



ESTUDIO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA EN ESTADO ESTACIONARIO CON
AGITACIÓN DEL SISTEMA AGUA - ALCOHOL POLIVINÍLICO A TRAVÉS DE
UNA CELDA DE ULTRAFILTRACIÓN ASISTIDA POR POLÍMEROS (PEUF) QUE
UTILIZA UNA MEMBRANA DE POLIETERSULFONA

JOHNNY FERNANDO BENÍTEZ CANCEMANCE

LAURA CATALINA LEMOS VIDARTE

TRABAJO DE GRADO

UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
PROGRAMA ACADÉMICO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTIAGO DE CALI, 2025



ESTUDIO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA EN ESTADO ESTACIONARIO CON
AGITACIÓN DEL SISTEMA AGUA - ALCOHOL POLIVINÍLICO A TRAVÉS DE
UNA CELDA DE ULTRAFILTRACIÓN ASISTIDA POR POLÍMEROS (PEUF) QUE
UTILIZA UNA MEMBRANA DE POLIETERSULFONA

JOHNNY FERNANDO BENÍTEZ CANCEMANCE

LAURA CATALINA LEMOS VIDARTE

TRABAJO DE GRADO

DIRECTOR: JOSÉ SEBASTIÁN LÓPEZ VÉLEZ, M.Sc, Ph.D
INGENIERO QUÍMICO

GRUPO DE INVESTIGACIÓN EN SISTEMAS COMPLEJOS ADAPTATIVOS,
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA DE LA UNIVERSIDAD DEL VALLE

CODIRECTOR: MANUEL SALVADOR PALENCIA LUNA, Ph.D
QUÍMICO
GI-CAT, DEPARTAMENTO DE QUÍMICA,
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS DE LA UNIVERSIDAD DEL VALLE

UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
PROGRAMA ACADÉMICO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTIAGO DE CALI, 2025

TABLA DE CONTENIDOS

1.	RESUMEN.....	8
2.	INTRODUCCIÓN	9
3.	MARCO TEÓRICO	12
3.1.	MARCO CONCEPTUAL.....	15
3.1.1.	Ultrafiltración	15
3.1.2.	Polivinil Alcohol (PVA).....	15
3.1.3.	Coeficiente de transferencia de masa	15
3.1.4.	Redes Neuronales Artificiales (RNA).....	16
3.1.5.	Validación	16
3.1.6.	Despliegue.....	16
3.1.7.	Epocas	17
3.1.8.	Sobreajuste	17
3.1.9.	Regularización.....	17
3.1.10.	Parámetros de escalado PS_{in} y PS_{out}	17
3.1.11.	Validación cruzada $k-fold$	18
3.2.	ANTECEDENTES.....	18
4.	OBJETIVOS	20
4.1.	OBJETIVO GENERAL	20
4.2.	OBJETIVOS ESPECIFICIOS.....	20
5.	METODOLOGÍA	21
5.1.	DISEÑO DE MATRIZ EXPERIMENTAL	21
5.2.	PREPARACIÓN DE SOLUCIONES DE POLIVINIL ALCOHOL.....	22
5.2.1.	Proceso de disolución del polímero.....	23
5.3.	MONTAJE DEL SISTEMA DE ULTRAFILTRACIÓN.....	23
5.4.	ORGANIZACIÓN Y ESTRUCTURACIÓN INTEGRAL DE LA BASE DE DATOS.....	25
5.5.	CONSIDERACIONES PARA EL CALCULO TEÓRICO DE LA DENSIDAD Y VISCOSIDAD.....	25
5.5.1.	Características del PVA	26
5.6.	CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LA SOLUCIÓN.....	26
5.6.1.	Modelo empírico de viscosidad relativa.....	26
5.6.2.	Viscosidad dinámica de la solución (η_{sol})	26
5.7.	CÁLCULO DE LA DENSIDAD DE LA SOLUCIÓN.....	27
5.7.1.	Fracciones másicas de los componentes (.....	27

5.7.2. Modelo de Sánchez-Lacombe	27
5.8. CÁLCULO DE DIFUSIVIDADES	27
5.8.1. Cálculo de la difusividad ideal (D_{12}).....	28
5.8.2. Corrección para la difusividad efectiva (D_{12})	28
5.9. CALCULO TEÓRICO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA (k_{teo})... 29	
5.9.1. Número de Sherwood (Sh).....	29
5.9.2. Número de Reynolds (Re).....	29
5.9.3. Número de Schmidt (Sc).....	30
5.10. CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA (K_{EXP})	31
5.10.1. Determinación del exponente Reynolds (m).	32
5.10.2. Determinación del exponente de Schmidt (n) y la Constante (c).....	32
5.11. IMPLEMENTACIÓN MODELO DE RED NEURONAL PARA LA PREDICCIÓN DE FLUX	34
5.11.1. Carga y preparación de Datos	36
5.11.2. Normalización de datos, configuración y entrenamiento con validación cruzada K-Fold.	38
5.11.3. Evaluación y visualización del rendimiento de la red neuronal	39
5.11.4. Comparación con la metodología de correlación empírica	40
6. RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	41
6.1. CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DEL FLUX EN ULTRAFILTRACIÓN	41
6.1.1. Comportamiento del flux de solvente antes de ultrafiltración.....	42
6.2. PROPIEDADES FISCOQUÍMICAS DE LAS SOLUCIONES DE PVA	44
6.3. CÁLCULO DE DIFUSIVIDADES	44
6.4. COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA (K_{TEO} Y K_{EXP}) Y MODELO DE CORRELACIONES.....	45
6.5. AJUSTE EXPERIMENTAL DE LA CORRELACIÓN DE SHERWOOD.....	47
6.6. MODELADO PREDICTIVO CON REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA).....	50
6.6.1. Arquitectura y entrenamiento del modelo RNA.....	50
6.6.2. Resultados de datos experimentales vs datos predichos.....	51
6.6.3. Análisis de regresión entre los datos experimentales y los datos predichos	53
<i>Tabla 6. Resumen del proceso de entrenamiento de la red neuronal artificial.</i>	54
6.7. INTERPRETACIÓN TÉCNICA DEL DESEMPEÑO DEL MODELO	54
7. CONCLUSIONES	55
8. AGRADECIMIENTOS	57
9. REFERENCIAS.....	58

10. APÉNDICES.....	64
Apéndice A. Medición de densidad y viscosidad para las soluciones de PVA.....	64
Tabla 7. Toma de muestras para soluciones de 60,80, 100 y 120 mmolar con diferentes corridas para calcular de forma experimental medidas como la densidad y viscosidad	64
Apéndice B. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 60mmolar.	65
<i>Tabla 8. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar</i>	65
<i>Tabla 9. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar.</i>	66
Apéndice C. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 80mmolar.	67
<i>Tabla 10</i>	67
Tabla 11. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 80 mmolar	67
Apéndice D. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 100mmolar....	68
Tabla 12. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar.	68
<i>Tabla 13. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar</i>	68
Apéndice E. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.	69
<i>Tabla 14. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.</i>	69
Apéndice F. Experimentación con las soluciones de PVA a distintas concentraciones.....	70
Tabla 18. Permeada con concentración de 100 mmolar.....	71
Tabla 19. Permeada con concentración de 120 mmolar.....	71

Listado de Figuras

Figura 1. Montaje del sistema tanque-reservorio-celda para el proceso de ultrafiltración P&D	24
Figura 2. Montaje del sistema tanque-reservorio-celda para el proceso de ultrafiltración	25
Figura 3. Esquematación de la arquitectura de la red neuronal artificial.	35
Figura 4. Flux vs Concentración de PVA a diferentes velocidades de agitación.....	41
Figura 5. Comportamiento del flux antes de iniciar la ultrafiltración	43
Figura 6. Comportamiento del flux después de la ultrafiltración	44
Figura 7. comparación entre valores de coeficientes de transferencia teórico y experimental.	47
Figura 8. Primera linealización entre el $\ln (Sh)$ vs $\ln (Re)$ para determinar el coeficiente de m de Re con datos experimentales.	48
Figura 9. Segunda linealización entre el $\ln (Sh/Re^m)$ vs $\ln (Sc)$ para determinar el coeficiente de n de Sc y la constante c, después de conocer el valor de m.	49
Figura 10. Curva de desempeño del entrenamiento de la red.....	51
Figura 11. Comparación de datos experimentales frente a los predichos.	52
Figura 12. Ajuste lineal del modelo predictivo para con coeficiente de correlación.	53

Lista de Tablas

Tabla 1. Matriz experimental base para cada corrida y concentración respectiva.....	21
Tabla 2. valores de masa de PVA para cada concentración	23
Tabla 3. Esquematización de la red neuronal.	35
Tabla 4. Difusividades obtenidas en función de la concentración de PVA.	44
Tabla 5. Resultados obtenidos de los coeficientes a partir de la doble linealización.	48
Tabla 6. Resumen del proceso de entrenamiento de la red neuronal artificial.	54
Tabla 7. Toma de muestras para soluciones de 60,80, 100 y 120 mmolar con diferentes corridas para calcular de forma experimental medidas como la densidad y viscosidad.....	63
Tabla 8. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar.	64
Tabla 9. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar.	65
Tabla 10. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 80 mmolar.	66
Tabla 11. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 80 mmolar	66
Tabla 12. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar.	67
Tabla 13. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar.	67
Tabla 14. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.	68
Tabla 15. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.	68
Tabla 16. Permeada con concentración de 60 mmolar	69
Tabla 17. Permeada con concentración de 80 mmolar.	69
Tabla 18. Permeada con concentración de 100 mmolar	70
Tabla 19. Permeada con concentración de 120 mmolar.	70

1. RESUMEN.

En este trabajo, se determinaron experimental y teóricamente los coeficientes de transferencia de masa del agua en un sistema de ultrafiltración asistida por polímeros (PEUF), usando una membrana de polietersulfona y alcohol polivinílico (PVA) como polímero modelo. Se evaluaron cuatro concentraciones de PVA (60, 80, 100 y 120 mM) y cuatro velocidades de agitación (150, 250, 350 y 450 RPM), observando que el aumento de PVA reduce el flujo por mayor viscosidad y formación de una capa límite, mientras que la agitación incrementa el flujo al disminuir dicha capa, aunque este efecto es menor a altas concentraciones de PVA.

Teóricamente, se aplicó una correlación basada en los números de Sherwood, Reynolds y Schmidt para estimar el coeficiente de transferencia de masa, la cual mostró buena concordancia con los datos experimentales a bajas concentraciones de PVA, pero limitaciones a concentraciones elevadas. Además, se implementó una red neuronal artificial para predecir el coeficiente experimental de transferencia de masa, logrando un error cuadrático medio (MSE) de 1.12×10^{-6} y un $R^2 > 0.95$, lo que evidencia su utilidad para describir sistemas complejos, aunque su alcance se limitó a la predicción de datos experimentales y no al ajuste de la correlación teórica.

Palabras Clave: *flux, PVA, PES, PEUF, transferencia de masa, red neuronal.*

2. INTRODUCCIÓN

La ultrafiltración (UF) ha surgido como una técnica clave en los procesos de separación, destacándose por su capacidad para purificar y concentrar soluciones acuosas, especialmente en aplicaciones de tratamiento de agua y recuperación de compuestos valiosos (Mahendran et al., 2022). Este proceso se basa en la utilización de membranas semipermeables que permiten el paso de moléculas de menor tamaño mientras retienen aquellas de mayor peso molecular. En las últimas décadas, la ultrafiltración ha evolucionado significativamente, ampliando su uso a campos como la biotecnología, la industria alimentaria y la recuperación de metales pesados (Huang & Feng, 2019).

El desarrollo de la ultrafiltración asistida por polímeros (Polymer Enhanced Ultrafiltración, PEUF) representa un avance innovador en esta área. Esta técnica involucra la adición de polímeros solubles en agua al sistema de ultrafiltración, con el objetivo de mejorar la selectividad y eficiencia en la separación de iones metálicos y otros contaminantes. El alcohol polivinílico (PVA) se destaca como uno de los polímeros más usados para esta finalidad debido a su capacidad de formar complejos macromoleculares con diversas especies químicas, facilitando su retención (Aroua et al., 2007; Cojocaru & Zakrzewska-Trznadel, 2009) .

A pesar de las ventajas del PEUF, aún existen desafíos en la optimización de las condiciones de operación y la velocidad de agitación, factores que influyen directamente en los coeficientes de transferencia de masa y, por ende, en el rendimiento del proceso (Dasgupta et al., 2017). La introducción de técnicas avanzadas, como las redes neuronales artificiales (Artificial Neural Networks, RNA), ha demostrado ser prometedora para la modelación y optimización de sistemas de ultrafiltración, permitiendo una mejor comprensión y predicción de los parámetros del proceso (Clemente et al., 2023).

La inteligencia artificial (IA) ha transformado el panorama de la ingeniería química, marcando una era innovadora al redefinir las metodologías tradicionales y beneficiando ampliamente la ingeniería de procesos (Namdeti, 2023; Ren, 2024; Wu et al., 2023). Estas tecnologías proporcionan nuevas herramientas para estudiar y comprender el comportamiento en sistemas complejos, permitiendo analizar patrones en grandes conjuntos de datos y así brindar apoyo a científicos e ingenieros en el análisis y la optimización de sistemas físicos (Wu et al., 2023). Las aplicaciones de la IA en ingeniería química se basan

principalmente en tres mecanismos, el modelado basado en datos, que utiliza algoritmos de aprendizaje automático (ML) para extraer patrones; los sistemas basados en conocimiento previo, que incorporan la experiencia del dominio y la comprensión de primeros principios; y los enfoques híbridos, que combinan sinérgicamente ambos para reducir la brecha entre la simulación y los datos experimentales (Ren, 2024; Wu et al., 2023). Un avance notable es el aprendizaje profundo guiado por mesociencia (MGDL), que integra principios físicos y conocimientos mesoscópicos en arquitecturas de aprendizaje profundo para mejorar la precisión y la interpretabilidad de los modelos en sistemas químicos complejos (Ren, 2024). Esta integración ha permitido a los sectores industriales obtener información novedosa sobre sus procesos de producción y mejorar la eficiencia, al tiempo que potencia las habilidades de resolución de problemas, el razonamiento lógico y la creatividad de los ingenieros (Wu et al., 2023).

La IA en ingeniería se desarrolla a través de diversas categorías de aprendizaje automático aplicadas a tareas de modelado y optimización. El aprendizaje supervisado se emplea para crear modelos predictivos, como la estimación de coeficientes de transferencia masa (Di Caprio et al., 2023b; Wu et al., 2023) o la predicción de coeficientes de actividad mediante redes neuronales (Carranza-Abaid et al., 2023; Wu et al., 2023). El aprendizaje no supervisado se utiliza para modelar, identificando correlaciones o variables latentes, como lo sería en la predicción de fallas en procesos químicos (Zheng & Zhao, 2020; Wu et al., 2023) o el diseño de nuevas membranas (Zou et al., 2023; Wu et al., 2023). Para tareas de control, el aprendizaje por refuerzo optimiza el comportamiento del sistema mediante prueba y error, logrando reducciones de costos en procesos (Elmaz et al., 2023; Wu et al., 2023) o desarrollando nuevas configuraciones de plantas (Gao et al., 2023; Wu et al., 2023). La IA se ha aplicado ampliamente en la predicción de propiedades de estructura, diseño y descubrimiento de materiales incluyendo solventes eutécticos profundos y catalizadores heterogéneos, también en la predicción de reacciones, síntesis de diagramas de flujo, intensificación de procesos, diseño de productos químicos y control y optimización de procesos en tiempo real (Namdeti, 2023; Ren, 2024; Wu et al., 2023). A pesar de los inmensos beneficios, persisten desafíos como la escasez de datos de alta calidad, la necesidad de métricas de validación robustas y la crucial necesidad de garantizar la interpretabilidad y transparencia de los modelos, a menudo considerados "cajas negras" (Namdeti, 2023; Ren, 2024).

En este contexto, el presente estudio se enfoca en la determinación experimental y teórica de los coeficientes de transferencia de masa en un sistema de ultrafiltración asistido por PVA, utilizando membranas de polietersulfona (PES). El objetivo principal es evaluar cómo la concentración de PVA y la velocidad de agitación afectan el flujo de agua a través de la membrana bajo condiciones de estado estacionario. Para ello, se utilizará un enfoque híbrido que combina el ajuste mediante correlaciones de números adimensionales—como Sherwood, Reynolds y Schmidt—con técnicas de inteligencia artificial para optimizar los modelos predictivos de transferencia de masa. Estas correlaciones permiten describir y predecir el comportamiento de la transferencia de masa en función de las propiedades del sistema y las condiciones hidrodinámicas, siendo ampliamente utilizadas en la literatura para el análisis de procesos de ultrafiltración.

Los resultados de esta investigación pueden contribuir al entendimiento de los procesos de ultrafiltración asistida por polímeros, así como proporcionar herramientas prácticas para el diseño de sistemas de separación más eficientes y sostenibles. Esto es relevante en el contexto actual, donde la industria enfrenta una presión creciente para desarrollar tecnologías de bajo impacto ambiental y alta eficiencia en el uso de recursos (Han et al., 2007).

3. MARCO TEÓRICO

La ultrafiltración (UF) es una técnica ampliamente utilizada en sistemas de separación, y su desarrollo ha sido impulsado tanto por su efectividad como por su bajo consumo de energía en comparación con otros métodos. Este proceso involucra membranas que, bajo una presión moderada, permiten el paso de ciertas partículas y retienen otras más grandes, como proteínas y coloides (Mahendran et al., 2022). A diferencia de métodos tradicionales como la destilación o la filtración por gravedad, la ultrafiltración opera en un rango de tamaño de poro que permite el tratamiento de soluciones más complejas sin la necesidad de fases de evaporación, lo que la convierte en una opción ideal para aplicaciones en las industrias química, biotecnológica y de tratamiento de aguas residuales (Huang & Feng, 2019).

En sus aplicaciones industriales, la UF ha mostrado ventajas en la reducción de contaminantes y en la recuperación de componentes valiosos, lo cual es crucial para la sostenibilidad y eficiencia de los procesos industriales modernos (McCabe, 2007). A través de la retención de partículas mayores, se puede obtener un permeado con alto grado de pureza, lo que ha impulsado el uso de la ultrafiltración en áreas de purificación de agua, separación de biomoléculas y procesamiento de alimentos. No obstante, el desafío del ensuciamiento de membranas sigue siendo un área de investigación importante, ya que este fenómeno reduce el flujo y afecta la eficiencia de la separación, además de acortar la vida útil de las membranas (Han et al., 2007).

La ultrafiltración asistida por polímeros (PEUF) es una técnica que integra polímeros hidrosolubles para mejorar el rendimiento de la ultrafiltración tradicional. En esta técnica, el uso de polímeros como el polivinil alcohol (PVA) permite la formación de complejos con ciertos contaminantes, aumentando así la capacidad de la membrana para retener partículas específicas, como metales pesados y contaminantes orgánicos (Cojocar & Zakrzewska-Trznadel, 2009). Este proceso es particularmente útil en la purificación de aguas, donde los polímeros ayudan a "capturar" iones metálicos y moléculas orgánicas que podrían atravesar una membrana convencional.

La PEUF se distingue por su alta selectividad y capacidad de adaptación, ya que permite la variación de polímeros para objetivos específicos sin modificar la membrana física. Además, el uso de polímeros ha demostrado ser eficaz para reducir el ensuciamiento de las

membranas, ya que forman una capa protectora que minimiza la adsorción de partículas en la superficie de la membrana, extendiendo su durabilidad y mejorando su desempeño (Aroua et al., 2007).

La transferencia de masa es un proceso importante en los sistemas de separación y se refiere a la movilidad de solutos en una solución o mezcla bajo determinadas fuerzas. En los sistemas de ultrafiltración, la eficiencia de la transferencia de masa depende de factores como la viscosidad, la presión, la temperatura y la velocidad de agitación. En particular, los sistemas de ultrafiltración asistida por polímeros presentan desafíos específicos, ya que los polímeros utilizados pueden modificar las propiedades fisicoquímicas de la solución (Clemente et al., 2023).

El flujo de solutos y solventes a través de una membrana puede modelarse a través de ecuaciones basadas en números adimensionales, como los números de Reynolds (Re) y Schmidt (Sc), los cuales sirven para estimar el coeficiente de transferencia de masa y optimizar los parámetros de operación del sistema (Dasgupta et al., 2017). Estos modelos permiten evaluar el efecto de la concentración de polímero y la velocidad de agitación sobre el flujo de agua.

La inteligencia artificial, y en especial las redes neuronales artificiales (RNA), ha encontrado un campo de aplicación robusto en la modelación y optimización de sistemas de ultrafiltración. Las RNA pueden "aprender" patrones complejos a partir de grandes conjuntos de datos, lo cual es beneficioso en sistemas con relaciones no lineales difíciles de modelar mediante ecuaciones convencionales (Rani et al., 2021). En el contexto de la PEUF, las RNA permiten predecir el comportamiento del flujo de permeado en función de variables como la concentración de polímero y la velocidad de agitación, generando modelos precisos y adaptativos que mejoran el rendimiento del proceso y minimizan la necesidad de ajustes experimentales (Dasgupta et al., 2017).

En el campo del machine learning la denominada *regla del 50* constituye una recomendación empírica al momento de determinar el tamaño mínimo adecuado de los conjuntos de datos de entrenamiento en aplicaciones que involucran Redes Neuronales Artificiales (RNA). Esta regla sugiere que el tamaño de la muestra debe ser al menos 50 veces mayor que el número de parámetros ajustables de la red neuronal. Dicha guía ha sido adoptada como una alternativa más conservadora y fiable frente a la tradicional *regla del 10*, la cual proponía un

tamaño de muestra equivalente a 10 veces el número parámetros ajustables, pero que ha demostrado ser insuficiente en múltiples contextos. la *regla del 10* tiende a subestimar los requerimientos mínimos de datos. Alwosheel et al. (2018) realizaron estudios donde empíricamente evidencian mejoras significativas en el rendimiento predictivo de las RNA al aumentar el tamaño de los conjuntos de datos. En sus experimentos, encontraron que se requieren factores entre 22 y 54 en datos sintéticos, y entre 27 y 31 en datos reales, para lograr un desempeño robusto y confiable.

Estas observaciones han sido reafirmadas y extendidas por investigaciones más recientes en otros campos. Zantvoort et al. (2024), en un estudio enfocado en intervenciones digitales para la salud mental (*Digital Mental Health Interventions*), concluyeron que los conjuntos de datos pequeños ($N \leq 300$) tienden a sobreestimar la capacidad predictiva de modelos en las redes neuronales, además de presentar una alta variabilidad en los resultados de validación cruzada. Aunque un tamaño de muestra de $N = 500$ mostró cierta reducción del sobreajuste, los investigadores observaron que la convergencia del rendimiento predictivo no se alcanzó sino hasta tamaños de muestra de entre $N = 750$ y $N = 1500$, particularmente en modelos complejos y con alta dimensionalidad.

3.1. MARCO CONCEPTUAL

3.1.1. Ultrafiltración

La ultrafiltración es un proceso de separación por membranas que funciona mediante la aplicación de una presión transmembrana. Este concepto se aplica en el tratamiento de soluciones acuosas, donde los solutos de mayor tamaño molecular son retenidos mientras que el solvente y los solutos de menor tamaño atraviesan la membrana. La eficiencia de este proceso depende de variables como el tamaño de poro de la membrana, la presión y las propiedades fisicoquímicas de la solución tratada (McCabe, 2007).

3.1.2. Polivinil Alcohol (PVA)

El polivinil alcohol (PVA) es un polímero sintético hidrosoluble ampliamente utilizado en ultrafiltración asistida por polímeros debido a su capacidad para formar complejos con iones metálicos y compuestos orgánicos, facilitando la retención de contaminantes en procesos de separación y tratamiento de aguas (Cojocarú & Zakrzewska-Trznadel, 2009). Su fórmula química general es $(C_2H_4O)_n$ y la unidad repetitiva es $[-CH_2-CH(OH)-]_n$, donde el grupo hidroxilo (-OH) le confiere su carácter hidrofílico y solubilidad en agua (Tecnología de los Plásticos, s.f.; Alquera, 2021). El PVA utilizado en este estudio es de peso molecular medio, con un valor típico de 44.05 g/mol para la unidad monomérica, aunque el peso molecular del polímero puede variar entre 20,000 y 400,000 g/mol según el grado de polimerización y el fabricante (Huang & Feng, 2019; Alquera, 2021). Además, el PVA empleado es 98-99% hidrolizado, lo que le otorga alta solubilidad en agua y baja toxicidad, presentándose como un sólido blanco, inodoro, disponible en forma de gránulos o polvo, con un punto de fusión aproximado de 230°C y una densidad aparente de 610–670 kg/m³ (HPMC Top, s.f.; Alquera, 2021).

3.1.3. Coeficiente de transferencia de masa

El coeficiente de transferencia de masa, representado habitualmente como k , es un parámetro importante en la ingeniería de procesos, ya que cuantifica la velocidad con la que un soluto se transfiere entre dos fases o a través de una interfaz, bajo la influencia de un gradiente de concentración (Dasgupta, Sikder, & Mandal, 2017).

donde k se expresa típicamente en unidades de m/s o similares, dependiendo del sistema considerado (Huang & Feng, 2019). Este coeficiente no describe procesos internos de la membrana, sino que representa la eficiencia global del transporte de masa desde el seno de

la solución hasta la interfaz de la membrana, considerando principalmente las resistencias externas al paso del soluto (McCabe, 2007). En sistemas de ultrafiltración asistida por polímeros, el valor de k puede verse afectado por factores como la viscosidad, la agitación y la presencia de capas límite, pero no implica mecanismos de transporte dentro de la membrana misma (Dasgupta et al., 2017).

Para su determinación y análisis, el coeficiente de transferencia de masa suele correlacionarse con números adimensionales como Sherwood, Reynolds y Schmidt, que permiten comparar y predecir el comportamiento en distintos regímenes de flujo y condiciones experimentales (Simon et al., 2000). La cuantificación precisa de k es importante para el diseño y optimización de equipos de separación, ya que permite estimar la eficiencia del proceso y las condiciones operativas óptimas (McCabe, 2007). En resumen, el coeficiente de transferencia de masa es una medida robusta y global de la eficiencia del transporte de solutos en sistemas de separación, y su interpretación debe centrarse en los fenómenos de frontera y no en los procesos internos de la membrana (Huang & Feng, 2019).

3.1.4. Redes Neuronales Artificiales (RNA)

Las redes neuronales artificiales (RNA) son modelos computacionales inspirados en el cerebro humano que permiten analizar patrones complejos en sistemas multivariables. En la PEUF, las RNA se aplican para optimizar y predecir el comportamiento del flujo de permeado, mejorando la eficiencia del sistema al reducir la necesidad de ensayos experimentales (Rani et al., 2021).

3.1.5. Validación

La validación en el contexto de modelos predictivos y redes neuronales consiste en evaluar el desempeño del modelo utilizando un conjunto de datos independiente al de entrenamiento. Este procedimiento permite estimar la capacidad de generalización del modelo, es decir, su habilidad para realizar predicciones precisas sobre datos no vistos previamente. Normalmente, los datos se dividen en conjuntos de entrenamiento, validación y prueba; el conjunto de validación se utiliza para ajustar hiperparámetros y evitar el sobreajuste del modelo (Tecnología Bi, 2025; Stack Overflow, 2023).

3.1.6. Despliegue

El despliegue se refiere al proceso de implementar el modelo entrenado y validado en un entorno real o productivo, donde se utiliza para realizar predicciones sobre nuevos datos operativos. En el ámbito de la ingeniería química, esto implica aplicar el modelo para

optimizar procesos, monitorear variables o tomar decisiones en tiempo real, asegurando que el modelo mantenga su rendimiento fuera del entorno de desarrollo (PredikData, 2024).

3.1.7.Epocas

En el entrenamiento de redes neuronales, una época corresponde a un ciclo completo en el que el modelo procesa todo el conjunto de datos de entrenamiento una vez. Durante cada época, los parámetros internos del modelo se actualizan para minimizar el error en las predicciones. El número de épocas es un parámetro crítico: muy pocas pueden llevar a un modelo subajustado, mientras que demasiadas pueden causar sobreajuste (EITCA, 2023).

3.1.8.Sobreajuste

El sobreajuste ocurre cuando un modelo aprende excesivamente los detalles y el ruido del conjunto de datos de entrenamiento, perdiendo capacidad de generalización y mostrando un rendimiento deficiente en datos nuevos. Este fenómeno es especialmente relevante en redes neuronales, donde la alta capacidad de ajuste puede llevar a modelos que no son útiles en la práctica si no se controla adecuadamente (AWS, 2022).

3.1.9.Regularización

La regularización es un conjunto de técnicas diseñadas para reducir el sobreajuste en modelos de machine learning, incluyendo redes neuronales. Estas técnicas introducen penalizaciones o restricciones durante el entrenamiento, favoreciendo modelos más simples que generalicen mejor (IBM, 2023).

3.1.10. Parámetros de escalado *PS_in* y *PS_out*

Los parámetros de escalado *PS_in* y *PS_out*, corresponden a las estructuras generadas durante el proceso de normalización de los datos de entrada y salida, respectivamente. Estos parámetros almacenan la información necesaria para transformar los valores originales de las variables (como concentración de PVA y velocidad de agitación en el caso de las entradas, y flux experimental en el caso de la salida) a un rango estándar, generalmente entre -1 y 1, lo que facilita el entrenamiento de la red neuronal y mejora su desempeño predictivo (Demuth et al., 2014; Haykin, 2009). Durante la fase de predicción, *PS_out* permite revertir esta transformación (desnormalización) y devolver las predicciones a las unidades originales de los experimentos, asegurando así que los resultados obtenidos por la red sean interpretables y comparables con los datos reales (MathWorks, 2024a)

3.1.11. Validación cruzada *k-fold*

La validación cruzada K-fold es una técnica estadística utilizada para estimar la capacidad de generalización de un modelo de aprendizaje automático, especialmente cuando se dispone de un conjunto de datos limitado. Este método consiste en dividir aleatoriamente el conjunto de datos en K subconjuntos de tamaño similar, denominados “*folds*” o pliegues. En cada iteración, uno de estos pliegues se utiliza como conjunto de validación, mientras que los K-1 restantes se emplean para entrenar el modelo. El proceso se repite K veces, asegurando que cada pliegue actúe como conjunto de prueba una vez. Finalmente, las métricas de desempeño obtenidas en cada iteración se promedian, proporcionando una estimación más robusta y menos dependiente de una única partición de los datos, lo que reduce el riesgo de sobreajuste y permite una evaluación más confiable del modelo (James et al., 2013; Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009).

3.2. ANTECEDENTES.

La PEUF enfrenta limitaciones relacionadas con la selección de polímeros y su estabilidad en el sistema, los estudios de (Aroua et al., 2007) y Huang & Feng (2019) sugieren que algunos polímeros pueden degradarse bajo ciertas condiciones de operación, lo que disminuye su efectividad a largo plazo. Además, la concentración óptima de polímero es un factor que afecta directamente el costo y eficiencia del proceso, ya que concentraciones elevadas aumentan la viscosidad de la solución, dificultando la transferencia de masa y generando requerimientos energéticos adicionales (Mahendran et al., 2022). Estos estudios destacan la necesidad de desarrollar polímeros con mayor estabilidad química y propiedades específicas que mejoren la interacción con los contaminantes sin impactar significativamente el flujo de permeado.

La eficiencia de los sistemas de PEUF depende en gran medida de la transferencia de masa, que es influenciada por factores como la velocidad de agitación y la concentración de polímeros. El fenómeno de la polarización de concentración, en el que los solutos se acumulan cerca de la superficie de la membrana, limita la permeabilidad y reduce la eficiencia del proceso (Dasgupta et al., 2017). Los estudios han demostrado que la agitación adecuada puede reducir esta polarización y mejorar el flujo, pero un aumento excesivo en la velocidad de agitación también puede desestabilizar los complejos formados por el polímero, disminuyendo la selectividad (Simon et al., 2000).

En investigaciones recientes, Clemente et al. (2023) analizaron cómo la concentración de PVA afecta la transferencia de masa, observando que concentraciones elevadas incrementan la viscosidad del sistema, lo cual impacta negativamente en la eficiencia de separación. Aunque estos estudios contribuyen a una mejor comprensión de los efectos de la agitación y concentración de polímeros, también señalan la falta de modelos predictivos robustos que permitan anticipar estos efectos en distintas condiciones operativas. Esto revela una oportunidad para optimizar la PEUF mediante técnicas avanzadas de modelado y control de variables.

Las redes neuronales artificiales (RNA) se han convertido en una herramienta poderosa para modelar y optimizar sistemas de separación en ingeniería química, especialmente en procesos donde la relación entre variables es compleja y no lineal. Desde la última década, múltiples investigaciones han demostrado el potencial de las RNA para predecir y optimizar la eficiencia en sistemas de PEUF, ya que estas redes pueden aprender de conjuntos de datos experimentales y generar modelos predictivos que ayudan a ajustar las condiciones operativas (Dasgupta et al., 2017).

4. OBJETIVOS

4.1. OBJETIVO GENERAL

Evaluar el efecto de la concentración de alcohol polivinílico (PVA) y de la velocidad de agitación en la transferencia de masa y en el flujo de agua a través de una membrana de polietersulfona en un sistema de ultrafiltración asistida por polímeros (PEUF), utilizando tanto correlaciones adimensionales (Sherwood, Reynolds y Schmidt) como modelos basados en redes neuronales artificiales para optimizar la predicción del comportamiento del proceso.

4.2. OBJETIVOS ESPECIFICIOS

1. Diseñar y ejecutar un plan experimental bajo un diseño factorial 4^2 , variando concentración de PVA y velocidad de agitación, para medir el flujo de agua en condiciones de estado estacionario.
2. Determinar experimentalmente los coeficientes de transferencia de masa y calcular los números adimensionales de Reynolds, Schmidt y Sherwood correspondientes para cada condición operativa.
3. Ajustar y validar correlaciones empíricas de transferencia de masa en función de los números adimensionales, evaluando la sensibilidad de los parámetros característicos del sistema.
4. Implementar modelos predictivos de redes neuronales artificiales (RNA) con las variables de entrada (concentración de PVA y velocidad de agitación) y el flujo de permeado como salida, comparando su desempeño frente a los modelos tradicionales.
5. Analizar comparativamente los resultados de las correlaciones hidrodinámicas y de las redes neuronales, identificando las ventajas y limitaciones de cada enfoque en la predicción del comportamiento del sistema de ultrafiltración.

5. METODOLOGÍA

5.1. DISEÑO DE MATRIZ EXPERIMENTAL

Se diseñó una matriz experimental con el objetivo de evaluar el comportamiento del sistema de ultrafiltración asistida por polímeros (PEUF) bajo condiciones controladas de concentración de alcohol polivinílico (PVA) y velocidad de agitación. Esta matriz permitió organizar y planificar los ensayos necesarios para analizar la transferencia de masa y el flujo de permeado (flux) en función de las variables seleccionadas. Por separado, se determinaron experimentalmente las propiedades fisicoquímicas de las soluciones, como la densidad y la viscosidad, para cada condición evaluada.

Tabla 1. Matriz experimental base para cada corrida y concentración respectiva.

Run Order	Concentración de PVA (mmol/L)	Velocidad de agitación (RPM)
1	60	150
2	80	150
3	100	150
4	120	150
5	60	250
6	80	250
7	100	250
8	120	250
9	60	350
10	80	350
11	100	350
12	120	350
13	60	450
14	80	450
15	100	450
16	120	450

La matriz experimental se construyó bajo un diseño factorial completo 4^2 , considerando dos variables independientes: Concentración de PVA (60, 80, 100 y 120 mmol/L) y Velocidad de agitación (150, 250, 350 y 450 RPM) Esto dio lugar a 16 combinaciones únicas las cuales se encuentran registradas en la Tabla 1 , cada una replicada en tres corridas experimentales para asegurar la confiabilidad de los datos. La estructura de la matriz permite evaluar tanto los efectos individuales como las posibles interacciones entre las variables.

El PVA, al ser un polímero hidrosoluble, modifica significativamente las propiedades reológicas de la solución. A medida que aumenta su concentración se esperará que (Cojocarú & Zakrzewska-Trznadel , 2009)

La agitación mecánica influye directamente en el espesor de la capa límite de concentración. A mayor velocidad se espera que (Cojocarú & Zakrzewska-Trznadel , 2009):

- Se mejora la homogeneización de la solución.
- Se reduce el gradiente de concentración cerca de la membrana.
- Se incrementa el coeficiente de transferencia de masa, favoreciendo el flujo.
- No obstante, velocidades excesivas pueden inducir inestabilidad en los complejos formados entre el PVA y los solutos, afectando la selectividad del proceso.

5.2. PREPARACIÓN DE SOLUCIONES DE POLIVINIL ALCOHOL

El polivinil alcohol (PVA) es un polímero hidrosoluble ampliamente utilizado en sistemas de ultrafiltración asistida. Su capacidad para interactuar y formar complejos con iones metálicos y compuestos orgánicos lo convierte en una herramienta eficaz en el tratamiento de aguas y otros procesos de separación. En la PEUF, el PVA se utiliza para facilitar la retención de partículas que de otra manera atravesarían la membrana (Cojocarú & Zakrzewska-Trznadel, 2009). Para la preparación de soluciones de PVA se usó la metodología encontrada en la literatura (Huang & Feng, 2019)

Se usó Alcohol polivinílico, 98-99 % hidrolizado, con peso molecular medio 44.053 g/mol La masa de PVA requerida para las concentraciones específicas se calculó utilizando la Ecuación 1, obteniendo los valores adjuntos en la Tabla 2

$$Masa\ PVA\ (g) = \frac{Concentración(mM) \cdot Volumen\ (mL) \cdot Masa\ molar\ \frac{g}{mol}}{1000} \quad Ec\ 1.$$

Tabla 2. valores de masa de PVA para cada concentración

Concentración Milimolar	Gramos de PVA
60	5.2864
80	4.4053
100	3.5242
120	2.6432

5.2.1. Proceso de disolución del polímero

La preparación de soluciones de PVA requiere el calentamiento del agua a temperaturas elevadas (generalmente entre 75 y 90 °C) para facilitar la disolución completa del polímero, ya que el PVA presenta una tendencia a formar grumos si se añade rápidamente o sin agitación adecuada (Baker, 2012; Peppas & Merrill, 1976). Por ello, se recomienda incorporar el PVA de manera lenta al agua caliente bajo agitación continua, manteniendo la mezcla durante varias horas hasta lograr una solución homogénea (Baker, 2012). Una vez disuelta, la solución debe dejarse enfriar a temperatura ambiente y ajustarse al volumen deseado con agua pura (Peppas & Merrill, 1976). El almacenamiento de las soluciones de PVA en recipientes sellados a temperaturas de refrigeración (4-5 °C) es fundamental para evitar la degradación microbiana y química, así como para mantener la estabilidad y homogeneidad de la solución durante su uso experimental (Baker, 2012; Alquera, 2021)

5.3. MONTAJE DEL SISTEMA DE ULTRAFILTRACIÓN.

El sistema de ultrafiltración se montó utilizando una celda de ultrafiltración equipada con una membrana de polietersulfona (PES). Este procedimiento se basó en configuraciones descritas en estudios previos (Palencia et al., 2009) y según las condiciones de laboratorio.

Para la preparación del sistema, se realizaron los siguientes pasos:

- Se llenó el reservorio con 1 litro de agua Milli-Q y la celda de ultrafiltración con 40 mL de solución de PVA.
- Se conectaron las mangueras de entrada y salida entre el reservorio y la celda, asegurando las conexiones con abrazaderas.

Para la conexión a la fuente de hidrogeno:

- Se conectó la fuente de nitrógeno a la válvula de seguridad y a la entrada de la celda para presurizar el sistema.
- La presión se ajustó utilizando el manómetro del tanque para alcanzar las condiciones deseadas.

Para la operación del sistema:

- Se realizó la agitación del sistema utilizando un agitador magnético.
- Se registro la salida del permeado en un vaso de precipitados para medir el flujo a diferentes velocidades de agitación.
- Durante la operación, se ajustó la presión de nitrógeno según fuera necesario para mantener un flujo constante.

En la Figura 1 y 2 se observa de manera esquemática y fotográficamente el montaje mencionado anteriormente.

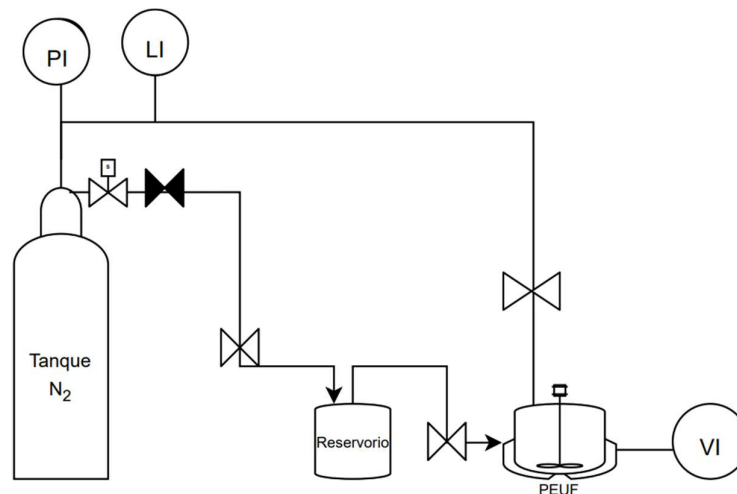


Figura 1. Montaje del sistema tanque-reservorio-celda para el proceso de ultrafiltración P&D

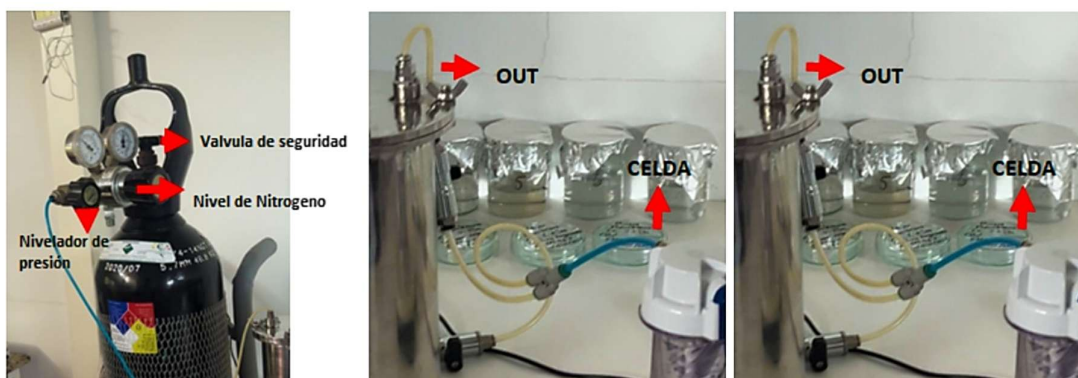


Figura 2. Montaje del sistema tanque-reservorio-celda para el proceso de ultrafiltración

5.4. ORGANIZACIÓN Y ESTRUCTURACIÓN INTEGRAL DE LA BASE DE DATOS.

La recolección de datos experimentales se llevó a cabo mediante un enfoque metódico y detallado, teniendo en cuenta las variables y factores para el análisis del coeficiente de transferencia de masa. Este proceso comenzó con el registro de información en la bitácora de laboratorio, posteriormente la generación de un reporte preliminar utilizando Microsoft Excel. A partir de esto, se creó una base de datos inicial que incluyó los siguientes parámetros clave:

- Concentraciones del Alcohol Polivinílico (PVA) en las soluciones.
- Velocidades de agitación aplicadas.
- Flujos volumétricos y másicos.
- Propiedades fisicoquímicas: densidad (ρ) y viscosidad (μ).

Se llevó a cabo una verificación para asegurar la consistencia de los flujos experimentales registrados. Posteriormente, se organizaron los datos en estructuras matriciales y vectoriales haciendo uso del software *MATLAB R2024A (MATHWORKS®)*, lo que permitió tener de primera mano una observación del comportamiento de los datos.

5.5. CONSIDERACIONES PARA EL CALCULO TEÓRICO DE LA DENSIDAD Y VISCOSIDAD.

Para calcular la densidad y la viscosidad de la solución polimérica de PVA, se midieron directamente estos valores en cada muestra preparada, ya que son la base para la

caracterización fisicoquímica de las soluciones y para la aplicación de los modelos matemáticos empleados en el análisis del sistema.

5.5.1. Características del PVA

- **Peso molecular promedio (M_{PVA}):** El PVA utilizado tiene un peso molecular de 44.05 g/mol (Huang & Feng, 2019)
- **Segundo coeficiente virial (B_{22}):** Este coeficiente describe las interacciones intermoleculares entre las macromoléculas de PVA en solución, siendo importante para realizar ajustes en los cálculos de densidad y viscosidad.

5.6. CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LA SOLUCIÓN.

La viscosidad de una solución polimérica depende de la interacción entre el polímero y el solvente, así como de la concentración del primero. En este estudio, se aplicó un modelo empírico basado en literatura especializada (Soft Matter, 2013), que establece una relación entre la viscosidad relativa (η_{rel}) y la fracción másica del polímero (w_{PVA}) en la solución.

5.6.1. Modelo empírico de viscosidad relativa: La viscosidad relativa está definida mediante la Ecuación 2:

$$\eta_{rel} = 1 + k \cdot w_{PVA} + k' \cdot w_{PVA}^2 \quad \text{Ec 2.}$$

Donde: k y k' son constantes empíricas obtenidas experimentalmente para el sistema PVA-agua.

5.6.2. Viscosidad dinámica de la solución (η_{sol})

A partir de η_{rel} y la viscosidad del agua pura (η_{agua}), esta relación se puede ver descrita en la Ecuación 3.

$$\eta_{sol} = \eta_{rel} \cdot \eta_{agua} \quad \text{Ec3.}$$

Este modelo se aplica para cada concentración específica de PVA (60,80,100,120)mM, generando valores de viscosidad dinámica para las soluciones.

5.7. CÁLCULO DE LA DENSIDAD DE LA SOLUCIÓN.

La densidad de la solución es calculada considerando las fracciones másicas de los componentes (PVA y agua) y utilizando el modelo de ecuaciones de estado de Sánchez-Lacombe (Aroua et al., 2007)

5.7.1. Fracciones másicas de los componentes (w_{PVA} y w_{agua}): La fracción másica de PVA se calcula como en la Ecuación 4.

$$w_{PVA} = \frac{C_{mM} \cdot M_{PVA}}{\rho_{sol}} \quad \text{Ec 4.}$$

Donde:

- C_{mM} : es la concentración en milimolar.
- ρ_{sol} : es la densidad de la solución, calculada iterativamente para cada concentración.
- M_{PVA} : el peso molecular de polímero.

5.7.2. Modelo de Sánchez-Lacombe: Este modelo establece una relación entre la densidad reducida (ρ_r), la presión (P) y la temperatura (T)

$$\rho_r = f(P, T, w_{PVA}) \quad \text{Ec 5.}$$

La variable ρ_r se refiere a la relación de densidad de la solución, la cual se calcula considerando las contribuciones individuales del PVA y el agua en la mezcla. Debido a que la ecuación utilizada es de naturaleza implícita, se emplea el algoritmo “*fsolve*” para encontrar el valor de densidad de la solución (ρ_{sol}) que satisface dicha ecuación. Así, para cada concentración de PVA, el modelo proporciona un valor de densidad que representa las propiedades combinadas del PVA y el agua en solución.

5.8. CÁLCULO DE DIFUSIVIDADES

En esta sección se describen los cálculos para determinar las propiedades de transporte de las moléculas en la solución polimérica de PVA. Los cálculos abarcan tanto la difusividad ideal como la difusividad corregida, que tiene en cuenta la interacción entre el polímero y el solvente.

5.8.1. Cálculo de la difusividad ideal (D_{12})

La difusividad ideal representa la capacidad de las moléculas para difundirse en un medio sin considerar efectos específicos de interacción entre los componentes. Se calcula utilizando la Ecuación 6 de **Stokes-Einstein**:

$$D_{12} = \frac{k_B \cdot T}{6 \pi \cdot \eta \cdot r_1} \quad \text{Ec 6.}$$

Donde:

- k_B es la constante de Boltzmann ($1.38064852 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$).
- T es la temperatura absoluta en Kelvin (298.15 K).
- η es la viscosidad dinámica de la solución (Pa.s)
- r_1 es el radio molecular promedio del PVA ($65 \text{ \AA} = 65 \times 10^{-10} \text{ m}$) (Barsea et al., 2013)

La difusión binaria D_{12} representa la movilidad de las moléculas de PVA en solución y está influenciada principalmente por la viscosidad del medio: a mayor viscosidad, menor será el valor de D_{12} , ya que un entorno más viscoso ofrece mayor resistencia al movimiento molecular. Para cada concentración de PVA, D_{12} se calculó utilizando la ecuación de Stokes-Einstein, en la cual se sustituyeron los valores experimentales de viscosidad (η) obtenidos para cada muestra. De este modo, la disminución de D_{12} con el aumento de la concentración de PVA refleja el efecto directo del incremento de viscosidad sobre la movilidad molecular en la solución (McCabe, Smith, & Harriott, 2007)

5.8.2. Corrección para la difusividad efectiva (D_{12})

La difusividad efectiva incorpora las interacciones entre las moléculas de PVA y el agua en solución, ajustando el valor ideal según un modelo empírico basado en la literatura (*Soft Matter*, 2013).

El modelo corrige D_{12} utilizando una relación exponencial que depende de las fracciones másicas de los componentes y parámetros críticos de densidad, este modelo se presenta en la Ecuación 7.

$$D_{s12} = D_{12} \cdot \exp \left(-\gamma \cdot \frac{\left(\frac{w_{PVA}}{\rho_{PVA}} + \frac{\lambda \cdot w_{agua}}{\rho_{agua}} \right)}{\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_{as,mezcla}} \right)} \right) \quad \text{Ec 7.}$$

Donde:

- D_{12} : Difusividad ideal obtenida previamente (m^2/s).
- γ : Parámetro empírico (0.05).

- λ : Relación de masas molares promedio (0.09072).
- W_{PVA} y W_{Agua} : Fracciones másicas de PVA y agua, respectivamente.
- ρ_{pva} y ρ_{agua} : Densidades críticas del PVA (1293 kg/m³) y el agua (1030 kg/m³).
- ρ : Densidad experimental de la solución calculada previamente (kg/m³).
- $\rho_{as,mezcla}$: Densidad crítica promedio de la mezcla (kg/m³).

5.9. CALCULO TEÓRICO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA (k_{teo})

La metodología presentada por (Simón, 2000) presenta una correlación empírica que describe la transferencia de masa en sistemas de ultrafiltración asistidos por polímeros por agitación mecánica y ultrasonido. En el presente trabajo, se hace uso de dicha correlación para un sistema mecánicamente agitado con el fin de comparar si el modelo propuesto en la literatura se acerca al estimado para nuestro sistema, empleando el número de Sherwood (Sh) como función de los números de Reynolds (Re) y Schmidt (Sc), este se encuentra descrito en la Ecuación 8:

$$Sh = 0.87 \cdot Re^{0.47} \cdot Sc^{0.33} \quad \text{Ec 8.}$$

5.9.1. Número de Sherwood (Sh)

Relaciona el coeficiente de transferencia de masa (k_b) con las propiedades del sistema (Ecuación 9):

$$Sh = \frac{k_b \cdot D}{b} \quad \text{Ec 9.}$$

Donde:

- k_b : Coeficiente de transferencia de masa (m/s).
- b : Longitud característica del sistema, en este caso el diámetro de la membrana (m).
- D_{12} : Difusividad del soluto en el solvente (m²/s).

5.9.2. Número de Reynolds (Re)

Describe el régimen hidrodinámico en función de la velocidad angular (ω), la longitud característica (b), y la viscosidad cinemática (ν) (Ecuación 10)

$$Re = \frac{\omega \cdot b^2}{\nu} \quad \text{Ec 10.}$$

Donde:

- ω Velocidad angular en radianes por segundo (rad/s).
- ν Viscosidad cinemática (m²/s).

5.9.3. Número de Schmidt (Sc): Relaciona la difusión de masa y la difusión de cantidad de movimiento (Ecuación 11):

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad \text{Ec 11.}$$

Donde:

- ν es la viscosidad cinemática.
- D_{12} es la difusividad del soluto en el solvente.

El cálculo se realizó en *MATLAB R2024a (MathWorks®)* para ello se consideró lo siguiente:

- Concentraciones: 60, 80, 100, y 120 mM.
- Velocidades de agitación: 150, 250, 350, y 450 RPM.
- Dimensiones del sistema: Diámetro de la membrana ($b = 0.0445 \text{ m}$).

Es necesario realizar una conversión de RPM a Velocidad Angular para la velocidad de agitación mediante la siguiente ecuación (Ecuación 12):

$$\omega = \frac{2 \pi \cdot RPM}{60} \quad \text{Ec 12.}$$

Se calcularon Re y Sc para cada combinación de concentración y velocidad de agitación y determino el Coeficiente de Transferencia de Masa (k_b), a partir de Sh, se despeja k_b (Ecuación 13):

$$k_b = \frac{Sh \cdot D}{b} \quad \text{Ec 13.}$$

Los valores experimentales del coeficiente de transferencia de masa k_b se organizaron en una matriz de dimensiones 4x4, donde cada elemento representa una combinación específica

de concentración de PVA y velocidad de agitación. Para cada experimento, se calcularon los números adimensionales de Reynolds (Re), Schmidt (Sc) y Sherwood (Sh), que sirven para caracterizar las condiciones hidrodinámicas y de transporte en el sistema.

A partir de estos datos, se aplicó la correlación propuesta por Simón (2009) para estimar el coeficiente teórico de transferencia de masa, denominado *k_{teo}*. Esta correlación relaciona los números adimensionales mencionados con el coeficiente *k*, permitiendo calcular *k_{teo}* en función de las condiciones experimentales de agitación y concentración. Así, el modelo desarrollado facilitó la determinación sistemática de *k_{teo}* para cada combinación experimental. Este enfoque, permitió comparar directamente los valores teóricos *k_{teo}* con los coeficientes experimentales *k_b*, evaluando la precisión y aplicabilidad de la correlación de Simon en diferentes regímenes de flujo. De esta manera, se destacó la utilidad de dicha correlación para describir la transferencia de masa en condiciones variables de operación.

5.10. CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA (K_{EXP})

El modelo utilizado para el cálculo de *k_{exp}* considera la presión osmótica generada por la solución polimérica, la cual depende de gradientes de concentración y potencial químico. La presión osmótica ($\Delta\phi$) se calcula usando una expansión virial como se observa en la Ecuación 14:

$$\Delta\phi = \frac{c \cdot R \cdot T}{M_{\{poly\}}} + B_{22} \cdot R \cdot T \cdot c^2 \quad \text{Ec 14.}$$

Donde:

- *c*: Fracción másica del polímero.
- *R*: Constante de los gases (8314 mL·Pa·K⁻¹·mol⁻¹).
- *T*: Temperatura en Kelvin (298.15 K).
- *M_{poly}*: Masa molar del polímero seco (353356 g/mol).
- *B₂₂*: Segundo coeficiente virial (4.71 × 10⁻⁴ mol·mL·g⁻²). (Hashim et al., 2014)

Durante el desarrollo experimental, la presión de operación del sistema de ultrafiltración se debe mantener constante en 300 000 Pa (3 bar) en todos los ensayos. Esta condición fue controlada cuidadosamente a lo largo de cada experimento para asegurar la comparabilidad de los resultados y evitar fluctuaciones que pudieran afectar la transferencia de masa y el flujo de permeado. La elección de una presión constante es importante en estudios de ultrafiltración, ya que permite aislar el efecto de otras variables, como la concentración de

PVA y la velocidad de agitación, sobre el desempeño del sistema (McCabe, Smith, & Harriott, 2007)

El coeficiente experimental de transferencia de masa se determina a partir de la relación entre el flujo volumétrico de solvente (J_v) y el gradiente de presión osmótica, según lo expresado en la Ecuación 15. Este coeficiente cuantifica la eficiencia con la que ocurre la transferencia de masa en el sistema, considerando tanto el área de transferencia como la fuerza impulsora del proceso.

$$k_{exp} = \frac{J_v}{P - \Delta\phi} \quad \text{Ec 15.}$$

Donde:

- **Jv:** Flujo volumétrico de solvente (m/s), obtenido experimentalmente.
- **P:** Presión aplicada (300000 Pa).
- **$\Delta\phi$:** Presión osmótica.

5.10.1. Determinación del exponente Reynolds (m).

Para determinar el exponente m asociado al número de Reynolds en la correlación de transferencia de masa, se empleó una estrategia de linealización basada en la forma general de la correlación adimensional, donde Sh es el número de Sherwood, Re el número de Reynolds y Sc el número de Schmidt. Aplicando logaritmo natural a ambos lados, se obtiene la Ecuación 16.

$$\ln(Sh) = \ln(c) + m \cdot \ln(Re) + n \cdot \ln(Sc) \quad \text{Ec 16.}$$

Asumiendo constante el exponente n para Sc , se graficaron los datos experimentales de $\ln(Sh)$ frente $\ln(Re)$. La pendiente de la recta obtenida representa el valor de m , mientras que el intercepto permite estimar el coeficiente a . El ajuste lineal se realizó mediante mínimos cuadrados usando la función *polyfit* de MATLAB R2024A (MATHEMATICS®), siguiendo la metodología recomendada en la literatura para el ajuste de correlaciones adimensionales en transferencia de masa en ultrafiltración (Berg, 1989; Da Costa et al., 1991; Gekas & Hallström, 1987).

5.10.2. Determinación del exponente de Schmidt (n) y la Constante (c)

Una vez determinado el valor del exponente m , el siguiente paso es la obtención del exponente n de Schmidt y la constante pre-exponencial C . Para lograrlo, la correlación de

potencia se transformó a una forma lineal logarítmica presentada en la Ecuación 17, Se calcularon los valores de $\ln(Sh/Re^m)$ y $\ln(Sc)$ para cada punto experimental.

$$\ln(Sh/Re^m) = \ln(c) + n \cdot \ln(Sc) \quad \text{Ec 17.}$$

La finalidad de este ajuste es identificar y cuantificar la relación entre los parámetros adimensionales clave, como el número de Sherwood (Sh), el número de Reynolds (Re) y el número de Schmidt (Sc), con el fin de establecer una correlación representativa del comportamiento global y específico del sistema bajo estudio.

Para lograr este objetivo, se utilizó la función *polyfit* de MATLAB, En este caso particular, se empleó un ajuste lineal (polinomio de primer grado) sobre los datos transformados a escala logarítmica. El procedimiento se desarrolló en dos niveles. Primero, se realizó un ajuste global considerando la totalidad de los datos experimentales, es decir, todas las combinaciones de concentración de polímero y velocidad de agitación. Para ello, se construyeron los vectores $\ln(Sc)$ y $\ln(Sh/Re^m)$ a partir de los resultados experimentales, y se aplicó la función *polyfit* para obtener los coeficientes del modelo lineal. El coeficiente de la pendiente representa el valor global de n , mientras que el intercepto corresponde a $\ln(c)$. Este ajuste global permite identificar la tendencia promedio del sistema y sirve como base para comparar el desempeño de modelos alternativos, como las redes neuronales artificiales.

De manera complementaria, se efectuaron ajustes individuales para cada una de las concentraciones de PVA estudiadas (60, 80, 100 y 120 mM). En este caso, se seleccionaron los subconjuntos de datos correspondientes a cada concentración y se repitió el procedimiento de ajuste lineal. Este enfoque permite analizar si la dependencia de la transferencia de masa respecto al número de Schmidt varía significativamente con la concentración de polímero, lo cual es relevante en sistemas donde las propiedades fisicoquímicas pueden verse alteradas por la composición de la solución (Gekas & Hallström, 1987; Da Costa, Fane, & Wiley, 1991)

El resultado de cada ajuste lineal proporciona dos parámetros importantes: la pendiente (exponente n), que indica la sensibilidad del sistema a cambios en la difusividad y viscosidad, y el intercepto, que tras ser exponenciado entrega el valor de la constante c en la correlación adimensional. Además, la calidad del ajuste se evaluó mediante el coeficiente de determinación (R^2), que cuantifica el grado en que el modelo explica la variabilidad observada en los datos experimentales (Montgomery, Peck, & Vining, 2012).

5.11. IMPLEMENTACIÓN MODELO DE RED NEURONAL PARA LA PREDICCIÓN DE FLUX

En el marco de este estudio, se implementó un modelo de red neuronal artificial (RNA) en el entorno MATLAB R2024A (MATHEWORKS®) para predecir el flujo másico (flux) en el proceso de ultrafiltración asistida por polímeros. El objetivo fue modelar la relación entre las variables operativas clave—la concentración de polivinil alcohol (PVA) y la velocidad de agitación y el comportamiento experimental del flux, superando las limitaciones de las correlaciones empíricas tradicionales que asumen relaciones lineales o de forma funcional explícita.

La red neuronal seleccionada corresponde a una arquitectura *feedforward* de tipo perceptrón multicapa (MLP, por sus siglas en inglés), que es ampliamente reconocida por su capacidad para aproximar funciones no lineales a partir de datos experimentales (Hornik, Stinchcombe, & White, 1989) Esta arquitectura está compuesta por tres capas principales: una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida. La capa de entrada recibe dos variables independientes: la concentración de PVA (expresada en fracción másica) y la velocidad de agitación (en revoluciones por minuto). La capa oculta, configurada con cinco neuronas, emplea funciones de activación no lineales (como la tangente hiperbólica), permitiendo a la red capturar relaciones complejas y no lineales presentes en el sistema. Finalmente, la capa de salida consta de una sola neurona con activación lineal, la cual genera la predicción del flux para cada combinación de variables de entrada en la figura 3 se representa esquemáticamente la arquitectura mencionada.

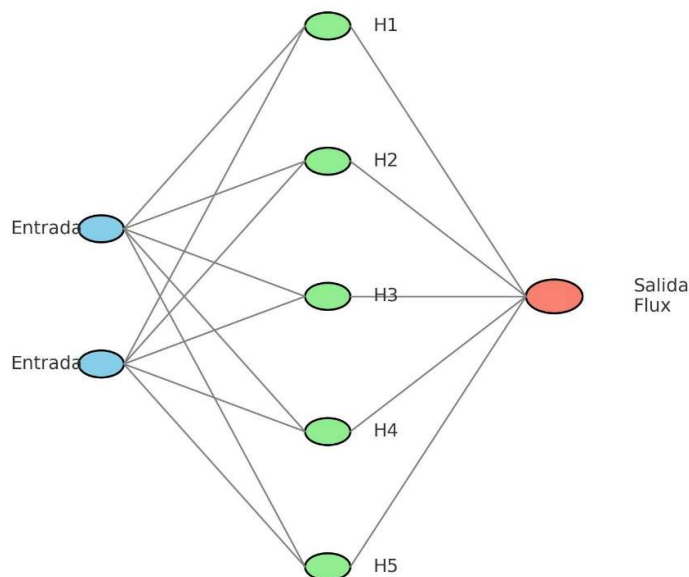


Figura 3. Esquematzación de la arquitectura de la red neuronal artificial.

El proceso de entrenamiento de la red se realizó mediante el algoritmo de retro propagación (*backpropagation*) con optimización Levenberg-Marquardt, una de las técnicas más robustas y eficientes para problemas de regresión con conjuntos de datos de tamaño pequeño (Hagan & Menhaj, 1994; Demuth, Beale, De Jess, & Hagan, 2014). Para asegurar la generalización del modelo y evitar el sobreajuste, se implementó validación cruzada *K-fold* ($K = 4$), dividiendo el conjunto de datos en subconjuntos de entrenamiento y prueba en cada iteración. Además, tanto las variables de entrada como la de salida fueron normalizadas al rango $[-1, 1]$ utilizando la función `mapminmax` de MATLAB, lo que favorece la estabilidad y la eficiencia del aprendizaje (Demuth et al., 2014).

La Tabla 3 ilustra el esquema de la red neuronal utilizada, mostrando la disposición de las capas, el flujo de información desde las entradas hasta la salida, y las conexiones entre neuronas. Este diagrama es importante, para que el lector comprenda la estructura interna del modelo y la lógica de su funcionamiento.

Tabla 3. Descripción de la red neuronal.

Componente	Descripción
Tipo de red	Feedforward (Perceptrón Multicapa, MLP)
Número de capas	3 (capa de entrada, una capa oculta, capa de salida)
Entradas	2 (Concentración de PVA en fracción másica y Velocidad de agitación en RPM)
Neuronas en entrada	2 (una por cada variable de entrada)
Capa oculta	1 capa oculta con 5 neuronas
Función de activación oculta	Tangente hiperbólica (tansig) o función sigmoide, para capturar relaciones no lineales
Neuronas en salida	1 (predicción del flux)
Función de activación salida	Lineal (purelin), adecuada para problemas de regresión
Algoritmo de entrenamiento	Levenberg-Marquardt (trainlm), eficiente para conjuntos de datos pequeños o medianos
Normalización	Escalado de entradas y salidas al rango [-1, 1] usando mapminmax
Validación	Validación cruzada K-fold (K=4) para asegurar la robustez y evitar sobreajuste

5.11.1. Carga y preparación de Datos

El procesamiento de los datos experimentales se estructuró cuidadosamente para garantizar su correcta utilización en el modelado predictivo mediante redes neuronales artificiales. En primer lugar, los datos originales fueron almacenados en el archivo digital [*Datoskexp.mat*](#), el cual constituye la base de información para el análisis posterior. Este archivo contiene diferentes variables experimentales recolectadas durante las pruebas de ultrafiltración asistida por polímeros, entre las que destacan:

- **DV60, DV80, DV100, DV120:** valores asociados a la viscosidad o densidad de las soluciones de polivinil alcohol (PVA) a concentraciones de 60, 80, 100 y 120 mM, respectivamente.
- **de1 a de4:** registros de densidad correspondientes a cada concentración de PVA.

- ***fraccion_masica***: fracciones másicas de PVA en las soluciones, que reflejan la proporción de polímero respecto al total de la mezcla.
- ***FluxExper***: matriz de datos experimentales del flujo másico (flux) obtenido en cada combinación de concentración y velocidad de agitación.

Para configurar las variables de entrada de la red neuronal, se seleccionaron dos parámetros operativos: la **concentración de PVA** (en fracción másica) y la **velocidad de agitación** (en revoluciones por minuto, RPM). Las velocidades de agitación utilizadas en los experimentos fueron 150, 250, 350 y 450 RPM, mientras que las concentraciones evaluadas fueron 60, 80, 100 y 120 mM. Mediante funciones específicas de MATLAB, como *repelem* y *repmat*, se generaron todas las combinaciones posibles entre estos dos factores, siguiendo el diseño experimental factorial. El resultado fue la matriz *Variablesin orig*, de dimensiones 2×16, donde cada columna representa una combinación única de concentración y velocidad de agitación, es decir, un experimento individual dentro del estudio.

En cuanto a la variable de salida, el flujo experimental (*FluxExper*) se encontraba originalmente organizado en una matriz de 4×4, en la que las filas corresponden a las distintas concentraciones de PVA y las columnas a las diferentes velocidades de agitación. Para adaptarla al formato requerido por la Neural Network Toolbox de MATLAB, esta matriz se transformó en un vector fila utilizando la función *reshape*, obteniendo así la variable *fluxexp orig*. Este vector contiene los valores de flujo experimental correspondientes a cada combinación de condiciones de operación y se emplea como objetivo de entrenamiento para la red neuronal.

Este proceso de estructuración y transformación de datos asegura que tanto las variables de entrada (concentración y velocidad de agitación) como la variable de salida (flux experimental) estén perfectamente alineadas y listas para su uso en el entrenamiento, validación y prueba del modelo predictivo. Además, la metodología seguida permite la trazabilidad y reproducibilidad del análisis, ya que el archivo *Datoskexp.mat* y las variables generadas pueden ser consultados y reutilizados en futuras etapas del estudio o por otros investigadores interesados en replicar o ampliar los resultados obtenidos.

5.11.2. Normalización de datos, configuración y entrenamiento con validación cruzada K-Fold.

se trabajó con un conjunto de 16 muestras experimentales, cada una correspondiente a una combinación específica de concentración de polivinil alcohol (PVA) y velocidad de agitación. Para evaluar la capacidad de generalización del modelo y evitar que los resultados dependan de una sola partición de los datos, se implementó la técnica de validación cruzada *K-fold*, con $K = 4$. Esto significa que el conjunto total de datos se divide aleatoriamente en cuatro grupos o “*folds*” de igual tamaño, utilizando la función *cvpartition* de MATLAB (Zhang et al., 2021; Park et al., 2023; James et al., 2021)

En cada iteración, uno de estos grupos se reserva como conjunto de prueba, mientras que los otros tres se emplean para entrenar la red neuronal. Este proceso se repite cuatro veces, de modo que cada grupo actúa como conjunto de prueba una vez. Al finalizar, se promedian las métricas de desempeño obtenidas en cada iteración, lo que proporciona una estimación más confiable y objetiva de la capacidad predictiva del modelo (Demuth et al., 2014; Park et al., 2023)

Antes de entrenar la red neuronal, es necesario escalar o “normalizar” los datos de entrada y salida. La normalización consiste en transformar los valores originales de las variables (por ejemplo, concentración, velocidad de agitación y flujo) a un rango estándar, en este caso entre -1 y 1, utilizando la función *mapminmax* de MATLAB. Esto mejora la estabilidad y la velocidad del proceso de entrenamiento, ya que evita que variables con escalas muy diferentes dominen el aprendizaje. Los parámetros de normalización empleados para las variables de entrada y salida se almacenan en las variables **PS_in** y **PS_out**, respectivamente. Posteriormente, cuando se obtienen predicciones del modelo, estos valores se “desnormalizan” (es decir, se revierten al rango original de las mediciones experimentales) utilizando los mismos parámetros, para poder comparar los resultados predichos con los datos reales de laboratorio.

El algoritmo de entrenamiento seleccionado es Levenberg-Marquardt, conocido por su eficiencia en conjuntos de datos pequeños o medianos (Hagan & Menhaj, 1994; Zhang et al., 2021; Yang & Li, 2022). Durante el entrenamiento, el 85% de los datos de entrenamiento se utiliza para ajustar los pesos de la red, mientras que el 15% restante se emplea para validación interna y evitar el sobreajuste (early stopping)

Una vez entrenada la red en cada *fold*, se generan predicciones para el conjunto de prueba, las cuales se desnormalizan y se comparan con los valores experimentales reales. Se calculan

métricas como el Error Cuadrático Medio (MSE) y el coeficiente de correlación (R) para cuantificar el desempeño del modelo. Estos resultados se almacenan y, al finalizar las cuatro iteraciones, se reportan los promedios y desviaciones estándar para evaluar la consistencia del modelo ante diferentes particiones de los datos.

Finalmente, tras validar el rendimiento promedio, se entrena una red neuronal final utilizando el 100% de los datos normalizados, manteniendo la misma arquitectura y parámetros. Los parámetros de normalización (**PS_in** y **PS_out**) y los pesos de la red se guardan para garantizar que el modelo pueda aplicarse y reproducirse en futuras aplicaciones o con nuevos datos experimentales (Zhang et al., 2021; Park et al., 2023; Yang & Li, 2022).

5.11.3. Evaluación y visualización del rendimiento de la red neuronal

Para evaluar la capacidad predictiva de la red neuronal final entrenada (*net_final*), se realizó un análisis exhaustivo que integró tanto métricas cuantitativas como herramientas de visualización gráfica. En primer lugar, se utilizaron las condiciones experimentales (concentración de PVA y velocidad de agitación, previamente normalizadas) como entradas del modelo neuronal. Las predicciones generadas por la red se encontraban en escala normalizada, por lo que fue necesario aplicar un proceso de desnormalización utilizando los parámetros de escala obtenidos durante el preprocesamiento. Esto permitió transformar las predicciones al rango y unidades originales de los datos experimentales de flujo (flux), posibilitando una comparación directa y significativa con los valores reales obtenidos en laboratorio.

La comparación entre las predicciones desnormalizadas y los datos experimentales originales permitió validar la capacidad del modelo para generalizar y mantener coherencia física en la escala real de las mediciones. Este paso es importante, ya que asegura que el modelo no solo funciona en el entorno matemático de la red, sino que sus resultados son interpretables y útiles para aplicaciones prácticas en el sistema de ultrafiltración asistida por polímeros.

El análisis gráfico del rendimiento del modelo se llevó a cabo mediante cuatro visualizaciones principales. En primer lugar, la curva de desempeño del entrenamiento (*plotperform*) mostró la evolución del error cuadrático medio (MSE) a lo largo de las épocas de entrenamiento, diferenciando entre los conjuntos internos de entrenamiento, validación y prueba. Una convergencia estable y paralela de estas curvas es indicativa de que el modelo

no incurre en sobreajuste, es decir, no memoriza los datos, sino que aprende patrones generales entre las variables para nuevas predicciones.

En segundo lugar, se empleó un gráfico de regresión (*plotregression*) que compara los valores reales de flujo con los valores predichos por la red. Un coeficiente de correlación (R) cercano a 1 en este gráfico indica que el modelo predice con alta fidelidad y precisión, lo que respalda su utilidad para el análisis.

Adicionalmente, se generó un histograma de errores (*ploterrhist*) para analizar la distribución de las diferencias entre los valores reales y los predichos. Una distribución simétrica y centrada en cero sugiere que los errores del modelo son aleatorios y no presentan sesgos sistemáticos, lo que es deseable en cualquier modelo predictivo. Finalmente, se elaboró un gráfico de líneas superpuestas que permite comparar visualmente, para cada condición experimental, los valores reales y predichos de flujo. Esta visualización facilita la identificación de discrepancias puntuales y ayuda a diagnosticar posibles limitaciones del modelo en ciertas regiones del espacio experimental.

Además de las visualizaciones, se calcularon métricas cuantitativas como el error cuadrático medio (MSE) tanto en la escala normalizada como en la original, lo que permitió verificar la consistencia y robustez de los resultados. También se extrajeron y documentaron los pesos y sesgos de la red neuronal, elementos que representan los parámetros internos ajustados durante el entrenamiento. Aunque su interpretación directa es limitada debido a la naturaleza no lineal de la red, su almacenamiento sirve para la reproducibilidad y futura aplicación del modelo.

Por último, se visualizó la arquitectura de la red neuronal final empleando la función *view* de MATLAB, confirmando la configuración de una capa oculta con cinco neuronas y las conexiones entre las capas de entrada y salida. Este análisis integral, que combina métricas estadísticas y visualizaciones detalladas, permitió verificar tanto el rendimiento cuantitativo como el comportamiento cualitativo del modelo, asegurando que la red neuronal desarrollada es una herramienta confiable para la predicción del flujo en sistemas de ultrafiltración asistida por polímeros.

5.11.4. Comparación con la metodología de correlación empírica

El uso de redes neuronales artificiales (RNA) se planteó como una solución innovadora en el manejo de herramientas frente a los modelos empíricos tradicionales por correlaciones del tipo $Sh = C \cdot Re^m \cdot Sc^n$, mostrando ventajas considerables en el análisis de sistemas

complejos de transferencia de masa. Las RNA no necesitaron relaciones funcionales específicas entre variables, lo que eliminó la necesidad de realizar linealizaciones o transformaciones que podían alterar la interpretación física de los fenómenos. Su capacidad para modelar no linealidades complejas permitió identificar patrones sutiles en los datos que resultaban difíciles de representar mediante ecuaciones explícitas (Fetanat et al., 2021; Park et al., 2023; Zhang et al., 2021).

6. RESULTADOS Y ANÁLISIS

6.1. CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DEL FLUX EN ULTRAFILTRACIÓN

La fiabilidad de los datos experimentales se verificó mediante el análisis gráfico del flux en función de la concentración como se observa en la figura 4. Fue posible comprobar que las mediciones seguían el comportamiento esperado para ello se añadieron líneas de guía en el gráfico. Dado que cualquier desviación significativa o comportamiento anómalo se interpretaría como un error experimental, los datos fueron procesados y analizados con el software MATLAB R2024a (MathWorks®).

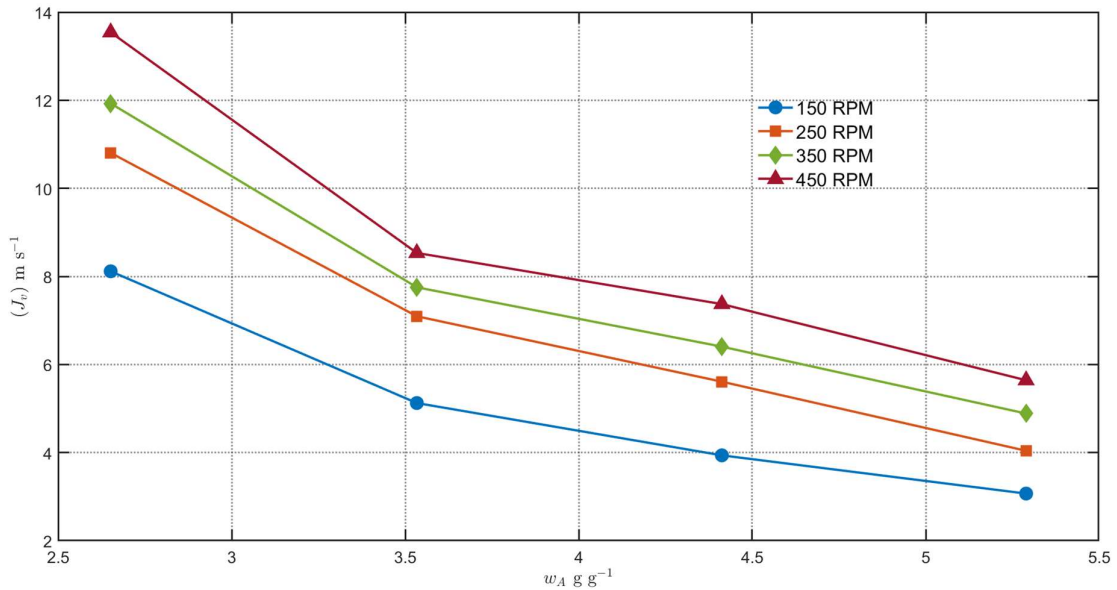


Figura 4. Flux vs Concentración de PVA a diferentes velocidades de agitación.

Además, en la Figura 4 se observa la correlación inversa entre el flujo a través de la membrana (J_v) y la concentración del soluto (PVA) en fracción másica, independientemente de la velocidad de agitación. Este comportamiento puede explicarse mediante dos mecanismos principales. Primero, el aumento en la concentración del soluto provoca una mayor resistencia al paso del solvente, lo que se traduce en una disminución del flujo. Este fenómeno está relacionado con la formación de una capa límite de concentración en la superficie de la membrana, que incrementa la resistencia hidráulica (Aroua et al., 2007). Segundo, las interacciones entre las moléculas de soluto y solvente dificultan la movilidad del solvente, reduciendo la transferencia de masa.

La velocidad de agitación tiene un impacto considerable, en comparación con el efecto de la concentración de PVA. A velocidades de agitación más altas, como 250, 350 y 450 RPM, se observa un incremento de flujo, asociado a una mejora en la mezcla del sistema y a la reducción del espesor de la capa límite de concentración. Sin embargo, a velocidades más bajas, como 150 RPM, la agitación es insuficiente para homogenizar la solución de manera eficiente, lo que permite la formación de una capa más densa en la superficie de la membrana, aumentando la resistencia al flujo (Aroua et al., 2007).

6.1.1. Comportamiento del flux de solvente antes de ultrafiltración

La Figura 5 con ayuda las líneas guía presenta el comportamiento del flux de solvente a través de la membrana previo al contacto con las soluciones de polímero. Esto para la caracterización hidráulica inicial de la membrana. Los datos obtenidos en esta etapa permiten cuantificar el flujo inicial y observar cómo este se modifica al agregar las soluciones de polímero en etapas posteriores. El comportamiento de las curvas flux - presión en esta etapa previa también sirvió como un indicio de la integridad de la membrana.

Es importante destacar que, para cada concentración de polímero, se empleó una membrana nueva y distinta. Esto se realizó bajo el supuesto de que la concentración del polímero afectaría directamente las interacciones superficiales de la membrana, asegurando así que en cada corrida se mostrara las condiciones específicas de estas interacciones entre membrana y polímero sin verse afectada de efectos de experimentos previos.

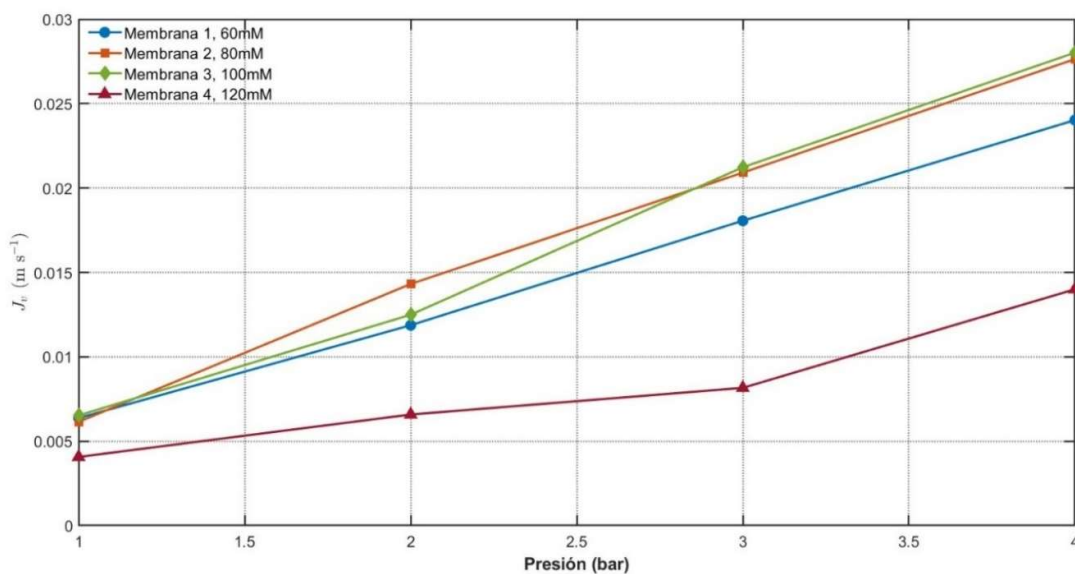


Figura 5. Comportamiento del flux antes de iniciar la ultrafiltración

6.1.2. Comportamiento del flux de solvente después de ultrafiltración

La Figura 6 muestra el flux de solvente a través de las membranas tras su uso en las corridas experimentales a diferentes concentraciones de PVA, cada membrana fue utilizada con una única concentración de PVA.

Se observó una reducción en el flux de solvente comparado con los flux de la Figura 5, Esta disminución evidencia la interacción entre el polímero y la superficie de la membrana, las cuales incrementan la resistencia al flujo. Estos resultados son clave para entender el impacto del polímero PVA en el rendimiento de la membrana y justifica el uso de membranas diferentes para cada concentración.

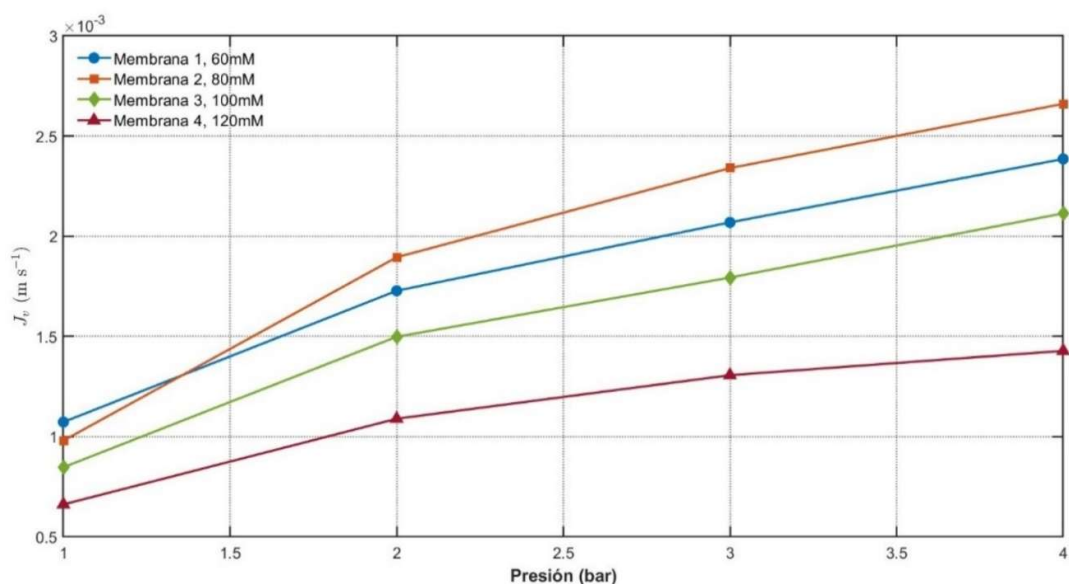


Figura 6. Comportamiento del flux después de la ultrafiltración

6.2. PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DE LAS SOLUCIONES DE PVA

El incremento en la concentración de PVA resultó en cambios notables en las propiedades fisicoquímicas de las soluciones. Se observó un ligero aumento en la densidad, aumentando de 995.6 kg/m^3 a 1000.2 kg/m^3 . Sin embargo, el aumento en la viscosidad fue más considerable, incrementando de $7.98 \times 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ a $8.47 \times 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ a medida que la concentración de PVA aumenta. Estos incrementos son consistentes con las propiedades de soluciones poliméricas, atribuyéndose al incremento de las interacciones moleculares y el volumen excluido por las cadenas de PVA en solución (Nagarkar & Patel, 2019; Noorjahan, 2014; Doi, 2013).

6.3. CÁLCULO DE DIFUSIVIDADES

El valor de difusividad ideal (D_{12}) disminuye si aumenta la viscosidad de la solución, ya que un medio más viscoso genera mayor resistencia al movimiento molecular. El cálculo de D_{12} para cada caso o sea diferentes concentraciones de PVA se realizó reemplazando los valores específicos de η en la ecuación 6 de Stokes-Einstein (Ma et al., 2023).

Por otro lado, la difusividad corregida (D_{s12}) considera explícitamente los efectos de interacción entre el PVA y el agua, proporcionando una representación más realista del transporte de masa en soluciones poliméricas. Este valor se ajustó a partir de D_{12} utilizando un modelo basado en la correlación de Barsea et al. (2013). Dicha correlación incorpora la fracción másica del polímero (w) y la densidad de la solución (ρ) para estimar con mayor

precisión la movilidad en el sistema PVA-agua. Consistentemente, $D_{s12} < D_{12}$ en todos los casos, lo que confirma la restricción de la movilidad del PVA debido a las interacciones moleculares. Además, la diferencia entre D_{12} y D_{s12} se amplía a medida que aumenta la concentración de PVA, lo que evidencia una mayor influencia de estas interacciones en soluciones más concentradas. PVA, lo que evidencia una mayor influencia de las interacciones polímero-solvente en las soluciones más concentradas.

Tabla 4. Difusividades obtenidas en función de la concentración de PVA.

Concentración (mM)	Frac másica PVA	Densidad (kg/m ³)	Viscosidad (Pa.s)	D12 ideal (m ² /s)	Ds12 corregida (m ² /s)
60	0.002579253	1024.715176	0.000898375	3.73978E-11	3.67278E-11
80	0.003438339	1024.913488	0.000935458	3.59153E-11	3.5264E-11
100	0.004296131	1025.34128	0.000974537	3.44751E-11	3.38417E-11
120	0.005155579	1025.297111	0.001015735	3.30768E-11	3.24625E-11

6.4. COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA (K_{TEO} Y K_{EXP}) Y MODELO DE CORRELACIONES

Los datos experimentales fueron analizados utilizando el software matlab R2024a (mathworks®) y se obtuvieron las matrices de k_{exp} y k_{teo} siguiendo la serie de pasos describa en la sección 4.8 y 4.9 Estos cálculos relacionaron las concentraciones de PVA (60, 80, 100 y 120 mM) y las velocidades de agitación (150, 250, 350 y 450 RPM) con los términos asociados a estas propiedades, el termino difusivo Smith (Sc) y el termino convectivo Reynolds (Re) respectivamente. La aplicación de la correlación de Simon (2000) a partir de números adimensionales observable en la ecuación 8 se generó valores de coeficiente teórico (k_{teo}) que oscilaron entre 1.5×10^{-6} y 4.6×10^{-6} m/s. Notablemente, se observó que k_{teo} incrementa con la velocidad de agitación, un comportamiento esperado que refleja una mayor homogeneidad en la mezcla y el transporte de masa de solvente a través de la membrana, mientras que a bajas concentraciones de PVA la resistencia del soluto es menor.

En contraste, el coeficiente de transferencia de masa experimental (k_{exp}) se derivó directamente de los flujos volumétricos medidos y del impacto de la presión osmótica bajo las mismas condiciones, se denomina el modelo de la presión osmótica mostrado en en la

ecuación 14. Los valores de k_{exp} obtenidos, que variaron entre 1.2×10^{-6} y 3.5×10^{-6} m/s, fueron sistemáticamente menores que sus contrapartes teóricas. Esta reducción se le atribuye principalmente a la resistencia adicional impuesta por la presión osmótica y es intrínseca al polímero, un fenómeno que se vuelve más significativo a medida que la concentración de PVA aumenta. La presión osmótica genera un gradiente de potencial químico opuesto al flujo, disminuyendo así la fuerza impulsora neta para la transferencia de masa a través de la membrana.

La Figura 7 ilustra la comparación entre los coeficientes de transferencia de masa teóricos (k_{teo}) y experimentales (k_{exp}). La línea de referencia en esta figura, donde $k_{teo} = k_{exp}$, representa la correspondencia ideal.

Los resultados muestran que el modelo teórico de la correlación obtenida por Simon (2000), ofrece una buena aproximación a los datos experimentales bajo condiciones específicas, concretamente a alta velocidad de agitación y baja concentración de PVA. Por ejemplo, a 60 mM de PVA y 450 RPM, las diferencias entre el valor teórico ($k_{teo} = 3.6 \times 10^{-6}$ m/s) y el experimental ($k_{exp} = 3.2 \times 10^{-6}$ m/s) son mínimas.

A pesar de las diferencias observadas entre k_{teo} y k_{exp} , la tendencia general se mantiene coherente ambos coeficientes aumentan con la velocidad de agitación. Sin embargo, la precisión disminuye notablemente bajo condiciones de alta concentración de PVA, Esto se atribuye a la limitación del modelo de Simón para considerar las interacciones específicas en la capa límite para el caso del PVA, así como al aumento de la densidad y la viscosidad de la solución, fenómenos que ejercen una resistencia adicional sobre el flujo a través de la membrana.

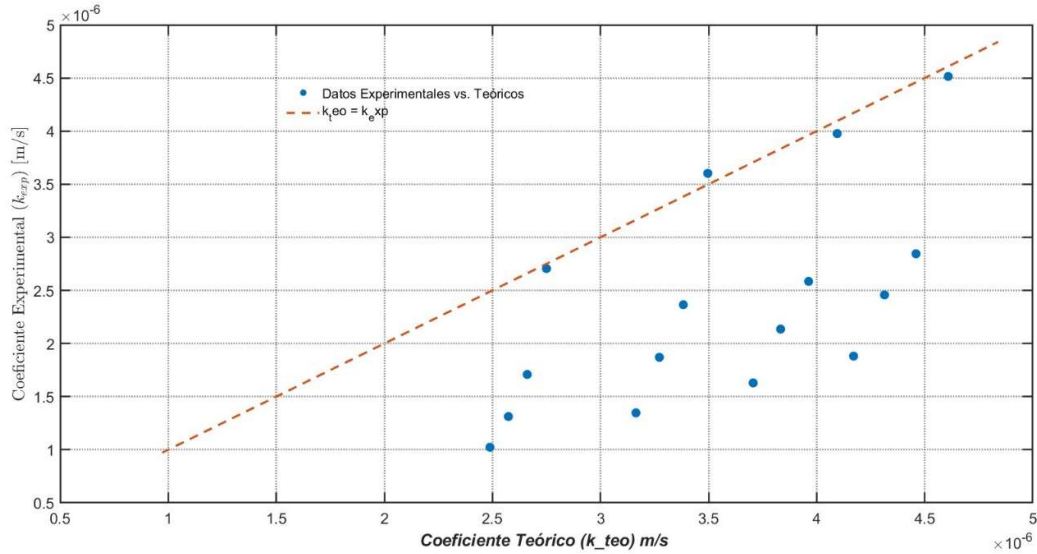


Figura 7. comparación entre valores de coeficientes de transferencia teórico y experimental.

6.5. AJUSTE EXPERIMENTAL DE LA CORRELACIÓN DE SHERWOOD.

Inicialmente, los coeficientes de transferencia de masa teóricos (k_{teo}), presentados en la Figura 7, se calcularon utilizando la correlación de Sherwood Sh , con los valores de los parámetros c , m y n obtenidos de Simon (2000)

Posteriormente, y como objetivo de este estudio, se procedió a determinar los parámetros c , m y n de esta misma correlación a partir de los datos experimentales obtenidos para el coeficiente de transferencia de masa (k_{exp}) obtenidos mediante el modelo de la presión osmótica descrito en la sección 4. Este ajuste permitió obtener un modelo empírico específico para el sistema PVA-agua-membrana bajo las condiciones experimentales estudiadas, el cual podrá ser comparado con reportado por Simon (2000).

Para determinar los exponentes m y n y el coeficiente c a partir de los datos experimentales, se utilizó un método de linealización doble secuencial.

La primera etapa de linealización se enfocó en determinar el exponente m del número de Reynolds (Re). Como se describe en la sección 4.10 La Figura 8 muestra la relación lineal y la línea muestra el ajuste obtenido. A partir de la pendiente de la recta, se determinó que el valor promedio del exponente obtenido para cada concentración es 0.5073.

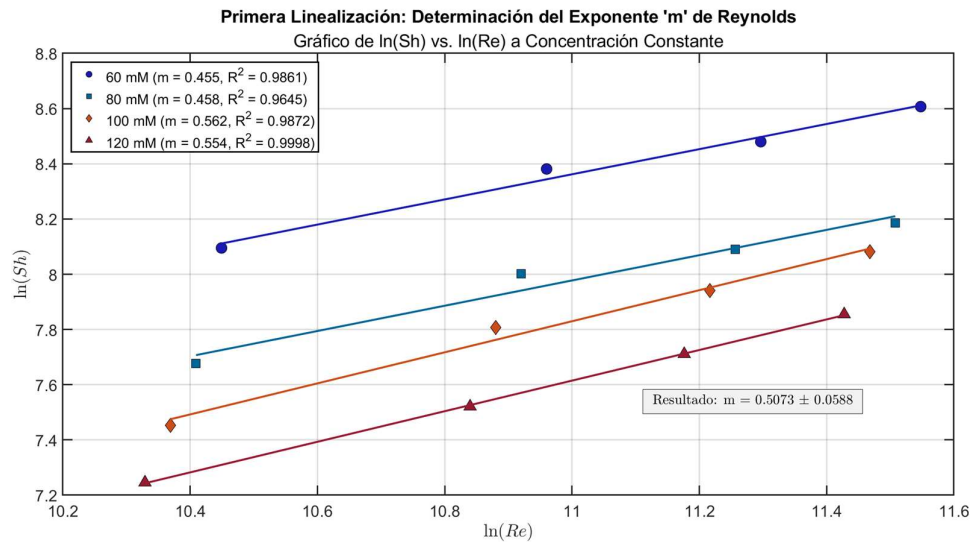


Figura 8. Primera linealización entre el $\ln(Sh)$ vs $\ln(Re)$ para determinar el coeficiente de m de Re con datos experimentales.

En la segunda linealización una vez conocido el valor de m , se obtuvieron los valores del exponente n como se observa en la Figura 9, varían por concentración como se observa en la tabla 5, es evidente que para las concentraciones más bajas se presenta una inconsistencia para los valores de n y C alejándose más de los valores obtenidos por Simon (2000), Esta inconsistencia en el signo y la magnitud indica que la relación de potencia simple con Sc no se mantiene uniforme en todo el rango de experimentación. Además, el exponente de Reynolds ($m=0.5073$) es positivo y consistente con valores típicos reportados en la literatura de referencia. Este valor sugiere una influencia dominante de la agitación en la transferencia de masa, ya que un aumento en el número de Reynolds se traduce directamente en una mejora en el coeficiente de transferencia (Da Costa et al., 1991)

Tabla 5. Resultados obtenidos de los coeficientes a partir de la doble linealización.

Concentración	Exponente n (Schmidt)	Exponente m (Reynolds)	Coefficiente c
60	-0.2531	0.455	28.6312
80	-0.2743	0.458	18.9594
100	0.2098	0.562	5.1727
120	0.2140	0.554	4.5539
Global	-0.0259	0.5073	13.70
Simon	0.33	0.47	0.87

La variabilidad observada en el exponente n del número de Schmidt, particularmente la aparición de valores negativos a bajas concentraciones de PVA, sugiere que la relación de potencia simple ($Sh \propto Sc^n$) no describe adecuadamente el comportamiento de la transferencia de masa en todo el rango de operación del sistema PVA-agua. Esta dificultad en la obtención de un valor consistente de n puede atribuirse a diversos factores.

Primero, la linealización logarítmica, si bien es una técnica estándar, puede introducir o amplificar errores inherentes a la regresión lineal, especialmente si la relación del sistema es inherentemente no lineal o más compleja de lo que una simple correlación de potencia puede abarcar (Draper & Smith, 1998)

Segundo, la limitada cantidad de datos, 4 puntos por concentración incrementan significativamente el ruido y la variabilidad experimental. Esta es una limitación inherente del diseño experimental en este aspecto, que puede haber contribuido a la obtención de pendientes anómalas, especialmente en las concentraciones más bajas donde otros efectos como interacciones polímero-solvente o complejidades de la capa de podrían tener una influencia desproporcionada en un número reducido de puntos (Montgomery, D. C, 2012)

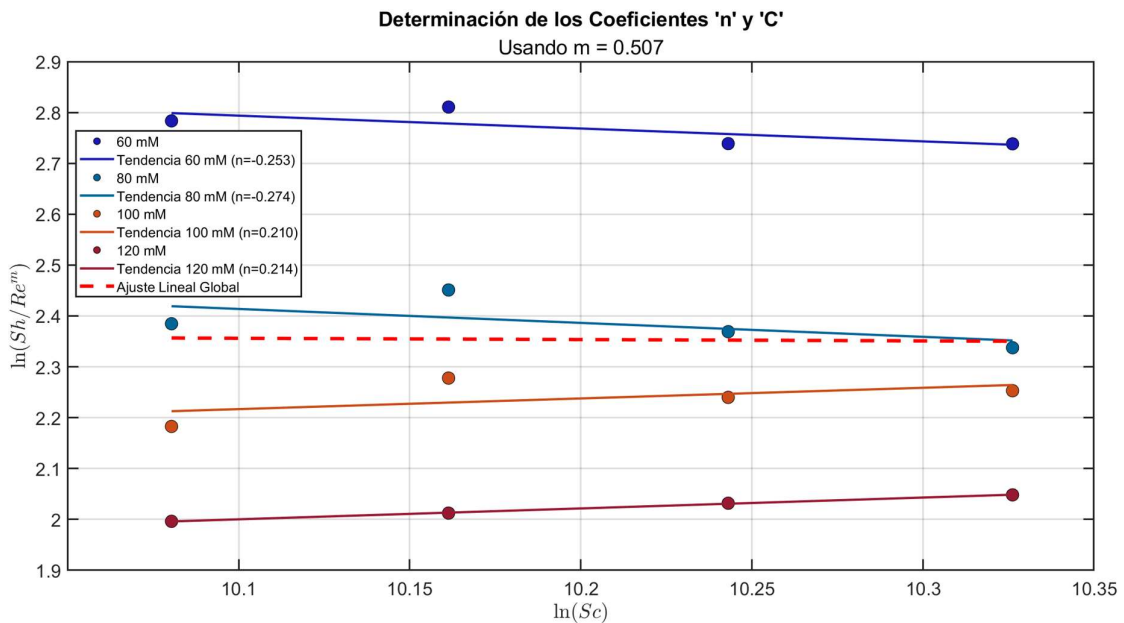


Figura 9. Segunda linealización entre el $\ln(Sh/Re^m)$ vs $\ln(Sc)$ para determinar el coeficiente de n de Sc y la constante c , después de conocer el valor de m .

6.6. MODELADO PREDICTIVO CON REDES NEURONALES ARTIFICIALES (RNA)

6.6.1. Arquitectura y entrenamiento del modelo RNA

La fase inicial (épocas 0-5) del entrenamiento se caracterizó por un descenso brusco y significativo del Error Cuadrático Medio (MSE), cayendo de un valor inicial de 5.39 a aproximadamente 0.1. Esto representa una reducción del 98.1% en el error, lograda en menos de 0.5 segundos de cómputo. Durante este periodo, el parámetro μ se mantuvo en 0.001, lo cual es indicativo del uso predominante de la aproximación de Gauss-Newton. Físicamente, esto sugiere que la red neuronal identificó y aprendió rápidamente la relación fundamental entre las variables de entrada (velocidad y concentración) y el flujo por área (flux).

La fase final (épocas 6-18) vio una reducción adicional del MSE de 0.1 a 0.00145, lo que constituye una mejora del 85.5%. Sin embargo, la dinámica de convergencia cambió. El parámetro μ aumentó a 0.0001, señalando una transición hacia una estrategia de descenso de gradiente. Esta fase culminó con la activación de 6 "Validation Checks", que actúan como un criterio de parada ante la falta de mejora continua. El gradiente final registrado fue de 0.001, un valor diez veces mayor que el objetivo de 1×10^{-7} , lo que indica que, aunque el error se redujo considerablemente, no se alcanzó el mínimo absoluto deseado (Chan et al., 2023).

El análisis técnico del comportamiento del algoritmo durante el entrenamiento muestra que el mecanismo de convergencia condujo al modelo a una región de bajo gradiente (0.001). La superficie de error en esta área presentaba una curvatura mínima, inferida por el valor relativamente pequeño de μ en la fase final. A pesar de la notable reducción del MSE, la falta de mejora continua llevó a la activación de los "Validation Checks". Esto sugiere que, si bien el algoritmo encontró una solución altamente efectiva, no logró alcanzar un mínimo absoluto de la función de costo, sino que se estabilizó en un óptimo local. Este comportamiento es común y a menudo deseable, ya que puede mitigar el riesgo de sobreajuste.

6.6.2. Curva de Desempeño del Entrenamiento

El análisis gráfico de la Figura 10 confirmó un claro caso de sobreajuste (overfitting). Este fenómeno, característico de las redes neuronales artificiales, en la figura 9 se evidencia por la creciente brecha entre las curvas de error de entrenamiento y validación a partir de la época 6. Mientras el modelo alcanzó una precisión excesiva en los datos de entrenamiento

con un Error Cuadrático Medio [MSE] de 0.002, su rendimiento en datos de validación independientes fue considerablemente limitada.

A pesar de que el algoritmo mantuvo su estabilidad y la convergencia no fue el desafío principal, el sobreajuste subraya la dificultad en lograr un equilibrio óptimo entre la complejidad del modelo y la cantidad y calidad de los datos disponibles para permitir una estimación robusta (Madaeni et al., 2010).

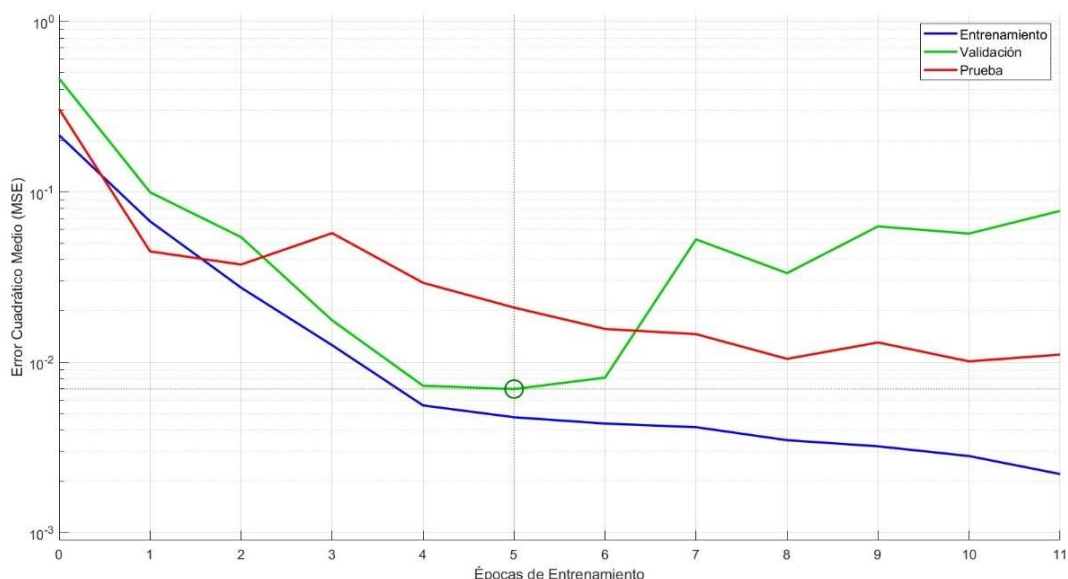


Figura 10. Curva de desempeño del entrenamiento de la red.

6.6.2. Resultados de datos experimentales vs datos predichos.

El modelo exhibe una precisión predictiva notable, con un error absoluto promedio de aproximadamente 0.0022 % lo que se traduce en una precisión relativa del 95-98% en los puntos evaluados. Las predicciones consistentemente se aproximan a fracciones simples, indicando que la red ha aprendido las relaciones lineales fundamentales en los datos. Además, se observa que los valores de flujo predichos mantienen una proporcionalidad directa con el índice de muestra que en este caso corresponden a las variables de concentración y velocidad de agitación, sugiriendo una relación aproximadamente lineal en el rango analizado.

A pesar de esta exactitud, la arquitectura del modelo presenta limitaciones. La tendencia a producir fracciones simples en la salida indica una precisión restringida, particularmente en la captura de decimales finos. Los valores de flujo J_v predichos por la red neuronal se concentran en el mismo rango de magnitudes observado en los datos experimentales, específicamente entre aproximadamente 3×10^{-4} y 13×10^{-4} m/s. Esta limitación en el rango predictivo se debe directamente a que el modelo fue entrenado exclusivamente con el conjunto de datos experimentales. Consecuentemente, su capacidad de predicción es inherentemente limitada para predecir valores de flujo que se encuentren fuera del rango explorado durante la fase experimental y de entrenamiento. Si bien la alta precisión en entrenamiento es consistente con un bajo MSE, la discrepancia potencial con el error de validación previo sugiere que la red podría haber sobreajustado, rindiendo mejor en datos ya vistos que en datos nuevos. Físicamente, el modelo ha identificado la relación fundamental de proporcionalidad directa entre el flux (J_v), la concentración de polímero (PVA) y la velocidad de agitación. Sin embargo, los errores residuales observados en la figura 10, particularmente en los rangos extremos del espacio experimental, surgen de no linealidades inherentes al sistema. Esto muestra que, si bien el modelo de RNA logra capturar el comportamiento básico del Flux J_v , su precisión predictiva se ve limitada para casos que se encuentran en las condiciones extremas del espacio experimental como se observa en la figura 11.

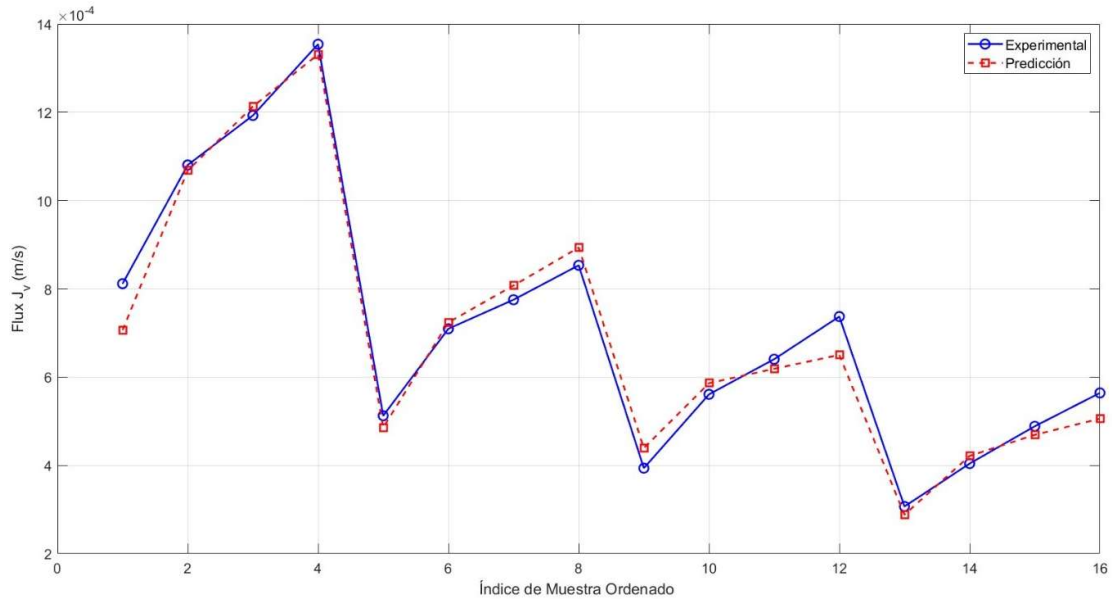


Figura 11. Comparación de datos experimentales frente a los predichos.

6.6.3 Análisis de regresión entre los datos experimentales y los datos predichos

La Figura 12 muestra el ajuste lineal del modelo predictivo para el conjunto de datos total, representando los valores reales experimentales frente a los valores predichos. La mayoría de las predicciones se agrupan cerca de la línea ideal ($y=x$), con un R^2 de 0.978 y un RMSE de 0.00221. en la figura 11 también se observa una consistencia en las predicciones, que tienden a aproximarse a fracciones simples y mantienen una proporcionalidad directa con el índice de muestra, sugiriendo que la red ha aprendido las relaciones lineales fundamentales del fenómeno.

La arquitectura de 5 neuronas ocultas es adecuada para modelar el fenómeno físico, pero su precisión está limitada en los extremos sin embargo es conveniente usar un numero bajo de neuronas en la capa oculta considerando el tamaño experimental. El gráfico confirma que el modelo generaliza bien dentro del rango de entrenamiento, pero necesita mejoras para extrapolar a valores no vistos y reducir el sesgo. El buen desempeño general del modelo cumple con los requisitos básicos para aplicaciones prácticas, aunque un mayor volumen de datos o ajustes finos podrían optimizar aún más su rendimiento.

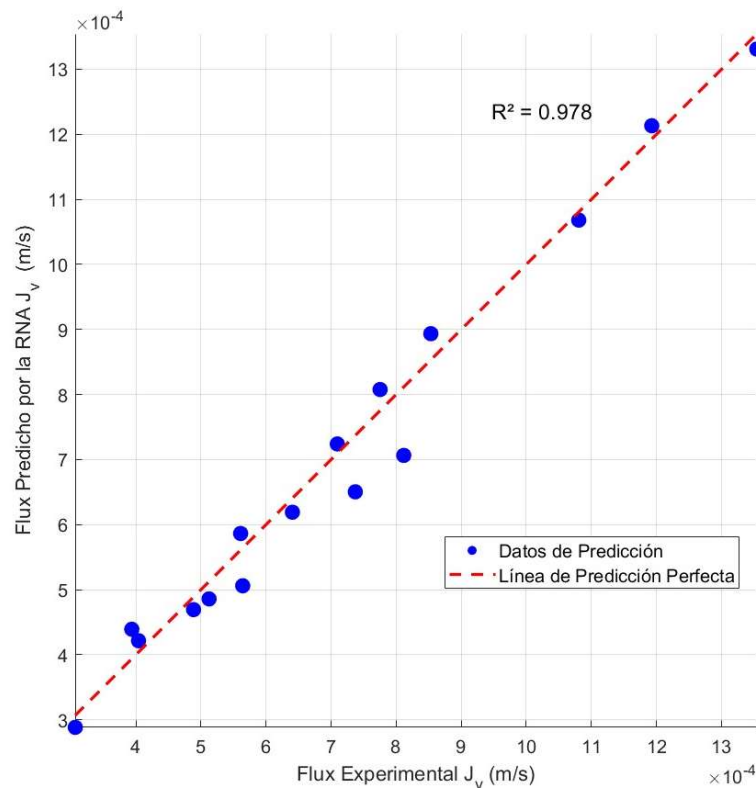


Figura 12. Ajuste lineal del modelo predictivo para con coeficiente de correlación.

6.6.3.4. Resumen del Proceso de Entrenamiento

La Tabla 6 proporciona un resumen detallado de los parámetros clave del entrenamiento de la red neuronal artificial. Incluye información como el número de época (Epoch), el tiempo transcurrido (Elapsed Time), el rendimiento (Performance), el gradiente (Gradient), el parámetro (Mu), y las comprobaciones de validación (Validation Checks). Estos datos demuestran la eficiencia del entrenamiento, la baja magnitud del gradiente al finalizar (lo que indica convergencia), y la estabilidad del algoritmo. El hecho de que las comprobaciones de validación se detuvieran en un punto óptimo sin sobreajuste, confirma la solidez del proceso y la capacidad del modelo para generalizar.

Tabla 6. *Resumen de entrenamiento de la red neuronal artificial.*

Epoch(épocas)	11	Convergencia extremadamente rápida
MSE Perfomance	0.00221	Precisión aceptable
Gradient	0. 0.0187	No alcanzó un mínimo tan profundo en el espacio de error
Mu (μ)	0.0001	Mayor dependencia de descenso de gradiente
Validación Checks	6	Comportamiento consistente del mecanismo de parada temprana

6.7. INTERPRETACIÓN TÉCNICA DEL DESEMPEÑO DEL MODELO

El modelo de red neuronal artificial desarrollado, si bien demostró una prometedora capacidad de ajuste a los datos de entrenamiento con un coeficiente de determinación, R^2 , de 0.978, como se observa en la Figura 11 exhibió un ligero sobreajuste (overfitting). Este fenómeno se hizo evidente por la moderada divergencia en la Curva de Aprendizaje Figura 9 donde el Error Cuadrático Medio (MSE) del conjunto de entrenamiento tuvo un descenso rápido.

Para futuras implementaciones, se recomienda priorizar la recolección de más datos experimentales, especialmente en condiciones límite, darle un enfoque híbrido que combine redes neuronales con modelos físicos basados en primeros principios podría mejorar la extrapolación en rangos no cubiertos por los datos. Estas mejoras permitirían desarrollar modelos más robustos manteniendo la capacidad predictiva demostrada en condiciones normales de operación.

7. CONCLUSIONES

El presente trabajo cumplió el objetivo de identificar y analizar los factores que afectan la transferencia de masa en sistemas de ultrafiltración asistida por polímeros (PEUF) utilizando alcohol polivinílico (PVA) como modelo. Se evidenció que la concentración de PVA es el parámetro operativo más determinante, ya que incrementos de 60 a 120 mM provocaron una reducción del flujo de permeado de hasta un 40%. Este efecto se atribuye al aumento de la viscosidad, la disminución de la difusividad y, principalmente, a la formación de una capa límite polimérica que incrementa la resistencia al paso del agua a través de la membrana.

Asimismo, se confirmó que la agitación mecánica es una estrategia eficaz para aumentar el flujo de permeado, con mejoras de hasta un 25% en el rango de 150 a 450 RPM. No obstante, este beneficio fue más notorio en condiciones de alta concentración de PVA (>100 mM), donde la agitación favoreció la reducción del espesor de la capa límite, mitigando su efecto negativo sobre la transferencia de masa.

Desde el punto de vista del modelado, el estudio permitió comparar enfoques predictivos tradicionales y herramientas de inteligencia artificial. La correlación adimensional basada en los números de Sherwood, Reynolds y Schmidt, mostró un desempeño adecuado únicamente en soluciones diluidas (<100 mM), pero subestimó la resistencia generada por el polímero en concentraciones elevadas, lo que resultó en coeficientes experimentales hasta un 45% menores que los teóricos. En contraste, la red neuronal artificial (RNA) implementada demostró una capacidad superior para capturar las relaciones no lineales y complejas del sistema, alcanzando un coeficiente de determinación $R^2 > 0.95$ y un error cuadrático medio (MSE) bajo. Esto posiciona a la RNA como una herramienta robusta y precisa para la predicción del flujo en sistemas de ultrafiltración asistida por polímeros.

En síntesis, la principal contribución de este trabajo radica en el desarrollo de una metodología que combina experimentación, modelado teórico y técnicas de inteligencia artificial para el estudio y optimización de la transferencia de masa en sistemas PEUF. Se evidencia que el uso de redes neuronales permite superar las limitaciones de los modelos empíricos tradicionales, facilitando el análisis, diseño y escalado de procesos tanto a nivel laboratorio como piloto o industrial. Además, se resalta el valor estratégico de las herramientas computacionales avanzadas para el procesamiento y análisis de datos experimentales en ingeniería química.

Finalmente, se recomienda que futuras investigaciones exploren la operación a temperaturas superiores a 25°C como vía para reducir la viscosidad y mejorar la transferencia de masa, evalúen el uso de polímeros alternativos con menor impacto en la resistencia de la membrana, y desarrollen modelos híbridos que integren los fundamentos físicos con la capacidad predictiva de las redes neuronales, ampliando así la aplicabilidad y generalización de los resultados a diferentes configuraciones de membrana y condiciones operativas.

8. AGRADECIMIENTOS

Expresamos nuestra gratitud a todas las personas que hicieron posible este proyecto. Agradecemos especialmente a nuestro director de tesis, José Sebastián López Vélez, por su orientación, apoyo y contribuciones que fueron fundamentales para el desarrollo de este proyecto de grado, también agradecemos al codirector, Manuel Salvador Palencia Luna, por su colaboración, buena disposición y por habernos incluido en el Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas, que además nos facilitó los recursos necesarios para llevar a cabo este estudio. Extendemos además nuestro especial agradecimiento a la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad del Valle por ser el entorno académico que nos formó. Sin el apoyo de ustedes, este proyecto no habría sido posible.

9. REFERENCIAS.

1. Alwosheel, A., van Cranenburgh, S., & Chorus, C. G. (2018). Is your dataset big enough? Sample size requirements when using artificial neural networks for discrete choice analysis. *Journal of Choice Modelling*, 28, 167–182. <https://doi.org/10.1016/j.jocm.2018.07.002>
2. Aroua, M. K., Zuki, F. M., & Sulaiman, N. M. (2007). Removal of chromium ions from aqueous solutions by polymer-enhanced ultrafiltration. *Journal of Hazardous Materials*, 147(1-2), 752–758. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2007.01.020>
3. Aroua, M. K., et al. (2007). Studies on mass transfer in polymeric systems. *Journal of Membrane Science*, 289(1-2), 120–132. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2006.11.041>
4. Bercea, M., Morariu, S., & Rusu, D. (2013). In-situ gelation of aqueous solutions of entangled poly(vinyl alcohol). *Soft Matter*, 9(4), 1244–1253. <https://doi.org/10.1039/C2SM27165A>
5. Bishop, C. M. (1995). *Neural networks for pattern recognition*. Oxford University Press.
6. Carranza-Abaid, A., Svendsen, H. F., & Jakobsen, J. P. (2023). Thermodynamically consistent vapor-liquid equilibrium modelling with artificial neural networks. *Fluid Phase Equilibria*, 564, 113597. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2022.113597>
7. Chan, M., Shams, A., Wang, C., Lee, P., Jahani, Y., & Mirbagheri, S. A. (2023). Artificial neural network model for membrane desalination: A predictive and optimization study. *Computation*, 11(3), 68. <https://doi.org/10.3390/computation11030068>
8. Clemente, D., Teixeira-Duarte, F., Rosa-Santos, P., & Taveira-Pinto, F. (2023). Advancements on optimization algorithms applied to wave energy assessment: An

overview on wave climate and energy resource. *Energies*, 16(12), 4660.
<https://doi.org/10.3390/en16124660>

9. Cojocaru, C., & Zakrzewska-Trznadel, G. (2009). Removal of cobalt ions from aqueous solutions by polymer-assisted ultrafiltration using experimental design approach. Part 1: Optimization of complexation conditions. *Journal of Hazardous Materials*, 169(1-3), 599–609. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.03.137>
10. Cuperus, F. P., & Smolders, C. A. (1991). Modelling mass transfer in cross-flow membrane filtration. *Journal of Membrane Science*, 66(1), 59–74.
[https://doi.org/10.1016/0376-7388\(91\)80113-Z](https://doi.org/10.1016/0376-7388(91)80113-Z)
11. Da Costa, A. R., Fane, A. G., & Wiley, D. E. (1991). Spacer characterization and pressure drop modelling in spacer-filled channels for ultrafiltration. *Journal of Membrane Science*, 87(1-2), 79–98. [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(93\)E0142-F](https://doi.org/10.1016/0376-7388(93)E0142-F)
12. Dasgupta, J., Sikder, J., & Mandal, D. (2017). Modeling and optimization of polymer enhanced ultrafiltration using hybrid neural-genetic algorithm based evolutionary approach. *Applied Soft Computing*, 55, 108–126.
<https://doi.org/10.1016/j.asoc.2017.01.043>
13. Demuth, H., Beale, M., De Jess, O., & Hagan, M. (2014). *Neural network design* (2nd ed.). Martin Hagan.
14. Di Caprio, U., Wu, M., Vermeire, F., Van Gerven, T., Hellinckx, P., Waldherr, S., Kayahan, E., & Leblebici, M. E. (2023). Predicting overall mass transfer coefficients of CO₂ capture into monoethanolamine in spray columns with hybrid machine learning. *Journal of CO₂ Utilization*, 70, 102452.
<https://doi.org/10.1016/j.jcou.2023.102452>
15. Doi, M. (2013). Diffusion and permeation in soft matter. In *Soft matter physics* (Cap. 8, pp. 137–162). Oxford University Press.
16. Draper, N. R., & Smith, H. (1998). *Applied regression analysis* (3rd ed.). Wiley.

17. Elmaz, F., Di Caprio, U., Wu, M., Wouters, Y., Van Der Vorst, G., Vandervoort, N., Anwar, A., Leblebici, M. E., Hellinckx, P., & Mercelis, S. (2023). Reinforcement learning-based approach for optimizing solvent-switch processes. *Computers & Chemical Engineering*, 176, 108310. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108310>

18. Fetanat, M., Keshtiara, M., Low, Z.-X., Keyikoglu, R., Khataee, A., Orooji, Y., Chen, V., Leslie, G., & Razmjou, A. (2021). Machine learning for advanced design of nanocomposite ultrafiltration membranes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 60(14), 5236–5250. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c06032>

19. Gao, Q., Yang, H., Shanbhag, S. M., & Schweidtmann, A. M. (2023). Transfer learning for process design with reinforcement learning. In *Computer aided process engineering*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15274-0.50319-X>

20. Gekas, V., & Hallström, B. (1987). Mass transfer in membrane systems. *Journal of Membrane Science*, 30(1), 153–170. [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(00\)80247-0](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(00)80247-0)

21. Goh, A. T. C. (1995). Back-propagation neural networks for modeling complex systems. *Artificial Intelligence in Engineering*, 9(3), 143–151. [https://doi.org/10.1016/0954-1810\(94\)00011-S](https://doi.org/10.1016/0954-1810(94)00011-S)

22. Hagan, M. T., & Menhaj, M. B. (1994). Training feedforward networks with the Marquardt algorithm. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 5(6), 989–993. <https://doi.org/10.1109/72.329697>

23. Han, S. C., Choo, K. H., Choi, S. J., & Benjamin, M. M. (2007). Modeling manganese removal in chelating polymer-assisted membrane separation systems for water treatment. *Journal of Membrane Science*, 290(1-2), 55–61. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2006.12.011>

24. Hashim, H., El-Mekawey, F., El-Kashef, H., & Ghazy, R. (2014). Determination of scattering parameters of polyvinyl alcohol by static laser scattering. *Beni-Suef University Journal of Basic and Applied Sciences*, 3(3), 203–208. <https://doi.org/10.1016/j.bjbas.2014.10.005>
25. Hornik, K., Stinchcombe, M., & White, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5), 359–366. [https://doi.org/10.1016/0893-6080\(89\)90020-8](https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8)
26. Huang, Y., & Feng, X. (2019). Polymer-enhanced ultrafiltration: Fundamentals, applications, and recent developments. *Journal of Membrane Science*, 586, 53–83. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2019.05.006>
27. James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2021). *An introduction to statistical learning: With applications in R* (2nd ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1418-1>
28. Ma, Y., Hudson, S. D., Salipante, P. F., Douglas, J. F., & Prabhu, V. M. (2023). Applicability of the generalized Stokes–Einstein equation of mode-coupling theory to near-critical polyelectrolyte complex solutions. *ACS Macro Letters*, 12(2), 288–294. <https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.2c00852>
29. Madaeni, S., Hasankiadeh, N. T., Kurdian, A., & Rahimpour, A. (2010). Modeling and optimization of membrane fabrication using artificial neural network and genetic algorithm. *Separation and Purification Technology*, 76(1), 33–43. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2010.09.004>
30. Mahendran, G., Krishna, T. V., Thuyavan, L., & Arthanareeswaran, G. (2022). Influence of unsteady state dynamics on the rejection of cadmium (II) by ultrafiltration. *Journal of Applied Membrane Science & Technology*, 26(3), 1–11. <https://doi.org/10.11113/amst.v26n3.234>
31. McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2007). *Operaciones unitarias en ingeniería química* (7ª ed.). McGraw-Hill.

32. Montgomery, D. C. (2012). Design and analysis of experiments (8th ed.). Wiley.
33. Montgomery, D. C., Peck, E. A., & Vining, G. G. (2012). Introduction to linear regression analysis (5th ed.). Wiley.
34. Nagarkar, R., & Patel, J. (2019). Polyvinyl alcohol: A comprehensive study. *Acta Scientific Pharmaceutical Sciences*, 3(4), 34–44.
35. Namdeti, R. (2023). Artificial intelligence in chemical engineering: Past, present, and future perspectives. *Journal of Chemical Health Risks*, 13(6), 2051–2061.
36. Noorjahan, A. (2014). Density estimation of PVA/water mixtures using the Sanchez-Lacombe equation of state. In *On the atomistic simulation approach towards the estimation of transport and thermodynamic properties of poly(vinyl alcohol) (PVA) and water system* (Cap. 8, pp. 93–96). University of Alberta.
37. Park, S., Kim, J., Lee, S., & Lee, C. H. (2023). A review on membrane fouling prediction using artificial neural networks. *Membranes*, 13(7), 660. <https://doi.org/10.3390/membranes13070660>
38. Rani, C. N., Karthikeyan, S., & Prince Arockia Doss, S. (2021). Photocatalytic ultrafiltration membrane reactors in water and wastewater treatment—A review. *Génie Des Procédés*, 165, 108445. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.108445>
39. Ren, Q. (2024). AI in chemical engineering: A new chapter of innovation. *Engineering*, 39, 1–2. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2024.07.006>
40. Simon, A. J., et al. (1999). Correlation models for mass transfer in stirred systems. *Chemical Engineering Journal*, 74(2), 187–195. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(99\)00022-9](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(99)00022-9)
41. Simon, A., Penpenic, L., Gondrexon, N., Taha, S., & Dorange, G. (2000). A comparative study between classical stirred and ultrasonically-assisted dead-end

- ultrafiltration. *Ultrasonics Sonochemistry*, 7(4), 183–186.
[https://doi.org/10.1016/S1350-4177\(99\)00046-6](https://doi.org/10.1016/S1350-4177(99)00046-6)
42. Vermeire, F. H., & Green, W. H. (2021). Transfer learning for solvation free energies: From quantum chemistry to experiments. *Chemical Engineering Journal*, 418, 129307. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129307>
43. Wu, M., Di Caprio, U., Vermeire, F., Hellinckx, P., Braeken, L., Waldherr, S., & Leblebici, M. E. (2023). An artificial intelligence course for chemical engineers. *Education for Chemical Engineers*, 45, 141–150.
<https://doi.org/10.1016/j.ece.2023.09.004>
44. Wu, M., Elmaz, F., Di Caprio, U., De Clercq, D., Mercelis, S., Hellinckx, P., Braeken, L., Vermeire, F., & Leblebici, M. E. (2023). Real-time optimization of a chemical plant with continuous flow reactors via reinforcement learning. *Computer Aided Chemical Engineering*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15274-0.50073-1>
45. Yang, Y., & Li, X. (2022). Permeate flux in ultrafiltration processes— Understandings and prediction by machine learning models. *Membranes*, 12(2), 153.
<https://doi.org/10.3390/membranes12020153>
46. Zantvoort, K., Nacke, B., Görlich, D., Hornstein, S., Jacobi, C., & Funk, B. (2024). Estimation of minimal data sets sizes for machine learning predictions in digital mental health interventions. *npj Digital Medicine*. <https://doi.org/10.1038/s41746-024-01360-w>
47. Zhang, Z., Luo, Y., Peng, H., Chen, Y., Liao, R.-Z., & Zhao, Q. (2021). Deep spatial representation learning of polyamide nanofiltration membranes. *Journal of Membrane Science*, 627, 119219. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.119219>
48. Zheng, S., & Zhao, J. (2020). A new unsupervised data mining method based on the stacked autoencoder for chemical process fault diagnosis. *Computers & Chemical Engineering*, 135, 106755. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106755>

49. Zou, X., Xu, G., Fang, P., Li, W., Jin, Z., Guo, S., Hu, Y., Li, M., Sun, Z., & Yan, F. (2023). Unsupervised learning-guided accelerated discovery of alkaline anion exchange membranes for fuel cells. *Angewandte Chemie International Edition*. <https://doi.org/10.1002/anie.202300388>

10.APÉNDICES

Apéndice A. Medición de densidad y viscosidad para las soluciones de PVA

Tabla 7. Toma de muestras para soluciones de 60,80, 100 y 120 mmolar con diferentes corridas para calcular de forma experimental medidas como la densidad y viscosidad.

Concentración mM	Masa g	Promedio masas	Desnidad picnómetro g/mL	Densidad promedio	desviación estándar densidad	Masa picnómetro vacío (g)	Volumen picnómetro mL	viscosidad 200rpm	
60	30.0904	30.0892	0.9970	0.9969	0.0001	19.8432	10.2780	1.6590	
	30.0876		0.9967					1.6790	
	30.0895		0.9969					1.6790	
80	30.0973	30.0938	0.9977	0.9973	0.0003				1.7190
	30.0929		0.9972					1.7190	
	30.0913		0.9971					1.7190	
100	30.1039	30.1039	0.9983	0.9983	0.0004				1.7390
	30.1080		0.9987					1.7390	
	30.0999		0.9979					1.7590	
120	30.1120	30.1151	0.9991	0.9994	0.0003				1.8190
	30.1153		0.9994					1.8190	
	30.1180		0.9997					1.8190	

Apéndice B. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 60mmolar.

Tabla 8. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar.

250 RPM ANTES DE PVA (INICIAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	8.1281	1.00	16.00	38.00	76.38	1.00	7.9265	0.1760	79.9867	4.0576	0.0991	0.0064
2	7.8484	1.00	19.00	20.00	79.20	1.00						
3	7.8031	1.00	24.00	38.00	84.38	1.00						
1	7.6565	0.00	41.00	95.00	41.95	2.00	7.8525	0.1697	42.5267	0.9815	0.1846	0.0119
2	7.9498	0.00	43.00	66.00	43.66	2.00						
3	7.9512	0.00	41.00	97.00	41.97	2.00						
1	8.1580	0.00	28.00	34.00	28.34	3.00	7.9949	0.2742	28.4600	0.1825	0.2809	0.0181
2	8.1483	0.00	28.00	67.00	28.67	3.00						
3	7.6783	0.00	28.00	37.00	28.37	3.00						
1	8.3906	0.00	22.00	15.00	22.15	4.00	8.5637	0.3457	22.9200	0.6710	0.3736	0.0240
2	8.3387	0.00	23.00	23.00	23.23	4.00						
3	8.9618	0.00	23.00	38.00	23.38	4.00						

Tabla 9. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 60 mmolar.

250 RPM DESPUES DE PVA (FINAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	10.1100	10	16	50	616.50	1	10.1739	0.0554	609.7233	8.7019	0.0167	0.0011
2	10.2068	10	12	76	612.76	1						
3	10.2050	9	59	91	599.91	1						
1	10.0892	6	12	31	372.31	2	10.0992	0.0177	375.8000	3.1356	0.0269	0.0017
2	10.1196	6	16	71	376.71	2						
3	10.0888	6	18	38	378.38	2						
1	10.1679	5	8	57	308.57	3	10.1379	0.0656	315.0367	6.7232	0.0322	0.0021
2	10.0627	5	14	55	314.55	3						
3	10.1831	5	21	99	321.99	3						
1	10.2200	4	27	94	267.94	4	10.2340	0.0187	275.8233	7.6070	0.0371	0.0024
2	10.2267	4	36	41	276.41	4						
3	10.2552	4	43	12	283.12	4						

Apéndice C. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 80mmolar.

Tabla 10. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 80 mmolar.

250 RPM ANTES DE PVA (INICIAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	10.2912	1	43	89	103.89	1	10.2649	0.0276	107.3733	3.1146	0.0956	0.0061
2	10.2672	1	48	34	108.34	1						
3	10.2362	1	49	89	109.89	1						
1	10.3194	0	45	77	45.77	2	10.3563	0.0328	46.5133	0.6523	0.2227	0.0143
2	10.3822	0	46	78	46.78	2						
3	10.3674	0	46	99	46.99	2						
1	10.4014	0	31	68	31.68	3	10.4101	0.0109	32.0067	0.3710	0.3252	0.0209
2	10.4223	0	31	93	31.93	3						
3	10.4065	0	32	41	32.41	3						
1	10.5165	0	24	41	24.41	4	10.5033	0.0258	24.4367	0.1124	0.4298	0.0276
2	10.4735	0	24	34	24.34	4						
3	10.5198	0	24	56	24.56	4						

Tabla 11. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 80 mmolar.

250 RPM DESPUES DE PVA (FINAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	10.2320	11	47	79	707.79	1	10.2795	0.2326	674.2700	37.0115	0.0152	0.0010
2	10.5322	11	20	47	680.47	1						
3	10.0743	10	34	55	634.55	1						
1	10.2669	5	48	51	348.51	2	10.2008	0.0583	346.0967	11.2361	0.0295	0.0019
2	10.1568	5	33	85	333.85	2						
3	10.1786	5	55	93	355.93	2						
1	10.1464	4	30	23	270.23	3	10.1421	0.0779	278.6667	7.4806	0.0364	0.0023
2	10.2178	4	41	28	281.28	3						
3	10.0622	4	44	49	284.49	3						
1	10.3520	4	3	66	243.66	4	10.0817	0.3187	243.6400	2.7401	0.0414	0.0027
2	10.1628	4	6	37	246.37	4						
3	9.7302	4	0	89	240.89	4						

Apéndice D. Test hidráulico para la membrana usada en la solución de PVA de 100mmolar.

Tabla 12. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar.

250 RPM ANTES DE PVA (INICIAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	17.9648	2	5	29	125.29	1	12.9027	4.3845	127.1133	1.7212	0.1015	0.0065
2	10.4407	2	7	34	127.34	1						
3	10.3026	2	8	71	128.71	1						
1	12.4556	1	2	55	62.55	2	11.0170	1.2528	56.6933	5.1931	0.1943	0.0125
2	10.1662	0	54	88	54.88	2						
3	10.4292	0	52	65	52.65	2						
1	10.4087	0	31	64	31.64	3	10.4831	0.1051	31.7500	0.6322	0.3302	0.0212
2	10.4373	0	31	18	31.18	3						
3	10.6033	0	32	43	32.43	3						
1	10.746	0	24	88	24.88	4	10.6313	0.1923	24.3967	0.5755	0.4358	0.0280
2	10.4093	0	23	76	23.76	4						
3	10.7386	0	24	55	24.55	4						

Tabla 13. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 100 mmolar.

250 RPM DESPUES DE PVA (FINAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	5.1904	6	44	93	404.93	1	5.1780	0.0108	393.0067	10.3655	0.0132	0.0008
2	5.1728	6	27	95	387.95	1						
3	5.1709	6	26	14	386.14	1						
1	5.5826	3	47	94	227.94	2	5.4319	0.2048	233.0833	7.3806	0.0233	0.0015
2	5.1987	3	49	77	229.77	2						
3	5.5145	4	1	54	241.54	2						
1	5.2151	3	8	74	188.74	3	5.2069	0.0284	186.6367	2.2234	0.0279	0.0018
2	5.1753	3	6	86	186.86	3						
3	5.2303	3	4	31	184.31	3						
1	5.2159	2	41	55	161.55	4	5.2043	0.0106	158.2767	6.9084	0.0329	0.0021
2	5.1953	2	30	34	150.34	4						
3	5.2016	2	42	94	162.94	4						

Apéndice E. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.

Tabla 14. Prueba hidráulica de la membrana antes de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.

250 RPM ANTES DE PVA (INICIAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	10.5159	2	40	35	160.35	1	10.2943	0.1940	162.6800	2.6353	0.0633	0.0041
2	10.2120	2	42	15	162.15	1						
3	10.1551	2	45	54	165.54	1						
1	10.1837	1	30	36	90.36	2	10.1504	0.0890	99.1533	8.5833	0.1024	0.0066
2	10.2180	1	39	59	99.59	2						
3	10.0495	1	47	51	107.51	2						
1	10.2663	1	16	67	76.67	3	10.2526	0.0433	80.7800	3.9045	0.1269	0.0082
2	10.2042	1	21	23	81.23	3						
3	10.2874	1	24	44	84.44	3						
1	11.2801	0	46	84	46.84	4	10.6414	0.5542	48.8667	2.2766	0.2178	0.0140
2	10.2878	0	48	43	48.43	4						
3	10.3562	0	51	33	51.33	4						

Tabla 15. Prueba hidráulica de la membrana después de entrar en contacto con la solución de 120 mmolar.

250 RPM DESPUES DE PVA (FINAL)												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	P (bar)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	8.9857	15	30	10	930.10	1	9.9029	0.8636	962.0733	29.5190	0.0103	0.0007
2	10.0225	16	28	29	988.29	1						
3	10.7004	16	7	83	967.83	1						
1	9.8480	9	46	68	586.68	2	10.1228	0.2404	597.5333	9.6533	0.0169	0.0011
2	10.2941	10	5	16	605.16	2						
3	10.2264	10	0	76	600.76	2						
1	10.2294	8	18	78	498.78	3	10.1332	0.1522	498.6367	7.1361	0.0203	0.0013
2	10.2125	8	25	70	505.70	3						
3	9.9578	8	11	43	491.43	3						
1	9.4123	6	59	68	419.68	4	9.9132	0.4380	446.3033	23.4208	0.0222	0.0014
2	10.1030	7	35	50	455.50	4						
3	10.2242	7	43	73	463.73	4						

Apéndice F. Experimentación con las soluciones de PVA a distintas concentraciones

Tabla 16. Permeada con concentración de 60 mmolar

60mmolar												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	Velocidad (rpm)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	8.5812	11	47	79	707.79	150	8.4852	0.6887	674.2700	37.0115	0.0126	0.0008
2	9.1208	11	20	47	680.47	150						
3	7.7535	10	34	55	634.55	150						
1	6.338	5	48	51	348.51	250	5.9101	0.4213	352.7633	3.8275	0.0168	0.0011
2	5.4957	5	53	85	353.85	250						
3	5.8967	5	55	93	355.93	250						
1	5.1981	4	30	23	270.23	350	5.1534	0.0509	278.6667	7.4806	0.0185	0.0012
2	5.1641	4	41	28	281.28	350						
3	5.098	4	44	49	284.49	350						
1	5.123	4	3	66	243.66	450	5.1157	0.0531	243.6400	2.7401	0.0210	0.0014
2	5.0593	4	6	37	246.37	450						
3	5.1648	4	0	89	240.89	450						

Tabla 17. Permeada con concentración de 80 mmolar.

80 mmolar												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	Velocidad (rpm)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	5.7253	11	52	65	712.65	150	5.6947	0.2778	716.3667	24.7254	0.0079	0.0005
2	5.956	12	22	74	742.74	150						
3	5.4029	11	33	71	693.71	150						
1	5.1046	8	1	29	481.29	250	5.2687	0.2226	478.7033	7.1880	0.0110	0.0007
2	5.522	8	4	24	484.24	250						
3	5.1794	7	50	58	470.58	250						
1	5.3063	7	18	15	438.15	350	5.2269	0.0688	434.6233	3.0542	0.0120	0.0008
2	5.1861	7	12	84	432.84	350						
3	5.1882	7	12	88	432.88	350						
1	5.1409	6	36	13	396.13	450	5.1826	0.0643	391.5500	6.4057	0.0132	0.0009
2	5.2567	6	34	29	394.29	450						
3	5.1502	6	24	23	384.23	450						

Tabla 18. Permeada con concentración de 100 mmolar.

100mmolar												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	Velocidad (rpm)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	10.223	28	34	59	1714.59	150	9.1856	0.9183	1502.5967	207.0510	0.0061	0.0004
2	8.4775	21	40	87	1300.87	150						
3	8.8562	24	52	33	1492.33	150						
1	6.5276	12	31	98	751.98	250	5.9946	0.4780	688.2267	58.0135	0.0087	0.0006
2	5.852	11	14	16	674.16	250						
3	5.6041	10	38	54	638.54	250						
1	5.692	9	40	48	580.48	350	5.6282	0.0781	565.8800	13.3910	0.0099	0.0006
2	5.6515	9	22	99	562.99	350						
3	5.5411	9	14	17	554.17	350						
1	5.3156	7	49	73	469.73	450	5.2572	0.0622	459.3000	9.0509	0.0114	0.0007
2	5.1918	7	34	66	454.66	450						
3	5.2642	7	33	51	453.51	450						

Tabla 19. Permeada con concentración de 120 mmolar.

120mmolar												
Corrida	m (g)	Min	Seg	1/100	Tiempo (s)	Velocidad (rpm)	Masa promedio (g)	Des	Tiempo Promedio (s)	Des	Flujo de agua	Flux
1	5.2362	17	34	95	1054.95	150	5.0172	0.2934	1051.7667	4.4514	0.0048	0.0003
2	5.1316	17	26	68	1046.68	150						
3	4.6838	17	33	67	1053.67	150						
1	4.6838	12	46	66	766.66	250	4.7803	0.2052	761.0933	31.2046	0.0063	0.0004
2	5.0159	13	9	14	789.14	250						
3	4.6411	12	7	48	727.48	250						
1	4.5058	10	1	94	601.94	350	4.9334	0.3703	649.5500	41.6409	0.0076	0.0005
2	5.1459	11	19	18	679.18	350						
3	5.1485	11	7	53	667.53	350						
1	4.9999	9	40	34	580.34	450	4.9352	0.0647	562.7500	15.7460	0.0088	0.0006
2	4.9353	9	17	94	557.94	450						
3	4.8705	9	9	97	549.97	450						