



Desarrollo de un modelo termodinámico híbrido basado en redes neuronales artificiales para la predicción robusta del equilibrio de fases líquido-líquido

Octavio Del Mazo Alvarado¹ y Adrián Bonilla Petriciolet¹

¹ Instituto Tecnológico de Aguascalientes. octavio.dmal@gmail.com

La Ingeniería Química comprende una gran variedad de procesos de separación tales como la destilación, extracción y adsorción, entre otros. Estas operaciones de separación son fundamentales para procesar mezclas de compuestos químicos de diversas características. Algunas de estas mezclas presentan comportamientos de equilibrio de fases particulares debido a los componentes presentes en ellas. La caracterización del comportamiento del equilibrio de fases de las mezclas es importante para determinar la mejor ruta para su procesamiento, establecer condiciones de operación, optimizar su desempeño y determinar costos. Por ejemplo, la mezcla agua - etanol ha sido estudiada ampliamente desde hace varias décadas¹. Los componentes de esta mezcla son miscibles entre sí y se pueden separar a través de un proceso de destilación. Entonces, el diseño de este equipo de separación requiere un modelo termodinámico que describa confiablemente el comportamiento de equilibrio de fases de la mezcla. La aplicación de modelos termodinámicos usualmente requiere de parámetros de interacción binaria, los cuales son obtenidos de la correlación de datos experimentales de equilibrio de fases. No obstante, cuando se analiza una mezcla que presenta equilibrio líquido-vapor y equilibrio líquido-líquido, la identificación de los parámetros del modelo termodinámico se complica sustancialmente. En estos casos, la selección o estimación de parámetros de interacción binaria del modelo termodinámico se basa en el procesamiento parcial de los datos de equilibrio vapor-líquido o equilibrio líquido-líquido, pero no de ambos. El objetivo de este trabajo fue incorporar herramientas de inteligencia artificial, específicamente Redes Neuronales Artificiales, al modelo termodinámico NRTL para realizar la estimación de un conjunto de parámetros de interacción binaria que permita predecir de manera confiable el comportamiento de equilibrio de fases vapor-líquido y líquido-líquido. Se reportan los resultados obtenidos de la aplicación de dicho modelo termodinámico así como el comparativo con respecto a los enfoques convencionales para el procesamiento de este tipo de problemas termodinámicos.

Referencias

1 F. Barr-David, B. F. Dodge, "Vapor-Liquid Equilibrium at High Pressures. The Systems Ethanol-Water and 2-Propanol-Water", J. Chem. Eng. Data, Vol. 4, 2, 1959, pp. 107-121.