



Simulación y Validación de un Sistema de Destilación para la Separación de Azeótropos de Diisopropileter – Isopropanol – Agua en Procesos Mejorados para la Industria Química

Ing. Rebeca Elizabeth Lascano Núñez ¹

elizabeth.lascano.nu@gmail.com

<https://orcid.org/0009-0008-5882-0825>

Unidad Educativa Particular San José”La Salle”, Ecuador

MsC. Cristina Alexandra Carvajal Zurita

kryscarzu@gmail.com

<https://orcid.org/0009-0007-3386-9852>

Unidad Educativa Bolívar, Ecuador

MsC. Vanessa Alexandra Navas
Enríquez

vane_n@live.com

<https://orcid.org/0009-0001-3148-4648>

Unidad Educativa San Pio X, Ecuador

Ing.. Michelle Fernanda Quimbíta
Benavides

michu-quimbíta@hotmail.com

<https://orcid.org/0009-0006-7585-5574>

Independiente, Ecuador

RESUMEN

La presente investigación tiene como finalidad la simulación y validación de un sistema de destilación con variación de presión para separar una mezcla de Diisopropileter (DIPE) - Isopropanol (IPA) – Agua, en la industria química con el fin de ejecutar una base de datos para diseñar una red neuronal artificial (RNA) capaz de predecir las principales fracciones molares en las columnas de destilación y en la recirculación. El desarrollo de la RNA se ejecutó con una base de datos obtenida del simulador de procesos químicos. Además, se obtendrán cinco salidas: el flujo molar en el fondo, fracción molar de IPA en el fondo y fracción molar de DIPE en el tope de la columna de destilación C1; la fracción molar de DIPE en el fondo y fracción molar de DIPE en el tope de la columna de destilación C3. La red se diseñó utilizando lenguaje de programación Python en el entorno informático de Jupyter Notebook.

Palabras clave: Ingeniería, tecnología, química, destilación por cambio de presión

¹ Autor Principal

Correspondencia: elizabeth.lascano.nu@gmail.com

Simulation And Validation of a Distillation System to Separate Diisopropylether's Azeotropes – Isopropanol – Water in Improved Processes for Chemical Industry

ABSTRACT

The present research is about the simulation and validation of a distillation system with pressure variation to separate a mixture of diisopropylether (dipe) -isopropanol (ipa) - water, in the chemical industry in order to run a database for design an artificial neural network (rna) capable to predict the main mole fractions in the distillation columns and in the recirculation. The development of the ann was carried out with a database obtained from the chemical process simulator. In addition, five outputs will be obtained: the molar flow at the bottom, the mole ipa fraction at the bottom, and the dipe mole fraction at the top of the column distillation c1; the dipe mole fraction at the bottom and dipe mole fraction at the top of the distillation column c3. The network was designed using the python programming language at jupyter notebook computing environment.

Keywords: *Engineering, technology, chemistry, pressure swing distillation*

Artículo recibido 25 julio 2023

Aceptado para publicación: 25 agosto 2023

INTRODUCCIÓN

Los Objetivos de Desarrollo Sostenible (2015), fueron aprobados en el 2015 por la Organización de Naciones Unidas, los objetivos son 17 y buscan transformar el mundo y mejorar la vida. Los objetivos abarcan desde la eliminación de la pobreza hasta la lucha contra el cambio climático. Al enfocarse en el objetivo 12, Producción y Consumo Responsable, nos exhorta a hacer más con menos. La industria química genera aproximadamente un tercio de la energía total utilizada en el sector industrial; además, la necesidad de mejorar la sostenibilidad en la producción de combustibles y productos químicos impulsan investigaciones significativas para repensar su uso (Kiss et al., 2020: p. 117788).

Inicialmente, la hidratación de propileno produce un efluente industrial rico en IPA y un subproducto de DIPE, juntos forman un azeótropo binario; los productos por separado son muy importantes en la industria química (Jun et al., 2020, p. 20736). IPA es ampliamente utilizado como aditivo para combustibles de petróleo y combustibles de aviación (Tsai et al., 2014, p. 196) y DIPE posee un potencial como mezcla de aceite debido a su alto octanaje y resistencia a explosiones (Jun et al., 2020, p. 20736).

El método más importante en la industria de procesos químicos es la destilación, pese a que el consumo de energía es muy alto. (Yildirim et al., 2011, p. 405). La separación de azeótropos binarios se caracteriza por el hecho de que es imposible realizarla mediante destilación simple y la manera más común para resolver este problema es agregar un tercer componente, que permita la separación de la mezcla (Luyben, 2013, p. 2). Yildirim et al., (2011, p. 406) considera que la separación de mezclas que contienen tres o más componentes requiere un alto costo de capital y de energía.

De acuerdo con Mulia (2011, p. 1533), la Destilación por Cambio de Presión (PSD) es una técnica eficaz exclusivamente para mezclas cuyas composiciones azeotrópicas cambian con la presión para que los componentes de la alimentación puedan ser recuperados fácilmente. Además, Luyben (2013, p. 2), considera que la pureza del producto y la economía del proceso en la PSD es mejor que en la destilación extractiva.

Una solución económicamente rentable requiere el uso de Softwares Open Source, mismos que son capaces de crear entornos de operación que generen resultados muy cercanos a los reales. Sin embargo, una limitación muy clara es la cantidad de datos e información necesaria para poder simular y obtener resultados fehacientes, misma que no siempre está disponible. Por otro lado, trabajar en un Software Open Source conlleva el riesgo de que el mismo no cuente con la robustez necesaria para simular el sistema y no se puedan obtener resultados confiables.

OBJETIVOS

Objetivo general

Simular y validar un sistema de destilación para la separación de azeótropos de Diisopropileter - Isopropanol - Agua en procesos mejorados para la Industria Química.

Objetivos específicos

- Simular el sistema mediante la multiplataforma de procesos químicos de códigos abierto DWSIM y comparar su eficiencia frente al sistema convencional.
- Validar el proceso de destilación para separar azeótropos Diisopropileter - Isopropanol – Agua mediante la comparación de los resultados obtenidos en el simulador con los valores provistos en bibliografía.
- Cuantificar la cantidad de diisopropileter e isopropanol recuperados y la cantidad de agua removida por el sistema de destilación para separar el azeótropo diisopropileter – isopropanol – agua.
- Diseñar una Red Neuronal Artificial que permita predecir la fracción molar de los principales componentes extraídos en el sistema de destilación propuesto a partir de las condiciones de funcionamiento: presión y temperatura.

METODOLOGÍA

La propuesta tecnológica en este trabajo de titulación presenta la simulación de un sistema de destilación para separar un azeótropo de DIPE–IPA-Agua y posteriormente, el modelado de una RNA capaz de predecir las composiciones de IPA y DIPE en los fondos de las columnas y en la recirculación del proceso. El enfoque del trabajo es cuantitativo, puesto que, se utilizan los datos que se obtuvieron en la simulación en DWSIM para la alimentación de la RNA.

Finalmente, la realización de un análisis estadístico es fundamental para determinar la confiabilidad y el grado de error que existe entre los valores extraídos de la simulación y los valores que predice la RNA.

Toda la información recopilada para el desarrollo del presente proyecto proviene de:

Fuente Primaria:

Conocimientos teóricos y experimentales obtenidos por el autor a partir de su formación académica, conocimiento tecnológico enfocado en simulación de procesos utilizando DWSIM, procesamiento de datos empleando Excel y JASP. Finalmente, lenguaje de programación Python y desarrollo en Jupyter Notebook.

Fuente Secundaria:

- Artículos científicos académicamente relevantes, principalmente de grado Q1 y Q2 publicados en revistas científicas indexadas en ScienceDirect y Scopus.
- Libros digitales relacionados al tema.
- Bibliotecas digitales asociadas a la ESPOCH.
- Sitios web oficiales de los softwares utilizados en la investigación.

RESULTADOS

Informe de resultados de la simulación en DWSIM

La simulación completa de un sistema de destilación para la separación de azeótropos de DIPE-IPA-Agua realizada en el Simulador de código abierto DWSIM, mismo que se presenta en la Figura 1-4.

Un punto descable es que la simulación no presenta modificaciones con relación al modelo de referencia. Además, los resultados obtenidos de la simulación se presentan como objetos de interés en el estudio, mismos que se presentan en la Figura 2-4 y en la Tabla 3-4, respectivamente.

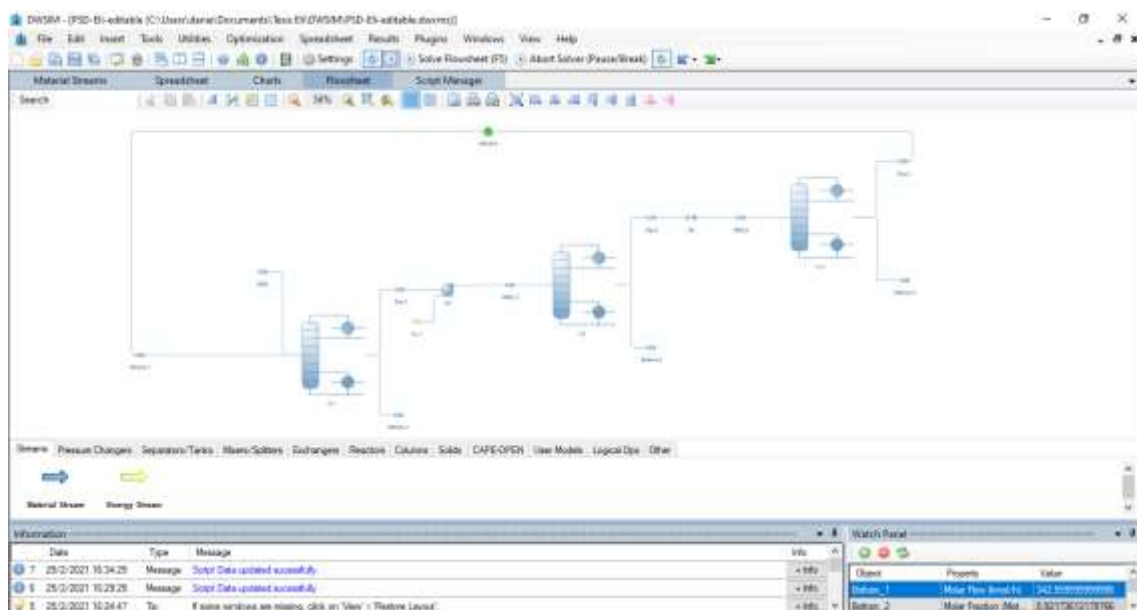


Figura Simulación completa del sistema de destilación para la separación de azeótropos de DIPE-IPA-Agua en DWSIM

Realizado por: Lascano, Rebeca,

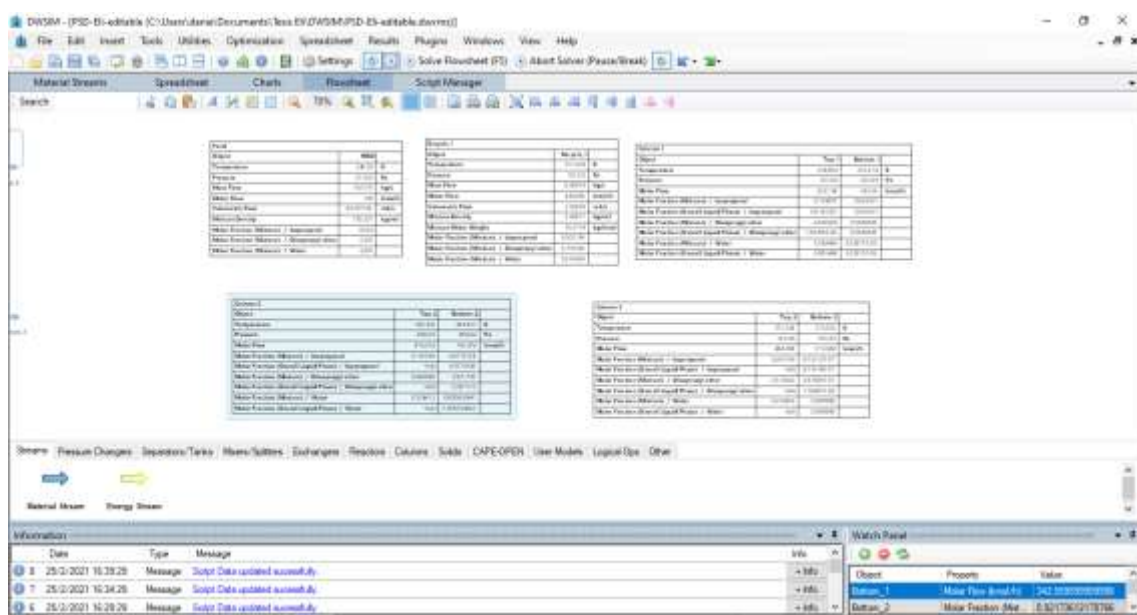


Figura. Resultados en DWSIM

Realizado por: Lascano, Rebeca,

Los resultados obtenidos de las columnas en la simulación se pueden visualizar en las Tabla 3-4, 3-5 y 3-6.

Tabla. Resultados de la columna C1 en DWSIM

Column 1			
Object	Top_1	Bottom_1	
Temperature	338,902	355,214	K
Pressure	101325	101325	Pa
Molar Flow	622,134	342,56	kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Isopropanol	0,164872	0,965921	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopropanol	0,0145503	0,965921	
Molar Fraction (Mixture) / Diisopropyl ether	0,586629	0,0340693	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Diisopropyl ether	1,95796E-06	0,0340693	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,248498	9,55875E-06	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Water	0,985448	9,55875E-06	

Realizado por: Lascano, Rebeca

Tabla. Resultados de la columna C2 en DWSIM

Column 2			
Object	Top_2	Bottom_2	
Temperature	392,432	403,427	K
Pressure	506625	506625	Pa
Molar Flow	476,258	145,876	kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Isopropanol	0,191599	0,0776134	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopropanol	NaN	0,0776342	
Molar Fraction (Mixture) / Diisopropyl ether	0,483988	0,921736	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Diisopropyl ether	NaN	0,921715	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,324413	0,000650441	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Water	NaN	0,000650862	

Realizado por: Lascano, Rebeca

Tabla. Resultados de la columna C3 en DWSIM

Column 3			
Object	Top_3	Bottom_3	
Temperature	351,264	372,936	K
Pressure	101325	101325	Pa
Molar Flow	444,694	31,5648	kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Isopropanol	0,205199	8,75313E-07	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Isopropanol	NaN	8,71614E-07	
Molar Fraction (Mixture) / Diisopropyl ether	0,518342	6,87006E-07	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Diisopropyl ether	NaN	7,78041E-09	
Molar Fraction (Mixture) / Water	0,276459	0,999998	
Molar Fraction (Overall Liquid Phase) / Water	NaN	0,999999	

Realizado por: Lascano, Rebeca

Validación de los resultados provenientes de DWSIM

Es indispensable realizar una validación de los datos obtenidos en la simulación con los resultados existentes en bibliografía para comprobar la veracidad de los mismos. El trabajo expuesto por Guang (2019, p. 11), se utilizará para ejecutar la validación del trabajo.

La comparación realizada entre los datos obtenidos en la simulación de DWSIM y los valores referentes dejan en evidencia ciertos valores anormales en el porcentaje del error. Esto se puede explicar dado que los valores tanto en la referencia como en la simulación son muy pequeños; por lo tanto, tienen una significancia menor y se pueden considerar despreciables.

El error porcentual emplea la siguiente fórmula:

$$E(\%) = \frac{V_{deseado} - V_{experimental}}{V_{deseado}} \quad (\text{Ec 1-4})$$

Tabla. Comparación de las fracciones molares obtenidas en la simulación y en los valores referentes

Resultados	Columna 1		Columna 2		Columna 3	
	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
IPA DWSIM	0.164	0.965	0.191	0.0077	0.205	8 x 10 ⁷
IPA (deseado)	0.125	0.998	0.163	0.00195	0.1746	11 x 10 ⁹
Error (%)	0.312	0.0331	0.1718	2.9487	0.1741	71.7273
DIPE DWSIM	0.586	0.034	0.483	0.921	0.518	6 x 10 ⁷
DIPE (deseado)	0.674	0.00157	0.574	0.998	0.6147	Trace
Error (%)	0.1306	20.6561	0.1585	0.0772	0.1573	-
AGUA DWSIM	0.248	0.0000095	0.324	0.00065	0.276	0.999
AGUA (deseado)	0.201	0.00043	0.263	0.00005	0.2107	1.00
Error (%)	0.2338	0.9779	0.2319	12.0000	0.3099	0.0010

Realizado por: Lascano, Rebeca

La existencia de porcentajes muy grandes en la Tabla 6-4 se justifica dado que, los valores se encuentran en trazas en el proceso; por lo tanto, pueden ser despreciables. Además, las fracciones

molares (señaladas con color) mismas que son las variables de interés, presentan un porcentaje de error muy bajo; por lo tanto, la diferencia no es significativa.

Tabla. Comparación de las temperaturas obtenidas en la simulación y en los valores referente

Resultados	Columna 1		Columna 2		Columna 3	
	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo
Temperatura K DWSIM	338.90	355.21	392.43	403.42	351.26	372.93
Temperatura K (deseada)	334.84	360.38	385.72	401.59	335.01	375.02
Error (%)	0.0121	0.0143	0.0174	0.0046	0.0485	0.0056

Realizado por: Lascano, Rebeca

El porcentaje de error en la temperatura es muy bajo, lo que implica que la diferencia no es significativa. La variación de la temperatura en el diseño si es representativa, por lo tanto, que el porcentaje de error sea muy bajo le favorece al proceso.

La simulación del sistema de destilación para la separación de azeótropos de diisopropiléter-isopropanol-agua presentan condiciones de operación válidos, comparados con el diseño original, lo que implica que es posible la realización de una base de datos para alimentar la RNA con una confianza alta.

Reporte de resultados de la RNA

La red neuronal artificial que se presenta en este trabajo posee 6 entradas, 7 salidas y seis capas ocultas distribuidas con 128-64-32-16-4 nodos respectivamente, lo que corresponde a 244 nodos.

La red se encuentra completamente conectada (Gráfico 2-3.).

Error cuadrático medio (MSE)

Tabla. Error cuadrático medio de cada fase de diseño de la RNA

Fase	MSE
Entrenamiento	0.006891
Prueba	0.006667
Validación	0.008051

Realizado por: Lascano, Rebeca

Los valores de MSE para la fase de entrenamiento, prueba y validación son muy bajos, lo cuál es deseable puesto que mientras mas cerca al cero estén los valores significa que el error disminuye. Por lo tanto, los datos que se presentan en la Tabla 8-4 son aceptables para el funcionamiento correcto de la RNA.

Gráficos sobre el comportamiento de la RNA

En el Figura 1-4 se puede observar un resumen del entrenamiento, mismo que detalla el número de capas, los nodos y los parametros. El número total de parámetros entrenados es de 11.957.

Resumen del Entrenamiento

```
In [13]:
model.summary()
Model: "ElModelo1"
```

Layer (type)	Output Shape	Param #
input_1 (InputLayer)	(None, 6, 1)	0
flatten (Flatten)	(None, 6)	0
dense (Dense)	(None, 128)	896
dense_1 (Dense)	(None, 64)	8256
dense_2 (Dense)	(None, 32)	2080
dense_3 (Dense)	(None, 16)	528
dense_4 (Dense)	(None, 8)	136
dense_5 (Dense)	(None, 4)	36
dense_6 (Dense)	(None, 5)	25
Total params: 11,957		
Trainable params: 11,957		
Non-trainable params: 0		

Figura. Resumen del entrenamiento

Realizado por: Lascano, Rebeca

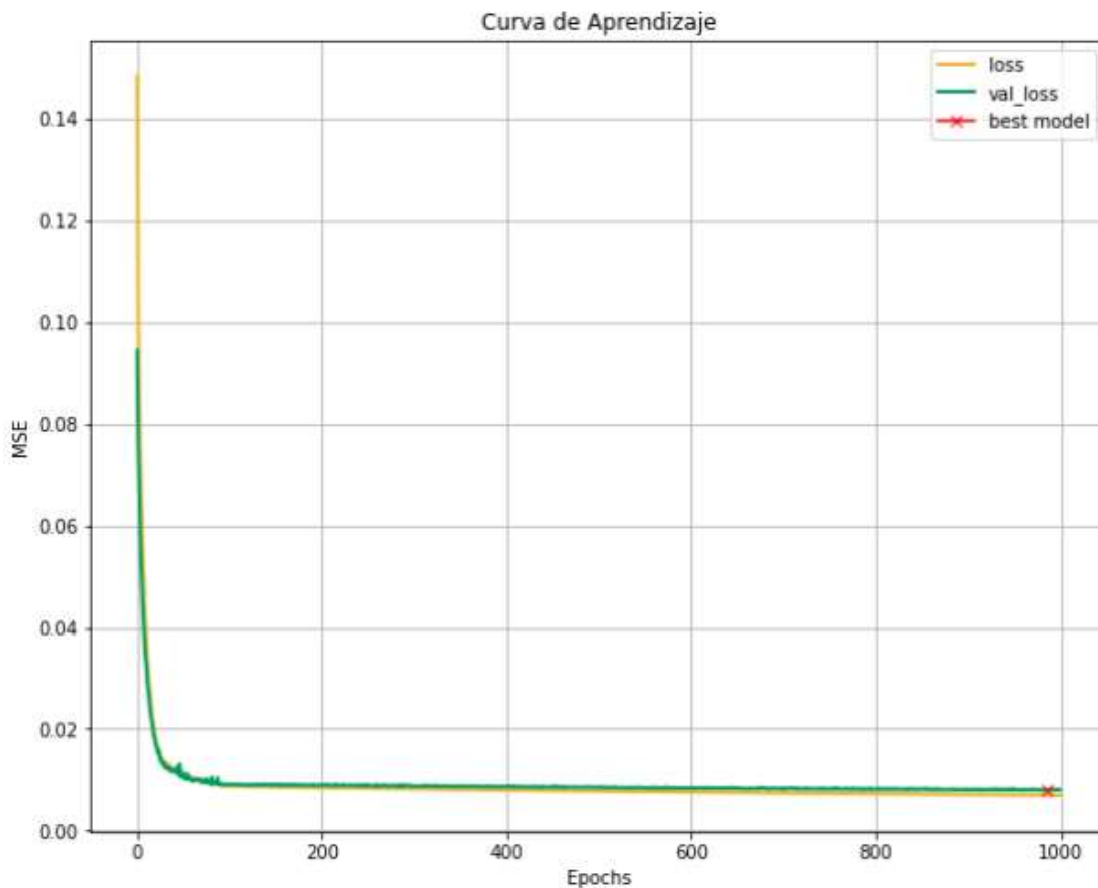


Figura 4-4. Rendimiento del entrenamiento de la RNA

Realizado por: Lascano, Rebeca

La evolución del error cuadrático medio final en la fase de entrenamiento es de 0.006891 (Figura 2-4). La curva de entrenamiento (amarilla) y la curva de prueba (verde) son muy cercanas entre sí, lo que implica que la capacidad de predicción en la red es alta.

Código de la RNA en Jupyter Notebook

El código desarrollado en el lenguaje de programación python en el entorno informático Jupyter Notebook para el entrenamiento, prueba y validación de la RNA así como las librerías y las variables utilizadas se presentan en los *ANEXOS B, C, D* e incluye:

- Librerías
- Extraer, filtrar y mostrar base de datos
- Normalizar los datos de entrada y salida
- Configurar la cantidad de datos utilizada para entrenamiento, prueba y validación
- Creación del modelo

- Diseño de la RNA
- Resumen total del entrenamiento
- Gráfico del aprendizaje
- Extracción de los pesos previamente entrenados
- Predicciones de las salidas según las entradas
- Exportar los valores predichos a una hoja en excel (sin normalizar)
- Gráficos de comparación

Gráficos de comparación entre las salidas predichas y las reales

El análisis de datos se ejecuta de la siguiente manera: Un conjunto de 130 valores con seis entradas y cinco salidas se utilizan para el entrenamiento, un conjunto de 22 valores con seis entradas y cinco salidas para la prueba y con 23 valores con seis entradas y cinco salidas para la validación. El entrenamiento y prueba se realiza para obtener los pesos sinápticos requeridos para la etapa de validación; además, es necesario recalcar que los valores son tomados de forma aleatoria (Figura 2-4).

Mostrar valores que se consideran para Entrenamiento

In [10]:

```
print ("Número de datos para entrenamiento = " + str(x_train.shape[0]))
print ("Número de datos para prueba = " + str(x_test.shape[0]))
print ("Número de datos para validaci3n = " + str(y_valid.shape[0]))
print('')
print ("x_train shape: " + str(x_train.shape))
print ("x_test shape: " + str(x_test.shape))
print ("x_valid shape: " + str(x_valid.shape))
print('')
print ("y_train shape: " + str(y_train.shape))
print ("y_test shape: " + str(y_test.shape))
print ("y_valid shape: " + str(y_valid.shape))

Número de datos para entrenamiento = 105
Número de datos para prueba = 22
Número de datos para validaci3n = 23

x_train shape: (105, 6, 1)
x_test shape: (22, 6, 1)
x_valid shape: (23, 6, 1)

y_train shape: (105, 5)
y_test shape: (22, 5)
y_valid shape: (23, 5)
```

Figura . Valores considerados para el entrenamiento, prueba y validación.

Realizado por: Lascano, Rebeca

Análisis de la base de datos empleada durante el diseño, entrenamiento y validación de la RNA

Se detalla a continuación los valores reales obtenidos del software DSWIM, los valores predichos por la RNA y el error porcentual asociado a ellos de cada una de las salidas.

Los datos correspondientes al tope de C1 para fracción molar de DIPE se encuentran en el *ANEXO E*, se presenta un error porcentual promedio 0,0463. Además, se presenta la gráfica comparativa entre los valores predichos y los valores reales.

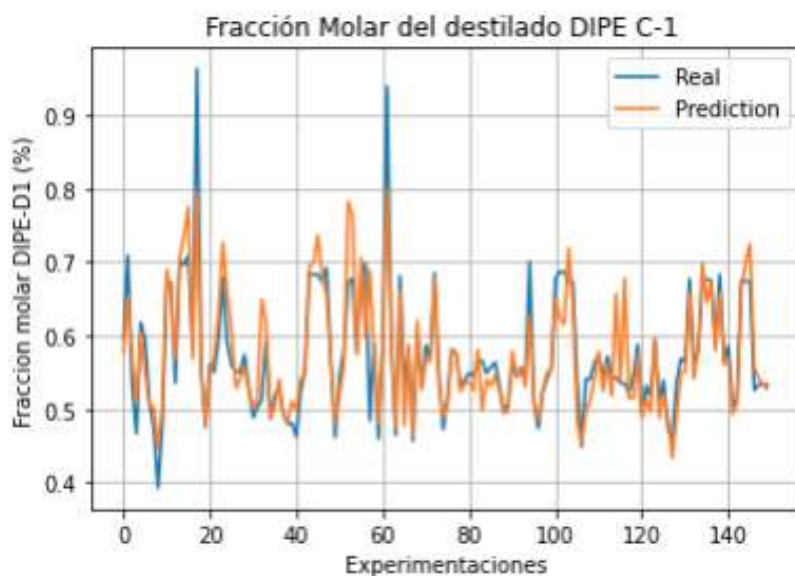


Figura. Fracción molar del tope de DIPE real vs el predicho por la RNA en la C1

Realizado por: Lascano, Rebeca

Los datos que corresponde al fondo de C1 para el flujo molar y fracción molar de IPA se encuentran en el *ANEXO F* y tienen como error porcentual promedio 0.0297 y 0.0353 respectivamente. Además, en el Figura 4-4, se presenta la comparación gráfica entre los valores predichos y los valores reales.

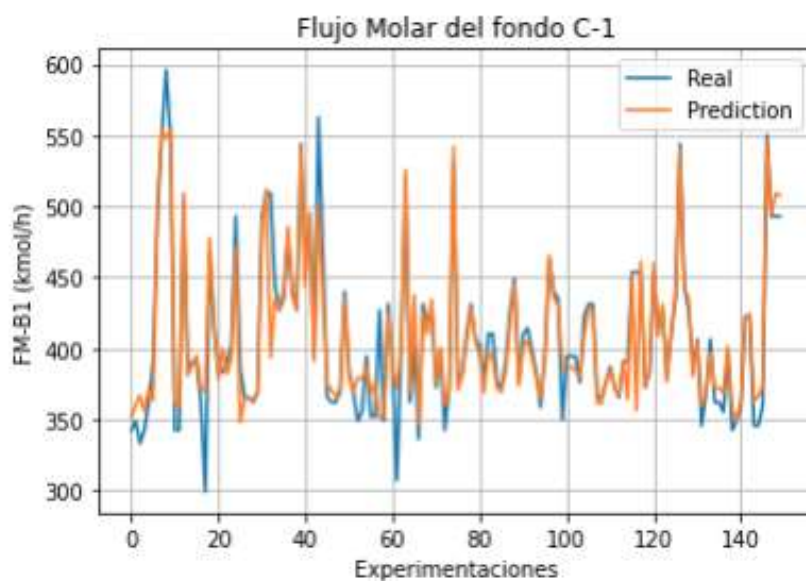


Figura. Fracción molar del fondo de Flujo Molar real vs el predicho por la RNA en la C1

Realizado por: Lascano, Rebeca

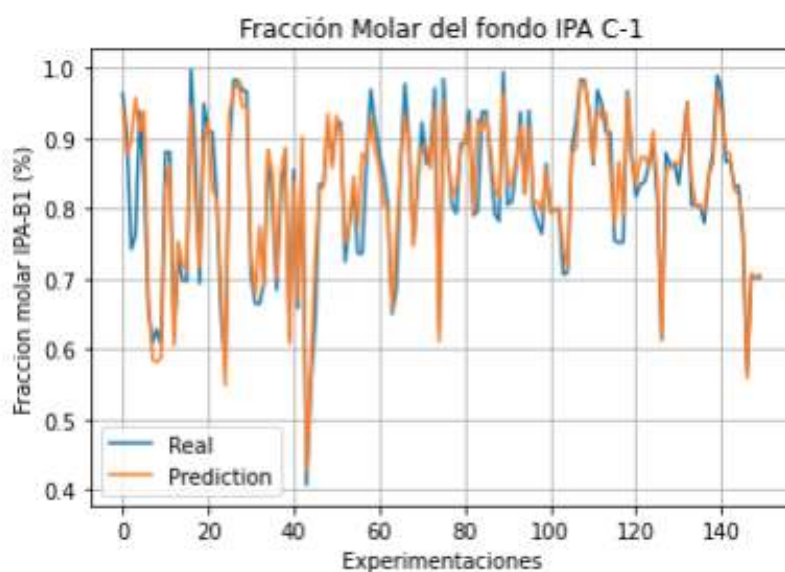


Figura. Fracción molar del fondo de IPA real vs el predicho por la RNA en la C1

Realizado por: Lascano, Rebeca

En el *ANEXO G* se presentan los datos correspondientes al fondo de C2 para la fracción molar de DIPE, como error porcentual promedio 0,0854. Además, en el Figura 6-4 se visualiza la comparación gráfica entre los valores predichos y los reales.

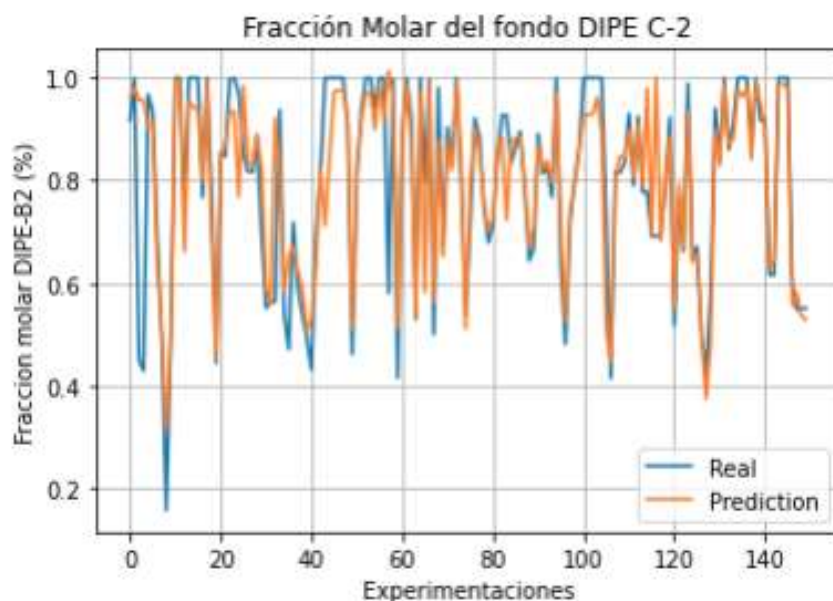


Figura 9-4. Fracción molar del fondo de DIPE real vs el predicho por la RNA en la C2

Realizado por: Lascano, Rebeca

Finalmente, en el *ANEXO H* se presentan los valores que corresponden al tope de C3 para la fracción molar de DIPE, mismos que presentan un error porcentual promedio 0,0562. Además, se observa la comparación gráfica entre los valores predichos y reales.

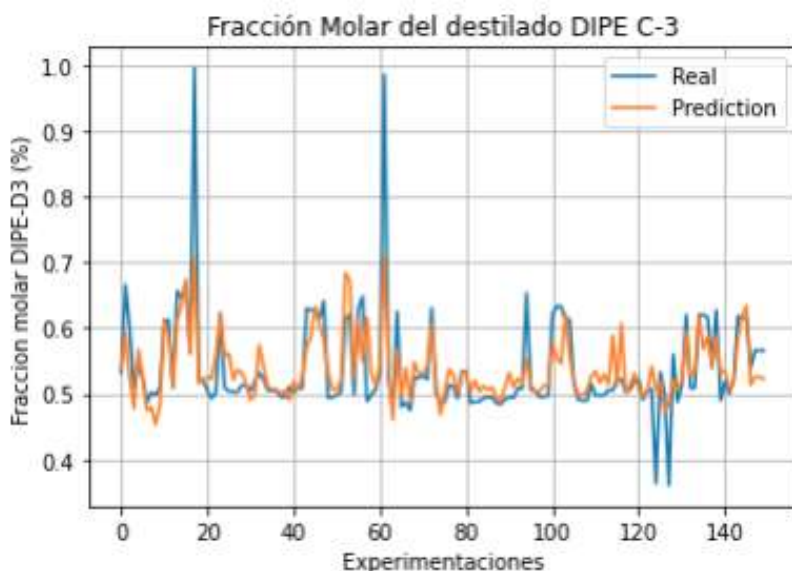


Figura 10-4. Fracción molar del fondo de DIPE real vs el predicho por la RNA en la C3

Realizado por: Lascano, Rebeca

El grado de compatibilidad reflejado en las gráficas de dispersión entre los valores reales (azul) y los predichos (naranja) son muy altos. Además, existen ligeros desfases muy notables al

sobreponer las curvas, principalmente en la fracción molar del fondo de DIPE en la C3, debido al ruido que presentan los datos por ser muy pequeños. Finalmente, el MSE para el entrenamiento es 0,006891, prueba es 0,006667 y validación es 0.008051; los valores al ser muy cercanos al cero ponen en evidencia la viabilidad de los procesos.

DISCUSIÓN

Los resultados que presenta de la RNA son satisfactorios; sin embargo, es necesario realizar un análisis estadístico comparativo con el fin de determinar el nivel de confiabilidad entre los datos predichos y los reales. El estudio se ejecutó en el software estadístico libre y de código abierto JASP, en el cuál, se analizaron los métodos ANOVA, correlación de Pearson y prueba t para dos muestras pareadas.

El análisis ANOVA de DFM en C1 presenta un valor de F de 0.191, el valor de p es 0.662 y un nivel de confianza es de 95%. Al comparar el nivel de confianza con el valor de p, este último es mayor. Por lo tanto, se acepta la hipótesis nula lo que implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Mientras tanto, en la correlación de Pearson de DFM en C1 el valor de r es 0.942, siendo un valor muy cercano a 1. Por lo tanto, la correlación es positiva e implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Además, en la prueba t para dos muestras pareadas de DFM en C1 el valor de p es 0.081 y el nivel de confianza es 95%. El valor p es mayor que el nivel de confianza. Por lo tanto, se acepta la hipótesis nula dado que los valores evaluados no difieren significativamente. Finalmente, posterior a los tres métodos que entregan resultados similares, se concluye que los valores evaluados son significativamente similares.

El análisis ANOVA de IPA en C1 presenta un valor de F de 0.074, el valor de p es 0.785 y un nivel de confianza es de 95%. Al comparar el nivel de confianza con el valor de p, este último es mayor. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alterntativa puesto que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Mientras tanto, en la correlación de Pearson de IPA en C1 el valor de r es 0.942, siendo un valor muy cercano a 1. Por lo tanto, la correlación es positiva e implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Además, en la prueba t para dos muestras pareadas de IPA en C1 el valor de p es 0.294 y el nivel de confianza

es 95%. El valor p es mayor que el nivel de confianza. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa dado que los valores evaluados no difieren significativamente. Finalmente, posterior a los tres métodos que entregan resultados similares, se concluye que los valores evaluados son significativamente similares.

El análisis ANOVA de DIPE en C1 presenta un valor de F de 0.002, el valor de p es 0.969 y un nivel de confianza es de 95%. Al comparar el nivel de confianza con el valor de p , este último es mayor. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa puesto que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Mientras tanto, en la correlación de Pearson de DIPE en C1 el valor de r es 0.835, siendo un valor muy cercano a 1. Por lo tanto, la correlación es positiva e implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Además, en la prueba t para dos muestras pareadas de DIPE en C1 el valor de p es 0.986 y el nivel de confianza es 95%. El valor p es mayor que el nivel de confianza. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa dado que los valores evaluados no difieren significativamente. Finalmente, posterior a los tres métodos que entregan resultados similares, se concluye que los valores evaluados son significativamente similares.

El análisis ANOVA de DIPE en C2 presenta un valor de F de 0.002, el valor de p es 0.967 y un nivel de confianza es de 95%. Al comparar el nivel de confianza con el valor de p , este último es mayor. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa puesto que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Mientras tanto, en la correlación de Pearson de DIPE en C2 el valor de r es 0.860, siendo un valor muy cercano a 1. Por lo tanto, la correlación es positiva e implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Además, en la prueba t para dos muestras pareadas de DIPE en C2 el valor de p es 0.987 y el nivel de confianza es 95%. El valor p es mayor que el nivel de confianza. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa dado que los valores evaluados no difieren significativamente. Finalmente, posterior a los tres métodos que entregan resultados similares, se concluye que los valores evaluados son significativamente similares.

El análisis ANOVA de DIPE en C3 presenta un valor de F de 0.139, el valor de p es 0.709 y un nivel de confianza es de 95%. Al comparar el nivel de confianza con el valor de p , este último es

mayor. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa puesto que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Mientras tanto, en la correlación de Pearson de DIPE en C3 el valor de r es 0.762, siendo un valor cercano a 1. Por lo tanto, la correlación es positiva e implica que no existen diferencias significativas entre los valores evaluados. Además, en la prueba t para dos muestras pareadas de DIPE en C3 el valor de p es 0.350 y el nivel de confianza es 95%. El valor p es mayor que el nivel de confianza. Por lo tanto, se rechaza la hipótesis alternativa dado que los valores evaluados no difieren significativamente. Finalmente, posterior a los tres métodos que entregan resultados similares, se concluye que los valores evaluados son significativamente similares.

CONCLUSIONES

- Se simuló un sistema de destilación para la separación del azeótropo diisopropiléter – isopropanol – agua en procesos mejorados para la Industria Química utilizando el simulador de procesos químicos de código abierto DWSIM. El sistema fue propuesto por Guang C, et al, (2019) y publicado en la revista Chemical Engineering Research and Design; mismo que se usó como referente para establecer las bases de diseño, condiciones de operación y evaluación del funcionamiento. Además, el sistema fue validado mediante el desarrollo de una red neuronal artificial.
- Se validó los resultados que se reciben de la red neuronal artificial (RNA) mediante un análisis estadístico comparativo entre los valores predichos por DWSIM y los reales por la red, con un valor de confiabilidad general del 95% y se comprobó que no existen diferencias significativas en los datos que se analizaron.
- Se cuantificó la cantidad de diisopropiléter de la C2 e isopropanol de la C1 removidos, siendo 97.70% y 99.60% respectivamente, datos obtenidos posterior a ejecutar variaciones en los parámetros de entrada. Además, de casi el 100% de agua en la C3.
- Se diseñó una red neuronal artificial utilizando el lenguaje de programación Python en el entorno informático de Jupyter Notebook, utilizando una base de datos extraída de varias experimentaciones en la simulación en DWSIM. La red neuronal artificial (RNA) es capaz de predecir las fracciones molares de isopropiléter, diisopropiléter y flujo molar

seleccionadas como salidas. La RNA consta de seis entradas, 6 capas ocultas dispuestas de 244 nodos, cinco salidas, utiliza el algoritmo de optimización Estimación Adaptativa de Momentos (Adam) y como función de activación se utilizó función tanh y función lineal. Obteniendo un MSE de validación de 0.008051.

- Se diseñó la RNA con cinco variables de entradas: temperatura (T-in), fracción molar IPA de entrada de flujo (IPA-in), fracción molar DIPE de entrada de flujo (DIPE-in), presión de la columna 1 (P-C1), presión de la columna 2 (P-C2), presión de la columna 3 (P-C3); y es capaz de predecir variables de salida como: flujo molar del fondo de la columna 1 (DFM-B1), fracción molar IPA del fondo de la columna 1 (IPA-B1), fracción molar DIPE del tope de la columna 1 (DIPE-D1), fracción molar DIPE del fondo de la columna 2 (DIPE-B2), fracción molar DIPE del fondo de la columna 3 (DIPE-D3).
- Se comprueban resultados muy similares entre los datos que arroja la simulación ejecutada en DWSIM y el referente. Además, cabe recalcar que al optar por una simulación en un software open source la robustez y precisión del mismo es significativamente diferente a un software de pago como lo es ASPEN PLUS. Lo que se explica las pequeñas variaciones en los resultados.

BIBLIOGRAFÍA

- ARCE, Alberto; et al.** "(Vapour + liquid) equilibrium of (DIPE + IPA + water) at 101.32 kPa". Journal of Chem. Thermodynamic [en línea], 2003, (España), vol. 35 (1), pp: 871-884 [Consulta: 03 de enero 2021]. Disponible en: [doi:10.1016/S0021-9614\(03\)00018-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9614(03)00018-1)
- ARIFIN, S., CHIEN, I.** "Combined preconcentrator/recovery column design for isopropyl alcohol dehydration process". Journal of Industrial & Engineering Chemistry Research [en línea], 2007, (China), vol. 46 (8), pp: 2535-2543 [Consulta: 16 de febrero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie061446c>
- ARMENTA, M., VALDEZ, R., SILVA, R.** "Diisopropyl ether production via 2-propanol dehydration using supported iron oxides catalysts". Journal of Fuel [en línea], 2019, (Mexico), vol. 236 (1), pp: 934-941 [Consulta: 11 de febrero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.06.138>

- ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR.** Código Orgánico de La Economía Social de Los Conocimientos, Creatividad e Innovación [en línea]. Ecuador: 2016. [Consulta: 13 de agosto 2020] Disponible en: <http://www.wipo.int/edocs/lexdocs/laws/es/ec/ec075es.pdf>
- BIYANTO, Totok; et al.** "Artificial neural network-based modeling and controlling of distillation column system". Journal of Engineering, Science and Technology [en línea], 2010, (Malasya), vol. 6 (1), pp: 177-188 [Consulta: 26 de noviembre 2020]. Disponible en: DOI: [10.4314/ijest.v2i6.63709](https://doi.org/10.4314/ijest.v2i6.63709)
- BUITRAGO, J., AMAYA, D., y RAMOS, O.** "Model and Simulation of a Hydrotreatment Reactor for Diesel Hydrodesulfurization in Oil Refining". Journal of Contemporary Engineering Sciences [en línea], 2017, (Colombia), vol. 10 (25), pp: 1245-1254 [Consulta: 15 de febrero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.12988/ces.2017.710135>
- CHAO, Guang; et al.** " Comparison of heterogeneous azeotropic and pressure-swing distillations for separating the diisopropylether/isopropanol/water mixtures". Journal of Chemical Engineering Research and Design [en línea], 2019, (China), vol. 143 (1), pp: 249-260. [Consulta: 23 de julio 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.01.021>
- CHEMSEP.** Chemsep Web Site [blog]. 2020. [Consulta: 17 de agosto 2020]. Disponible en: <http://www.chemsep.org/>
- CHETOUANI, Yahya.** "Using Artificial Neural networks for the modelling Of a distillation column". Journal of Technomathematics Research Foundation [en línea], 2007, (Francia), vol. 4 (7), pp: 119-33. [Consulta: 30 de agosto 2020]. Disponible en: <http://www.tmrfindia.org/ijcsa/V4I310.pdf>
- DURST, Dupont, y GOKEL, George.** *Química Orgánica Experimental* [en línea]. Barcelona-España: Reverté, 2007 [Consulta: 15 de agosto 2020]. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=xixTfEO1a2gC&printsec=frontcover&hl=es#v=onepage&q&f=false>
- ENZYME ADVISING GROUP.** *Redes neuronales con Python: ¿por qué es el mejor lenguaje para IA?* [blog]. 2020. [Consulta: 01 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://blog.enzymeadvisinggroup.com/>

FERRERO, Rosana. *¿Qué es el anova de una vía* [blog]. 2020. [Consulta: 02 de febrero 2021].

Disponible en: <https://www.maximaformacion.es/blog-dat/que-es-el-anova-de-una-via/>

GAO, Xiaoxi; et al. "A combination of pressure-swing and extractive distillation for separating complex binary azeotropic system". *Journal of Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2017, (China), vol. 122 (1), pp: 269-276 [Consulta: 18 de febrero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2017.10.012>

GOSS, Mark. *Análisis estadístico con JASP: una guía para estudiantes* [en línea], Barcelona-España: FUOC, 2018. [Consulta: 29 de septiembre 2020]. Disponible en: <http://openaccess.uoc.edu/webapps/o2/bitstream/10609/102926/6/An%C3%A1lisis%20estad%C3%ADstico%20con%20JASP%20una%20gu%C3%ADa%20para%20estudiant%20es.pdf>

IQBAL, Asma y AKHLAQ, Syed. "Pressure swing distillation of azeotropic mixture — A simulation study". *Journal of Perspectives in Science* [en línea], 2016, (India), vol. 8 (1), pp: 4-6. [Consulta: 26 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.pisc.2016.01.001>

JANARDHANAN, PS. "Project repositories for machine learning with TensorFlow". *Journal of Procedia Computer Science* [en línea], 2020, (India), vol. 171 (1), pp: 188-196 [Consulta: 03 de enero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.procs.2020.04.020>

JUN, Qi; et al. "Heat-Integrated Azeotropic Distillation and Extractive Distillation for the Separation of Heterogeneous Ternary Azeotropes of Diisopropyl Ether/Isopropyl Alcohol/Water". *Journal of Industrial & Engineering Chemistry Research* [en línea], 2019, (China), vol. 58(45), pp: 20734-20745. [Consulta: 30 de agosto 2020]. Disponible en: [DOI: 10.1021/acs.iecr.9b03846](https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b03846)

JUN, Qi; et al. "Ionic liquid extractive distillation for the recovery of diisopropyl ether and isopropanol from industrial effluent: Experiment and simulation". *Journal of Cleaner Production* [en línea], 2020, (China), vol. 254 (1), pp: 120132 [Consulta: 22 de agosto 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.120132>

- KING, Judson; et al.** "Separation & Purification: Critical Needs and Oportunities". Journal of The National Academies Press [en línea], 1987, (Washington, DC), pp: 63-64. [Consulta: 29 de agosto 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.17226/19188>
- KISS, Anton y SMITH, Robin.** "Rethinking energy use in distillation processes for a more sustainable chemical industry". Journal of Energy [en línea], 2020, (United Kingdom), vol. 203 (1), pp: 117788 [Consulta: 20 de agosto 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117788>
- KOOIJMAN, Harry y TAYLOR, Ross.** ChemSep Modeling Separation Processes [blog]. 2020. [Consulta: 2020-06-01]. Disponible en: <http://www.chemsep.com/program/index.html>
- CHEN, Hao; et al.** "Applying artificial neural network to predict the viscosity of microalgae slurry in hydrothermal hydrolysis process". Journal of Energy and AI [en línea], 2021, (China), vol. 4 (1), pp: 100053 [Consulta: 27 de febrero 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.egyai.2021.100053>
- LÉVY, Jean.** *Las redes neuronales artificiales: Fundamentos teóricos y aplicaciones prácticas* [en línea], La Coruña-España: NETBIBLIO S. L., 2008. [Consulta: 28 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=X0uLwi1Ap4QC&printsec>
- LIN, K., TSAI, M. y CHIEN, I.** "Energy-efficient separation design of diisopropylether/isopropanol/water system having three distillation regions and liquid-liquid envelope". Journal of Separation and Purification Technology [en línea], 2020, (Taiwan), vol. 251 (1), pp: 117292. [Consulta: 27 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117292>
- LLADOSA, Estela; et al.** "Separation of di-n-propyl ether and n-propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization". Journal of Chemical Engineering and Processing: Process Intensification [en línea], 2011, (España), vol. 50 (11-12), pp: 1266-1274. [Consulta: 30 de noviembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.07.010>
- LUYBEN, William.** "Comparison of extractive distillation and pressure-swing distillation for acetone/chloroform separation". Journal of Computers & Chemical Engineering [en

- línea], 2013, (United States of America), vol. 50 (1), pp: 1-7. [Consulta: 29 de agosto 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.10.014>
- LUYBEN, William.** "Design and Control of a Fully Heat-Integrated Pressure-Swing Azeotropic Distillation System". Journal of Industrial & Engineering Chemistry Research [en línea], 2008, (United States of America), vol. 47 (8), pp: 2681-2695. [Consulta: 02 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie071366o>
- MACHINE LEARNING MASTERY PTY.** *What is Deep Learning?* [blog]. 2020. [Consulta: 20 de diciembre 2020]. Disponible en: <https://machinelearningmastery.com/what-is-deep-learning/>
- MANZANARES, Albert.** *Detector de baches con deep learning* [en línea], Barcelona-España: Treball de Fi de Grau, 2018. [Consulta: 29 de septiembre 2020]. Disponible en: https://repositori.upf.edu/bitstream/handle/10230/42402/Manzanares_2019.pdf
- McCLARREN, Ryan.** *Computational Nuclear Engineering and Radiological Science Using Python* [en línea]. Notre Dame-USA: ELSEVIER, 2018 [Consulta: 03 de enero 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/C2016-0-03507-6>
- MEDEIROS, Daniel.** DWSIM - Open Source Process Simulator Web Site [blog]. 2020. [Consulta: 29 de agosto 2020]. Disponible en: <http://DWSIM.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>
- MINISTERIO DE TELECOMUNICACIONES Y DE LA SOCIEDAD DE LA INFORMACIÓN.** Software libre y Software Público [blog]. 2020. [Consulta: 16 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://www.gobiernoelectronico.gob.ec/software-libre-y-software-publico-2/>
- MULIA, Jorge y FLORES, Antonio.** "Modeling, simulation and control of an internally heat integrated pressure-swing distillation process for bioethanol separation". Journal of Computers & Chemical Engineering [en línea], 2011, (México), vol. 35 (1), pp: 1532-1546. [Consulta: 29 de agosto 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.03.011>

- NHU, Viet; et al.** "Effectiveness assessment of Keras based deep learning with different robust T optimization algorithms for shallow landslide susceptibility mapping at tropical area". Journal of Catena [en línea], 2020, (Viet Nam), vol. 188 (1), pp: 104458 [Consulta: 22 de diciembre 2020]. Disponible en: [DOI: 10.1016/j.catena.2020.104458](https://doi.org/10.1016/j.catena.2020.104458)
- NumFOCUS.** *About us* [blog]. 2021. [Consulta: 24 de noviembre 2020]. Disponible en: <https://pandas.pydata.org/>
- OSOULALE, Funmilayo; et al.** "Energy efficiency optimisation for distillation column using artificial neural network models". Journal of Energy [en línea], 2016, (United Kingdom), vol. 106 (1), pp: 562-578. [Consulta: 25 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.03.051>
- PANJAPAKKUL, Warissara.** Techno-economic analysis of alternative pathways for isopropanol production. [En línea]. (Trabajo de titulación). (Maestría). A&M University. Texas-Estados Unidos. 2018. pp:1-94. [Consulta: 21 de enero 2021]. Disponible en: <https://oaktrust.library.tamu.edu/bitstream/handle/1969.1/173590/PANJAPAKKUL-THESIS-2018.pdf?sequence=1>
- PROJECT JUPYTER.** *About us* [blog]. 2021. [Consulta: 24 de enero 2020]. Disponible en: <https://jupyter.org/about>
- PYTHON SOFTWARE FOUNDATION.** Python Web Site [blog]. 2020. [Consulta: 01 de septiembre 2020]. Disponible en: <https://www.python.org/>