



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN SISTEMA DE
DESTILACIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE AZEÓTROPAS DE
BENCENO – ISOPROPANOL – AGUA EN PROCESOS PARA LA
INDUSTRIA QUÍMICA**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR:

MORALES CHAPALBAY ALEJANDRO EDUARDO

Riobamba – Ecuador

2023



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE UN SISTEMA DE
DESTILACIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE AZEÓTROPOS DE
BENCENO – ISOPROPANOL – AGUA EN PROCESOS PARA LA
INDUSTRIA QUÍMICA**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: MORALES CHAPALBAY ALEJANDRO EDUARDO

DIRECTORA: Ing. CRISTINA GABRIELA CALDERÓN TAPIA, MsC.

Riobamba – Ecuador

2023

© 2024, **Alejandro Eduardo Morales Chapalbay**

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, Alejandro Eduardo Morales Chapalbay, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular es de mi autoría y los resultados de este son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como 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, 15 de abril de 2024



.....
Alejandro Eduardo Morales Chapalbay

060488281-1

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 Y VALIDACIÓN DE UN SISTEMA DE DESTILACIÓN PARA LA SEPARACIÓN DE AZEÓTROPAS DE BENCENO – ISOPROPANOL – AGUA EN PROCESOS PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA**, realizado por el señor: **ALEJANDRO EDUARDO MORALES CHAPALBAY**, 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

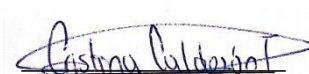
FECHA

Ing. Maria Augusta Guadalupe Alcoser
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL



(15-04-2024)

Ing. Cristina Gabriela Calderón Tapia, MsC.
DIRECTORA DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR



(15-04-2024)

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



(15-04-2024)

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a Amanda Chapalbay, mi madre, quien me ha brindado todo un amor y apoyo incondicional y ha sido mi mayor inspiración y motivación para poder alcanzar mis metas. A mi familia y personas cercanas quienes fueron un gran apoyo emocional durante el tiempo en que escribía este trabajo, dándome su cariño y confianza. Además, quiero expresar mi agradecimiento a mi abuela María Dolores Mayacela, quien siempre estuvo conmigo desde que tengo memoria y cuidado de mí. A pesar de no estar presente para verme cumplir un sueño, su compañía y preocupación siempre fueron y serán pilares en mi formación, y por ello, le estoy eternamente agradecido.

Alejandro

AGRADECIMIENTO

Quiero expresar mi profundo agradecimiento a mi madre y familiares, quienes siempre estuvieron brindándome un apoyo incondicional a largo de todos estos años, inculcándome valores que siempre han predominado en mi vida como el respeto, la responsabilidad, la dedicación, la lealtad y el esfuerzo, siendo pilares fundamentales en mi formación.

Agradezco también a mis nuevos amigos, cuya amistad surgió gracias a esta etapa académica, así como a aquellos amigos que, aunque distantes físicamente, siempre estuvieron ahí para apoyarme y brindarme su atención. Además, agradezco a las personas que una vez estuvieron en mi vida y dejaron una huella imborrable en mi vida. Este recorrido habría sido completamente distinto sin todas estas personas, especialmente aquella figura que ya no está físicamente pero que fue mi guía y motivación durante todo este proceso. Sus recuerdos y lecciones perdurarán en mí eternamente.

Quiero dedicar un agradecimiento especial al Ingeniero Daniel Chuquín por ofrecerme la oportunidad, la confianza y el respaldo necesario para llevar a cabo este trabajo, así como a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo por proporcionarme un entorno de crecimiento académico donde pude desarrollarme y aprender. A todos ustedes, mi más sincero agradecimiento por ser parte de este viaje y por contribuir a mi desarrollo personal y profesional.

Alejandro

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiv
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	xv
RESUMEN	xvi
ABSTRACT.....	xvii
INTRODUCCIÓN.....	1
CAPÍTULO I.....	2
1. Diagnóstico del problema.....	2
1.1 Antecedentes.....	2
1.2 Planteamiento del problema	3
1.3 Justificación.....	3
1.4 Objetivos.....	4
1.4.1 Objetivo General	4
1.4.2 Objetivos Específicos.....	4
CAPÍTULO II	5
2. MARCO TEÓRICO	5
2.1 Antecedentes de investigación.....	5
2.1.1 Simulación del proceso de destilación	5
2.1.2 Redes neuronales artificiales en la industria química	7
2.2 Referencias Teóricas.....	9
2.2.1 IPA (Isopropanol).....	9
2.2.2 DWSIM	10
2.2.3 ChemSep	11
2.2.4 Redes Neuronales.....	11
2.2.5 Redes neuronales de MATLAB	12
CAPITULO III.....	14
3. MARCO METODOLÓGICO	14

3.1	Partes de la metodología.....	14
3.2	Parámetros de funcionamiento	14
3.2.1	Condiciones de operación	14
3.2.2	Proceso de separación	15
3.2.3	Condiciones operativas iniciales en la primera columna y segunda de extracción .	15
3.2.4	Condiciones operativas iniciales en la columna de recuperación del solvente	16
3.3	Simulación en DWSIM	17
3.3.1	Proceso aplicado en DWSIM	17
3.3.2	Diseño del flowsheet.....	18
3.3.3	ConFigurauración de entradas.....	20
3.3.4	ConFiguraurar Operaciones	20
3.4	Análisis de Sensibilidad.....	29
3.5	Tratamiento de datos	30
3.6	Creación de la RNA en MATLAB	31
3.7	Entrenamiento de la RNA.....	32
3.8	Validación de resultados de la RNA.....	34
3.9	Análisis estadístico	36
CAPÍTULO IV.....		37
4.	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	37
4.1	Resultados de la simulación en DWSIM.....	37
4.2	Validación de resultados de la simulación.....	39
4.3	Balance de nada del sistema	40
4.3.1	Balance de masa general para la primera columna de destilación extractiva.....	40
4.3.2	Balance de masa general para la segunda columna de destilación extractiva	42
4.3.3	Balance de masa general para la columna de separación.....	45
4.4	Resultados del análisis de sensibilidad.....	48
4.4.1	Resultados del análisis de sensibilidad modificando FM_F.	48
4.4.2	Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_IPA.	49
4.4.3	Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_H2O.....	51
4.4.4	Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_BEN.....	53
4.5	Resultados del entrenamiento de la RNA.....	55
4.6	Reporte completo de resultados de la RNA.....	58
4.6.1	Desempeño de la RNA.....	59
4.7	Resultados de la predicción de valores reales de la RNA	60
4.7.1	Análisis de los datos predichos por la RNA.....	61
4.8	Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion 19	66

CONCLUSIONES	70
RECOMENDACIONES	71
BIBLIOGRAFÍA	1
ANEXOS	5

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Características de DWSIM.....	10
Tabla 1-3: Datos iniciales para la simulación	15
Tabla 2-3: Condiciones operativas de la columna de extracción.....	16
Tabla 3-3: Condiciones operativas de la segunda columna de extracción.....	16
Tabla 4-3: Condiciones operativas de la columna de recuperación del solvente.....	16
Tabla 5-3: Condiciones complementarias para la simulación.....	29
Tabla 6-3: Parámetros usados para el análisis de sensibilidad.....	30
Tabla 6-3: Variables de entrada de la RNA.....	30
Tabla 7-3: Variables de salida de RNA	31
Tabla 8-3: Validación de la RNA.	35
Tabla 1-4: Resultados de las corrientes obtenidas en DWSIM.....	39
Tabla 2-4: Validación de la simulación en DWSIM.....	39
Tabla 3-4: Variables en el análisis de sensibilidad.	48
Tabla 4-4: Análisis de sensibilidad modificando FM_F.....	48
Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad modificando X_IPA.....	50
Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad modificando X_H2O	51
Tabla 7-4: Análisis de sensibilidad modificando X_BEN	53
Tabla 8-4: Resultados del entrenamiento de la RNA.....	55
Tabla 9-4: Error cuadrático medio del diseño de la RNA.....	58
Tabla 10-4: Errores porcentuales de las predicciones por la RNA	61
Tabla 11-4: ANOVA de resultados de la RNA.....	67

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. Arquitectura típica de una red neuronal	12
Figura 1-3: Metodología para crea una RNA	14
Figura 2-3: Diagrama de flujo del proceso	15
Figura 3-3: Proceso de simulación aplicado	17
Figura 4-3: Diagrama de separación ternaria en DWSIM	19
Figura 5-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep	21
Figura 6-3: Disposición operativa de la columna de destilación	21
Figura 7-3: Detalles de presiones de funcionamiento.....	22
Figura 8-3: Disposición operativa de la columna de destilación	22
Figura 9-3: Condiciones iniciales de funcionamiento	23
Figura 10-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep	24
Figura 11-3: Disposición operativa de la columna de destilación	24
Figura 12-3: Detalles de presiones de funcionamiento.....	25
Figura 13-3: Detalles de presiones de funcionamiento.....	25
Figura 14-3: Condiciones iniciales de funcionamiento	26
Figura 15-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep	27
Figura 16-3: Disposición operativa de la columna de destilación	27
Figura 17-3: Detalles de presiones de funcionamiento.....	28
Figura 18-3: Condiciones iniciales de funcionamiento	28
Figura 19-3: Proceso para análisis de sensibilidad	29
Figura 20-3: Base de datos en Excel.....	31
Figura 21-3: Selección de datos de entrada y salida.	32
Figura 22-3: Selección del porcentaje de datos para entrenamiento, validación y prueba.	33
Figura 23-3: Selección del algoritmo de entrenamiento de RNA.....	34
Figura 1-4: Simulación completa del sistema de separación de benceno-isopropanol-agua.	37

Figura 2-4: Resultados obtenidos en DWSIM.....	38
Figura 3-4: Diagrama de balance general de masa en la primera columna de destilación.	40
Figura 4-4: Diagrama de balance general de masa en la segunda columna de destilación.....	43
Figura 5-4: Diagrama de balance general de masa en la segunda columna de destilación.....	46
Figura 6-4: Resultado del análisis Flujo molar vs Fracción molar de benceno en D1.....	49
Figura 7-4: Resultado del análisis Flujo molar vs Fracción molar de isopropanol en D2.....	49
Figura 8-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar benceno en D1	50
Figura 9-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2.....	51
Figura 10-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar de agua en D3	51
Figura 11-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar benceno en D1.....	52
Figura 12-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2.....	52
Figura 13-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar de agua en D3.....	53
Figura 14-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar benceno en D1.....	54
Figura 15-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2.....	54
Figura 16-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar de agua en D3.....	54
Figura 17-4: Comparación entre las mejores configuraciones para cada algoritmo de entrenamiento.....	57
Figura 18-4: Esquema de la red neuronal artificial diseñada en MATLAB.	58
Figura 19-4: Rendimiento del entrenamiento de la RNA.	59
Figura 20-4: Regresión del entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial.....	60

Figura 21-4: Fracción molar de Benceno real vs el predicho en el destilado de la primera columna (D1).	62
Figura 22-4: Fracción molar de Isopropanol real vs el predicho en el destilado de la segunda columna (D2).	63
Figura 23-4: Fracción molar de Agua real vs el predicho en el destilado de la tercera columna (D3).	64
Figura 24-4: Fracción molar de benceno en el destilado de la primera columna en la validación.	65
Figura 25-4: Fracción molar de isopropanol en el destilado de la segunda columna en la validación.	65
Figura 26-4: Fracción molar de agua en el destilado de la tercera columna en la validación. ..	66
Figura 26-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del benceno	68
Figura 27-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del isopropanol	68
Figura 28-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del agua.....	69

ÍNDICE DE ANEXOS

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

ANEXO B: VARIABLES EMPLEADAS EN EL ENTRENAMIENTO Y DISEÑO DE LA RNA

ANEXO C: CÓDIGO EN MATLAB PARA EL DISEÑO DE LA RNA

ANEXO D: RESULTADOS DEL ERROR EN LA PREDICCIÓN DE LAS SALIDAS CON DATOS DEL ENTRENAMIENTO

ANEXO E: RESULTADOS DEL ERROR EN LA PREDICCIÓN DE LAS SALIDAS CON DATOS PARA LA VALIDACIÓN EXTERNA

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
BEN	Benceno
IPA	Isopropanol
RNA	Red Neuronal Artificial
DC	Columna de destilación
FM_F	Flujo molar en la alimentación
X_BEN	Fracción molar de benceno en la alimentación
X_IPA	Fracción molar de isopropanol en la alimentación
X_H2O	Fracción molar de agua en la alimentación
FR_BEN	Fracción molar de benceno en el destilado de primera columna
FR_IPA	Fracción molar de isopropanol en el destilado de la segunda columna.
FR_H2O	Fracción molar de H2O en el destilado de la tercera columna.
LM	Levenberg-Marquardt
BR	Bayesian Regularization
SCG	Scaled Conjugate Gradient
MSE	Error cuadrático medio
R	Regresión
nftool	Neuronal Fitting

RESUMEN

En el presente trabajo tuvo como objetivo el crear una red neuronal artificial (RNA) la cuál sea capaz de predecir datos acertados o aproximados en base a una predicción del comportamiento de un sistema de separación ternaria de benceno-isopropanol-agua cambiando especificaciones en la corriente de entrada y obteniendo así las fracciones de los componentes principales en cada uno de los destilados, en la primera columna la fracción principal es el benceno, en la segunda columna la fracción principal es de isopropanol y en la tercera columna la fracción es el agua, esto debido a los resultados presentes en la simulación de referencia para este proceso de Tsai y Chien (2021). El diseño, entrenamiento y validación de la red neuronal artificial se lo realizo en el software MATLAB partiendo de datos proporcionados por el software DWSIM validando los resultados de simulación con publicaciones de alto impacto que usan Aspen HYSYS siendo este uno de los más usados a nivel industrial. La red neuronal se desarrolló a partir de una base de datos con 325 datos para su entrenamiento y 25 datos para su validación, la arquitectura de esta tiene 4 entradas, 65 neuronas ocultas y 3 salidas usando para su entrenamiento el algoritmo Bayesian Regularization (BR) obteniendo un Error Cuadrático Medio (MSE) de 1.13867 E-02 y un coeficiente de Regresión Lineal (R) de 0.959099. Se validó la RNA mediante un análisis estadístico comparativo alcanzando un porcentaje de confianza del 95%, se demostró que no existe discrepancia significativa. En la simulación se logró tener una fracción de Benceno de 0.9979 en el primer destilado, de isopropanol de 0.9967 en el segundo destilado y de agua de 0.9993 en el tercer destilado demostrando la viabilidad del proceso industrial para la separación.

Palabras clave: <BENCENO> <ISOPROPANOL> <DWSIM (SOFTWARE)> <RED NEURONAL ARTIFICIAL> <MATLAB (SOFTWARE)> <ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD> <LEVENBERG MARQUARDT (ALGORITMO)>

0531-DBRA-UPT-2025



ABSTRACT

The objective of this work was to create an artificial neural network (ANN) which is able to predict accurate or approximate data based on a prediction of the behavior of a benzene-isopropanol-water ternary separation system by changing specifications in the inlet stream and thus obtaining the fractions of the main components in each of the distillates, in the first column the main fraction is benzene, in the second column the main fraction is isopropanol and in the third column the fraction is water, this due to the results present in the reference simulation for this process by Tsai and Chien (2021). The design, training and validation of the artificial neural network was carried out in MATLAB software using data provided by the DWSIM software, validating the simulation results with high impact publications using Aspen HYSYS, one of the most widely used at industrial level. The neural network was developed from a database with 325 data for training and 25 data for validation, its architecture has 4 inputs, 65 hidden neurons and 3 outputs using the Bayesian Regularization (BR) algorithm for training, obtaining a Mean Squared Error (MSE) of 1.13867 E-02 and a Linear Regression coefficient (R) of 0.959099. The ANN was validated by means of a comparative statistical analysis reaching a confidence percentage of 95%, it was demonstrated that there is no significant discrepancy. The simulation achieved a benzene fraction of 0.9979 in the first distillate, isopropanol fraction of 0.9967 in the second distillate and water fraction of 0.9993 in the third distillate, demonstrating the viability of the industrial process for the separation.

Keywords: <BENZENE> <ISOPROPANOL> <DWSIM (SOFTWARE)> <ARTIFICIAL NEURALNETWORK> <MATLAB (SOFTWARE)> <SENSITIVITY ANALYSIS> <LEVENBERG MARQUARDT (ALGORITHM)>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.

Ced: 1103696132

INTRODUCCIÓN

La simulación de procesos químicos es actualmente un campo floreciente de la ingeniería debido a sus múltiples ventajas, la más notable de las cuales es la modificación de variables clave del proceso con el objetivo de analizar los efectos de estas variables en todo. Permite un estudio detallado y completo del proceso y lo mejora significativamente. Esto garantiza que la simulación de procesos se convierta en una herramienta clave para la investigación, el diseño y la optimización de procesos. Aún hoy este campo se sigue combinando con la aplicación de la inteligencia artificial, y en este trabajo se utilizará una de ellas, como son las redes neuronales artificiales.

La principal ventaja del emulador utilizado es que es de código abierto, es decir. Es gratis, además cuenta con un espacio de trabajo intuitivo que facilita el aprendizaje y herramientas como su propio estudio de creación de componentes, lo que la convierte en una herramienta competitiva. emuladores disponibles en el mercado. El uso de redes neuronales artificiales como herramientas predictivas es objeto de varios estudios sobre diversos procesos industriales. La ventaja de su uso es la capacidad de utilizar todos los parámetros de entrada y obtener resultados con alta confiabilidad, lo que convierte a la tecnología en una poderosa herramienta predictiva.

Para el trabajo de integración, se utilizará neuron fit (nftool) disponible en MATLAB. Esta herramienta le permite seleccionar datos, diseñar y entrenar una ANN y evaluar su rendimiento mediante pruebas estadísticas como el error cuadrático medio (MSE) y el análisis de regresión (R). Para demostrar la eficacia de la red desarrollada, se realizará una validación externa utilizando otros datos no incluidos en la formación. También se realizó un análisis estadístico utilizando herramientas de análisis de varianza para resaltar el poder predictivo de las redes neuronales artificiales y demostrar su confiabilidad.

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

1.1 Antecedentes

El benceno y el isopropanol (IPA) son comúnmente empleados como solventes orgánicos de alta calidad en diversas áreas, como la química y la farmacología. En la producción industrial de cloranfenicol, se utiliza una mezcla ternaria de benceno-IPA-agua, donde el benceno se emplea en exceso para deshidratar el isopropanol (IPA). La separación de esta mezcla mediante destilación convencional es desafiante debido a la presencia de varios azeótropos con puntos de ebullición mínimos. Existen diferentes métodos especializados de destilación, como la destilación extractiva, la destilación por cambio de presión, la destilación azeotrópica y la destilación reactiva, siendo la destilación extractiva particularmente prometedora cuando se elige el extractante adecuado (Cui et al. 2020).

Diferentes estudios presentan diversas configuraciones para la destilación extractiva de corriente lateral con el objetivo de separar benceno/isopropanol/agua, utilizando etilenglicol como disolvente. Estas configuraciones incluyen la destilación extractiva de corriente lateral doble (D-SSED), la destilación extractiva de corriente lateral única (S-SSED) y la destilación extractiva convencional (CED). Se concluye que el esquema D-SSED es la opción más eficiente, logrando un ahorro del 31,52% en el costo total de capital (TAC) y una reducción del 35,56% en las emisiones de CO₂ en comparación con el esquema CED. Para lograr esto, se emplea un procedimiento de optimización basado en recocido simulado en los complejos diagramas de flujo de las tres columnas. La solución óptima se encuentra de manera eficiente mediante tres rondas de búsqueda a partir de un caso base. Este procedimiento destaca las ventajas de ahorro de tiempo, inteligencia y optimización global en contraste con el método de optimización secuencial iterativo convencional (Cui et al. 2020).

En la continua búsqueda de mejorar los procesos industriales para satisfacer la demanda global actual, se enfrentan constantes cambios en las condiciones operativas de estos procesos. Con la tecnología actual, es posible abordar eficazmente y a un bajo costo operativo los desafíos presentes en los ámbitos académico, industrial, empresarial o de proyectos. La simulación de procesos emerge como la opción principal para ofrecer soluciones y realizar análisis detallados, rápidos y económicamente eficientes.

Esta simulación se basa en el análisis matemático de problemas reales que pueden preverse con la ayuda de herramientas tecnológicas. Gracias a la existencia de softwares disponibles, algunos de acceso gratuito y otros de pago, cada uno con características distintivas. En la actualidad, estos programas se han convertido en instrumentos confiables y fáciles de utilizar, posicionándose como medios para evaluar, controlar y optimizar procesos industriales (Biyanto et al. 2011).

1.2 Planteamiento del problema

Como resultado de las buenas capacidades de modelado, las redes neuronales se han utilizado ampliamente para una serie de aplicaciones de ingeniería química, como el análisis de datos de sensores, la detección de fallas y la identificación de procesos no lineales. Sin embargo, son muy pocos los trabajos reportados en los que se evalúa la capacidad de las redes neuronales artificiales (ANN) para modelar procesos que incluyan la destilación extractiva (DE) (Wasewar et al. 2009).

La separación de azeótropos es un problema importante y desafiante en la industria de procesos químicos. Se pueden utilizar varios métodos para este propósito, incluida la destilación por oscilación de presión (PSD), la destilación azeotrópica heterogénea (HAD) y la destilación extractiva (ED) (Gerbaud et al. 2019). La destilación extractiva utiliza un agente de arrastre o disolvente (disolvente ligero, intermedio o pesado) para interactuar con los componentes azeotrópicos, aumentando así la volatilidad relativa entre los componentes clave ligeros y pesados.

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

1.3 Justificación

La recuperación de isopropanol (IPA) en el último tiempo ha tenido suma importancia en la industria debido a que este se puede utilizar como solvente convencional para nitrocelulosa, alcaloides, caucho y aceite, puede usarse como materia prima para sintetizar glicerina, acetato de isopropilo y metil-isobutil cetona. Más importante aún, las características de mayor densidad de energía y valor de combustión hacen que el IPA se use ampliamente como aditivo para combustibles de petróleo y combustibles de aviación (Xu et al. 2022).

Por ese motivo, se opta por simular y validar un sistema alternativo de destilación extractiva para la separación de los azeótropos Benceno – Isopropanol – Agua empleando tres columnas mediante

el software DWSIM, que permita corroborar su eficiencia frente al sistema convencional y comparar los resultados con los valores determinados en bibliografía.

Por otro lado, los resultados permiten el diseño de una red neuronal artificial utilizando el MATLAB, como una herramienta didáctica, confiable y rápida que permita predecir la fracción molar de los principales componentes del sistema de estudio a partir de tres condiciones de entrada: presión, temperatura y relación solvente/alimentación. De esta manera se puede analizar, controlar y/o estudiar el comportamiento del proceso mediante la variación de sus condiciones de forma directa y simplificada.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Simular y validar un sistema de destilación para la separación de azeótropos de Benceno – Isopropanol – Agua.

1.4.2 Objetivos Específicos

- Identificar las variables, parámetros y las operaciones de funcionamiento necesarias para la simulación del proceso
- Validar la simulación del proceso de separación de una mezcla azeotrópica de Benceno – Isopropanol – Agua mediante destilación extractiva comparando los resultados obtenidos en la simulación con el proceso real y tomando como referencia la bibliografía de alto impacto.
- Implementar una red neuronal para la predicción de la mezcla exactitud de la simulación.
- Realizar un análisis estadístico para evaluar la capacidad de predicción de la red neuronal.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes de investigación

2.1.1 *Simulación del proceso de destilación*

Buitrago et al. (2017) detalla que en la época actual se ha implementado el uso de software para generar modelos y simulaciones de procesos químicos siendo estos una gran herramienta didáctica en la industria que se lo implementa con el fin de tener los requisitos y a su vez de minimizar el tiempo de diseñar un equipo o una línea de equipos que lleve un proceso de producción.

Analizando lo que concierne al costo experimental que se puede llevar en una planta piloto la simulación en diferentes softwares ayuda a reducir de una manera drástica r los experimentos haciendo uso de simulaciones por computadora, con el fin de analizar el comportamiento en los componentes del proceso (Tangsriwong et al. 2020).

En este proceso es necesario realizar la separación de Benceno-IPA-Agua utilizando un software de código libre, DWSIM, teniendo en cuenta las propiedades de equilibrio de fase del azeótropo ternario, para predecir el comportamiento de la fase del sistema Shan et al. (2021) aplica una destilación extractiva con una columna (CED) y una destilación extractiva de pared divisora con las cuales recupera el Benceno e IPA de agua residual, aplicando el modelo NRTL para describir el equilibrio líquido-vapor de las composiciones del sistema.

Tsai y Chien (2021) proponen el uso de una triple columna de destilación extractiva de corriente lateral para la separación Benceno-IPA-Agua usando etilenglicol como un agente de arrastre pesado, aplicando una envoltura líquido-líquido que el proceso consta de un decantador y tres torres de destilación las cuales operan a presiones diferentes, haciendo uso del paquete termodinámico UNIQUAC. Los resultados ofrecen un ahorro del 63.4% en el costo operativo.

Aplicando destilación por cambio de presión y destilación azeotrópica heterogénea se puede recuperar el benceno e isopropanol debido a que la mezcla forma azeótropos los cuales son sensibles a la presión, siendo recuperados sin ningún tipo de solvente extra, llevando a cabo la integración parcial de calor para mejorar la eficiencia energética y reducir las emisiones de CO₂. Estos estudios revelaron que el proceso PSD con el orden de productos agua-benceno-IPA puede

resolver de manera altamente efectiva el tratamiento de aguas residuales que contienen solventes orgánicos benceno e IPA (Cui et al. 2019).

Para hacer un diseño mejorado de la recuperación de benceno e isopropanol Tsai, Zhang y Chien (2021) propone el uso de una división líquido-líquido natural en el decantador haciendo una organización de la secuencia de destilación tal que las columnas anteriores se diseñen como separador para preservar el calor latente de la corriente de vapor superior de esta columna. Dando un resultado que el sistema de calor integrado tiene un 75.1% de ahorro en la economía.

Li et al. (2021) adopta un algoritmo realizado en MATLAB con una vinculación posterior a Aspen Plus para tener la simulación destilación extractiva intensificada con columna de pared divisoria para separar mezclas ternarias de benceno-isopropanol-agua. Los resultados dan que el proceso presenta una columna con pared divisora de destilación extractiva junto a una columna de recuperación del solvente, que en este caso es el etilenglicol, siendo el mejor esquema debido a que se reduce un 28.65% el costo anual total y las emisiones de CO₂ un 32.34% si se lo compara con procesos convencionales.

Se desarrollaron cinco estructuras de control para controlar los SSED convencionales y energéticamente eficientes. Las respuestas de los cinco CS se investigaron utilizando una tasa de alimentación de $\pm 10\%$ y perturbaciones de composición de $\pm 20\%$, y el rendimiento de los cinco CS se evaluó cuantitativamente utilizando dos criterios de desviación del objetivo de rendimiento (DPT) y error de integración absoluto en la pureza del producto (IAE). Se encontró que CS1 no puede manejar de manera efectiva las perturbaciones del flujo de alimentación, pero CS2 tiene un buen comportamiento dinámico tanto para el flujo de alimentación como para las perturbaciones de la composición. Los valores de DPT e IAE de CS2 fueron significativamente menores que los de CS1. CS3, CS4 y CS5 pueden tolerar el flujo de alimentación y las perturbaciones de la composición, pero CS4 y CS5 logran una salida de control más favorable que CS3. Los valores DPT e IAE de CS4 y CS5 son muy similares, y ambos son más pequeños que CS3. Estos estudios se hicieron para una destilación extractiva de doble corriente lateral que ahorra energía para la separación de benceno/isopropanol/agua (Xu et al. 2022).

Zhang et al. (2021) realiza un control dinámico de igual manera de una destilación extractiva ternaria de doble corriente lateral teniendo un ahorro de energía. Teniendo un esquema de control que logra obtener un control regulado de forma estable que rechaza las perturbaciones que presenta el rendimiento y en la composición de alimentación, donde los bucles de control tienen la función de controlar la composición de isopropanol mediante un ajuste de velocidad de flujo

del extractante que se da en la columna extractiva C2 y al mismo tiempo regulando la relación de reflujo en la columna extractiva C1 para tener una disminución en el efecto del solvente a través de bucles de control de temperatura en cascada de composición.

2.1.2 *Redes neuronales artificiales en la industria química*

Las técnicas de las redes neuronales están adquiriendo mayor relevancia por el desempeño eficiente y la diversidad de sus aplicaciones en los sectores de las industrias químicas, empleando varios métodos de resolución de esta.

Luo, Shao y Zhang (1995) propone que la solución es el control inferencial donde para las cuales salidas no medibles se infieren con mediciones secundarias y controlar estas salidas. Este artículo propone un estimador inferencial basado en Fuzzy-Neural-Net (FNN), esta está construida por varias redes distribuidas donde su clasificación, ejecución y aprendizaje se rige la teoría de conjuntos difusos. Esta aplicación demostró ser superior a un control convencional, mejorando la pureza de la columna de destilación.

Sharma & Singh, (2012) presenta un ejemplo con el terc-amil metil éter (TAME) el cual presenta un comportamiento altamente no lineal y es lo que se propone en su trabajo, un modelo de control predictivo (MPC) con uso de redes neuronales para controlar estos procesos no lineales. Para esto se usó control PID convencional, modelo de control predictivo y control predictivo de red neuronal (NNPC). Se realizó una comparación y se concluyó que NNPC y MPC tienen mejor rendimiento de control y más suave que el PID, en este caso para el cambio de punto de ajuste y para el cambio de carga de $\pm 10\%$ en el caudal de alimentación.

Savkovic-Stevanovic (1996) propone en su trabajo que se puede hacer la aplicación de una red neuronal inversa para el control de la composición de los productos en una columna de destilación. Esta red neuronal se basa en el algoritmo de retro propagación de la regla delta generalizada lo cual minimiza a la red la suma de cuadrados del residual. Los resultados que se obtuvieron demuestran la viabilidad del uso de redes neuronales para modelos dinámicos no lineales a partir de datos de entrada-salida de la planta.

Como sabemos, en la industria es un problema la operación óptima de una unidad de destilación en nuestro caso de manera que se obtengan buenos resultados con rendimiento y producción variable. Li et al. (2022) propone una solución la cual es una estrategia de optimización (OSS) junto con modelado de redes neuronales integradas en mecanismos (MENN). Se asegura que

MENN podrá reflejar con precisión las características del proceso. Partiendo de estos se realizaron optimizaciones para la temperatura superior de la columna asegurando así productos calificados. Se realizaron pruebas a nivel industrial las cuales mostraron buena adaptación a diferentes rendimientos de producción, esto mejoró la tasa de calificación del producto.

Las redes neuronales también fueron aplicadas a un proceso de destilación de membrana de espacio de aire para diferentes condiciones operativas. En este trabajo que Khayet y Cojocarú (2012) realizó se tomaron en consideración las variables de temperatura de condensación, temperatura de entrada y el caudal de alimentación para las soluciones salinas acuosas y en la respuesta se tomó en cuenta el índice de rendimiento basados en el flujo de permeado como la concentración de sal. Como resultado se obtuvo que la ANN se adapta con precisión a este proceso. Se llegó a esta conclusión analizando predicciones de la ANN y los datos experimentales, dando como resultado un coeficiente de correlación de 0.992, esto fue corroborado por un análisis de varianza (ANOVA). La condición operativa funciona con el método Monte Carlo y las condiciones óptimas fueron de una temperatura de condensación de 13.9 °C, temperatura de entrada 71 °C y caudal de alimentación de 205 L/h, rendimiento experimental con máximo índice de 51.075 kg/m² y lo más importante fue el error residual inferior a 1%.

Una aplicación interesante de la destilación de membrana para la desalinización es con el uso de energías renovables, el problema radica en el control y la optimización ya que se opera de manera discontinua y no estacionariamente. Porrazzo et al. (2013) propone en su trabajo la implementación de una red neuronal, entrenándola con datos experimentales deliberados, posterior se analizó el rendimiento del proceso en diversas condiciones operativas para poder saber respecto a la producción del destilado el caudal de alimentación, radiación solar y temperatura de alimentación en frío. Se concluyó que la red neuronal cumple su función en condiciones operativas variables.

Las redes neuronales han sido también usadas para la predicción del flujo de agua del efluente donde Idris et al. (2022) escogió en su trabajo que sería de un molino de aceite de palma pretratado (POME) usando destilación por membrana de contacto directo (DCMD). Este modelo le permitió identificar rangos de temperatura y velocidad de alimentación para una operación óptima. Se usó una red neuronal Artificial FeedForward (FANN) multicapa con 1 capa oculta con 13 neuronas ocultas con tres variables de entrada (temperatura, velocidad de alimentación y membrana) y en la salida con 18 puntos de datos experimentales. Los resultados fueron favorables a la aplicación de la red neuronal obteniendo un error cuadrático medio de 0.0034 que fue el más bajo y coeficiente de regresión (R) en entrenamiento, validación y prueba de 0.9859, 0.9986 y 0.9984

121 respectivamente. Se reconoció que la temperatura de alimentación era el parámetro más sensible.

(Dantas et al. 2020) en su trabajo tuvo como objetivo el extraer aceite de pachulí, para optimizar y maximizar sus resultados aplicó una red neuronal artificial (ANN) y metodología de superficie de respuesta (RSM) obteniendo así fracciones ricas en patchoulol. Entre las condiciones óptimas obtuvo temperatura de evaporación de 85 °C, temperatura del condensador de 10 °C, y velocidad de agitación de 600 RPM. Con estas condiciones se obtuvo una recuperación de 74.22%. Esto demostró una buena capacidad predictiva de la ANN junto con RSM.

Para la producción de aceite base para lubricantes es usada esta operación de destilación al vacío y es importante su control para cumplir con el control de calidad en el producto final. El modelo matemático VDU es uno de los más usados para el control de las variables de esta operación, sin embargo, la problemática está en la falta de conocimiento y limitada capacidad de obtener datos. Se ha pensado en desarrollar sensores y controladores inferenciales hay características complejas. Yoon et al. (2022) da una solución y es la de desarrollar una RNN apilada con longitud de secuencia para predecir la viscosidad cinemática. Estos predictores de calidad se aplican para desarrollar un optimizador en tiempo real para ajustar las variables operativas clave para nuestro producto. Se propone continuar con este estudio desarrollando los sensores y controladores que ya mencionamos.

Retomando la desalinización, se aplica un ANN en el proceso de destilación de membrana al vacío para describir y evaluar el desempeño donde las variables de entrada 1son presión de vacío, temperatura de entrada de alimentación, concentración de la solución acuosa de sal de alimentación y caudal de alimentación y en la respuesta el flujo de permeado. Como resultado la ANN es capaz de modelar este proceso y se optimizó con la aplicación de algoritmos genéticos (Tavakolmoghadam y Safavi 2012).

2.2 Referencias Teóricas

2.2.1 IPA (Isopropanol)

IPA, también conocido como isopropanol, isopropanol o 2-propanol; es un líquido incoloro, no polar, muy volátil (se evapora rápidamente) y tiene una alta densidad de energía. El método principal para extraer IPA es la hidratación de propileno catalizada por ácido, en la que se produce éter diisopropílico (DIPE) como subproducto. Dadas las propiedades relevantes mencionadas anteriormente, el IPA es un producto que tiene una gran demanda principalmente como solvente

de limpieza, como intermediario en procesos industriales, con fines higiénicos y como aditivo para combustible. Debido a su alta densidad energética y poder calorífico, se utiliza principalmente como aditivo para combustibles derivados del petróleo (Shan et al. 2021).

2.2.2 DWSIM

DWSIM es un simulador de procesos para ingeniería química de código abierto y libre descarga. Además, cumple con CAPE-OPEN, interfaz que posee una serie de especificaciones para un amplio rango de aplicaciones en simulaciones. Este estándar establece los requisitos con los que debe cumplir el código a la hora de calcular las funciones termodinámicas, equilibrios químicos y de fases, etc (DWSIM 2020).

2.2.2.1 Características

DWSIM presenta una interfaz gráfica fácil de usar y sobre todo intuitiva; además, permite el uso de operaciones unitarias, modelos termodinámicos complejos, herramientas para caracterizar crudos y soporte para sistemas reactivos.

Tabla 1-2: Características de DWSIM.

Característica	Observación
Modelos termodinámicos	<ul style="list-style-type: none"> ▪ GERG-2008 ▪ PC-SAFT ▪ CoolProp, ▪ Peng-Robinson ▪ Peng-Robinson (1978), ▪ Soave-Redlich-Kwong ▪ Lee-Kesler ▪ Lee-Kesler-Plöcker ▪ UNIFAC ▪ Modified UNIFAC (Dortmund) ▪ UNIQUAC ▪ NRTL ▪ Chao-Seader ▪ Grayson-Streed ▪ Raoult's Law ▪ IAPWS-IF97 (tablas de vapor) ▪ IAPWS-08 (agua de mar)

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Black-Oil (petróleo) ▪ Sour Water and Aqueous Electrolytes
Operaciones unitarias de estado estacionario	Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores, separador de componentes, placa de orificio, columnas de destilación/absorción, separador de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo, Python Script y Diagrama de Flujo de operaciones unitarias.
Operaciones unitarias de estado dinámico	Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, hoja de cálculo y Python Script.

Fuente: (DWSIM 2023)

Elaborado por: Morales A., 2024

2.2.3 ChemSep

ChemSep es un simulador de columna utilizado para ejecutar operaciones de destilación, extracción y absorción. La interfaz es fácil e intuitiva, combina un modelo clásico de columna de etapa de equilibrio con un modelo de columna de no equilibrio. Además, la base de datos de productos químicos es muy amplia y abarca alrededor de 400 ítems (CHEMPSEP 2020).

2.2.4 Redes Neuronales

Las técnicas de Inteligencia Artificial denominadas Redes Neuronales Artificiales (RNA) están adquiriendo cada día mayor relevancia por su desempeño eficiente y la diversidad de sus aplicaciones en los sectores de la industria y servicios.

Una propiedad de suma importancia de las redes neuronales artificiales es su capacidad para representar relaciones funcionales no lineales dadas topologías de red apropiadas. Además, la estructura del modelo de proceso basado en redes neuronales resultante puede considerarse general y requiere poco conocimiento previo del proceso para su determinación. Por lo tanto, proporciona una técnica de modelado de procesos confiable y rentable (Biyanto et al. 2011).

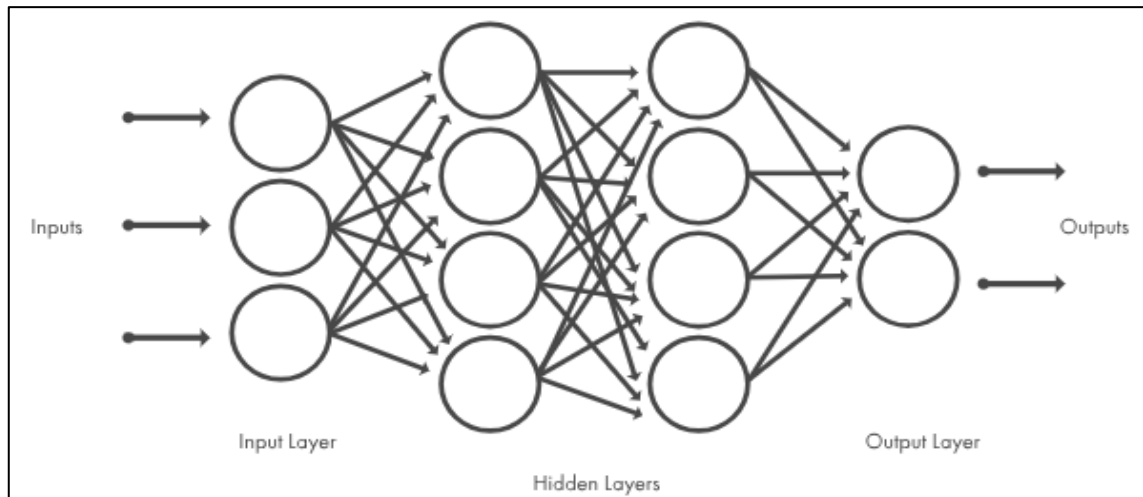


Figura 1-2. Arquitectura típica de una red neuronal

Fuente: (MATLAB 2022).

- **Neurona o Nodo:** Conjunto de unidades de procesamiento.
- **Regla de Propagación:** Es un elemento relacionado con diferentes formas como: lineal, cuadrática, a distancia o polinómica (no lineal).
- **El patrón de conexiones entre neuronas:** las conexiones se definen mediante pesos que determinan la influencia de las entradas sobre las salidas.
- **Función de Activación o Transferencia:** Determina un nuevo nivel de activación basado en la entrada y el nivel actual. Pueden ser: lineal, tanh, escalonada, seno, etc.

2.2.5 *Redes neuronales de MATLAB*

Con herramientas y funciones para gestionar grandes conjuntos de datos, MATLAB® proporciona una caja de herramientas dedicada para el aprendizaje automático, las redes neuronales, el aprendizaje profundo, la visión artificial y la conducción autónoma. Con sólo unas pocas líneas de código, MATLAB permite desarrollar redes neuronales sin ser un experto. Puede ponerse en marcha rápidamente, crear y visualizar modelos o implementar modelos en servidores y dispositivos integrados.

MATLAB le permite integrar los resultados en aplicaciones existentes. MATLAB automatiza la implementación de modelos de redes neuronales en sistemas empresariales, clústeres, nubes y dispositivos integrados (MATLAB 2022).

El preprocesamiento de entradas y objetivos de la red mejora la eficiencia del entrenamiento de redes neuronales poco profundas. El post-procesamiento permite un análisis detallado del rendimiento de la red. MATLAB y Simulink proporcionan herramientas para ayudarle a:

- Reducir las dimensiones de los vectores de entrada mediante el análisis de componentes principales.
- Llevar a cabo análisis de regresión entre la respuesta de la red y los objetivos correspondientes.
- Escalar las entradas y los objetivos para que se ajusten al rango $[-1,1]$
- Normalizar la media y la desviación estándar del conjunto de datos de entrenamiento.
- Utilizar el preprocesamiento de datos y la división de datos automatizados al crear sus redes (MATLAB 2022).

CAPITULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1 Partes de la metodología

Después de tener las bases teóricas necesarias para el presente Trabajo de Integración Curricular, se propone la siguiente metodología detallada en la Figura. 2:

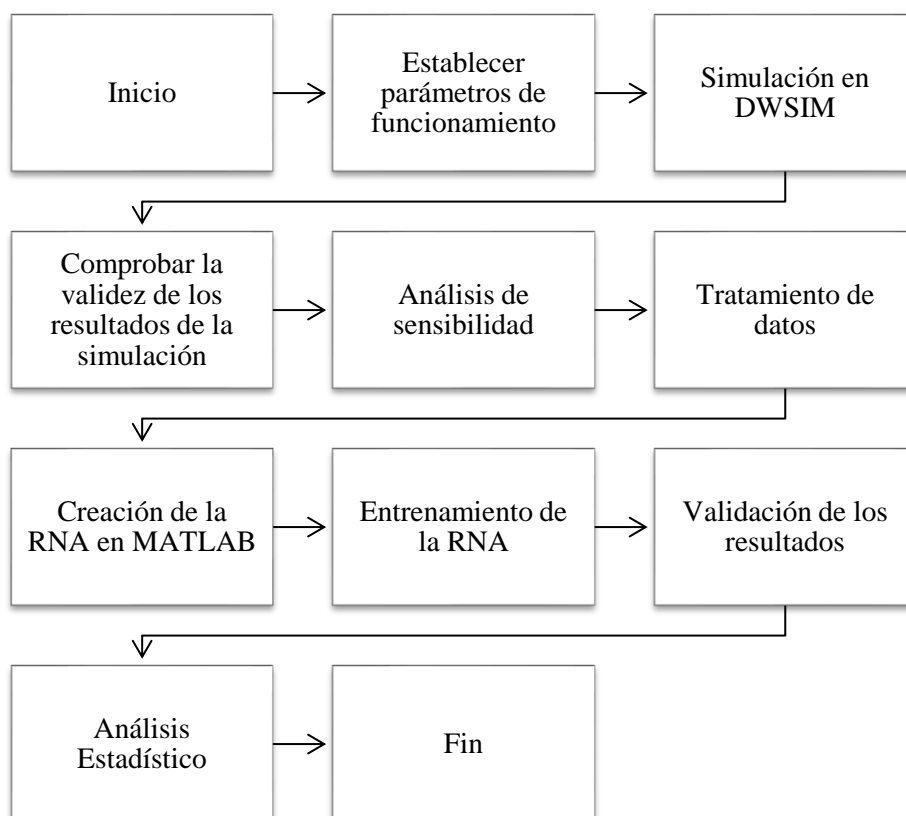


Figura 1-3: Metodología para crea una RNA

Realizado por: Morales, A., 2024.

3.2 Parámetros de funcionamiento

Los datos iniciales fueron obtenidos del artículo:

Design and control of an energy-efficient process for the separation of benzene/isopropanol/water ternary mixture llevado a cabo por Meng-Lin Tsai , I-Lung Chien (2021) del Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Taiwán, basándose en la simulación que realizó (Cui et al. 2020).

3.2.1 Condiciones de operación

Tabla 1-3: Datos iniciales para la simulación

Parámetros	Entradas				Unidades
	Feed			SF1	
	Valor				
Flujo Molar	100			114.1	kmol/h
Composición	IPA	H ₂ O	Benceno	EG	%mol
	0.6	0.1	0.3	1	
Temperatura	320			323	°K
Presión	1.1			1	atm

Fuente: (Tsai y Chien 2021b).

Realizado por: Morales, A., 2024.

Tomando en cuenta los datos de la Tabla 1-3, se desarrollará la separación de la mezcla de ISOPRAPANOL-BENCENO-AGUA con la mayor eficiencia posible.

3.2.2 Proceso de separación

Como se puede observar en la Figura 2-3, muestra el diagrama de flujo para la separación en donde se tiene un proceso que involucra 3 columnas, las 2 primeras son columnas de extracción del benceno e isopropanol, y la última columna es para la recuperación del solvente.

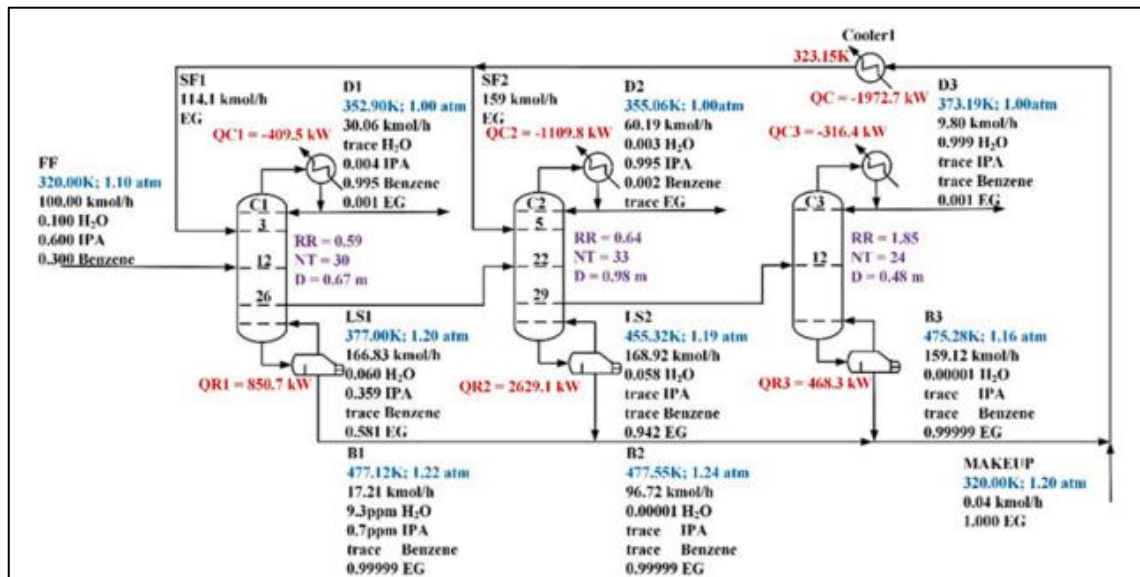


Figura 2-3: Diagrama de flujo del proceso

Fuente: (Tsai y Chien 2021b)

3.2.3 Condiciones operativas iniciales en la primera columna y segunda de extracción

Tabla 2-3: Condiciones operativas de la columna de extracción

Propiedades de la columna de destilación extractiva con salida lateral (DC)		
Parámetros	Valor	Unidades
Número de total de etapas	30	-
Etapas de alimentación	12	-
Etapas de entrada del solvente	3	-
Etapas de salida de corriente lateral	26	-
Rehervidor	Líquido Parcial	-
Condensador	Vapor Total	-
Presión de la etapa inferior	1.2	Atm
Presión de la etapa superior	1	Atm
Trabajo del rehervidor	850.7	kW
Temperatura del condensado	352.90	°K
Caudal de la corriente de fondo	17.21	kmol/h

Fuente: (Tsai y Chien 2021b)

Realizado por: Morales A., 2024

Tabla 3-3: Condiciones operativas de la segunda columna de extracción

Propiedades de la segunda columna de destilación extractiva con salida lateral (DC)		
Parámetros	Valor	Unidades
Número de total de etapas	33	-
Etapas de alimentación	22	-
Etapas de entrada del solvente	5	-
Etapas de salida de corriente lateral	29	-
Rehervidor	Líquido Parcial	-
Condensador	Vapor Total	-
Presión de la etapa inferior	1.24	Atm
Presión de la etapa superior	1	Atm
Trabajo del rehervidor	2629.1	kW
Temperatura del condensado	355.06	°K
Caudal de la corriente de fondo	96.72	kmol/h

Fuente: (Tsai y Chien 2021b)

Realizado por: Morales A., 2024

Los parámetros fueron obtenidos por Tsai y Chien (2021b), en su diseño para la primera y segunda columna de extracción lo hicieron de manera iterativa ajustando la salida a 99.5% del destilado de benceno y a 99.5% de IPA respectivamente, además con una corriente lateral en cada una de las columnas para así tener una mejor eficiencia en los resultados de lo destilados.

3.2.4 Condiciones operativas iniciales en la columna de recuperación del solvente

Tabla 4-3: Condiciones operativas de la columna de recuperación del solvente

Propiedades de la columna de destilación extractiva (DC)		
Parámetros	Valor	Unidades
Número de total de etapas	24	-
Etapas de alimentación	12	-
Rehervidor	Líquido Parcial	-
Condensador	Vapor Total	-
Presión de la etapa inferior	1.16	Atm
Presión de la etapa superior	1	Atm
Trabajo del rehervidor	468.3	kW
Temperatura del condensado	373.19	°K
Caudal de la corriente de fondo	159.12	kmol/h

Fuente: (Tsai y Chien 2021b)

Realizado por: Morales A., 2024

Esta columna también posee un condensador parcial. Como se observa en la Figura 2-3, el agua con alta pureza (99,9 % en moles) y un producto de fondo que es el solvente EG con pureza 99.9%.

3.3 Simulación en DWSIM

3.3.1 Proceso aplicado en DWSIM

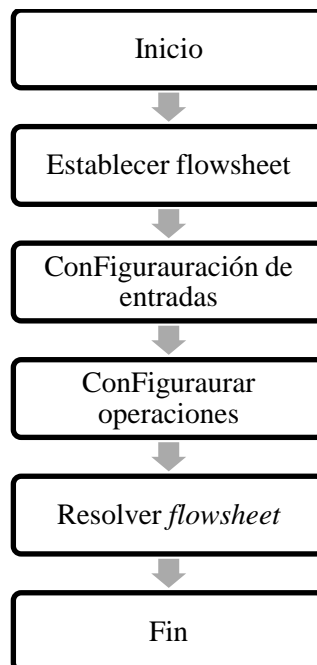


Figura 3-3: Proceso de simulación aplicado

Realizado por: Morales A., 2024

3.3.2 Diseño del flowsheet

Para el diagrama de flujo empleado en la simulación está basado en la Figura 2-3, este proceso de separación de una mezcla ternaria de benceno-isopropanol-agua fue propuesto Tsai y Chien (2021b), en su trabajo este proceso fue simulado con ASPEN PLUS, también presentan datos detallados sobre el diseño de las columnas de destilación estos parámetros encontrados en su trabajo serán aplicados para la simulación en DWSIM y adaptados con los paquetes termodinámicos con los que cuenta, en la Figura. 4 se muestra el diseño del flowsheet propuesto para la separación de una mezcla ternaria de benceno-isopropanol-agua en DWSIM.

3.3.2.1 Descripción del flowsheet

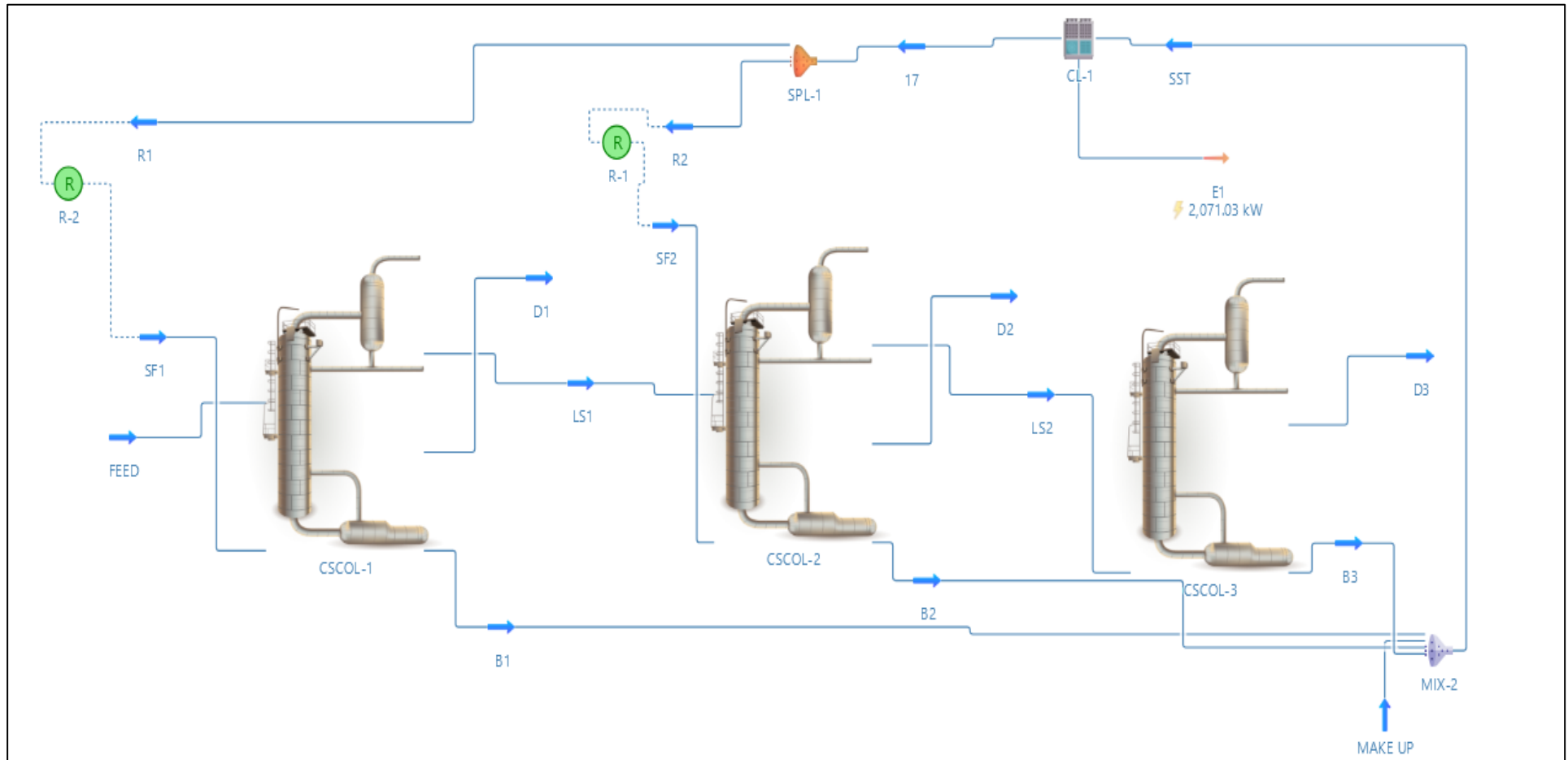


Figura 4-3: Diagrama de separación ternaria en DWSIM

Realizado por: Morales, A., 2024

3.3.3 Configuración de entradas

Las condiciones iniciales de funcionamiento para S-01 y S-02 son especificadas en la Tabla 1-3 se eligió el paquete termodinámico NRTL, para el caso del reflujo que se da en el proceso se necesita bloques lógicos disponibles en DWSIM (REC), estos ayudan a que el simulador aplique los arreglos requeridos en los ajustes por interacciones tanto en los balances de materia como en los balances de energía hasta obtener la convergencia deseada.

3.3.4 Configuración de Operaciones

Luego de tener listo las entradas es necesario especificar las condiciones de trabajo para todos los equipos que intervienen en el proceso de separación de una mezcla ternario de benceno-isopropanol-agua, Enfriamiento (Cooler), Mezclador (Mixer) y Separador (Splitter).

3.3.4.1 Destilación

Para la primera columna de destilación se emplea el modelo incluido en DWSIM conocido como “ChemSep Column”, las condiciones de funcionamiento se detallan en la Tabla 3-3, se emplea el modelo termodinámico DECHEMA/Ideal gas law/NRTL/Riedel/Ideal, para modelar el equilibrio vapor-liquido en la simulación la fuente para los parámetros de interacción binaria se emplean los datos obtenidos en el trabajo de Tsai y Chien (2021b) estos parámetros fueron obtenidos de la base de datos del simulador Aspen Plus y adaptados a DWSIM.

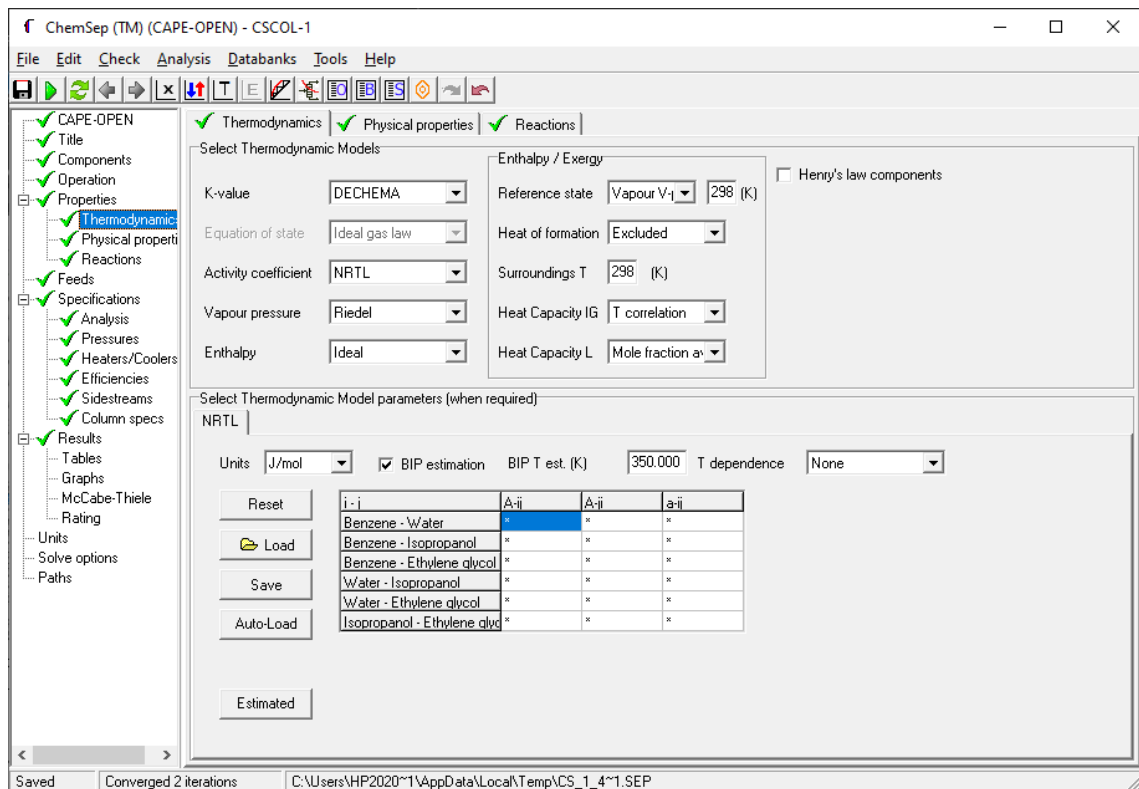


Figura 5-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep

Realizado por: Morales, A., 2024

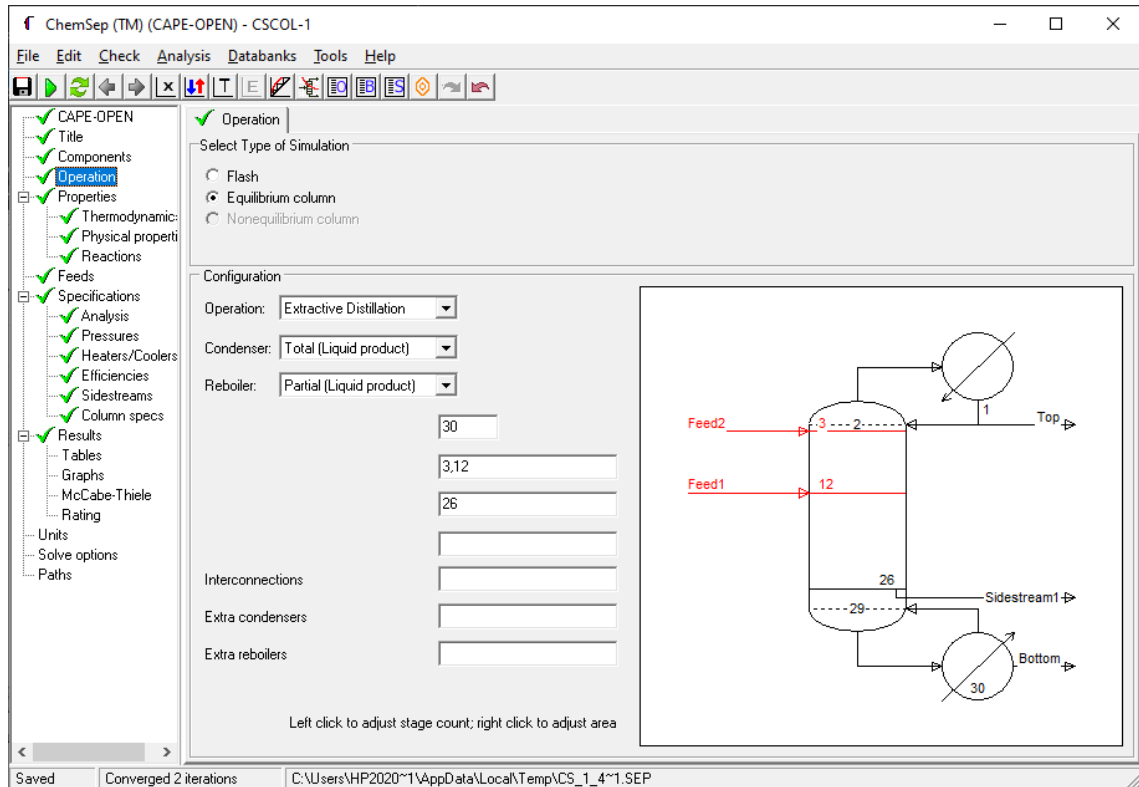


Figura 6-3: Disposición operativa de la columna de destilación

Realizado por: Morales, A., 2024

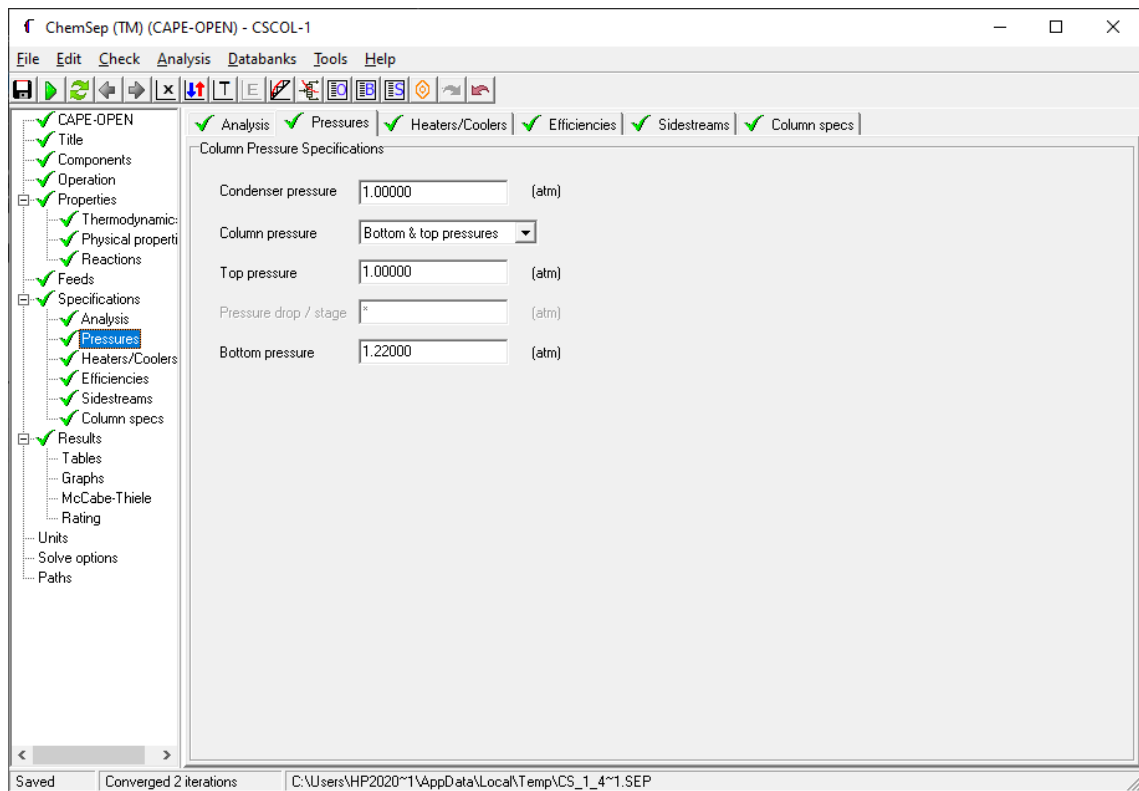


Figura 7-3: Detalles de presiones de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

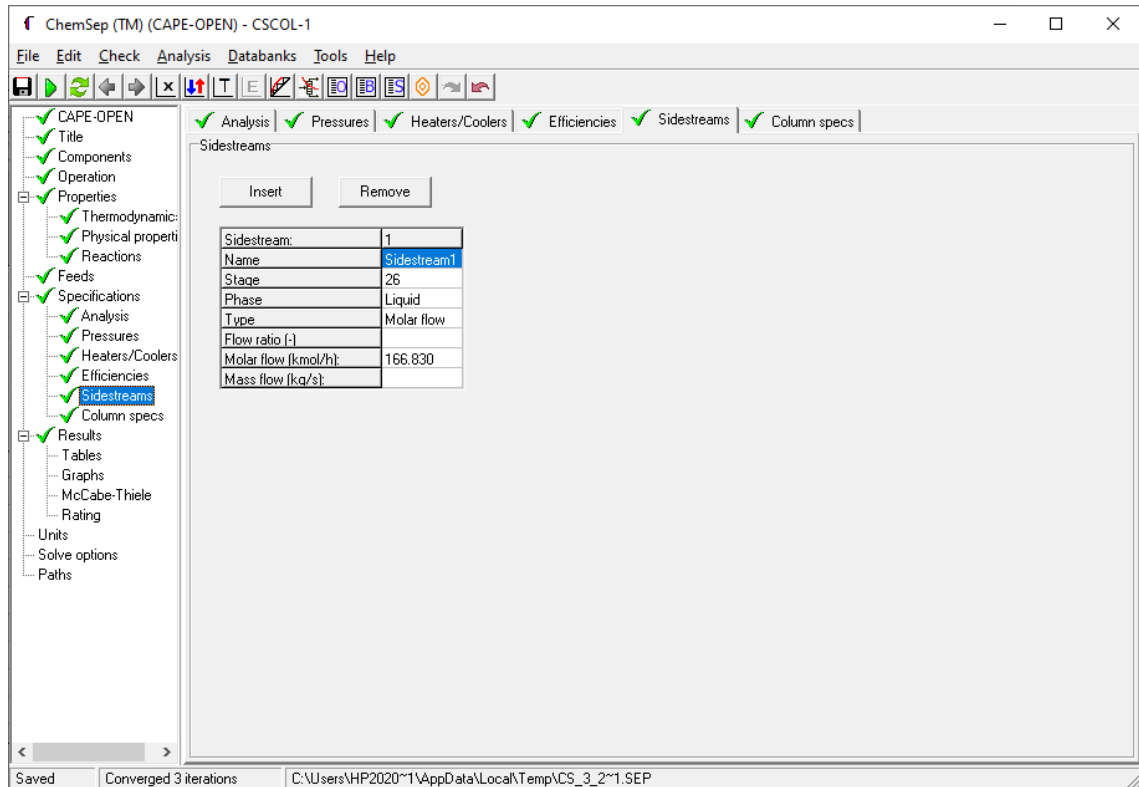


Figura 8-3: Disposición operativa de la columna de destilación

Realizado por: Morales, A., 2024

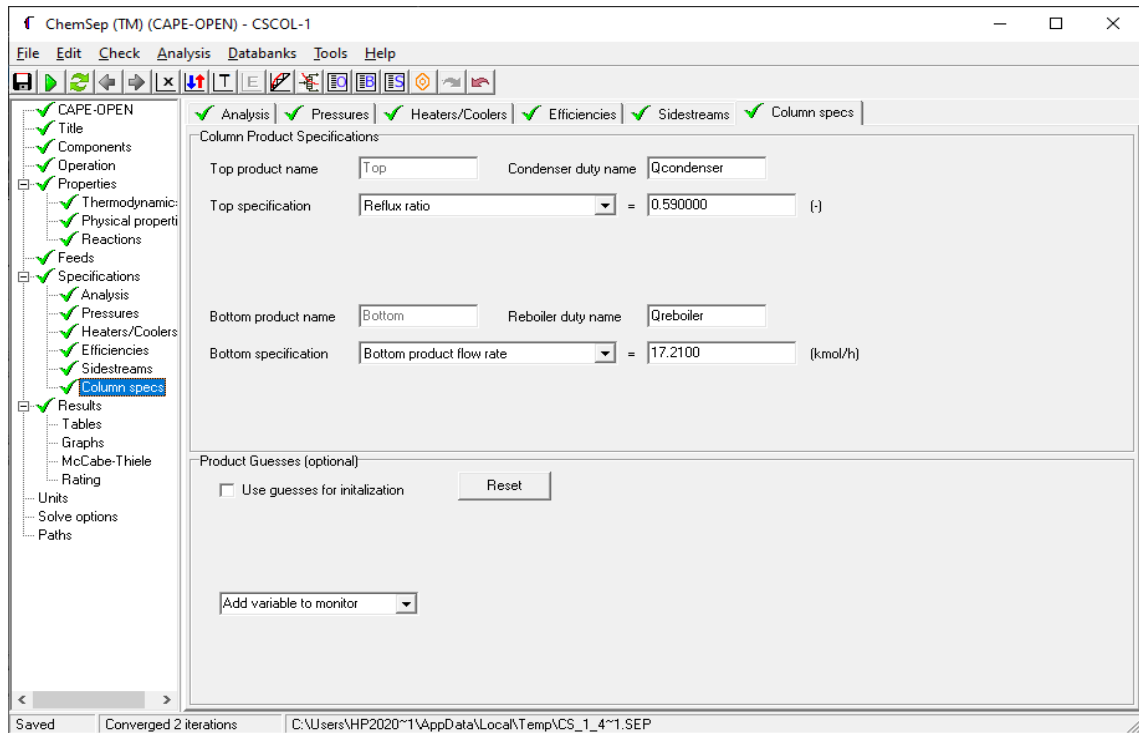


Figura 9-3: Condiciones iniciales de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

Para la segunda columna de destilación se emplea el mismo modelo incluido en DWSIM que en la primera columna conocido como “ChemSep Column”, las condiciones de funcionamiento se detallan en la Tabla 3-3, se emplea el modelo termodinámico DECHEMA/Ideal gas law/UNIFAC/Antoine/Peng-Robinson 78.

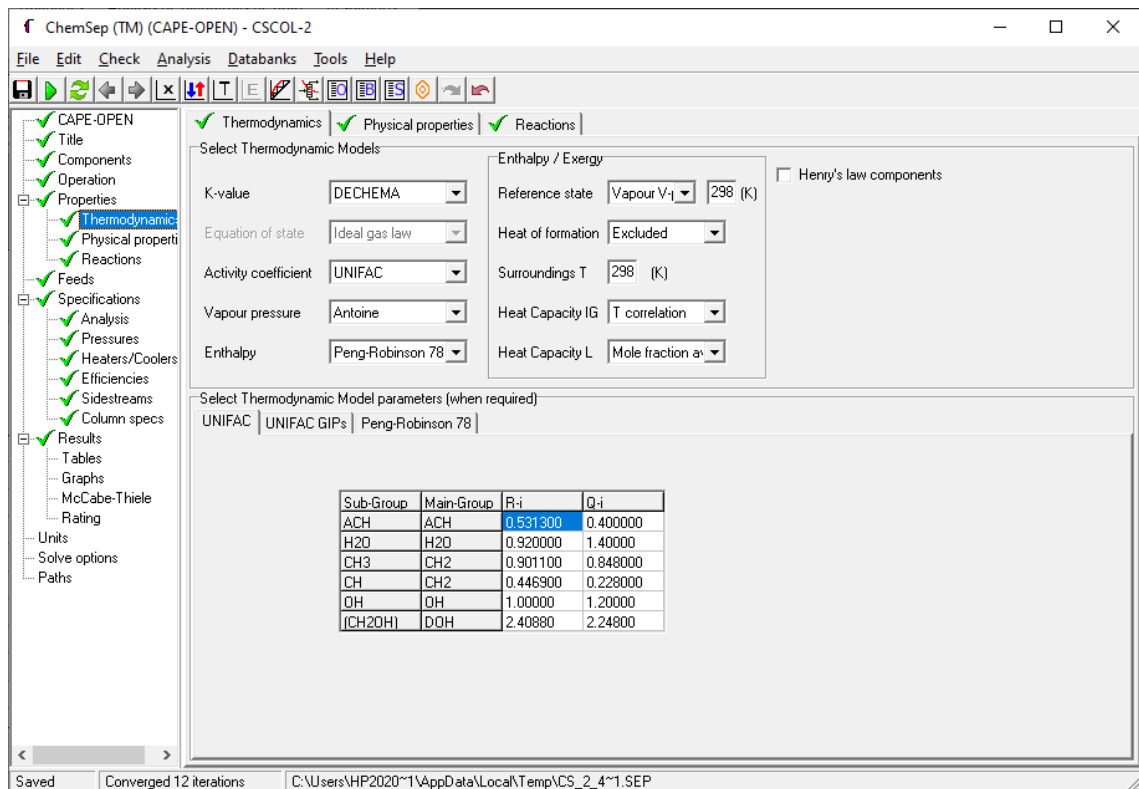


Figura 10-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep

Realizado por: Morales, A., 2024

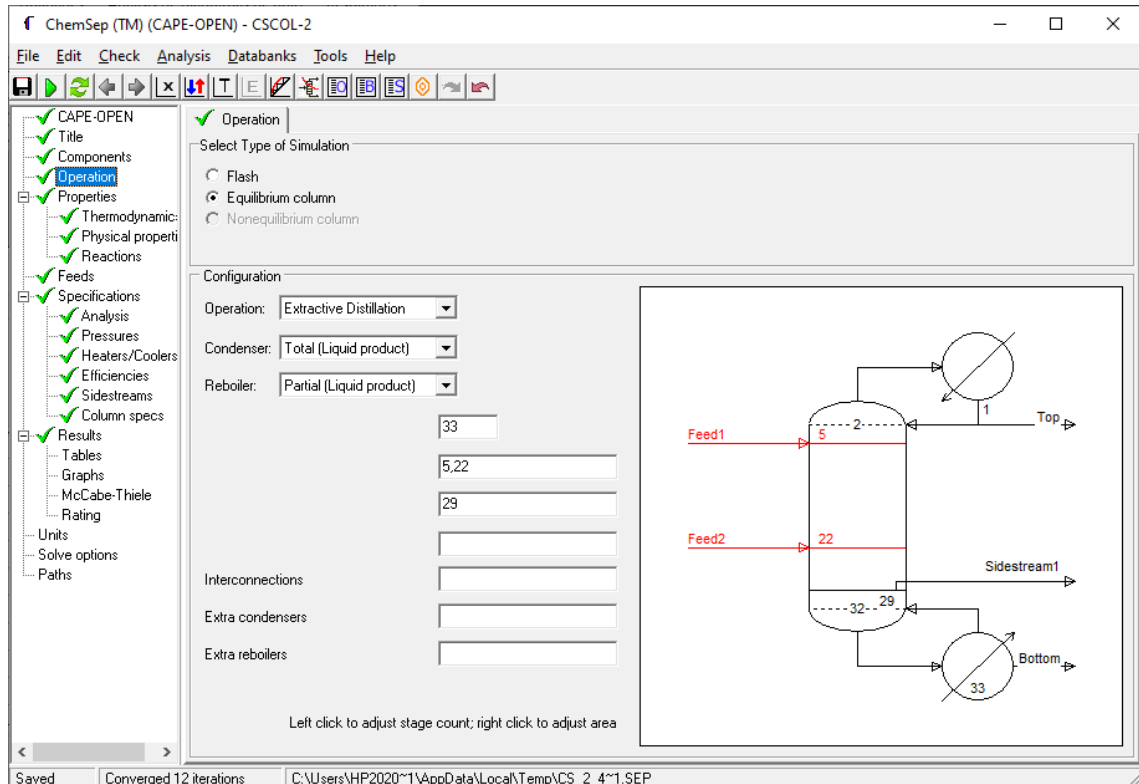


Figura 11-3: Disposición operativa de la columna de destilación

Realizado por: Morales, A., 2024

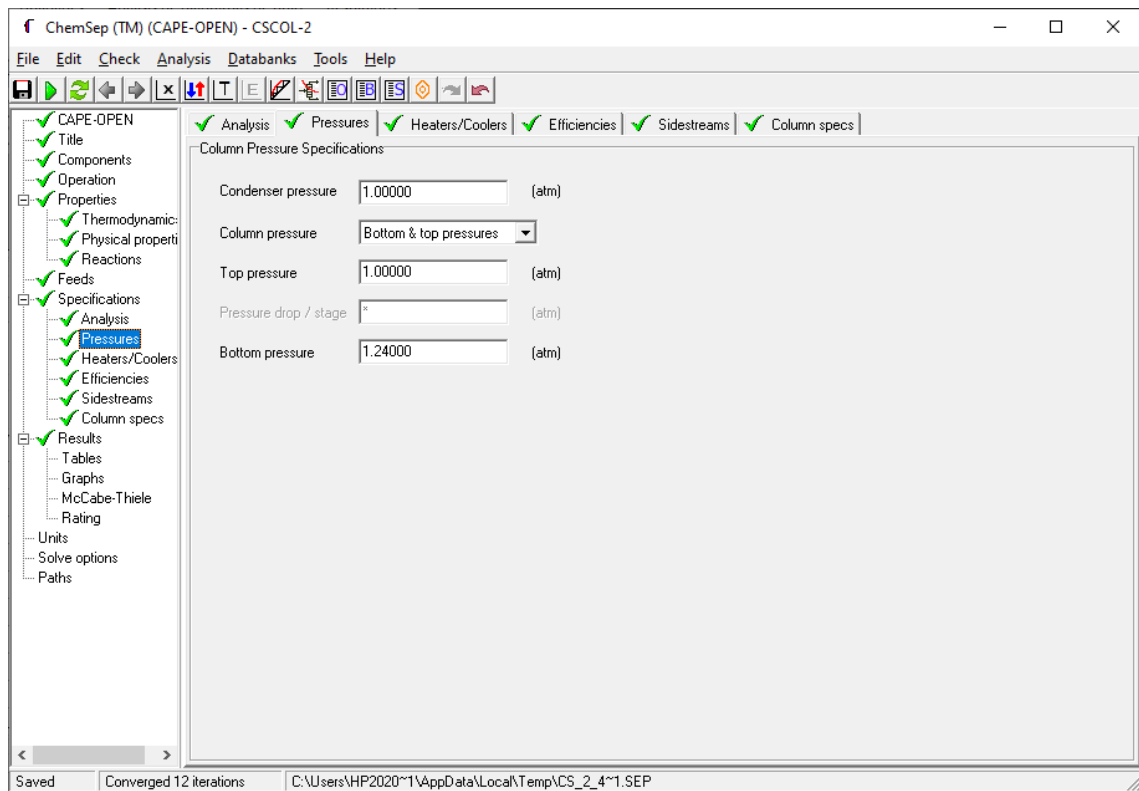


Figura 12-3: Detalles de presiones de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

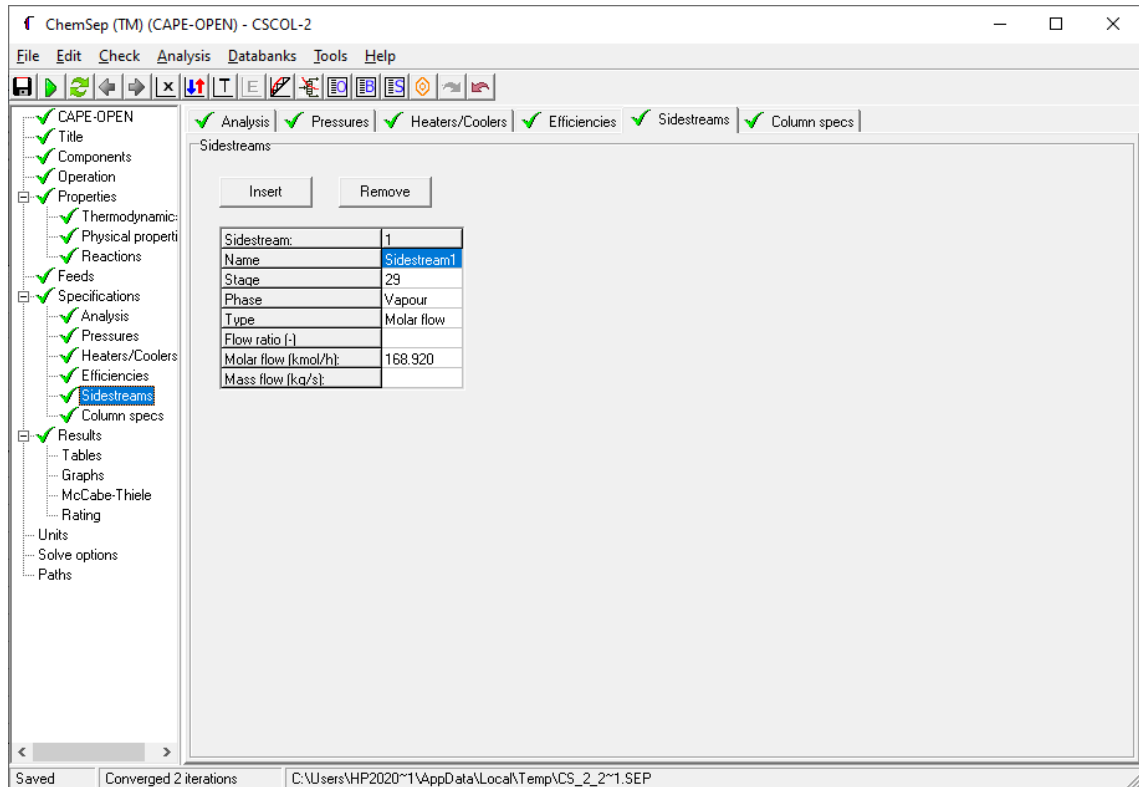


Figura 13-3: Detalles de presiones de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

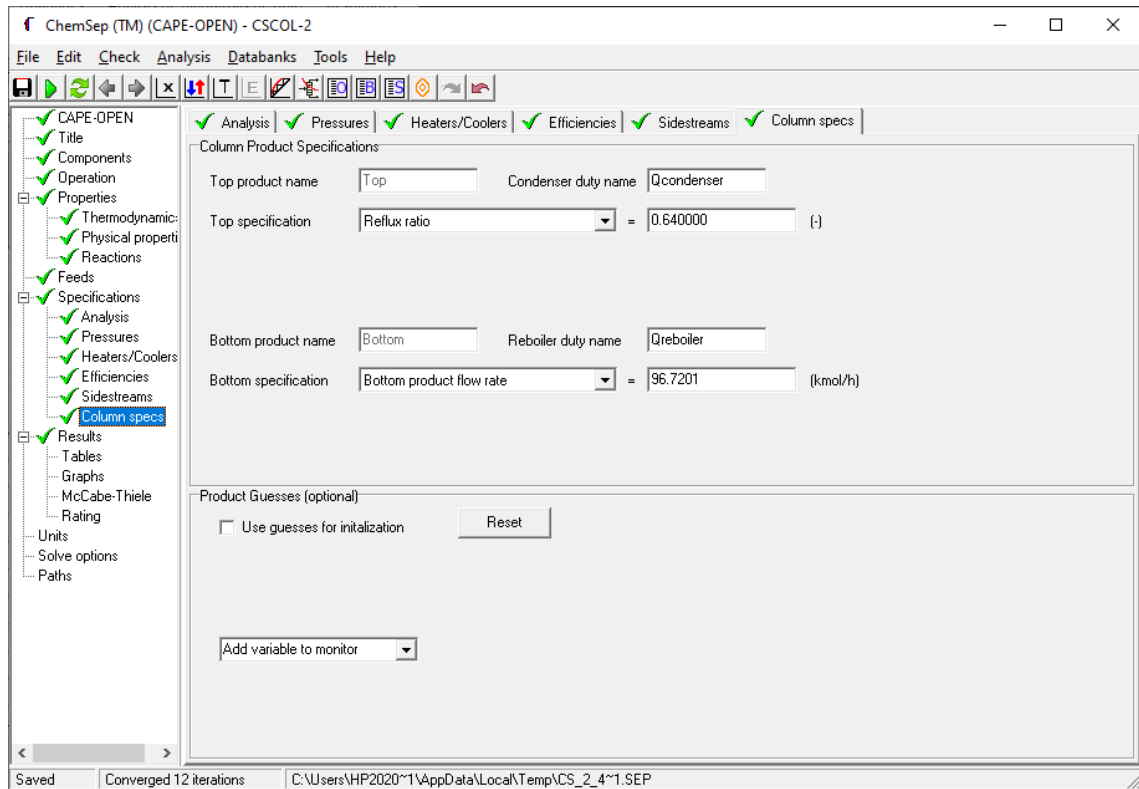


Figura 14-3: Condiciones iniciales de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

Para la última columna de destilación se emplea el mismo procedimiento que las otras dos anteriores, las condiciones de funcionamiento se detallan en la Tabla 3-3, se emplea el modelo termodinámico Gamma-Phi/Peng-Robinson 78/UNIQUAC/Antoine/Ideal.

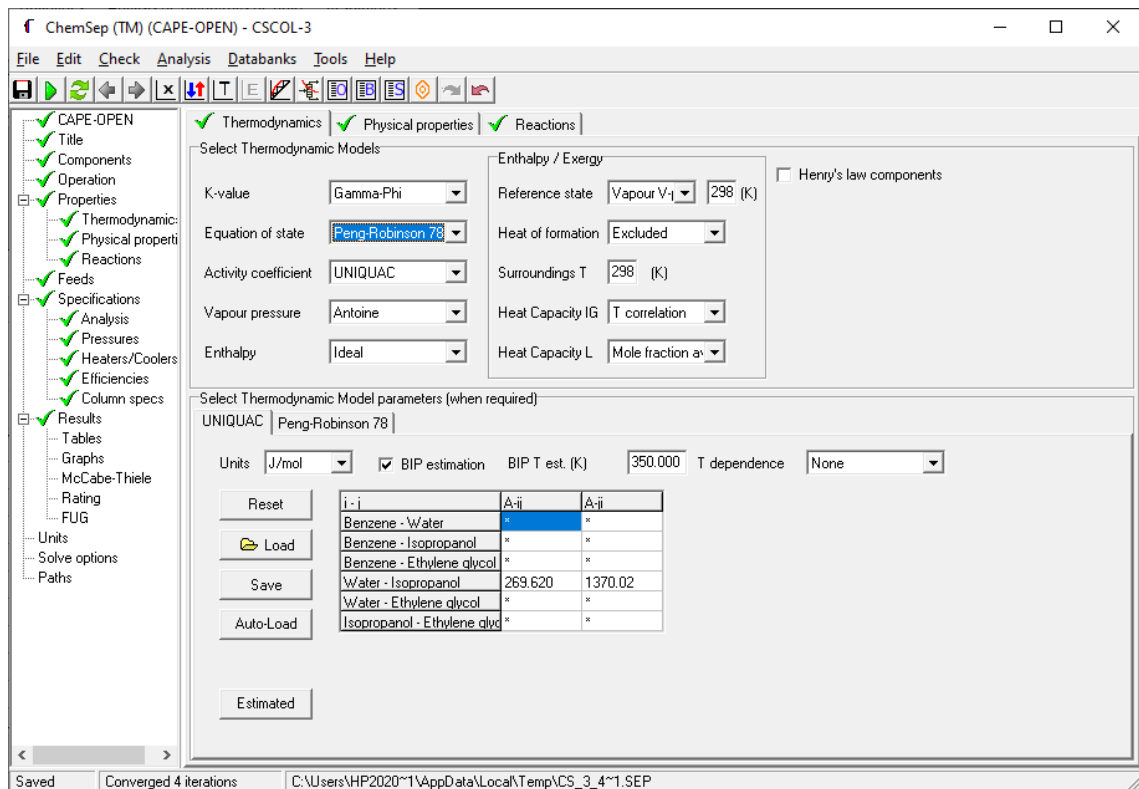


Figura 15-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep

Realizado por: Morales, A., 2024

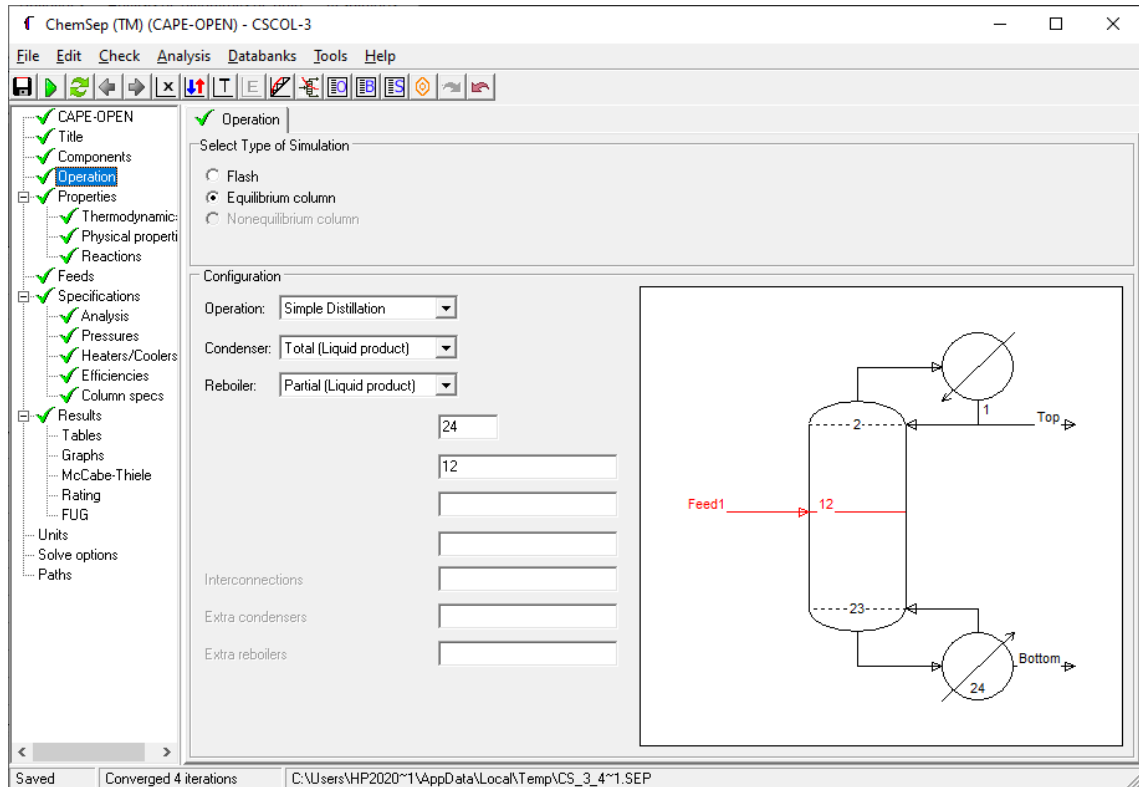


Figura 16-3: Disposición operativa de la columna de destilación

Realizado por: Morales, A., 2024

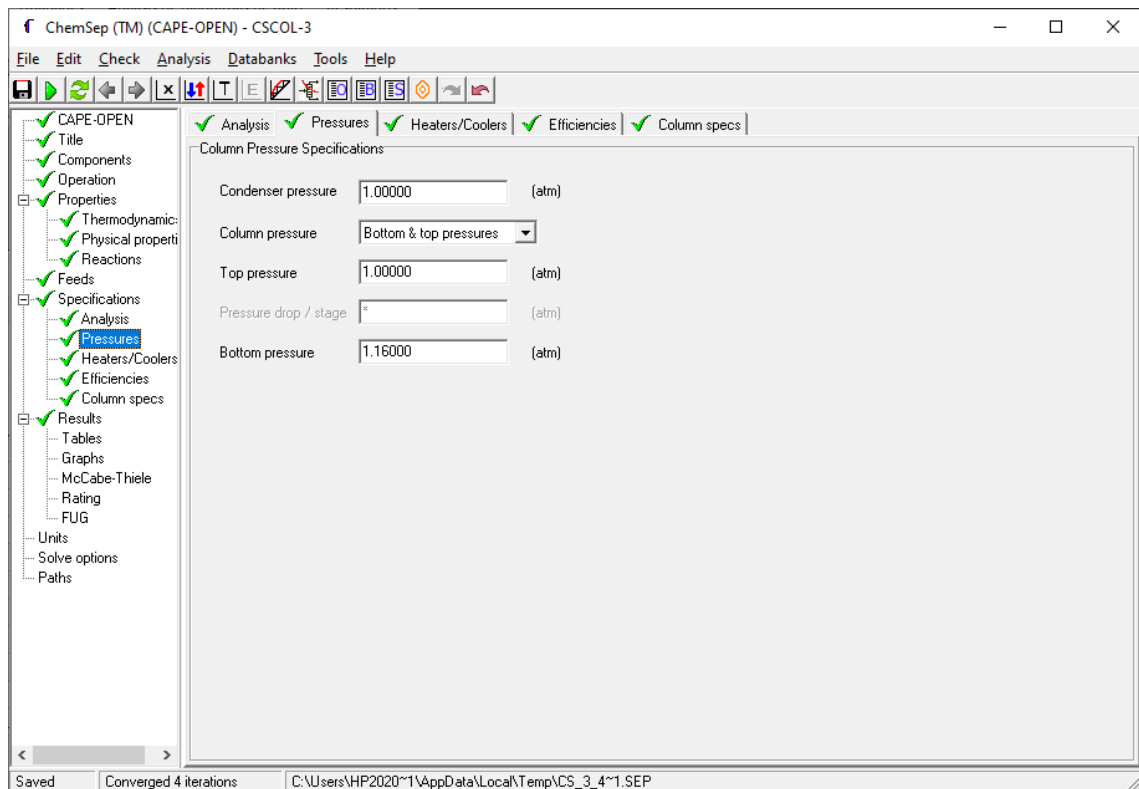


Figura 17-3: Detalles de presiones de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

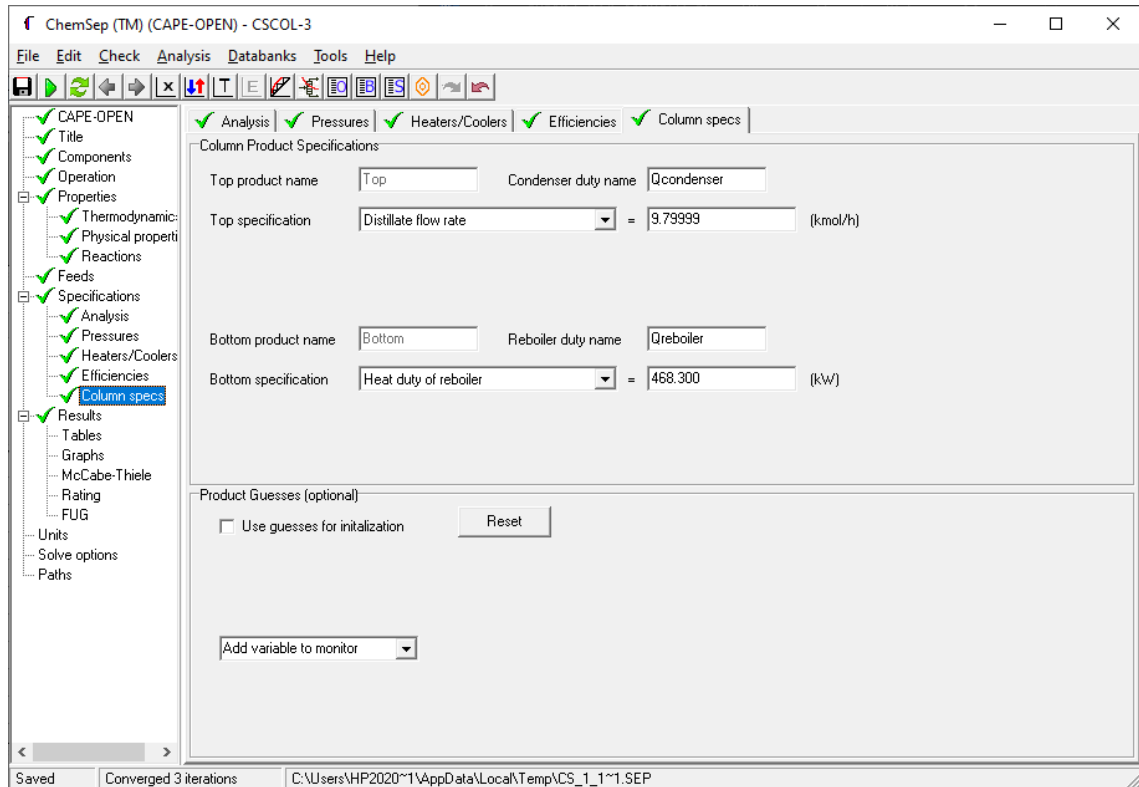


Figura 18-3: Condiciones iniciales de funcionamiento

Realizado por: Morales, A., 2024

3.3.4.2 Datos adicionales

En la Tabla 5-3 se emplean datos para la recirculación del solvente luego de la separación de benceno-isopropanol-agua, el bloque lógico de recirculación (REC) posee las configuraciones presentadas por defecto en DWSIM.

Tabla 5-3: Condiciones complementarias para la simulación

Parámetros	Valor	Unidades
Temperatura de salida del enfriador (cooler)	323.15	K
Flujo R1 en la salida del divisor (splitter)	114.1	Kmol/h

Realizado por: Morales, A., 2024

3.4 Análisis de Sensibilidad

En la Figura 19-3 se muestra el proceso requerido para el análisis de sensibilidad

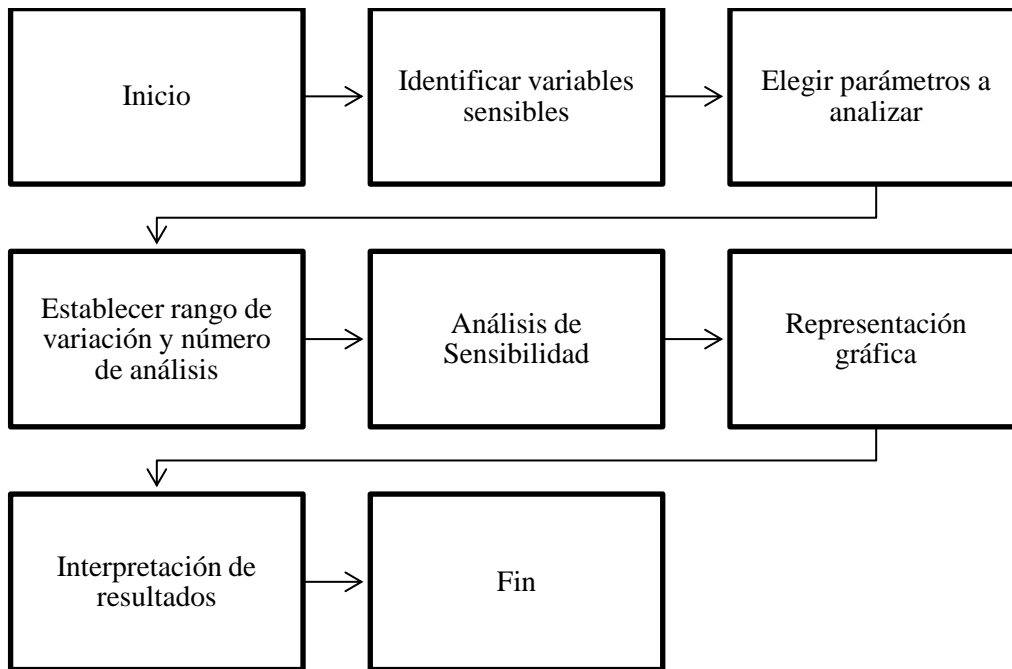


Figura 19-3: Proceso para análisis de sensibilidad

Realizado por: Morales, A., 2024

Cuando se realiza el análisis de sensibilidad del proceso se debe tener en cuenta las propiedades fisicoquímicas de todos los componentes en especial de los productos resultantes de mayor pureza que se dan los diferentes destilados y residuos, al tener en cuenta esto se identifica las variables que serán modificadas para analizar cómo afectan en el proceso de esta manera se facilita la identificación de las entradas de la red neuronal que posteriormente será creada en base a las variables críticas que afecte de manera más significativa la concentración obtenida de IPA,

Benceno y Agua, luego de tener claro la razón del porque se realiza el análisis de sensibilidad lo primero que se tiene que conocer son los rangos de modificación, todos estos parámetros son establecidos en la Tabla 6-3.

Tabla 6-3: Parámetros usados para el análisis de sensibilidad

Repeticiones	Variables independientes	Unidades	Rango de variación	Variables Dependientes	Unidades
10	Feed - Flujo molar	Kmol/h	100-300	D1 - X_{Benceno} , Fracción Molar	.
10	Feed - Flujo molar	Kmol/h	100-300	D2 - X_{IPA} , Fracción Molar	.
10	Feed - X_{IPA} , Fracción Molar	-	0.3-0.9	D1 - X_{Benceno} , Fracción Molar	.
10	Feed - X_{IPA} , Fracción Molar	-	0.3-0.9	D2 - X_{IPA} , Fracción Molar	.
10	Feed - $X_{\text{H}_2\text{O}}$, Fracción Molar	-	0.1-0.9	D1 - X_{Benceno} , Fracción Molar	.
10	Feed - $X_{\text{H}_2\text{O}}$, Fracción Molar	-	0.1-0.9	D2 - X_{IPA} , Fracción Molar	.

Realizado por: Morales, A., 2024

Para el análisis de sensibilidad se aplican diferentes métodos dependiendo de la posibilidad de ser aprovechado las funciones integradas en DWSIM o en el caso de requerir ingresar los datos manualmente en cada simulación del análisis de sensibilidad el aplicar este método tomaría mucho tiempo, por lo que será usado únicamente en el caso de que la simulación no converja de manera adecuado con los métodos automatizados.

3.5 Tratamiento de datos

Llegado al punto de realizar la simulación, análisis de sensibilidad y validación de la misma respecto a la separación ternaria de BENCENO-ISOPROPANOL-AGUA, se procede a establecer las entradas y salidas que se usaran para la creación de la RNA, realizando un total de 350 corridas de la simulación variando los datos de las diferentes entradas y anotando los valores de las salidas seleccionadas, consiguiendo los datos necesarios para el entrenamiento y validación de la red neuronal.

Tabla 6-3: Variables de entrada de la RNA

Variable	Detalle	Rango	Unidades
FM_F	Flujo molar en la alimentación	100-300	Kmol/h
X_BEN	Fracción molar de benceno en la alimentación	0.01-0.9	-
X_IPA	Fracción molar de isopropanol en la alimentación	0.01-0.9	-
X_H2O	Fracción molar de agua en la alimentación	0.01-0.9	-

Realizado por: Morales, A., 2024

Para las establecer las salidas de la RNA se seleccionan las variables que presentaron una variación considerable al momento de hacer el análisis de sensibilidad

Tabla 7-3: Variables de salida de RNA

Variable	Detalle	Unidades
FR_BEN	Fracción molar de benceno en el destilado de primera columna.	-
FR_H2O	Fracción molar de H2O en el destilado de la tercera columna.	-
FR_IPA	Fracción molar de isopropanol en el destilado de la segunda columna.	-

Realizado por: Morales, A., 2024

Se produjo una base de datos con 350 datos como se muestra en el Anexo A, 325 de ellos son usados para entrenar la RNA haciendo uso del software MATLAB, los últimos 25 datos de la base son usados para la validación de la RNA para comprobar que la misma está prediciendo correctamente.

3.6 Creación de la RNA en MATLAB

En la creación de la red neuronal, principalmente se hace uso de la herramienta Neuronal Fitting (nftool) disponible en el toolbox que presenta MATLAB.

El primer paso en la creación de la RNA es conFiguraurar los datos de entrada que esta cuenta con 4 entradas: Flujo molar en la alimentación (FM_F), fracción molar de benceno en la alimentación (X_BEN), fracción molar de isopropanol en la alimentación (X_IPA), fracción molar de agua en la alimentación (X_W).

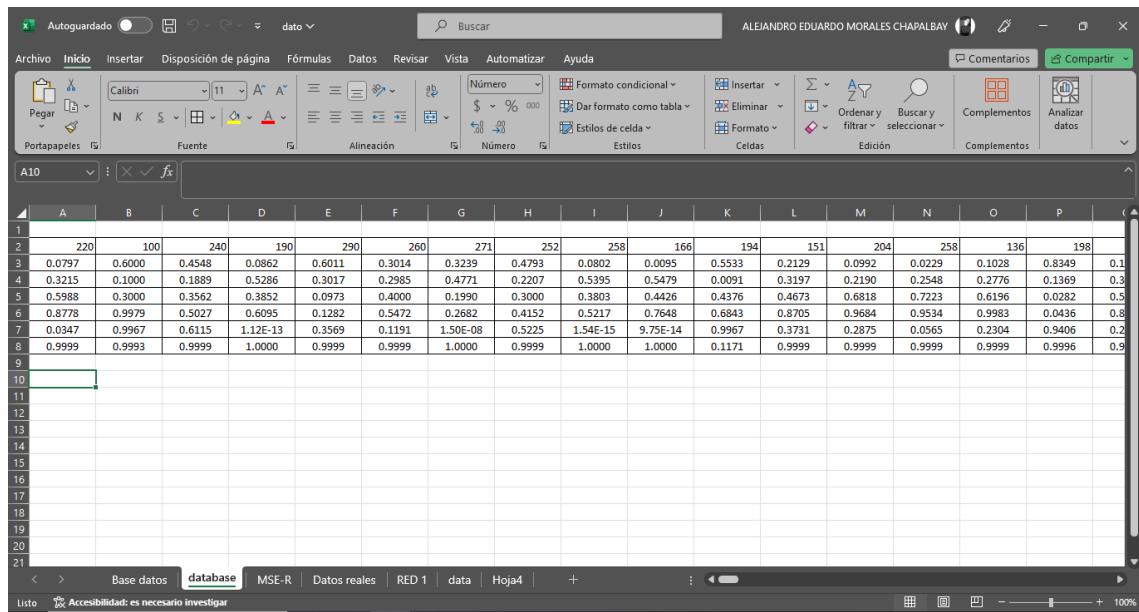


Figura 20-3: Base de datos en Excel

Realizado por: Morales, A., 2024

A estos datos se aplica la función normalize a cada una de las variables de entrada y salida, para así obtener una mejor notoria de la base datos.

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

Donde:

x' = Valor normalizado.

X = Valor real.

X_{min} = Valor mínimo.

X_{max} = Valor máximo.

3.7 Entrenamiento de la RNA

Para el entrenamiento se hará uso de tres algoritmos estadísticos que presenta MATLAB para en el entrenamiento de redes neuronales los cuales son: Levenberg-Marquardt (LM), Bayesian Regularization (BR) y Scaled Conjugate Gradient (SCG). El algoritmo Br es uno de los algoritmos de entrenamiento más utilizados cuando se trabaja con datos que son muy dispersos entre sí.

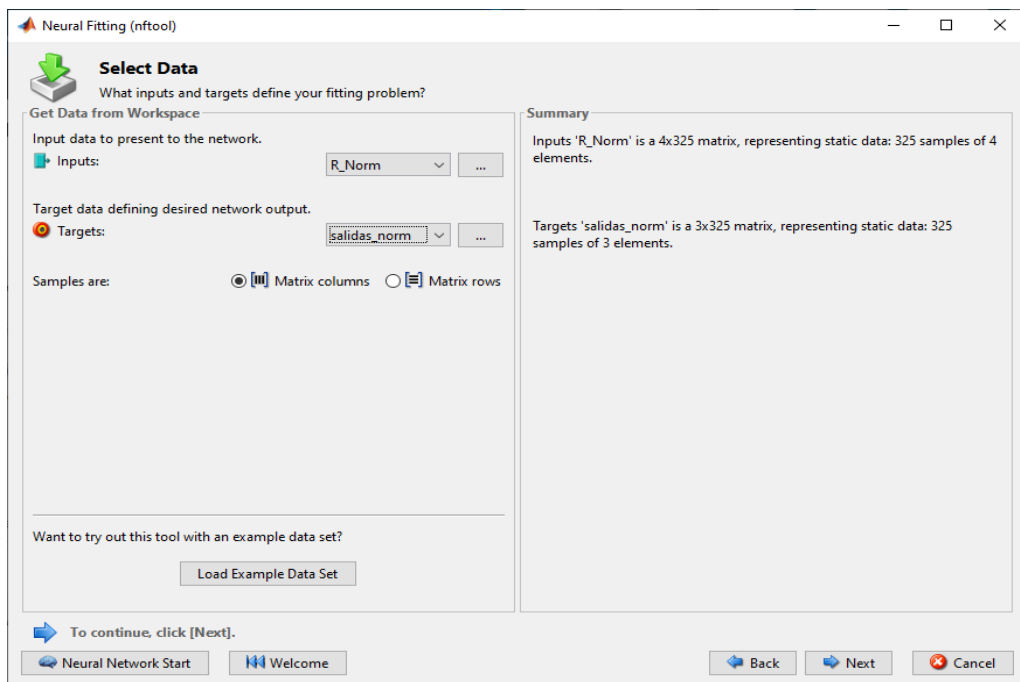


Figura 21-3: Selección de datos de entrada y salida.

Realizado por: Morales, A., 2024

Se elige las variables de entrada y salida, en este caso se nombró como “R_Norm” a los datos de las entradas y “salidas_norm” a los valores resultantes anotados que arrojó el simulador, estas dos variables siendo previamente normalizadas.

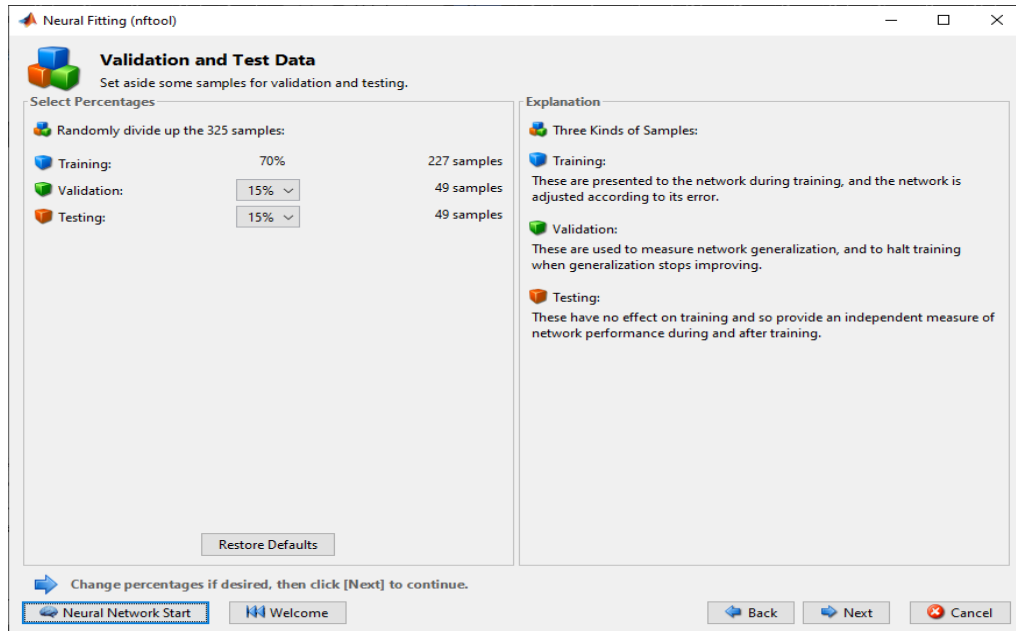


Figura 22-3: Selección del porcentaje de datos para entrenamiento, validación y prueba.

Realizado por: Morales, A., 2024

Para el entrenamiento de la RNA se debe tener en cuenta que el programa de MATLAB arroja tres tipos de datos:

- **Entrenamiento (training):** se indican a la red en el transcurso del entrenamiento, y la red se acopla en función de su error.
- **Validación (validation):** se emplean para calcular la generalización de la red y para interrumpir el entrenamiento en el momento que la generalización para de mejorar.
- **Prueba (testing):** no poseen ningún resultado en el entrenamiento, suministran una medida independiente del rendimiento de la red durante y después del entrenamiento.

Los 325 datos utilizados para el entrenamiento de la RNA están clasificados de forma: 70% usado para el entrenamiento (227), 15% usado para la validación (49) y 15% usado en el proceso de prueba de la RNA (49), como se puede observar en la Figura 22-3.

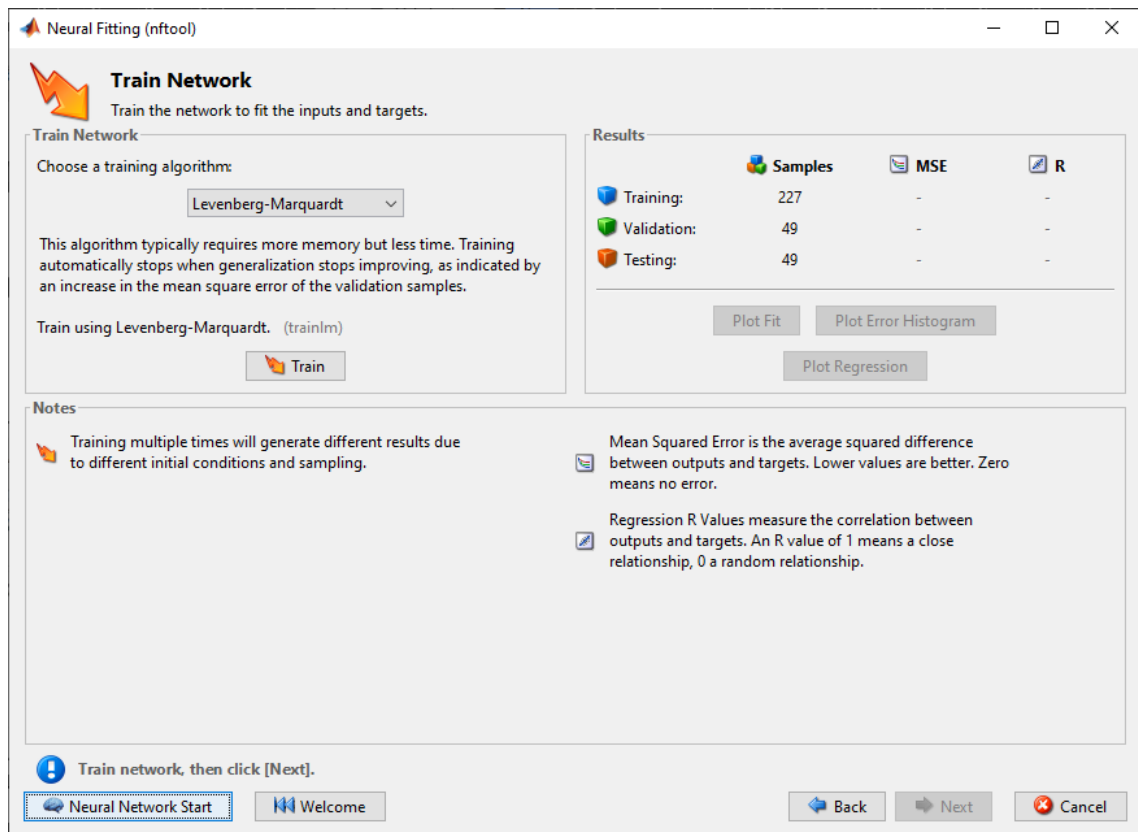


Figura 23-3: Selección del algoritmo de entrenamiento de RNA.

Realizado por: Morales, A., 2024

El algoritmo de Levenberg-Marquart (LM) tiende a requerir una mayor cantidad de memoria, pero su tiempo de entrenamiento es menor. Se detiene automáticamente cuando la capacidad de generalización no mejora, identificando un aumento en el error cuadrático medio en las muestras de validación.

Por otro lado, el algoritmo de Bayesian Regularization (BR) suele consumir más tiempo, pero logra una buena generalización en conjuntos de datos difíciles, pequeños o ruidosos. Su entrenamiento se detiene mediante una adaptación en la minimización de pesos (regularización).

En cuanto al algoritmo de Scaled Conjugate Gradient (SCG), requiere menos memoria y su entrenamiento se detiene automáticamente cuando la capacidad de generalización deja de mejorar, indicando un incremento en el error cuadrático medio en las muestras de validación.

3.8 Validación de resultados de la RNA

Para la validación se emplearán los criterios de validación de Redes Neuronales Artificiales (RNA) para predecir las fracciones molares en la separación de benceno-isopropanol-agua mediante destilación extractiva utilizando etilenglicol como solvente. Se iniciará utilizando los

indicadores generados en MATLAB tales como el Error Cuadrático Medio (MSE) y el coeficiente de Regresión (R), como se puede observar en la Tabla 8-3. Posteriormente se ampliará el análisis y se aplicarán herramientas adicionales como Excel y el software StatGraphics 19.

Tabla 8-3: Validación de la RNA.

VALORES VALIDACIÓN RNA		LEVERENG - MARQUARDT		BAYESIAN REGULARIZATION		SCALED CONJUGATE GRADIENT	
		MSE	R	MSE	R	MSE	R
10	Training	1.55E-02	9.41E-01	1-32078e-2	9.49E-01	1.96E-02	9.24E-01
	Validation	1.73E-02	9.32E-01	0	0	2.08E-02	9.14E-01
	Testing	1.75E-02	9.35E-01	2.05E-02	9.24E-01	2.30E-02	9.13E-01
20	Training	1.47E-02	9.43E-01	1.28E-02	9.50E-01	2.15E-02	9.16E+04
	Validation	1.99E-04	9.25E-01	0	0	1.60E-02	9.42E-01
	Testing	2.21E-02	9.18E-01	2.15E-02	9.20E-01	1.43E-02	9.28E-01
30	Training	1.57E-02	9.40E-01	1.11E-02	9.58E-01	1.66E-02	9.36E-01
	Validation	2.78E-02	8.88E-01	0	0	2.77E-02	8.86E-01
	Testing	1.59E-02	9.46E-01	2.18E-02	9.08E-01	2.22E-02	9.11E-01
40	Training	1.27E-02	9.52E-01	1.29E-02	9.44E-01	1.71E-02	9.33E-01
	Validation	1.78E-02	9.24E-01	0	0	2.05E-02	9.26E-01
	Testing	1.65E-02	9.43E-01	1.20E-02	9.56E-01	2.13E-02	9.20E-01
50	Training	9.05E-03	9.66E-01	1.33E-02	9.50E-01	1.44E-02	9.43E-01
	Validation	3.55E-02	8.56E-01	0	0	1.55E-02	9.48E-01
	Testing	1.68E-02	9.38E-01	1.52E-02	9.38E-01	1.85E-02	9.29E-01
60	Training	1.21E-02	9.55E-01	1.34E-02	9.48E-02	1.56E-02	9.39E-01
	Validation	2.08E-02	9.14E-01	0	0	1.79E-02	9.33E-01
	Testing	2.00E-02	9.23E-01	1.14E-02	9.59E-01	2.30E-02	9.17E-01
70	Training	1.18E-02	9.54E-01	1.46E-02	9.43E-01	1.27E-02	9.51E-02
	Validation	1.86E-02	9.32E-01	0	0	3.41E-02	8.71E-01
	Testing	2.01E-02	9.24E-01	1.48E-02	9.43E-01	1.69E-02	9.35E-01
80	Training	1.19E-02	9.55E-01	1.27E-02	9.52E-01	1.57E-01	9.37E-01
	Validation	1.67E-02	9.35E-01	0	0	1.78E-02	9.25E-01
	Testing	2.49E-02	9.10E-01	1.84E-02	9.25E-01	2.14E-02	9.23E-01
90	Training	1.20E-02	9.55E-01	1.23E-02	9.54E-01	1.54E-02	9.40E-01
	Validation	1.93E-02	9.27E-01	0	0	1.54E-02	8.56E-01
	Testing	2.06E-02	9.22E-01	2.15E-02	9.09E-01	2.17E-02	9.20E-01
100	Training	7.88E-03	9.70E-01	1.06E-02	9.59E-01	1.52E-02	9.41E-01
	Validation	4.77E-02	8.42E-01	0	0	1.85E-02	9.27E-01
	Testing	2.89E-02	9.13E-01	2.23E-02	9.20E-01	2.75E-02	9.05E-01

Realizado por: Morales, A., 2024

Debido a que MATLAB no cuenta con una validación interna para los datos ingresados, se hará una validación externa con nuevos datos los cuales no se usaron para el entrenamiento de RNA, estos son los últimos 25 datos de la base (Anexo A), para probar la capacidad de predicción de la

red y asegurar que es la correcta comprobando los valores experimentales obtenidos del simulador (DWSIM) y lo que arroja la RNA.

3.9 Análisis estadístico

Una vez obtenido la validación externa se procede a hacer un análisis de comparación de los valores de los datos de las salidas tanto los experimentales como los proporcionados por la RNA. La valoración de los resultados se ejecuta con el programa estadístico Statgraphics Centurion19 utilizando la prueba estadística.

ANOVA: El Análisis de Varianza (ANOVA) se destaca como la técnica principal en el análisis de datos experimentales. Su concepto fundamental consiste en descomponer la variación total en las contribuciones individuales de cada fuente de variación presente en el experimento (Gutiérrez y Salazar 2008).

CAPÍTULO IV

4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1 Resultados de la simulación en DWSIM

En la Figura 1-4 se muestra la simulación terminada a lo que respecta al proceso de separación ternaria de Benceno-Isopropanol-Agua, ejecutada en DWSIM.

Toda la simulación se realizó sin hacer ninguna modificación del modelo de referencia y se obtuvieron datos muy similares o en algunos casos iguales, obteniendo un error muy bajo.

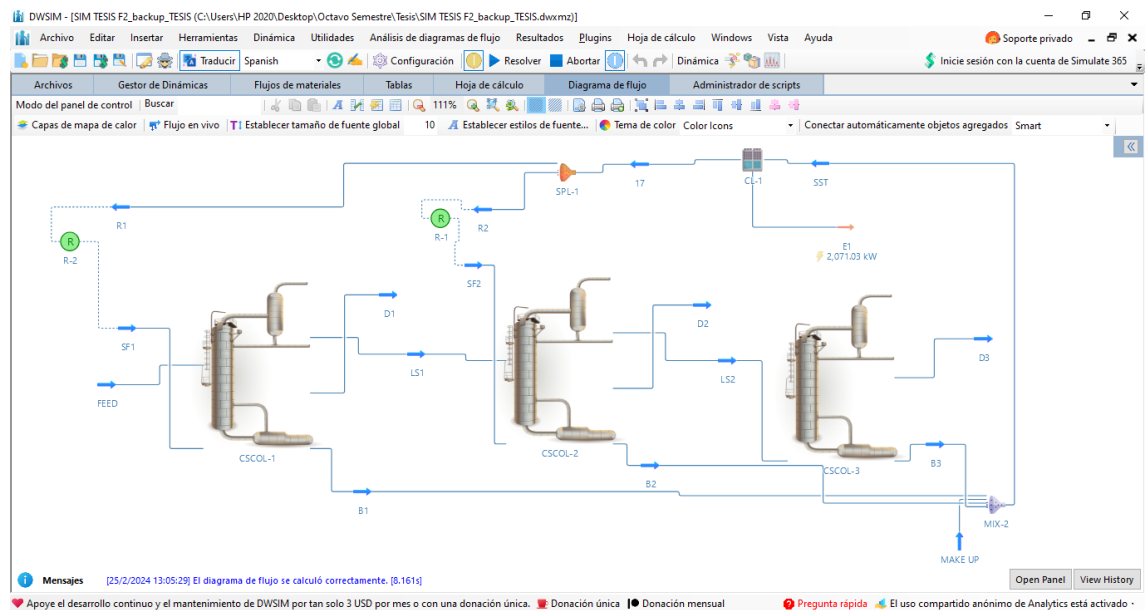


Figura 1-4: Simulación completa del sistema de separación de benceno-isopropanol-agua.

Realizado por: Morales, A., 2024

RESULTADOS

Objeto	LS2	LS1	D3	D2	D1	B4	B3	B2	B1	
Temperatura	474.562	383.913	372.874	355.47	352.338	474.663	474.681	477.384	476.822	K
Presión	1.20903	1.18858	1	1	1	1.16	1.16	1.24	1.22	atm
Flujo molar	168.92	166.83	9.79999	60.1801	30.0599	273.05	159.12	96.7201	17.21	kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Benzene	9.95854E-16	1.1759E-05	1.71653E-14	3.2598E-05	0.997943	1.70863E-14	2.47042E-25	6.53826E-24	2.71087E-13	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0.0587186	0.0601872	0.999341	0.00318884	0.000293259	0.000459061	0.000786842	3.42942E-07	6.46491E-06	
Molar Fraction (Mixture) / Isopropanol	3.82379E-05	0.359604	0.000659097	0.996778	0.000241116	1.07598E-07	5.11338E-12	2.7102E-13	1.70708E-06	
Molar Fraction (Mixture) / Ethylene glycol	0.941243	0.580197	5.10848E-16	2.34091E-07	0.00152238	0.999541	0.999213	1	0.999992	

Figura 2-4: Resultados obtenidos en DWSIM

Realizado por: Morales, A., 2024

Los resultados obtenidos de la simulación se muestran en la Tabla 1-4, los mismos están en concordancia con los mostrados por (Tsai y Chien 2021b) los cuales hicieron uso del software Aspen Plus para el diseño y simulación del proceso.

La simulación muestra una fracción molar final de BENCENO (X_{BEN}) en el destilado de la primera columna extractiva (D1) de 0.997943, las demás fracciones presentes en esta corriente son consideradas trazas por su mínimo valor que estas presentan, en el destilado de la segunda columna extractiva (D2) se tiene una fracción molar de isopropanol (X_{IPA}) de 0.996778 siendo lo demás trazas, y en la última columna de recuperación de solvente obteniendo en el destilado un fracción molar de agua (X_W) de 0.999341 y una fracción molar del solvente Etilenglicol (EG) de 0.999213, cabe recalcar que los demás valores de flujos molares, temperaturas y presiones de cada corriente de salida y corrientes laterales de cada una de las columnas dieron valores cercanos o directamente iguales, estos valores se detallan en la Tabla 1-4.

Tabla 1-4: Resultados de las corrientes obtenidas en DWSIM

Flujos	D1	D2	D3	B1	B2	B3	LS1	LS2	Unidades
Propiedades									
Temperatura	352.33	355.47	372.87	476.68	477.38	474.68	383.91	474.56	°K
Presión	1	1	1	1.24	1.24	1.16	1.18	1.20	atm
Flujo Molar	30.05	60.18	9.79	17.21	96.72	159.12	166.83	168.92	kmol/h
Fracción Molar (Mezcla) /BENCENO	0.9979	3.2598 E-05	1.1759 E-05	2.71087 E-13	6.54E-24	2.47E-25	1.18E-05	9.9585 E-16	-
Fracción Molar (Mezcla) /IPA	0.00024 111	0.9967	0.0006 59	1.70708 E-06	2.7102 E-13	5.11338 E-12	0.3596	3.8237 E-05	-
Fracción Molar (Mezcla) /H ₂ O	0.00029 325	0.0031 88	0.9993	6.46491 E-06	3.42942 E-07	0.000786	0.06018	0.0587 18	-
Fracción Molar (Mezcla) /2-EG	0.00152 23	2.3409 E-07	5.1084 E-16	0.9999	1	0.9992	0.58019	0.9412 4	-

Realizado por: Morales, A., 2024

4.2 Validación de resultados de la simulación

Una vez de realizar la simulación en DWSIM y obtener los respectivos resultados, es de carácter obligatorio realizar una validación de los mismo con respecto al trabajo original ya establecido, esto se lo realiza mediante el cálculo del error porcentual que se muestra en la fórmula Ec 1-4. El artículo usado para la validación de los resultados, fue realizado por Tsai y Chien (2021b).

En la validación de los resultados se consideran los resultados más relevantes es decir que las trazas obtenidas en la destilación no son consideradas debido a que en DWSIM se obtuvo todos los compuestos presentes en el destilado y en el fondo de la columna al ser tan pequeñas se llegan a considerar insignificantes.

Fórmula para el cálculo del error porcentual:

$$E (\%) = \left| \frac{X_{Real} - X_{DWSIM}}{X_{Real}} \right| \times 100 \% \quad (\text{Ec 1-4})$$

Tabla 2-4: Validación de la simulación en DWSIM

Variable	Detalle	Unidades	DWSIM	(Tsai y Chien 2021)	Error (%)
FR_BEN	Fracción molar de benceno en el destilado 1 (D1)		0.997	0.995	0.2010
FR_IPA	Fracción molar de isopropanol en el destilado 2 (D2)		0.996	0.995	0.1005
FR_H2O	Fracción molar de agua en el destilado 3 (D3)		0.999	0.999	0.0000
D1	Flujo molar en el destilado de la primera columna	kmol/h	30.06	30.059	0.0033

D2	Flujo molar en el destilado de la segunda columna	kmol/h	60.19	60.14	0.0830
D3	Flujo molar en el destilado de la tercera columna	kmol/h	9.8	9.81	0.1020
LS1	Flujo molar de la corriente lateral de la primera columna	kmol/h	166.83	166.83	0.0000
LS2	Flujo molar de la corriente lateral de la segunda columna	kmol/h	168.92	168.92	0.0000
B1	Flujo molar en el fondo de la primera columna	kmol/h	17.21	17.21	0.0000
B2	Flujo molar en el fondo de la segunda columna	kmol/h	96.72	96.72	0.0000
B3	Flujo molar en el fondo de la tercera columna	kmol/h	159.12	159.1	0.0125

Realizado por: Morales, A., 2024

4.3 Balance de nada del sistema

4.3.1 Balance de masa general para la primera columna de destilación extractiva

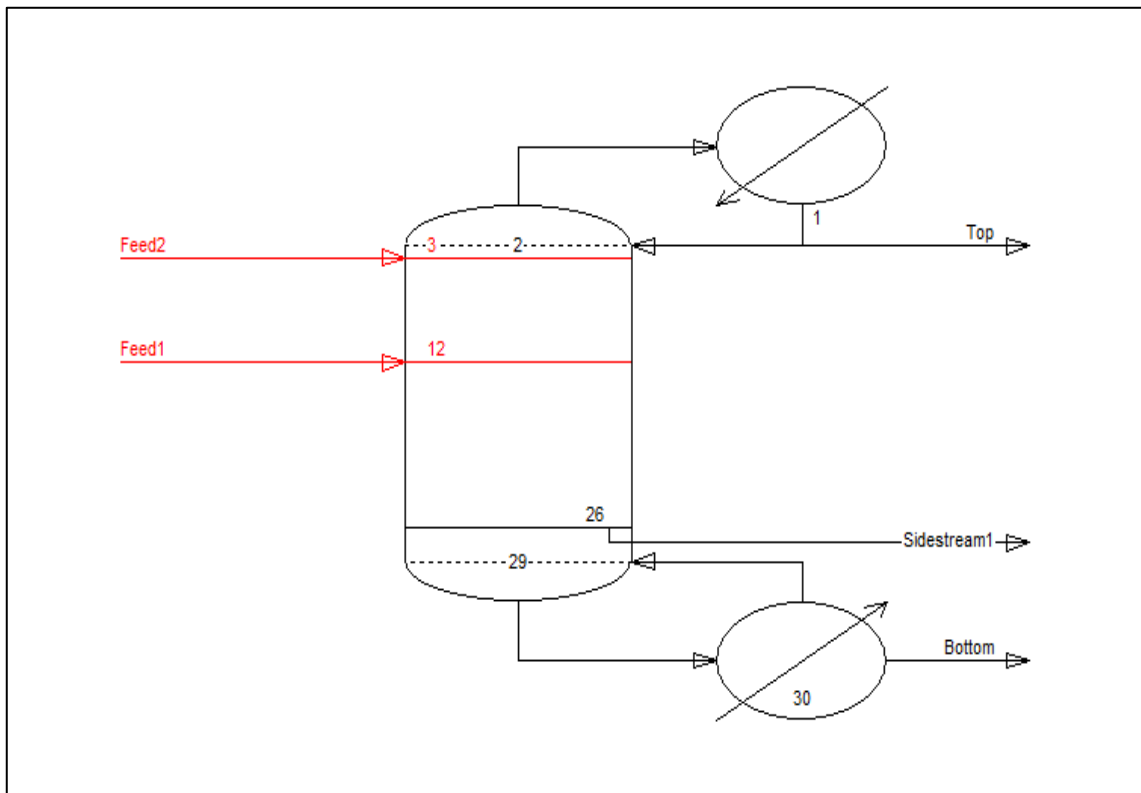


Figura 3-4: Diagrama de balance general de masa en la primera columna de destilación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Balance global de materia:

(Ec 2-4)

$$FF + SF1 = D1 + LS1 + B1$$

Donde:

FF = Flujo molar de la alimentación.

SF1 = Flujo molar de EG de entrada recirculación 1.

D1 = Flujo molar del destilado de la primera columna.

LS1 = Flujo molar de corriente lateral primera columna.

B1 = Flujo molar en el fondo de la primera columna.

Flujos de entrada:

$$FF = 100 \text{ kmol/h}$$

$$SF1 = 114.1 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (BEN):

$$FF \times XBEN_F = D1 \times XBEN_D + LS1 \times XBEN_{LS} + B1 \times XBEN_B \quad (\text{Ec 3-4})$$

Donde:

$XBEN_F$ = fracción molar de BEN en la entrada de la columna.

$XBEN_D$ = fracción molar de BEN en el destilado 1.

$XBEN_{LS}$ = fracción molar de BEN en la corriente lateral de la primera columna.

$XBEN_B$ = fracción molar de BEN en el fondo 1.

$$FF \times XBEN_F = D1 \times XBEN_D$$

$$D1 = \frac{FF \times XBEN_F}{XBEN_D} \quad (\text{Ec 4-4})$$

Entonces

$$D1 = \frac{100 \text{ kmol/h} \times 0.3}{0.997}$$

$$D1 = 30.09 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (IPA):

$$FF \times XIPA_F = D1 \times XIPA_D + LS1 \times XIPA_{LS} + B1 \times XIPA_B \quad (\text{Ec 5-4})$$

Donde:

X_{IPA_F} = fracción molar de IPA en la entrada de la columna.

X_{IPA_D} = fracción molar de IPA en el destilado.

$X_{IPA_{LS}}$ = fracción molar de IPA en la corriente lateral de la columna.

$X_{IPA_{B1}}$ = fracción molar de IPA en el fondo.

$$FF \times X_{IPA_F} = D1 \times X_{IPA_D} + LS1 \times X_{IPA_{LS}}$$
$$LS1 = \frac{FF \times X_{IPA_F}}{X_{IPA_{LS}}} \quad (\text{Ec 6-4})$$

Entonces:

$$LS1 = \frac{100 \text{ kmol/h} \times 0.6}{0.3596}$$
$$LS1 = 166.85 \text{ kmol/h}$$

Balance global de materia:

$$FF + SF1 = D1 + LS1 + B1$$
$$B1 = FF + SF1 - D1 - LS1$$

Entonces:

$$B1 = 100 \text{ kmol/h} + 114.1 \text{ kmol/h} - 30.09 \text{ kmol/h} - 166.85 \text{ kmol/h}$$
$$B1 = 17.16 \text{ kmol/h}$$

4.3.2 Balance de masa general para la segunda columna de destilación extractiva

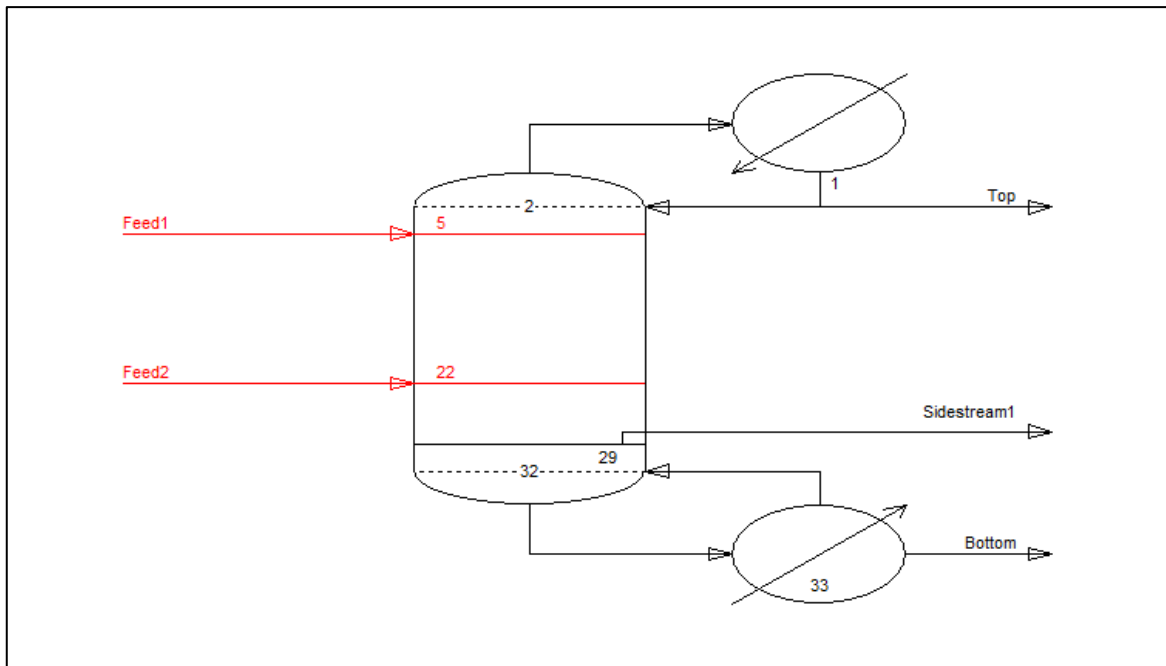


Figura 4-4: Diagrama de balance general de masa en la segunda columna de destilación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Balance global de materia:

$$LS1 + SF2 = D2 + LS2 + B2 \quad (\text{Ec 7-4})$$

Donde:

LS1 = Flujo molar de corriente lateral primera columna.

SF2 = Flujo molar de EG de entrada recirculación 2.

D2 = Flujo molar del destilado segunda columna.

LS2 = Flujo molar de corriente lateral segunda columna.

B2 = Flujo molar en el fondo de la segunda columna.

Flujos de entrada:

$$LS1 = 166.85 \text{ kmol/h}$$

$$SF2 = 159 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (IPA):

$$LS1 \times XIPA_{LS1} = D2 \times XIPA_{D2} + LS2 \times XIPA_{LS2} + B2 \times XIPA_{B2} \quad (\text{Ec 8-4})$$

Donde:

$XIPA_{LS1}$ = fracción molar de IPA en la corriente lateral de la primera columna.

$XIPA_{D2}$ = fracción molar de IPA en el destilado 2.

$XIPA_{LS2}$ = fracción molar de IPA en la corriente lateral de la segunda columna.

$XIPA_{B2}$ = fracción molar de IPA en el fondo 2.

$$LS1 \times XIPA_{LS1} = D2 \times XIPA_{D2}$$

$$D2 = \frac{LS1 \times XIPA_{LS1}}{XIPA_{D2}} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Entonces:

$$D2 = \frac{166.85 \text{ kmol/h} \times 0.3596}{0.9967}$$

$$D2 = 60.19 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (EG):

$$LS1 \times XEG_{LS1} + SF2 \times XEG_{SF2} = D2 \times XEG_{D2} + LS2 \times XEG_{LS2} + B2 \times XEG_{B2} \quad (\text{Ec 10-4})$$

Donde:

XEG_{LS1} = fracción molar de EG en la corriente lateral de la primera columna.

XEG_{SF2} = fracción molar de EG de la entrada recirculación 2.

XEG_{D2} = fracción molar de EG en el destilado 2.

XEG_{LS2} = fracción molar de EG en la corriente lateral de la segunda columna.

XEG_{B2} = fracción molar de EG en el fondo 2.

$$LS1 \times XEG_{LS1} + SF2 \times XEG_{SF2} = D2 \times XEG_{D2} + LS2 \times XEG_{LS2} + B2 \times XEG_{B2}$$

$$B2 = \frac{LS1 \times XEG_{LS1} + SF2 \times XEG_{SF2} - D2 \times XEG_{D2} - LS2 \times XEG_{LS2}}{XEG_{B2}} \quad (\text{Ec 11-4})$$

Balance de masa por componente (H₂O):

$$LS1 \times XH_2O_{LS1} = D2 \times XH_2O_{D2} + LS2 \times XH_2O_{LS2} + B2 \times XH_2O_{B2} \quad (\text{Ec 12-4})$$

Donde:

XH_2O_{LS1} = fracción molar de H₂O en la corriente lateral de la primera columna.

XH_2O_{D2} = fracción molar de H₂O en el destilado 2.

$X_{H_2O_{LS2}}$ = fracción molar de H_2O en la corriente lateral de la segunda columna.

$X_{H_2O_{B2}}$ = fracción molar de H_2O en el fondo 2.

$$LS1 \times X_{H_2O_{LS1}} = D2 \times X_{H_2O_{D2}} + LS2 \times X_{H_2O_{LS2}} + B2 \times X_{H_2O_{B2}}$$

$$B2 = \frac{LS1 \times X_{H_2O_{LS1}} - D2 \times X_{H_2O_{D2}} - LS2 \times X_{H_2O_{LS2}}}{X_{H_2O_{B2}}} \quad (\text{Ec 13-4})$$

Entonces, igualamos las ecuaciones Ec -4 y Ec -4 para conseguir LS2

$$B2 = B2$$

$$\frac{LS1 \times XEG_{LS1} + SF2 \times XEG_{SF2} - D2 \times XEG_{D2} - LS2 \times XEG_{LS2}}{XEG_{B2}} = \frac{LS1 \times X_{H_2O_{LS1}} - D2 \times X_{H_2O_{D2}} - LS2 \times X_{H_2O_{LS2}}}{X_{H_2O_{B2}}} \quad (\text{Ec 14-4})$$

Despejando LS2 se tiene:

$$LS2 = \frac{LS1(X_{H_2O_{LS1}} \times XEG_{B2} - XEG_{LS1} \times X_{H_2O_{B2}}) - SF2 \times XEG_{SF2} \times X_{H_2O_{B2}} - D2 \times X_{H_2O_{D2}} \times XEG_{B2}}{X_{H_2O_{LS2}} \times XEG_{B2} - XEG_{LS2} \times X_{H_2O_{B2}}} \quad (\text{Ec 15-4})$$

Entonces,

$$LS2 = \frac{166.85 \text{ kmol/h} (0.06 \times 0.99 - 0.58 \times 3.43 \times 10^{-07}) - 159 \times 1 \times 3.43 \times 10^{-07} - 60.19 \times 0.003 \times 3.43 \times 10^{-07}}{0.0587 \times 0.999 - 0.94 \times 3.43 \times 10^{-07}}$$

$$LS2 = 168.85 \text{ kmol/h}$$

Balance global de materia:

$$LS1 + SF2 = D2 + LS2 + B2$$

$$B2 = LS1 + SF2 - D2 - LS2$$

Entonces:

$$B1 = 166.85 \text{ kmol/h} + 159 \text{ kmol/h} - 60.19 \text{ kmol/h} - 168.85 \text{ kmol/h}$$

$$B1 = 96.81 \text{ kmol/h}$$

4.3.3 Balance de masa general para la columna de separación.

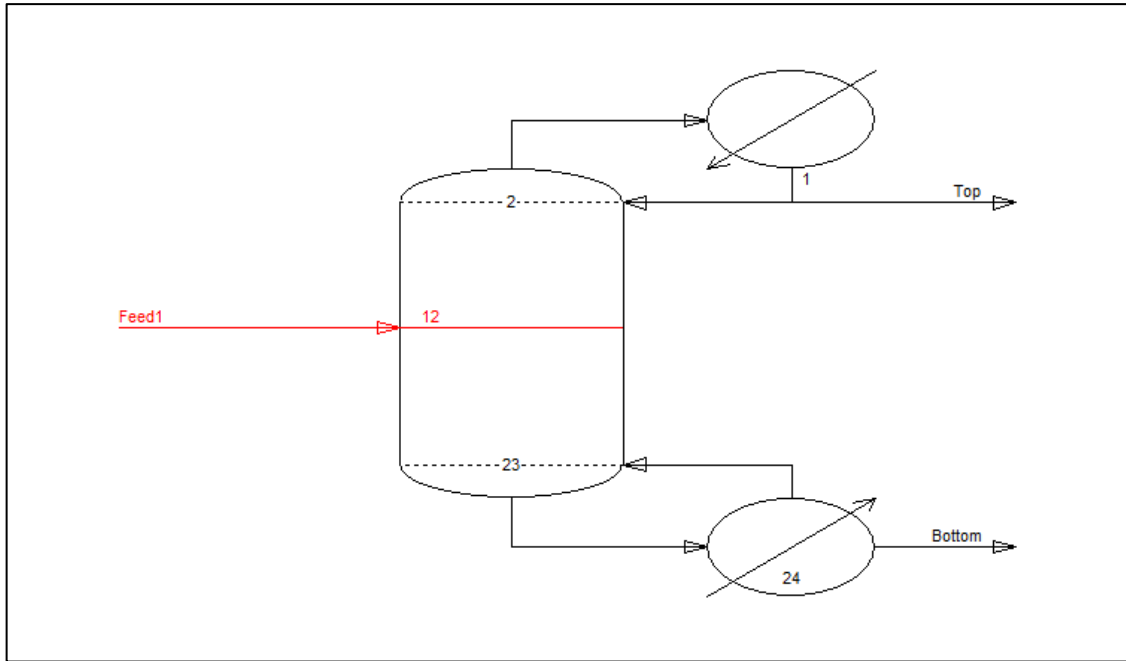


Figura 5-4: Diagrama de balance general de masa en la segunda columna de destilación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Balace global de materia:

$$LS2 = D3 + B3 \quad (\text{Ec 16-4})$$

Donde:

LS2 = Flujo molar de corriente lateral segunda columna.

D3 = Flujo molar del destilado columna de separación.

B3 = Flujo molar en el fondo de la segunda columna.

Flujos de entrada:

$$LS2 = 168.85 \text{ kmol/h}$$

Balace de masa por componente (H₂O):

$$LS2 \times X_{H_2O_{LS2}} = D3 \times X_{H_2O_{D3}} + B3 \times X_{H_2O_{B3}} \quad (\text{Ec 17-4})$$

Donde:

X_{H₂O_{LS2}} = fracción molar de H₂O en la corriente lateral de la segunda columna.

X_{H₂O_{D3}} = fracción molar de H₂O en el destilado 3.

$X_{H_2O_{B3}}$ = fracción molar de H_2O en el fondo 3.

$$LS2 \times X_{H_2O_{LS2}} = D3 \times X_{H_2O_{D3}} + B3 \times X_{H_2O_{B3}}$$

$$B3 = \frac{LS2 \times X_{H_2O_{LS2}} - D3 \times X_{H_2O_{D3}}}{X_{H_2O_{B3}}} \quad (\text{Ec 18-4})$$

Balance de masa por componente (EG):

$$LS2 \times X_{EG_{LS2}} = D3 \times X_{EG_{D3}} + B3 \times X_{EG_{B3}} \quad (\text{Ec 19-4})$$

Donde:

$X_{EG_{LS2}}$ = fracción molar de EG en la corriente lateral de la segunda columna.

$X_{EG_{D3}}$ = fracción molar de EG en el destilado 3.

$X_{EG_{B3}}$ = fracción molar de EG en el fondo 3.

$$LS2 \times X_{EG_{LS2}} = D3 \times X_{EG_{D3}} + B3 \times X_{EG_{B3}}$$

$$B3 = \frac{LS2 \times X_{EG_{LS2}} - D3 \times X_{EG_{D3}}}{X_{EG_{B3}}} \quad (\text{Ec 20-4})$$

Entonces, igualamos las ecuaciones Ec -4 y Ec -4 para conseguir D3

$$B3 = B3$$

$$\frac{LS2 \times X_{H_2O_{LS2}} - D3 \times X_{H_2O_{D3}}}{X_{H_2O_{B3}}} = \frac{LS2 \times X_{EG_{LS2}} - D3 \times X_{EG_{D3}}}{X_{EG_{B3}}} \quad (\text{Ec 20-4})$$

$$D3 = \frac{LS2(X_{EG_{LS2}} \times X_{H_2O_{B3}} - X_{H_2O_{LS2}} \times X_{EG_{B3}})}{X_{EG_{D3}} \times X_{H_2O_{B3}} - X_{H_2O_{D3}} \times X_{EG_{B3}}}$$

Entonces,

$$D3 = \frac{168.85 \text{ kmol/h}(0.94 \times 0.0008 - 0.05875 \times 0.999)}{5.09 \times 10^{-16} \times 0.0008 - 0.999 \times 0.999}$$

$$D3 = 9.80 \text{ kmol/h}$$

4.4 Resultados del análisis de sensibilidad

Las variables críticas más relevantes del proceso se seleccionaron con el fin de ver cómo afecta a las salidas al conocer las variables que en este caso fueron en la parte de la alimentación y las variables a analizar fueron en los destilados de cada una de las columnas. Los rangos, variables tanto dependientes como independientes, número de repeticiones y rangos de variación para los análisis fueron propuesto en la Tabla 3-4.

Tabla 3-4: Variables en el análisis de sensibilidad.

Enfoque	Identificación	Descripción	Unidades
FEED	FM_F	Flujo molar en la alimentación.	kmol/h
	X_BEN	Fracción molar de BEN en la alimentación.	-
	X_IPA	Fracción molar de IPA en la alimentación.	-
	X_H2O	Fracción molar de H2O en la alimentación.	-
Salidas	FR_BEN_D1	Fracción molar de BEN en el destilado de la primera columna.	-
	FR_IPA_D2	Fracción molar de IPA en el destilado de la segunda columna.	-
	FR_H2O_D3	Fracción molar de H2O en el destilado de la tercera columna.	-

Realizado por: Morales, A., 2024

4.4.1 Resultados del análisis de sensibilidad modificando FM_F.

En este análisis se hace con el propósito de ver cómo afectan a las tres salidas más importantes del proceso de manera que la variable modificada pueda servir como una entrada para la RNA, y su intención se muestran en la Tabla 4-4, el análisis se realizó con 10 repeticiones en un rango establecido el cual fue definido para las condiciones dadas en la simulación base hecha en DWSIM.

Tabla 4-4: Análisis de sensibilidad modificando FM_F

Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
FM_F	Análisis de cómo afecta el flujo molar de la alimentación en la concentración final de Benceno en destilado en la primera columna.	FR_BEN_D1
	Análisis de cómo afecta el flujo molar de la alimentación en la concentración final de Isopropanol en el destilado en la segunda columna.	FR_IPA_D2

	Análisis de cómo afecta el flujo molar de la alimentación en la concentración final de Agua en el destilado en la tercera columna.	FR_H2O_D3
--	--	-----------

Realizado por: Morales, A., 2024

El rango escogido para el análisis fue de 100 entre 300 kmol/h con 10 repeticiones los resultados se indican en las Figura 6-4, y 7-4, donde se logra apreciar que al aumentar el flujo molar de la alimentación hay una notoria disminución de la fracción molar de benceno e isopropanol en sus respectivos destilados, dando a entender que esta variable si afectan de manera inmediata por lo que se le considera una entrada para la RNA.

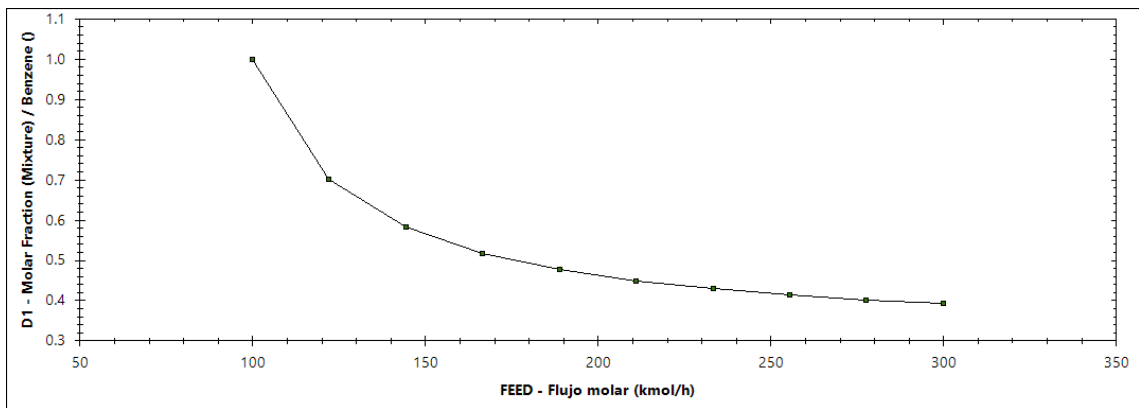


Figura 6-4: Resultado del análisis Flujo molar vs Fracción molar de benceno en D1

Realizado por: Morales, A., 2024

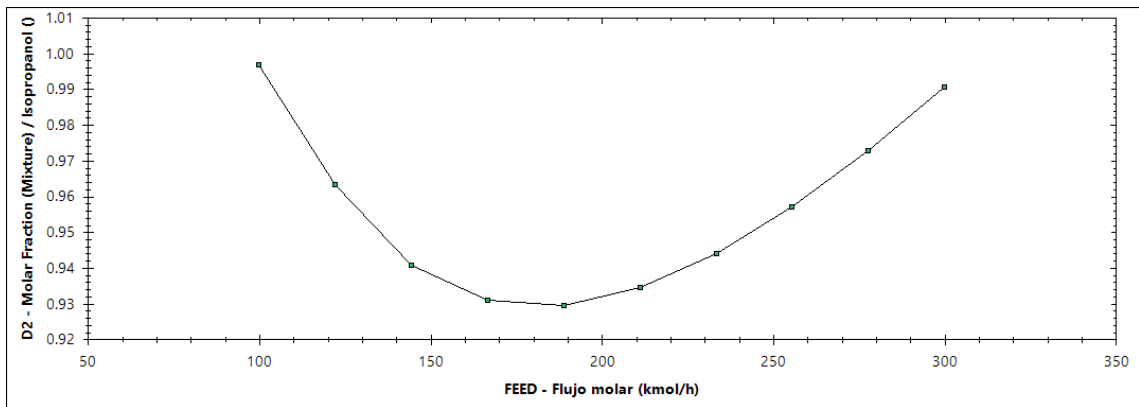


Figura 7-4: Resultado del análisis Flujo molar vs Fracción molar de isopropanol en D2

Realizado por: Morales, A., 2024

4.4.2 Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_IPA.

En este análisis el propósito, es el mismo que el anterior, visualizar cómo afectan a las tres salidas más importantes del proceso de manera que la variable modificada pueda servir como una entrada para la RNA, y su intención se muestran en la Tabla 5-4.

Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad modificando X_IPA

Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
X_IPA	Análisis de cómo afecta la fracción de IPA de la alimentación en la concentración final de Benceno en destilado en la primera columna.	FR_BEN_D1
	Análisis de cómo afecta la fracción de IPA de la alimentación en la concentración final de Isopropanol en el destilado en la segunda columna.	FR_IPA_D2
	Análisis de cómo afecta la fracción de IPA de la alimentación en la concentración final de Agua en el destilado en la tercera columna.	FR_H2O_D3

Realizado por: Morales, A., 2024

El rango utilizado para el análisis fue de 0.3 entre 0.9 con las mismas repeticiones que los demás análisis de sensibilidad, se evalúa mediante una gráfica de los resultados el cómo afecta el cambio de fracción molar de isopropanol en la alimentación en la concentración final de los diferentes destilados, como se observa en las Figuras 8-4, y 10-4 hay una reducción en la concentración de benceno y agua, mientras que en la Figura 9-4, se puede apreciar un aumento en la fracción molar de isopropanol variando entre 0.5 a 1 por esto se llegó a la conclusión de excluir esta variable como una entrada de la RNA.

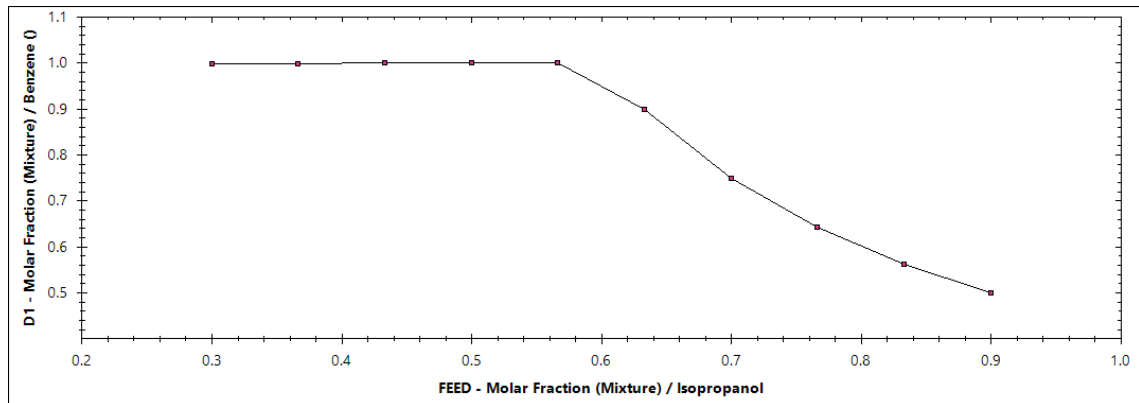


Figura 8-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar benceno en D1

Realizado por: Morales, A., 2024

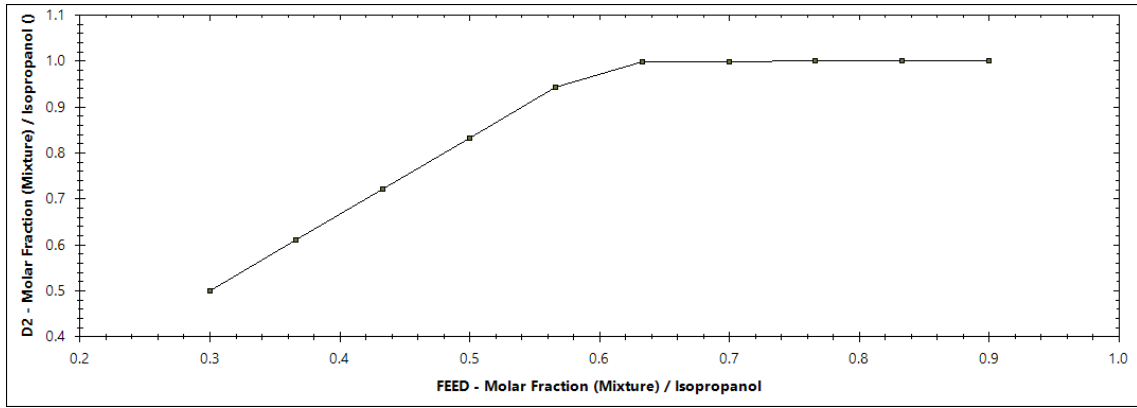


Figura 9-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2

Realizado por: Morales, A., 2024

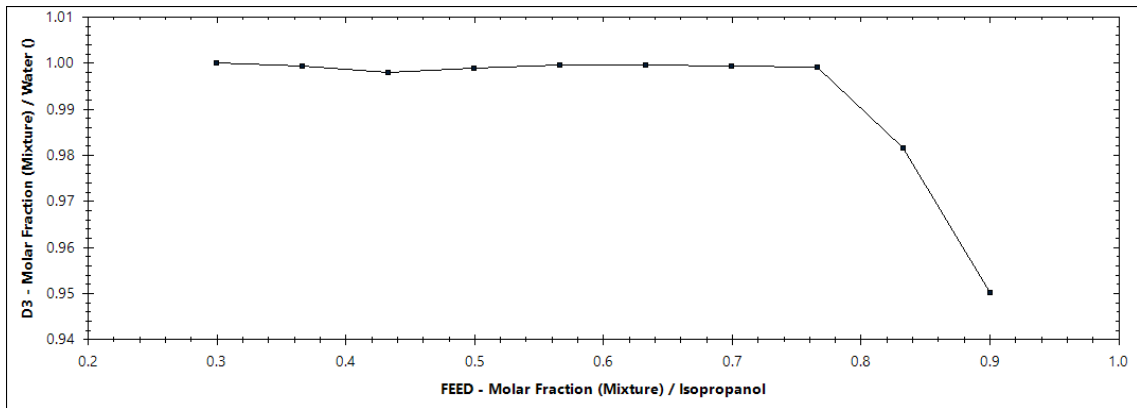


Figura 10-4: Resultado del análisis Fracción molar de isopropanol en alimentación vs Fracción molar de agua en D3

Realizado por: Morales, A., 2024

4.4.3 Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_{H2O} .

Haciendo modificaciones en esta variable se determinará si es factible usarla como entrada en la red neuronal, al igual que se ha hecho con las demás.

Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad modificando X_{H2O}

Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
X _{H2O}	Análisis de cómo afecta la fracción de H2O de la alimentación en la concentración final de Benceno en destilado en la primera columna.	FR_BEN_D1
	Análisis de cómo afecta la fracción de H2O de la alimentación en la concentración final de Isopropanol en el destilado en la segunda columna.	FR_IPA_D2

	Análisis de cómo afecta la fracción de H ₂ O de la alimentación en la concentración final de Agua en el destilado en la tercera columna.	FR_H2O_D3
--	---	-----------

Realizado por: Morales, A., 2024

Este rango fue entre 0.1 a 0.9 el valor de la fracción molar utilizada en este análisis con las repeticiones ya conocidas, se evalúa mediante una gráfica de los resultados el cómo afecta el cambio de fracción molar de agua en la alimentación en la concentración final de los diferentes destilados, como se observa en las Figura 11-4, y 12-4 hay una reducción en la concentración de benceno e isopropanol, dando a entender que esta variable si puede ser utilizada como entrada al momento de realizar la RNA.

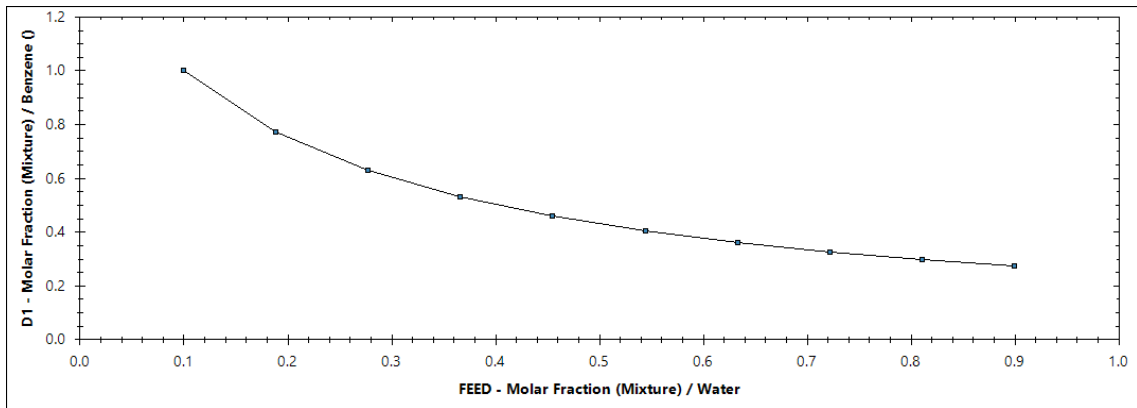


Figura 11-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar benceno en D1

Realizado por: Morales, A., 2024

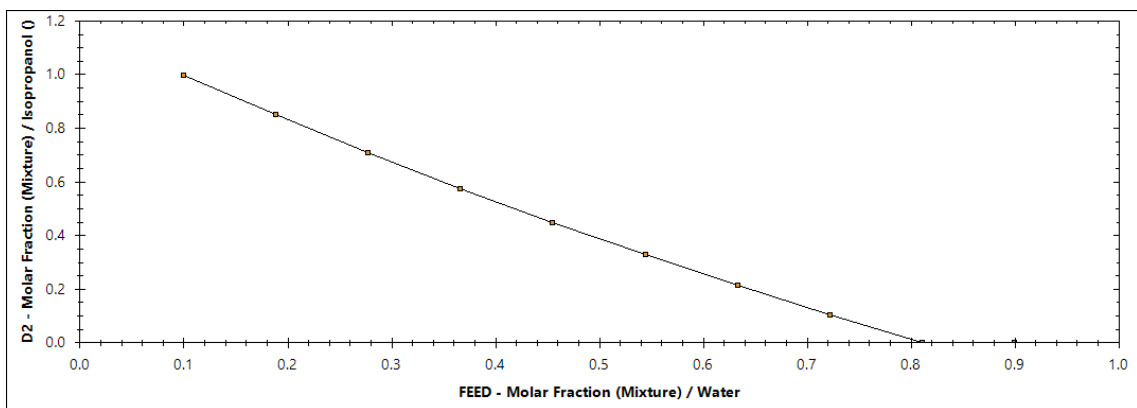


Figura 12-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2

Realizado por: Morales, A., 2024

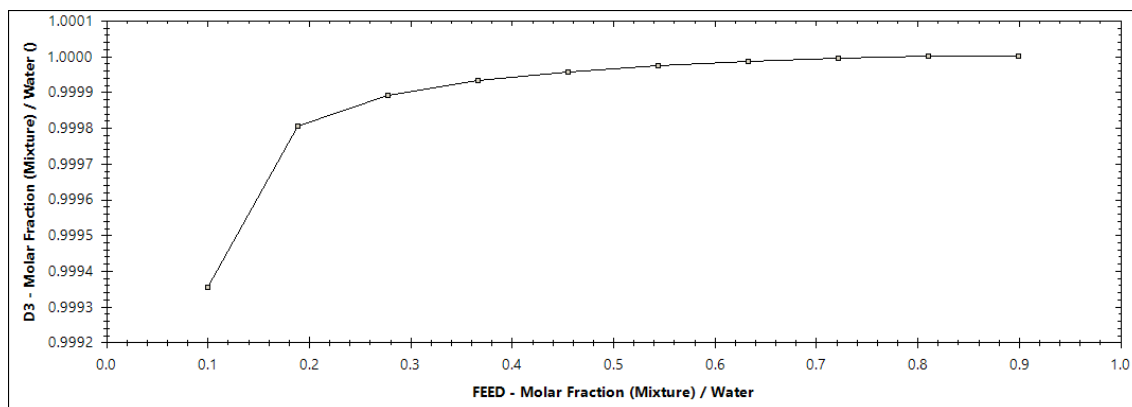


Figura 13-4: Resultado del análisis Fracción molar de agua en alimentación vs Fracción molar de agua en D3

Realizado por: Morales, A., 2024

4.4.4 Resultados del análisis de sensibilidad modificando X_BEN.

Tabla 7-4: Análisis de sensibilidad modificando X_BEN

Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
X_BEN	Análisis de cómo afecta la fracción de BEN de la alimentación en la concentración final de Benceno en destilado en la primera columna.	FR_BEN_D1
	Análisis de cómo afecta la fracción de BEN de la alimentación en la concentración final de Isopropanol en el destilado en la segunda columna.	FR_IPA_D2
	Análisis de cómo afecta la fracción de BEN de la alimentación en la concentración final de Agua en el destilado en la tercera columna.	FR_H2O_D3

Realizado por: Morales, A., 2024

Este rango fue entre 0.1 a 0.9 el valor de la fracción molar utilizada en este análisis con las repeticiones ya conocidas, se evalúa mediante una gráfica de los resultados el cómo afecta el cambio de fracción molar de agua en la alimentación en la concentración final de los diferentes destilados, como se observa en las Figura 15-4, y 16-4 hay una reducción en la concentración de agua e isopropanol, y en la Figura 13-4 se puede observar un aumento de fracción molar en el destilado, dando a entender que esta variable si puede ser utilizada como entrada al momento de realizar la RNA.

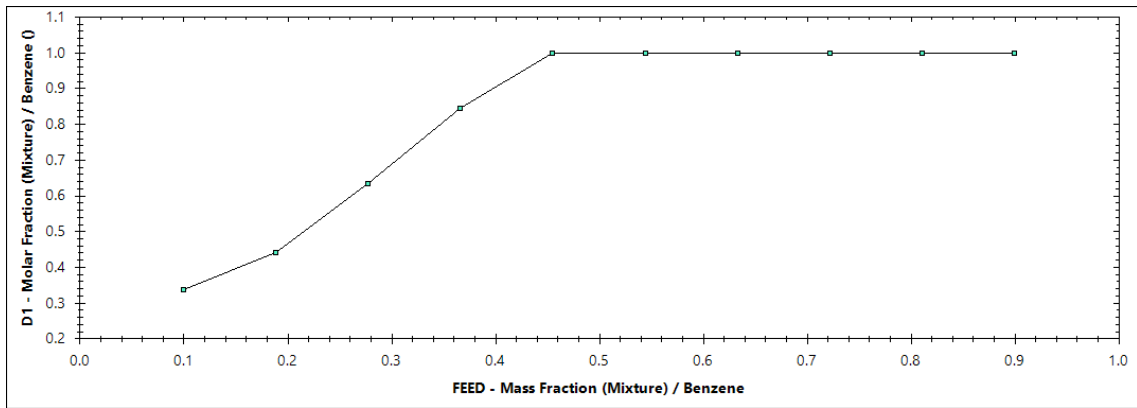


Figura 14-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar benceno en D1

Realizado por: Morales, A., 2024

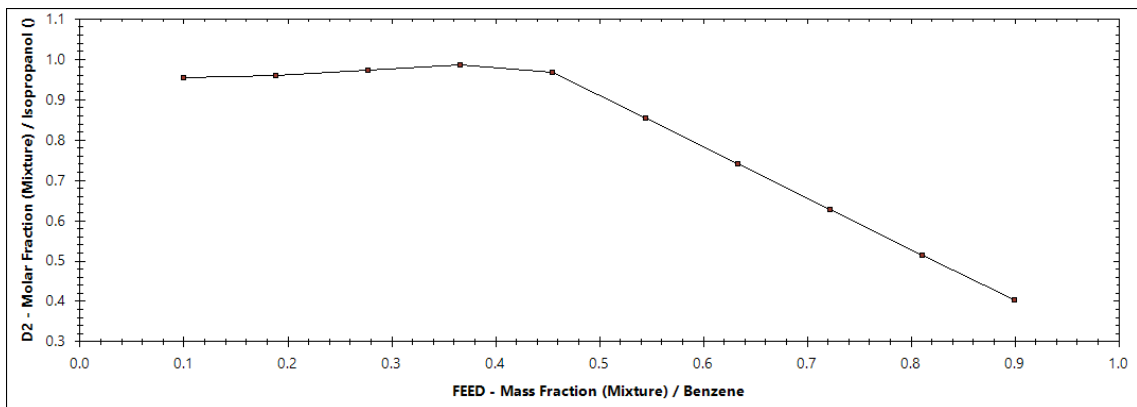


Figura 15-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar de isopropanol en D2

Realizado por: Morales, A., 2024

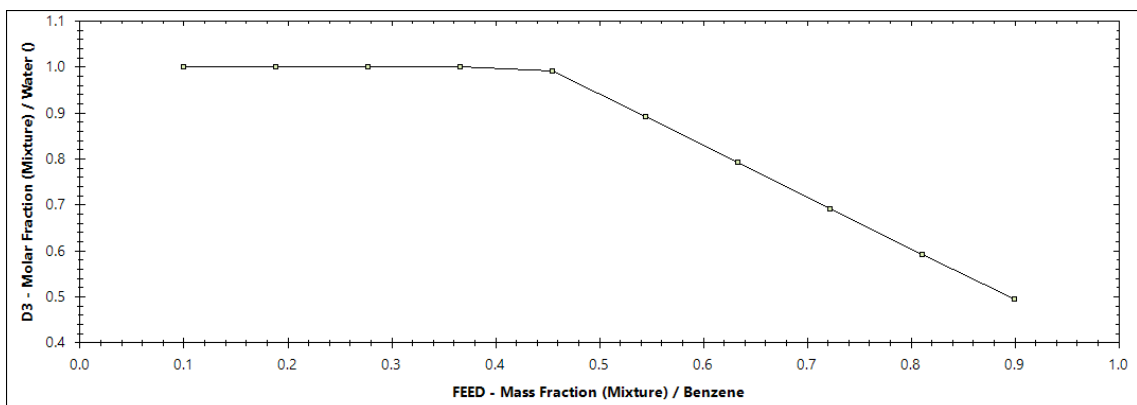


Figura 16-4: Resultado del análisis Fracción molar de benceno en alimentación vs Fracción molar de agua en D3

Realizado por: Morales, A., 2024

4.5 Resultados del entrenamiento de la RNA

En el proceso de entrenamiento de la Red Neuronal Artificial (RNA), se utilizan los distintos algoritmos de entrenamiento disponibles en MATLAB, ajustando su configuración. Se inicia con un número de neuronas ocultas de 10 y se incrementa hasta llegar a 100. La evaluación del rendimiento de la RNA se realiza mediante el cálculo del Error Cuadrático Medio (MSE) y el coeficiente de Regresión (R).

Tabla 8-4: Resultados del entrenamiento de la RNA

NÚMERO DE NEURONAS	LEVERENG - MARQUARDT		BAYESIAN REGULARIZATION		SCALED CONJUGATE GRADIENT	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
10	1.75E-02	9.35E-01	2.05E-02	9.24E-01	2.30E-02	9.13E-01
20	2.21E-02	9.18E-01	2.15E-02	9.20E-01	1.43E-02	9.28E-01
30	1.59E-02	9.46E-01	2.18E-02	9.08E-01	2.22E-02	9.11E-01
40	1.65E-02	9.43E-01	1.20E-02	9.56E-01	2.13E-02	9.20E-01
50	1.68E-02	9.38E-01	1.52E-02	9.38E-01	1.85E-02	9.29E-01
65	2.00E-02	9.23E-01	1.14E-02	9.59E-01	2.30E-02	9.17E-01
70	2.01E-02	9.24E-01	1.48E-02	9.43E-01	1.69E-02	9.35E-01
80	2.49E-02	9.10E-01	1.84E-02	9.25E-01	2.14E-02	9.23E-01
90	2.06E-02	9.22E-01	2.15E-02	9.09E-01	2.17E-02	9.20E-01
100	2.89E-02	9.13E-01	2.23E-02	9.20E-01	2.75E-02	9.05E-01

Realizado por: Morales, A., 2024

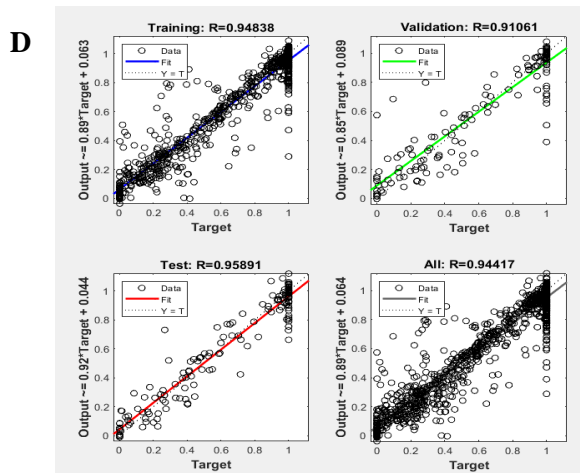
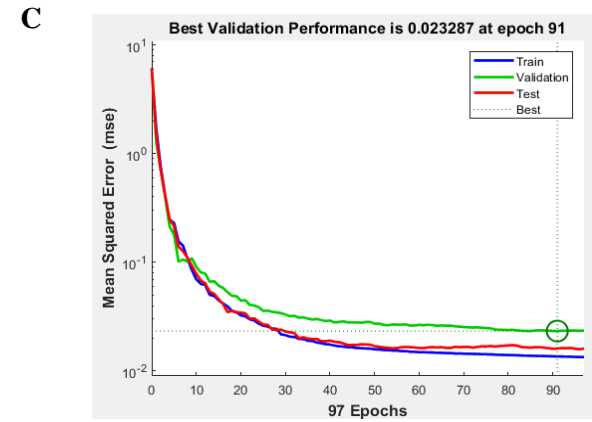
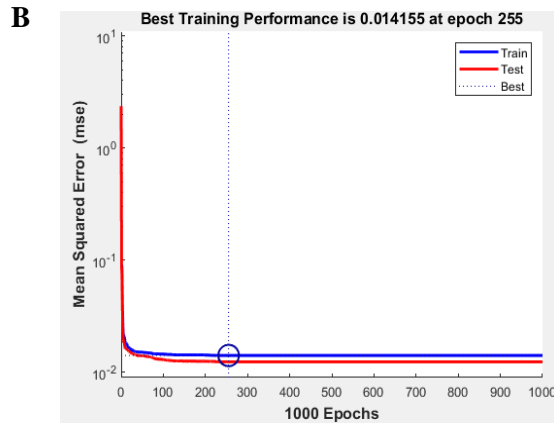
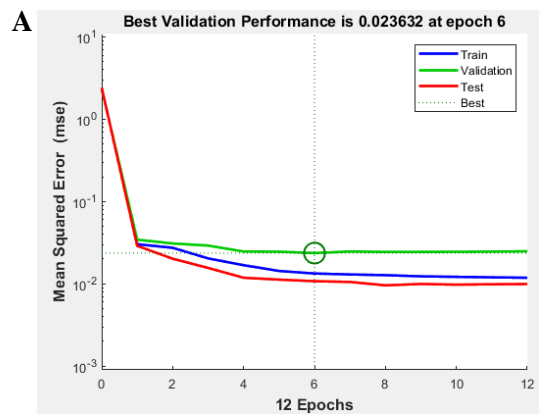
Para tener una mejor comparación entre los diferentes algoritmos los datos del MSE y R se toma en cuenta los datos del testeo, debido a que estos valores los cuales no ha entrenado la red, es decir no estaban en la base de datos, y son los mejores para la predicción de datos. Para cada algoritmo de entrenamiento modificando el número de neuronas ocultas, las configuraciones óptimas para las neuronas fueron de 30 para LM, 65 para BR y 70 para SCG.

Las Figura 17-4 (A), 17-4 (B) y 17-4 (C) muestran la evolución de los errores de entrenamiento, validación y prueba a lo largo del número de iteraciones para cada modelo de Red Neuronal Artificial (RNA). A medida que se realizan más iteraciones de entrenamiento los errores tienden a disminuir gradualmente. El algoritmo finaliza cuando supera las restricciones establecidas para el error máximo en cada iteración.

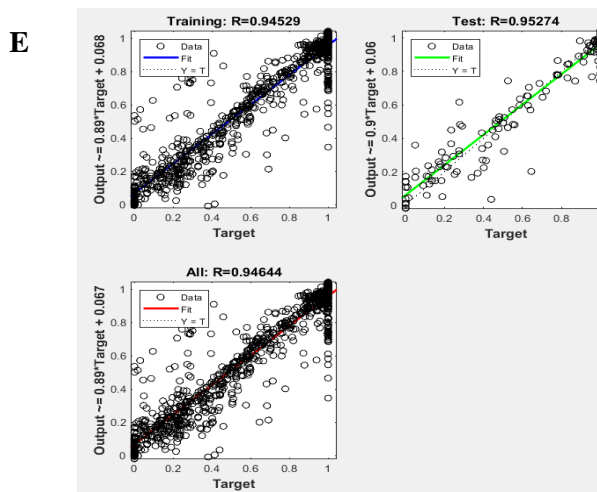
Como se observa en las Figura 17-4 (A), 17-4 (B) y 17-4 (C), los algoritmos de entrenamiento de la RNA-LM, RNA-BR y RNA-SCG finalizan en 12, 1000 y 67 iteraciones (por el error de validación), si bien los errores de entrenamiento son lo suficientemente pequeños para los tres algoritmos de entrenamiento. En el caso del algoritmo BR ocupa más iteraciones debido al tiempo

que toma el entrenamiento. Los gráficos de error de prueba y validación muestran características iguales.

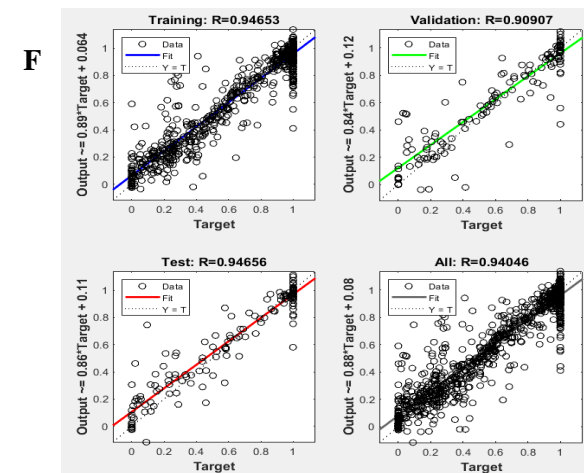
En el caso de los análisis de regresión en las Figura 17-4(D), 17-4(E) y 17-4(F) exhiben las salidas generadas por la red neuronal en comparación con los objetivos esperados para las muestras de entrenamiento, validación y prueba. El grado óptimo de ajuste se alcanza cuando los puntos se alinean en una línea diagonal de 45 grados, indicando que las salidas de la red coinciden perfectamente con los objetivos ($R=1$). Siendo en el modelo RNA-BR teniendo un rendimiento superior al o similares a lo demás en cada etapa del entrenamiento.



RNA-LN



RNA-BR



RNA-SCG

Figura 17-4: Comparación entre las mejores configuraciones para cada algoritmo de entrenamiento.

Realizado por: Morales, A., 2024

Al tener resultados similares entre los modelos RNA-LN y RNA-BR se decide tomar el modelo RNA-BR porque este trabaja con valores que están demasiado dispersos entre sí y eso ayuda a una mejor predicción. Además, su capacidad de predicción se pone a prueba mediante una validación externa y análisis estadísticos para que la respuesta de la RNA sea satisfactoria y se logre introducir cualquier nueva entrada y conseguir resultados válidos con el menor error posible.

4.6 Reporte completo de resultados de la RNA

Una vez se tenga la mejor configuración para la RNA se ejecutó un último entrenamiento con el siguiente diseño: 65 neuronas ocultas y se entrenó con una base de datos de 325 datos con 4 entradas y 3 salidas mediante el algoritmo Bayesian Regularization, con un tiempo de ejecución de >1 minuto.

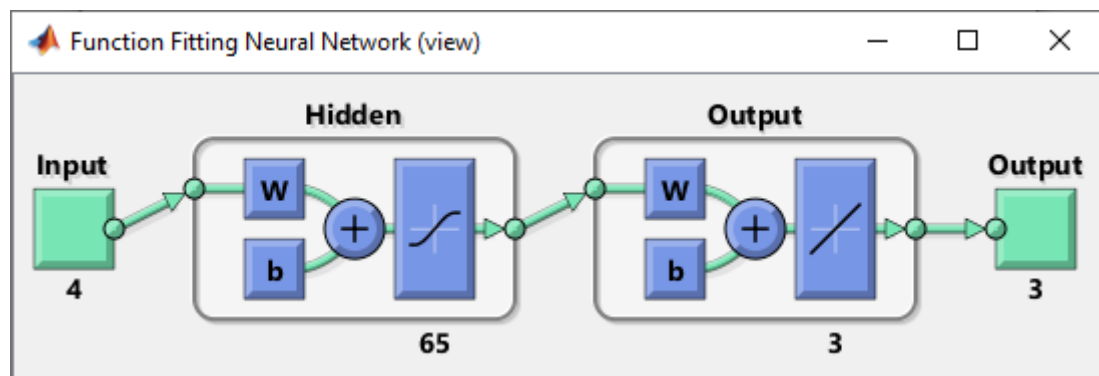


Figura 18-4: Esquema de la red neuronal artificial diseñada en MATLAB.

Realizado por: Morales, A., 2024

Tabla 9-4: Error cuadrático medio del diseño de la RNA

Etapa	MSE
trainPerformance (Entrenamiento)	0.1044
valPerformance (Validación)	NAN
testPerformance (Prueba)	0.0100
performance (Desempeño total)	0.0243

Realizado por: Morales, A., 2024

En la Tabla -4 se examinan los errores cuadráticos medios en cada fase del ajuste de la Red Neuronal Artificial (RNA): entrenamiento y prueba. El valor más relevante es el de la etapa de Prueba y entrenamiento. La reducción del error se refleja en valores más cercanos a cero, lo cual sugiere que resultados como 0.1044 y 0.0100 son aceptables para el buen rendimiento de la RNA.

4.6.1 Desempeño de la RNA

Los resultados para medir desempeño de la RNA se muestran en la Figura 20-4. Estos revelan el grado de acercamiento de la RNA en cada una de las etapas que lo conforman entrenamiento y prueba. El coeficiente total es de 0.94702, enseñando que la correlación entre salidas y los objetivos (Target) es aproximadamente lineal. En la Figura 19-4, representa el avance del MSE conforme progresan las iteraciones de cada etapa, el MSE mayor se encuentra en la etapa de prueba.

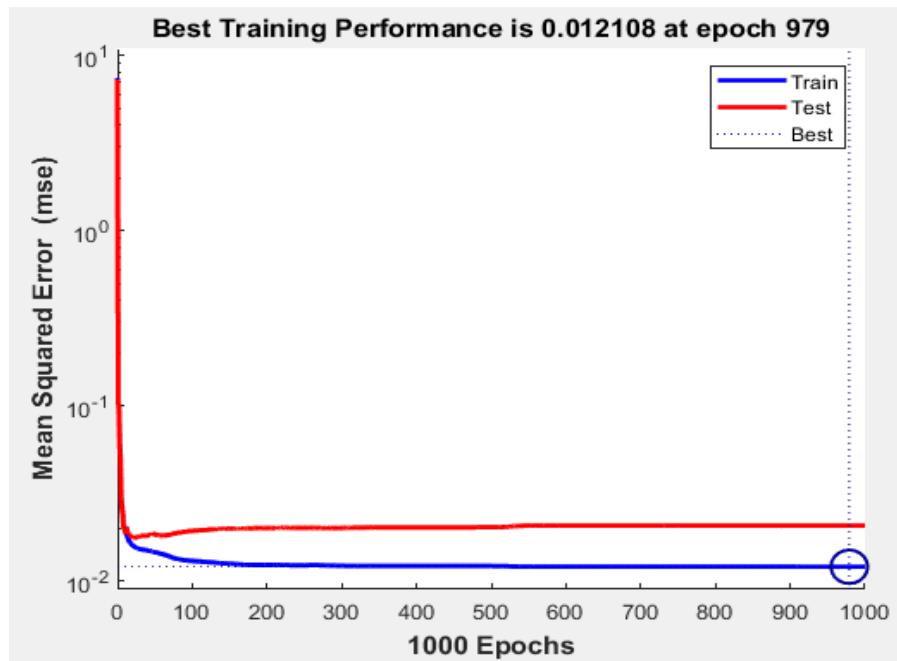


Figura 19-4: Rendimiento del entrenamiento de la RNA.

Realizado por: Morales, A., 2024

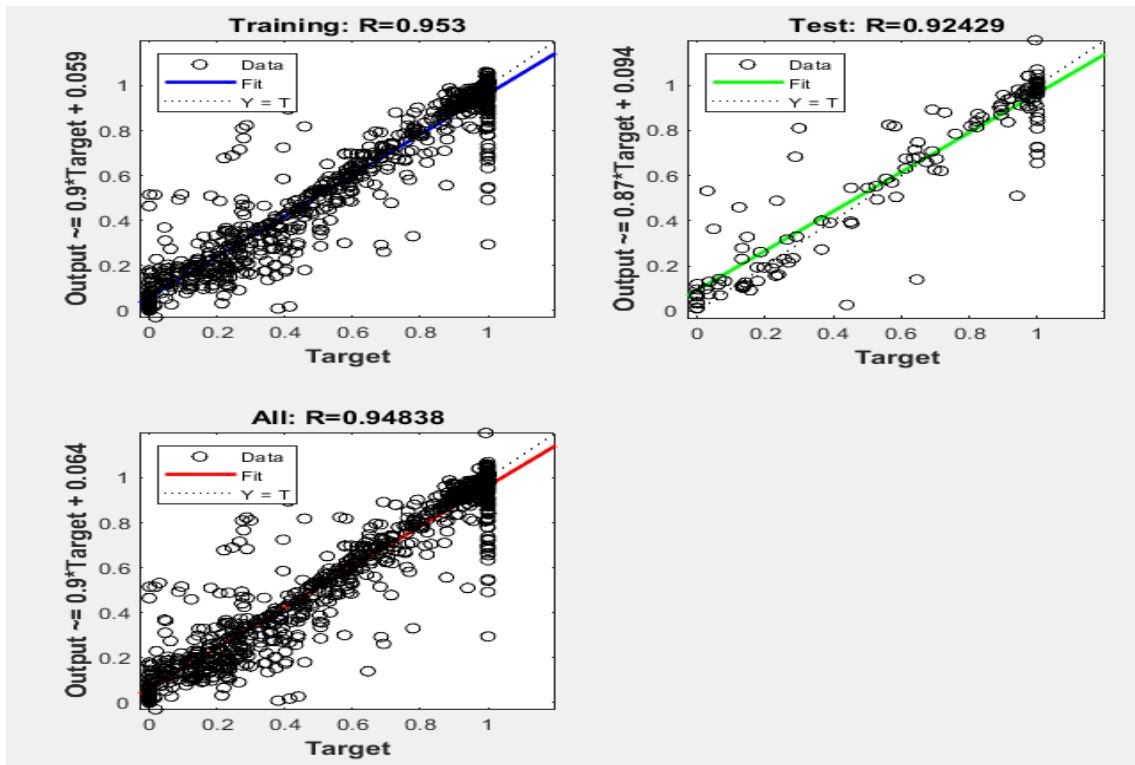


Figura 20-4: Regresión del entrenamiento y prueba de la red neuronal artificial.

Realizado por: Morales, A., 2024

4.7 Resultados de la predicción de valores reales de la RNA

En el Anexo D se hallan los resultados del error porcentual de los 325 datos que se usaron en el proceso de entrenamiento, estos errores son distintos en comparación de los errores que se obtuvieron en los 25 datos para la validación externa de la RNA.

En la Tabla 10-4 se tienen los errores porcentuales para las predicciones de la RNA, haciendo uso de datos para la validación en cada una de las salidas seleccionadas, se debe tener en consideración que para el promedio del error no se tomaron en cuenta los errores de datos atípicos de la red, los cuales hacen que el error sea grande. Para la primera salida de fracción molar de BENCENO en el Destilado 1 (FR_BEN) es de 8.048 %, para la segunda salida la fracción molar de ISOPROPANOL en el Destilado 2 (FR_IPA) es de 3 % y para la última salida la fracción molar de AGUA en el Destilado 3 (FR_H2O) es de 6.266 %.

Las predicciones ejecutadas por la RNA son aceptablemente precisas, obviando el caso de algunos valores atípicos predichos por la red en los errores debido a la gran dispersión de datos en la base de datos original usada para el entrenamiento, pero el porcentaje de error promedio sigue siendo aceptable.

Tabla 10-4: Errores porcentuales de las predicciones por la RNA

FR_BEN			FR_IPA			FR_H2O		
DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR
0.2178	0.33457	53.613	6.88E-02	0.08577	0.00	1.0000	1.00546	0.546
0.76	0.68666	9.651	0.0522	0.04164	20.32	0.9999	0.99607	0.383
0.418	0.40923	2.098	1.70E-02	0.00132	0.00	1.0000	1.01219	1.219
0.0349	0.19163	449.087	1.34E-01	0.15988	0.00	1.0000	0.98409	1.591
0.6579	0.42888	34.810	0.09089	0.08415	7.42	0.9999	1.00917	0.927
0.1653	0.13879	16.040	0.21806	0.23528	7.89	0.9999	1.04180	4.190
0.0211	0.25959	1131.444	0.37001	0.32180	13.05	0.9999	0.95252	4.739
0.6677	0.85537	28.106	0.94610	0.92716	2.00	0.7040	0.83957	19.258
0.7546	0.87611	16.103	0.93654	0.93564	0.10	0.6607	0.70206	6.261
0.9159	0.38755	57.687	0.63250	0.61092	3.41	0.9997	1.03194	3.224
0.2608	0.34150	30.942	1.21E-01	0.15221	0.00	1.0000	0.99646	0.354
0.8355	0.85060	1.808	0.20465	0.19768	3.41	0.9999	0.98369	1.621
0.8842	0.58019	34.382	0.92710	0.89587	3.37	0.9993	0.79343	20.601
0.4843	0.62538	29.132	0.94074	0.94549	0.51	0.3089	0.56229	82.029
0.9788	0.96299	1.615	0.02575	0.15753	511.73	0.9999	1.02377	2.387
0.893	0.87405	2.123	0.87238	0.84664	2.95	0.4291	0.44761	4.314
0.4245	0.29723	29.981	2.54E-02	0.01505	0.00	1.0000	0.99343	0.657
0.2574	0.36963	43.602	1.09E-01	0.14360	0.00	1.0000	1.01294	1.294
0.9583	0.97917	2.178	0.20371	0.16429	19.35	0.9999	1.01942	1.953
0.4552	0.31803	30.134	0.04129	0.05440	31.76	0.9999	0.99931	0.059
0.5829	0.52516	9.905	0.01693	0.02318	0.00	0.9999	1.00489	0.499
0.5039	0.27492	45.442	0.03652	0.03968	8.64	0.9999	0.99718	0.272
0.7326	0.69788	4.739	0.93862	0.92863	1.06	0.9995	0.47474	52.502
0.9471	0.93141	1.657	0.38518	0.35585	7.61	0.9999	0.95166	4.824
0.6338	0.59212	6.576	0.93043	0.94460	1.52	0.9996	0.70265	29.707
PROMEDIO		8.048			3.00			6.266

Realizado por: Morales, A., 2024

4.7.1 Análisis de los datos predichos por la RNA

Para el análisis de los datos predichos por la RNA se hace uso de gráficos haciendo una comparación entre los datos obtenidos de manera experimental en el simulador DWSIM y los resultados que fueron predichos por la RNA, divididos en dos partes: datos de entrenamiento (325) y para la validación externa (25).

4.7.1.1 Datos de entrenamiento

Fracción molar de BENCENO en el Destilado 1

Durante en entrenamiento la predicción de fracción molar (FR_BEN) tiene un error promedio de 5.419 %, en la Figura 21-4 se observa la evidencia de datos atípicos.

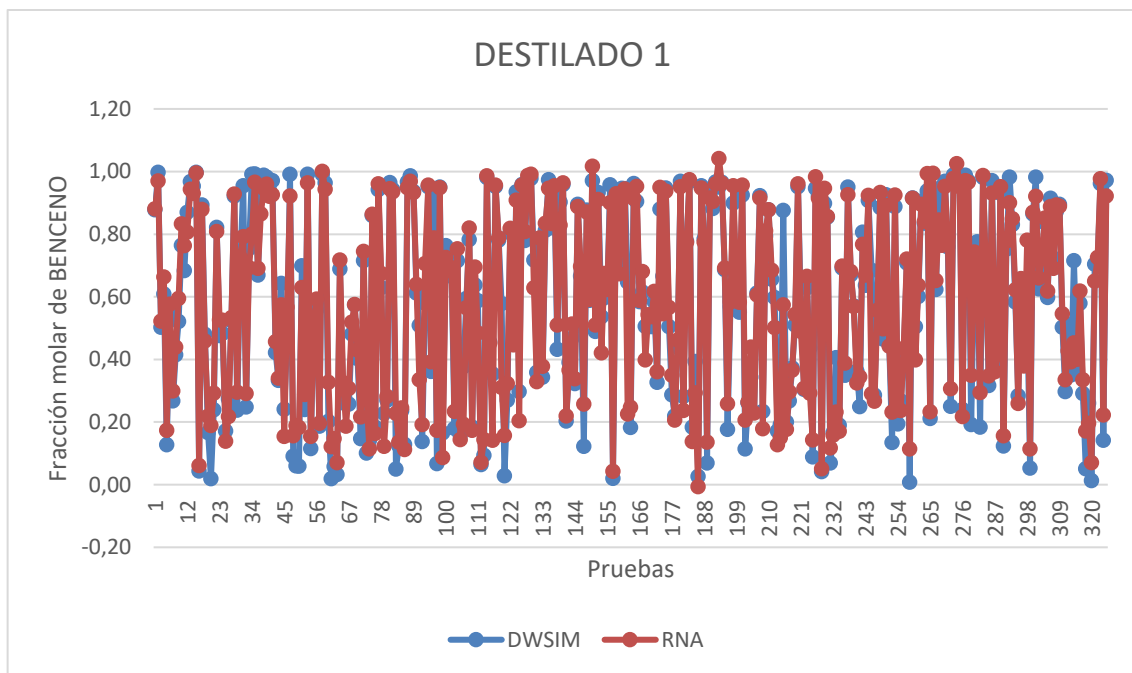


Figura 21-4: Fracción molar de Benceno real vs el predicho en el destilado de la primera columna (D1).

Realizado por: Morales, A., 2024

El error promedio de los datos de entrenamiento es aceptable lo cual indica que es una buena predicción de la RNA frente a la fracción molar de benceno en el destilado 1, a pesar de la presencia de valores atípicos las gráficas se acoplan por el error que es aceptable.

Fracción molar de IPA en el destilado 2.

En el destilado 2 se aprecia un error porcentual medio de 3% en la predicción de la fracción molar de IPA, como se observa en la Figura 22-4, existen valores atípicos en comparación de las otras salidas predichas es la que tiene el menor error, por lo que siguen siendo valores de error considerados inferiores para las predicciones durante el proceso de entrenamiento.

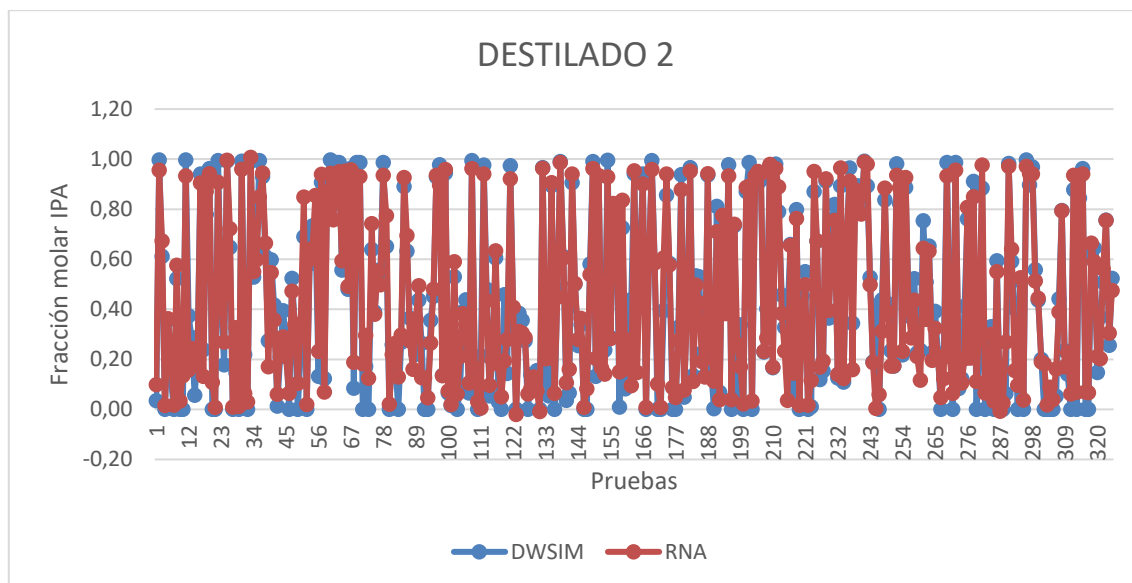


Figura 22-4: Fracción molar de Isopropanol real vs el predicho en el destilado de la segunda columna (D2).

Realizado por: Morales, A., 2024

Fracción molar de H₂O en el destilado 3

En el destilado 3 se aprecia un error porcentual medio de 6.2311 % en la predicción de los resultados de fracciones molares, respecto a la presencia de valores atípicos como se muestra en la Figura 23-4 existen al igual que en la predicción de fracción molar de benceno, siendo el error aceptable, por lo que se tiene una buena predicción con los valores de entrenamiento para la RNA.

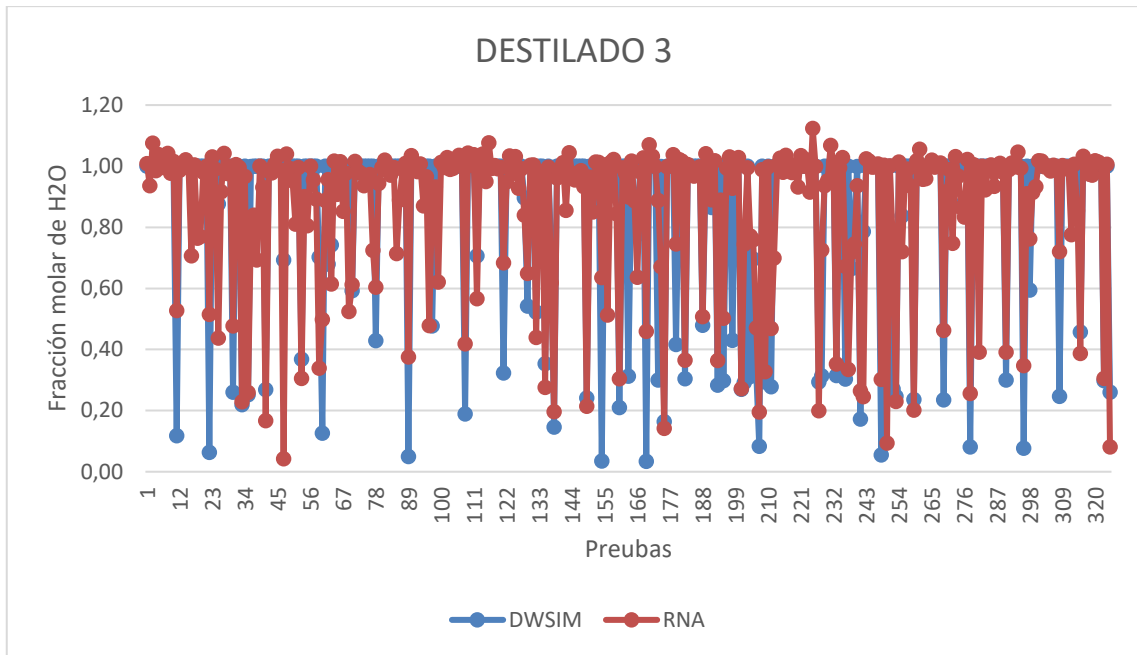


Figura 23-4: Fracción molar de Agua real vs el predicho en el destilado de la tercera columna (D3).

Realizado por: Morales, A., 2024

Al observar las tres gráficas comprando los valores reales obtenidos del simulador y lo valores predichos por la RNA, todas las gráficas presentan desfases debido al MSE por ser un valor cercano o tender a cero, se puede ver de mejor manera en la aptitud de aprendizaje de la RNA.

4.7.1.2 Datos de validación externa

Fracción molar de BENCENO en el Destilado 1

La predicción de la fracción molar de benceno en el destilado 1 (D1) se observa en la Figura 24-4, se comparan los datos reales obtenidos del simulador y los datos predichos por la RNA, se tiene una correlación aceptable con algunas presencias de valores atípicos y esto se refleja en el error promedio de 8.048 %.

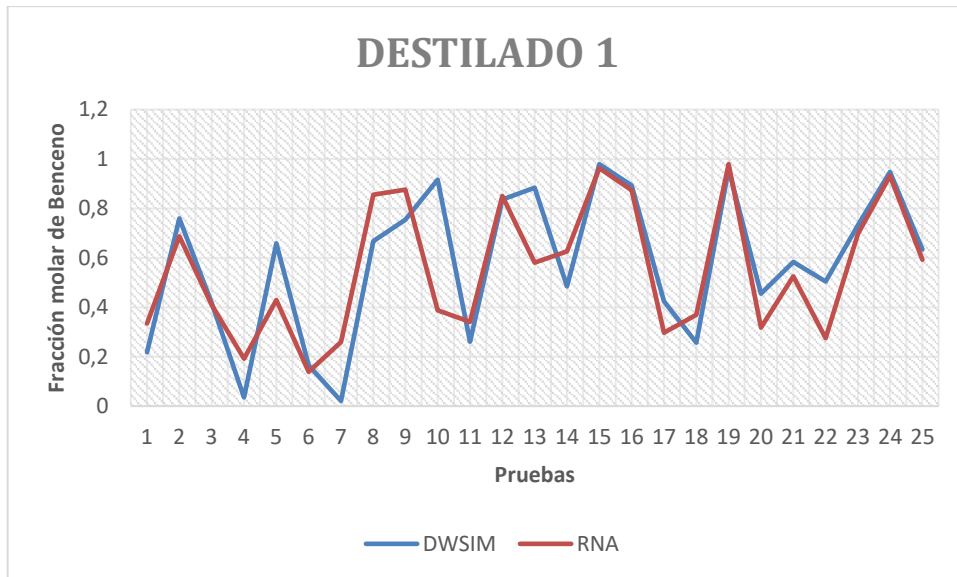


Figura 24-4: Fracción molar de benceno en el destilado de la primera columna en la validación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Fracción molar de IPA en el destilado 2.

Para la fracción molar de IPA las predicciones fueron la más precisas como se puede observar en la Figura 25-4, en la predicción de la RNA para la fracción se obtuvo en error promedio porcentual 3.00 %, con la casi presencia de pocos valores atípicos.



Figura 25-4: Fracción molar de isopropanol en el destilado de la segunda columna en la validación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Fracción molar de H₂O en el destilado 3

En las predicciones hechas por la RNA se obtuvo un error promedio porcentual aceptable de 6.266 % para la fracción molar de H₂O, y se tiene presencia de valore atípicos como se observa en la Figura 26– 4.

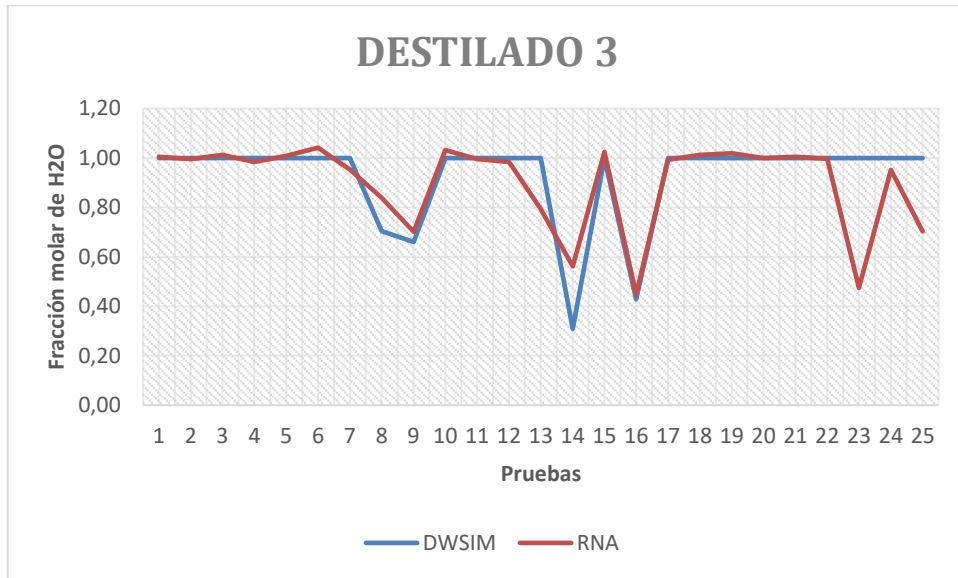


Figura 26-4: Fracción molar de agua en el destilado de la tercera columna en la validación.

Realizado por: Morales, A., 2024

Todos los gráficos presentan una coincidencia considerable entre los valores predichos por la RNA y los valores del simulador DWSIM.

El resultado que presento menos desfase fue el de la predicción de valores de fracción molar de IPA, reflejándose en el error porcentual que tiene, debido a la poca presencia de valores atípicos. Con respecto a los otros dos resultados si bien tienen una diferencia en el error, estos son aceptables por tener un valor menor al 10 %.

4.8 Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion 19

Con el fin de demostrar que la red tiene la capacidad predictiva necesaria y confiabilidad de esta se realiza un análisis estadístico comparativo para establecer un nivel de confianza, utilizando los datos experimentales obtenidos del simulador y los datos predichos de la RNA de fracción molar de benceno, isopropanol y H₂O en los respectivos destilados (D1, D2, D3).

El análisis estadístico se efectuó en el programa Statgraphics Centurion 19, utilizando como muestra los datos para la validación externa de la RNA.

Tabla 11-4: ANOVA de resultados de la RNA

Fuente	Suma de Cuadrados	Df	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Fracción molar de BENCENO en el destilado 1					
Entre grupos	0.0086293	1	0.0086293	0.11	0.7431
Intra grupos	3.811	48	0.0793959		
Total (Corr.)	3.81963	49			
Fracción molar de IPA en el destilado 2					
Entre grupos	0.0000108495	1	0.0000108495	0.00	0.9931
Intra grupos	6.79461	48	0.141554		
Total (Corr.)	6.79463	49			
Fracción molar de H2O en el destilado 3					
Entre grupos	0.0063025	1	0.0063025	0.18	0.6701
Intra grupos	1.64702	48	0.0343129		
Total (Corr.)	1.65332	49			

Realizado por: Morales, A., 2024

La Tabla 11-4 la tabla ANOVA descompone la varianza de los datos en dos componentes: un componente entre-grupos y un componente dentro-de-grupos. La razón-F, para la fracción molar de benceno en destilado de la columna 1 es de 0.108687, en la fracción molar de isopropanol del destilado de la columna 2 es de 0.0000766453 y para la fracción molar del agua en el destilado de la columna 3 es de 0.183677, el cual es el cociente entre el estimado entre-grupos y el estimado dentro-de-grupos. Puesto que el valor-P de la razón-F es mayor o igual que 0,05, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las 2 variables con un nivel del 95,0% de confianza.

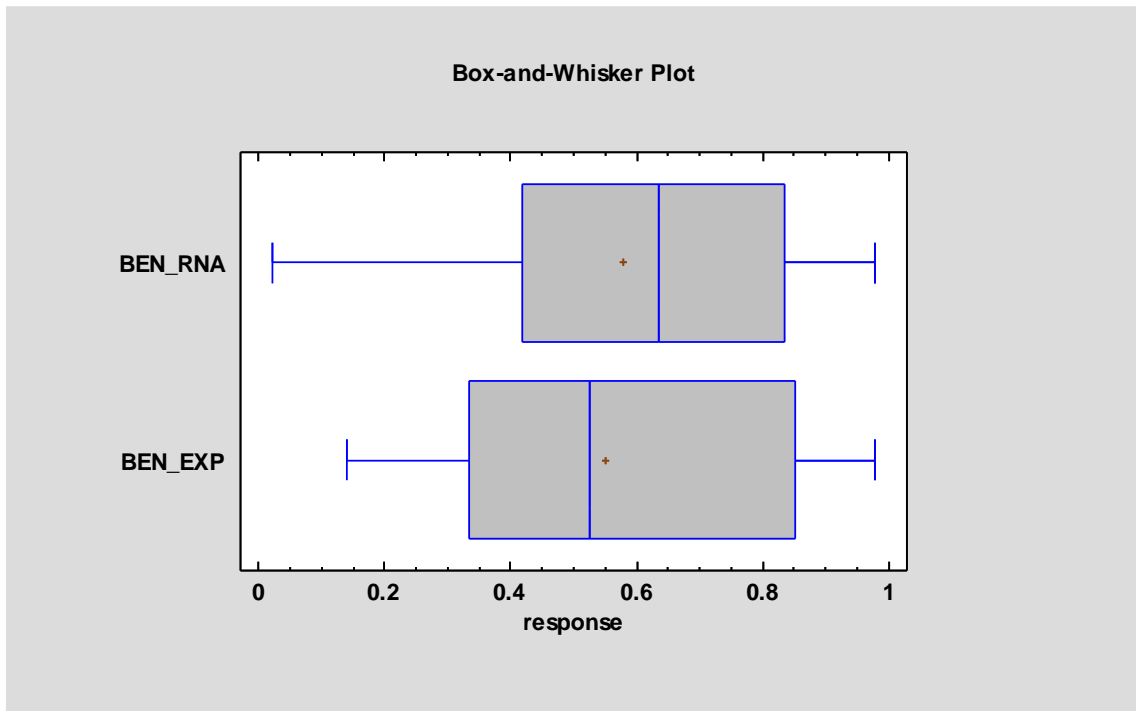


Figura 26-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del benceno

Realizado por: Morales, A., 2024

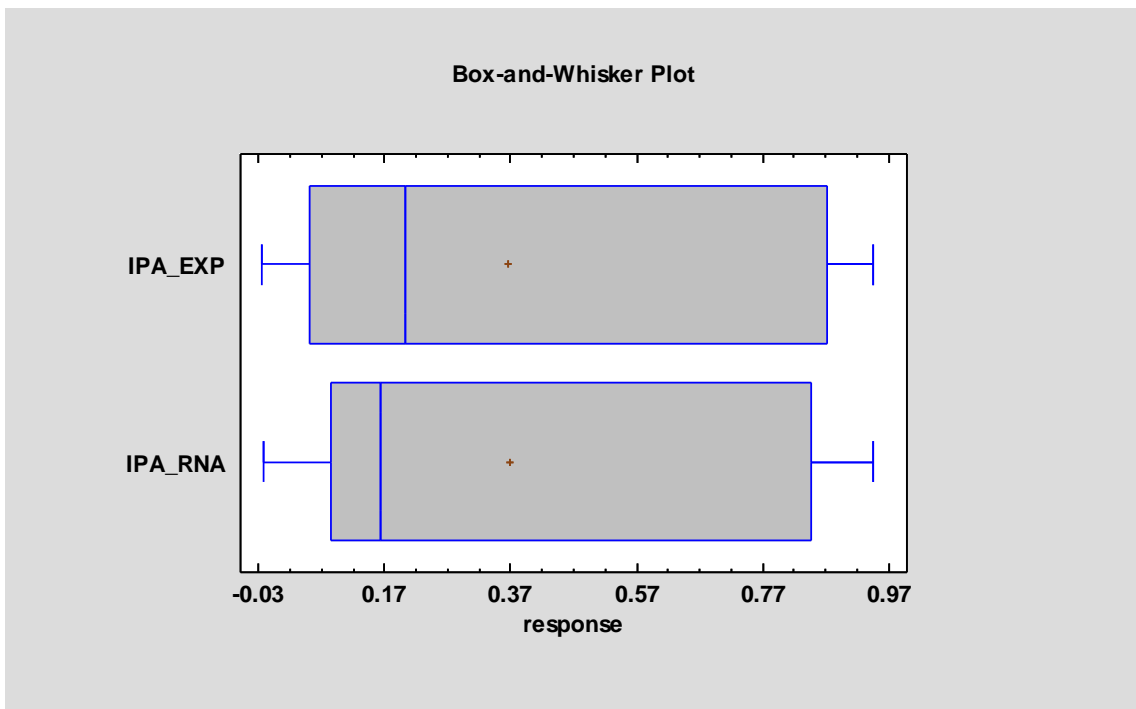


Figura 27-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del isopropanol

Realizado por: Morales, A., 2024

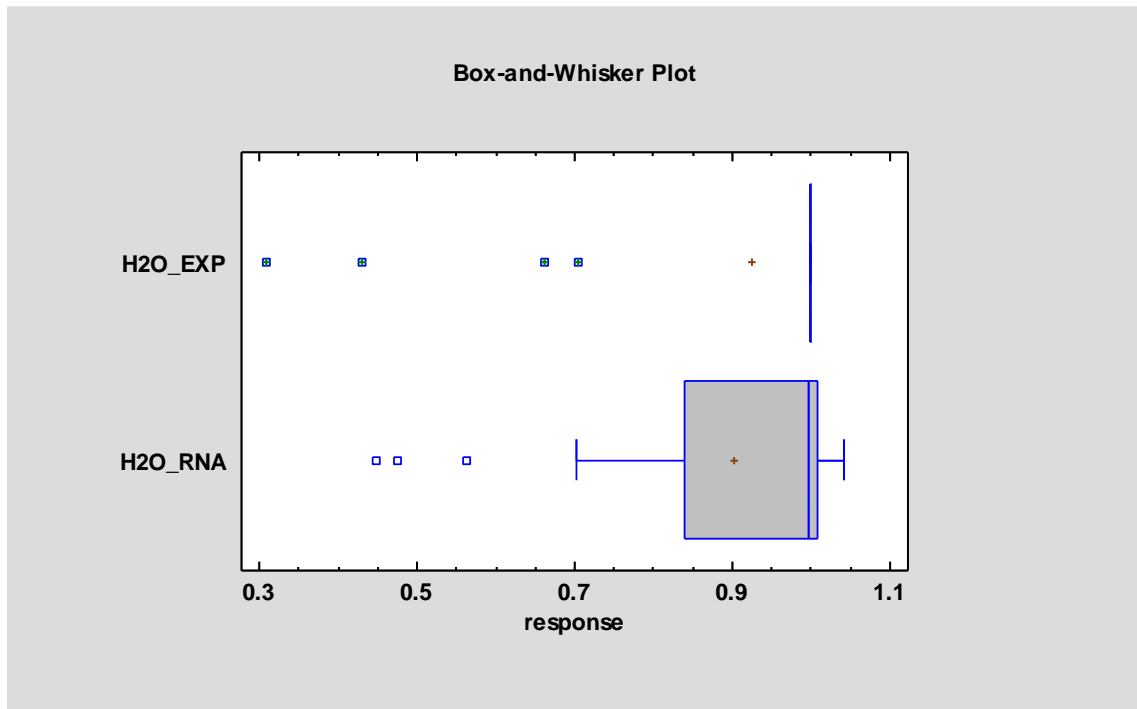


Figura 28-4: Caja y bigotes para los resultados de fracción del agua

Realizado por: Morales, A., 2024

Los diagramas de cajas y bigotes proporcionan una representación visual de la distribución de los datos analizados. Las líneas verticales en los extremos indican los valores mínimos y máximos observados en los datos. Además, los puntos situados en los extremos señalan los datos atípicos presentes en la base de datos utilizada para validar la Red Neuronal Artificial (RNA). Se observa en los gráficos que las cajas y bigotes muestran una discrepancia notable entre los valores reales y los valores predichos en los valores predichos de las fracciones molares de benceno y agua, y un parecido entre ambas graficas en los valores de fracción molar de isopropanol.

CONCLUSIONES

- Se hizo uso del simulador gratuito DWSIM para realizar la simulación del proceso de separación de la mezcla benceno-isopropanol-agua mediante destilación extractiva. El proceso fue propuesto por Tsai y Chien (2021b); mismo que sirvió para identificar las variables como base de datos, equipos, condiciones de operación y evaluación de funcionamiento de la simulación.
- La simulación desarrollada en DWSIM fue validada con respecto a la presentada por la bibliografía haciendo una comparación con los resultados obtenidos en el simulador y los resultados que se tomó como base. Obteniendo un error menor al 5 % dando como valido el proceso, tomando como referencia que la comparación se hizo con cada una de las salidas que presenta el proceso de separación.
- Se implementó una red neuronal artificial (RNA) mediante la herramienta Neural Net Fiting proveniente del software MATLAB y una base de datos realizada con el simulador DWSIM, con el fin de realizar una predicción de las fracciones molares de benceno (FR_BEN), isopropanol (FR_IPA) y agua (FR_H2O) en los destilados de la primera, segunda y tercera columna respectivamente del proceso siendo estas las salidas más importantes del mismo. Haciendo usos de análisis de sensibilidad para poder identificar que variables de entrada afectaban a las variables de salida más importantes, siendo estas el flujo molar en la alimentación (FM_F), la fracción molar de benceno (X_BEN), de isopropanol (X_IPA) y de agua (X_H2O) en la alimentación, teniendo un total de 4 entradas para la RNA. La RNA consta de 4 entradas, 65 neuronas ocultas y 3 salidas, y fue ingresada con el algoritmo Bayesian Regularization, con un MSE de 0.0113867 y un coeficiente de regresión de 0.959099.
- Se evaluó la predicción que presenta la RNA haciendo uso de un análisis estadístico ANOVA, haciendo uso de 25 datos externos a los usados en el entrenamiento de la red, en donde se comparan los valores reales sacados del simulador DWSIM y los valores predichos por la RNA de las diferentes salidas, resultando que los valores comparados no existen una diferencia estadísticamente significativa con un nivel de confianza de 95 %, dando a entender que la red tiene una buena capacidad predictiva.

RECOMENDACIONES

- Al momento de llevar a cabo el análisis de sensibilidad de una manera eficaz es recomendable combinar variables, debido a que de forma individual no se detectan variaciones significativas en los resultados de la simulación, y no solo enfocarse en una corriente sino también en equipos como torres de destilación, teniendo en cuenta que tiene que existir un cambio notorio en los resultados de las variables deseadas.
- Para mejorar la capacidad de aprendizaje de la Red Neuronal Artificial (RNA), se podría considerar la incorporación de nuevas variables de entrada ya sea la variación del número de patos en la torre, calor del reboiler, para mejorar la precisión y la versatilidad del modelo. Esta expansión del alcance de la RNA no solo enriquecería su capacidad predictiva, sino que también abriría nuevas oportunidades para aplicaciones y análisis más detallados en sistemas de destilación y procesos relacionados. Actualmente, la RNA está diseñada para calcular las fracciones molares de los tres componentes principales en un sistema de destilación, basándose únicamente en cuatro condiciones típicas de entrada: fracciones molares de benceno (FR_BEN), isopropanol (FR_IPA) y agua (FR_H2O) y el flujo molar de la alimentación (FM_F). Sin embargo, sería innovador ampliar esta capacidad para predecir las fracciones molares de otros compuestos o para calcular nuevos parámetros, como los flujos másicos, molares, entre otros.
- Los datos empleados en el entrenamiento de la RNA deben ser normalizados y quitar valores demasiado atípicos debido a que aumentan el error de la capacidad predictiva final que se alcanzara con la RNA.
- Es fundamental llevar a cabo un adecuado tratamiento de los datos con el fin de evitar la presencia de valores atípicos o recolecciones incorrectas en la base de datos generada. Esto se debe a que dichos valores pueden afectar negativamente el proceso de entrenamiento, aprendizaje y validación de la Red Neuronal Artificial (RNA), lo que podría resultar en un aumento del error cuadrático medio y en una mayor dispersión de los datos durante el proceso de regresión.

BIBLIOGRAFÍA

1. BIYANTO, T.R., WIDJANTORO, B.L., JABAL, A.A. y BUDIATI, T., 2011. Artificial neural network based modeling and controlling of distillation column system. *International Journal of Engineering, Science and Technology*, vol. 2, no. 6, ISSN 2141-2820. DOI 10.4314/ijest.v2i6.63709.
2. BUITRAGO, J., AMAYA, D. y RAMOS, O., 2017. Model and simulation of a pentane isomerization reactor for naphtha stream in oil refining. *Contemporary Engineering Sciences*, vol. 10, no. 25, DOI 10.12988/ces.2017.710136.
3. CHEMPSEP, 2020. ChempSep. *Online* [en línea]. [consulta: 29 agosto 2023]. Disponible en: <http://www.chemsep.org/>.
4. CUI, Y., SHI, X., GUANG, C., ZHANG, Z., WANG, Chao y WANG, Chen, 2019. Comparison of pressure-swing distillation and heterogeneous azeotropic distillation for recovering benzene and isopropanol from wastewater. *Process Safety and Environmental Protection* [en línea], vol. 122, ISSN 09575820. DOI 10.1016/j.psep.2018.11.017. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2018.11.017>.
5. CUI, Y., ZHANG, Z., SHI, X., GUANG, C. y GAO, J., 2020. Triple-column side-stream extractive distillation optimization via simulated annealing for the benzene/isopropanol/water separation. *Separation and Purification Technology* [en línea], vol. 236, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2019.116303. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.116303>.
6. DANTAS, T.N.C., CABRAL, T.J.O., DANTAS NETO, A.A. y MOURA, M.C.P.A., 2020. Enrichment of patchoulol extracted from patchouli (*Pogostemon cablin*) oil by molecular distillation using response surface and artificial neural network models. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* [en línea], vol. 81, ISSN 22345957. DOI 10.1016/j.jiec.2019.09.011. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.09.011>.
7. DWSIM, 2020. DWSIM - Chemical Process simulator. *DWSIM Wiki* [en línea]. [consulta: 29 agosto 2023]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Automation%0Ahttp://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>.
8. DWSIM, 2023. DWSIM Simulator. *Online* [en línea]. [consulta: 29 agosto 2023]. Disponible en: <https://dwsim.org/>.
9. GERBAUD, V., RODRIGUEZ-DONIS, I., HEGELY, L., LANG, P., DENES, F. y YOU, X.Q., 2019. Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 141, ISSN 0263-8762. DOI 10.1016/J.CHERD.2018.09.020.

10. GUTIÉRREZ, H. y SALAZAR, R., 2008. *Análisis y diseño de experimentos*. S.l.: McGRAW-HILL/INTERAMERICANA EDITORES, S.A. ISBN 9789701065266.
11. IDRIS, I., AHMAD, Z., ROSLEE OTHMAN, M., SHOLAHUDIN ROHMAN, F., ILYAS RUSHDAN, A. y AZMI, A., 2022. Application of artificial neural network to predict water flux from pre-treated palm oil mill effluent using direct contact membrane distillation. *Materials Today: Proceedings*, vol. 63, ISSN 2214-7853. DOI 10.1016/J.MATPR.2022.04.084.
12. KHAYET, M. y COJOCARU, C., 2012. Artificial neural network modeling and optimization of desalination by air gap membrane distillation. *Separation and Purification Technology* [en línea], vol. 86, ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2011.11.001. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2011.11.001>.
13. LI, M., CUI, Y., SHI, X., ZHANG, Z., ZHAO, X., ZHU, X. y GAO, J., 2021. Simulated annealing-based optimal design of energy efficient ternary extractive dividing wall distillation process for separating benzene-isopropanol-water mixtures. *Chinese Journal of Chemical Engineering* [en línea], vol. 33, ISSN 10049541. DOI 10.1016/j.cjche.2020.08.041. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2020.08.041>.
14. LI, Sihong, ZHENG, Y., LI, Shaoyuan y HUANG, M., 2022. Mechanism-embedded neural network modeling and operation optimization of a distillation unit with varying production performance. *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], vol. 183, ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2022.04.031. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.04.031>.
15. LUO, R.F., SHAO, H.H. y ZHANG, Z.J., 1995. Fuzzy-neural-net-based inferential control for a high-purity distillation column. *Control Engineering Practice*, vol. 3, no. 1, ISSN 09670661. DOI 10.1016/0967-0661(94)00061-K.
16. MATLAB, 2022. ¿Qué es una red neuronal? - MATLAB & Simulink. *MathWorks* [en línea]. [consulta: 29 agosto 2023]. Disponible en: <https://la.mathworks.com/discovery/neural-network.html#redes-neuronales-con-matlab>.
17. PORRAZZO, R., CIPOLLINA, A., GALLUZZO, M. y MICALÈ, G., 2013. A neural network-based optimizing control system for a seawater-desalination solar-powered membrane distillation unit. *Computers and Chemical Engineering* [en línea], vol. 54, ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2013.03.015. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.03.015>.

18. SAVKOVIC-STEVANOVIC, J., 1996. Neural net controller by inverse modeling for a distillation plant. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 20, no. SUPPL.2, ISSN 00981354. DOI 10.1016/0098-1354(96)00162-7.
19. SHAN, B., ZHENG, Q., CHEN, Z., SHEN, Y., ZHANG, F., WANG, Y. y ZHU, Z., 2021. Dynamic control and performance comparison of conventional and dividing wall extractive distillation for benzene / isopropanol / water separation. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* [en línea], vol. 128, ISSN 18761070. DOI 10.1016/j.jtice.2021.08.005. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.08.005>.
20. TANGSRIWONG, K., LAPCHIT, P., KITTIJUNGJIT, T., KLAMRASSAMEE, T., SUKJAI, Y. y LAONUAL, Y., 2020. Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen plus and DWSIM. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, vol. 463, no. 1, ISSN 17551315. DOI 10.1088/1755-1315/463/1/012057.
21. TAVAKOLMOGHADAM, M. y SAFAVI, M., 2012. An optimized neural network model of desalination by vacuum membrane distillation using genetic algorithm. *Procedia Engineering*, vol. 42, ISSN 18777058. DOI 10.1016/j.proeng.2012.07.400.
22. TSAI, M.L. y CHIEN, I.L., 2021a. Design and control of an energy-efficient process for the separation of benzene/isopropanol/water ternary mixture. *Separation and Purification Technology*, vol. 255, no. September 2020, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.117694.
23. TSAI, M.L. y CHIEN, I.L., 2021b. Design and control of an energy-efficient process for the separation of benzene/isopropanol/water ternary mixture. *Separation and Purification Technology* [en línea], vol. 255, no. September 2020, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.117694. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117694>.
24. TSAI, M.L., ZHANG, Y.R. y CHIEN, I.L., 2021. Improved design of separation system for the recovery of benzene and isopropanol from wastewater. *Separation and Purification Technology* [en línea], vol. 260, no. December 2020, ISSN 18733794. DOI 10.1016/j.seppur.2020.118227. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.118227>.
25. WASEWAR, K.L., KUMAR, S., PONSELVAN, F.I., MALVIYA, J. y KUMAR, M., 2009. Artificial Neural Network (ANN) Modeling of Reactive Distillation. *The IUP Journal of Chemical Engineering* [en línea], vol. 1, Disponible en: https://papers.ssrn.com/sol3/papers.cfm?abstract_id=1487497.
26. XU, L., LIU, Y., BAI, W., TAN, Z. y XUE, W., 2022. Design and control of energy-saving double side-stream extractive distillation for the benzene/isopropanol/water

separation. *Energy* [en línea], vol. 239, ISSN 03605442. DOI 10.1016/j.energy.2021.121952. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.121952>.

27. YOON, Y.S., JEONG, W., KIM, J., SEOK, M., PARK, J., BAE, J., LEE, K. y LEE, J.H., 2022. Development of inferential sensor and real-time optimizer for a vacuum distillation unit by recurrent neural network modeling of time series data. *Computers & Chemical Engineering*, vol. 168, ISSN 0098-1354. DOI 10.1016/J.COMPHEMENG.2022.108039.
28. ZHANG, Q., HOU, W., MA, Y., YUAN, X. y ZENG, A., 2021. Dynamic control analysis of eco-efficient double side-stream ternary extractive distillation process. *Computers and Chemical Engineering* [en línea], vol. 147, ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2021.107232. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107232>.



ANEXOS

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

N° de datos	ENTRADAS				SALIDAS		
	Flujo molar (feed)	Fracción ipa (feed)	Fracción agua (feed)	Fracción benceno (feed)	D1 - molar fraction (mixture) / benceno	D2 - molar fraction (mixture) / isopropanol	D3 - molar fraction (mixture) / agua
1	220	0.0797	0.3215	0.5988	0.8778	0.0347	0.9999
2	100	0.6000	0.1000	0.3000	0.9979	0.9967	0.9993
3	240	0.4548	0.1889	0.3562	0.5027	0.6115	0.9999
4	190	0.0862	0.5286	0.3852	0.6095	1.12E-13	1.0000
5	290	0.6011	0.3017	0.0973	0.1282	0.3569	0.9999
6	260	0.3014	0.2985	0.4000	0.5472	0.1191	0.9999
7	271	0.3239	0.4771	0.1990	0.2682	1.50E-08	1.0000
8	252	0.4793	0.2207	0.3000	0.4152	0.5225	0.9999
9	258	0.0802	0.5395	0.3803	0.5217	1.54E-15	1.0000
10	166	0.0095	0.5479	0.4426	0.7648	9.75E-14	1.0000
11	194	0.5533	0.0091	0.4376	0.6843	0.9967	0.1171
12	151	0.2129	0.3197	0.4673	0.8705	0.3731	0.9999
13	204	0.0992	0.2190	0.6818	0.9684	0.2875	0.9999
14	258	0.0229	0.2548	0.7223	0.9534	0.0565	0.9999
15	136	0.1028	0.2776	0.6196	0.9983	0.2304	0.9999
16	198	0.8349	0.1369	0.0282	0.0436	0.9406	0.9996
17	184	0.1373	0.3085	0.5542	0.8940	0.2375	0.9999
18	216	0.5257	0.1490	0.3253	0.4810	0.779	0.9998
19	244	0.7543	0.1266	0.1191	0.1669	0.9618	0.9995
20	280	0.4339	0.5512	0.0150	0.0199	2.77E-07	1.0000
21	291	0.2943	0.5236	0.1821	0.2397	3.66E-14	1.0000
22	299	0.3643	0.0061	0.6296	0.8218	0.9937	0.0627
23	288	0.4057	0.2332	0.3611	0.4769	0.4071	0.9999
24	274	0.3524	0.2874	0.3602	0.4836	0.1774	0.9999
25	144	0.8243	0.0875	0.0882	0.1714	0.993	0.8759
26	215	0.5987	0.2161	0.1852	0.2744	0.647	0.9998
27	237	0.2316	0.3978	0.3706	0.5247	3.30E-14	1.0000
28	294	0.0551	0.1592	0.7857	0.9222	0.1464	0.9999
29	297	0.3103	0.5076	0.1821	0.2381	1.91E-08	1.0000
30	212	0.5169	0.0215	0.4616	0.6888	0.9919	0.2596
31	123	0.1238	0.4641	0.4120	0.9551	0.2193	0.9999
32	241	0.2335	0.5898	0.1767	0.2489	4.65E-08	1.0000
33	100	0.7539	0.0184	0.2277	0.7547	0.9902	0.2190
34	103	0.2991	0.2738	0.4271	0.9913	0.5284	0.9999

35	119	0.3837	0.0187	0.5976	0.9923	0.6192	0.2520
36	288	0.4217	0.0711	0.5072	0.6698	0.9943	0.9984
37	104	0.5506	0.1364	0.3130	0.9557	0.9301	0.9995
38	138	0.2685	0.1708	0.5607	0.9885	0.6105	0.9998
39	165	0.1047	0.1920	0.7033	0.9830	0.2732	0.9999
40	224	0.1906	0.1571	0.6524	0.9401	0.5973	0.9998
41	172	0.2074	0.0157	0.7769	0.9709	0.4174	0.2683
42	289	0.3097	0.3700	0.3203	0.4225	0.0123	1.0000
43	246	0.4391	0.3221	0.2388	0.3336	0.2082	0.9999
44	167	0.3292	0.2971	0.3737	0.6429	0.3944	0.9999
45	150	0.4642	0.4070	0.1288	0.2413	0.2836	0.9999
46	206	0.1070	0.5917	0.3013	0.4561	4.69E-08	1.0000
47	105	0.3283	0.0723	0.5994	0.9922	0.5226	0.6923
48	297	0.6146	0.3155	0.0699	0.0914	0.3299	0.9999
49	298	0.4586	0.4949	0.0465	0.0607	3.99E-08	1.0000
50	194	0.5615	0.4007	0.0379	0.0593	0.2251	0.9999
51	167	0.4088	0.1848	0.4064	0.6992	0.689	0.9998
52	261	0.2349	0.5890	0.1761	0.2405	1.14E-07	1.0000
53	101	0.4074	0.0437	0.5489	0.9922	0.5807	0.3681
54	286	0.7002	0.2123	0.0875	0.1158	0.7332	0.9999
55	195	0.4767	0.1668	0.3565	0.5558	0.7246	0.9999
56	276	0.2974	0.2860	0.4166	0.5580	0.1312	0.9999
57	193	0.7414	0.1390	0.1195	0.1874	0.9072	0.9996
58	120	0.0620	0.0963	0.8416	0.9918	0.1233	0.9999
59	164	0.3722	0.0512	0.5767	0.9643	0.9234	0.7021
60	212	0.8387	0.0255	0.1358	0.2026	0.9971	0.1258
61	281	0.7992	0.1859	0.0149	0.0198	0.8763	0.9999
62	236	0.8490	0.1098	0.0412	0.0585	0.9859	0.6794
63	173	0.8841	0.0966	0.0193	0.0323	0.9859	0.7417
64	281	0.3130	0.1695	0.5175	0.6889	0.5561	0.9999
65	198	0.7022	0.1165	0.1813	0.2803	0.9458	0.9994
66	213	0.5528	0.2744	0.1728	0.2572	0.4798	0.9999
67	214	0.7126	0.1138	0.1736	0.2578	0.9637	0.9993
68	274	0.3306	0.3110	0.3584	0.4812	0.0843	0.9999
69	253	0.5080	0.0764	0.4156	0.5743	0.9857	0.9416
70	268	0.6239	0.0782	0.2978	0.4030	0.9858	0.5919
71	298	0.5056	0.3813	0.1131	0.1477	1.37E-12	1.0000
72	267	0.2124	0.2591	0.5284	0.7160	0.1712	0.9999
73	183	0.3227	0.6149	0.0625	0.1011	2.19E-08	1.0000
74	138	0.6566	0.2736	0.0698	0.1415	0.6383	0.9998
75	202	0.1961	0.2415	0.5624	0.8602	0.389	0.9999
76	245	0.6162	0.2524	0.1314	0.1838	0.5554	0.9999
77	218	0.1798	0.0612	0.7590	0.9426	0.5462	0.9997
78	201	0.5474	0.0419	0.4107	0.6298	0.986	0.4290

79	169	0.6271	0.2393	0.1336	0.2279	0.6508	0.9998
80	231	0.2663	0.5453	0.1883	0.2700	1.43E-14	1.0000
81	202	0.0898	0.2355	0.6747	0.9650	0.258	0.9999
82	246	0.0705	0.2006	0.7289	0.9427	0.2044	0.9999
83	187	0.3510	0.6177	0.0312	0.0498	2.86E-08	1.0000
84	197	0.5455	0.3741	0.0804	0.1246	0.2675	0.9999
85	231	0.6903	0.1446	0.1651	0.2367	0.8905	0.9996
86	211	0.6691	0.2449	0.0860	0.1286	0.6313	0.9998
87	184	0.1303	0.1991	0.6706	0.9672	0.3647	0.9999
88	130	0.1338	0.3274	0.5388	0.9865	0.2877	0.9999
89	219	0.1448	0.0041	0.8511	0.9364	0.2203	0.0500
90	248	0.3376	0.2223	0.4400	0.6128	0.4357	0.9999
91	108	0.3052	0.5155	0.1793	0.5087	0.2639	0.9999
92	186	0.4029	0.5107	0.0864	0.1384	6.32E-08	1.0000
93	149	0.0833	0.6090	0.3076	0.5797	2.41E-12	1.0000
94	208	0.1225	0.0772	0.8003	0.9514	0.355	0.9998
95	265	0.4842	0.2493	0.2665	0.3620	0.4515	0.9999
96	122	0.4762	0.1208	0.4030	0.9444	0.9285	0.9994
97	272	0.8327	0.1169	0.0504	0.0678	0.977	0.4765
98	226	0.0526	0.0693	0.8781	0.9503	0.1359	0.9999
99	134	0.7882	0.1325	0.0793	0.1658	0.944	0.9999
100	117	0.1190	0.5738	0.3072	0.7637	0.0651	0.9999
101	140	0.1307	0.5078	0.3615	0.7223	0.015	0.9999
102	249	0.3292	0.1918	0.4789	0.6660	0.5294	0.9998
103	255	0.3769	0.4922	0.1308	0.1802	7.17E-08	1.0000
104	252	0.1890	0.2938	0.5172	0.7158	0.0831	0.9999
105	239	0.5795	0.3082	0.1123	0.1587	0.3904	0.9999
106	160	0.4689	0.3188	0.2123	0.3771	0.4379	0.9999
107	124	0.1905	0.5502	0.2593	0.5947	0.0656	0.9999
108	200	0.4769	0.0138	0.5093	0.7831	0.9935	0.1893
109	140	0.4074	0.5007	0.0919	0.1836	0.1413	0.9999
110	148	0.1019	0.5618	0.3364	0.6377	2.43E-08	1.0000
111	166	0.2857	0.3741	0.3402	0.5878	0.2139	0.9999
112	191	0.8521	0.1073	0.0406	0.0640	0.9754	0.7066
113	287	0.6446	0.2839	0.0716	0.0946	0.4797	0.9999
114	160	0.0217	0.1528	0.8255	0.9816	0.0539	0.9998
115	222	0.3643	0.3236	0.3121	0.4556	0.2068	0.9999
116	123	0.5476	0.2996	0.1528	0.3542	0.6051	0.9998
117	242	0.0141	0.1194	0.8664	0.9533	0.0298	0.9999
118	162	0.0685	0.4878	0.4437	0.7807	4.31E-09	1.0000
119	132	0.3868	0.3413	0.2719	0.5783	0.4574	0.9999
120	223	0.5676	0.4124	0.0199	0.0289	0.1436	0.9999
121	282	0.7068	0.0905	0.2027	0.2695	0.9738	0.3232
122	211	0.2219	0.2403	0.5379	0.8045	0.3886	0.9999

123	239	0.2224	0.4587	0.3189	0.4508	5.65E-08	1.0000
124	229	0.1276	0.2225	0.6499	0.9356	0.3843	0.9999
125	195	0.4852	0.3241	0.1907	0.2973	0.3559	0.9999
126	232	0.0982	0.0784	0.8235	0.9585	0.2736	0.9998
127	263	0.0651	0.3622	0.5727	0.7801	2.45E-15	1.0000
128	161	0.0617	0.0733	0.8650	0.9728	0.1385	0.8961
129	137	0.0732	0.0567	0.8700	0.9785	0.0899	0.5415
130	116	0.1786	0.5364	0.2850	0.7177	0.1551	0.9999
131	226	0.2267	0.5257	0.2476	0.3585	1.99E-14	1.0000
132	178	0.4717	0.0563	0.4720	0.7774	0.9653	0.5222
133	271	0.4115	0.3339	0.2546	0.3431	0.1168	0.9999
134	265	0.1197	0.2821	0.5981	0.8126	0.0538	0.9999
135	132	0.4583	0.0506	0.4912	0.9748	0.8939	0.3538
136	280	0.0292	0.3547	0.6161	0.8213	5.24E-16	1.0000
137	204	0.1780	0.0614	0.7606	0.9380	0.4792	0.7123
138	119	0.8091	0.0127	0.1782	0.4322	0.9906	0.1455
139	151	0.2818	0.2333	0.4849	0.9032	0.6098	0.9997
140	205	0.0148	0.1199	0.8654	0.9594	0.0353	0.9999
141	253	0.4676	0.3854	0.1470	0.2031	0.0652	0.9999
142	154	0.6466	0.1401	0.2133	0.3907	0.9062	0.9990
143	279	0.4274	0.2221	0.3506	0.4678	0.4997	0.9998
144	255	0.4511	0.3146	0.2343	0.3228	0.2545	0.9999
145	296	0.1058	0.1902	0.7039	0.8956	0.3394	0.9999
146	210	0.0966	0.4589	0.4445	0.6664	4.46E-08	1.0000
147	238	0.3259	0.5874	0.0868	0.1229	8.88E-15	1.0000
148	272	0.1897	0.1586	0.6517	0.8772	0.5809	0.9998
149	111	0.7553	0.0267	0.2179	0.5891	0.9895	0.2408
150	148	0.0549	0.3636	0.5815	0.9712	0.1319	0.9999
151	173	0.5887	0.1193	0.2920	0.4901	0.9307	0.9987
152	224	0.0812	0.2769	0.6420	0.9333	0.2238	0.9999
153	107	0.2716	0.5424	0.1860	0.5370	0.2371	0.9999
154	225	0.5856	0.0026	0.4118	0.5975	0.9952	0.0348
155	231	0.2982	0.2787	0.4230	0.6067	0.2865	0.9999
156	158	0.3033	0.1473	0.5495	0.9582	0.7742	0.9994
157	133	0.7675	0.2226	0.0099	0.0208	0.8054	0.9994
158	262	0.0041	0.2770	0.7190	0.9380	0.0086	0.9999
159	182	0.3940	0.1724	0.4336	0.7042	0.7252	0.9996
160	180	0.0996	0.0159	0.8844	0.9465	0.0813	0.2095
161	188	0.1288	0.2091	0.6621	0.9458	0.3648	0.9998
162	105	0.3487	0.4352	0.2161	0.6471	0.4382	0.9998
163	208	0.7808	0.0975	0.1217	0.1833	0.9412	0.3126
164	144	0.1634	0.3034	0.5332	0.9623	0.3998	0.9998
165	245	0.1886	0.0765	0.7349	0.9043	0.5908	0.8835
166	248	0.4847	0.0951	0.4202	0.5852	0.9397	0.7755

167	241	0.0356	0.5275	0.4369	0.6155	6.59E-07	1.0000
168	167	0.4488	0.2571	0.2941	0.5060	0.5769	0.9997
169	295	0.5999	0.0055	0.3946	0.5166	0.9941	0.0339
170	256	0.4280	0.2051	0.3669	0.5048	0.5883	0.9997
171	267	0.2304	0.3378	0.4318	0.5850	8.03E-08	1.0000
172	293	0.3093	0.4416	0.2491	0.3272	1.95E-15	1.0000
173	284	0.1725	0.0393	0.7883	0.8804	0.3939	0.2997
174	142	0.5045	0.1571	0.3384	0.6668	0.8564	0.9990
175	100	0.4523	0.0154	0.5323	0.9481	0.5831	0.1633
176	152	0.1602	0.5669	0.2729	0.5054	4.01E-12	1.0000
177	232	0.1734	0.6255	0.2011	0.2878	4.92E-15	1.0000
178	124	0.4436	0.4604	0.0960	0.2202	3.28E-01	0.9999
179	271	0.5749	0.0987	0.3264	0.4399	0.9371	0.4157
180	112	0.0263	0.2117	0.7620	0.9687	0.0489	0.9999
181	224	0.5202	0.2858	0.1941	0.2821	0.4591	0.9998
182	259	0.3951	0.0372	0.5677	0.7777	0.966	0.3044
183	113	0.0716	0.2694	0.6590	0.9681	0.1343	0.9999
184	224	0.5946	0.2791	0.1263	0.1836	0.5336	0.9997
185	105	0.4745	0.3939	0.1316	0.3941	0.5294	0.9997
186	103	0.3935	0.5980	0.0085	0.0264	0.2247	0.9999
187	176	0.0505	0.3719	0.5777	0.9551	0.1349	0.9999
188	156	0.4899	0.0772	0.4329	0.7847	0.9358	0.4787
189	257	0.5679	0.3812	0.0509	0.0699	0.1859	0.9999
190	258	0.0011	0.3126	0.6864	0.9339	0.0022	1.0000
191	267	0.2402	0.0798	0.6800	0.8823	0.8113	0.8644
192	113	0.0362	0.1753	0.7884	0.9669	0.0679	0.9999
193	106	0.4935	0.0305	0.4759	0.9503	0.7147	0.2828
194	117	0.2316	0.1981	0.5703	0.9659	0.4497	0.9997
195	277	0.4440	0.0423	0.5137	0.6872	0.9772	0.2973
196	290	0.3427	0.5230	0.1343	0.1769	1.19E-15	1.0000
197	233	0.4353	0.1667	0.3980	0.5687	0.7338	0.9994
198	260	0.0599	0.0485	0.8917	0.8996	0.0467	0.4294
199	188	0.2896	0.3142	0.3962	0.6309	0.3373	0.9998
200	259	0.1899	0.4079	0.4022	0.5509	5.38E-08	1.0000
201	141	0.4601	0.0254	0.5145	0.9248	0.8702	0.2693
202	300	0.8020	0.1104	0.0876	0.1142	0.9863	0.2912
203	229	0.3328	0.4855	0.1817	0.2615	4.69E-14	1.0000
204	181	0.7040	0.0851	0.2110	0.3438	0.9349	0.3110
205	210	0.6945	0.1517	0.1538	0.2306	0.9041	0.6964
206	239	0.4843	0.0825	0.4332	0.6124	0.9166	0.3131
207	160	0.1898	0.0026	0.8076	0.9232	0.2293	0.0832
208	142	0.4823	0.3991	0.1186	0.2337	0.4011	0.9998
209	201	0.4513	0.0308	0.5179	0.7942	0.9736	0.2934
210	251	0.0843	0.2818	0.6339	0.8787	0.1662	0.9999

211	216	0.5235	0.0324	0.4441	0.6567	0.9803	0.2783
212	168	0.4693	0.1815	0.3492	0.5982	0.7892	0.9988
213	213	0.5659	0.3184	0.1157	0.1722	0.4569	0.9997
214	165	0.4882	0.4008	0.1110	0.1926	0.3278	0.9998
215	116	0.2253	0.4266	0.3481	0.8766	0.3789	0.9999
216	129	0.6046	0.3037	0.0917	0.2002	0.6586	0.9994
217	266	0.4278	0.3748	0.1974	0.2678	0.0713	0.9999
218	232	0.5572	0.1823	0.2606	0.3730	0.7987	0.9987
219	245	0.1575	0.4781	0.3644	0.5099	5.70E-15	1.0000
220	124	0.2203	0.2029	0.5768	0.9518	0.4528	0.9999
221	171	0.3995	0.2680	0.3325	0.5626	0.5502	0.9996
222	247	0.3275	0.4540	0.2185	0.3048	9.44E-08	1.0000
223	257	0.2070	0.3350	0.4580	0.6292	0.0096	0.9999
224	136	0.6080	0.1800	0.2120	0.4364	0.8701	0.9976
225	176	0.6726	0.2740	0.0534	0.0886	0.6713	0.9994
226	150	0.0493	0.2395	0.7112	0.9464	0.1194	0.9999
227	168	0.1371	0.0272	0.8356	0.9228	0.1538	0.2941
228	162	0.8367	0.1394	0.0238	0.0418	0.9116	0.3136
229	239	0.1190	0.1360	0.7450	0.8987	0.3644	0.9996
230	277	0.2255	0.1357	0.6387	0.8542	0.7575	0.9988
231	212	0.7322	0.2214	0.0464	0.0692	0.8181	0.9982
232	194	0.4510	0.4426	0.1064	0.1663	0.1249	0.9999
233	121	0.7020	0.1268	0.1712	0.4057	0.8928	0.3141
234	185	0.4248	0.4567	0.1185	0.1905	0.1082	0.9999
235	205	0.3451	0.1990	0.4559	0.6919	0.6485	0.9993
236	281	0.6536	0.0841	0.2623	0.3492	0.9651	0.3026
237	103	0.2010	0.1560	0.6430	0.9507	0.3438	0.9994
238	238	0.4190	0.1071	0.4738	0.671	0.8928	0.6648
239	230	0.4765	0.1256	0.3979	0.5717	0.8924	0.8258
240	213	0.5626	0.1933	0.2441	0.3634	0.7837	0.9986
241	133	0.8605	0.0211	0.1185	0.2499	0.9908	0.1716
242	182	0.3900	0.1130	0.4970	0.807	0.8923	0.7857
243	278	0.3183	0.2047	0.4770	0.6373	0.5274	0.9996
244	233	0.0658	0.2569	0.6773	0.9079	0.1894	0.9999
245	116	0.3060	0.4219	0.2722	0.6854	0.4129	0.9997
246	221	0.3722	0.4319	0.1959	0.2866	1.02E-07	1.0000
247	187	0.3408	0.2905	0.3688	0.589	0.4372	0.9997
248	198	0.3761	0.0028	0.6211	0.8853	0.8362	0.0543
249	254	0.3981	0.2644	0.3375	0.4657	0.4225	0.9997
250	115	0.2047	0.0464	0.7489	0.9259	0.2345	0.3067
251	109	0.2480	0.5915	0.1605	0.4478	0.1732	0.9999
252	291	0.8047	0.0930	0.1023	0.1346	0.9817	0.2710
253	196	0.3585	0.0196	0.6220	0.8887	0.8226	0.2469
254	286	0.5065	0.3470	0.1465	0.1939	0.2173	0.9999

255	206	0.6564	0.1664	0.1772	0.2682	0.8867	0.8370
256	253	0.4346	0.2701	0.2953	0.4081	0.4402	0.9997
257	209	0.2501	0.2783	0.4716	0.7087	0.3671	0.9998
258	281	0.6822	0.3116	0.0062	0.0082	0.5218	0.9996
259	152	0.1863	0.0166	0.7971	0.9162	0.2256	0.2363
260	115	0.2713	0.5306	0.1981	0.5055	0.2349	0.9999
261	286	0.3871	0.1588	0.4541	0.601	0.7532	0.9988
262	209	0.1674	0.2297	0.6029	0.9061	0.5087	0.9996
263	197	0.2676	0.1939	0.5385	0.8349	0.6519	0.9993
264	146	0.0949	0.3176	0.5875	0.9383	0.2262	0.9998
265	272	0.5337	0.3092	0.1571	0.2114	0.3916	0.9997
266	139	0.0962	0.2724	0.6314	0.9402	0.2198	0.9998
267	226	0.1820	0.3873	0.4308	0.6238	5.18E-08	1.0000
268	115	0.1177	0.4590	0.4233	0.9452	0.2247	0.9999
269	280	0.3984	0.0269	0.5747	0.766	0.9862	0.2351
270	187	0.1270	0.1144	0.7586	0.969	0.3559	0.9999
271	219	0.1230	0.3600	0.5170	0.7595	5.96E-08	1.0000
272	240	0.7187	0.1036	0.1777	0.2507	0.9862	0.8750
273	145	0.0352	0.2233	0.7414	0.9894	0.083	0.9999
274	111	0.0669	0.4028	0.5303	0.9914	0.1233	0.9999
275	151	0.1678	0.1419	0.6903	0.9838	0.4119	0.9998
276	231	0.6473	0.1854	0.1672	0.2398	0.7608	0.9998
277	143	0.1273	0.2574	0.6153	0.9882	0.2984	0.9999
278	149	0.4448	0.0053	0.5499	0.9701	0.9105	0.0807
279	176	0.2760	0.6081	0.1159	0.1923	6.23E-08	1.0000
280	260	0.2233	0.2535	0.5232	0.7157	0.2151	0.9999
281	157	0.4546	0.1152	0.4302	0.7758	0.8833	0.9996
282	230	0.2656	0.6061	0.1283	0.1843	1.00E-14	1.0000
283	147	0.0789	0.1198	0.8013	0.9818	0.1883	0.9999
284	201	0.2758	0.2774	0.4468	0.6852	0.3305	0.9999
285	232	0.1853	0.5939	0.2208	0.3169	4.85E-08	1.0000
286	161	0.2293	0.1988	0.5719	0.9713	0.5934	0.9998
287	236	0.3009	0.4306	0.2685	0.3815	1.60E-07	1.0000
288	247	0.1658	0.5640	0.2702	0.3769	3.67E-15	1.0000
289	274	0.0290	0.1108	0.8603	0.9307	0.0625	0.9999
290	190	0.8635	0.0582	0.0783	0.1239	0.9828	0.3000
291	249	0.2907	0.1678	0.5414	0.7529	0.5914	0.9998
292	123	0.1978	0.3070	0.4952	0.983	0.4034	0.9999
293	239	0.0839	0.3281	0.5880	0.8312	1.38E-14	1.0000
294	292	0.3607	0.1950	0.4443	0.5842	0.5126	0.9998
295	207	0.3290	0.4826	0.1883	0.2844	6.57E-08	1.0000
296	282	0.4921	0.0136	0.4943	0.6573	0.996	0.0772
297	162	0.6458	0.1373	0.2168	0.3815	0.8965	0.9993
298	142	0.6390	0.0739	0.2872	0.5658	0.9681	0.5945

299	275	0.6853	0.2747	0.0399	0.0535	0.5573	0.9998
300	229	0.1892	0.2103	0.6006	0.8646	0.4366	0.9999
301	103	0.1166	0.4400	0.4434	0.9829	0.1995	0.9999
302	291	0.2259	0.2986	0.4754	0.6258	0.0002	1.0000
303	200	0.0324	0.5439	0.4237	0.6515	3.39E-10	1.0000
304	253	0.0619	0.3320	0.6062	0.8377	4.36E-15	1.0000
305	162	0.1357	0.5244	0.3399	0.5981	1.84E-12	1.0000
306	288	0.0334	0.2734	0.6931	0.9154	0.0524	0.9999
307	176	0.2948	0.2689	0.4363	0.724	0.4415	0.9999
308	289	0.2730	0.0255	0.7015	0.8717	0.7939	0.2466
309	208	0.1188	0.2864	0.5949	0.8961	0.2336	0.9999
310	284	0.3268	0.2942	0.3791	0.5029	0.1409	0.9999
311	196	0.1966	0.6121	0.1912	0.2973	1.77E-08	1.0000
312	132	0.6043	0.1541	0.2415	0.5137	0.8781	0.9993
313	191	0.1834	0.5946	0.2220	0.3502	1.77E-07	1.0000
314	111	0.5494	0.1860	0.2646	0.7153	0.8437	0.9994
315	144	0.7290	0.0774	0.1936	0.3764	0.9615	0.4574
316	285	0.2003	0.3621	0.4376	0.5799	9.04E-07	1.0000
317	188	0.2193	0.5974	0.1833	0.2918	1.38E-13	1.0000
318	136	0.6698	0.3056	0.0247	0.0508	0.6154	0.9998
319	101	0.5875	0.3323	0.0801	0.2604	0.645	0.9997
320	124	0.4311	0.5629	0.0060	0.0137	0.1465	0.9999
321	168	0.2805	0.3081	0.4114	0.7048	0.3689	0.9999
322	207	0.3058	0.2194	0.4748	0.717	0.5078	0.9998
323	149	0.3735	0.0256	0.6009	0.9625	0.7565	0.2979
324	138	0.4675	0.4622	0.0702	0.1423	0.2556	0.9999
325	120	0.3394	0.0220	0.6386	0.9726	0.5235	0.2598
326	223	0.2055	0.6450	0.1495	0.2178	5.67E-14	1.0000
327	153	0.2183	0.3691	0.4126	0.76	0.2711	0.9999
328	247	0.2785	0.4218	0.2997	0.418	4.77E-08	1.0000
329	182	0.3730	0.6056	0.0215	0.0349	7.94E-12	1.0000
330	114	0.2330	0.5127	0.2543	0.6579	0.2234	0.9999
331	203	0.5092	0.3824	0.1084	0.1653	0.2282	0.9999
332	166	0.5237	0.4641	0.0122	0.0211	0.1787	0.9999
333	127	0.6100	0.0900	0.3000	0.6677	0.9603	0.7040
334	133	0.5611	0.0811	0.3578	0.7546	0.9603	0.6607
335	105	0.4125	0.2816	0.3058	0.9159	0.684	0.9997
336	146	0.2933	0.5707	0.1359	0.2608	1.00E-07	1.0000
337	264	0.1089	0.2769	0.6142	0.8355	0.077	0.9999
338	104	0.5310	0.1794	0.2896	0.8842	0.8662	0.9993
339	135	0.7154	0.0512	0.2334	0.4843	0.9692	0.3089
340	113	0.0352	0.1285	0.8363	0.9788	0.066	0.9999
341	243	0.3148	0.0477	0.6375	0.893	0.9537	0.4291
342	159	0.2529	0.5093	0.2378	0.4245	8.50E-12	1.0000

343	161	0.2638	0.5906	0.1456	0.2574	1.80E-12	1.0000
344	214	0.0119	0.2507	0.7374	0.9583	0.0297	0.9999
345	164	0.3451	0.3938	0.2611	0.4552	0.2227	0.9999
346	172	0.2105	0.4436	0.3459	0.5829	0.0073	0.9999
347	139	0.3423	0.4073	0.2504	0.5039	0.2999	0.9999
348	187	0.4071	0.1343	0.4586	0.7326	0.8193	0.9995
349	223	0.1383	0.1827	0.6791	0.9471	0.4235	0.9999
350	157	0.5240	0.1245	0.3515	0.6338	0.8753	0.9996

Realizado por: MORALES, Alejandro 2024.

ANEXO B: VARIABLES EMPLEADAS EN EL ENTRENAMIENTO Y DISEÑO DE LA RNA

Variable	Descripción
R	Matriz que contienen el flujo molar en la alimentación y las fracciones molares de benceno, isopropanol y agua en la alimentación, esta es la entrada en la RNA.
R_Norm	Matriz que contiene las entradas normalizadas para el diseño de la RNA
salidas	Matriz que contienen las fracciones molares de los productos después del proceso, en cada uno de los destilados
salidas_norm	Salidas de la RNA normalizadas para facilitar el adiestramiento de la RED
x	Variable a la que se le asigna la matriz de entradas para el diseño y adiestramiento de RNA.
t	Variable a la que se le asigna la matriz de salidas para el diseño y adiestramiento de RNA.
trainFcn	Indica la función algorítmica utilizada para el adiestramiento de la red.
hiddenLayerSize	Designa el número de neuronas en la capa oculta que serán consideradas en la estructura de la red

Realizado por: MORALES, Alejandro 2024

ANEXO C: CÓDIGO EN MATLAB PARA EL DISEÑO DE LA RNA

```
clc
clear all
%-----DISEÑO DE LA RNA-----

%Leer Tabla Desde la Hoja de Excel
Presentar=readtable('dato.xlsx','Sheet','database');

%Convertir la tabla a Matriz Numérica
Datos = table2array(Presentar);

%Parámetros de Entrada Fracciones molares (FEED)
R=Datos(1:4,:);
R_Norm = normalize(R(:,1:end),'range');

%Parámetro de Salida Fracciones Molares (D1. D2 Y D3)
salidas=Datos(5:7,:);

Fr_ben_norm = normalize(salidas(1,1:end),'range');
Fr_ben_max=max(salidas(1,:));
Fr_ben_min=min(salidas(1,:));

Fr_ipa_norm = normalize(salidas(2,1:end),'range');
Fr_ipa_max=max(salidas(2,:));
Fr_ipa_min=min(salidas(2,:));

Fr_w_norm = normalize(salidas(3,1:end),'range');
Fr_w_max=max(salidas(3,:));
Fr_w_min=min(salidas(3,:));

salidas_norm=[Fr_ben_norm;Fr_ipa_norm;Fr_w_norm];

% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 20-Feb-2024 20:01:47
%
% This script assumes these variables are defined:
%
%   R_Norm - input data.
%   salidas_norm - target data.

x = R_Norm;
t = salidas_norm;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help nntrain
% 'trainlm' is usually fastest.
```



```

% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
trainFcn = 'trainbr'; % Bayesian Regularization backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 65;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
% For a list of all processing functions type: help nnprocess
net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% For a list of all data division functions type: help nndivision
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

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

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

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

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

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

% View the Network
view(net)

```

```

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

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

PropPred = net(R_Norm(1:end,:))
Prop_Reales= salidas_norm;

FB=(PropPred(1,:)*(Fr_ben_max-Fr_ben_min))+Fr_ben_min;
FIPA=(PropPred(2,:)*(Fr_ipa_max-Fr_ipa_min))+Fr_ipa_min;
FW=(PropPred(3,:)*(Fr_w_max-Fr_w_min))+Fr_w_min;

Valor_Real=[FB; FIPA ;FW]';

%-----EJECUCIÓN RNA-----

Fr_ben_max=0.9983;
Fr_ben_min=0.0082;

Fr_ipa_max=0.9971;
Fr_ipa_min=5.2371e-16;

```

```

Fr_w_max=1;
Fr_w_min=0.0339;

load ('TESISD.mat');

Extraer=readtable('dato.xlsx','Sheet','Datos reales');
Datos = table2array(Extraer);
R=Datos(1:4,:);
R_Norm=normalize(R(:,1:end),'range');

net(R_Norm);

ans_1=ans';

i=1;
while i<26;
FB(i,1)=(ans_1(i,1)*(Fr_ben_max-Fr_ben_min))+Fr_ben_min;
FIPA(i,1)=(ans_1(i,2)*(Fr_ipa_max-Fr_ipa_min))+Fr_ipa_min;
FW(i,1)=(ans_1(i,3)*(Fr_w_max-Fr_w_min))+Fr_w_min;
i=i+1;

end

PREDICCIONES=([FB FIPA FW]);

```

Realizado por: MORALES, Alejandro 2024.

ANEXO D: RESULTADOS DEL ERROR EN LA PREDICCIÓN DE LAS SALIDAS CON DATOS DEL ENTRENAMIENTO

Predicción N°	FR_BEN			FR_IPA			FR_H2O		
	DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR
1	0.8778	0.8810	0.3617	0.0347	0.0981	182.8479	0.9999	1.0084	0.8502
2	0.9979	0.9699	2.8072	0.9967	0.9553	4.1564	0.9993	0.9356	6.3732
3	0.5027	0.5223	3.8991	0.6115	0.6735	10.1317	0.9999	1.0749	7.5028
4	0.6095	0.6630	8.7843	1.12E-13	0.0150	0.00E+00	1.0000	0.9852	1.4774
5	0.1282	0.1741	35.7635	0.3569	0.3626	1.5856	0.9999	1.0375	3.7612
6	0.5472	0.5765	5.3611	0.1191	0.2036	70.9342	0.9999	0.9954	0.4549
7	0.2682	0.2994	11.6449	1.50E-08	0.0163	0.00E+00	1.0000	0.9996	0.0381
8	0.4152	0.4401	5.9915	0.5225	0.5761	10.2503	0.9999	1.0414	4.1492
9	0.5217	0.5951	14.0714	1.54E-15	0.0328	0.00E+00	1.0000	0.9766	2.3389
10	0.7648	0.8337	9.0050	9.75E-14	0.1338	0.00E+00	1.0000	1.0154	1.5390
11	0.6843	0.7633	11.5501	0.9967	0.9321	6.4816	0.1171	0.5270	350.0837
12	0.8705	0.8062	7.3837	0.3731	0.1573	57.8394	0.9999	0.9860	1.3905
13	0.9684	0.9441	2.5137	0.2875	0.2435	15.3145	0.9999	1.0103	1.0444
14	0.9534	0.9303	2.4265	0.0565	0.1754	210.4211	0.9999	1.0209	2.0978
15	0.9983	0.9959	0.2420	0.2304	0.2149	6.7387	0.9999	0.9967	0.3196
16	0.0436	0.0618	41.6564	0.9406	0.9043	3.8585	0.9996	0.7064	29.3339
17	0.8940	0.8789	1.6862	0.2375	0.1311	44.7800	0.9999	1.0041	0.4186
18	0.4810	0.4589	4.5944	0.779	0.8712	11.8320	0.9998	0.7643	23.5550
19	0.1669	0.2187	31.0531	0.9618	0.9419	2.0707	0.9995	0.7690	23.0662
20	0.0199	0.1895	852.3692	2.77E-07	0.1076	0.00E+00	1.0000	0.9802	1.9766
21	0.2397	0.2925	22.0164	3.66E-14	0.0072	0.00E+00	1.0000	0.9984	0.1581
22	0.8218	0.8088	1.5835	0.9937	0.9071	8.7159	0.0627	0.5143	720.4952

23	0.4769	0.5261	10.3170	0.4071	0.4476	9.9518	0.9999	1.0305	3.0579
24	0.4836	0.5256	8.6797	0.1774	0.2688	51.5123	0.9999	0.9902	0.9730
25	0.1714	0.1391	18.8324	0.993	0.9956	0.2655	0.8759	0.4376	50.0401
26	0.2744	0.2179	20.5950	0.647	0.7221	11.6028	0.9998	0.9159	8.3892
27	0.5247	0.5339	1.7609	3.30E-14	0.0083	0.00E+00	1.0000	1.0421	4.2059
28	0.9222	0.9285	0.6862	0.1464	0.3263	122.8797	0.9999	0.9752	2.4709
29	0.2381	0.2954	24.0637	1.91E-08	0.0114	0.0000	1.0000	0.9991	0.0872
30	0.6888	0.7271	5.5570	0.9919	0.9596	3.2527	0.2596	0.4768	83.6644
31	0.9551	0.7925	17.0281	0.2193	0.0646	70.5641	0.9999	1.0054	0.5539
32	0.2489	0.2912	16.9869	4.65E-08	0.0294	0.0000	1.0000	0.9961	0.3931
33	0.7547	0.6935	8.1078	0.9902	1.0067	1.6620	0.2190	0.2283	4.2325
34	0.9913	0.8001	19.2859	0.5284	0.5500	4.0910	0.9999	0.9668	3.3132
35	0.9923	0.9658	2.6690	0.6192	0.5968	3.6151	0.2520	0.2587	2.6515
36	0.6698	0.6911	3.1797	0.9943	0.8478	14.7344	0.9984	0.8055	19.3210
37	0.9557	0.8654	9.4535	0.9301	0.9447	1.5672	0.9995	0.8393	16.0287
38	0.9885	0.9472	4.1768	0.6105	0.6645	8.8401	0.9998	0.6926	30.7278
39	0.9830	0.9600	2.3429	0.2732	0.1704	37.6247	0.9999	1.0001	0.0205
40	0.9401	0.9215	1.9733	0.5973	0.5460	8.5884	0.9998	0.9302	6.9657
41	0.9709	0.9265	4.5771	0.4174	0.3569	14.4849	0.2683	0.1671	37.7141
42	0.4225	0.4573	8.2256	0.0123	0.0603	390.1337	1.0000	0.9829	1.7107
43	0.3336	0.3408	2.1566	0.2082	0.2558	22.8559	0.9999	0.9779	2.2043
44	0.6429	0.5749	10.5839	0.3944	0.2892	26.6713	0.9999	1.0063	0.6384
45	0.2413	0.1548	35.8540	0.2836	0.2111	25.5769	0.9999	1.0326	3.2685
46	0.4561	0.5673	24.3704	4.69E-08	0.0644	0.0000	1.0000	0.9865	1.3487
47	0.9922	0.9220	7.0770	0.5226	0.4724	9.6085	0.6923	0.0417	93.9826
48	0.0914	0.1563	71.0132	0.3299	0.3397	2.9596	0.9999	1.0393	3.9385
49	0.0607	0.1887	210.8042	3.99E-08	0.1032	0.0000	1.0000	0.9926	0.7359

50	0.0593	0.1830	208.7687	0.2251	0.3378	50.0532	0.9999	0.9514	4.8475
51	0.6992	0.6300	9.9017	0.689	0.8487	23.1769	0.9998	0.8100	18.9843
52	0.2405	0.2884	19.9228	1.14E-07	0.0190	0.0000	1.0000	0.9952	0.4783
53	0.9922	0.9645	2.7893	0.5807	0.5986	3.0780	0.3681	0.3056	16.9831
54	0.1158	0.1546	33.5416	0.7332	0.6428	12.3266	0.9999	0.9000	9.9908
55	0.5558	0.5147	7.4012	0.7246	0.8544	17.9156	0.9999	0.8050	19.4964
56	0.5580	0.5930	6.2635	0.1312	0.2318	76.7076	0.9999	0.9998	0.0125
57	0.1874	0.1964	4.7853	0.9072	0.9392	3.5289	0.9996	0.9551	4.4495
58	0.9918	1.0010	0.9326	0.1233	0.0688	44.1625	0.9999	0.8919	10.8029
59	0.9643	0.9436	2.1459	0.9234	0.8688	5.9090	0.7021	0.3386	51.7695
60	0.2026	0.3268	61.3091	0.9971	0.9428	5.4439	0.1258	0.4984	296.1916
61	0.0198	0.1213	512.3797	0.8763	0.7578	13.5174	0.9999	0.8874	11.2509
62	0.0585	0.1469	151.0585	0.9859	0.9067	8.0304	0.6794	0.9563	40.7577
63	0.0323	0.0702	0.0000	0.9859	0.9490	3.7449	0.7417	0.6146	17.1297
64	0.6889	0.7173	4.1254	0.5561	0.5941	6.8386	0.9999	1.0166	1.6684
65	0.2803	0.3265	16.4708	0.9458	0.9521	0.6654	0.9994	0.9071	9.2323
66	0.2572	0.1868	27.3877	0.4798	0.4907	2.2690	0.9999	1.0141	1.4196
67	0.2578	0.3082	19.5491	0.9637	0.9574	0.6551	0.9993	0.8522	14.7248
68	0.4812	0.5196	7.9784	0.0843	0.1882	123.2821	0.9999	0.9766	2.3294
69	0.5743	0.5752	0.1630	0.9857	0.9311	5.5409	0.9416	0.5241	44.3420
70	0.4030	0.4300	6.7083	0.9858	0.9295	5.7157	0.5919	0.6123	3.4457
71	0.1477	0.2163	46.4426	1.37E-12	0.1810	1.32E+13	1.0000	1.0159	1.5904
72	0.7160	0.7458	4.1653	0.1712	0.2955	72.5944	0.9999	0.9840	1.5880
73	0.1011	0.2795	176.4235	2.19E-08	0.1241	0.0000	1.0000	0.9757	2.4326
74	0.1415	0.1142	19.2921	0.6383	0.7418	16.2120	0.9998	0.9362	6.3609
75	0.8602	0.8643	0.4723	0.389	0.3801	2.2951	0.9999	0.9494	5.0469
76	0.1838	0.1634	11.0948	0.5554	0.5511	0.7757	0.9999	0.9730	2.6854

77	0.9426	0.9610	1.9543	0.5462	0.4973	8.9528	0.9997	0.7241	27.5667
78	0.6298	0.6748	7.1472	0.986	0.9357	5.1013	0.4290	0.6036	40.6900
79	0.2279	0.1226	46.2250	0.6508	0.7743	18.9782	0.9998	0.9428	5.7054
80	0.2700	0.2823	4.5674	1.43E-14	0.0210	0.0000	1.0000	0.9959	0.4090
81	0.9650	0.9456	2.0142	0.258	0.2183	15.4013	0.9999	1.0197	1.9769
82	0.9427	0.9351	0.8101	0.2044	0.2636	28.9512	0.9999	1.0007	0.0775
83	0.0498	0.2285	358.7916	2.86E-08	0.1294	0.0000	1.0000	0.9708	2.9230
84	0.1246	0.1360	9.1536	0.2675	0.2971	11.0642	0.9999	0.9956	0.4349
85	0.2367	0.2452	3.5714	0.8905	0.9262	4.0106	0.9996	0.7142	28.5510
86	0.1286	0.1125	12.5554	0.6313	0.6946	10.0240	0.9998	0.8884	11.1450
87	0.9672	0.9490	1.8824	0.3647	0.2741	24.8468	0.9999	0.9897	1.0153
88	0.9865	0.9695	1.7187	0.2877	0.1594	44.5922	0.9999	1.0089	0.8976
89	0.9364	0.9339	0.2680	0.2203	0.3605	63.6255	0.0500	0.3753	650.5468
90	0.6128	0.6398	4.4019	0.4357	0.4939	13.3543	0.9999	1.0345	3.4630
91	0.5087	0.3358	33.9974	0.2639	0.1270	51.8746	0.9999	0.9903	0.9623
92	0.1384	0.1923	38.9330	6.32E-08	0.1260	0.0000	1.0000	0.9824	1.7558
93	0.5797	0.7062	21.8240	2.41E-12	0.0465	0.0000	1.0000	1.0068	0.6792
94	0.9514	0.9565	0.5365	0.355	0.2648	25.4054	0.9998	0.8694	13.0401
95	0.3620	0.3924	8.3915	0.4515	0.4793	6.1668	0.9999	0.9649	3.5047
96	0.9444	0.7883	16.5299	0.9285	0.9350	0.7042	0.9994	0.4784	52.1328
97	0.0678	0.1738	156.3581	0.977	0.8950	8.3957	0.4765	0.8960	88.0431
98	0.9503	0.9488	0.1555	0.1359	0.1338	1.5666	0.9999	0.9317	6.8245
99	0.1658	0.0871	47.4725	0.944	0.9582	1.5085	0.9999	0.6200	37.9939
100	0.7637	0.7262	4.9055	0.0651	0.0733	12.6094	0.9999	1.0123	1.2405
101	0.7223	0.6835	5.3673	0.015	0.0190	26.5780	0.9999	0.9959	0.4042
102	0.6660	0.6931	4.0716	0.5294	0.5893	11.3169	0.9998	1.0279	2.8149
103	0.1802	0.2337	29.6640	7.17E-08	0.0619	0.0000	1.0000	0.9891	1.0949

104	0.7158	0.7530	5.2020	0.0831	0.2112	154.1610	0.9999	0.9922	0.7652
105	0.1587	0.1442	9.1556	0.3904	0.3823	2.0852	0.9999	1.0248	2.4913
106	0.3771	0.1934	48.7231	0.4379	0.3398	22.4007	0.9999	1.0353	3.5453
107	0.5947	0.5656	4.8893	0.0656	0.1049	59.8625	0.9999	1.0070	0.7144
108	0.7831	0.8198	4.6910	0.9935	0.9618	3.1942	0.1893	0.4180	120.8046
109	0.1836	0.1743	5.0464	0.1413	0.1656	17.2216	0.9999	1.0427	4.2796
110	0.6377	0.6949	8.9713	2.43E-08	0.0307	0.0000	1.0000	1.0026	0.2646
111	0.5878	0.4846	17.5547	0.2139	0.0053	97.5369	0.9999	1.0371	3.7199
112	0.0640	0.0718	12.1832	0.9754	0.9398	3.6499	0.7066	0.5664	19.8371
113	0.0946	0.1437	51.9021	0.4797	0.4332	9.6993	0.9999	1.0075	0.7555
114	0.9816	0.9866	0.5083	0.0539	0.0960	78.1278	0.9998	1.0393	3.9489
115	0.4556	0.4522	0.7548	0.2068	0.1970	4.7201	0.9999	0.9496	5.0325
116	0.3542	0.1418	59.9594	0.6051	0.6331	4.6237	0.9998	1.0766	7.6845
117	0.9533	0.9568	0.3702	0.0298	0.1803	504.9470	0.9999	0.9928	0.7090
118	0.7807	0.7883	0.9685	4.31E-09	0.0499	0.0000	1.0000	1.0024	0.2373
119	0.5783	0.3107	46.2750	0.4574	0.1934	57.7196	0.9999	0.9917	0.8238
120	0.0289	0.1571	443.6415	0.1436	0.2788	94.1322	0.9999	0.9952	0.4723
121	0.2695	0.3235	20.0413	0.9738	0.9206	5.4671	0.3232	0.6832	111.3723
122	0.8045	0.8186	1.7553	0.3886	0.4082	5.0316	0.9999	0.9482	5.1737
123	0.4508	0.4470	0.8519	5.65E-08	-0.0202	0.0000	1.0000	1.0338	3.3763
124	0.9356	0.9093	2.8085	0.3843	0.3110	19.0731	0.9999	0.9753	2.4615
125	0.2973	0.2047	31.1460	0.3559	0.3049	14.3187	0.9999	1.0312	3.1297
126	0.9585	0.9571	0.1479	0.2736	0.2864	4.6751	0.9998	0.9270	7.2818
127	0.7801	0.8090	3.7033	2.45E-15	0.0610	0.0000	1.0000	0.9913	0.8724
128	0.9728	0.9878	1.5413	0.1385	0.0827	40.2846	0.8961	0.8395	6.3113
129	0.9785	0.9920	1.3808	0.0899	0.1287	43.1551	0.5415	0.6493	19.9077
130	0.7177	0.6292	12.3253	0.1551	0.0736	52.5712	0.9999	1.0025	0.2620

131	0.3585	0.3297	8.0378	1.99E-14	-0.0093	0.0000	1.0000	1.0038	0.3848
132	0.7774	0.7883	1.4045	0.9653	0.9628	0.2588	0.5222	0.4395	15.8376
133	0.3431	0.3779	10.1561	0.1168	0.2020	72.9180	0.9999	0.9724	2.7547
134	0.8126	0.8353	2.7921	0.0538	0.2043	279.7655	0.9999	0.9819	1.8014
135	0.9748	0.9462	2.9303	0.8939	0.9063	1.3865	0.3538	0.2757	22.0734
136	0.8213	0.8347	1.6306	5.24E-16	0.0639	0.0000	1.0000	0.9969	0.3110
137	0.9380	0.9550	1.8072	0.4792	0.4473	6.6596	0.7123	0.6187	13.1350
138	0.4322	0.5106	18.1321	0.9906	0.9860	0.4649	0.1455	0.1966	35.1540
139	0.9032	0.8290	8.2134	0.6098	0.6045	0.8687	0.9997	0.9611	3.8656
140	0.9594	0.9645	0.5299	0.0353	0.1066	201.8737	0.9999	0.9923	0.7649
141	0.2031	0.2200	8.3383	0.0652	0.1596	144.7457	0.9999	1.0116	1.1744
142	0.3907	0.3658	6.3641	0.9062	0.9399	3.7223	0.9990	0.8555	14.3667
143	0.4678	0.5133	9.7184	0.4997	0.5026	0.5829	0.9998	1.0435	4.3727
144	0.3228	0.3385	4.8748	0.2545	0.2785	9.4179	0.9999	0.9766	2.3293
145	0.8956	0.8887	0.7753	0.3394	0.3637	7.1644	0.9999	0.9550	4.4918
146	0.6664	0.6972	4.6148	4.46E-08	0.0076	0.0000	1.0000	0.9774	2.2615
147	0.1229	0.2574	109.4323	8.88E-15	0.0816	0.0000	1.0000	0.9850	1.4964
148	0.8772	0.8707	0.7398	0.5809	0.5385	7.3043	0.9998	0.9324	6.7412
149	0.5891	0.5920	0.4937	0.9895	0.9617	2.8081	0.2408	0.2139	11.1644
150	0.9712	1.0176	4.7788	0.1319	0.2031	54.0149	0.9999	0.9641	3.5769
151	0.4901	0.5104	4.1401	0.9307	0.9343	0.3914	0.9987	0.8496	14.9274
152	0.9333	0.9105	2.4384	0.2238	0.1653	26.1451	0.9999	1.0131	1.3219
153	0.5370	0.4212	21.5698	0.2371	0.1402	40.8790	0.9999	1.0124	1.2452
154	0.5975	0.6748	12.9455	0.9952	0.9288	6.6711	0.0348	0.6353	1725.6784
155	0.6067	0.6236	2.7806	0.2865	0.2827	1.3299	0.9999	1.0041	0.4196
156	0.9582	0.9010	5.9691	0.7742	0.8225	6.2339	0.9994	0.5128	48.6902
157	0.0208	0.0431	0.0000	0.8054	0.8083	0.3589	0.9994	1.0121	1.2669

158	0.9380	0.9293	0.9243	0.0086	0.1493	1635.9781	0.9999	1.0219	2.2026
159	0.7042	0.6738	4.3227	0.7252	0.8349	15.1285	0.9996	0.8439	15.5803
160	0.9465	0.9254	2.2243	0.0813	0.1611	98.1672	0.2095	0.3038	45.0035
161	0.9458	0.9450	0.0804	0.3648	0.2764	24.2260	0.9998	0.9945	0.5330
162	0.6471	0.2262	65.0398	0.4382	0.0943	78.4718	0.9998	0.9757	2.4125
163	0.1833	0.2472	34.8707	0.9412	0.9531	1.2590	0.3126	0.8988	187.5170
164	0.9623	0.9142	5.0017	0.3998	0.1468	63.2833	0.9998	1.0170	1.7198
165	0.9043	0.9527	5.3570	0.5908	0.5897	0.1926	0.8835	0.8862	0.3070
166	0.5852	0.5886	0.5861	0.9397	0.9011	4.1105	0.7755	0.6361	17.9707
167	0.6155	0.6814	10.7092	6.59E-07	0.0071	0.0000	1.0000	0.9804	1.9591
168	0.5060	0.3988	21.1829	0.5769	0.5992	3.8675	0.9997	1.0274	2.7676
169	0.5166	0.5433	5.1706	0.9941	0.9579	3.6387	0.0339	0.4588	1253.4402
170	0.5048	0.5366	6.2898	0.5883	0.5851	0.5447	0.9997	1.0696	6.9887
171	0.5850	0.6175	5.5523	8.03E-08	0.1009	0.0000	1.0000	1.0324	3.2394
172	0.3272	0.3611	10.3570	1.95E-15	0.0073	0.0000	1.0000	0.9987	0.1348
173	0.8804	0.9494	7.8341	0.3939	0.6049	53.5632	0.2997	0.8877	196.2084
174	0.6668	0.5463	18.0721	0.8564	0.9407	9.8482	0.9990	0.6708	32.8568
175	0.9481	0.9372	1.1466	0.5831	0.5767	1.0993	0.1633	0.1413	13.4964
176	0.5054	0.5664	12.0692	4.01E-12	0.0870	0.0000	1.0000	0.9982	0.1784
177	0.2878	0.3499	21.5827	4.92E-15	0.0479	0.0000	1.0000	1.0022	0.2232
178	0.2202	0.2068	6.0749	3.28E-01	0.2732	16.6406	0.9999	1.0377	3.7783
179	0.4399	0.4622	5.0646	0.9371	0.8773	6.3854	0.4157	0.7453	79.2781
180	0.9687	0.9516	1.7650	0.0489	0.0766	56.5971	0.9999	1.0217	2.1780
181	0.2821	0.2373	15.8645	0.4591	0.4202	8.4746	0.9998	1.0167	1.6943
182	0.7777	0.7741	0.4619	0.966	0.9519	1.4562	0.3044	0.3648	19.8331
183	0.9681	0.9747	0.6825	0.1343	0.1118	16.7449	0.9999	1.0052	0.5313
184	0.1836	0.1379	24.9030	0.5336	0.4962	7.0123	0.9997	0.9712	2.8508

185	0.3941	0.2938	25.4560	0.5294	0.4243	19.8438	0.9997	0.9670	3.2749
186	0.0264	-0.0060	0.0000	0.2247	0.1905	15.2187	0.9999	0.9843	1.5597
187	0.9551	0.9481	0.7349	0.1349	0.1294	4.0705	0.9999	0.9974	0.2480
188	0.7847	0.7747	1.2729	0.9358	0.9414	0.6028	0.4787	0.5072	5.9573
189	0.0699	0.1358	94.2103	0.1859	0.2414	29.8285	0.9999	1.0409	4.0971
190	0.9339	0.9163	1.8873	0.0022	0.1129	5029.7755	1.0000	1.0174	1.7383
191	0.8823	0.9047	2.5427	0.8113	0.7106	12.4138	0.8644	0.8895	2.9050
192	0.9669	0.9606	0.6487	0.0679	0.0388	42.8035	0.9999	1.0171	1.7252
193	0.9503	1.0416	9.6098	0.7147	0.7746	8.3748	0.2828	0.3640	28.6957
194	0.9659	0.9635	0.2472	0.4497	0.3822	15.0029	0.9997	0.8883	11.1473
195	0.6872	0.6923	0.7459	0.9772	0.9325	4.5784	0.2973	0.5018	68.7871
196	0.1769	0.2589	46.3385	1.19E-15	0.0389	0.0000	1.0000	0.9935	0.6457
197	0.5687	0.5841	2.7042	0.7338	0.7396	0.7898	0.9994	1.0307	3.1309
198	0.8996	0.9547	6.1295	0.0467	0.2593	455.2928	0.4294	0.9272	115.9340
199	0.6309	0.6027	4.4662	0.3373	0.1700	49.5995	0.9998	1.0164	1.6604
200	0.5509	0.5831	5.8442	5.38E-08	0.0219	0.0000	1.0000	1.0282	2.8225
201	0.9248	0.9570	3.4857	0.8702	0.8869	1.9139	0.2693	0.2721	1.0444
202	0.1142	0.2064	80.7339	0.9863	0.8910	9.6614	0.2912	0.7442	155.5522
203	0.2615	0.2643	1.0665	4.69E-14	0.0335	0.0000	1.0000	0.9945	0.5473
204	0.3438	0.4393	27.7701	0.9349	0.9343	0.0669	0.3110	0.7717	148.1411
205	0.2306	0.2289	0.7386	0.9041	0.9508	5.1686	0.6964	0.7592	9.0126
206	0.6124	0.6063	0.9921	0.9166	0.9431	2.8947	0.3131	0.4706	50.2876
207	0.9232	0.9155	0.8288	0.2293	0.2322	1.2434	0.0832	0.1955	134.9251
208	0.2337	0.1790	23.4107	0.4011	0.2849	28.9762	0.9998	0.9886	1.1240
209	0.7942	0.8106	2.0635	0.9736	0.9783	0.4832	0.2934	0.3276	11.6550
210	0.8787	0.8782	0.0536	0.1662	0.1693	1.8823	0.9999	0.9977	0.2210
211	0.6567	0.6850	4.3036	0.9803	0.9622	1.8495	0.2783	0.4681	68.1980

212	0.5982	0.5016	16.1420	0.7892	0.8885	12.5777	0.9988	0.6989	30.0265
213	0.1722	0.1274	26.0180	0.4569	0.3819	16.4148	0.9997	1.0045	0.4754
214	0.1926	0.1506	21.7885	0.3278	0.2324	29.1034	0.9998	1.0257	2.5865
215	0.8766	0.5745	34.4591	0.3789	0.0360	90.5108	0.9999	0.9798	2.0145
216	0.2002	0.1772	11.4735	0.6586	0.6550	0.5507	0.9994	1.0349	3.5570
217	0.2678	0.2961	10.5694	0.0713	0.1448	103.0677	0.9999	0.9968	0.3097
218	0.3730	0.3662	1.8227	0.7987	0.7621	4.5776	0.9987	0.9785	2.0194
219	0.5099	0.5438	6.6435	5.70E-15	0.0169	0.0000	1.0000	1.0041	0.4076
220	0.9518	0.9605	0.9172	0.4528	0.3687	18.5706	0.9999	0.9315	6.8393
221	0.5626	0.4894	13.0114	0.5502	0.4981	9.4725	0.9996	1.0343	3.4755
222	0.3048	0.3079	1.0278	9.44E-08	0.0172	0.0000	1.0000	1.0001	0.0113
223	0.6292	0.6653	5.7319	0.0096	0.1151	1098.5508	0.9999	1.0209	2.0976
224	0.4364	0.2929	32.8923	0.8701	0.9504	9.2237	0.9976	0.9151	8.2706
225	0.0886	0.1436	62.0307	0.6713	0.6731	0.2643	0.9994	1.1230	12.3680
226	0.9464	0.9840	3.9755	0.1194	0.1694	41.8810	0.9999	0.9990	0.0901
227	0.9228	0.9153	0.8141	0.1538	0.1937	25.9626	0.2941	0.1994	32.1990
228	0.0418	0.0508	0.0000	0.9116	0.9204	0.9652	0.3136	0.7248	131.1246
229	0.8987	0.9471	5.3815	0.3644	0.3959	8.6322	0.9996	0.9358	6.3811
230	0.8542	0.8563	0.2460	0.7575	0.6189	18.3034	0.9988	0.9516	4.7267
231	0.0692	0.1174	69.6729	0.8181	0.7543	7.8043	0.9982	1.0674	6.9315
232	0.1663	0.1589	4.4308	0.1249	0.1398	11.9201	0.9999	1.0109	1.1006
233	0.4057	0.2325	42.6962	0.8928	0.9647	8.0564	0.3141	0.3520	12.0590
234	0.1905	0.1711	10.1983	0.1082	0.1229	13.6253	0.9999	0.9941	0.5794
235	0.6919	0.6984	0.9428	0.6485	0.6627	2.1846	0.9993	1.0279	2.8650
236	0.3492	0.3883	11.1952	0.9651	0.9125	5.4509	0.3026	0.6723	122.1854
237	0.9507	0.9259	2.6052	0.3438	0.1587	53.8334	0.9994	0.3340	66.5835
238	0.671	0.6814	1.5523	0.8928	0.8760	1.8767	0.6648	0.7181	8.0212

239	0.5717	0.5690	0.4687	0.8924	0.8710	2.4005	0.8258	0.7447	9.8169
240	0.3634	0.3255	10.4366	0.7837	0.7809	0.3557	0.9986	0.9362	6.2513
241	0.2499	0.3441	37.7140	0.9908	0.9884	0.2444	0.1716	0.2638	53.7326
242	0.807	0.7682	4.8106	0.8923	0.9800	9.8314	0.7857	0.2458	68.7104
243	0.6373	0.6692	5.0070	0.5274	0.4973	5.7051	0.9996	1.0244	2.4819
244	0.9079	0.9242	1.7962	0.1894	0.1874	1.0823	0.9999	1.0163	1.6403
245	0.6854	0.2908	57.5742	0.4129	0.0038	99.0695	0.9997	0.9970	0.2716
246	0.2866	0.2667	6.9522	1.02E-07	0.0582	0.0000	1.0000	0.9972	0.2799
247	0.589	0.5577	5.3127	0.4372	0.3115	28.7412	0.9997	1.0073	0.7572
248	0.8853	0.9334	5.4277	0.8362	0.8833	5.6331	0.0543	0.3023	456.6803
249	0.4657	0.4981	6.9500	0.4225	0.3872	8.3542	0.9997	1.0032	0.3467
250	0.9259	0.8916	3.7019	0.2345	0.1723	26.5135	0.3067	0.0938	69.4040
251	0.4478	0.4430	1.0722	0.1732	0.1737	0.3092	0.9999	1.0013	0.1449
252	0.1346	0.2322	72.4984	0.9817	0.9354	4.7140	0.2710	0.7265	168.0731
253	0.8887	0.9249	4.0731	0.8226	0.8856	7.6586	0.2469	0.2302	6.7810
254	0.1939	0.2390	23.2704	0.2173	0.2309	6.2633	0.9999	1.0136	1.3685
255	0.2682	0.2368	11.7165	0.8867	0.9262	4.4591	0.8370	0.7199	13.9861
256	0.4081	0.4351	6.6133	0.4402	0.3989	9.3927	0.9997	0.9657	3.3984
257	0.7087	0.7206	1.6844	0.3671	0.2853	22.2768	0.9998	0.9907	0.9108
258	0.0082	0.1146	1297.1652	0.5218	0.4366	16.3215	0.9996	0.9353	6.4289
259	0.9162	0.9150	0.1349	0.2256	0.2113	6.3282	0.2363	0.2017	14.6596
260	0.5055	0.3990	21.0646	0.2349	0.1161	50.5651	0.9999	1.0181	1.8222
261	0.601	0.6372	6.0290	0.7532	0.6437	14.5394	0.9988	1.0551	5.6381
262	0.9061	0.8955	1.1726	0.5087	0.3594	29.3584	0.9996	0.9572	4.2397
263	0.8349	0.8403	0.6480	0.6519	0.6318	3.0874	0.9993	0.9590	4.0370
264	0.9383	0.9942	5.9594	0.2262	0.1952	13.7074	0.9998	0.9991	0.0723
265	0.2114	0.2330	10.2108	0.3916	0.3242	17.2218	0.9997	1.0197	2.0045

266	0.9402	0.9946	5.7853	0.2198	0.2126	3.2940	0.9998	0.9963	0.3454
267	0.6238	0.6523	4.5721	5.18E-08	0.0469	0.0000	1.0000	1.0078	0.7774
268	0.9452	0.8452	10.5821	0.2247	0.1226	45.4239	0.9999	1.0100	1.0143
269	0.766	0.7647	0.1752	0.9862	0.9328	5.4121	0.2351	0.4620	96.5230
270	0.969	0.9525	1.7006	0.3559	0.2092	41.2256	0.9999	0.9160	8.3868
271	0.7595	0.7898	3.9892	5.96E-08	0.0643	0.0000	1.0000	0.9883	1.1661
272	0.2507	0.3064	22.2005	0.9862	0.9556	3.1064	0.8750	0.7475	14.5763
273	0.9894	0.9783	1.1236	0.083	0.1314	58.2555	0.9999	1.0313	3.1386
274	0.9914	1.0253	3.4156	0.1233	0.1053	14.6261	0.9999	0.9677	3.2206
275	0.9838	0.9518	3.2521	0.4119	0.2018	51.0126	0.9998	0.8637	13.6159
276	0.2398	0.2182	9.0184	0.7608	0.8075	6.1317	0.9998	0.8336	16.6272
277	0.9882	0.9712	1.7196	0.2984	0.2047	31.4052	0.9999	1.0220	2.2138
278	0.9701	0.9657	0.4567	0.9105	0.8488	6.7735	0.0807	0.2564	217.6835
279	0.1923	0.3497	81.8477	6.23E-08	0.1118	0.0000	1.0000	1.0051	0.5050
280	0.7157	0.7436	3.9046	0.2151	0.3182	47.9278	0.9999	0.9805	1.9389
281	0.7758	0.7100	8.4856	0.8833	0.9759	10.4864	0.9996	0.3915	60.8331
282	0.1843	0.2945	59.7816	1.00E-14	0.0655	0.0000	1.0000	1.0000	0.0022
283	0.9818	0.9874	0.5683	0.1883	0.0775	58.8576	0.9999	0.9225	7.7446
284	0.6852	0.6833	0.2815	0.3305	0.2997	9.3309	0.9999	0.9908	0.9129
285	0.3169	0.3472	9.5526	4.85E-08	0.0317	0.0000	1.0000	1.0036	0.3608
286	0.9713	0.9309	4.1556	0.5934	0.5497	7.3561	0.9998	0.9334	6.6407
287	0.3815	0.3608	5.4242	1.60E-07	-0.0074	0.0000	1.0000	0.9993	0.0746
288	0.3769	0.4183	10.9938	3.67E-15	0.0254	0.0000	1.0000	1.0095	0.9461
289	0.9307	0.9516	2.2466	0.0625	0.2693	330.8136	0.9999	0.9803	1.9614
290	0.1239	0.1565	26.3298	0.9828	0.9703	1.2705	0.3000	0.3906	30.1879
291	0.7529	0.7782	3.3643	0.5914	0.6396	8.1551	0.9998	0.9888	1.1040
292	0.983	0.9007	8.3717	0.4034	0.1549	61.6053	0.9999	1.0100	1.0138

293	0.8312	0.8493	2.1749	1.38E-14	0.0955	0.0000	1.0000	0.9982	0.1795
294	0.5842	0.6226	6.5793	0.5126	0.5261	2.6367	0.9998	1.0458	4.5982
295	0.2844	0.2599	8.6107	6.57E-08	0.0366	0.0000	1.0000	0.9931	0.6866
296	0.6573	0.6580	0.1136	0.996	0.9715	2.4575	0.0772	0.3469	349.4011
297	0.3815	0.3792	0.6142	0.8965	0.9414	5.0127	0.9993	0.9100	8.9337
298	0.5658	0.7815	38.1276	0.9681	0.9407	2.8346	0.5945	0.7621	28.1951
299	0.0535	0.1141	113.3146	0.5573	0.5132	7.9072	0.9998	0.9142	8.5578
300	0.8646	0.8701	0.6380	0.4366	0.4444	1.7895	0.9999	0.9327	6.7204
301	0.9829	0.9213	6.2691	0.1995	0.1892	5.1408	0.9999	1.0177	1.7773
302	0.6258	0.6609	5.6019	0.0002	0.1814	90578.2027	1.0000	1.0169	1.6949
303	0.6515	0.7257	11.3915	3.39E-10	0.0182	0.0000	1.0000	0.9976	0.2405
304	0.8377	0.8520	1.7077	4.36E-15	0.0876	0.0000	1.0000	0.9998	0.0200
305	0.5981	0.6183	3.3814	1.84E-12	0.0380	0.0000	1.0000	0.9842	1.5837
306	0.9154	0.8880	2.9941	0.0524	0.1614	207.9657	0.9999	1.0032	0.3270
307	0.724	0.6915	4.4851	0.4415	0.3887	11.9558	0.9999	0.9979	0.2023
308	0.8717	0.8933	2.4814	0.7939	0.7935	0.0464	0.2466	0.7200	191.9804
309	0.8961	0.8895	0.7368	0.2336	0.1698	27.2975	0.9999	1.0023	0.2433
310	0.5029	0.5455	8.4798	0.1409	0.2266	60.8028	0.9999	0.9914	0.8500
311	0.2973	0.3353	12.7866	1.77E-08	0.0609	0.0000	1.0000	0.9978	0.2233
312	0.5137	0.4269	16.9034	0.8781	0.9350	6.4742	0.9993	0.7759	22.3523
313	0.3502	0.3926	12.1053	1.77E-07	0.0682	0.0000	1.0000	1.0062	0.6200
314	0.7153	0.4525	36.7444	0.8437	0.9334	10.6284	0.9994	0.8547	14.4828
315	0.3764	0.4005	6.4122	0.9615	0.9407	2.1588	0.4574	0.3866	15.4687
316	0.5799	0.6190	6.7346	9.04E-07	0.0688	0.0000	1.0000	1.0320	3.2010
317	0.2918	0.3352	14.8630	1.38E-13	0.0667	0.0000	1.0000	1.0039	0.3899
318	0.0508	0.1718	238.1210	0.6154	0.6633	7.7792	0.9998	0.9735	2.6341
319	0.2604	0.1963	24.6013	0.645	0.5896	8.5958	0.9997	0.9703	2.9397

320	0.0137	0.0708	416.5440	0.1465	0.2113	44.2357	0.9999	1.0178	1.7868
321	0.7048	0.6507	7.6827	0.3689	0.2015	45.3715	0.9999	1.0138	1.3893
322	0.717	0.7264	1.3100	0.5078	0.5606	10.3905	0.9998	1.0075	0.7744
323	0.9625	0.9776	1.5657	0.7565	0.7548	0.2200	0.2979	0.3054	2.5158
324	0.1423	0.2231	56.7876	0.2556	0.3042	19.0152	0.9999	1.0057	0.5848
325	0.9726	0.9224	5.1653	0.5235	0.4740	9.4631	0.2598	0.0813	68.7147
	Error porcentual promedio		5.4197	Error porcentual promedio		6.4139	Error porcentual promedio		6.2311

Realizado por: MORALES, Alejandro 2024.

ANEXO E: RESULTADOS DEL ERROR EN LA PREDICCIÓN DE LAS SALIDAS CON DATOS PARA LA VALIDACIÓN EXTERNA

Predicción N°	FR_BEN			FR_IPA			FR_H2O		
	DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR	DWSIM	RNA	ERROR
1	0.2178	0.33457	53.613	6.88E-02	0.08577	0.00	1.0000	1.00546	0.546
2	0.76	0.68666	9.651	0.05226	0.04164	20.32	0.9999	0.99607	0.383
3	0.418	0.40923	2.098	1.70E-02	0.00132	0.00	1.0000	1.01219	1.219
4	0.0349	0.19163	449.087	1.34E-01	0.15988	0.00	1.0000	0.98409	1.591
5	0.6579	0.42888	34.810	0.090893116	0.08415	7.42	0.9999	1.00917	0.927
6	0.1653	0.13879	16.040	0.218065134	0.23528	7.89	0.9999	1.04180	4.190
7	0.0211	0.25959	1131.444	0.370079897	0.32180	13.05	0.9999	0.95252	4.739
8	0.6677	0.85537	28.106	0.946100915	0.92716	2.00	0.7040	0.83957	19.258
9	0.7546	0.87611	16.103	0.93654611	0.93564	0.10	0.6607	0.70206	6.261
10	0.9159	0.38755	57.687	0.632501934	0.61092	3.41	0.9997	1.03194	3.224
11	0.2608	0.34150	30.942	1.21E-01	0.15221	0.00	1.0000	0.99646	0.354
12	0.8355	0.85060	1.808	0.204656715	0.19768	3.41	0.9999	0.98369	1.621
13	0.8842	0.58019	34.382	0.927104613	0.89587	3.37	0.9993	0.79343	20.601
14	0.4843	0.62538	29.132	0.940736422	0.94549	0.51	0.3089	0.56229	82.029
15	0.9788	0.96299	1.615	0.025751906	0.15753	511.73	0.9999	1.02377	2.387
16	0.893	0.87405	2.123	0.872379931	0.84664	2.95	0.4291	0.44761	4.314
17	0.4245	0.29723	29.981	2.54E-02	0.01505	0.00	1.0000	0.99343	0.657
18	0.2574	0.36963	43.602	1.09E-01	0.14360	0.00	1.0000	1.01294	1.294
19	0.9583	0.97917	2.178	0.203713921	0.16429	19.35	0.9999	1.01942	1.953
20	0.4552	0.31803	30.134	0.041288598	0.05440	31.76	0.9999	0.99931	0.059
21	0.5829	0.52516	9.905	0.016927782	-0.02318	0.00	0.9999	1.00489	0.499
22	0.5039	0.27492	45.442	0.0365211	0.03968	8.64	0.9999	0.99718	0.272

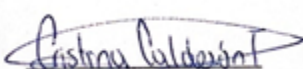

23	0.7326	0.69788	4.739	0.938622802	0.92863	1.06	0.9995	0.47474	52.502
24	0.9471	0.93141	1.657	0.385183072	0.35585	7.61	0.9999	0.95166	4.824
25	0.6338	0.59212	6.576	0.930432208	0.94460	1.52	0.9996	0.70265	29.707
	Error porcentual promedio		8.048	Error porcentual promedio		3.00	Error porcentual promedio		6.266

Realizado por: MORALES, Alejandro 2024.



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
CERTIFICADO DE CUMPLIMIENTO DE LA GUÍA PARA
NORMALIZACIÓN DE TRABAJOS DE FIN DE GRADO

Fecha de entrega: 06/ 06/ 2024

INFORMACIÓN DEL AUTOR
Nombres – Apellidos: Alejandro Eduardo Morales Chapalbay
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
 Ing. Cristina Gabriela Calderón Tapia, MSc. Director del Trabajo de Integración Curricular
 Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy, Mgs. Asesor del Trabajo de Integración Curricular

