay agua en el sistema (momento en el que el diagrama de fases de la figura ya no es aplicable).

Dado que el agua forma azeótropos de punto minino de ebullición con muchos compuestos orgánicos, queda claro por qué el agua debe eliminarse siempre cuidadosamente con agentes

secantes antes de la destilación: si no se eliminan los rastros de agua, se producirá un destilado con contenido de humedad (Bautista, 2017, pp. 49-57).

2.2.7 Software de simulación de procesos

El software de simulación ayuda a predecir el comportamiento del sistema. Se puede utilizar para evaluar nuevos diseños, diagnosticar problemas con diseños existentes y probar sistemas en condiciones difíciles de reproducir, como satélites en el espacio (MathWorks, 2022b). SEGÚN MathWorks (2022b) para ejecutar una simulación se requiere un modelo matemático del sistema, que se puede representar como un diagrama de bloques, un diagrama esquemático, un diagrama de estado o incluso un código. El software de simulación calcula el comportamiento del modelo a medida que cambian las condiciones u ocurren eventos. El software de simulación también incluye herramientas de visualización como pantallas de datos y animaciones 3D para ayudar a monitorear las simulaciones mientras se ejecutan (MathWorks, 2022b).

Los ingenieros y científicos usan software de simulación por una variedad de razones (MathWorks, 2022b):

- El modelado y el modelado son menos costosos que la creación de prototipos y las pruebas de hardware.
- El software de simulación se puede utilizar para probar diferentes diseños antes de que se integren en el hardware.
- El software de simulación se puede interconectar con el hardware para probar la integración de todo el diseño.

2.2.7.1 Software más usado para la simulación de procesos

Es primordial saber que existen simuladores dedicados a la industria de procesos y la industria química, con el objetivo de mejorar e incrementar la eficiencia de las mismas a permitir hacer simulaciones de diferentes procesos antes de que en realidad se lleguen a efectuar, las cuales producen resultados que pueden ser analizados para una futura realización de los mismos y de este modo analizar todos los posibles cambios que puede llegar a tener el proceso sin necesidad de construir una planta piloto (Simuluc, 2016).

Existe una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, algunos de las cuales son poderosas herramientas de cálculo, con inmensos bancos de datos que contienen las propiedades físicas de miles de compuestos y sustancias químicas, selección de modelos termodinámicos, cálculos de equipos (teórico y real), análisis de costo, estado de agregación y condiciones de operación, que le dan al simulador la ventaja de una gran versatilidad (Simuluc, 2016). Estos son los softwares más usados:

- **HYSYS:** Un programa interactivo centrado en la ingeniería y simulación de procesos que se puede utilizar para resolver una variedad de problemas relacionados con los procesos químicos (Aspentech, 2022a). El simulador tiene una interfaz muy fácil de usar y además de permitir el uso de operadores lógicos y herramientas para ayudar a simular varios procesos, también es un simulador bidireccional, ya que el flujo de información es bidireccional (hacia adelante y hacia atrás), puede calcular las condiciones desde la corriente de entrada hasta la operación en base a las condiciones correspondientes a la corriente de salida sin cálculo iterativo, y tiene un entorno de simulación modular para estado estacionario y estado dinámico; es un software para la simulación de plantas petroquímicas y afines (Aspentech, 2022a).
- **ASPEN PLUS:** Advanced System for Process Engineering (ASPEN) es el líder del mercado en herramientas de modelado de procesos para el desarrollo conceptual, la optimización y el control del rendimiento en las industrias química, de polímeros, química especializada, metales y minerales. Aspen Plus es un simulador modular continuo fijo (en su última versión permite estrategias orientadas a ecuaciones (Aspentech, 2022b). Actualmente, es probablemente el más utilizado en la industria para modelar procesos: químicos y petroquímicos, refinación, generación de energía, metales y minerales, papel y pulpa y otros como procesamiento de gas y petróleo, con la base de datos comercial más grande entre los procesos, simuladores que incluyen el comportamiento de iones y electrolitos; también modela y simula cualquier tipo de proceso en el que el material y la energía fluyen continuamente de una unidad de proceso a otra, utilizando funciones de herramientas de optimización de procesos y costos, generando resultados gráficos y tabulares y más (Aspentech, 2022b).
- **CHEMCAD:** Es un paquete de módulos que abarca cálculo y diseño de intercambiadores de calor (CC-THERM), simulación de destilaciones dinámicas (CC-DCOLUMN), simulación de reactores por lotes (CC-ReACS), simulación de destilaciones por lotes (CC-BATCH), simulación de redes de tuberías (CC-SAFETY NET) (Chemstations, 2022, p.1). El sistema se utiliza en todo el mundo para el diseño, operación y mantenimiento de procesos químicos en diversas industrias, incluida la exploración de petróleo y gas; se encuentran en la naturaleza en plantas químicas, farmacéuticas, de biocombustibles e industriales (Chemstations, 2022, p.1). En general, el software como herramienta de productividad tiene muchos beneficios, que incluyen: aumentar la productividad utilizando la información obtenida de los cálculos de simulación diarios relacionados con las condiciones operativas, aumentar la rentabilidad operativa a través de operaciones más eficientes, optimizar y abordar los cuellos de botella existentes en los procesos y equipos, diseñar nuevos procesos y equipos, reduciendo los costos y la inversión de capital (Chemstations, 2022, p.1).
- **COCO:** Este es un emulador gratuito y de código abierto. Fue desarrollado por Amsterdam utilizando el estándar abierto CAPE-OPEN (software libre), estable (Coco, 2022, p.1). Incluye

un entorno para diagramas de flujo de procesos, operaciones unitarias, paquetes de cinética de reacción y paquetes de termodinámica. Dado que está desarrollado según el estándar abierto CAPE-OPEN, asegura la compatibilidad con otras aplicaciones como HTRI y Prosim. El ejecutable también incluye un simulador de procesos de separación (destilación, extracción, absorción) llamado ChemSep en su versión ligera (hasta 150 pasos de equilibración y 10 componentes) (Coco, 2022, p.1).

- **DWSIM:** Es un simulador de procesos químicos de código abierto y descarga libre que cumple con el estándar Cape-Open, es decir, cumple con el estándar de ingeniería que permite la inter operatividad de soluciones, lo que le da al usuario la opción de combinar interfaces de modelamiento de diferentes software o programas entre sí, siendo el primer software de código abierto en utilizar el estándar Cape-Open, el cual es ampliamente utilizado por simuladores de procesos comerciales (Noguera, 2022). Cuenta con una interfaz gráfica bastante completa y fácil de utilizar, por lo que no tiene nada que envidiar a opciones comerciales, como Hysys o Pipephase. Fue desarrollado por el ingeniero Daniel Wagner Oliveira de Madeiros en el año 2004 a partir de macros de VBA de Excel que implementaban PREOS y un algoritmo básico de flash (Noguera, 2022).

2.2.8 ChemSep

Es un simulador de columnas de destilación, absorción y operaciones de extracción con una interfaz fácil e intuitiva. Combina el modelo de columna de etapas de equilibrio clásico con un modelo de columna de no-equilibrio en una interfaz fácil e intuitiva. Su base de datos abarca 400 productos químicos y se puede probar la versión totalmente gratuita limitada a 150 etapas y 10 componentes (Kooijman y Taylor, 2020).

Tiene uso de manera independiente o integrada con un diagrama de flujo, proporcionando un robusto simulador de columnas al no requerir conjeturas iniciales. Permite una gran variedad de configuraciones y especificación de columnas. Se lo puede ejecutar con todos los programas comerciales de simulación que cumplan con CAPE-OPEN (Kooijman y Taylor, 2020).

2.2.9 Red Neuronal Artificial

Las redes neuronales artificiales son un modelo inspirado en el funcionamiento del cerebro humano. Está formado por un conjunto de nodos conocidos como neuronas artificiales que están conectadas y transmiten señales entre sí. Estas señales se transmiten desde la entrada hasta generar una salida (Atria Innovation, 2019).

Aprender modificándose automáticamente a sí mismo es su objetivo principal de forma que puede llegar a realizar tareas complejas que no podrían ser realizadas mediante la clásica programación

basada en reglas. Se pueden automatizar funciones que en un principio solo podrían ser realizadas por personas (Atria Innovation, 2019).

2.2.9.1 Funcionamiento

El funcionamiento de las redes se asemeja al del cerebro humano. Las redes reciben una serie de valores de entrada y cada una de estas entradas llega a un nodo llamado neurona. Las neuronas de la red están a su vez agrupadas en capas que forman la red neuronal. Cada una de las neuronas de la red posee a su vez un peso, un valor numérico, con el que modifica la entrada recibida. Los nuevos valores obtenidos salen de las neuronas y continúan su camino por la red (Atria Innovation, 2019).

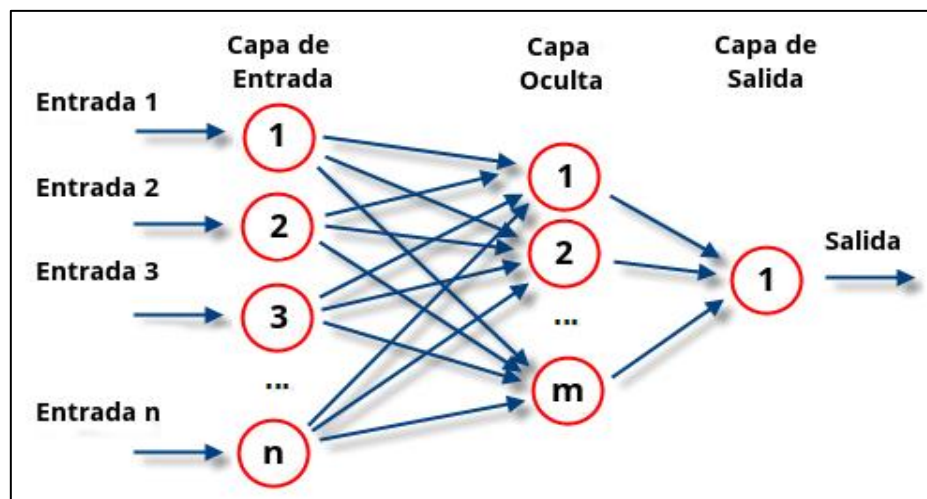


Ilustración 4-2: Ejemplo de RNA

Fuente: Atria Innovation (2019).

2.2.9.2 Entrenamiento de la red neuronal

Para lograr que una red neuronal realice las funciones deseadas, es necesario entrenarla. El entrenamiento de una red neuronal se realiza modificando los pesos de sus neuronas para que consiga extraer los resultados deseados. Para ello se introduce datos de entrenamiento en la red, en función del resultado que se obtenga, se modifican los pesos de las neuronas según el error obtenido y en función de cuanto haya contribuido cada neurona a dicho resultado. Este método es conocido como Back propagation o propagación hacia atrás. Con este método se consigue que la red aprenda, consiguiendo un modelo capaz de obtener resultados muy acertados incluso con datos muy diferentes a los que han sido utilizados durante su entrenamiento (Atria Innovation, 2019). Pese a que en la actualidad se ha popularizado su uso, las redes neuronales existen desde la década de 1950. Sin embargo, la poca potencia de los equipos de aquella época y la inexistencia de

algoritmos que permitiesen a las redes aprender de forma eficiente provocó que estas dejaran de usarse (Atria Innovation, 2019).

2.2.9.3 Funciones de las redes neuronales

El alcance de las funciones de las redes neuronales es muy amplio, debido a su funcionamiento (Atria Innovation, 2019).

- Son capaces de aproximar cualquier función existente con el suficiente entrenamiento.
- Son utilizadas para tareas de predicción y clasificación.
- Su rango de actuación es amplio y de gran utilidad hoy en día, no solo se utilizan para aplicaciones de Industria 4.0 (reconocimiento de piezas y defectos que no han sido introducidos previamente, por ejemplo), sino que son utilizados en otras áreas como la economía, en la que pueden ayudar a predecir cuanto van a variar los precios a lo largo de los años, o incluso en medicina donde son de gran ayuda para diagnosticar diversos problemas de salud.

Se han convertido en una pieza clave para el desarrollo de la Inteligencia Artificial, es uno de los principales campos de investigación y el que más está evolucionando con el tiempo, ofreciendo cada vez soluciones más complejas y eficientes (Atria Innovation, 2019).

2.2.9.4 Ventajas y desventajas

Para hacer uso de una RNA en procesos industriales o químicos, se debe tener en cuenta su constitución y fundamentos, la capacidad que posee para aprender mediante el entrenamiento es una capacidad que le hace semejante al cerebro humano que tiene la capacidad de disolver información importante, por eso tiene varias ventajas y desventajas como se indican en la Tabla 2-2.

Tabla 2-2: Ventajas y desventajas de la RNA

Ventajas	Desventajas
<ul style="list-style-type: none"> • No se requiere tener un aprendizaje estadístico avanzado • Problemas de no repetitividad poseen medición sensible. • Se puede reaprender la capacidad para reforzar su precisión cuando se consigan nuevos datos. 	<ul style="list-style-type: none"> • Susceptible a la sobre figuración. • Convergencia incierta. • Se necesita tener una base de datos extensa. • Por lo general, no se conoce la estructura óptima de la red (prueba y error).

<ul style="list-style-type: none"> • Posee diferentes algoritmos de entrenamiento. • Es flexible al momento de aumentar o eliminar las entradas y salidas. • Puede funcionar en modo online gracias a la rápida convergencia de la RNA. • Reordenamiento de múltiples entradas para lograr estimar múltiples salidas. • Facilidad de optimización, presenta un análisis no lineal asequible y que se adapte a grandes cantidades de datos. • Capacidad de mapeo no lineal que logran estimar cualquier característica cuantitativa discreta. • Tiene numerosas variables interconectadas para poder estudiar estructuras grandes y complicadas. • Los cálculos iterativos para resolver las ecuaciones diferenciales no es necesario que sean largos o extensos. • Posee la ventaja de unirlo con otros enfoques de optimización. 	<ul style="list-style-type: none"> • Dificultad para identificar las posibles correlaciones de causa y efecto (caja negra). • Normativa limitada sobre cantidad y tipo de formación. • Los criterios de elección del mejor algoritmo de entrenamiento con la rápida convergencia de nuevos patrones, no se conocen bien. • Para la determinación del número de neuronas en la capa oculta no existe una norma señalada. • Las redes de capa oculta con una o dos neuronas poseen inestabilidad con neuronas insuficientes. • Pese a brindar estabilidad y precisión, se necesita más entrenamiento y validación de datos para la optimización mediante el algoritmo genético.
--	---

Fuente: (Veza et al., 2022, p.8365).

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

2.2.10 Matlab

Matlab es un lenguaje de programación y un entorno informático utilizado por muchos ingenieros, científicos, investigadores y organizaciones de todo el mundo. Se usa ampliamente en dominios científicos y de ingeniería, incluidos, entre otros, el aprendizaje profundo y el aprendizaje automático, el procesamiento de señales y las comunicaciones, el procesamiento de imágenes y videos, las finanzas computacionales y la robótica (Reis, Galha y Monteiro, 2022, p.1). A pesar de su amplia gama de usos, MATLAB parece ser percibido por muchos como una herramienta más especializada que como el posible lenguaje de elección de un programador (Reis, Galha y Monteiro, 2022, p.1). Fue fundada en 1984 por Jack Little y Cleve Moler, que identificaron la necesidad entre ingenieros y científicos de un entorno de computación más potente y productivo más allá de los proporcionados por lenguajes como Fortran y C. Combinaron su experiencia en matemáticas, ingeniería e informática para desarrollar MATLAB (MathWorks, 2022a).

2.2.10.1 Beneficios

- La funcionalidad se puede ampliar enormemente agregando cajas de herramientas.
- Alta eficiencia de codificación y productividad, ya que no requiere un compilador para su ejecución.
- Ideal para desarrollar aplicaciones de investigación científica.
- Matlab Coder permite convertir código para usar en otros lenguajes de programación, como C ++, Java y Python.
- Plataforma independiente.
- Facilita el desarrollo de la simulación científica gracias a la biblioteca incorporada

Los usos más comunes de MATLAB incluyen cálculos matriciales, desarrollo y ejecución de algoritmos, creación de interfaces de usuario (UI) y visualización de datos (Ponce C, 2010, p. 8). El entorno informático numérico de paradigmas múltiples permite a los desarrolladores interactuar con programas desarrollados en diferentes lenguajes, lo que permite aprovechar las fortalezas únicas de cada idioma para diversos fines (Ponce C, 2010, p. 8).

2.2.10.2 NEURONAL NETWORK TOOLBOX

El uso de esta caja de herramientas TOOLBOX se debe a las posibilidades para el diseño, inicialización, simulación y entrenamiento de modelos neuronales, conocidos por su uso generalizado son: perceptrones, redes lineales, redes de retropropagación, redes de base radial, aprendizaje asociativo y competencia, aplicaciones auto organizativas, aprendizaje de cuantificación vectorial, red Elman y red Hopfield. La caja de herramientas permite a los usuarios utilizar sus propias funciones, que pueden ser transferencia e inicialización, reglas de aprendizaje, funciones de entrenamiento y estimaciones de errores, para su uso posterior con funciones básicas; proporciona las herramientas y capacidades gráficas de MATLAB para comprender el comportamiento de la red (Ponce C, 2010, p. 11). Esta herramienta nos muestra (Ponce C, 2010, p. 11):

- Visualización gráfica de la matriz de pesos y vector de desplazamiento con el uso de los diagramas de Hinton,
- Representación de errores a lo largo del entrenamiento, mapas de superficie de error en función de pesos y vector de desplazamiento, etc.
- Esta herramienta cuenta con el soporte de MATLAB 4.2c y SIMULINK. La librería de SIMULINK posee modelos de capas de redes neuronales de cada clase de neurona efectuada en el toolbox de redes neuronales.

CAPÍTULO III

3 MARCO METODOLÓGICO

3.1 Método de estudio

Para el desarrollo del trabajo de titulación se tomó en cuenta los siguientes métodos de estudio:

- **Método deductivo:** Parte de una premisa general para obtener las conclusiones de un caso particular, pone énfasis en la teoría, modelos teóricos, explicación y abstracción; antes de recoger datos empíricos, hacer observaciones o emplear experimentos (Morán y Alvarado, 2010, p.12).

Este método se usó porque su orientación va desde lo general hacia lo específico, en cuanto a los objetivos planteados para este trabajo de titulación iniciamos en lo general que fue simular el proceso de destilación y recuperación de bioetanol y lo más específico que se realizó fue la determinación de variables de proceso, validación del artículo científico con la simulación, desarrollo de una RNA, la optimización del proceso y análisis estadístico el cual se lo realizó en la metodología en ese orden y se encuentra detallado y especificado. Además, en los resultados se especificó los resultados obtenidos desde la simulación hasta la RNA.

- **Método analítico:** Proceso cognoscitivo que consiste en descomponer un objeto de estudio mediante la separación de cada una de las partes del todo para estudiarlas en forma individual (Morán y Alvarado, 2010, p.12).

Este método se utilizó en el capítulo 2 para detallar las referencias teóricas en las que se basa el trabajo de titulación se tallo una a una los conceptos necesitados y de especial importancia para el trabajo, también se hará uso en capítulo 4 para detallar el análisis e interpretación de resultados paso a paso y en orden en cómo fueron obtenidos.

3.2 Selección del simulador

Para el desarrollo del trabajo de titulación se consideraron varios simuladores y se optó por usar el simulador QWSIM debido a que este simulador es de código abierto y de acceso al público, es decir, no requiere de licencias educativas y permisos para su descarga y uso. DWSIM posee características que lo hacen un simulador fácil de usar.

DWSIM es un simulador de procesos químicos ideal para todos los usuarios que requieran tener toda la potencia de simulación de los grandes softwares comerciales como Hysys o Aspen Plus, en una compacta presentación Open Source, que promete ser una herramienta completa para pruebas, estimaciones y escalado de procesos industriales.

3.2.1 Principales características de DWSIM

DWSIM es un poderoso software que permite realizar diferentes tareas de simulación, entre las cuales podemos destacar principalmente: operaciones unitarias, modelos termodinámicos, caracterizaciones de crudo y sistemas reactivos (Noguera 2022). Destaca por contar con ciertas características entre las que tenemos (Noguera 2022):

- **Software multiplataforma:** Al ser un software multiplataforma, puede ser descargado y ejecutado en diferentes sistemas operativos, como Windows, Linux, iOS, Android o MacOS.
- **Capacidad de realizar simulaciones dinámicas y de estado estacionario:** Cuenta con un solver modular paralelo que le permite realizar simulaciones tanto en estado estacionario, como simulaciones dinámicas.
- **Interfaz de Excel:** Viene equipado con un complemento de Excel que permite realizar cálculos termodinámicos en una hoja de Excel.
- **Automatización de API:** Permite al usuario crear, cargar modificar, ejecutar y guardar hojas de flujo directamente del código.
- **Termodinámica autónoma:** DWSIM integra los principales modelos termodinámicos disponibles de manera gratuita.

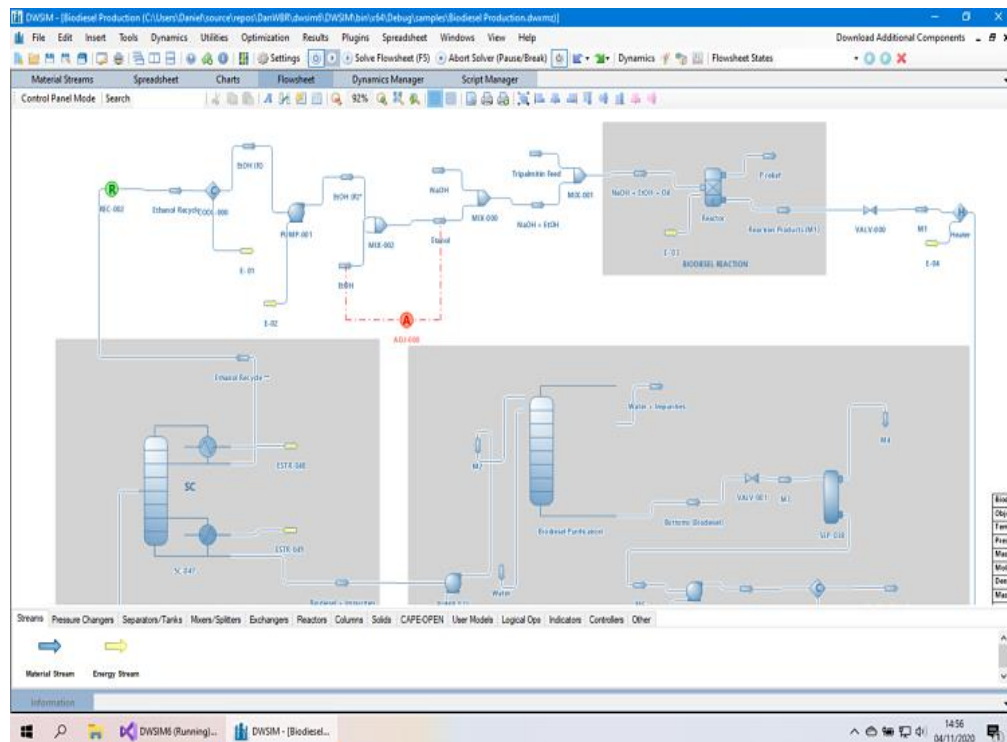


Ilustración 1-3: Interfaz del simulador

Fuente: Noguera (2022).

Tabla 1-3: Principales características de DWSM.

<p>Operaciones Unitarias</p>	<p>Separación, mezclado, splitter, expansión, compresión, intercambio de calor (enfriadores, calentadores), segmento de tubería, columna de acceso directo, válvulas, reactores, separador de componentes, placa de orificio, columnas de destilación/adsorción, separación de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo, Python Script y Diagrama de flujo de operaciones unitarias.</p>
<p>Modelos termodinámicos</p>	<p>GERG-2008, CoolProp, PC-SAFT, Peng-Robinson, Peng-Robinson (1978), Lee-Kesler, Soave-Redlich-Kwong, UNIFAC, UNIFAC modificado (Dortmund), UNIQUAC, Lee-Kesler-Plocker, NRTL, Ley de Raoult, IAPWS-IF97 Tablas de vapor, Electrolitos acuosos, Petróleo crudo, Black Oil, IAPWS-08 Agua marina y Agua Amarga.</p>
<p>Modelado termodinámico y simulación</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Modelar y simular controladores PID • Programar eventos • Monitorización de variables • Realizar matrices de causa y efecto • Ejecutar modo de panel de control en tiempo real • Medidores analógicos y digitales • Ejecutar campos de entrada e interruptores • Seleccionar indicadores
<p>Herramientas de DWSIM</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Ajuste de controlador PID • Regresión de datos binarios • Creador de compuestos • Curvas de destilación • Bulk y destilación de C7+ • Caracterización de petróleo • Gestor de reacciones
<p>Utilidades de DWSIM</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Envolvente de fase • Cálculo de hidratos • Propiedades de sustancias puras • Puntos críticos • Dimensionamiento de recipientes • Propiedades de flujo frío de petróleo • Hoja de cálculo
<p>Análisis de procesos</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Optimización restringida y multivariada • Análisis de sensibilidad

Fuente: Noguera (2022).

Elaborado por: Alvarez, Nicole, 2023

3.3 Ingeniería del proyecto

Para el presente trabajo de titulación se tiene planeado seguir la siguiente metodología dividida en varias etapas, el procedimiento planteado a cumplir paso a paso y de forma detallada para la correcta simulación y validación y correcto desarrollo de la RNA y su posterior validación se describe a continuación en la Ilustración 2-3.

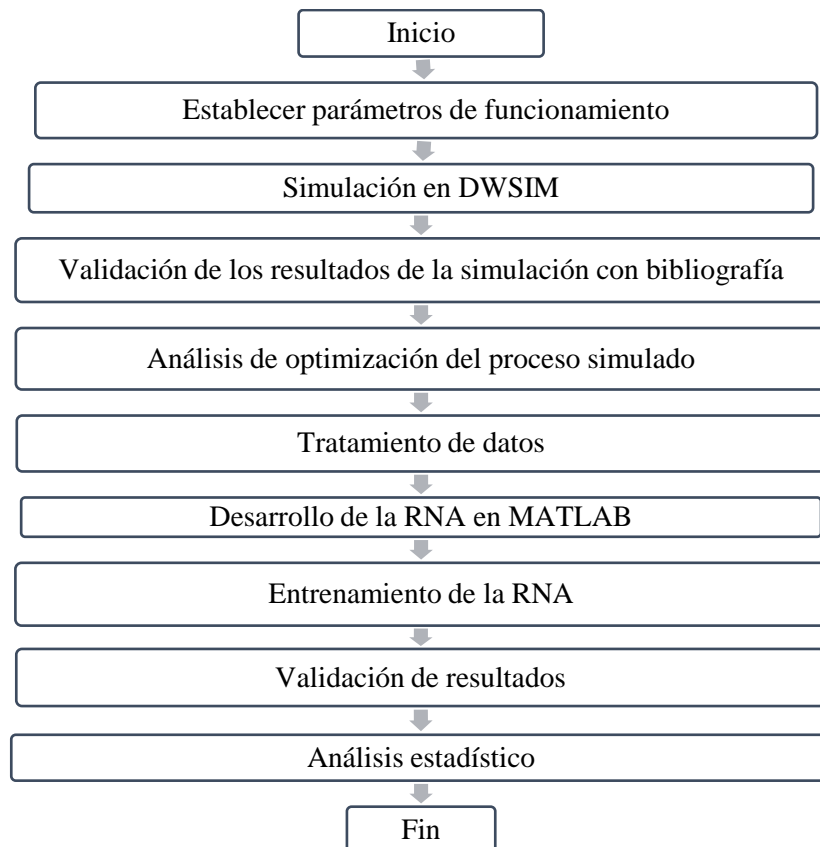


Ilustración 2-3: Metodología para el desarrollo de la RNA

Elaborado por: Álvarez, Nicole, 2022.

3.4 Establecer parámetros de funcionamiento

Mediante el diagrama de procesos para la obtención de bioetanol propuesto por Singh, da Cunha y Rangaiah (2019), quienes describen la destilación asistida por bomba de calor seguida de un proceso de adsorción por cambio de presión para la recuperación y deshidratación de bioetanol. Se definieron las composiciones iniciales de las líneas de alimentación a cada equipo (bombas, columnas de destilación, intercambiadores de calor, desgasificador, compresores), junto con el modelo termodinámico requerido para la ejecución de la simulación, así como otros parámetros requeridos de temperatura y presión entre otros para ejecutar la simulación.

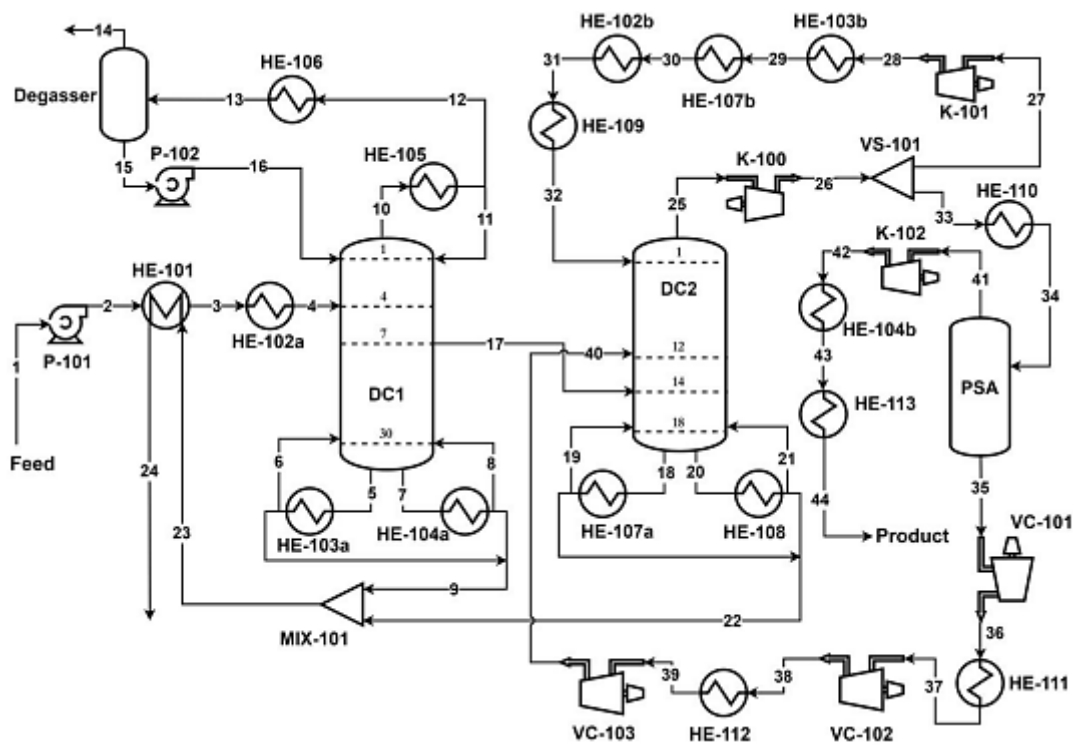


Ilustración 3-3: Diseño óptimo de la recuperación y deshidratación de bioetanol.

Fuente: Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 580).

3.4.1 Descripción del proceso

En el proceso de destilación asistida por bomba de calor seguida de un proceso de adsorción por cambio de presión, la corriente superior (Corriente 25) de DC2 se comprime inicialmente (relación de presión $\sim 1,8$) a una presión intermedia de 221 kPa y se divide en dos corrientes (Corrientes 27 y 33). El flujo 33 se enfría ligeramente antes de ingresar al sistema PSA. La otra corriente (Corriente 27) se comprime aún más (relación de presión $\sim 2,1$) a una presión suficientemente alta de 474 kPa para la integración de calor. Después de la adsorción de la corriente 34 en el sistema PSA, el etanol deshidratado (99,8 % en peso) se recomprime con vapor para usarlo como fuente de calor en el rehervidor DC1 (HE-104). Luego se enfría a 40°C para el almacenamiento. La corriente de purga (Corriente 35) del sistema PSA contiene una cantidad sustancial de etanol y, por lo tanto, se envía a una serie de tres compresores con enfriamiento intermedio, para reciclar a la etapa 12 de la segunda columna de destilación (DC2). Las corrientes inferiores de todas las columnas de destilación contienen principalmente agua (99,9% en peso).

Las siguientes tablas describen los valores óptimos de los flujos y los parámetros de diseño del proceso según Singh, da Cunha y Rangaiah (2019).

Tabla 2-3: Caudal másico y composiciones en principales flujos del proceso.

Parámetros	Corrientes			
	1 (Alimentación)	14 (CO ₂)	24 (Agua)	44 (Etanol)
Caudal másico (kg/h)	193000	225	173000	19300
Fracción másica de Etanol	0,100	0,133	0,0001	0,998
Fracción másica de Agua	0,899	0,014	0,9999	0,002
Fracción másica de Dióxido de carbono	0,001	0,854	0,0000	0,000

Fuente: Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 581).

Tabla 3-3: Parámetros de diseño del proceso.

Variable de diseño	Valor
Relación de división de la presión de en la corriente 26	0,71
Presión en la primera columna (kPa)	125
Presión en la segunda columna (kPa)	120
Pureza de etanol en la Corriente 9 (% en peso)	0,01
Pureza de etanol en la Corriente 22 (% en peso)	0,008
Recuperación de etanol en la Corriente 17 (%)	99,7
Pureza del CO ₂ en la Corriente 17 (ppm)	23
Temperatura de la Corriente 4 (°C)	98,0
Presión de adsorción (kPa)	200
Presión de desorción (kPa)	25
Pureza del etanol en la Corriente 41 (% en peso)	99,8

Fuente: Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 585).

3.4.2 Descripción de la integración de calor en el proceso

El diagrama de flujo implementa una integración de calor mediante intercambiadores, calderas y condensadores. A continuación, se describen las integraciones de calor para el proceso:

1. Pre calentamiento de la alimentación antes de ingresar a DC1, pre calentamiento de la Corriente 2 usando la Corriente 23 en HE-101 seguido de pre calentamiento de la Corriente 3 usando el calor sensible de la Corriente 30 en HE-102.
2. Calor sensible y latente de la corriente 28 (como resultado de la recompresión de vapor de la corriente 27) y el calor sensible y latente de la Corriente 42 (como resultado de la

recompresión de vapor de la Corriente 41) para proporcionar servicio de rehervidor DC1, en HE-103 y HE-104 respectivamente.

3. Calor latente y sensible de la Corriente 29 (como resultado de la recompresión de vapor de la Corriente 27 para proporcionar parte del servicio del rehervidor DC2 (HE-107).

En la siguiente tabla se describe el requerimiento energético en el proceso

Tabla 4-3: Descripción energética del proceso

Equipo	Energía (kW)
HE-101	15,291
HE-102	626
HE-103	13,873
HE-104	4,876
HE-105	846
HE-106	1
HE-107	2,301
HE-108	2,708
HE-109	1,625
HE-110	219
HE-111	329
HE-112	287
HE-113	1,379

Fuente: Singh, da Cunha y Rangaiah (2019, p. 589).

3.4.3 Paquete de propiedades termodinámicas

La elección de un modelo termodinámico adecuado suele ser el primer paso en la simulación de procesos. En el trabajo de investigación propuesto por Singh, da Cunha y Rangaiah (2019) mediante Aspen HYSYS simulan la destilación asistida por bomba de calor para la recuperación de bioetanol seguida de adsorción por oscilación de presión para la deshidratación de bioetanol, utilizando el modelo no aleatorio de dos líquidos (NRTL por sus siglas en inglés) logran modelar las fugacidades en fase líquida de agua y etanol.

3.5 Simulación en DWSIM

3.5.1 Proceso aplicado en DWSIM

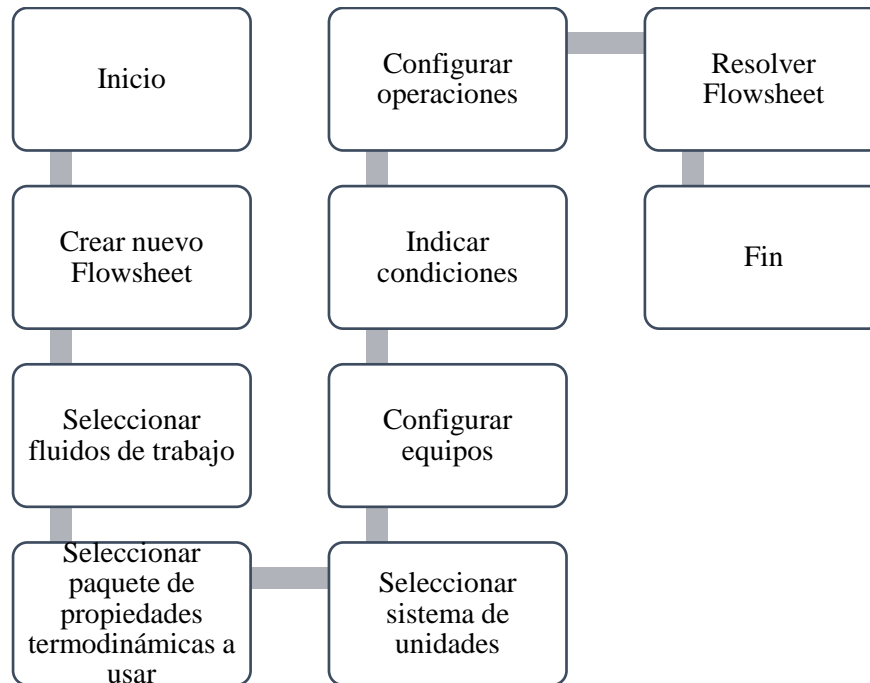


Ilustración 4-3: Procesos de simulación en DWSIM aplicado

Fuente: Alvarez, Nicole, 2023

A partir de los parámetros óptimos descritos por Singh, da Cunha y Rangaiah (2019) se simuló en DWSIM la destilación asistida por bomba de calor seguida de un proceso de adsorción por cambio de presión para la recuperación y deshidratación de bioetanol.

3.5.2 Condiciones de la alimentación

Tabla 5-3: Condiciones de la alimentación

Alimentación		
Object	Feed	
Temperature	25	C
Pressure	101,325	kPa
Mass Flow	193000	kg/h
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,1	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,001	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,899	

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

3.5.3 Condiciones de la primera columna de alta presión

Utilizando una columna de destilación ChemSep se asignan los parámetros correspondientes a las corrientes de entrada, corrientes de salida, cantidad de platos, presión, modelo termodinámico (NRTL) y demás especificaciones de la columna como se observa a continuación.

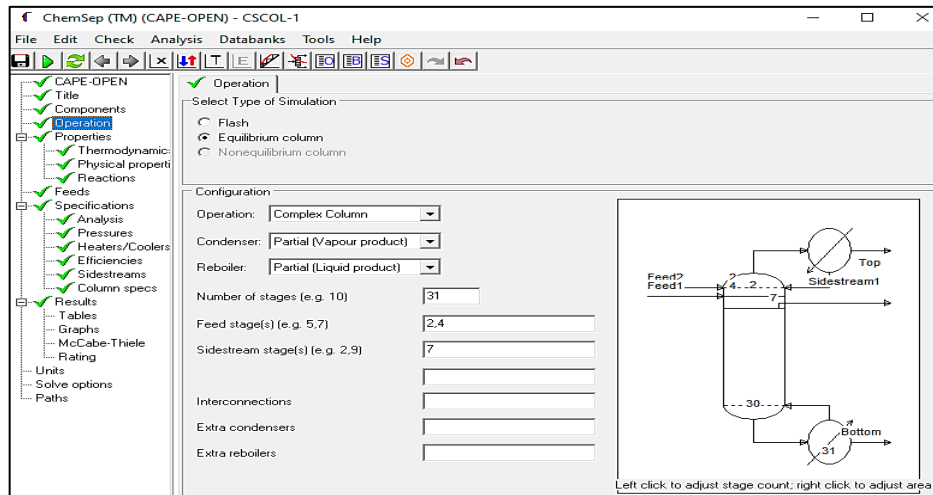


Ilustración 5-3: Parámetros de operación en la primera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

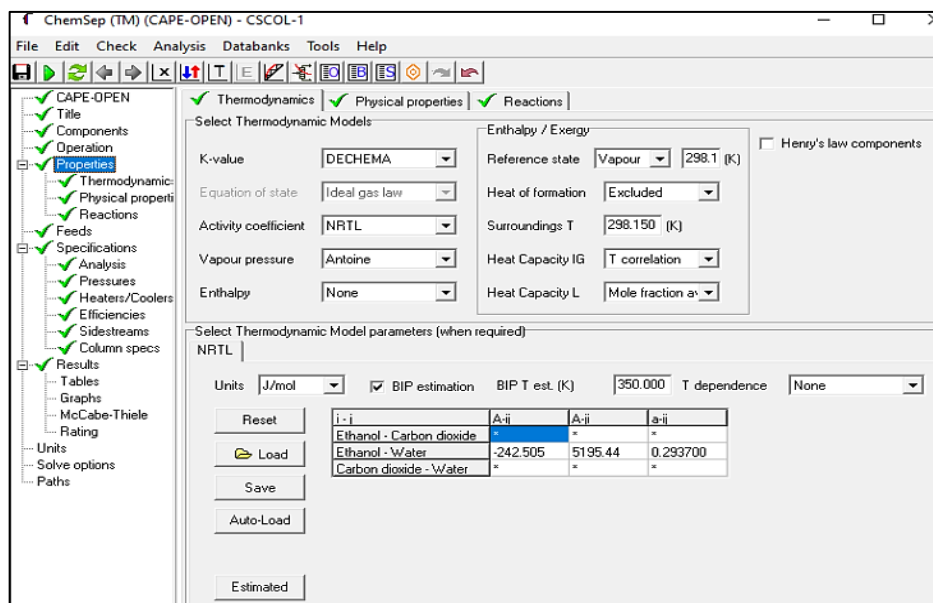


Ilustración 6-3: Propiedades termodinámicas en la primera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

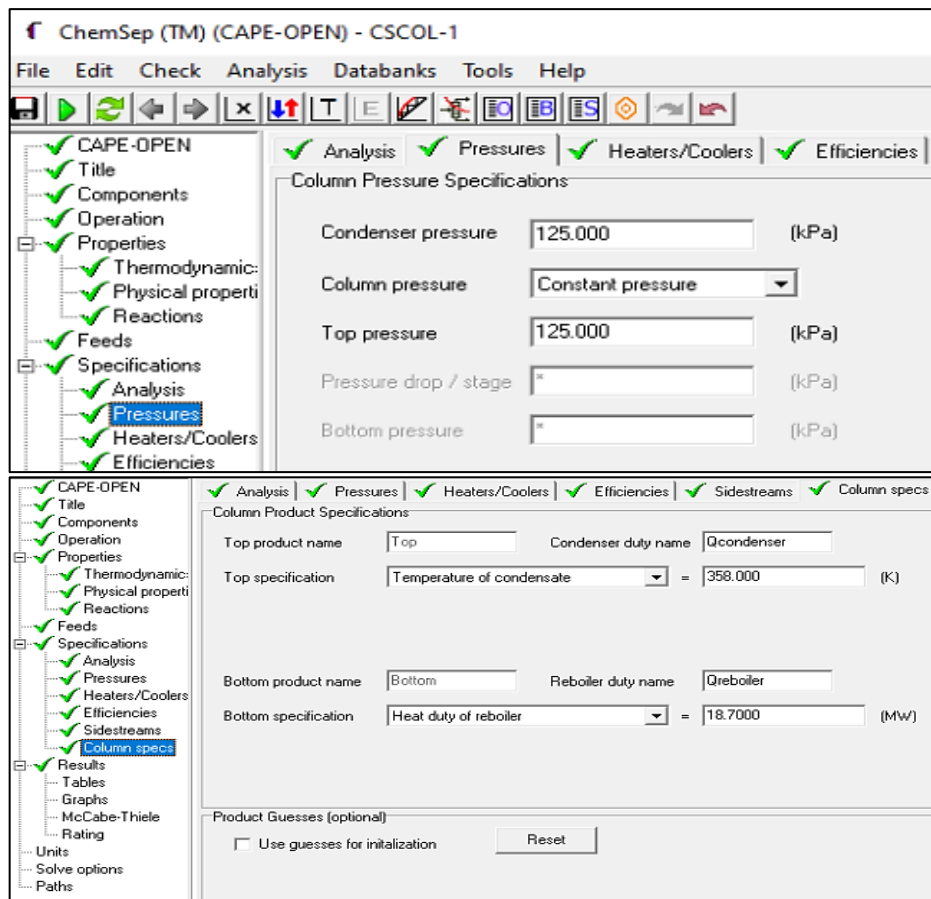


Ilustración 7-3: Especificaciones en la primera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

3.5.4 Condiciones de la segunda columna de baja presión

Utilizando una segunda columna de destilación ChemSep se asignan los parámetros correspondientes a las corrientes de entrada, corrientes de salida, cantidad de platos, presión, modelo termodinámico (NRTL) y demás especificaciones de la columna como se observa a continuación.

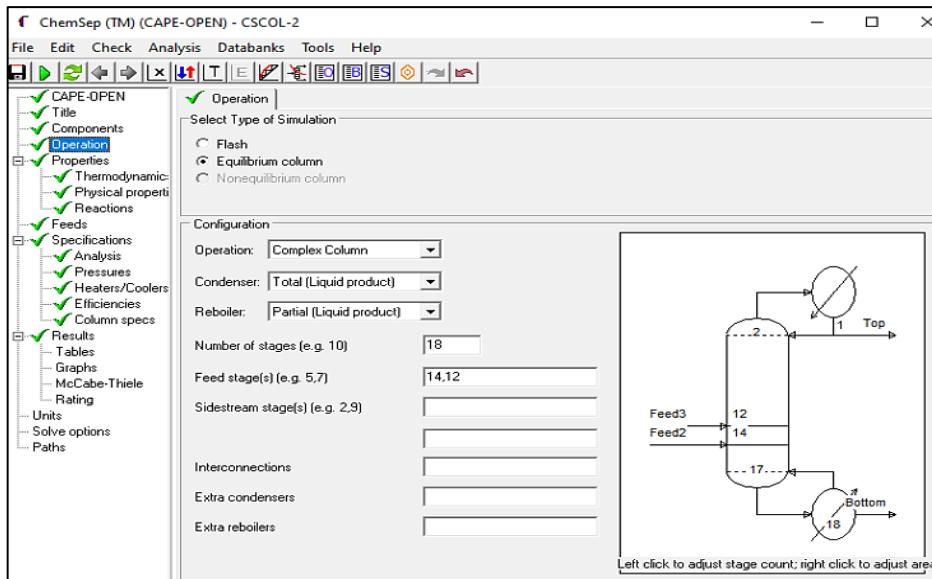


Ilustración 8-3: Parámetros de operación en la segunda columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

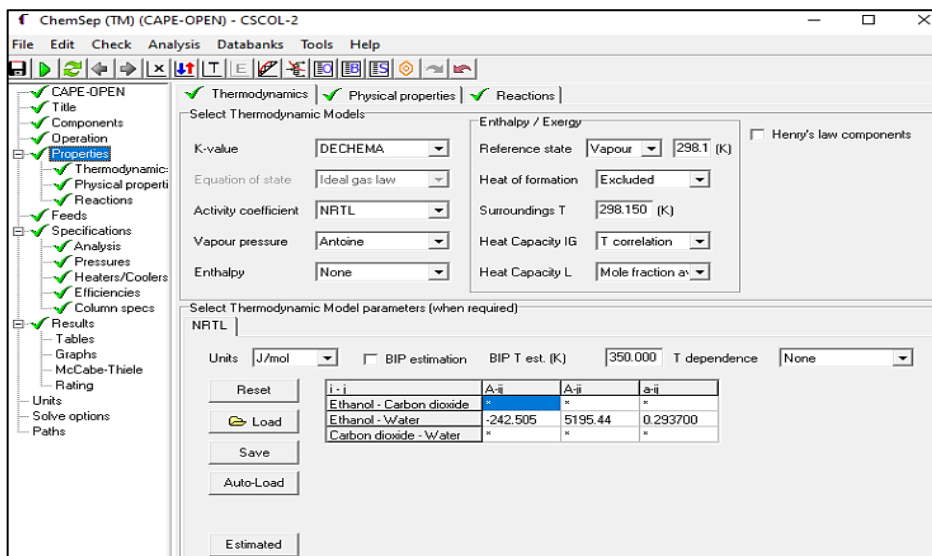


Ilustración 9-3: Propiedades termodinámicas en la segunda columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

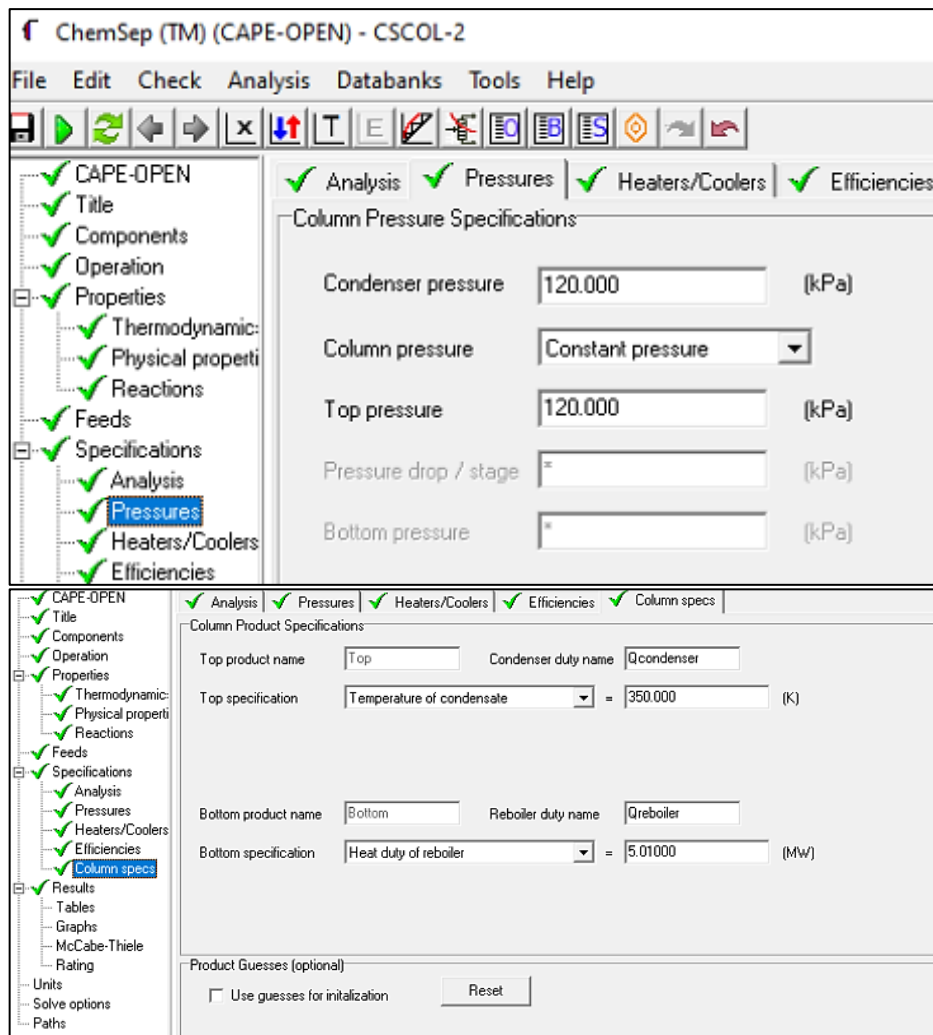


Ilustración 10-3: Especificaciones en la segunda columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

3.5.5 Condiciones de la tercera columna de absorción

Utilizando en este caso una columna de absorción ChemSep se asignan los parámetros correspondientes a las corrientes de entrada, corrientes de salida, cantidad de platos, presión, modelo termodinámico (NRTL) y demás especificaciones de la columna como se observa a continuación.

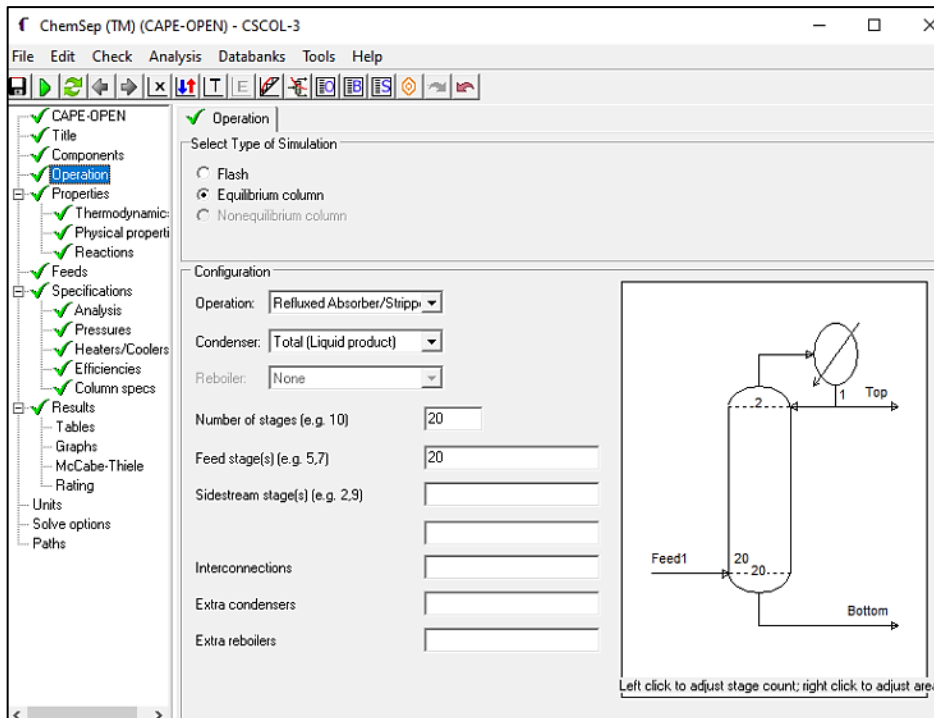


Ilustración 11-3: Parámetros de operación en la tercera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

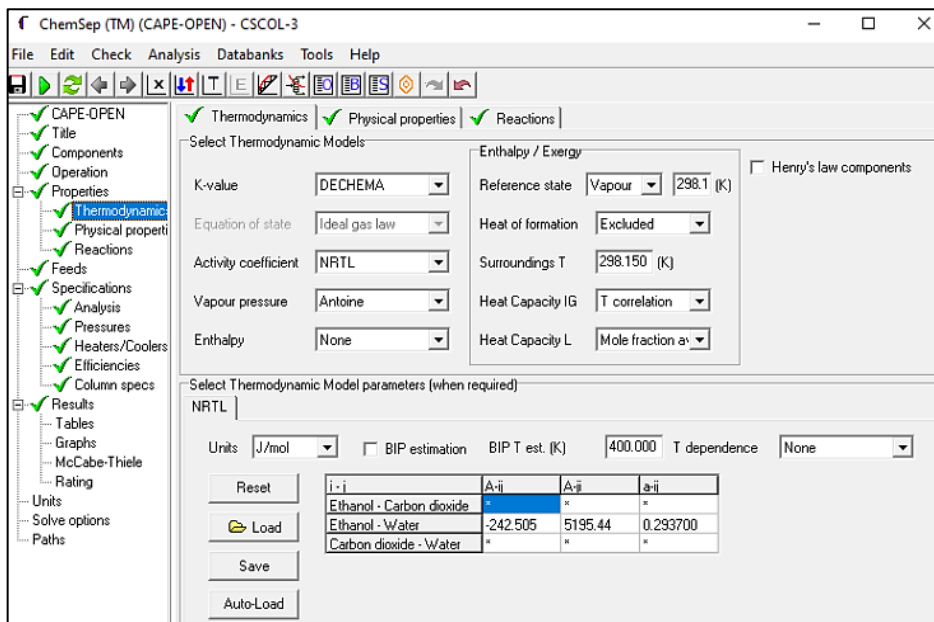


Ilustración 12-3: Propiedades termodinámicas en la tercera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

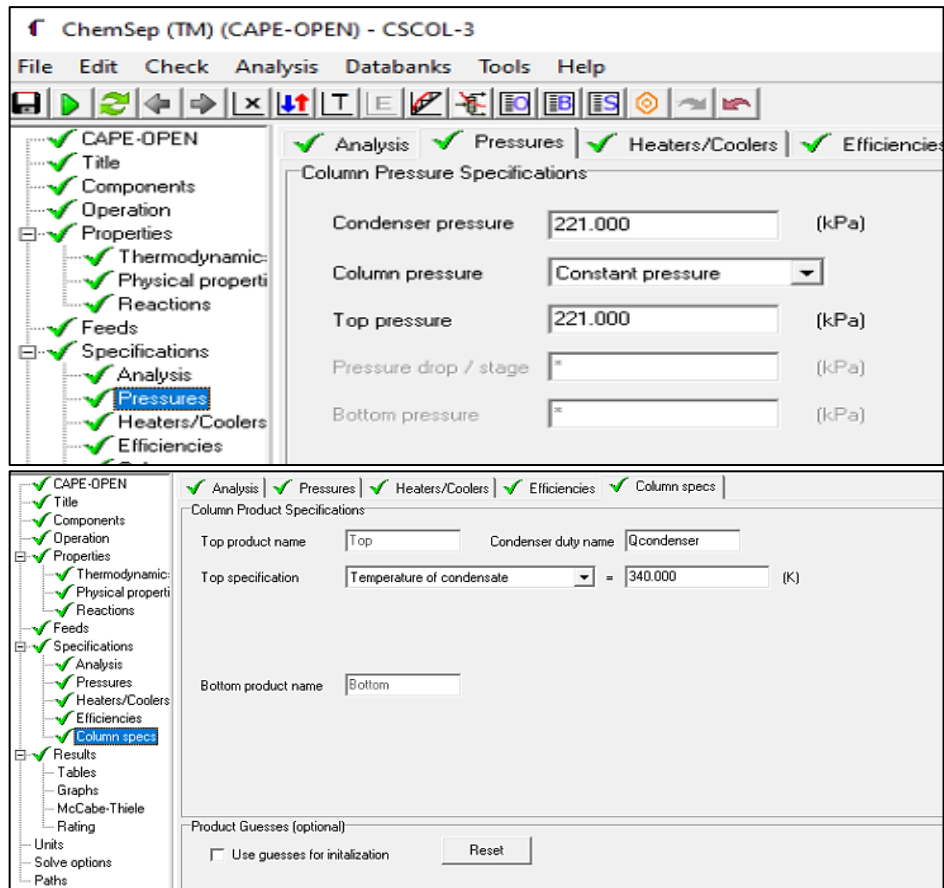


Ilustración 13-3: Especificaciones en la tercera columna

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

3.6 Validación de los resultados de la simulación con bibliografía

Para validar los resultados se compararán los datos obtenidos en la simulación del proceso de recuperación y deshidratación de bioetanol en DWSIM con los datos reportados por Singh, da Cunha y Rangaiah al simular en 2019 el mismo proceso en Aspen HYSYS. Además, se realizará un balance de masa de la simulación.

3.7 Análisis de optimización del proceso simulado

El análisis de optimización consistió en identificar las etapas principales del proceso, en este caso se ha seleccionado la primera columna donde ocurre la separación del dióxido de carbono de la corriente de destilado a través de un desgasificador, en el fondo de la columna se separa el agua y en la corriente lateral se obtiene una mezcla azeotrópica etanol-agua. Para el análisis de la simulación dinámica se tomarán en cuenta aquellos parámetros de operación que están

directamente relacionados con la cantidad obtenida de los compuestos a recuperar. El análisis de optimización permitirá obtener una base de datos para desarrollar la red neuronal artificial.

3.8 Tratamiento de datos

Se obtuvo una base de datos compuesta por 201 datos del análisis de optimización de la simulación a partir de la modificación de las variables independientes y dependientes del proceso simulado. El tratamiento de los datos consistió en la normalización de la base de la base de datos, de los 201 recopilados por simulación, se utilizaron 150 datos para entrenar y 51 datos para validar la predicción de la red neuronal artificial.

3.9 Desarrollo de la red neuronal artificial

3.9.1 Entradas y salidas de la red neuronal artificial

Las variables independientes establecidas en el análisis de optimización del proceso corresponden a las entradas y las variables dependientes serán las salidas de la red neuronal artificial. A continuación, se describen las entradas y salidas de la red.

Tabla 6-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial.

ENTRADAS	Corriente de Alimentación
	• Temperatura
	• Fracción másica de etanol
	• Fracción másica de dióxido de carbono
	• Fracción másica de Agua
	Columna de destilación
	• Presión
	• Temperatura
SALIDAS	Corriente de cabeza de la columna
	• Fracción másica de dióxido de carbono
	Corriente de fondo de la columna
	• Fracción másica de agua
	Corriente lateral de la columna
	• Fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica
• Fracción másica de agua en mezcla azeotrópica	

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

3.9.2 Diseño de la red neuronal artificial

La red neuronal se desarrollará en Matlab a través de la aplicación Neural Network Fitting, en la siguiente figura se puede observar la interfaz de la aplicación.

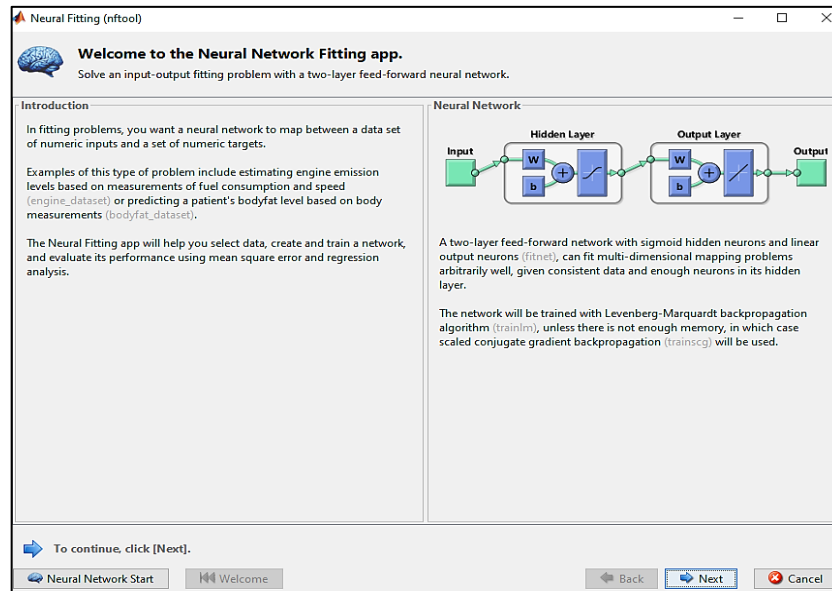


Ilustración 14-3: Neural Network Fitting

Fuente: Software Matlab (2023).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

3.10 Entrenamiento de la red neuronal artificial

De los 150 datos seleccionados para el entrenamiento de la red, a los datos de entrada y salida normalizados se los almacena en vectores, declarando sus variables como “Entradas_N” y “Salidas_N” respectivamente. Luego se ingresan en la aplicación Neural Network Fitting como se indica a continuación.

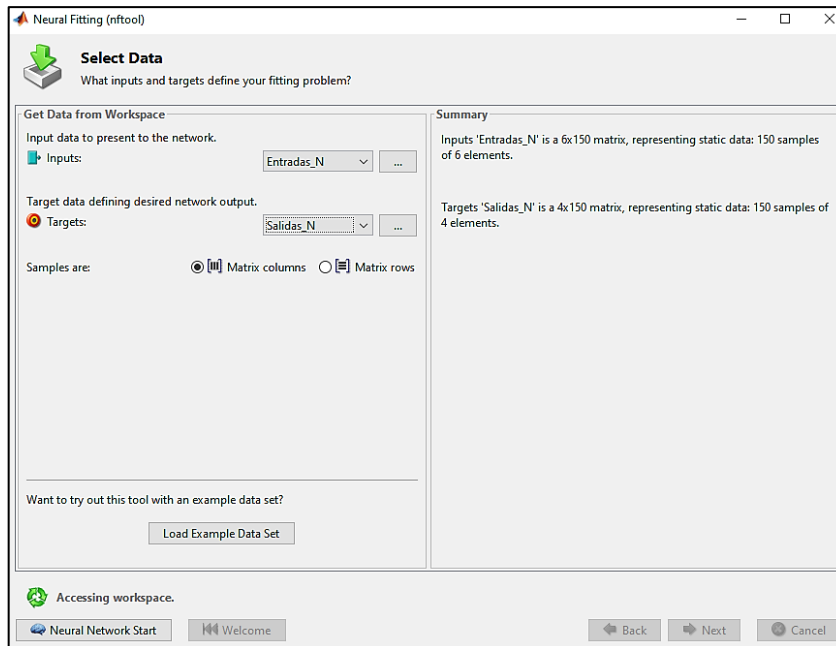


Ilustración 15-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial

Fuente: Software Matlab (2023).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

De los 150 datos, se selecciona el porcentaje de datos destinados a entrenar, validar y realizar una prueba interna del rendimiento de la predicción en el proceso de entrenamiento de la red.

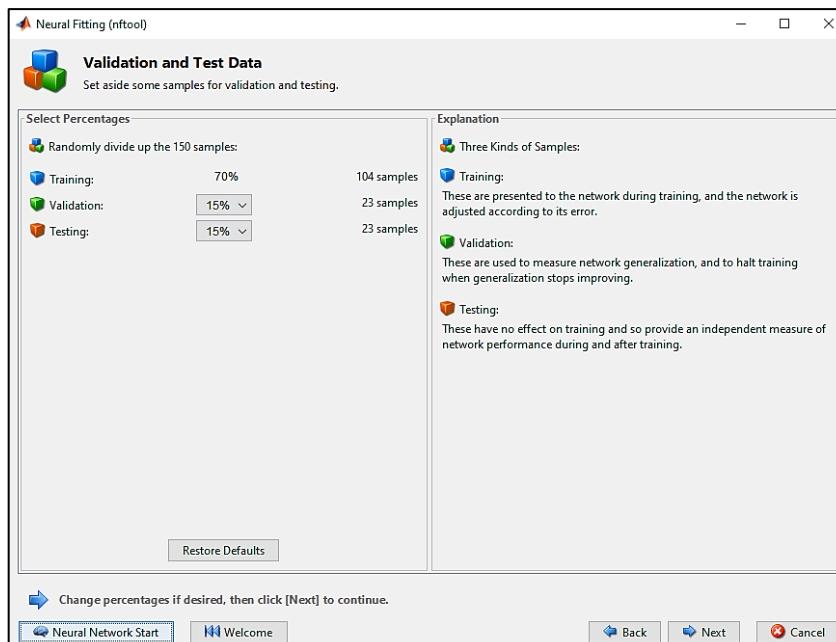


Ilustración 16-3: Entradas y salidas de la red neuronal artificial

Fuente: Software Matlab (2023).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

Luego se debe establecer la arquitectura de la red neuronal artificial, en la siguiente figura se puede observar que la red consta de seis variables en la capa de entrada, 10 neuronas en la capa oculta y 4 variables en la capa de salida. La cantidad de neuronas en la capa oculta se debe establecer en función del rendimiento y el error de la predicción; es decir, al modificar la cantidad de neuronal en la capa oculta para disminuir su error de predicción y por ende, mejorar su rendimiento.

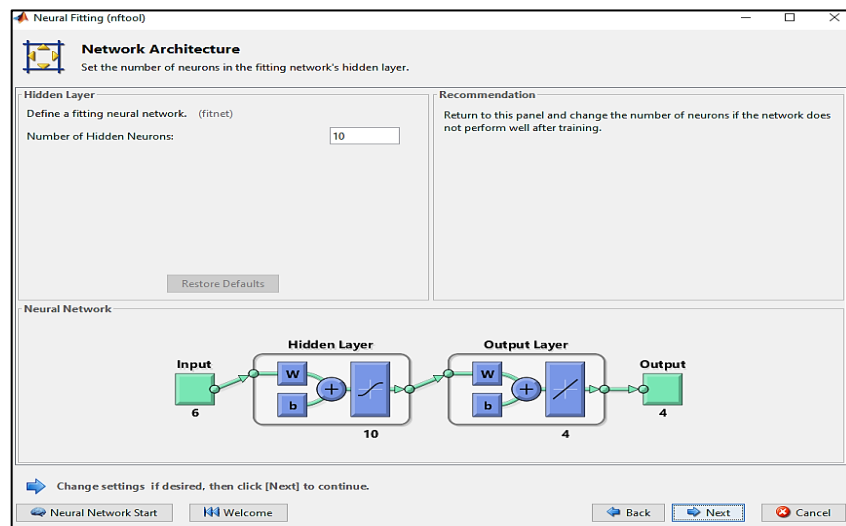


Ilustración 17-3: Arquitectura de la red neuronal

Fuente: Software Matlab (2023).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

Al igual que la selección de la cantidad de neuronas en la capa oculta, el algoritmo de entrenamiento de la red también se debe establecer en función del rendimiento de la predicción; es decir, se entrenará a la red con los tres algoritmos de entrenamiento (Levenberg Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient) y se seleccionará el mejor algoritmo en función del error de predicción.

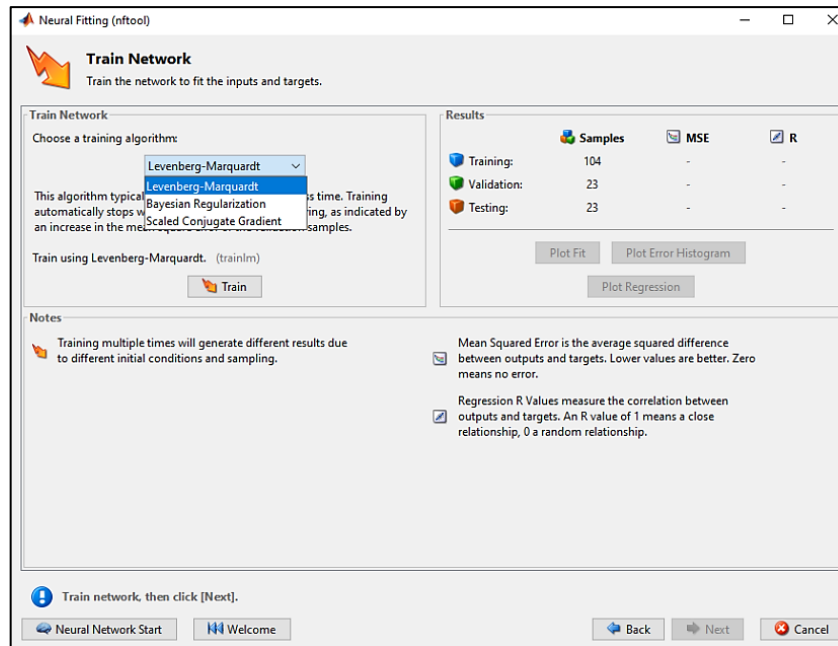


Ilustración 18-3: Algoritmos de entrenamiento de la red

Fuente: Software Matlab (2023).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2023.

3.11 Validación de resultados

Para validar la red neuronal desarrollada, se deben comparar los datos predichos por la RNA con los resultados obtenidos mediante la simulación en DWSIM. Para ello se utilizan 51 datos y se evalúa la variación y el error de predicción de la red en función del análisis estadístico.

3.12 Análisis estadístico

El análisis ANOVA también conocido como análisis de la varianza ANOVA se utiliza para contrastar la hipótesis de igualdad de medias poblacionales, es decir analizar la variación de la media entre dos grupos. En este caso, permitirá contrastar la hipótesis de igualdad entre la media de los datos reales con la media de los datos predichos a través de una formulación de hipótesis y una regla de decisión.

3.12.1 Formulación de la hipótesis nula y la hipótesis alternativa

H_0 : la media de los datos es igual.

H_1 : la media de los datos no es igual.

3.12.2 Regla de decisión

Condición para aceptar la hipótesis nula (H_0): Si el Valor-p $> \alpha$ (0,05).

Aceptar la hipótesis nula de igualdad de medias permitirá determinar que no existe variación significativa entre los datos reales y los datos predichos.

CAPÍTULO IV

4 RESULTADOS

4.1 Simulación del proceso en DWSIM

A partir de los parámetros óptimos descritos por Singh, da Cunha y Rangaiah (2019) se simuló en DWSIM la destilación asistida por bomba de calor seguida de un proceso de adsorción por cambio de presión para la recuperación y deshidratación de bioetanol como se observa en el siguiente diagrama, los resultados de la simulación se describen a continuación.

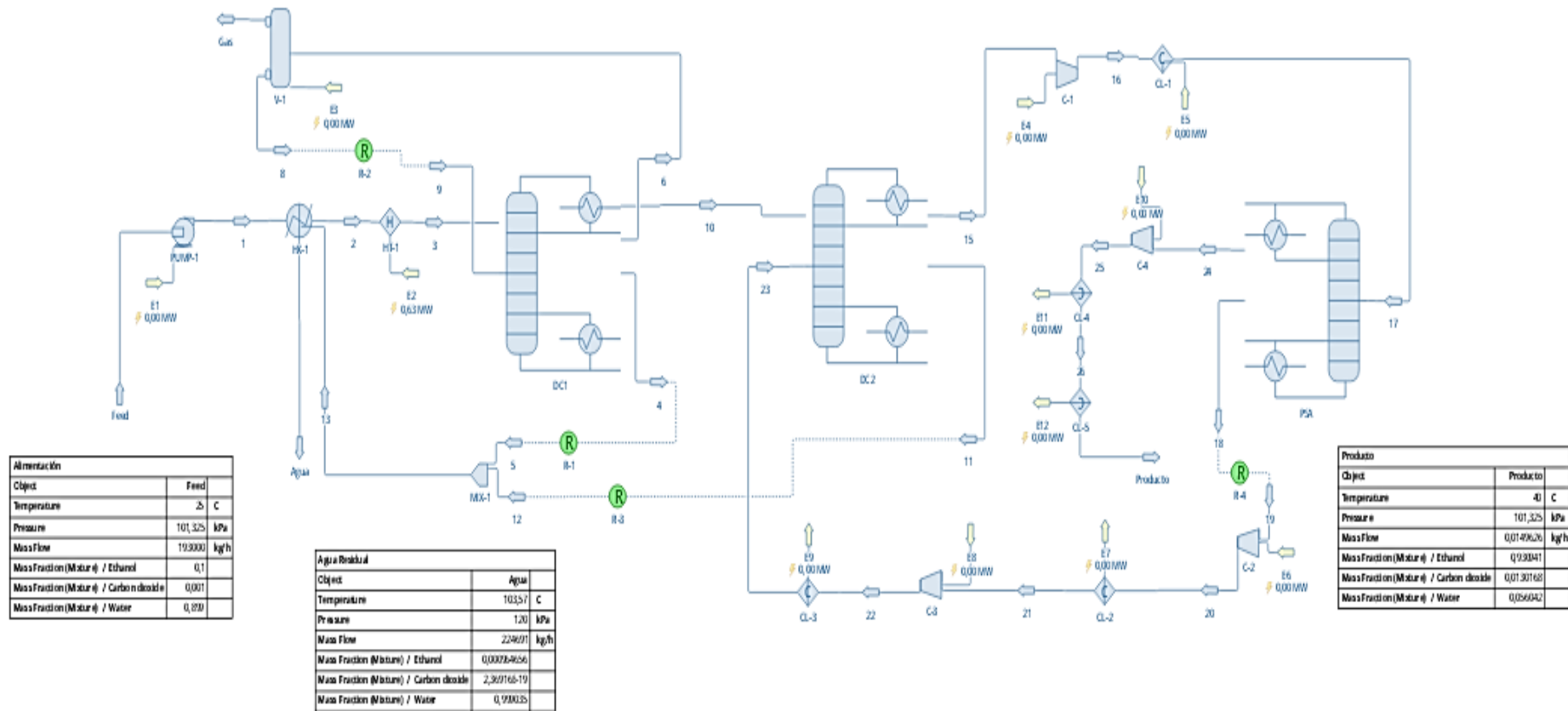


Ilustración 1-4: Simulación del proceso de recuperación y deshidratación de bioetanol.

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 1-4: Resultados de la primera columna de destilación.

Variable	Destilado	Fondo	Lateral	Unidad
Temperature	78,768	105,98	107,205	C
Pressure	125	125	125	kPa
Mass Flow	23567,3	169433	55258,8	kg/h
Molar Flow	649,483	9404,95	3060	kmol/h
Volumetric Flow	14876,4	177,624	76621,6	m ³ /h
Density (Mixture)	1,58421	953,887	0,721191	kg/m ³
Molecular Weight (Mixture)	36,2862	18,0153	18,0584	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	79,1589	-2169,93	149,603	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	0,42867	-5,74524	0,355102	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	2872,37	-39091,9	2701,59	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	15,5548	-103,502	6,41259	kJ/[kmol.K]
Molar Fraction (Mixture) / Ethanol	0,645039	1,91E-19	0,001536	
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,818933	4,87E-19	0,003922	
Molar Flow (Mixture) / Ethanol	418,942	1,79E-15	4,70526	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Ethanol	19300	8,26E-14	216,764	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,006752	5,11E-24	1,45E-09	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,008189	1,25E-23	3,52E-09	
Molar Flow (Mixture) / Carbon dioxide	4,38542	4,81E-20	4,43E-06	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Carbon dioxide	193	2,12E-18	0,0001947	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,34820	1	0,998462	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,17287	1	0,996077	
Molar Flow (Mixture) / Water	226,155	9404,95	3055,29	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Water	4074,25	169433	55042	kg/h
Molarity (Mixture) / Ethanol	0,028161	1,01E-17	6,14E-05	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Carbon dioxide	0,000294	2,71E-22	5,78E-11	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Water	0,015202	52,9488	0,0398751	kmol/m ³

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 2-4: Resultados de la segunda columna de destilación.

Variable	Destilado	Fondo	Unidad
Temperature	73,5829	97,2727	C
Pressure	120	120	kPa
Mass Flow	0,117701	55258,7	kg/h
Molar Flow	0,00280518	3060	kmol/h
Volumetric Flow	0,0001533	57,5823	m ³ /h
Density (Mixture)	767,789	959,648	kg/m ³
Molecular Weight (Mixture)	41,9583	18,0584	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	-858,22	-2202,02	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	-2,28666	-5,83219	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	-36009,4	-39764,9	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	-95,9442	-105,32	kJ/[kmol.K]
Molar Fraction (Mixture) / Ethanol	0,85201	0,00153757	
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,935472	0,00392245	
Molar Flow (Mixture) / Ethanol	0,00239004	4,70495	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Ethanol	0,110106	216,75	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,00159261	3,95E-19	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,00167046	9,63E-19	
Molar Flow (Mixture) / Carbon dioxide	4,47E-06	1,21E-15	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Carbon dioxide	0,00019662	5,32E-14	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,146397	0,998462	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,0628575	0,996078	
Molar Flow (Mixture) / Water	0,00041067	3055,29	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Water	0,00739836	55042	kg/h
Molarity (Mixture) / Ethanol	15,5908	0,0817083	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Carbon dioxide	0,0291429	2,10E-17	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Water	2,67891	53,0596	kmol/m ³

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 3-4: Resultados de la tercera columna de destilación.

Variable	Destilado	Fondo	Unidad
Temperature	61,8628	96,1247	C
Pressure	221	221	kPa
Mass Flow	0,0149626	0,102738	kg/h
Molar Flow	0,00035333	0,00245185	kmol/h
Volumetric Flow	1,90E-05	0,00013826	m ³ /h
Density (Mixture)	785,609	743,085	kg/m ³
Molecular Weight (Mixture)	42,3471	41,9022	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	-882,81	-781,981	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	-2,36829	-2,07381	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	-37384,5	-32766,7	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	-100,29	-86,8971	kJ/[kmol.K]
Molar Fraction (Mixture) / Ethanol	0,855741	0,851472	
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,930941	0,936132	
Molar Flow (Mixture) / Ethanol	0,00030236	0,00208768	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Ethanol	0,0139293	0,0961763	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0125251	1,71E-05	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0130168	1,80E-05	
Molar Flow (Mixture) / Carbon dioxide	4,43E-06	4,20E-08	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Carbon dioxide	0,00019477	1,85E-06	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,131734	0,148511	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,056042	0,0638501	
Molar Flow (Mixture) / Water	4,65E-05	0,00036413	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Water	0,00083853	0,00655983	kg/h
Molarity (Mixture) / Ethanol	15,8754	15,0998	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Carbon dioxide	0,232362	0,00030397	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Water	2,44388	2,63366	kmol/m ³

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 4-4: Resultados del separador (desgasificador).

Variable	Líquido	Gas	Unidad
Temperature	64,35	64,35	C
Pressure	125	125	kPa
Mass Flow		241,677	kg/h
Molar Flow		5,61316	kmol/h
Volumetric Flow		49,8037	m ³ /h
Density (Mixture)		4,8526	kg/m ³
Molecular Weight (Mixture)	42,125	43,0555	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)		35,0789	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)		0,0588804	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)		1510,34	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)		2,53513	kJ/[kmol.K]
Molar Fraction (Mixture) / Ethanol	0,842473	0,168666	
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,921338	0,180469	
Molar Flow (Mixture) / Ethanol		0,94675	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Ethanol		43,6153	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0183015	0,781275	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0191203	0,798585	
Molar Flow (Mixture) / Carbon dioxide		4,38542	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Carbon dioxide		193	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,139225	0,050059	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,0595414	0,0209457	
Molar Flow (Mixture) / Water		0,280989	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Water		5,06209	kg/h
Molarity (Mixture) / Ethanol		0,0190096	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Carbon dioxide		0,0880541	kmol/m ³
Molarity (Mixture) / Water		0,00564193	kmol/m ³

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 5-4: Resultados de las corrientes producto.

Variables	Producto	Gas	Agua	Unidad
Temperature	40	64,35	103,57	C
Pressure	101,325	125	120	kPa
Mass Flow	0,0149626	241,677	224691	kg/h
Molar Flow	0,00035333	5,61316	12464,9	kmol/h
Volumetric Flow	6,87E-05	49,8037	235,149	m3/h
Density (Mixture)	217,822	4,8526	955,529	kg/m3
Molecular Weight (Mixture)	42,3471	43,0555	18,0259	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	-951,725	35,0789	-2179,08	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	-2,57993	0,0588804	-5,76963	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	-40302,8	1510,34	-39279,8	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	-109,252	2,53513	-104,003	kJ/[kmol.K]
Molar Fraction (Mixture) / Ethanol	0,855741	0,168666	0,00037	
Mass Fraction (Mixture) / Ethanol	0,930941	0,180469	0,00096	
Molar Flow (Mixture) / Ethanol	0,000302	0,94675	4,70495	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Ethanol	0,0139293	43,6153	216,75	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0125251	0,781275	9,70E-20	
Mass Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,0130168	0,798585	2,37E-19	
Molar Flow (Mixture) / Carbon dioxide	4,43E-06	4,38542	1,21E-15	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Carbon dioxide	0,000194	193	5,32E-14	kg/h
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,131734	0,050059	0,99963	
Mass Fraction (Mixture) / Water	0,056042	0,0209457	0,999035	
Molar Flow (Mixture) / Water	4,65E-05	0,280989	12460,2	kmol/h
Mass Flow (Mixture) / Water	0,000838	5,06209	224475	kg/h
Molarity (Mixture) / Ethanol	4,40169	0,0190096	0,02001	kmol/m3
Molarity (Mixture) / Carbon dioxide	0,0644258	0,0880541	5,14E-18	kmol/m3
Molarity (Mixture) / Water	0,6776	0,0056419	52,9888	kmol/m3

Fuente: Software DWSIM (2022).

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

4.2 Validación de la simulación

4.2.1 Simulación del proceso en ASPEN HYSYS

Se compararon los datos obtenidos en la simulación del proceso de recuperación y deshidratación de bioetanol en DWSIM con los datos reportados por Singh, da Cunha y Rangaiah al simular el mismo proceso en Aspen HYSYS. A continuación, se indica la correspondiente validación de la simulación.

Tabla 6-4: Validación de la simulación.

Parámetros	Resultados		Error Relativo (%)
	ASPEN HYSYS	DWSIM	
Fracción másica de Etanol	0,998	0,931	6,71
Fracción másica de CO ₂	0,854	0,798	6,55
Fracción másica de Agua	0,999	0,999	0,00

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Además de validar la simulación con los resultados reportados en bibliografía, se realizó un balance de masa para contrastar los resultados obtenidos por simulación.

4.2.2 Balance de masa del proceso

Como un método de comprobación se procedió a realizar el balance de masa global de forma manual a la simulación de deshidratación y recuperación de bioetanol por destilación asistida por bomba de calor y por oscilación de presión para cada torre de destilación, torre de absorción, separador gas- líquido y mezclador, a fin de demostrar la validez del sistema mediante cálculos matemáticos sin necesidad de hacer uso del software. Se lo realizará de manera simplificada y parcial, es decir, no se comprobarán todos los resultados solo se hará la comprobación de los flujos másicos esto para evitar que el procedimiento sea muy extenso.

4.2.2.1 Balance de masa en la columna de alta presión (CD 1)

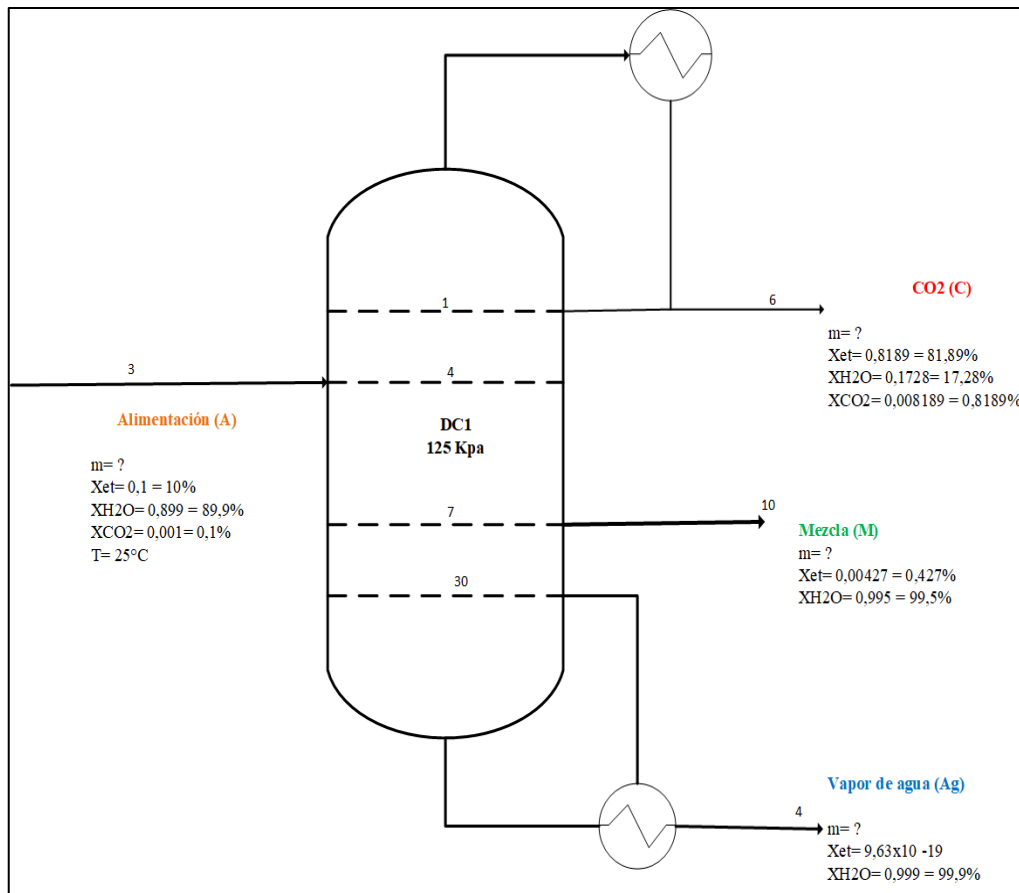


Ilustración 2-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de alta presión CD1

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

Balance general de masa

$$A = C + M + Ag \quad \text{Ec. (1 - 4)}$$

Donde:

A= Flujo másico de alimentación etanol/H₂O/CO₂ en Kg/h

C= Flujo másico de salida del condensado CO₂ en Kg/h

M= Flujo másico de salida etanol/H₂O en Kg/h

Ag= Flujo másico de salida de vapor de agua en Kg/h

Balance general para CO₂

$$A = C$$

$$AX_{CO_2} = CX_{CO_2} \quad \text{Ec. (2 - 4)}$$

$$C = \frac{AX_{CO2}}{X_{CO2}} = \frac{193000 \text{ kg/h}(0.001)}{0.008189} = 23568.201 \text{ kg/h}$$

Balance de masa por componente (Xet) en la mezcla

$$A = C + M + Ag$$

$$AX_{et} = CX_{et} + MX_{et} + AgX_{et} \quad \text{Ec. (3 - 4)}$$

$$193000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * (0.1) = 23568.201 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * (0.8189) + M * (0.00427) + Ag * (9.63 \times 10^{-19})$$

$$19300 = 19299.999 + 0.00427M + 9.63 \times 10^{-19} Ag \quad \text{Ec. (4 - 4)}$$

Balance de masa por componente (H2O) para la mezcla

$$A = C + M + Ag$$

$$AX_{H2Oa} = CX_{H2Oc} + MX_{H2Om} + AgX_{H2Oag} \quad \text{Ec. (5 - 4)}$$

$$193000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * (0.899) = 23568.201 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * (0.1728) + M * (0.995) + Ag * (0.999)$$

$$173507 = 4072.5851 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + 0.985 M + 0.999 Ag$$

$$169434.4149 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 0.995 M + 0.999 Ag \quad \text{Ec. (6 - 4)}$$

Despejamos M de Ec.4-4 y Ec.6-4

$$1 \times 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 0.00427M + 9.63 \times 10^{-19} Ag$$

$$169434.4149 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 0.995M + 0.999 Ag$$

$$M = \frac{1 \times 10^{-3} - 9.63 \times 10^{-19} Ag}{0.00427}$$

$$M = \frac{169434.4149 - 1 Ag}{0.995}$$

Igualamos

$$M = M$$

$$\frac{1 \times 10^{-3} - 9.63 \times 10^{-19} Ag}{0.00427} = \frac{169434.4149 - 1 Ag}{0.995}$$

$$0.995(1 \times 10^{-3} - 9.63 \times 10^{-19} Ag) = 0.00427(169434.4149 - 1 Ag)$$

$$9.95 \times 10^{-14} - 9.58185 \times 10^{-19} Ag = 723.4849 - 4.27 \times 10^{-8} Ag$$

$$-9.58185 \times 10^{-19} Ag + 4.27 \times 10^{-3} Ag - 723.4849 - 9.95 \times 10^{-4}$$

$$4.27 \times 10^{-3} Ag = 723.4839$$

$$Ag = \frac{723.4839}{4.27 \times 10^{-3}}$$

$$\mathbf{Ag = 169434.1698 \text{ kg/h}}$$

Balance general para obtener M

$$A = C + M + Ag$$

$$193000 \frac{kg}{h} = 23568.201 \frac{kg}{h} + M + 169434.1689 \frac{kg}{h}$$

$$193000 \frac{kg}{h} = 193002.3708 \frac{kg}{h} + M$$

$$M = (193002.3708 - 193000) \frac{kg}{h}$$

$$M = 2.3707 \frac{kg}{h}$$

4.2.2.2 Balance de masa en la columna de baja presión (CD 2)

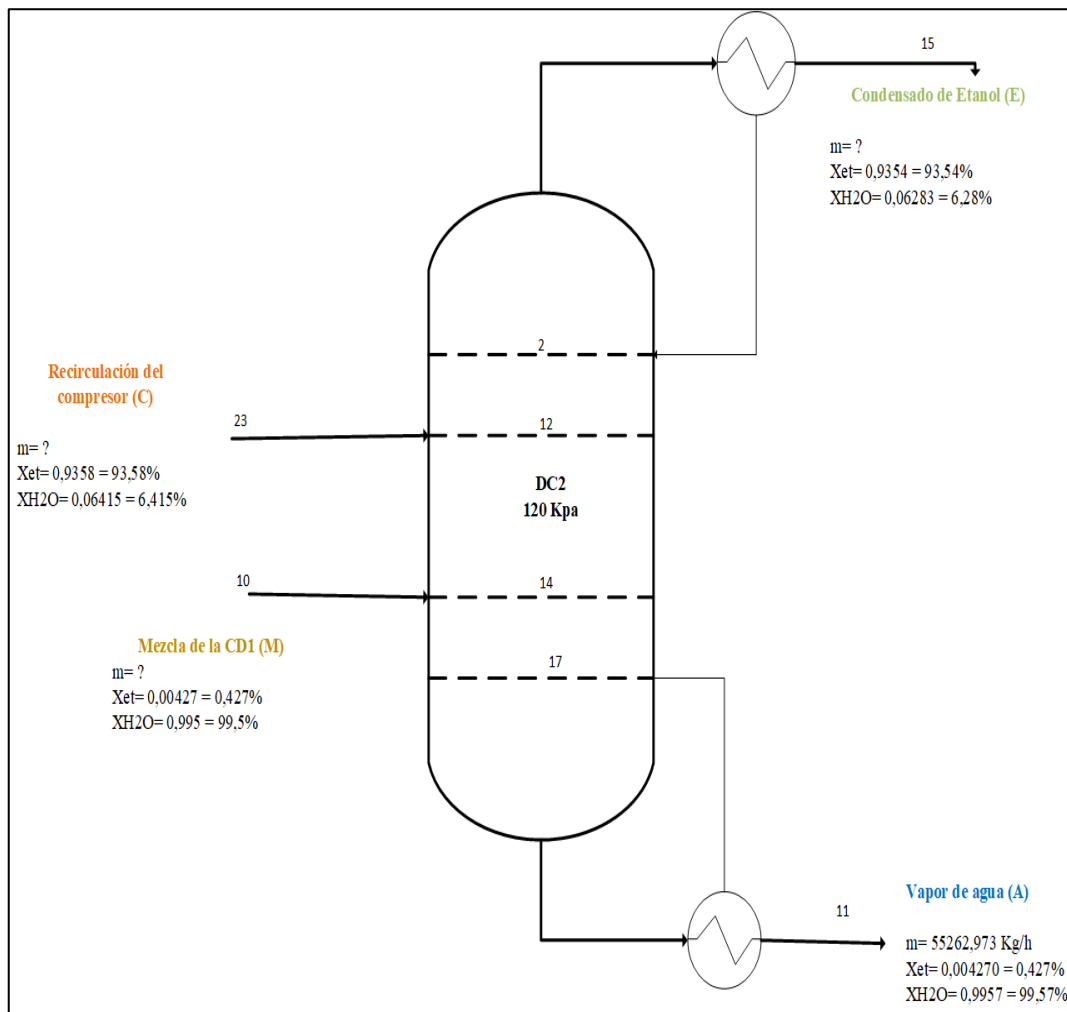


Ilustración 3-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de baja presión CD 2

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

Balance general de masa

$$M + C = E + A$$

$$Ec. (7 - 4)$$

Donde:

M= Flujo másico de entrada a CD 2, de salida de la CD 1 etanol/H₂O en Kg/h

C= Flujo másico de entrada proveniente del compresor en Kg/h

E= Flujo másico de salida de la cabeza de la columna (condensado) en Kg/h

A= Flujo másico de salida de vapor agua en Kg/h

Balance general por componente para H₂O

$$MX_{H_2O} + CX_{H_2O} = EX_{H_2O} + AX_{H_2O} \quad Ec. (8 - 4)$$

$$55262.973(0.9957) + 0.06415 * C = 0.06283 * E + 56262.973(0.9957)$$

$$55025.342 + 0.06415 * C = 0.06283 * E + 55025.34222$$

$$C = \frac{0.06283 * E}{0.06415} \quad Ec. (9 - 4)$$

Balance parcial para M

$$M = A$$

$$MX_{H_2O} = AX_{H_2O} \quad Ec. (10 - 4)$$

$$M = \frac{55262.973(0.9957)}{0.9957}$$

$$\mathbf{M = 55262.978 \text{ kg/h}}$$

Balance general por componente para Etanol

$$MX_{et} + CX_{et} = EX_{et} + AX_{et}$$

$$55262.973(0.004271) + 0.9358C = 0.9354E + 0.004270(55262.973)$$

$$236.02815 + 0.9358C = 0.9354E + 235.9728$$

$$C = \frac{0.9354E - 0,05525}{0.9358} \quad Ec. (11 - 4)$$

Igualamos Ec. (9 - 4) y Ec. (11 - 4)

$$C = C$$

$$\frac{0.06283E}{0.06415} = \frac{0.9354E - 0,05525}{0.9358}$$

$$0.9358(0.06283E) = 0.06415(0.9354E - 0,05525)$$

$$0.0587E = 0.0600E - 3.5507 \times 10^{-3}$$

$$0.0587E - 0.0600E = -3.5507 \times 10^{-3}$$

$$E = \frac{-3.5507 \times 10^{-3}}{-1.3 \times 10^{-3}}$$

$$\mathbf{E = 2.7313 \text{ kg/h}}$$

Balance general para obtener C

$$M + C = E + A$$

$$C = E + A - M$$

$$C = E$$

$$C = 2.7317 \text{ kg/h}$$

4.2.2.3 Balance de masa en el separador Gas- Líquido

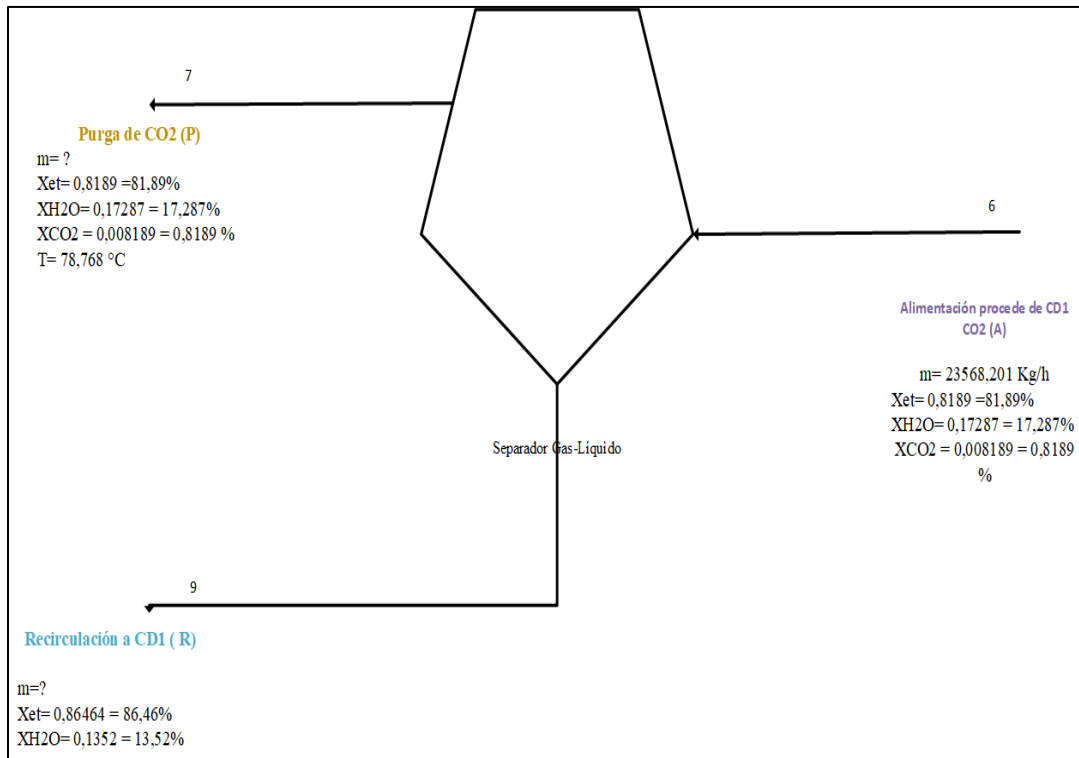


Ilustración 4-4: Diagrama de balance general de masa en el separador gas - líquido

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

Balance General

$$A = P + R \quad \text{Ec. (12 - 4)}$$

Donde:

A= Flujo másico de entrada al separador, de salida de la CD 1 etanol/H₂O/CO₂ en Kg/h

P= Flujo másico de salida de purga de CO₂ en Kg/h

R= Flujo másico de salida recirculado a la CD1 en Kg/h

Balance General para CO₂

$$A = P$$

$$AX_{H_2O} = PX_{H_2O} \quad \text{Ec. (13 - 4)}$$

$$P = \frac{AX_{H_2O}}{X_{H_2O}} = \frac{2356.8201 \text{ kg/h}(0,0081893)}{0,0081893}$$

$$P = 23568.201 \frac{kg}{h}$$

Balance general para R

$$A = P + R$$

$$R = A - P \quad \text{Ec. (13 - 4)}$$

$$R = (23568.201 - 23568.201)kg/h$$

$$R = 0 \text{ kg/h}$$

Balance general por componente para etanol

$$AX_{et} = PX_{et} + RX_{et} \quad \text{Ec. (14 - 4)}$$

$$P = \frac{AX_{eta} - RX_{etr}}{x_{etp}} \quad \text{Ec. (15 - 4)}$$

Balance general por componente para etanol vapor de agua

$$AX_{H_2O} = PX_{H_2O} + RX_{H_2O} \quad \text{Ec. (16 - 4)}$$

$$P = \frac{AX_{H_2O A} - RX_{H_2O P}}{x_{H_2O p}} \quad \text{Ec. (17 - 4)}$$

Igualamos Ec. (15 - 4) y Ec. (17 - 4)

$$P = P$$

$$\frac{AX_{eta} - RX_{etr}}{x_{etp}} = \frac{AX_{H_2O A} - RX_{H_2O P}}{x_{H_2O p}}$$

$$X_{H_2O A}(AX_{eta} - RX_{etr}) = x_{etp}(AX_{H_2O A} - RX_{H_2O P})$$

$$A(X_{eta} * X_{H_2O P}) - R(X_{etr} * X_{H_2O P}) = A(X_{H_2O} * X_{etp}) - R(X_{H_2O R} * X_{etp})$$

$$R = \frac{A((X_{H_2O} * X_{H_2O P}) - (X_{eta} * X_{H_2O P}))}{(X_{H_2O} * X_{etp}) * (X_{etr} * X_{H_2O P})}$$

$$R = \frac{23568((0.17287 * 0.81893) - (0.81893 * 0.17287))}{(0.1352 * 0.81893) * (0.8646 * 0.17887)}$$

$$R = 0 \text{ kg/h}$$

Balance general para P

$$A = P + R$$

$$P = A - R$$

$$P = 23568.201 \text{ kg/h}$$

4.2.2.4 Balance de masa en el absorbedor (PSA)

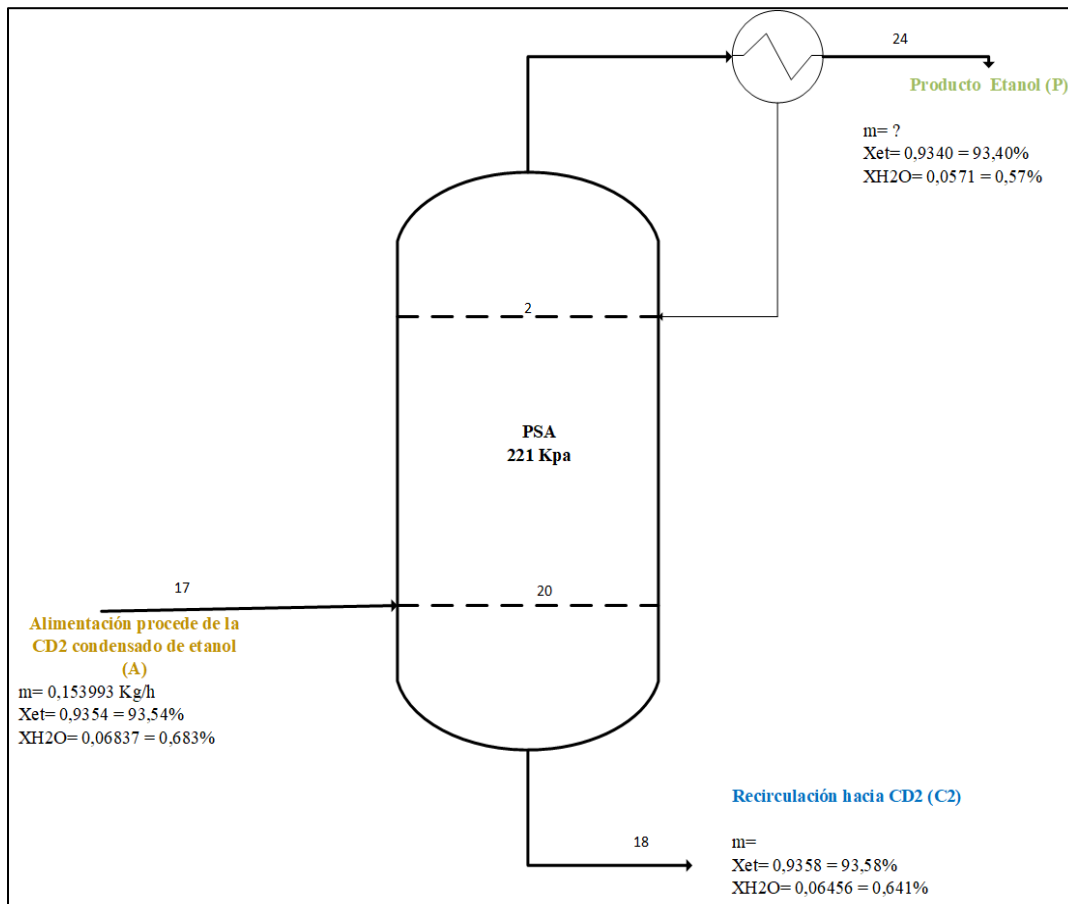


Ilustración 5-4: Diagrama de balance general de masa en el absorbedor

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

Balance general

$$A = P + C2 \quad \text{Ec. (18 - 4)}$$

Donde:

A= Flujo másico de entrada al absorbedor procedente de la CD 2 etanol/H₂O en Kg/h

P= Flujo másico de salida de producto obtenido de etanol recuperado en Kg/h

C2= Flujo másico de salida recirculado a la CD 2 en Kg/h

Balance general por componente para etanol

$$A = P + C2$$

$$A X_{et} = P X_{et} + C2 X_{et} \quad \text{Ec. (18 - 4)}$$

$$0.153993 * (0,93549) = 0,9340P + 0.9358 C2$$

$$0.1440 = 0.9340P + 0.9358 C2$$

$$P = \frac{0.1440 - 0.9358C2}{0,9340} \quad \text{Ec. (20 - 4)}$$

Balance general por componente para H₂O

$$A = P + C2$$

$$A X_{H2O} = P X_{H2O} + C2 X_{H2O} \quad \text{Ec. (21 - 4)}$$

$$0.153993 * (0.068373) = 0.0571P + 0.064156 C2$$

$$0.01052 = 0.0571P + 0.064156 C2$$

$$P = \frac{0.01052 - 0,06456C2}{0,0571} \quad \text{Ec. (22 - 4)}$$

Igualamos Ec. (20 - 4) y Ec. (22 - 4)

$$\frac{0.1440 - 0.9358 * C2}{0.9340} = \frac{0.01052 - 0.064156 * C2}{0.0571}$$

$$0.0571(0.1440 - 0.9358 * C2) = 0.9340(0.01052 - 0.06456) * C2$$

$$8.2224x10^{-3} - 0.05334 * C2 = 9.82568x10^{-3} - 0.0599C2$$

$$-0.05334 * C2 - 0.0599 * C2 = 9.82568x10^{-3} - 8.2224x10^{-3}$$

$$6.5817x10^{-3} C2 = 1.60328x10^{-3}$$

$$C2 = \frac{1.60328x10^{-3}}{6.5817x10^{-3}}$$

$$C2 = 0.24359$$

Balance general para P

$$A = P + C2$$

$$P = C2 - A \quad \text{Ec. (23 - 4)}$$

$$P = (0.24359 - 0.153993)kg/h$$

$$P = 0.08959 \text{ kg/h}$$

4.2.2.5 Balance de masa en el mezclador

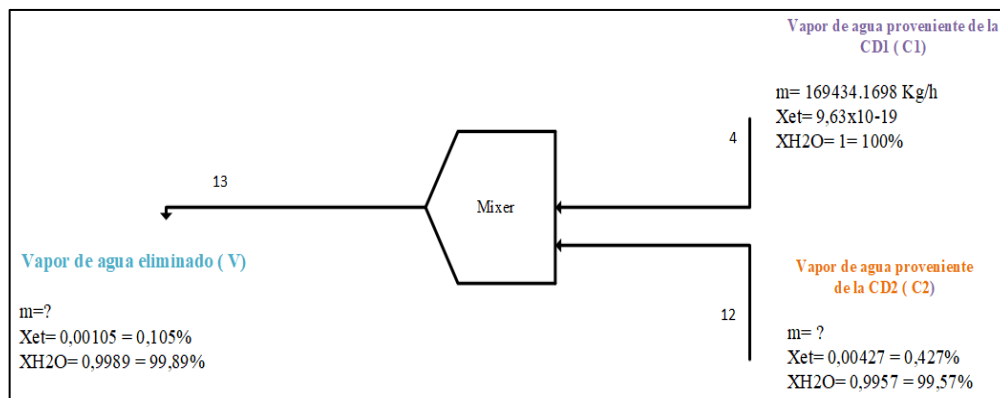


Ilustración 6-4: Diagrama de balance general de masa en el mezclador

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

Balance general de masa

$$C1 + C2 = V \quad \text{Ec. (24 - 4)}$$

Donde:

C1= Flujo másico de entrada proveniente de la CD1 vapor de agua en Kg/h

C2= Flujo másico de entrada proveniente de la CD2 vapor de agua en Kg/h

V= Flujo másico de salida vapor de agua eliminado en Kg/h

Balance general por componente para H₂O

$$C1X_{H_2O} + C2X_{H_2O} = VX_{H_2O} \quad \text{Ec. (25 - 4)}$$

$$169434.1698 * (1) + C2(0.9956) = V(0.9989)$$

$$169434.1698 + C2(0.9957) = V(0.9989)$$

$$C2 = \frac{0.9989 * V - 169434.1698}{0.9957} \quad \text{Ec. (26 - 4)}$$

Balance general por componente para Etanol

$$C1 + C2 = V$$

$$C1 \text{ xet} + C2 \text{ xet} = V \text{ xet} \quad \text{Ec. (27 - 4)}$$

$$169434.1698 * (9.63 \times 10^{-19}) + C2(0.004270) = V(0.001050)$$

$$1.631651 \times 10^{-3} + 0.004270 * C2 = 0.001050 * V$$

$$C2 = \frac{0.001050 * V - 1.631651 \times 10^{-3}}{0.004270} \quad \text{Ec. (28 - 4)}$$

Igualamos Ec. (26 - 4) y Ec. (28 - 4)

$$C2 = C2$$

$$\frac{0.9989 * V - 169434.1698}{0.9957} = \frac{0.001050 * V - 1.631651 \times 10^{-3}}{0.004270}$$

$$0.004270(0.9989 * V - 169434.1698) = 0.9957(0.001050 * V - 1.631651 \times 10^{-3})$$

$$1.265303 \times 10^{-3} * V - 1.045485 \times 10^{-3} * V = -1.62463 \times 10^{-3} + 723.4839$$

$$V = \frac{723.483905}{3.219818 \times 10^{-3}}$$

$$\mathbf{V = 224697.1428 \text{ kg/h}}$$

Balance General para C2

$$C1 + C2 = V$$

$$C2 = V - C1 \quad \text{Ec. (29 - 4)}$$

$$C2 = (224697.1428 - 169434.1698) \text{ kg/h}$$

$$\mathbf{C2 = 55262.973 \text{ kg/h}}$$

4.2.3 Balance de energía del sistema

El balance de energía realizado a la simulación de deshidratación y recuperación de bioetanol por destilación asistida por bomba de calor y por oscilación de presión, se lo realiza como un método adicional de validación de la simulación, realizándolo de manera parcial y resumida para los equipos más importantes para encontrar la potencia contribuida o el trabajo que necesita para funcionar.

4.2.3.1 Balance de energía en la bomba

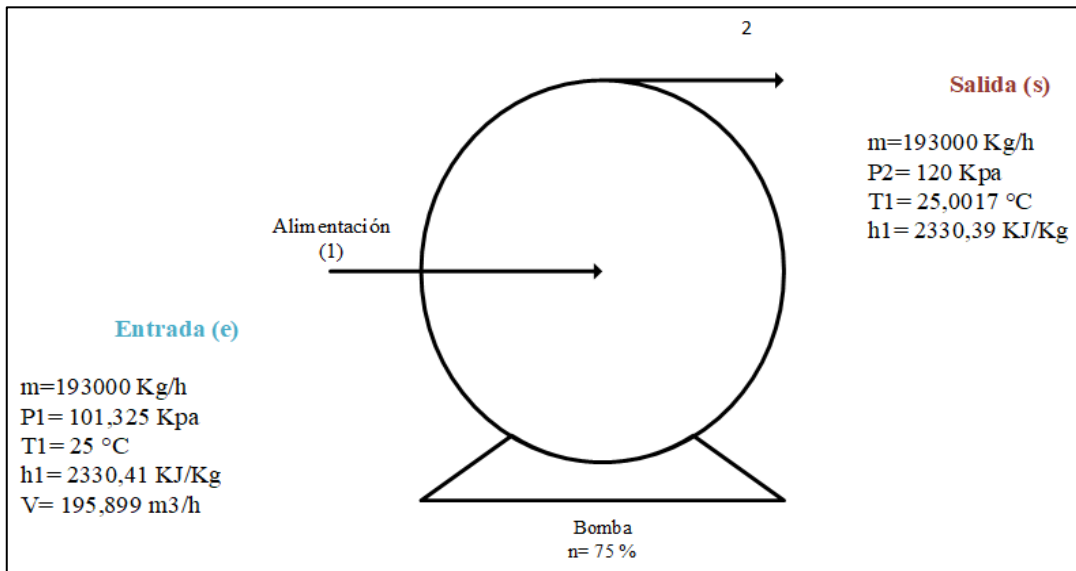


Ilustración 7-4: Diagrama de balance general de energía en la bomba

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

$$Q_e + W_e + \sum me \left(h_e + \frac{V_e^2}{2} + g_e \right) = Q_s + W_s + \sum ms \left(h_s + \frac{V_s^2}{2} + g_s \right) \quad \text{Ec. (30 - 4)}$$

Donde:

La bomba permite aumentar la presión de los líquidos mediante la contribución de potencia, por lo tanto:

$$Q = 0$$

$$E_c = 0$$

$$E_p = 0$$

$$W_s = 0$$

$$193000 \frac{\text{Kg}}{\text{h}} * \frac{1\text{h}}{3600 \text{ s}} = 53,611 \text{ Kg/s}$$

$$m_e = m_s$$

$$W_e + m_e(h_e) = m_s(h_s) \quad \text{Ec. (31 - 4)}$$

Por lo tanto,

$$W_e = m (h_s - h_e)$$

$$W_e = 53,611 \text{ Kg/s } (2330,41 - 2330,39)\text{kJ/Kg}$$

$$W_e = 1,0722 \text{ kJ/s}$$

$$W_e = 1,0722 \text{ KW}$$

$$1,0722 \text{ KW} * \frac{0,001 \text{ MW}}{1 \text{ KW}} = 0,0010722 \text{ MW}$$

$$W_e = 0,0010722 \text{ MW}$$

Por unidad de masa

Procede a realizar el cálculo de la potencia haciendo uso de los volúmenes específicos, para comprobar que la obtención de respuestas similares al balance de energía y la simulación.

v = volumen específico que entra a la bomba siempre se aproxima al volumen del líquido saturado.

$$W = -vdp \quad \text{Ec. (32 - 4)}$$

$$W = -v(P_2 - P_1)$$

Tabla A-5 para líquido saturado

$$P_1 = 101.325 \text{ kpa}$$

$$V_{esp} = 0.001043 \text{ m}^3/\text{kg}$$

$$T_{sat} = 99.97 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$V_1 = V_f = 0.001043 \text{ m}^3/\text{kg}$$

$$W = -V(P_2 - P_1) \quad \text{Ec. (33 - 4)}$$

$$W = -0.001043 \text{ m}^3/\text{kg} (120 - 101.325)\text{kpa}$$

$$W = -0.01947 \text{ kJ/kg} \text{ (Consumo potencia)}$$

W en Kw

$$\dot{W}B = \dot{m}WB \quad \text{Ec. (34 - 4)}$$

$$\dot{m} = \frac{\dot{V}}{Vd \text{ esp}} = \frac{0.05441 \text{ m}^3/\text{s}}{0.001043 \text{ m}^3/\text{kg}}$$

$$\dot{m} = 52.1668 \text{ kg/s}$$

$$\dot{W}B = \dot{m}WB$$

$$\dot{W}B = 52.1668 \text{ kg/s}(0.01947 \text{ kJ/kg})$$

$$W = 1.01568 \text{ kw}$$

$$1.01568 \text{ kw} * \frac{0.001 \text{ MW}}{1 \text{ kw}} = 0.001015 \text{ MW}$$

1.1.1. Balance de energía en el intercambiador de calor

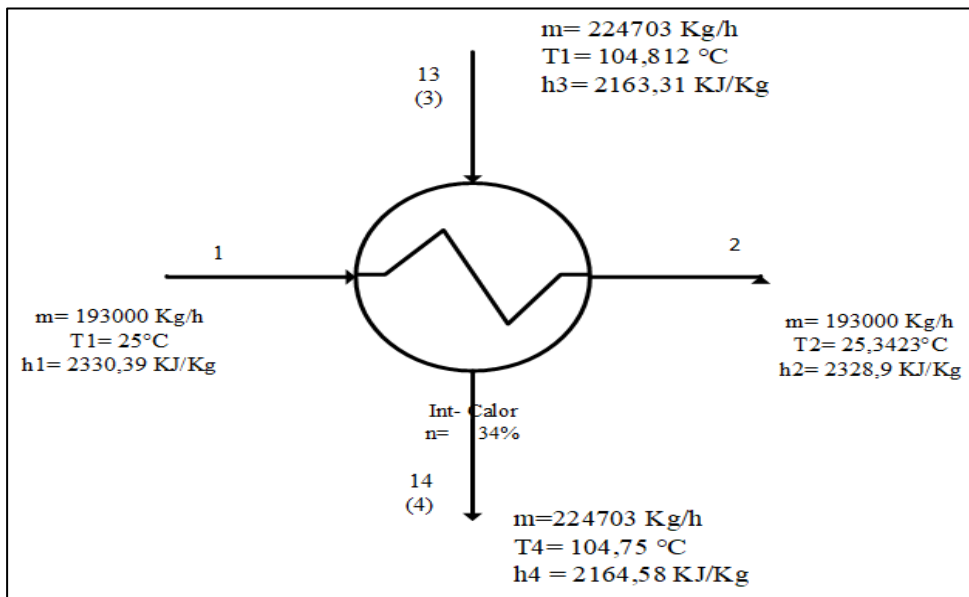


Ilustración 8-4: Diagrama de balance general de energía en el intercambiador de calor

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

$$Q_e + W_e + \sum me \left(h_e + \frac{V_e^2}{2} + g_e \right) = Q_s + W_s + \sum ms \left(h_s + \frac{V_s^2}{2} + g_s \right) \quad \text{Ec. (30 - 4)}$$

Donde:

El intercambiador de calor permite variar la temperatura de los líquidos mediante el calor que ingresa al sistema, por lo tanto:

$$Q_s = 0$$

$$E_c = 0$$

$$E_p = 0$$

$$W = 0$$

$$224703 \frac{\text{Kg}}{\text{h}} * \frac{1\text{h}}{3600\text{ s}} = 62,4175 \text{ Kg/s}$$

$$m_e = m_s$$

$$Q_e + m_e(h_e) = m_s(h_s) \quad \text{Ec. (35 - 4)}$$

Por lo tanto,

$$Q_e = m (h_s - h_e)$$

$$Q_e = 62,4175 \text{ Kg/s} (2164,58 - 2163,31) \text{ kJ/Kg}$$

$$Q_e = 79,2702 \text{ kJ/s}$$

$$Q_e = 79,2702 \text{ KW}$$

$$79,2702 \text{ KW} * \frac{0,001 \text{ MW}}{1 \text{ KW}} = 0,07927 \text{ MW}$$

$$Q_e = 0,07927 \text{ MW}$$

4.2.3.2 Balance de energía en el compresor

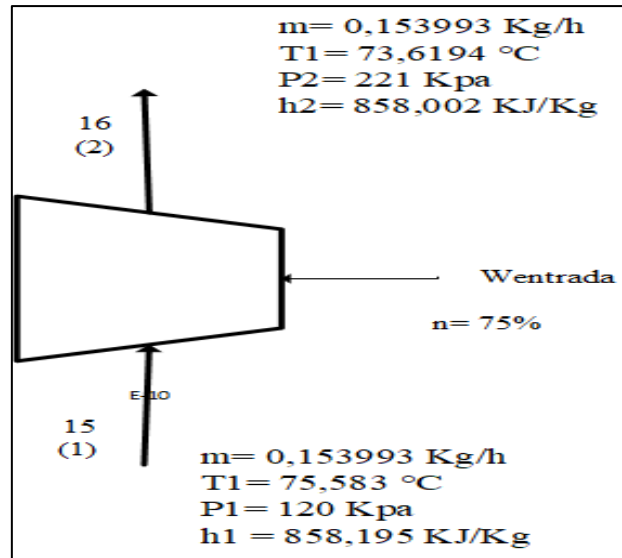


Ilustración 9-4: Diagrama de balance general de energía en el compresor

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2023

$$Q_e + W_e + \sum m_e \left(h_e + \frac{V_e^2}{2} + g_e \right) = Q_s + W_s + \sum m_s \left(h_s + \frac{V_s^2}{2} + g_s \right) \quad \text{Ec. (30 - 4)}$$

Donde:

El compresor aumenta la presión de un gas mediante una fuente externa de trabajo, por lo tanto, necesita de trabajo para funcionar.

$$Q = 0$$

$$E_c = 0$$

$$E_p = 0$$

$$W_s = 0$$

$$0,153993 \frac{\text{Kg}}{\text{h}} * \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 4,2775 \times 10^{-5} \text{ Kg/s}$$

$$m_e = m_s$$

$$W_e + m_e(h_e) = m_s(h_s) \quad \text{Ec. (36 - 4)}$$

Por lo tanto,

$$W_e = m(h_e - h_s)$$

$$W_e = 4,2775 \times 10^{-5} \text{ Kg/s} (858,195 - 858,002) \text{ kJ/Kg}$$

$$W_e = 8,2557 \times 10^{-6} \text{ kJ/s}$$

$$W_e = 8,2557 \times 10^{-6} \text{ KW}$$

$$8,2557 \times 10^{-6} \text{ KW} * \frac{0,001 \text{ MW}}{1 \text{ KW}} = 8,2557 \times 10^{-9} \text{ MW}$$

$$W_e = 8,2557 \times 10^{-9} \text{ MW}$$

4.3 Red neuronal artificial

4.3.1 Base de datos de la RNA

De la base de datos, se utilizaron 150 datos para entrenar la red neuronal artificial y 51 datos para validar la red neuronal artificial, este conjunto de datos se puede observar en el ANEXO A y ANEXO B respectivamente.

4.3.2 Desarrollo de la RNA

El desarrollo y la programación de la RNA en Matlab se describen en el . La red neuronal artificial tiene una arquitectura que consta de 6 neuronas en la capa de entrada, 40 neuronas en la capa oculta y 4 neuronas en la capa de salida como se puede observar a continuación.

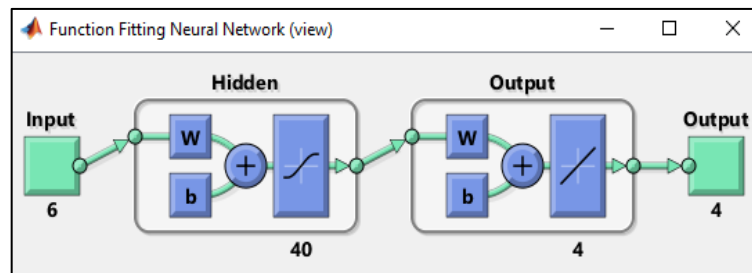


Ilustración 10-4: Arquitectura de la RNA.

Fuente: Software Matlab (2022).

4.3.3 Entrenamiento de la RNA

Las pruebas de entrenamiento realizadas se describen en la siguiente tabla, donde es posible observar la correlación del entrenamiento, validación y prueba interna de la RNA. Los resultados del entrenamiento de la RNA se reportan en el ANEXO D.

Tabla 7-4: Pruebas de entrenamiento.

Arquitectura	Bayesian Regularization (BR)				Levenberg Marquardt (LM)					Scaled Conjugate Gradient (SCG)				
	R _E	R _P	R _T	MSE	R _E	R _V	R _P	R _T	MSE	R _E	R _V	R _P	R _T	MSE
6-05-4	0,98	0,99	0,98	1,97E-03	0,99	1,00	0,95	0,98	3,70E-04	0,97	0,94	0,97	0,96	7,56E-03
6-10-4	1,00	0,84	0,96	4,98E-05	1,00	0,96	0,91	0,98	4,99E-03	0,99	0,94	0,95	0,97	7,32E-03
6-20-4	1,00	0,84	0,97	1,91E-05	0,99	0,99	0,97	0,99	1,60E-03	0,98	0,97	0,96	0,98	3,40E-03
6-40-4	1,00	0,93	0,99	2,81E-08	0,99	0,97	0,92	0,98	2,49E-03	0,98	0,95	0,97	0,97	6,44E-03
6-80-4	1,00	0,87	0,97	5,77E-13	1,00	0,88	0,83	0,96	1,52E-02	0,95	0,77	0,75	0,89	3,82E-02
6-100-4	1,00	0,87	0,98	6,29E-13	0,99	0,77	0,69	0,89	3,78E-02	0,98	0,76	0,80	0,91	3,82E-02
6-150-4	1,00	0,89	0,98	5,36E-13	1,00	0,57	0,51	0,79	1,04E-01	0,91	0,54	0,41	0,71	9,94E-02
6-200-4	1,00	0,86	0,98	5,87E-13	1,00	0,62	0,64	0,74	1,78E-01	0,99	0,38	0,39	0,63	1,40E-01
6-250-4	1,00	0,86	0,98	6,42E-13	1,00	0,33	0,37	0,60	3,95E-01	0,95	0,37	0,33	0,61	2,80E-01
6-300-4	1,00	0,86	0,98	7,21E-13	1,00	0,15	0,34	0,54	4,78E-01	0,54	0,02	0,34	0,34	9,03E-01
6-400-4	1,00	0,90	0,98	7,11E-13	1,00	0,19	0,17	0,40	6,02E-01	0,55	0,21	0,38	0,39	9,54E-01

R_E: Correlación del entrenamiento.
R_V: Correlación de la validación.
R_P: Correlación de la prueba.
R_T: Correlación total de aprendizaje.

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Fuente: Software DWSIM (2022).

Según los resultados descritos en la tabla anterior, la red neuronal tuvo un mejor aprendizaje con el algoritmo de Bayesian Regularization (BR) al emplear 40 neuronas en la capa oculta. La correlación de los resultados y el error de predicción se describen a continuación.

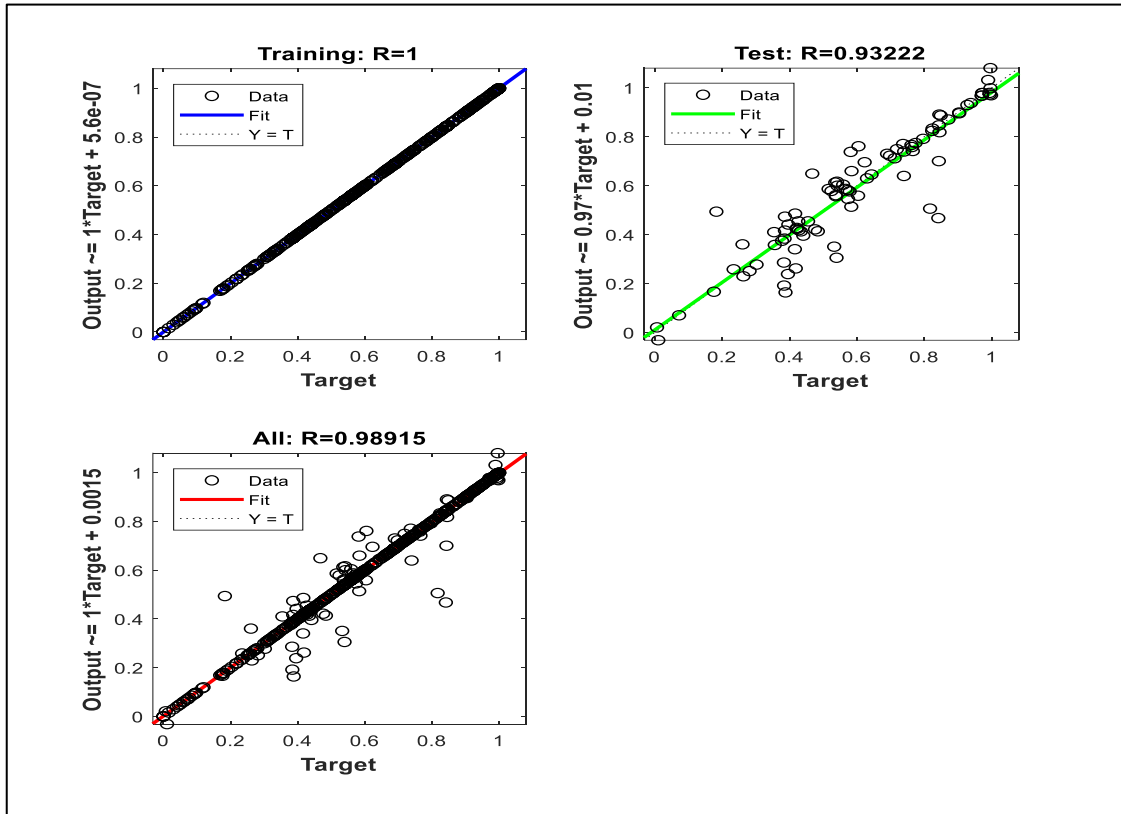


Ilustración 11-4: Correlación del aprendizaje de la RNA con 40 neuronas.

Fuente: Software Matlab (2022).

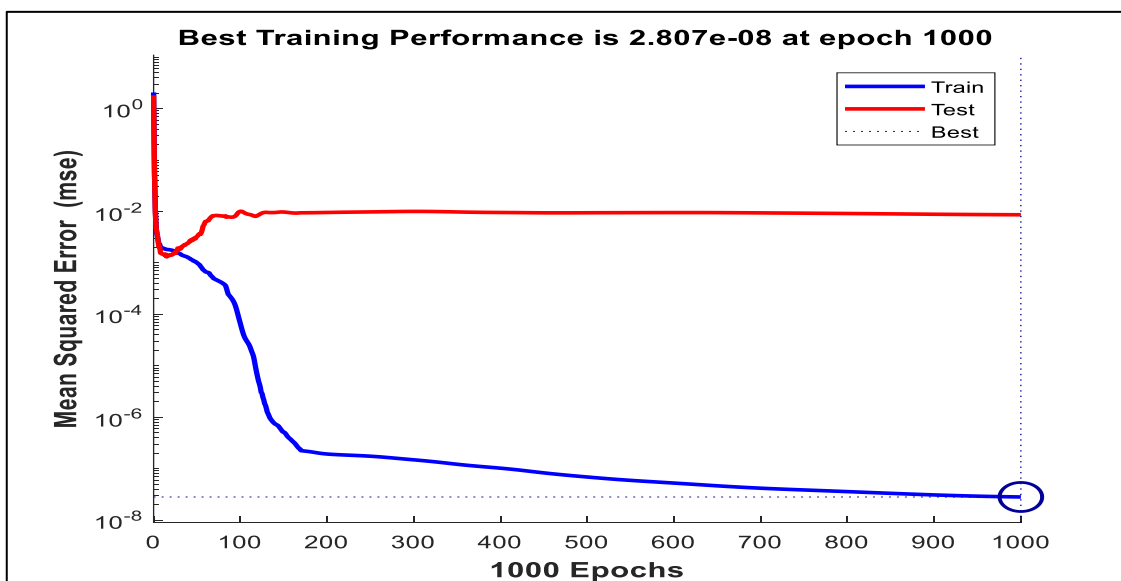


Ilustración 12-4: Error de predicción de la RNA con 40 neuronas.

Fuente: Software Matlab (2022).

4.4 Validación por análisis estadístico

El código de validación y los resultados de la validación se describen en el ANEXO E y ANEXO F respectivamente. Los gráficos y resultados de la validación de la predicción por análisis estadístico mediante la varianza de la media con ANOVA se describen a continuación.

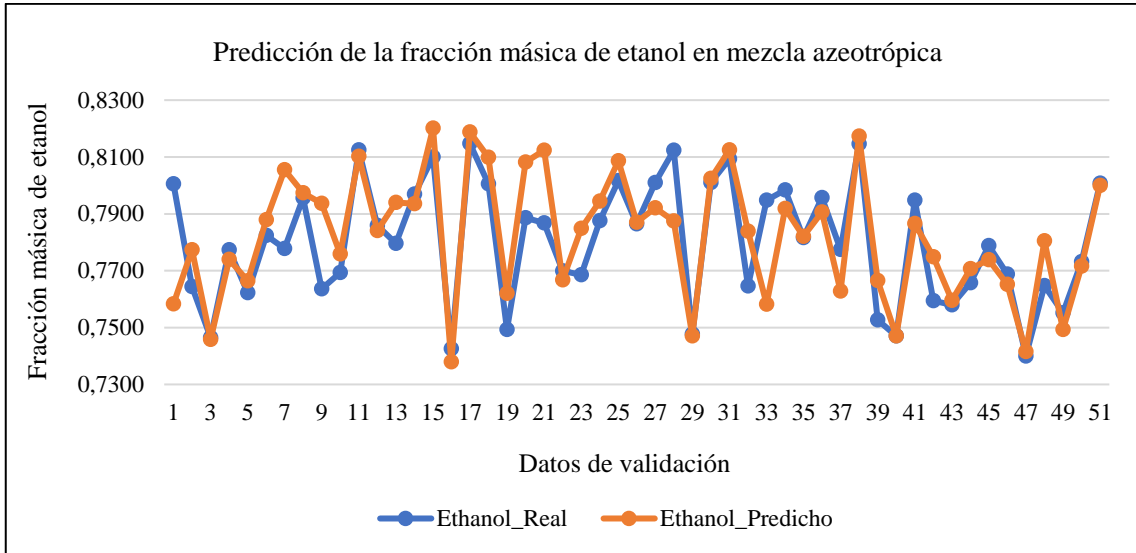


Ilustración 13-4: Predicción de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 8-4: Medias de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.

Variable	Casos	Media	Error Est. (s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Ethanol_Real	51	0,779983	0,00299863	0,775776	0,784189
Ethanol_Predicho	51	0,782175	0,00299863	0,777968	0,786381
Total	102	0,781079			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 9-4: ANOVA de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,000122511	1	0,000122511	0,27	0,6064
Intra grupos	0,045858	100	0,00045858		
Total (Corr.)	0,0459805	101			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

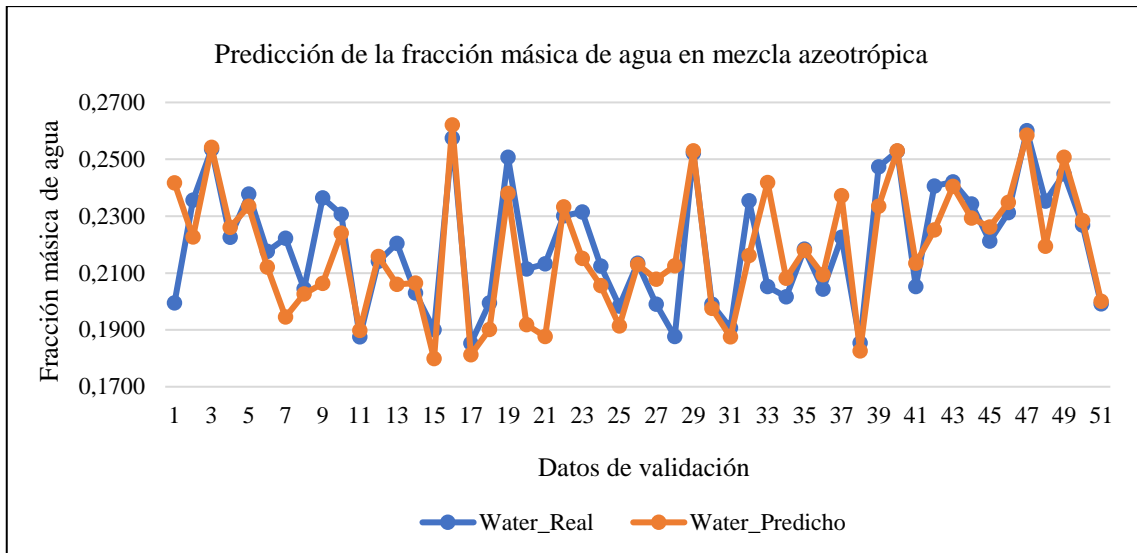


Ilustración 14-4: Predicción de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 10-4: Medias de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.

Variable	Casos	Media	Error Est. (s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
Water_Real	51	0,220017	0,00299861	0,21581	0,224224
Water_Predicho	51	0,217825	0,00299861	0,213618	0,222032
Total	102	0,218921			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 11-4: ANOVA de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,000122524	1	0,000122524	0,27	0,6064
Intra grupos	0,0458573	100	0,000458573		
Total (Corr.)	0,0459799	101			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

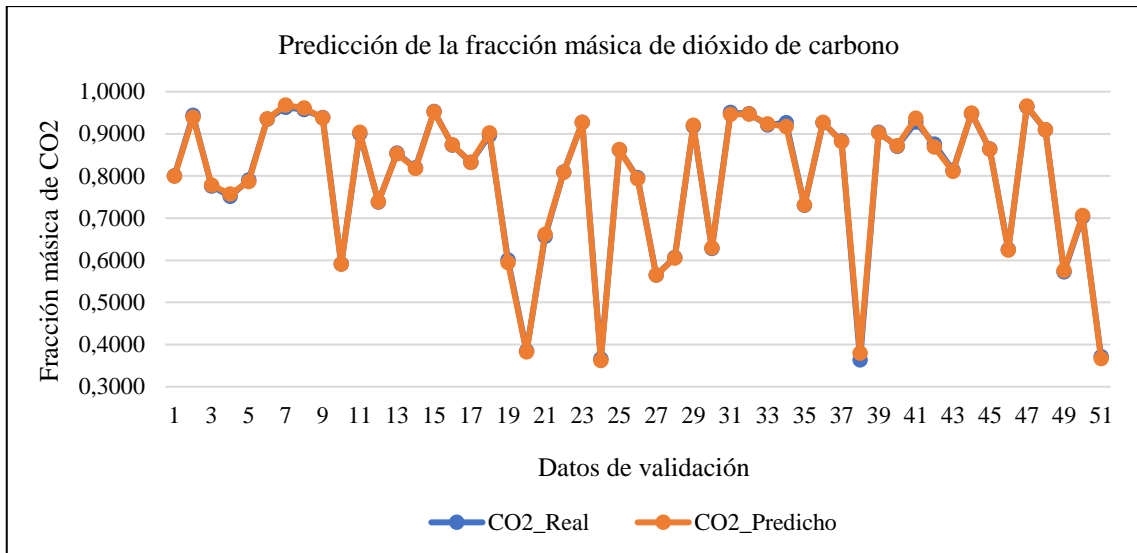


Ilustración 15-4: Predicción de la fracción másica de dióxido de carbono.

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 12-4: Medias de la fracción másica de dióxido de carbono.

Variable	Casos	Media	Error Est. (s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
CO2_Real	51	0,792849	0,0231816	0,760327	0,82537
CO2_Predicho	51	0,800863	0,0231816	0,768342	0,833384
Total	102	0,796856			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 13-4: ANOVA de la fracción másica de dióxido de carbono.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00163788	1	0,00163788	0,06	0,8074
Intra grupos	2,74068	100	0,0274068		
Total (Corr.)	2,74231	101			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

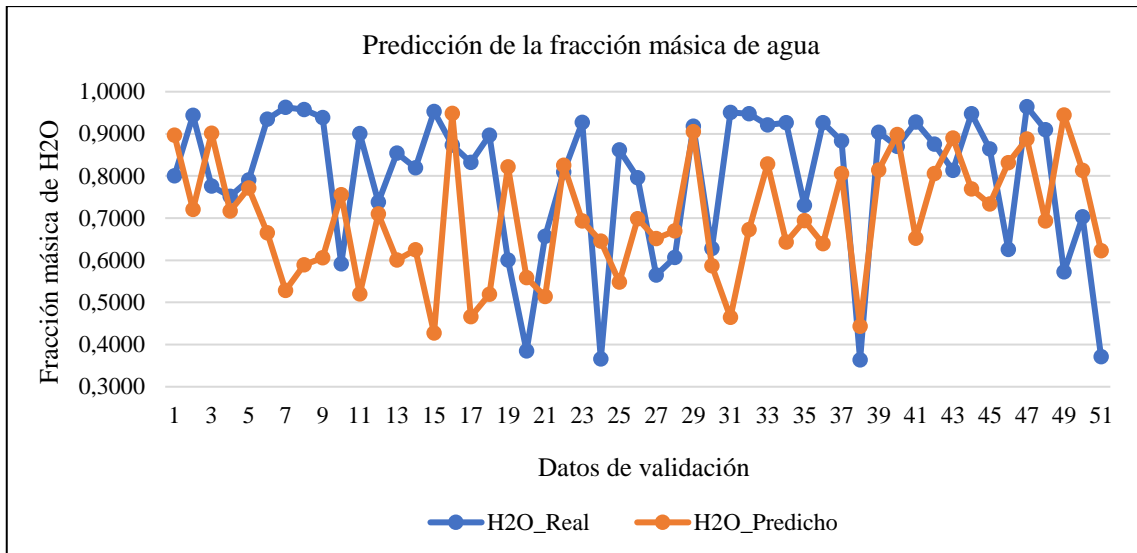


Ilustración 16-4: Predicción de la fracción másica de agua.

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 14-4: Medias de la fracción másica de dióxido de carbono.

Variable	Casos	Media	Error Est. (s agrupada)	Límite Inferior	Límite Superior
H2O_Real	51	0,713243	0,0190201	0,68656	0,739926
H2O_Predicho	51	0,698697	0,0190201	0,672014	0,72538
Total	102	0,70597			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Tabla 15-4: ANOVA de la fracción másica de dióxido de carbono.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,00539591	1	0,00539591	0,29	0,5898
Intra grupos	1,84499	100	0,0184499		
Total (Corr.)	1,85038	101			

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Las tablas de la media descritas muestran las medias para cada columna de datos. También muestra el error estándar de cada media, el cual es una medida de la variabilidad de su muestreo. El error estándar es el resultado de dividir la desviación estándar mancomunada entre el número de observaciones en cada nivel. La tabla también muestra un intervalo alrededor de cada media. Los intervalos mostrados actualmente están basados en el procedimiento de la diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. Están contruidos de tal manera que, si dos medias son iguales, sus intervalos se traslaparán un 95,0% de las veces. Puede ver gráficamente los intervalos seleccionando Gráfica de Medias de la lista de Opciones Gráficas (ver ANEXO G). Las tablas ANOVA descomponen la varianza de los datos en dos componentes: un componente entre grupos y un componente intragrupo. La razón-F, es el cociente entre el estimado entre grupos y el estimado intragrupo. A continuación, se resumen los resultados del análisis estadístico.

Tabla 16-4: Resumen estadístico de la validación de la predicción.

Parámetro	Variable	Media	Razón-F	Valor-P
Fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica.	Ethanol_Real	0,779	0,27	0,606
	Ethanol_Predicho	0,782		
Fracción másica de agua en mezcla azeotrópica.	Water_Real	0,220	0,27	0,606
	Water_Predicho	0,217		
Fracción másica de dióxido de carbono.	CO2_Real	0,792	0,06	0,807
	CO2_Predicho	0,800		
Fracción másica de agua.	H2O_Real	0,713	0,29	0,589
	H2O_Predicho	0,698		

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

Puesto que el valor-P de la razón-F es mayor que el nivel de significancia ($\alpha = 0,05$), se acepta la hipótesis nula que plantea la igualdad de medias, por lo tanto, el análisis ANOVA describe con un nivel del 95,0% de confianza, que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los resultados reales y predichos por la RNA.

Tabla 17-4: Predicción de la GUI.

Entradas						Ethanol (Mezcla)			Water (Mezcla)			CO2			H2O		
TA	X_mass _EtOH	X_mass _CO2	X_mas s_H2O	PC	TC	Ethano Real	Ethanol_ Predicho	Error (%)	Water_ Real	Water_ Predicho	Error (%)	CO2_ Real	CO2_ Predicho	Error (%)	H2O_ Real	H2O_ Predicho	Error (%)
40	0,2	0,007	0,793	432	315	0,8101	0,8102	0,01	0,1898	0,1898	0,00	0,9603	0,9603	0,00	0,4985	0,4985	0,00
13	0,40	0,002	0,598	308	357	0,7967	0,7983	0,20	0,2033	0,2017	0,81	0,6184	0,6177	0,12	0,5998	0,5894	1,74
28	0,50	0,003	0,497	250	319	0,8130	0,8140	0,12	0,1870	0,1860	0,54	0,9134	0,9138	0,04	0,4986	0,4917	1,38
11	0,40	0,006	0,594	299	322	0,7973	0,7976	0,04	0,2027	0,2024	0,16	0,9167	0,9168	0,01	0,5979	0,5956	0,38
17	0,30	0,004	0,696	333	345	0,7814	0,7812	0,03	0,2186	0,2188	0,09	0,7862	0,7863	0,01	0,6995	0,7006	0,17
19	0,40	0,008	0,592	385	314	0,7956	0,7973	0,22	0,2044	0,2027	0,85	0,9577	0,9615	0,40	0,5970	0,5892	1,29
16	0,10	0,008	0,892	330	324	0,7478	0,7475	0,04	0,2522	0,2525	0,10	0,9179	0,9200	0,23	0,8998	0,9027	0,33
50	0,10	0,009	0,891	337	329	0,7475	0,7515	0,53	0,2525	0,2485	1,59	0,8977	0,8967	0,11	0,8999	0,8736	2,93

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

El error de predicción de la interfaz gráfica de usuario es menor al 3%.

CONCLUSIONES

- La RNA desarrollada predice la deshidratación y recuperación de bioetanol en un proceso de destilación, las entradas corresponden a la temperatura, la fracción másica de etanol, la fracción másica de agua, fracción másica de dióxido de carbono en la corriente de alimentación; la presión y temperatura de la columna de destilación y las salidas corresponde a la fracción másica de dióxido de carbono, la fracción másica de agua, así como la fracción másica de etanol y agua en la mezcla azeotrópica.
- La simulación del proceso de recuperación de bioetanol en DWSIM se validó mediante la simulación en ASPEN realizada por Singh, da Cunha y Rangaiah (2019). Los resultados presentaron un error relativo porcentual de 6,71%, 6,55% y 0% respecto a la fracción másica de Etanol, la fracción másica de dióxido de carbono y fracción másica de agua.
- El análisis de optimización se centró en la primera columna de destilación donde ocurre la separación del dióxido de carbono de la corriente de destilado a través de un desgasificador, en el fondo de la columna se separa el agua y en la corriente lateral se obtiene una mezcla azeotrópica etanol-agua. Los parámetros de operación que indican directamente en los resultados son la temperatura y la presión de la columna. A través del análisis de optimización se obtuvo una base de 201 datos para desarrollar la RNA. Se utilizaron 150 datos para entrenar y 51 datos para validar la predicción.
- Se diseñó una RNA de aprendizaje supervisado con el algoritmo de Bayesian Regularization y una arquitectura conformada por 6 neuronas de entrada, 40 neuronas en la capa oculta y 4 neuronas en la capa de salida. La capacidad de predicción durante el entrenamiento de la red se evaluó a través del error cuadrático medio óptimo ($MSE = 2,81E-08$) y la correlación entre los datos reales y predichos a través del coeficiente de Pearson ($R = 0,99$).
- Para el análisis estadístico de validación RNA se utilizó el análisis ANOVA para determinar la varianza entre las medias de los resultados reales y predichos. Puesto que el valor-P fue superior al nivel de significancia ($\alpha = 0,05$) en todas las variables comparadas, se aceptó la hipótesis nula que plantea la igualdad de medias, por lo tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los resultados reales y predichos por la RNA.

RECOMENDACIONES

- Se recomienda comparar la simulación con los resultados obtenidos en otro software de licencia libre como es COCO simulator.
- Evaluar otros tipos de RNA y sus componentes, entre ellos, diferentes funciones de activación, cantidad de capas ocultas, algoritmos de entrenamiento y tasas de aprendizaje.
- Utilizar la interfaz gráfica como herramienta tecnológica asociada con la enseñanza de simulación de procesos químicos.

GLOSARIO

Algoritmo de entrenamiento: El algoritmo de entrenamiento y aprendizaje encuentra patrones que se encuentren presentes en los datos de entrenamiento que asignan los atributos de los datos de entrada al destino (la respuesta que desea predecir) y genera un modelo de ML que captura dichos patrones (Isasi y Galván, 2004, p.12). El proceso de entrenamiento de un modelo de ML consiste en proporcionar datos de entrenamiento de los cuales aprender a un algoritmo de ML (es decir, el algoritmo de aprendizaje). El término modelo de ML se refiere al artefacto de modelo que se crea en el proceso de entrenamiento (Isasi y Galván, 2004, p.13).

Biocombustible: Se entiende por biocombustible aquellos combustibles que se obtienen de biomasa. La biomasa es el término que en sentido amplio, se refiere a cualquier tipo de materia orgánica que haya tenido su origen inmediato en el proceso biológico de organismos recientemente vivos, como plantas, o sus desechos metabólicos (el estiércol); el concepto de biomasa comprende productos tanto de origen vegetal como de origen animal (Salinas y Gasca, 2010, p. 76). En la actualidad se ha aceptado este término para denominar al grupo de productos energéticos y materias primas de tipo renovable que se origina a partir de la materia prima orgánica formada por vía biológica. Quedan por tanto fuera de este concepto los combustibles fósiles o los productos orgánicos derivados de ellos, aunque también tuvieron su origen biológico en épocas remotas. Hoy en día se pueden diferenciar distintos tipos de biomasa (Salinas y Gasca, 2010, p. 76).

Destilación azeotrópica: La destilación azeotrópica aplica a una clase de operación de destilación, caracterizada por la separación de componentes usando las propiedades azeotrópicas del sistema en cuestión (Ortega y Ojeda, 2012, p. 23). La destilación azeotrópica es usada para separar componentes cuyos puntos de ebullición estén muy cercanos, o aún en casos de formación de azeótropos, donde la destilación convencional es costosa o prácticamente imposible (Ortega y Ojeda, 2012, p. 23).

Mezcla azeotrópica: Es una mezcla líquida de dos o más compuestos químicos que tienen un comportamiento similar a como si estuvieran formados de manera individual y con características de punto de ebullición definidos. Los puntos de ebullición en estas mezclas suelen ser más bajos o más altos que los de cualquier componente que forme parte de la mezcla, por esta razón no es posible modificar su composición por etapas sucesivas de evaporación y condensación (destilación fraccionada) (Cavendish Marshall Corporation, 2003, p.663).

Mantiene su composición y punto de ebullición durante un proceso de destilación. Este comportamiento de los azeótropos se puede producir cuando una mezcla hierve o ebulle para producir vapor, el cual, cuenta con la misma composición del líquido (Noguera, 2020).

Red Neuronal Artificial: Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) son modelos matemáticos y computacionales basados en el complejo comportamiento del cerebro humano, específicamente

de las neuronas biológicas. La capacidad que poseen para aprender por medio de algoritmos de entrenamiento, han permitido su uso y aplicación en todas las ciencias (Isasi y Galván, 2004, p.3).

Simulación de procesos: La simulación de procesos industriales está definida como el uso de modelos informáticos para probar virtualmente los métodos y procedimientos de fabricación, incluidos procesos como producción, inventario, montaje y transporte, imita el funcionamiento que podrían llegar a darse en los procesos o sistemas del mundo real con el uso de modelos (Aula 21, 2023). El modelo representa los comportamientos y las características clave del proceso o sistema seleccionado, mientras que la simulación representa cómo evoluciona el modelo en diferentes condiciones a lo largo del tiempo (Aula 21, 2023).

BIBLIOGRAFÍA

ALBARRACÍN, K., JARAMILLO, L. y ALBUJA, M. "Obtención de Bioetanol Anhidro a Partir de Paja (*Stipa ichu*)". *Revista Politécnica* [en línea], 2015, vol. 36, no. 2, pp. 4. ISSN 1390-0129. Disponible en: <https://revistapolitecnica.epn.edu.ec/images/revista/volumen36/tomo2/ObtenciondeBioetanolAnhidroaPartirdePaja.pdf>.

ALZATE, A. *Modelado y control de una columna de destilación binaria* [en línea], 2010, S.l.: National University of Colombia. Disponible en: <https://www.researchgate.net/publication/306373786%0D>.

ASPENTECH. Aspen Hysys. *IA industrial Aspen* [en línea], 2022a. Disponible en: <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspens-hysys>.

ASPENTECH. Aspen Plus. *IA industrial Aspen* [en línea], 2022b. Disponible en: <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspens-hysys>.

ATRIA INNOVATION. Qué son las redes neuronales y sus funciones. *Atria Innovation* [en línea], 2019. Disponible en: <https://www.atriainnovation.com/que-son-las-redes-neuronales-y-sus-funciones/>.

AULA 21. Simulación de Procesos Industriales. *Centro de Formación Técnica para la Industria* [en línea], 2017. Disponible en: <https://www.cursosaula21.com/que-es-la-simulacion-de-procesos-industriales/>.

BAUTISTA, B. Generación de bioetanol como combustible alternativo a partir de compuestos lignocelulósicos a nivel laboratorio. *Diciembre* [en línea], 2017, vol. 4, no. 13, pp. 49-57. Disponible en: www.ecorfan.org/bolivia.

BIETANOL RIO CUARTO S.A. Bioetanol. [en línea], 2021. Disponible en: <https://www.bio4.com.ar/productos/bioetanol/>.

BONIFACINO, S., RESQUÍN, F., LOPRETTI, M., BUXEDAS, L., VÁZQUEZ, S., GONZÁLEZ, M., SAPOLINSKI, A., HIRIGOYEN, A., DOLDÁN, J., RACHID, C. y CARRASCO-LETELIER, L. "Bioethanol production using high density Eucalyptus crops in

Uruguay". *Heliyon*, 2021, vol. 7, no. 1, pp. 1-9. ISSN 24058440. DOI 10.1016/j.heliyon.2021.e06031.

CARDONA ALZARE, C.A., SÁNCHEZ TORO, O.J., MONTOYA RODRÍGUEZ, M.I. y QUINTERO SUÁREZ, J.A. "Simulación de los procesos de obtención de etanol a partir de caña de azúcar y maíz". *Scientia et Technica*, 2005, vol. 3, no. 28, pp. 187-192.

CAVENDISH MARSHALL CORPORATION. "*How it Works*". *Science and Technology* [en línea], 2003. Third Edit. New York: s.n. ISBN 0-7614-7314-4. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=eEF4rcwcKoUC&printsec=copyright#v=onepage&q&f=false>.

CHEMSTATIONS. *Chemcad* [en línea], 2022. Disponible en: <https://www.chemstations.com/>.

CHIA, D.N., DUANMU, F. y SORENSEN, E. "Optimal Design of Distillation Columns Using a Combined Optimisation Approach". *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2021, vol. 50, pp. 153-158. DOI 10.1016/B978-0-323-88506-5.50025-5. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780323885065500255>.

COCO. COCO: Cape open to Cape open. *Simulation environment* [en línea], 2021. Disponible en: <https://www.cocosimulator.org/>.

CORNEJO ARTEAGA, P.M. de L. Aplicaciones del Alcohol Etílico. *Boletines científicos: Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo* [en línea], 2021. Disponible en: <https://www.uaeh.edu.mx/scige/boletin/prepa3/n5/m7.html>.

EKPENYONG, M., ASITOK, A., ANTAI, S., EKPO, B., ANTIGHA, R. y OGAREKPE, N. "Statistical and Artificial Neural Network Approaches to Modeling and Optimization of Fermentation Conditions for Production of a Surface / Bioactive Glyco - lipo - peptide". *International Journal of Peptide Research and Therapeutics* [en línea], 2021, vol. 27, no. 1, pp. 475-495. ISSN 1573-3904. DOI 10.1007/s10989-020-10094-8. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s10989-020-10094-8>.

EZE, P.C. y MASUKU, C.M. "Vapour – liquid equilibrium prediction for synthesis gas conversion using artificial neural networks". *South African Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2018, vol. 26, no. July, pp. 80-85. ISSN 1026-9185. DOI 10.1016/j.sajce.2018.10.001. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.sajce.2018.10.001>.

FERCHICHI, M., HEGELY, L. y LANG, P. "Economic and environmental evaluation of heat pump-assisted pressure-swing distillation of maximum-boiling azeotropic mixture". *Energy* [en línea], 2022, vol. 239, pp. 122608. ISSN 0360-5442. DOI 10.1016/j.energy.2021.122608. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.122608>.

HOLMATOV, B., SCHYNS, J.F., KROL, M.S., GERBENS-LEENES, P.W. y HOEKSTRA, A.Y. "Can crop residues provide fuel for future transport? Limited global residue bioethanol potentials and large associated land, water and carbon footprints". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2021, vol. 149, pp. 15. ISSN 18790690. DOI 10.1016/j.rser.2021.111417. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111417>.

HUATANGARI, L.Q., TOLEDO, L.O. y VALVERDE, N.K. "Red neuronal artificial para estimar un índice de calidad de agua Artificial neural network to estimate an index of water quality". *Enfoque* [en línea], 2022, vol. 11, no. 2, pp. 109-120. DOI 10.29019/enfoque.v11n2.633.

INTELIGENCIA, R.D.E. Bioetanol [en línea], 2017, pp. 101. Disponible en: https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/296708/IT_Bioetanol_01022018.pdf.

ISASI, P. y GALVÁN, I.M. *Redes Neuronales Artificiales un enfoque práctico* [en línea]. Pearson. Madrid: s.n., 2004. Disponible en: <http://librodigital.sangregorio.edu.ec/librosusgp/08867.pdf>.

JESÚS, R.J. De, MANUEL, S.J., ALBERTO, H.J. y JACOB, Á.F. Sistema sensor para el monitoreo ambiental basado en redes Neuronales Sensor System Based in Neural Networks for the Environmental Monitoring [blog], 2016, no. número 2.

KHAYET, M. y COJOCARU, C. "Artificial neural network modeling and optimization of desalination by air gap membrane distillation". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2012, vol. 86, pp. 171-182. DOI 10.1016/j.seppur.2011.11.001. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1383586611006459>.

KISS, A.A., LUO, H. y BILDEA, C.S. "Energy Efficient Bioethanol Purification by Heat Pump Assisted Extractive Distillation". *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2022, vol. 37, pp. 1307-1312. DOI <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63577-8.50063-2>. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63577-8.50063-2>.

KOOIJMAN, H. y TAYLOR, R. ChemSep. Modeling Separation Processes. [en línea]. 2022. Disponible en: <http://www.chemsep.org/program/index.html>.

LEE, H., YOU, T. y CHEN, C. "Energy efficient design of bio-butanol purification process from acetone butanol ethanol fermentation". *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* [en línea], 2022, vol. 130, pp. 104015. ISSN 1876-1070. DOI 10.1016/j.jtice.2021.08.003. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.08.003>.

LEE, S.C., WOO, H.C. y KIM, Y.H. "Energy-efficient ethanol recovery process using 2-methyl pentanol extraction". *Fuel* [en línea], 2022, vol. 310, no. PB, pp. 122393. ISSN 0016-2361. DOI 10.1016/j.fuel.2021.122393. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.122393>.

LOY, Y.Y., LEE, X.L. y RANGAIAH, G.P. "Bioethanol recovery and purification using extractive dividing-wall column and pressure swing adsorption: An economic comparison after heat integration and optimization". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2015, vol. 149, pp. 413-427. DOI 10.1016/j.seppur.2015.06.007. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1383586615300332>.

MAHMUD, S., HAIDER, A.S.M.R., SHAHRIAR, S.T., SALEHIN, S., HASAN, A.S.M.M. y JOHANSSON, M.T. "Bioethanol and biodiesel blended fuels — Feasibility analysis of biofuel feedstocks in Bangladesh". *Energy Reports* [en línea], 2022, vol. 8, pp. 1741-1756. ISSN 23524847. DOI 10.1016/j.egyr.2022.01.001. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2022.01.001>.

MANOHAR, B. y DIVAKAR, S. "An artificial neural network analysis of porcine pancreas lipase catalysed esterification of anthranilic acid with methanol". *Process Biochemistry* [en línea], 2005, vol. 40, no. 10, pp. 3372-3376. DOI doi.org/10.1016/j.procbio.2005.03.045.

MAO, W., CAO, Y., SHEN, R., ZHOU, J., ZHOU, X. y LI, W. "Heat integrated technology assisted pressure-swing distillation for the mixture of ethylene glycol and 1,2-butanediol". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2020, vol. 241, pp. 116740. DOI <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.116740>. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.116740>.

MAROTO VALIENTE, Á. y MUÑOZ, A. *Operaciones unitarias y reactores químicos* [en línea], 2013. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia. ISBN 9788436266313. Disponible en:

<https://books.google.com.ec/books?id=1pxZZ76eTZIC&pg=PT136&dq=operaciones+unit%0AArias+destilaci3n&hl=es&sa=X&ved=2ahUKEwjL64Lw1qP3AhUvmeAKHcsTDOsQ6A%0AF6BAgHEAI#v=onepage&q&f=false>.

MATHWORKS. Matlab. *Mathworks* [en lnea], 2022a. Disponible en: <https://la.mathworks.com/products/matlab.html>.

MATHWORKS. Software desimulaci3n. *MATLAB* [en lnea], 2022b. Disponible en: <https://la.mathworks.com/discovery/simulation-software.html>.

MCCABE, W., SMITH, J. y HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical Engineering*. Sptima. S.l.: s.n. 2017. ISBN 9780072848236.

MORÁN, G. y ALVARADO C., D. *Métodos de investigación*. Primera Ed. México: s.n. 2010. ISBN 9786074422191.

MULERO, Á., PIERANTOZZI, M., CACHADIÑA, I. y Di NICOLA, G. "An Artificial Neural Network for the surface tension of alcohols". *Fluid Phase Equilibria* [en lnea], 2017, vol. 449, pp. 28-40. DOI 10.1016/j.fluid.2017.06.003. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381217302248>.

NHIEN, L.C., LONG, N.V.D. y LEE, M. "Novel heat-integrated and intensified biorefinery process for cellulosic ethanol production from lignocellulosic biomass". *Energy Conversion and Management: X* [en lnea], 2017, vol. 141, pp. 367-377. DOI 10.1016/j.enconman.2016.09.077. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890416308767>.

NOGUERA, B. ¿Qué es un azeótropo o mezcla azeotrópica? *IQR: Ingeniería Química* [en lnea], 2020. Disponible en: <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2020/12/que-es-un-azeotropo-o-mezcla-azeotropica.html>.

NOGUERA, B. DWSIM: Simulador de procesos químicos Open Source. *IQR: Ingeniería Química* [en lnea], 2022, Disponible en: <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2022/02/DWSIM-simulador-procesos-quimicos-open-source.html>.

ORTEGA, D. y OJEDA, D. El Desplazamiento Del Azeótropo. [en lnea], 2012, pp. 83. Disponible en: [http://190.242.62.234:8080/jspui/bitstream/11227/119/1/TESIS CASTRO-](http://190.242.62.234:8080/jspui/bitstream/11227/119/1/TESIS_CASTRO-)

OJEDA.pdf.

PATRAȘCU, I., BILDEA, C.S. y KISS, A.A. "Dynamics and control of a heat pump assisted extractive dividing-wall column for bioethanol dehydration". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2017, vol. 119, pp. 66-74. [Consulta: 12 julio 2022]. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2016.12.021. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0263876217300035>.

PLESU POPESCU, A.E., PELLIN, J.L., BONET, J. y LLORENS, J. "Bioethanol dehydration and mixing by heterogeneous azeotropic distillation". *Journal of Cleaner Production*, [en línea], 2021, vol. 320, no. November 2020. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2021.128810.

PONCE C, P. *Inteliencia Artificial con aplicaciones a la ingeniería*. Primera. México: s.n., 2010, ISBN 9786077854838.

REIS, E., GRALHA, C. y MONTEIRO, M.P. "Surveying communities of users of MATLAB and clone languages". *Journal of Computer Languages* [en línea], 2022, vol. 73, no. October, pp. 101170. ISSN 2590-1184. DOI 10.1016/j.cola.2022.101170. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cola.2022.101170>.

ROSARIO, B. Predicción de la concentración de cloroformo en el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo mediante ARN. *Domino de las Ciencias*, 8(3), 2022, Art. 3. <https://doi.org/10.23857/dc.v8i3.2817>.

RUI, L., QING, Y., XIAOMENG, S., XIN, D. y HAO, Y. "Heat-Integrated Pressure-Swing Distillation Process for Separation of a Maximum-Boiling Azeotrope Ethylenediamine/Water". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2016, vol. 105, pp. 1-15. DOI <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.10.038>. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.10.038>.

SALINAS, E. y GASCA, V. "Biocombustibles. *El Cotidiano* [en línea], 2010, pp. 99-116. DOI 10.1787/agr_outlook-2010-6-es. Disponible en: <https://www.redalyc.org/pdf/325/32512739009.pdf>.

SÁNCHEZ, R., ZÁRATE, V., FERNÁNDEZ, M. y NOLASCO, S. Aplicación de redes neuronales artificiales (rna) en la predicción y modelado de la cinética de. aceites y grasas [en

línea], 2017, vol. 1, pp. 138-141. Disponible en: <http://asaga.org.ar/ag/106/AG106.html#p=146>.

SANUSI, I.A., SUINYUY, T.N. y KANA, G.E.B. "Impact of nanoparticle inclusion on bioethanol production process kinetic and inhibitor profile". *Biotechnology Reports* [en línea], 2021, vol. 29, pp. 12. ISSN 2215017X. DOI 10.1016/j.btre.2021.e00585. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.btre.2021.e00585>.

SAULINO, F. "Implicaciones del desarrollo de los biocombustibles para la gestión y el aprovechamiento del agua". *Ministerio Federal de Cooperación Económica y Desarrollo* [en línea], 2011, pp. 67. Disponible en: <https://repositorio.cepal.org/handle/11362/3941>.

SERNA, F., BARRERA, L. y MONTIEL, H. "Impacto social y económico en el uso de biocombustibles". *Journal of Technology Management and Innovation* [en línea], 2012, vol. 6, no. 1, pp. 100-114. ISSN 07182724. DOI 10.4067/S0718-27242011000100009.

SHARMA, N. y SINGH, K. "Model predictive control and neural network predictive control of TAME reactive distillation column". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2012, vol. 59, pp. 9-21. DOI 10.1016/j.cep.2012.05.003. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270112000992>.

SILVA, L., BERMÚDEZ, A. y CASTIBLANCO, D. "La biotecnología aplicada al bioetanol". *Boletín Tecnológico* [en línea], 2012, pp. 1-46. Disponible en: http://www.sic.gov.co/sites/default/files/files/Propiedad Industrial/Boletines_Tecnologicos/BTBioetanol.pdf.

SIMULUC. Softwares utilizados para la simulación de sistemas. *Simulación de procesos* [en línea], 2016, Disponible en: <https://simuluc.wordpress.com/2016/09/12/software-utilizados-para-la-simulacion-de-sistemas/>.

SINGH, A., DA CUNHA, S. y RANGAIAH, G.P. "Heat-pump assisted distillation versus double-effect distillation for bioethanol recovery followed by pressure swing adsorption for bioethanol dehydration". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2019, vol. 210, pp. 574-586. ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2018.08.043. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2018.08.043>.

TAQVI, S.A., DENDENA, L. y MUHADIZIR, S. "Optimization and Dynamics of Distillation Column using Aspen Plus". *Procedia Engineering* [en línea], 2016, vol. 148, pp. 978-984. ISSN

1877-7058. DOI 10.1016/j.proeng.2016.06.484. Disponible en:
<http://dx.doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.484>.

TÉLLEZ, J. y COTE, M. "Alcohol etílico: Un tóxico de alto riesgo para la salud humana socialmente aceptado". *Facultad médica* [en línea], 2006, vol. 54, pp. 32-47. Disponible en:
<http://www.scielo.org.co/pdf/rfmun/v54n1/v54n1a05.pdf>.

VEZA, I., AFZAL, A., MUJTABA, M.A., TUAN, A., BALASUBRAMANIAN, D., SEKAR, M., FATTAH, I.M.R., SOUDAGAR, M.E.M., EL-SEESY, A.I., DJAMARI, D.W., HANANTO, A.L., PUTRA, N.R. y TAMALDIN, N. "Review of artificial neural networks for gasoline , diesel and homogeneous charge compression ignition engine". *Alexandria Engineering Journal* [en línea], 2022, vol. 61, no. 11, pp. 8363-8391. ISSN 1110-0168. DOI 10.1016/j.aej.2022.01.072. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.01.072>.

YANG, A., SU, Y., TENG, L., JIN, S., ZHOU, T. y SHEN, W. "Investigation of energy-efficient and sustainable reactive/pressure-swing distillation processes to recover tetrahydrofuran and ethanol from the industrial effluent". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2020, vol. 250, pp. 117210. DOI <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117210>. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117210>.

YOUNG, C. y STEFFEN, P.G. "Biocombustibles como estrategia de desarrollo". *Polis* [en línea], 2008, vol. 21, pp. 11.


D.B.A.I.
Ing. ...



ANEXOS

ANEXO A: DATOS PARA ENTRENAMIENTO DE LA RNA

Alimentación				Columna		Salidas			
TA	X_mass_EtOH	X_mass_CO2	X_mass_H2O	PC	TC	Ethanol (Mezcla Azeo)	Water (Mezcla Azeo)	CO2	H2O
25	0,10	0,001	0,899	125	313	0,761421	0,238579	0,871602	0,900017
33	0,48	0,004	0,516	310	342	0,808927	0,191072	0,79635	0,518506
25	0,11	0,009	0,881	289	349	0,751809	0,248191	0,707656	0,891958
39	0,20	0,001	0,799	433	341	0,761763	0,238237	0,863921	0,79991
27	0,52	0,006	0,474	329	340	0,81526	0,18474	0,824389	0,477352
32	0,10	0,009	0,891	217	348	0,754219	0,245781	0,620537	0,903533
30	0,10	0,009	0,891	266	345	0,751249	0,248751	0,730684	0,901762
39	0,75	0,009	0,241	128	315	0,864849	0,135151	0,857296	0,243424
15	0,20	0,007	0,793	141	344	0,774994	0,225006	0,494082	0,803655
37	0,50	0,003	0,497	356	328	0,811276	0,188724	0,906711	0,49862
40	0,20	0,007	0,793	432	315	0,810156	0,189843	0,960353	0,498546
13	0,30	0,010	0,690	356	345	0,781124	0,218875	0,800697	0,698474
23	0,30	0,008	0,692	499	353	0,777304	0,222695	0,805448	0,698746
20	0,50	0,009	0,491	477	313	0,810201	0,189798	0,967926	0,49558
30	0,50	0,006	0,494	318	349	0,812131	0,187869	0,732836	0,497866
14	0,30	0,002	0,698	398	344	0,779391	0,220608	0,830169	0,699645
21	0,10	0,009	0,891	470	352	0,741119	0,25888	0,802211	0,900875
34	0,10	0,001	0,899	443	334	0,741748	0,258252	0,903198	0,899985
42	0,40	0,005	0,595	239	340	0,798604	0,201396	0,755653	0,598803
30	0,40	0,005	0,595	207	356	0,799273	0,200727	0,44029	0,601201
33	0,20	0,003	0,797	248	357	0,769077	0,230923	0,521473	0,801329

10	0,30	0,010	0,690	360	326	0,781095	0,218905	0,916814	0,697517
35	0,20	0,007	0,793	220	321	0,781479	0,218521	0,891367	0,726014
30	0,20	0,010	0,791	355	333	0,765229	0,23477	0,882865	0,798914
33	0,30	0,003	0,697	205	347	0,785578	0,214422	0,612006	0,700242
27	0,10	0,007	0,893	261	325	0,751603	0,248396	0,889736	0,899991
15	0,10	0,001	0,899	378	313	0,744779	0,25522	0,959496	0,899934
16	0,40	0,002	0,599	447	335	0,793804	0,206196	0,898625	0,599312
48	0,40	0,003	0,597	324	323	0,796429	0,20357	0,919536	0,598928
36	0,40	0,005	0,595	135	355	0,800583	0,199417	0,14711	0,612949
46	0,40	0,002	0,598	401	316	0,794708	0,205292	0,954957	0,599246
41	0,40	0,009	0,591	217	341	0,799456	0,200544	0,717478	0,598155
27	0,40	0,005	0,595	396	344	0,795047	0,204953	0,828738	0,598509
12	0,10	0,002	0,899	249	315	0,751998	0,248002	0,93016	0,899919
20	0,50	0,009	0,491	304	334	0,812706	0,187293	0,854364	0,496079
29	0,30	0,005	0,695	171	335	0,787111	0,212889	0,723745	0,699642
49	0,40	0,008	0,592	408	313	0,795122	0,204878	0,962263	0,596932
16	0,20	0,006	0,794	249	315	0,769408	0,230592	0,929944	0,79911
13	0,40	0,002	0,598	308	357	0,796662	0,203338	0,618416	0,599818
41	0,10	0,002	0,898	407	314	0,743481	0,256519	0,960503	0,899865
15	0,30	0,001	0,699	413	319	0,779085	0,220915	0,960234	0,699725
13	0,10	0,005	0,895	498	313	0,739783	0,260216	0,969831	0,899622
21	0,40	0,003	0,597	210	321	0,799261	0,200739	0,885582	0,598991
30	0,20	0,007	0,793	208	343	0,771333	0,228666	0,679131	0,800918
21	0,50	0,004	0,496	194	326	0,772196	0,227803	0,841892	0,799513
29	0,40	0,009	0,591	128	341	0,801913	0,198087	0,507432	0,600794
25	0,30	0,010	0,690	126	321	0,789494	0,210506	0,806302	0,69842
38	0,50	0,004	0,496	459	314	0,80989	0,19011	0,964749	0,498051

45	0,50	0,006	0,494	248	329	0,813367	0,186632	0,857346	0,497385
13	0,50	0,007	0,493	207	350	0,813989	0,186011	0,562085	0,498875
13	0,50	0,005	0,495	476	315	0,809769	0,190231	0,964243	0,497562
28	0,40	0,003	0,598	130	320	0,801618	0,198382	0,821271	0,599526
37	0,20	0,008	0,792	151	340	0,774538	0,225462	0,606053	0,802057
40	0,50	0,004	0,496	220	318	0,813693	0,186307	0,906041	0,498159
14	0,50	0,002	0,498	263	351	0,812679	0,187321	0,645524	0,499442
19	0,20	0,004	0,796	158	341	0,773971	0,226029	0,607303	0,801012
34	0,20	0,005	0,795	380	325	0,763945	0,236054	0,925381	0,799278
31	0,40	0,006	0,594	459	329	0,793948	0,206051	0,92539	0,597829
12	0,30	0,007	0,694	406	318	0,779611	0,220388	0,950846	0,698103
38	0,30	0,008	0,692	195	321	0,78632	0,21368	0,876784	0,698478
30	0,40	0,003	0,597	169	350	0,800323	0,199677	0,457874	0,600585
50	0,50	0,003	0,497	246	348	0,798253	0,201747	0,665312	0,599555
18	0,40	0,008	0,592	451	358	0,794178	0,205821	0,734937	0,598227
18	0,40	0,005	0,595	431	354	0,794334	0,205666	0,762799	0,598772
22	0,20	0,004	0,796	302	327	0,766901	0,233098	0,895387	0,799524
32	0,40	0,007	0,593	264	347	0,798088	0,201912	0,702137	0,598676
40	0,40	0,002	0,598	189	340	0,79975	0,20025	0,687552	0,599655
41	0,20	0,001	0,799	425	317	0,762042	0,237958	0,955685	0,799832
18	0,50	0,005	0,495	188	319	0,814397	0,185603	0,88363	0,497753
25	0,30	0,007	0,694	364	331	0,780732	0,219267	0,8957	0,698376
13	0,20	0,008	0,792	434	355	0,762163	0,237836	0,756309	0,8002
25	0,10	0,002	0,898	274	353	0,750371	0,249629	0,635057	0,900717
42	0,10	0,003	0,897	206	353	0,754725	0,245275	0,505348	0,90205
39	0,20	0,007	0,793	421	321	0,762672	0,237328	0,945075	0,798876
13	0,30	0,007	0,693	449	354	0,778415	0,221584	0,77351	0,699121

28	0,50	0,003	0,497	250	319	0,813045	0,186955	0,913412	0,49861
20	0,20	0,010	0,790	172	333	0,773528	0,226472	0,750208	0,800329
31	0,20	0,006	0,794	199	350	0,771634	0,228366	0,546307	0,802303
18	0,40	0,002	0,598	488	322	0,793052	0,206948	0,950294	0,599251
17	0,20	0,005	0,795	442	332	0,761786	0,238214	0,911208	0,799336
16	0,30	0,002	0,698	295	332	0,782411	0,217589	0,863841	0,699588
26	0,30	0,003	0,697	371	332	0,780221	0,219779	0,892897	0,699314
20	0,40	0,008	0,592	405	355	0,795066	0,204933	0,736316	0,598217
12	0,10	0,007	0,893	364	354	0,748839	0,251161	0,659609	0,902198
12	0,30	0,008	0,692	283	335	0,783223	0,216777	0,836776	0,698522
20	0,40	0,005	0,595	450	322	0,79403	0,20597	0,945821	0,598134
12	0,50	0,001	0,499	269	341	0,812499	0,187501	0,773692	0,499618
15	0,20	0,002	0,798	392	315	0,763279	0,236721	0,956511	0,799663
11	0,40	0,006	0,594	299	322	0,79726	0,202739	0,916722	0,597859
37	0,40	0,006	0,595	146	315	0,801388	0,198612	0,877487	0,598006
30	0,40	0,008	0,592	193	330	0,800101	0,199898	0,806514	0,59774
32	0,20	0,009	0,791	261	357	0,768642	0,231358	0,54699	0,803456
48	0,50	0,002	0,498	224	358	0,813336	0,186664	0,441134	0,500023
20	0,40	0,010	0,590	457	356	0,809675	0,190324	0,757672	0,499256
42	0,30	0,009	0,691	342	325	0,781531	0,218469	0,91638	0,697771
41	0,30	0,004	0,696	156	342	0,787647	0,212353	0,583125	0,700519
14	0,10	0,007	0,893	337	354	0,747102	0,252898	0,694863	0,901763
46	0,40	0,004	0,596	195	320	0,799761	0,200239	0,882509	0,598661
24	0,40	0,003	0,597	405	349	0,794691	0,205309	0,793512	0,599189
17	0,40	0,003	0,597	352	353	0,795773	0,204227	0,71792	0,599389
21	0,20	0,006	0,794	182	340	0,772693	0,227307	0,676405	0,800811
43	0,30	0,005	0,695	314	325	0,782052	0,217948	0,908559	0,698795

19	0,40	0,005	0,595	196	344	0,799727	0,200273	0,641608	0,599396
38	0,50	0,009	0,491	425	352	0,810824	0,189175	0,777223	0,496501
15	0,50	0,003	0,497	167	327	0,814609	0,185391	0,804527	0,49879
49	0,50	0,005	0,495	374	317	0,811219	0,188781	0,948725	0,497597
16	0,50	0,007	0,493	203	325	0,814294	0,185706	0,855086	0,496954
48	0,50	0,007	0,493	147	313	0,815406	0,184594	0,8902	0,496823
34	0,20	0,003	0,797	463	350	0,760908	0,239091	0,814259	0,799877
39	0,50	0,004	0,496	180	352	0,814301	0,185699	0,447655	0,499992
10	0,10	0,004	0,896	295	324	0,749384	0,250616	0,907618	0,899924
21	0,50	0,003	0,497	413	334	0,81042	0,18958	0,894342	0,498639
23	0,10	0,004	0,896	475	314	0,740645	0,259354	0,966512	0,899709
44	0,50	0,009	0,491	294	343	0,812831	0,187169	0,775038	0,496515
12	0,50	0,008	0,493	188	344	0,814554	0,185446	0,624573	0,497915
25	0,20	0,009	0,791	181	325	0,773035	0,226965	0,838146	0,799406
27	0,20	0,001	0,799	157	324	0,773954	0,226046	0,821364	0,799952
23	0,30	0,010	0,690	448	357	0,778627	0,221372	0,744122	0,699048
23	0,20	0,006	0,795	307	316	0,766861	0,233139	0,940699	0,799058
37	0,30	0,006	0,694	189	332	0,772375	0,227624	0,783901	0,799954
30	0,50	0,003	0,497	340	316	0,811533	0,188467	0,946191	0,498564
25	0,10	0,009	0,891	317	339	0,748458	0,251541	0,827542	0,9006
27	0,30	0,006	0,694	483	332	0,777583	0,222417	0,918888	0,698508
12	0,30	0,008	0,692	324	320	0,781992	0,218008	0,930964	0,697938
46	0,50	0,002	0,498	392	313	0,810629	0,189371	0,96048	0,499031
32	0,50	0,010	0,491	364	342	0,811847	0,188152	0,827739	0,49579
34	0,20	0,003	0,797	157	339	0,774012	0,225988	0,638463	0,800589
23	0,20	0,010	0,790	146	343	0,774795	0,225205	0,533559	0,80418
39	0,50	0,008	0,492	500	316	0,809785	0,190215	0,964238	0,496088

17	0,30	0,004	0,696	333	345	0,781364	0,218636	0,786207	0,69945
20	0,30	0,007	0,693	161	353	0,787192	0,212808	0,353233	0,705695
50	0,10	0,009	0,891	337	329	0,747474	0,252525	0,897718	0,899915
30	0,20	0,005	0,795	199	318	0,771823	0,228176	0,896665	0,799399
28	0,30	0,003	0,697	445	318	0,77827	0,221729	0,955407	0,699181
19	0,40	0,005	0,595	492	339	0,793245	0,206754	0,890373	0,598299
16	0,40	0,008	0,592	434	332	0,794595	0,205404	0,908877	0,597178
15	0,20	0,003	0,798	294	319	0,767142	0,232858	0,927578	0,799763
17	0,50	0,009	0,491	163	345	0,815083	0,184917	0,544167	0,496135
30	0,50	0,010	0,490	395	334	0,811419	0,188581	0,889263	0,495452
40	0,50	0,008	0,493	136	324	0,815684	0,184316	0,791052	0,49682
20	0,10	0,005	0,895	265	322	0,751223	0,248777	0,906392	0,899911
44	0,40	0,002	0,598	201	352	0,799366	0,200634	0,509999	0,600164
30	0,50	0,004	0,496	272	343	0,812724	0,187276	0,755963	0,498514
24	0,10	0,004	0,896	366	350	0,745526	0,254473	0,762606	0,900594
29	0,40	0,008	0,592	418	320	0,79492	0,20508	0,947028	0,596999
42	0,30	0,009	0,691	468	313	0,778223	0,221776	0,967513	0,697458
29	0,10	0,004	0,897	356	345	0,746054	0,253946	0,80186	0,900389
32	0,50	0,004	0,496	138	325	0,815284	0,184716	0,783833	0,498437
31	0,50	0,004	0,496	437	345	0,810171	0,189829	0,838294	0,498304
15	0,50	0,006	0,494	188	318	0,814495	0,185505	0,889422	0,497282

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

ANEXO B: DATOS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

Alimentación				Columna		Salidas			
TA	X_mass_EtOH	X_mass_CO2	X_mass_H2O	PC	TC	Ethanol (Mezcla)	Water (Mezcla)	CO2	H2O
46	0,10	0,003	0,897	163	327	0,800543	0,199457	0,800142	0,599449
49	0,20	0,008	0,793	375	319	0,764377	0,235623	0,943912	0,798721
21	0,10	0,002	0,898	344	347	0,746531	0,253469	0,776388	0,900259
33	0,30	0,005	0,695	479	358	0,777386	0,222614	0,75205	0,699691
37	0,20	0,006	0,794	429	351	0,762228	0,237771	0,790213	0,79991
22	0,30	0,008	0,693	309	318	0,78245	0,217549	0,934478	0,697919
34	0,30	0,007	0,694	478	316	0,777806	0,222193	0,96276	0,698048
19	0,40	0,008	0,592	385	314	0,795581	0,204418	0,957671	0,596952
34	0,20	0,008	0,793	396	322	0,763618	0,236382	0,938388	0,798756
31	0,20	0,003	0,798	247	353	0,769294	0,230706	0,591567	0,800046
26	0,50	0,002	0,498	279	324	0,812433	0,187567	0,90084	0,499087
35	0,30	0,007	0,694	205	338	0,785857	0,214143	0,738191	0,699383
10	0,40	0,002	0,598	407	341	0,779539	0,22046	0,854294	0,698605
38	0,40	0,005	0,595	306	339	0,796984	0,203016	0,819477	0,598544
29	0,50	0,009	0,491	494	321	0,809971	0,190029	0,953145	0,495638
18	0,10	0,010	0,890	442	340	0,742503	0,257496	0,872969	0,90016
41	0,50	0,008	0,492	185	326	0,814726	0,185274	0,832493	0,496617
23	0,40	0,002	0,598	164	314	0,800523	0,199477	0,896922	0,599314
40	0,10	0,006	0,894	293	357	0,749341	0,250659	0,600463	0,902602
12	0,30	0,003	0,698	133	347	0,788553	0,211447	0,384855	0,701991
40	0,50	0,004	0,496	180	341	0,786803	0,213197	0,657035	0,700093
16	0,20	0,003	0,797	233	334	0,769927	0,230073	0,809469	0,799893
39	0,20	0,005	0,795	265	317	0,768597	0,231403	0,927146	0,79927
28	0,30	0,003	0,697	164	353	0,787557	0,212443	0,365814	0,702238
33	0,40	0,006	0,594	137	316	0,801671	0,198329	0,862151	0,598067
27	0,30	0,003	0,697	183	330	0,786513	0,213487	0,796039	0,699559

33	0,40	0,003	0,597	150	342	0,80096	0,19904	0,564592	0,59996
21	0,50	0,004	0,496	289	356	0,812384	0,187616	0,606724	0,49904
16	0,10	0,008	0,892	330	324	0,747783	0,252217	0,917857	0,899768
36	0,40	0,008	0,592	160	340	0,800965	0,199035	0,627836	0,599168
23	0,50	0,003	0,497	493	322	0,809319	0,190681	0,950633	0,498559
18	0,30	0,004	0,696	362	317	0,764619	0,23538	0,947477	0,799189
25	0,20	0,004	0,796	399	327	0,794745	0,205255	0,9214	0,599284
47	0,10	0,007	0,893	251	316	0,79843	0,201569	0,926361	0,597825
18	0,30	0,005	0,695	326	350	0,781617	0,218383	0,730275	0,699605
45	0,40	0,002	0,598	353	323	0,795704	0,204295	0,926451	0,599278
35	0,30	0,004	0,696	480	340	0,777476	0,222523	0,882799	0,699115
32	0,50	0,005	0,495	441	353	0,814586	0,185414	0,363782	0,501042
24	0,10	0,009	0,891	246	321	0,752695	0,247304	0,903767	0,899861
14	0,10	0,003	0,897	335	334	0,747102	0,252897	0,870082	0,900057
13	0,40	0,002	0,598	397	325	0,794786	0,205214	0,92828	0,599276
41	0,10	0,006	0,894	150	316	0,759477	0,240523	0,875445	0,90008
43	0,10	0,002	0,898	165	326	0,757961	0,242039	0,813386	0,900166
39	0,20	0,004	0,797	330	315	0,765775	0,234224	0,947838	0,799351
30	0,30	0,007	0,694	435	341	0,77882	0,221179	0,86415	0,698548
35	0,20	0,005	0,795	258	352	0,768751	0,231249	0,625781	0,801095
22	0,10	0,005	0,895	493	316	0,739985	0,260014	0,964231	0,899646
30	0,20	0,008	0,792	365	328	0,764724	0,235276	0,910019	0,798943
18	0,10	0,009	0,891	202	349	0,755173	0,244827	0,572844	0,904514
35	0,20	0,010	0,791	174	337	0,773164	0,226836	0,703484	0,79848
46	0,40	0,006	0,594	153	351	0,800806	0,199194	0,370911	0,602746

Realizado por: Alvarez, Nicole, 2022.

ANEXO C: PROGRAMACIÓN DE LA RNA.

%01.EXTRACCIÓN DE BASE DE DATOS DE EXCEL

%Leer base de datos de Excel

```
Extraer=readtable('Base_Datos.xlsx','Sheet','Entrenamiento');
```

%Convertir la tabla a Matriz Numérica

```
Datos=table2array(Extraer);
```

%02.NORMALIZACIÓN DE ENTRADAS

```
entradas=Datos(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)];
```

%Fracción másica de etanol

```
etoh_max=max(entradas(2,:));
```

```
etoh_min=min(entradas(2,:));
```

```
etoh_N=[(entradas(2,1:end)-etoh_min)/(etoh_max-etoh_min)];
```

%Fracción másica de dióxido de carbono

```
co2_max=max(entradas(3,:));
```

```
co2_min=min(entradas(3,:));
```

```
co2_N=[(entradas(3,1:end)-co2_min)/(co2_max-co2_min)];
```

%Fracción másica de agua

```
h2o_max=max(entradas(4,:));
```

```
h2o_min=min(entradas(4,:));
```

```
h2o_N=[(entradas(4,1:end)-h2o_min)/(h2o_max-h2o_min)];
```

%Presión de la columna

```
PC_max=max(entradas(5,:));
```

```
PC_min=min(entradas(5,:));
```

```
PC_N=[(entradas(5,1:end)-PC_min)/(PC_max-PC_min)];
```

% Temperatura de la columna

TC_max=max(entradas(6,:));

TC_min=min(entradas(6,:));

TC_N=[(entradas(6,1:end)-TC_min)/(TC_max-TC_min)];

% Entradas normalizadas

Entradas_N=[T_N;etoh_N;co2_N;h2o_N;PC_N;TC_N];

%03.NORMALIZACIÓN DE SALIDAS

salidas=Datos(7:10,:);

% Fracción de etanol en la mezcla azeotrópica

EtOH_Az_max=max(salidas(1,:));

EtOH_Az_min=min(salidas(1,:));

EtOH_Az_N=[(salidas(1,1:end)-EtOH_Az_min)/(EtOH_Az_max-EtOH_Az_min)];

% Fracción de agua en la mezcla azeotrópica

H2O_Az_max=max(salidas(2,:));

H2O_Az_min=min(salidas(2,:));

H2O_Az_N=[(salidas(2,1:end)-H2O_Az_min)/(H2O_Az_max-H2O_Az_min)];

% Fracción de dióxido de carbono recuperado

CO2_max=max(salidas(3,:));

CO2_min=min(salidas(3,:));

CO2_N=[(salidas(3,1:end)-CO2_min)/(CO2_max-CO2_min)];

% Fracción de agua recuperada

H2O_max=max(salidas(4,:));

H2O_min=min(salidas(4,:));

H2O_N=[(salidas(4,1:end)-H2O_min)/(H2O_max-H2O_min)];

% salidas normalizadas

Salidas_N=[EtOH_Az_N;H2O_Az_N;CO2_N;H2O_N];

%04. RED NEURONAL ARTIFICIAL

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

% Script generated by Neural Fitting app


```
% Created 05-Feb-2023 15:34:05
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% Entradas_N - input data.
% Salidas_N - 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';

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 100;
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)

%05.RESULTADOS PREDICHOS
Datos_pred=net(Entradas_N(1:end,:));

% Predicción de la fracción de etanol en la mezcla azeotrópica
EtOH_Az_pred=[Datos_pred(1,:).*(EtOH_Az_max-EtOH_Az_min)+EtOH_Az_min];

% Fracción de agua en la mezcla azeotrópica
H2O_Az_pred=[Datos_pred(2,:).*(H2O_Az_max-H2O_Az_min)+H2O_Az_min];

% Fracción de dióxido de carbono recuperado
CO2_pred=[Datos_pred(3,:).*(CO2_max-CO2_min)+CO2_min];

% Fracción de agua recuperada
H2O_pred=[Datos_pred(4,:).*(H2O_max-H2O_min)+H2O_min];

% Datos predichos
Datos_Predichos=[EtOH_Az_pred;H2O_Az_pred;CO2_pred;H2O_pred];

% Resultados reales y predichos
Real= salidas';
Predicho= Datos_Predichos';

```

ANEXO D: RESULTADOS DEL ENTRENAMIENTO DE LA RNA.

Entradas						Datos Reales				Datos Predichos			
TA	X_mass_EtOH	X_mass_CO2	X_mass_H2O	PC	TC	Ethanol (Mezcla)	Water (Mezcla)	CO2	H2O	Ethanol (Mezcla)	Water (Mezcla)	CO2	H2O
25	0,10	0,001	0,899	125	313	0,761421	0,238579	0,871602	0,900017	0,761427	0,238573	0,871672	0,900061
33	0,48	0,004	0,516	310	342	0,808927	0,191072	0,79635	0,518506	0,808909	0,191091	0,796216	0,518369
25	0,11	0,009	0,881	289	349	0,751809	0,248191	0,707656	0,891958	0,751809	0,248190	0,706917	0,891954
39	0,20	0,001	0,799	433	341	0,761763	0,238237	0,863921	0,79991	0,760622	0,239378	0,863099	0,802185
27	0,52	0,006	0,474	329	340	0,81526	0,18474	0,824389	0,477352	0,809677	0,190322	0,825086	0,514215
32	0,10	0,009	0,891	217	348	0,754219	0,245781	0,620537	0,903533	0,754218	0,245781	0,620826	0,903538
30	0,10	0,009	0,891	266	345	0,751249	0,248751	0,730684	0,901762	0,751254	0,248745	0,730953	0,901801
39	0,75	0,009	0,241	128	315	0,864849	0,135151	0,857296	0,243424	0,864848	0,135152	0,857295	0,243415
15	0,20	0,007	0,793	141	344	0,774994	0,225006	0,494082	0,803655	0,771174	0,228826	0,498764	0,828741
37	0,50	0,003	0,497	356	328	0,811276	0,188724	0,906711	0,49862	0,811288	0,188712	0,906505	0,498710
40	0,20	0,007	0,793	432	315	0,810156	0,189843	0,960353	0,498546	0,810158	0,189841	0,960332	0,498564
13	0,30	0,010	0,690	356	345	0,781124	0,218875	0,800697	0,698474	0,781127	0,218873	0,800597	0,698498
23	0,30	0,008	0,692	499	353	0,777304	0,222695	0,805448	0,698746	0,777302	0,222697	0,805461	0,698737
20	0,50	0,009	0,491	477	313	0,810201	0,189798	0,967926	0,49558	0,810204	0,189796	0,967942	0,495601
30	0,50	0,006	0,494	318	349	0,812131	0,187869	0,732836	0,497866	0,811913	0,188087	0,732848	0,496749
14	0,30	0,002	0,698	398	344	0,779391	0,220608	0,830169	0,699645	0,779417	0,220582	0,830213	0,699862
21	0,10	0,009	0,891	470	352	0,741119	0,25888	0,802211	0,900875	0,735834	0,264164	0,798107	0,956525
34	0,10	0,001	0,899	443	334	0,741748	0,258252	0,903198	0,899985	0,741755	0,258245	0,903306	0,900032
42	0,40	0,005	0,595	239	340	0,798604	0,201396	0,755653	0,598803	0,798599	0,201400	0,755774	0,598774
30	0,40	0,005	0,595	207	356	0,799273	0,200727	0,44029	0,601201	0,792500	0,207501	0,441450	0,639410
33	0,20	0,003	0,797	248	357	0,769077	0,230923	0,521473	0,801329	0,772086	0,227914	0,520811	0,783740
10	0,30	0,010	0,690	360	326	0,781095	0,218905	0,916814	0,697517	0,781097	0,218903	0,916837	0,697538
35	0,20	0,007	0,793	220	321	0,781479	0,218521	0,891367	0,726014	0,781473	0,218526	0,891616	0,725944

30	0,20	0,010	0,791	355	333	0,765229	0,23477	0,882865	0,798914	0,765235	0,234764	0,883083	0,798953
33	0,30	0,003	0,697	205	347	0,785578	0,214422	0,612006	0,700242	0,785593	0,214407	0,612000	0,700386
27	0,10	0,007	0,893	261	325	0,751603	0,248396	0,889736	0,899991	0,751611	0,248389	0,889170	0,900060
15	0,10	0,001	0,899	378	313	0,744779	0,25522	0,959496	0,899934	0,744779	0,255220	0,959271	0,899950
16	0,40	0,002	0,599	447	335	0,793804	0,206196	0,898625	0,599312	0,793775	0,206225	0,898706	0,599079
48	0,40	0,003	0,597	324	323	0,796429	0,20357	0,919536	0,598928	0,796435	0,203565	0,919643	0,598982
36	0,40	0,005	0,595	135	355	0,800583	0,199417	0,14711	0,612949	0,800587	0,199413	0,147160	0,612978
46	0,40	0,002	0,598	401	316	0,794708	0,205292	0,954957	0,599246	0,794713	0,205287	0,955199	0,599292
41	0,40	0,009	0,591	217	341	0,799456	0,200544	0,717478	0,598155	0,799447	0,200553	0,717332	0,598085
27	0,40	0,005	0,595	396	344	0,795047	0,204953	0,828738	0,598509	0,795067	0,204933	0,828742	0,598669
12	0,10	0,002	0,899	249	315	0,751998	0,248002	0,93016	0,899919	0,751993	0,248007	0,930280	0,899850
20	0,50	0,009	0,491	304	334	0,812706	0,187293	0,854364	0,496079	0,812704	0,187295	0,854303	0,496074
29	0,30	0,005	0,695	171	335	0,787111	0,212889	0,723745	0,699642	0,787135	0,212865	0,723790	0,699855
49	0,40	0,008	0,592	408	313	0,795122	0,204878	0,962263	0,596932	0,795126	0,204874	0,962384	0,596958
16	0,20	0,006	0,794	249	315	0,769408	0,230592	0,929944	0,79911	0,769407	0,230592	0,929651	0,799109
13	0,40	0,002	0,598	308	357	0,796662	0,203338	0,618416	0,599818	0,796655	0,203345	0,618346	0,599766
41	0,10	0,002	0,898	407	314	0,743481	0,256519	0,960503	0,899865	0,743475	0,256525	0,960359	0,899803
15	0,30	0,001	0,699	413	319	0,779085	0,220915	0,960234	0,699725	0,779093	0,220907	0,959771	0,699770
13	0,10	0,005	0,895	498	313	0,739783	0,260216	0,969831	0,899622	0,739784	0,260215	0,969892	0,899629
21	0,40	0,003	0,597	210	321	0,799261	0,200739	0,885582	0,598991	0,799258	0,200741	0,885316	0,598966
30	0,20	0,007	0,793	208	343	0,771333	0,228666	0,679131	0,800918	0,771344	0,228655	0,679334	0,801020
21	0,50	0,004	0,496	194	326	0,772196	0,227803	0,841892	0,799513	0,772190	0,227810	0,841922	0,799449
29	0,40	0,009	0,591	128	341	0,801913	0,198087	0,507432	0,600794	0,801918	0,198082	0,507537	0,600837
25	0,30	0,010	0,690	126	321	0,789494	0,210506	0,806302	0,69842	0,789491	0,210509	0,806294	0,698394
38	0,50	0,004	0,496	459	314	0,80989	0,19011	0,964749	0,498051	0,809892	0,190107	0,964631	0,498053
45	0,50	0,006	0,494	248	329	0,813367	0,186632	0,857346	0,497385	0,813371	0,186628	0,857213	0,497411
13	0,50	0,007	0,493	207	350	0,813989	0,186011	0,562085	0,498875	0,813990	0,186010	0,562268	0,498895

13	0,50	0,005	0,495	476	315	0,809769	0,190231	0,964243	0,497562	0,809769	0,190231	0,964240	0,497557
28	0,40	0,003	0,598	130	320	0,801618	0,198382	0,821271	0,599526	0,801610	0,198390	0,821322	0,599471
37	0,20	0,008	0,792	151	340	0,774538	0,225462	0,606053	0,802057	0,774543	0,225457	0,605890	0,802101
40	0,50	0,004	0,496	220	318	0,813693	0,186307	0,906041	0,498159	0,813687	0,186313	0,906073	0,498107
14	0,50	0,002	0,498	263	351	0,812679	0,187321	0,645524	0,499442	0,812686	0,187314	0,645546	0,499493
19	0,20	0,004	0,796	158	341	0,773971	0,226029	0,607303	0,801012	0,773965	0,226034	0,607461	0,800969
34	0,20	0,005	0,795	380	325	0,763945	0,236054	0,925381	0,799278	0,763944	0,236055	0,925762	0,799280
31	0,40	0,006	0,594	459	329	0,793948	0,206051	0,92539	0,597829	0,793962	0,206037	0,925293	0,597970
12	0,30	0,007	0,694	406	318	0,779611	0,220388	0,950846	0,698103	0,779618	0,220382	0,950849	0,698153
38	0,30	0,008	0,692	195	321	0,78632	0,21368	0,876784	0,698478	0,786332	0,213668	0,876897	0,698572
30	0,40	0,003	0,597	169	350	0,800323	0,199677	0,457874	0,600585	0,791509	0,208491	0,455502	0,650169
50	0,50	0,003	0,497	246	348	0,798253	0,201747	0,665312	0,599555	0,820981	0,179019	0,665289	0,445082
18	0,40	0,008	0,592	451	358	0,794178	0,205821	0,734937	0,598227	0,794225	0,205774	0,735042	0,598576
18	0,40	0,005	0,595	431	354	0,794334	0,205666	0,762799	0,598772	0,794322	0,205678	0,762644	0,598711
22	0,20	0,004	0,796	302	327	0,766901	0,233098	0,895387	0,799524	0,766890	0,233109	0,894602	0,799465
32	0,40	0,007	0,593	264	347	0,798088	0,201912	0,702137	0,598676	0,798085	0,201914	0,702359	0,598642
40	0,40	0,002	0,598	189	340	0,79975	0,20025	0,687552	0,599655	0,799758	0,200242	0,687683	0,599698
41	0,20	0,001	0,799	425	317	0,762042	0,237958	0,955685	0,799832	0,762044	0,237955	0,955736	0,799868
18	0,50	0,005	0,495	188	319	0,814397	0,185603	0,88363	0,497753	0,814425	0,185575	0,883568	0,497977
25	0,30	0,007	0,694	364	331	0,780732	0,219267	0,8957	0,698376	0,780718	0,219281	0,895896	0,698223
13	0,20	0,008	0,792	434	355	0,762163	0,237836	0,756309	0,8002	0,762153	0,237846	0,756077	0,800086
25	0,10	0,002	0,898	274	353	0,750371	0,249629	0,635057	0,900717	0,750366	0,249634	0,635004	0,900683
42	0,10	0,003	0,897	206	353	0,754725	0,245275	0,505348	0,90205	0,754728	0,245272	0,505516	0,902074
39	0,20	0,007	0,793	421	321	0,762672	0,237328	0,945075	0,798876	0,801545	0,198454	0,943154	0,552011
13	0,30	0,007	0,693	449	354	0,778415	0,221584	0,77351	0,699121	0,778416	0,221583	0,773868	0,699151
28	0,50	0,003	0,497	250	319	0,813045	0,186955	0,913412	0,49861	0,813042	0,186958	0,913733	0,498599
20	0,20	0,010	0,790	172	333	0,773528	0,226472	0,750208	0,800329	0,773547	0,226453	0,750799	0,800455

31	0,20	0,006	0,794	199	350	0,771634	0,228366	0,546307	0,802303	0,771638	0,228362	0,546011	0,802314
18	0,40	0,002	0,598	488	322	0,793052	0,206948	0,950294	0,599251	0,793064	0,206936	0,950396	0,599347
17	0,20	0,005	0,795	442	332	0,761786	0,238214	0,911208	0,799336	0,761784	0,238216	0,910998	0,799330
16	0,30	0,002	0,698	295	332	0,782411	0,217589	0,863841	0,699588	0,782393	0,217607	0,864024	0,699450
26	0,30	0,003	0,697	371	332	0,780221	0,219779	0,892897	0,699314	0,780228	0,219772	0,893593	0,699359
20	0,40	0,008	0,592	405	355	0,795066	0,204933	0,736316	0,598217	0,795039	0,204961	0,736245	0,598011
12	0,10	0,007	0,893	364	354	0,748839	0,251161	0,659609	0,902198	0,748576	0,251423	0,719609	0,883328
12	0,30	0,008	0,692	283	335	0,783223	0,216777	0,836776	0,698522	0,783234	0,216766	0,836654	0,698609
20	0,40	0,005	0,595	450	322	0,79403	0,20597	0,945821	0,598134	0,791461	0,208539	0,943545	0,613909
12	0,50	0,001	0,499	269	341	0,812499	0,187501	0,773692	0,499618	0,832093	0,167907	0,777629	0,351602
15	0,20	0,002	0,798	392	315	0,763279	0,236721	0,956511	0,799663	0,763272	0,236728	0,957136	0,799627
11	0,40	0,006	0,594	299	322	0,79726	0,202739	0,916722	0,597859	0,797260	0,202740	0,916738	0,597867
37	0,40	0,006	0,595	146	315	0,801388	0,198612	0,877487	0,598006	0,801391	0,198609	0,877389	0,598031
30	0,40	0,008	0,592	193	330	0,800101	0,199898	0,806514	0,59774	0,800082	0,199918	0,806331	0,597574
32	0,20	0,009	0,791	261	357	0,768642	0,231358	0,54699	0,803456	0,768636	0,231364	0,546930	0,803409
48	0,50	0,002	0,498	224	358	0,813336	0,186664	0,441134	0,500023	0,813337	0,186663	0,441274	0,500026
20	0,40	0,010	0,590	457	356	0,809675	0,190324	0,757672	0,499256	0,809653	0,190346	0,757647	0,499091
42	0,30	0,009	0,691	342	325	0,781531	0,218469	0,91638	0,697771	0,781526	0,218473	0,916407	0,697737
41	0,30	0,004	0,696	156	342	0,787647	0,212353	0,583125	0,700519	0,787636	0,212364	0,583343	0,700429
14	0,10	0,007	0,893	337	354	0,747102	0,252898	0,694863	0,901763	0,747105	0,252895	0,695081	0,901820
46	0,40	0,004	0,596	195	320	0,799761	0,200239	0,882509	0,598661	0,799772	0,200228	0,882461	0,598748
24	0,40	0,003	0,597	405	349	0,794691	0,205309	0,793512	0,599189	0,794690	0,205310	0,793292	0,599170
17	0,40	0,003	0,597	352	353	0,795773	0,204227	0,71792	0,599389	0,795781	0,204219	0,717988	0,599434
21	0,20	0,006	0,794	182	340	0,772693	0,227307	0,676405	0,800811	0,768523	0,231477	0,678263	0,831280
43	0,30	0,005	0,695	314	325	0,782052	0,217948	0,908559	0,698795	0,782041	0,217958	0,908075	0,698714
19	0,40	0,005	0,595	196	344	0,799727	0,200273	0,641608	0,599396	0,799730	0,200270	0,641628	0,599408
38	0,50	0,009	0,491	425	352	0,810824	0,189175	0,777223	0,496501	0,810824	0,189175	0,777252	0,496505

15	0,50	0,003	0,497	167	327	0,814609	0,185391	0,804527	0,49879	0,814610	0,185390	0,804517	0,498801
49	0,50	0,005	0,495	374	317	0,811219	0,188781	0,948725	0,497597	0,811213	0,188787	0,948808	0,497557
16	0,50	0,007	0,493	203	325	0,814294	0,185706	0,855086	0,496954	0,814309	0,185690	0,855377	0,497076
48	0,50	0,007	0,493	147	313	0,815406	0,184594	0,8902	0,496823	0,834977	0,165024	0,886634	0,370097
34	0,20	0,003	0,797	463	350	0,760908	0,239091	0,814259	0,799877	0,760902	0,239097	0,814077	0,799821
39	0,50	0,004	0,496	180	352	0,814301	0,185699	0,447655	0,499992	0,814299	0,185701	0,447491	0,499983
10	0,10	0,004	0,896	295	324	0,749384	0,250616	0,907618	0,899924	0,749380	0,250620	0,907288	0,899905
21	0,50	0,003	0,497	413	334	0,81042	0,18958	0,894342	0,498639	0,810420	0,189580	0,894324	0,498647
23	0,10	0,004	0,896	475	314	0,740645	0,259354	0,966512	0,899709	0,742410	0,257589	0,968184	0,885484
44	0,50	0,009	0,491	294	343	0,812831	0,187169	0,775038	0,496515	0,822277	0,177722	0,770630	0,432129
12	0,50	0,008	0,493	188	344	0,814554	0,185446	0,624573	0,497915	0,814543	0,185457	0,624382	0,497827
25	0,20	0,009	0,791	181	325	0,773035	0,226965	0,838146	0,799406	0,773015	0,226985	0,837742	0,799293
27	0,20	0,001	0,799	157	324	0,773954	0,226046	0,821364	0,799952	0,773958	0,226042	0,821303	0,799998
23	0,30	0,010	0,690	448	357	0,778627	0,221372	0,744122	0,699048	0,778630	0,221369	0,744158	0,699071
23	0,20	0,006	0,795	307	316	0,766861	0,233139	0,940699	0,799058	0,766885	0,233115	0,940662	0,799293
37	0,30	0,006	0,694	189	332	0,772375	0,227624	0,783901	0,799954	0,784843	0,215156	0,784079	0,705722
30	0,50	0,003	0,497	340	316	0,811533	0,188467	0,946191	0,498564	0,808052	0,191948	0,951977	0,518317
25	0,10	0,009	0,891	317	339	0,748458	0,251541	0,827542	0,9006	0,748448	0,251551	0,827811	0,900535
27	0,30	0,006	0,694	483	332	0,777583	0,222417	0,918888	0,698508	0,774502	0,225497	0,918434	0,725416
12	0,30	0,008	0,692	324	320	0,781992	0,218008	0,930964	0,697938	0,781979	0,218021	0,931105	0,697814
46	0,50	0,002	0,498	392	313	0,810629	0,189371	0,96048	0,499031	0,810624	0,189377	0,960387	0,498985
32	0,50	0,010	0,491	364	342	0,811847	0,188152	0,827739	0,49579	0,811862	0,188137	0,827913	0,495901
34	0,20	0,003	0,797	157	339	0,774012	0,225988	0,638463	0,800589	0,773992	0,226008	0,638088	0,800416
23	0,20	0,010	0,790	146	343	0,774795	0,225205	0,533559	0,80418	0,774788	0,225212	0,533362	0,804119
39	0,50	0,008	0,492	500	316	0,809785	0,190215	0,964238	0,496088	0,809778	0,190221	0,964278	0,496043
17	0,30	0,004	0,696	333	345	0,781364	0,218636	0,786207	0,69945	0,781365	0,218635	0,786287	0,699435
20	0,30	0,007	0,693	161	353	0,787192	0,212808	0,353233	0,705695	0,787187	0,212813	0,353245	0,705656

50	0,10	0,009	0,891	337	329	0,747474	0,252525	0,897718	0,899915	0,747476	0,252523	0,897693	0,899924
30	0,20	0,005	0,795	199	318	0,771823	0,228176	0,896665	0,799399	0,771816	0,228184	0,896853	0,799335
28	0,30	0,003	0,697	445	318	0,77827	0,221729	0,955407	0,699181	0,778251	0,221749	0,955263	0,698999
19	0,40	0,005	0,595	492	339	0,793245	0,206754	0,890373	0,598299	0,792080	0,207920	0,884006	0,610982
16	0,40	0,008	0,592	434	332	0,794595	0,205404	0,908877	0,597178	0,794588	0,205411	0,908783	0,597128
15	0,20	0,003	0,798	294	319	0,767142	0,232858	0,927578	0,799763	0,767158	0,232842	0,927513	0,799902
17	0,50	0,009	0,491	163	345	0,815083	0,184917	0,544167	0,496135	0,815089	0,184911	0,544113	0,496177
30	0,50	0,010	0,490	395	334	0,811419	0,188581	0,889263	0,495452	0,811419	0,188580	0,889066	0,495456
40	0,50	0,008	0,493	136	324	0,815684	0,184316	0,791052	0,49682	0,815685	0,184314	0,791169	0,496835
20	0,10	0,005	0,895	265	322	0,751223	0,248777	0,906392	0,899911	0,751214	0,248786	0,907124	0,899788
44	0,40	0,002	0,598	201	352	0,799366	0,200634	0,509999	0,600164	0,799364	0,200636	0,509826	0,600150
30	0,50	0,004	0,496	272	343	0,812724	0,187276	0,755963	0,498514	0,804081	0,195918	0,755673	0,555929
24	0,10	0,004	0,896	366	350	0,745526	0,254473	0,762606	0,900594	0,745531	0,254468	0,762794	0,900580
29	0,40	0,008	0,592	418	320	0,79492	0,20508	0,947028	0,596999	0,789294	0,210705	0,952107	0,647818
42	0,30	0,009	0,691	468	313	0,778223	0,221776	0,967513	0,697458	0,778224	0,221775	0,967367	0,697468
29	0,10	0,004	0,897	356	345	0,746054	0,253946	0,80186	0,900389	0,746055	0,253945	0,801638	0,900452
32	0,50	0,004	0,496	138	325	0,815284	0,184716	0,783833	0,498437	0,815281	0,184718	0,783727	0,498422
31	0,50	0,004	0,496	437	345	0,810171	0,189829	0,838294	0,498304	0,810163	0,189837	0,838352	0,498241
15	0,50	0,006	0,494	188	318	0,814495	0,185505	0,889422	0,497282	0,814472	0,185528	0,889340	0,497094

Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

ANEXO E: PROGRAMACIÓN DE LA VALIDACIÓN DE LA RNA.

%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel

```
Extraer=readtable('Base_Datos.xlsx','Sheet','Validación');
```

%Convertir la tabla a matriz numérica

```
Datos_v = table2array(Extraer);
```

%Cargar la red neuronal artificial

```
load('NET40BR.mat');
```

%Normalización de Parámetros de Entrada

```
entradas_v=Datos_v(1:6,:);
```

% Temperatura

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

%Fracción másica de etanol

```
etoh_Nv=[(entradas_v(2,1:end)-etoh_min)/(etoh_max-etoh_min)];
```

%Fracción másica de dióxido de carbono

```
co2_Nv=[(entradas_v(3,1:end)-co2_min)/(co2_max-co2_min)];
```

%Fracción másica de agua

```
h2o_Nv=[(entradas_v(4,1:end)-h2o_min)/(h2o_max-h2o_min)];
```

%Presión de la columna

```
PC_Nv=[(entradas_v(5,1:end)-PC_min)/(PC_max-PC_min)];
```

%Temperatura de la columna

```
TC_Nv=[(entradas_v(6,1:end)-TC_min)/(TC_max-TC_min)];
```

%Entradas normalizadas

```
Entradas_Nv=[T_Nv;etoh_Nv;co2_Nv;h2o_Nv;PC_Nv;TC_Nv];
```

%Validación de la red neuronal artificial

```
Datos_pred_v=net(Entradas_Nv(1:end,:));
```

%RESULTADOS

%Predicción de la fracción de etanol en la mezcla azeotrópica

```
EtOH_Az_pred_v=[Datos_pred_v(1,:).*(EtOH_Az_max-EtOH_Az_min)+EtOH_Az_min];
```

%Fracción de agua en la mezcla azeotrópica

```
H2O_Az_pred_v=[Datos_pred_v(2,:).*(H2O_Az_max-H2O_Az_min)+H2O_Az_min];
```

```
%Fracción de dióxido de carbono recuperado
```

```
CO2_pred_v=[Datos_pred_v(3,:).*(CO2_max-CO2_min)+CO2_min];
```

```
%Fracción de agua recuperada
```

```
H2O_pred_v=[Datos_pred_v(4,:).*(H2O_max-H2O_min)+H2O_min];
```

```
%Datos predichos
```

```
Datos_Predichos_v=[EtOH_Az_pred_v;H2O_Az_pred_v;CO2_pred_v;H2O_pred_v];
```

```
%Resultados reales y predichos
```

```
salidasv= Datos_v(7:10,:);
```

```
Real_v= salidasv';
```

```
Predicho_v= Datos_Predichos_v';
```

```
%GRAFICOS
```

```
%Etanol en mezcla azeotrópica
```

```
figure;
```

```
plot(salidasv(1,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Datos_Predichos_v(1,:));grid;legend('EtOH Real','EtOH Predicho')
```

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

```
ylabel('Fracción másica de etanol')
```

```
title('Predicción de etanol en la mezcla azeotrópica')
```

```
%Agua en mezcla azeotrópica
```

```
figure;
```

```
plot(salidasv(2,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Datos_Predichos_v(2,:));grid;legend('H2O Real','H2O Predicho')
```

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

```
ylabel('Fracción másica de agua')
```

```
title('Predicción de agua en la mezcla azeotrópica')
```

```
%Dióxido de carbono
```

```
figure;
```

```
plot(salidasv(3,:))
```

```
hold on
```

```
plot(Datos_Predichos_v(3,:));grid;legend('CO2 Real','CO2 Predicho')
xlabel('Cantidad de datos')
ylabel('Fracción másica de dióxido de carbono')
title('Predicción del dióxido de carbono recuperado')
```

% Agua

```
figure;
plot(salidasv(4,:))
hold on
plot(Datos_Predichos_v(4,:));grid;legend('H2O Real','H2O Predicho')
xlabel('Cantidad de datos')
ylabel('Fracción másica de agua')
title('Predicción del agua recuperada')
```

ANEXO F: RESULTADOS DE LA VALIDACIÓN DE LA RNA.

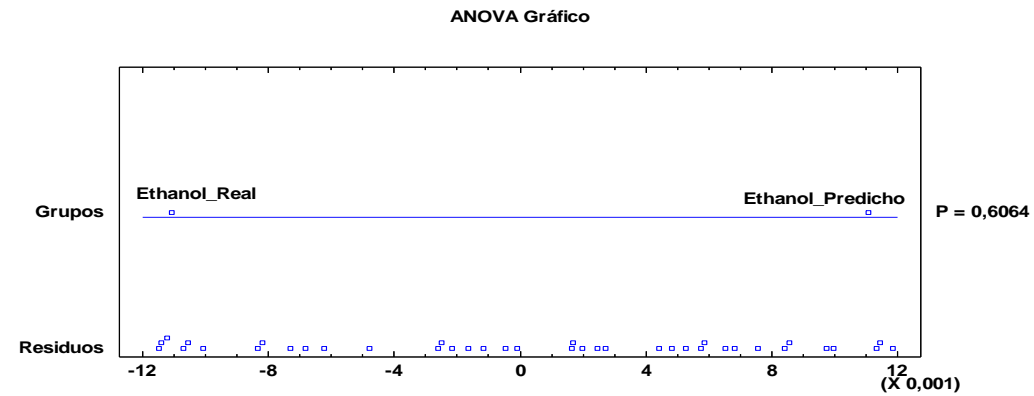
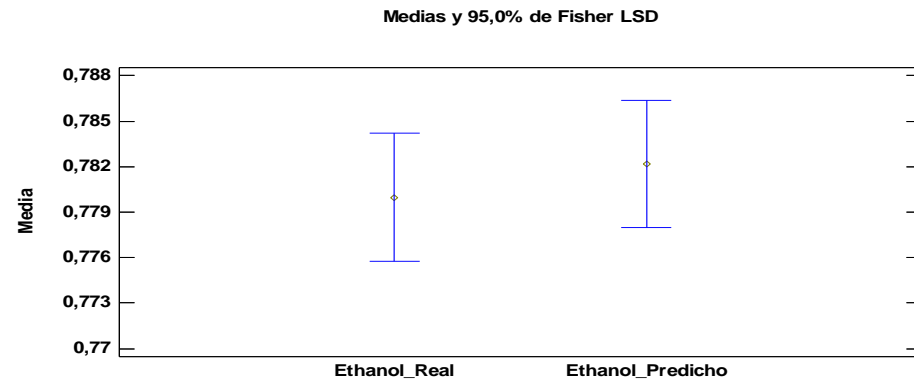
Entradas						Ethanol (Mezcla)			Water (Mezcla)			CO2			H2O		
TA	X_mass_EtOH	X_mass_CO2	X_mass_H2O	PC	TC	Ethanol_Real	Ethanol_Predicho	Error (%)	Water_Real	Water_Predicho	Error (%)	CO2_Real	CO2_Predicho	Error (%)	H2O_Real	H2O_Predicho	Error (%)
46	0,10	0,003	0,897	163	327	0,8005	0,7583	5,28	0,1995	0,2417	-21,18	0,8001	0,7997	0,06	0,5994	0,8969	-49,62
49	0,20	0,008	0,793	375	319	0,7644	0,7774	-1,70	0,2356	0,2226	5,52	0,9439	0,9392	0,50	0,7987	0,7207	9,76
21	0,10	0,002	0,898	344	347	0,7465	0,7458	0,09	0,2535	0,2542	-0,28	0,7764	0,7779	-0,20	0,9003	0,9016	-0,14
33	0,30	0,005	0,695	479	358	0,7774	0,7740	0,44	0,2226	0,2260	-1,52	0,7521	0,7568	-0,63	0,6997	0,7171	-2,49
37	0,20	0,006	0,794	429	351	0,7622	0,7665	-0,56	0,2378	0,2335	1,79	0,7902	0,7866	0,46	0,7999	0,7712	3,59
22	0,30	0,008	0,693	309	318	0,7825	0,7879	-0,70	0,2175	0,2121	2,51	0,9345	0,9353	-0,09	0,6979	0,6650	4,72
34	0,30	0,007	0,694	478	316	0,7778	0,8055	-3,56	0,2222	0,1945	12,47	0,9628	0,9679	-0,53	0,6980	0,5282	24,33
19	0,40	0,008	0,592	385	314	0,7956	0,7974	-0,23	0,2044	0,2026	0,88	0,9577	0,9616	-0,41	0,5970	0,5890	1,34
34	0,20	0,008	0,793	396	322	0,7636	0,7936	-3,93	0,2364	0,2064	12,69	0,9384	0,9380	0,04	0,7988	0,6061	24,12
31	0,20	0,003	0,798	247	353	0,7693	0,7759	-0,86	0,2307	0,2241	2,88	0,5916	0,5909	0,12	0,8000	0,7556	5,56
26	0,50	0,002	0,498	279	324	0,8124	0,8102	0,27	0,1876	0,1898	-1,19	0,9008	0,9036	-0,31	0,4991	0,5198	-4,16
35	0,30	0,007	0,694	205	338	0,7859	0,7842	0,22	0,2141	0,2158	-0,80	0,7382	0,7388	-0,09	0,6994	0,7102	-1,55
10	0,40	0,002	0,598	407	341	0,7795	0,7940	-1,86	0,2205	0,2060	6,57	0,8543	0,8531	0,15	0,6986	0,6005	14,05
38	0,40	0,005	0,595	306	339	0,7970	0,7935	0,44	0,2030	0,2065	-1,71	0,8195	0,8176	0,23	0,5985	0,6246	-4,35
29	0,50	0,009	0,491	494	321	0,8100	0,8201	-1,26	0,1900	0,1799	5,35	0,9531	0,9519	0,13	0,4956	0,4273	13,78
18	0,10	0,010	0,890	442	340	0,7425	0,7379	0,62	0,2575	0,2621	-1,79	0,8730	0,8739	-0,10	0,9002	0,9481	-5,33
41	0,50	0,008	0,492	185	326	0,8147	0,8188	-0,50	0,1853	0,1812	2,21	0,8325	0,8324	0,01	0,4966	0,4658	6,21
23	0,40	0,002	0,598	164	314	0,8005	0,8099	-1,17	0,1995	0,1901	4,70	0,8969	0,9020	-0,56	0,5993	0,5196	13,31
40	0,10	0,006	0,894	293	357	0,7493	0,7620	-1,69	0,2507	0,2380	5,05	0,6005	0,5945	1,00	0,9026	0,8216	8,98
12	0,30	0,003	0,698	133	347	0,7886	0,8082	-2,50	0,2114	0,1918	9,31	0,3849	0,3829	0,52	0,7020	0,5589	20,38
40	0,50	0,004	0,496	180	341	0,7868	0,8124	-3,25	0,2132	0,1876	12,00	0,6570	0,6614	-0,67	0,7001	0,5143	26,53
16	0,20	0,003	0,797	233	334	0,7699	0,7668	0,41	0,2301	0,2332	-1,36	0,8095	0,8087	0,09	0,7999	0,8257	-3,22
39	0,20	0,005	0,795	265	317	0,7686	0,7849	-2,12	0,2314	0,2151	7,04	0,9271	0,9275	-0,04	0,7993	0,6929	13,31
28	0,30	0,003	0,697	164	353	0,7876	0,7944	-0,88	0,2124	0,2056	3,24	0,3658	0,3622	0,98	0,7022	0,6452	8,12
33	0,40	0,006	0,594	137	316	0,8017	0,8086	-0,87	0,1983	0,1914	3,50	0,8622	0,8629	-0,08	0,5981	0,5484	8,31
27	0,30	0,003	0,697	183	330	0,7865	0,7870	-0,06	0,2135	0,2130	0,23	0,7960	0,7935	0,32	0,6996	0,6988	0,11

33	0,40	0,003	0,597	150	342	0,8010	0,7921	1,10	0,1990	0,2079	-4,43	0,5646	0,5649	-0,06	0,6000	0,6512	-8,54
21	0,50	0,004	0,496	289	356	0,8124	0,7875	3,07	0,1876	0,2125	-13,29	0,6067	0,6048	0,32	0,4990	0,6694	-34,14
16	0,10	0,008	0,892	330	324	0,7478	0,7470	0,10	0,2522	0,2530	-0,31	0,9179	0,9201	-0,25	0,8998	0,9054	-0,62
36	0,40	0,008	0,592	160	340	0,8010	0,8024	-0,18	0,1990	0,1976	0,74	0,6278	0,6295	-0,27	0,5992	0,5868	2,06
23	0,50	0,003	0,497	493	322	0,8093	0,8125	-0,39	0,1907	0,1875	1,66	0,9506	0,9463	0,45	0,4986	0,4647	6,79
18	0,30	0,004	0,696	362	317	0,7646	0,7839	-2,52	0,2354	0,2161	8,18	0,9475	0,9472	0,03	0,7992	0,6728	15,81
25	0,20	0,004	0,796	399	327	0,7947	0,7582	4,60	0,2053	0,2418	-17,80	0,9214	0,9235	-0,23	0,5993	0,8285	-38,24
47	0,10	0,007	0,893	251	316	0,7984	0,7919	0,82	0,2016	0,2081	-3,24	0,9264	0,9173	0,98	0,5978	0,6431	-7,58
18	0,30	0,005	0,695	326	350	0,7816	0,7821	-0,06	0,2184	0,2179	0,21	0,7303	0,7315	-0,17	0,6996	0,6943	0,76
45	0,40	0,002	0,598	353	323	0,7957	0,7906	0,64	0,2043	0,2094	-2,50	0,9265	0,9271	-0,07	0,5993	0,6392	-6,67
35	0,30	0,004	0,696	480	340	0,7775	0,7628	1,88	0,2225	0,2372	-6,58	0,8828	0,8815	0,15	0,6991	0,8055	-15,21
32	0,50	0,005	0,495	441	353	0,8146	0,8174	-0,34	0,1854	0,1826	1,50	0,3638	0,3795	-4,32	0,5010	0,4435	11,49
24	0,10	0,009	0,891	246	321	0,7527	0,7665	-1,84	0,2473	0,2335	5,59	0,9038	0,9019	0,20	0,8999	0,8138	9,57
14	0,10	0,003	0,897	335	334	0,7471	0,7470	0,01	0,2529	0,2530	-0,03	0,8701	0,8715	-0,17	0,9001	0,8986	0,16
13	0,40	0,002	0,598	397	325	0,7948	0,7866	1,03	0,2052	0,2134	-3,99	0,9283	0,9369	-0,92	0,5993	0,6522	-8,84
41	0,10	0,006	0,894	150	316	0,7595	0,7749	-2,03	0,2405	0,2251	6,41	0,8754	0,8685	0,79	0,9001	0,8058	10,48
43	0,10	0,002	0,898	165	326	0,7580	0,7596	-0,21	0,2420	0,2404	0,67	0,8134	0,8113	0,25	0,9002	0,8899	1,14
39	0,20	0,004	0,797	330	315	0,7658	0,7707	-0,65	0,2342	0,2293	2,11	0,9478	0,9489	-0,11	0,7994	0,7693	3,76
30	0,30	0,007	0,694	435	341	0,7788	0,7738	0,64	0,2212	0,2262	-2,26	0,8642	0,8631	0,13	0,6985	0,7336	-5,02
35	0,20	0,005	0,795	258	352	0,7688	0,7651	0,47	0,2312	0,2349	-1,57	0,6258	0,6238	0,32	0,8011	0,8312	-3,75
22	0,10	0,005	0,895	493	316	0,7400	0,7415	-0,21	0,2600	0,2585	0,58	0,9642	0,9663	-0,21	0,8996	0,8878	1,32
30	0,20	0,008	0,792	365	328	0,7647	0,7805	-2,07	0,2353	0,2195	6,72	0,9100	0,9095	0,05	0,7989	0,6933	13,22
18	0,10	0,009	0,891	202	349	0,7552	0,7493	0,77	0,2448	0,2507	-2,39	0,5728	0,5754	-0,44	0,9045	0,9443	-4,39
35	0,20	0,010	0,791	174	337	0,7732	0,7716	0,20	0,2268	0,2284	-0,67	0,7035	0,7062	-0,39	0,7985	0,8134	-1,86
46	0,40	0,006	0,594	153	351	0,8008	0,7999	0,11	0,1992	0,2001	-0,44	0,3709	0,3668	1,11	0,6027	0,6228	-3,33

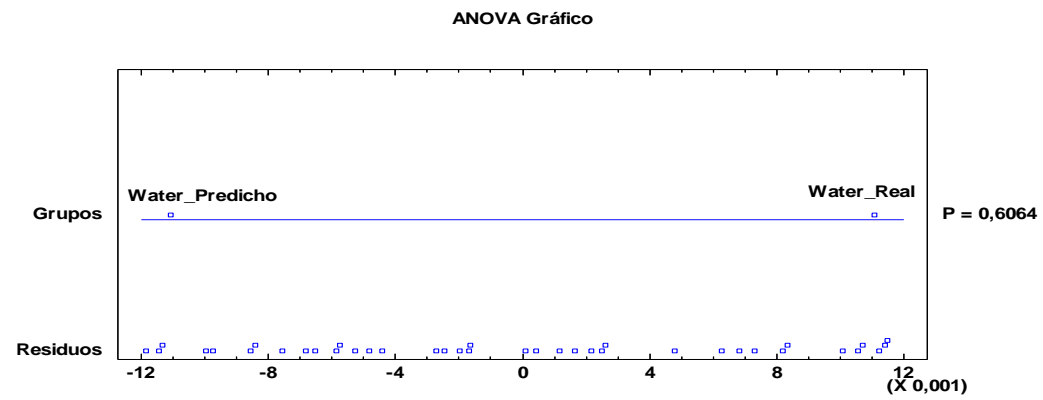
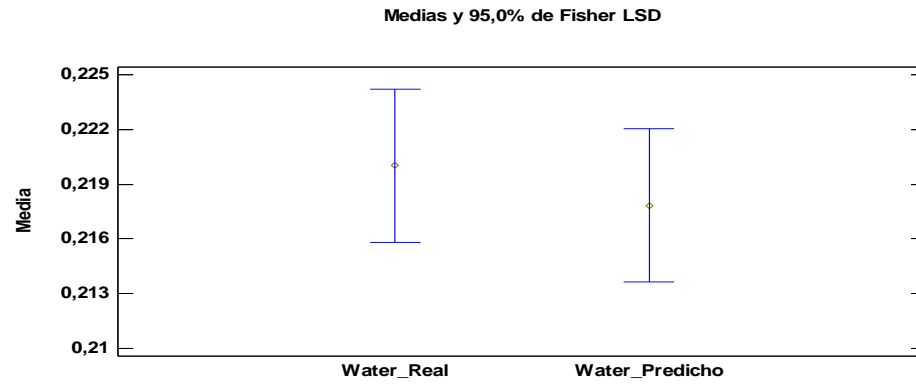
Realizado por: Álvarez, Nicole, 2022.

ANEXO G: GRÁFICOS DE RESULTADOS ESTADÍSTICOS.

Predicción de la fracción másica de etanol en mezcla azeotrópica

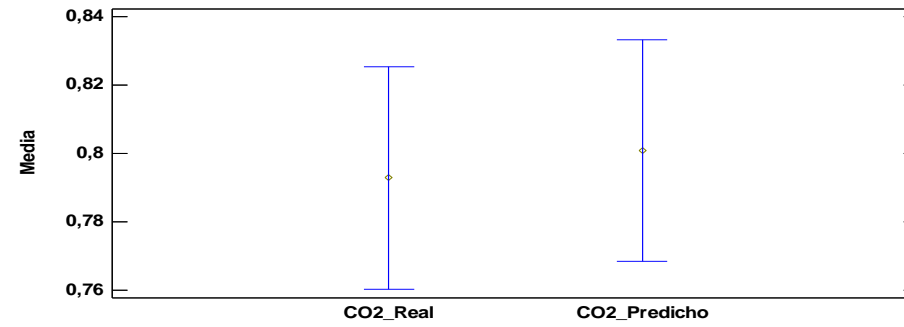


Predicción de la fracción másica de agua en mezcla azeotrópica

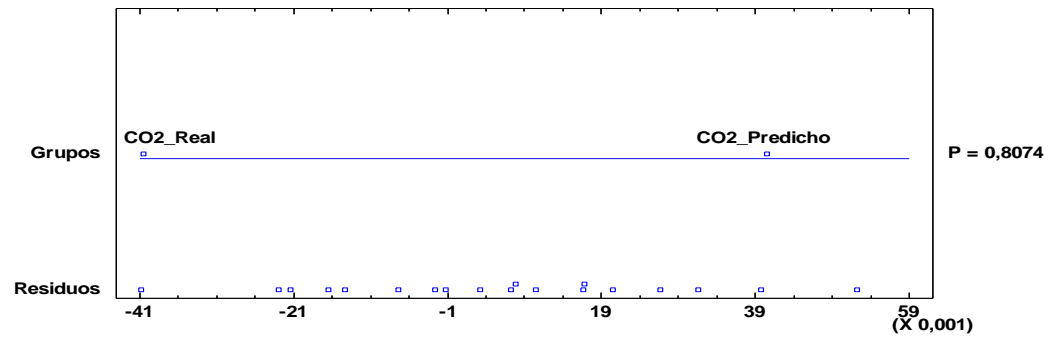


Predicción de la fracción másica de dióxido de carbono

Medias y 95,0% de Fisher LSD

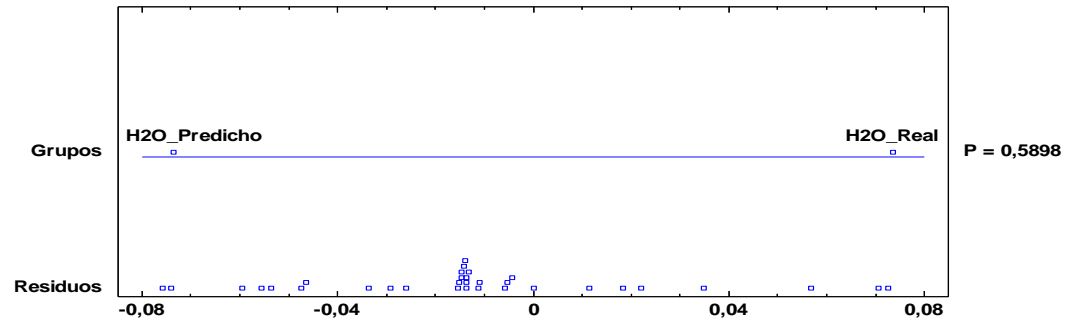


ANOVA Gráfico

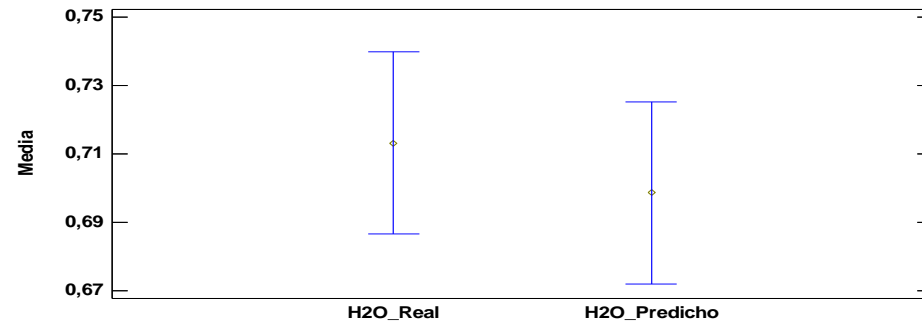


Predicción de la fracción másica de agua

ANOVA Gráfico



Medias y 95,0% de Fisher LSD





epoch

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: 23 / 08 / 2023

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Jhoana Nicole Alvarez Uvidia
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniera Química
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo



23-08-2023

1312-DBRA-UPT-2023