



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**SIMULACIÓN Y PREDICCIÓN POR RNA DE LA COMPOSICIÓN
DE TETRAHIDROFURANO SEPARADO DE UNA MEZCLA
AZEOTRÓPICA TETRAHIDROFURANO - AGUA UTILIZANDO
DWSIM**

Trabajo de titulación

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: JENNIFER PAULINA TAIPE PILLA

DIRECTOR: Ing. DARÍO FERNANDO GUAMÁN LOZADA

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Jennifer Paulina Taipe Pilla.

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

Yo, Jennifer Paulina Taipe Pilla, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 15 de septiembre de 2021

Jennifer Paulina Taipe Pilla

172249852-2

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo: propuesta tecnológica. **SIMULACIÓN Y PREDICCIÓN POR RNA DE LA COMPOSICIÓN DE TETRAHIDROFURANO SEPARADO DE UNA MEZCLA AZEOTRÓPICA TETRAHIDROFURANO - AGUA UTILIZANDO DWSIM**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Cesar Arturo Puente Guijarro PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-15
Ing. Darío Fernando Guamán Lozada DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN	_____	2021-09-15
Ing. Linda Mariuxi Flores Fiallos MIEMBRO DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-15

DEDICATORIA

Dedico este trabajo principalmente a Dios, quien ha sido mi guía y fortaleza cada día de mi vida y cuyo amor y misericordia me ha permitido llegar hasta el día de hoy. A mis padres, por haberme apoyado incondicionalmente, pese a las dificultades que se prestaron el camino. A mi querida hermana por su cariño y apoyo incondicional.

Jennifer

AGRADECIMIENTO

Quiero expresar mi gratitud a todas las personas que hicieron posible este proyecto y a aquellas que de alguna manera estuvieron conmigo en todo momento de mi vida guiándome y apoyándome durante todo mi camino y finalmente conseguir mi meta

Jennifer

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	x
ÍNDICE DE FIGURAS.....	xi
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xii
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xiii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS.....	xiv
RESUMEN.....	xvi
SUMMARY.....	xvii

CAPÍTULO I

1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	Antecedentes.....	1
1.2	Planteamiento del problema	2
1.3	Objetivos	4
1.3.1	<i>Objetivo General</i>	4
1.3.2	<i>Objetivos Específicos</i>	4
1.4	Justificación del proyecto	5
1.5	Alcance	6

CAPÍTULO II

2	MARCO TEÓRICO	7
2.1	Estado del Arte.....	7
2.2	Bases Teóricas	8
2.2.1	<i>Azeótropo</i>	8
2.2.2	<i>Mezcla azeotrópica de tetrahidrofurano – agua</i>	9
2.2.3	<i>Métodos de separación de tetrahidrofurano - agua</i>	9
2.2.3.1	<i>Pervaporación por membrana</i>	9

2.2.3.2	<i>Destilación por oscilación de presión (PSD)</i>	10
2.2.3.3	<i>Destilación extractiva (DE)</i>	11
2.2.4	DWSIM	12
2.2.4.1	<i>Características importantes de DWSIM</i>	12
2.2.5	Redes neuronales artificiales	13
2.2.5.1	<i>Arquitectura de la red neuronal artificial</i>	15
2.2.6	Entrenamiento de la red neuronal	17
2.2.6.1	<i>Algoritmos de entrenamiento</i>	19
2.2.7	Redes neuronales en Matlab	19

CAPÍTULO III

3	METODOLOGÍA	20
3.1	Establecimiento de parámetros y variables	21
3.1.1	<i>Operacionalización de variables</i>	22
3.1.1.1	<i>Selección de variables</i>	22
3.1.1.2	<i>Operación de variables</i>	22
3.2	Simulación DWSIM	23
3.2.1	<i>Validación de la simulación</i>	25
3.3	Procesamiento de la base de datos para entrenamiento de la RNA	25
3.4	Diseño de la red neuronal artificial	26
3.5	Entrenamiento de la red neuronal artificial	27
3.6	Validación de la red neuronal artificial por análisis estadístico	31

CAPÍTULO IV

4	GESTIÓN DEL PROYECTO	32
4.1	Cronograma	32
4.2	Presupuesto	33
4.3	Recursos humanos y materiales	33

4.3.1	<i>Talento humano</i>	33
4.3.2	<i>Recursos materiales y software</i>	33
4.4	Resultados	34
4.4.1	<i>Simulación del proceso en DWSIM</i>	34
4.4.1.1	<i>Balance de masa del proceso</i>	36
4.4.2	<i>Base de datos para desarrollar la red neuronal artificial</i>	39
4.4.3	<i>Programación de la red neuronal artificial</i>	39
4.4.3.1	<i>Normalización de los datos</i>	39
4.4.3.2	<i>Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial</i>	39
4.4.3.3	<i>Validación de la red neuronal artificial</i>	40
4.4.4	<i>Análisis estadístico de los datos predichos por la red</i>	40
4.4.4.1	<i>Análisis de la varianza ANOVA para el flujo másico.</i>	40
4.4.4.2	<i>Análisis de la varianza ANOVA para la fracción molar</i>	41
	CONCLUSIONES	43
	RECOMENDACIONES	44
	GLOSARIO	
	BIBLIOGRAFÍA	
	ANEXOS	

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2. Funciones de activación más comunes	15
Tabla 1-3. Parámetros de operación óptimos del proceso.....	22
Tabla 2-3. Variables del proceso.....	22
Tabla 3-3. Condiciones de la corriente de alimentación	24
Tabla 4-3. Especificaciones en las columnas	24
Tabla 5-3. Validación de la simulación.....	25
Tabla 6-3. Rangos de operación de las variables independientes	26
Tabla 7-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial	26
Tabla 8-3. Ensayos de entrenamiento de la red neuronal artificial.	28
Tabla 9-3. Tabla ANOVA para el análisis de la varianza	31
Tabla 1-4. Cronograma del proyecto.....	32
Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto	33
Tabla 3-4. Talento humano	33
Tabla 4-4. Softwares y equipos utilizados para desarrollar el proyecto.....	33
Tabla 5-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (D1)	34
Tabla 6-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (B1)	34
Tabla 7-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de etilenglicol (D2)	35
Tabla 8-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de etilenglicol (B2)	35
Tabla 9-4. Corriente de recirculación de etilenglicol recuperado (EG_Recircula)	35
Tabla 10-4. Resumen de resultados del balance de masa del proceso	39
Tabla 11-4. Tabla de Medias para el flujo másico de destilado en la primera columna	40
Tabla 12-4. Tabla ANOVA para el flujo másico de destilado en primera columna	41
Tabla 13-4. Tabla de Medias para la fracción molar de THF real y predicha.....	41
Tabla 14-4. Tabla ANOVA para la fracción molar de THF real y predicha.....	41

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2. (a) azeótropo de Eb. máxima. (b) azeótropo de Eb. mínima.....	8
Figura 2-2. Diagramas de equilibrio del punto de ebullición para la mezcla THF-agua	9
Figura 3-2. Diagrama de flujo de la deshidratación por pervaporación.....	10
Figura 4-2. (a) Diagrama de flujo PSD, (b) Diagrama Txy para azeótropos de Eb. mínima.	11
Figura 5-2. Diagrama de Flujo de Destilación Extractiva.....	12
Figura 6-2. Estructura de una neurona artificial.....	13
Figura 7-2. Ejemplo de una red de alimentación hacia adelante con múltiples capas	17
Figura 1-3. Metodología a seguir en el trabajo	20
Figura 2-3. Diagrama de flujo del proceso de separación de tetrahidrofurano - agua.	21
Figura 3-3. Diagrama de flujo del proceso de recuperación de THF en DWSIM	23
Figura 4-3. Herramienta Neural Fitting app de Matlab.....	27
Figura 5-3. Selección de entradas y salidas normalizadas	27
Figura 6-3. Arquitectura de la red neuronal artificial	29
Figura 7-3. Selección del algoritmo de entrenamiento	30
Figura 8-3. Proceso de entrenamiento de la RNA.....	30
Figura 1-4. Diagrama del proceso de recuperación de tetrahidrofurano.....	36

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-4. Flujo másico de destilado en la columna de recuperación de THF.	40
Gráfico 2-4. Fracción molar de THF recuperado en destilado de la primera columna	41

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. Características importantes de DWSIM

ANEXO B. Conjunto de datos de entrenamiento de la red neuronal artificial

ANEXO C. Conjunto de datos de validación de la red neuronal artificial

ANEXO D. Normalización de los datos de entrenamiento

ANEXO E. Normalización de los datos de validación

ANEXO F. Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial

ANEXO G. Resultados del entrenamiento de la red con diferentes neuronas en la capa oculta

ANEXO H. Datos predichos durante el entrenamiento de la red neuronal artificial

ANEXO I. Validación de la red neuronal artificial

ANEXO J. Datos predichos durante la validación de la red neuronal artificial

ANEXO K. Gráficos Anova para validación de la red neuronal artificial

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

ANOVA	Análisis de la varianza
atm	atmósferas
B_1	Flujo másico de residuo en la primera columna
B_2	Flujo másico de residuo en la segunda columna
BR	Regularización Bayesiana
C_1	Columna de destilación extractiva
C_2	Columna de recuperación del agente de arrastre
CAPE-OPEN	Ingeniería de procesos asistida por computadora de próxima generación - Entorno de simulación abierto
D_1	Flujo másico de destilado en la primera columna
D_2	Flujo másico de destilado en la segunda columna
DE	Destilación Extractiva
EG	Etilenglicol
Feed	Flujo másico de alimentación
H_2O	Agua
K	Kelvin
kg/h	kilogramo por hora
kg/kmol	kilogramo por kilomol
kJ/kg	kilojulio por kilogramo
kJ/[kg. K]	kilojulio por kilogramo kelvin
kJ/kmol	kilojulio por kilomol
kJ/[kmol. K]	kilojulio por kilomol Kelvin
kmol/h	kilomol por hora
kW	kiloWatts

LM	Levenberg Marquardt
MSE	Error cuadrático medio
m ³ /h	metro cúbico por hora
NRTL	Modelo no aleatorio de dos líquidos
PSD	Destilación por oscilación de presión
Q _s	Calor de salida
R	Coefficiente de correlación de Pearson
RNA	Red Neuronal Artificial
RR _{C1}	Relación de reflujo en la primera columna de destilación extractiva
RR _{C2}	Relación de reflujo en la columna de recuperación del agente de arrastre
SCG	Scaled Conjugate Gradient
THF	Tetrahidrofurano
TR _{C1}	Temperatura del calderín en la columna de destilación extractiva
VLE	Equilibrio Vapor - Líquido
W/[m. K]	Watt por metro Kelvin
X	valor que se desea normalizar
X'	valor normalizado
X _{min}	valor mínimo
X _{max}	valor máximo
X _{THF,D1}	Fracción molar de tetrahidrofurano recuperado en la primera columna
X _{THF,F}	Fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación

RESUMEN

La finalidad de este trabajo fue simular un sistema de destilación extractiva para separar la mezcla tetrahidrofurano-agua y predecir la composición de tetrahidrofurano mediante redes neuronales artificiales. La simulación del sistema de destilación se llevó a cabo con el software DWSIM y el modelo de predicción se desarrolló en Matlab. Los datos experimentales recopilados de la literatura se utilizaron para construir y validar tanto la simulación como la red neuronal. El modelo de predicción fue diseñado empleando 100 datos de entrenamiento con 4 variables de entrada: La fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación, la relación de reflujo y temperatura del calderín en la primera columna; la relación de reflujo en la segunda columna; 2 variables de salida: la fracción molar y flujo másico de tetrahidrofurano recuperado en columna de destilación extractiva. En la capa oculta: 400 neuronas y el algoritmo de regularización bayesiana. Durante el entrenamiento y prueba de la red neuronal se obtuvo un coeficiente de correlación de 0,97225; un error cuadrático medio de $5,17 \text{ E-}03$; un $p\text{-value} > 0,05$, el cual, valida la red neuronal, evidenciando que no existe una diferencia estadística entre los valores predichos y los datos reales. La red simula un proceso que se alimenta con 3000 Kg/h de la mezcla azeotrópica a 320 K; 1,57 Kg/h de etilenglicol en un sistema de destilación que opera en dos columnas mantenidas 1,1 atm. Los resultados indican que la red neuronal artificial puede ser ampliamente utilizada como una herramienta de simulación eficiente al momento de predecir la concentración de tetrahidrofurano que se desee separar mediante destilación extractiva de una mezcla azeotrópica de tetrahidrofurano-agua. Se recomienda emplear el modelo de predicción para desarrollar redes neuronales que permitan calcular la cantidad de los componentes separados en otras mezclas azeotrópicas por destilación extractiva con el adecuado agente de arrastre.

Palabras clave: <INGENIERÍA Y TECNOLOGIA QUÍMICA>, <DESTILACIÓN EXTRACTIVA>, <ETILENGLICOL>, <MEZCLA AZEOTRÓPICA>, <SIMULADOR DWSIM>, <REDES NEURONALES ARTIFICIALES>, <TETRAHIDROFURANO>, <AGENTE DE ARRASTRE>

LUIS ALBERTO
CAMINOS
VARGAS

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, l=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974, cn=LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Fecha: 2021.03.19 16:49:05 -05'00'



0791-DBRAI-UPT-2021

SUMMARY

The objective of this study was to simulate an extractive distillation system to separate the tetrahydrofuran-water mixture and predict the composition of tetrahydrofuran using artificial neural networks. The simulation of the system was done with the DWSIM software, and the prediction model was developed in Matlab. The experimental data collected from the literature was used to build and validate the simulation and the neural network. The prediction model was designed using 100 data as with 4 input variables, the molar fraction of tetrahydrofuran in the inlet, the reflux ratio, and the temperature of the reboiler in the first column; the reflux ratio in the second column; 2 output variables, the molar fraction and mass flow of tetrahydrofuran recovered in the extractive distillation column. In the hidden layer, 400 neurons and the Bayesian regularization algorithm. During the training and testing of the neural network, a correlation coefficient of 0.97225 was obtained; a root means the square error of 5.17×10^{-3} ; a p-value > 0.05 , which validates the neural network, showing that there is no statistical difference between the predicted values and the real data. The network simulates a process that is fed with 3000 Kg / h of the azeotropic mixture at 320 K; 1.57 Kg / h of ethylene glycol in a distillation system that operates in two columns maintained 1.1 atm. The results indicate that the artificial neural network can be widely used as an efficient simulation tool when predicting the concentration of tetrahydrofuran that is desired to be separated by extractive distillation of an azeotropic mixture of tetrahydrofuran-water. It is recommended to use the prediction model to develop neural networks that allow calculating the amount of the separated components in other azeotropic mixtures by extractive distillation with the appropriate entrainment agent.

Keywords: <CHEMICAL ENGINEERING AND TECHNOLOGY>, <EXTRACTIC DISTILLATION>, <ETHYLENE GLYCOL>, <AZEOTROPIC MIXTURE>, <DWSIM SIMULATOR>, <NEURON NETWORKS

ANGEL
PAUL
OBREGON
MAYORG
A

Digitally signed
by ANGEL PAUL
OBREGON
MAYORGA
Date:
2021.11.29
10:23:14 -05'00'

CAPÍTULO I

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Gran parte de los procesos de producción de tetrahidrofurano parten del 1,4-butanodiol, siendo la síntesis de Reppe la primera en ser aplicada industrialmente. Se han desarrollado procesos alternativos, en los que se utilizan como reactivos butadieno, alcoholes, n-butano, anhídrido maleico y ácido maleico. A partir de estos procesos se produce un azeótropo acuoso de THF, que debe separarse a 99,9% mol de THF, para que el producto sea comercialmente atractivo (Gómez y Gil, 2009, p.2).

Existe una variedad de procesos adecuados para la separación de mezclas azeotrópicas, incluida la destilación por oscilación de presión, la per-vaporación, y la destilación extractiva. Entre estos, la destilación extractiva es el método más utilizado para la separación de la mezcla azeotrópica THF-agua en el que se aplica la adición de un agente separador para aumentar la volatilidad relativa de los componentes ligeros y pesados (Fan et al., 2013, p.829).

Sin embargo, los experimentos de laboratorio en destilación extractiva demanda tiempo y son costosos debido a la gran cantidad de parámetros involucrados. Por lo tanto, resulta conveniente predecir datos experimentales con la ayuda de programas de simulación disponibles (Lladosa et al., 2011, p.1266).

La simulación es una herramienta útil para evaluar el proceso, ya que algunas de sus características pueden predecirse evitando altos gastos. La simulación del proceso de destilación extractiva para la deshidratación del THF se realiza con un arrastrador adecuado, previamente seleccionado mediante una metodología adecuada. Para determinar las variables operativas y su efecto sobre la pureza del producto y el consumo energético, se realizó un análisis de sensibilidad. El proceso de destilación extractiva se describe en la siguiente sección (Gómez y Gil, 2009, p.3).

En la actualidad, el uso de simuladores y redes neuronales artificiales para el modelado y diseño de procesos es en una herramienta eficaz para el desarrollo y optimización de procesos en la industria (Lladosa et al., 2011, p.1267).

1.2 Planteamiento del problema

El tetrahidrofurano (THF) u oxido de dietileno es un producto altamente utilizado en la industria química de procesos, principalmente para la de poliuretanos, elastómeros y copoliésteres o copoliamidas. También es un solvente de importancia en la elaboración de pinturas, adhesivos, barnices, etc (Gómez, 2007, p.7).

La producción de las fibras Spandex (un elastómero comercial) ha incrementado la demanda de THF ganando gran importancia los procesos de producción de THF en los últimos años. El THF se obtiene en solución con agua, mezcla que debe ser separada para lograr una pureza de 99,9% mol de THF. Sin embargo, la mezcla THF-agua genera un azeótropo a 82,9% mol de tetrahidrofurano, por tanto, la mezcla no puede separarse mediante destilación simple. Ante las dificultades para separar la mezcla debido al fenómeno azeotrópico, el tetrahidrofurano no se puede separar de su solución acuosa mediante un método de destilación convencional. Por lo tanto, una técnica de separación, como la destilación extractiva (DE) se utilizan a menudo en la industria con más frecuencia que otras alternativas, debido al bajo consumo de energía y selección flexible de los posibles agentes de arrastre (Rodriguez-Donis et al., 2009, p.1120).

La destilación extractiva (DE) es un tema de gran interés industrial como técnica probada y exitosa para separar sistemas azeotrópicos. Implica la adición de un agente separador (agente de arrastre), como en este caso el Etilenglicol que interactúa de manera diferente con los componentes de la mezcla tetrahidrofurano - agua y altera sus volatilidades. La selección exitosa del agente de arrastre es uno de los pasos más importantes, ya que determina los costos de capital y energía de todo el proceso (Kim et al., 2004, p.1612).

Sin embargo llevar a cabo una destilación extractiva a nivel de una planta piloto en laboratorio conllevarían mucho tiempo y costos de operación; es por ello que actualmente en la industria y en este trabajo se hace uso de la simulación de procesos para crear una representación del proceso real, con un margen de costo mucho más bajo y con la posibilidad de analizar errores en el diseño en lugar de hacerlo en el sistema real, así pues, permite experimentar con el sistema de una manera simple y entendible, y a su vez someterlo a diversos cambios de variables operativas. Por lo tanto, se pueden representar los procesos existentes o que se van a implementar en una empresa a futuro, realizar pruebas y análisis en base a los resultados obtenidos sin suspender la actividad operacional de la empresa.

En complemento a ello, implementar una red neuronal artificial (RNA) permitirá diseñar un modelo que aprenda del proceso simulado y prediga la concentración de tetrahidrofurano recuperado por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica. Desde el punto de vista de la ingeniería, las RNA se pueden ver como modelos empíricos no lineales que son especialmente

útiles para representar procesos a partir de datos de entrada y salida, hacer predicciones en el tiempo, clasificar datos y reconocer patrones. Es por ello que, el presente trabajo evidenciará que las redes neuronales artificiales pueden aprender de un proceso; y en este caso predecir la composición de tetrahidrofurano recuperado por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente arrastrante; para ello se empleará el software DWSIM para simular el proceso y obtener una base de datos para el aprendizaje de la red neuronal artificial.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Realizar un modelo de predicción de la composición de tetrahidrofurano recuperado de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua mediante simulación en DWSIM y redes neuronales artificiales.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Simular el proceso de la obtención de tetrahidrofurano por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre en DWSIM.
- Obtener una base de datos a partir de simulaciones en DWSIM modificando variables significativas dentro del proceso de destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre.
- Establecer la arquitectura de la red neuronal artificial para el entrenamiento y su posterior predicción, que permita obtener resultados consistentes con el proceso.
- Validar los resultados predichos por la red neuronal mediante un análisis estadístico comparativo.

1.4 Justificación del proyecto

La simulación de procesos y predicción de datos por redes neuronales son herramientas imprescindibles al momento de obtener información relevante para implementar u optimizar los procesos industriales, en este sentido el Ingeniero Químico está capacitado para utilizar softwares especializados de simulación que le permitan identificar las principales variables y como éstas intervienen dentro de los procesos químicos, logrado una mejora en los procesos industriales a un bajo costo y sin necesidad de interactuar con el proceso real.

En vista de la creciente demanda por el ahorro de recursos, tanto en inversión de capital como en ahorro de energía, utilizar redes neuronales artificiales se ha convertido en una herramienta aliada para el cumplimiento de las demandas ya mencionadas, debido a su capacidad de predicción y utilidad dentro del campo científico ahorrando procedimientos tedios de cálculo y simulación para cada uno de los objetivos propuestos dentro del campo investigativo.

La falta de propuestas en el campo de la separación de mezclas azeotrópicas, entiéndase a estas como la constitución de componentes de puntos de ebullición muy cercanos como es el caso del tetrahidrofurano-agua, dejan un campo abierto en la investigación y desarrollo tecnológico por ello es importante llevar a cabo la predicción de la composición de tetrahidrofurano recuperado por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre misma que da una alternativa viable en miras del avance en el campo industrial, así como su posible aplicación en el campo educativo, brindando herramientas interactivas que faciliten el entendimiento de procesos industriales por medio del uso de software especializados cuyo propósito fundamental es acercarse a la realidad del funcionamiento en cada una de las etapas u operaciones dentro del proceso.

La manera más común de obtener tetrahidrofurano anhidro es por medio de destilación extractiva utilizando 1,4-butanediol como solvente. También se ha utilizado el 1,2-propanodiol (Songlin y Wang, 2006, p.478) como solvente, pero en este trabajo se utilizará como solvente Etilenglicol para la separación de la mezcla THF-agua. Como el software DWSIM empleado para desarrollar el modelo de simulación es de código libre, se pretende que la información sea de acceso abierto para todas las personas que deseen utilizar este trabajo como guía para el desarrollo de futuros proyectos.

1.5 Alcance

El presente trabajo de titulación beneficiará a los estudiantes de la carrera Ingeniería Química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, con la finalidad de afianzar sus conocimientos sobre procesos industriales, a través de la simulación mediante software de código abierto, y la posible aplicación de redes neuronales artificiales para predecir variables de operación en los diferentes procesos químicos desarrollados a nivel industrial.

El sector industrial también puede beneficiarse si decide utilizar el modelo de predicción planteado en la presente investigación a partir de datos obtenidos en bibliografía para crear sus propias redes neuronales entrenadas con los datos del proceso en tiempo real; logrando optimizaciones de alto rendimiento y bajo costo.

CAPÍTULO II

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Estado del Arte

El tetrahidrofurano (THF) se ha utilizado ampliamente como disolvente y reactivo en la ingeniería química y las industrias farmacéuticas debido a su buena capacidad de disolución. La purificación de THF a partir de sus soluciones acuosas se ha estudiado ampliamente desde los aspectos económicos y ambientales (Koczka et al., 2007, p.240). Sin embargo, es imposible obtener THF anhidro por simple destilación porque el THF forma un azeótropo mínimo con agua a presión atmosférica (Gu et al., 2018, p.4).

Para el proceso de destilación extractiva, existen varios estudios sobre la separación de la mezcla THF-agua. Desde el punto de vista de la selección del agente de arrastre, Xu y Wang (2006) compararon los efectos de diferentes agentes de arrastre para la mezcla azeotrópica THF-agua mediante datos experimentales. Gómez y Gil (2009) estudiaron por simulación en Aspen Plus seis posibles agentes de arrastre para la deshidratación del THF y señalaron que el glicerol era el mejor al considerar el precio del agente de arrastre, la toxicidad y la eficacia. (Zhang et al. 2014) investigaron cuatro posibles agentes de arrastre y encontraron que el dimetilsulfóxido (DMSO) era más eficaz que el 1,2-propanodiol para romper el azeótropo THF-agua. También verificaron los resultados mediante datos experimentales de equilibrio líquido-vapor.

Desde el punto de vista del diseño de procesos, Fan et al. (2013) diseñaron el proceso de destilación extractiva para separar la mezcla THF-agua con etilenglicol como agente de arrastre mediante la minimización del costo anual total de operación. Deorukhkar et al. (2016) estudiaron el proceso de DE a escala piloto para separar la mezcla azeotrópica THF-agua en modo discontinuo, semicontinuo y continuo. Ghuge et al. (2017) optimizaron el proceso de DE empleando DMSO, etilenglicol, glicerol y 1,2-propanodiol como agentes de arrastre para la separación de THF-agua mediante análisis de sensibilidad.

Desde el punto de vista de la aplicación de redes neuronales artificiales en la separación de la mezcla azeotrópica THF-agua, no se reportan investigaciones enfocadas directamente en los

procesos de separación, pero se han reportado estudios que emplean RNA para estudiar las mezclas de THF – agua. Por ejemplo Mohammadi y Richon (2010) desarrollaron un modelo matemático basado en el algoritmo de red neuronal artificial feed-forward, para estimar las condiciones de disociación de hidratos para el sistema de agua con hidrógeno tetrahidrofurano utilizando los datos experimentales de las condiciones de disociación de hidratos a diferentes concentraciones de tetrahidrofurano en fase acuosa. Y de igual manera Mohammadi et al (2010) realizaron la determinación de diagramas de fase de hidratos de tetrahidrofurano + metano, dióxido de carbono o clatrato de nitrógeno mediante un algoritmo de red neuronal artificial.

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Azeótropo

El término “azeótropo”, una antigua palabra griega que significa "hervir sin cambios", lo que quiere decir que el vapor emitido tiene la misma composición que el líquido a una presión y temperatura determinada. Es decir, que el vapor y el líquido tienen composición similar y la mezcla hierve a una temperatura diferente a los puntos de ebullición de los componentes puros (Hilmen, 2000; citado en Rosario, 2020, p.15).

El azeótropo (ver Figura 1-2) se genera donde en algún punto en el espacio de composición del diagrama de equilibrio del punto de ebullición las composiciones de mezcla de vapor y líquido de equilibrio son iguales para una presión y temperatura dadas. A estos puntos se conocen como azeótropos y las mezclas con estas características como mezclas azeotrópicas (Liang et al., 2017, p.240).

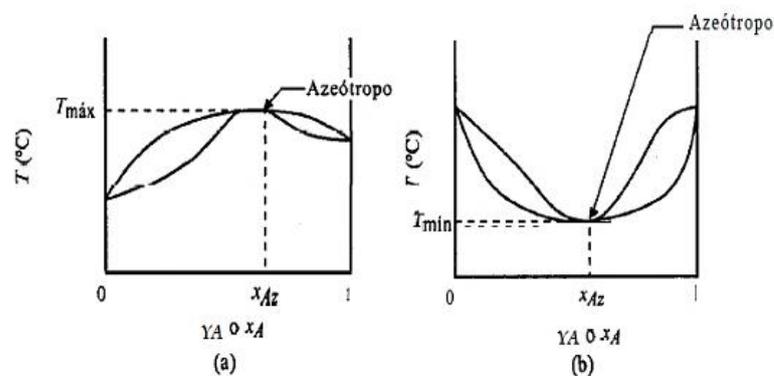


Figura 1-2. (a) azeótropo de Eb. máxima. (b) azeótropo de Eb. mínima.

Fuente: (Geankoplis, 1998, p.715).

2.2.2 Mezcla azeotrópica de tetrahidrofurano – agua

El tetrahidrofurano se disuelve fácilmente en agua y se forma un azeótropo de ebullición mínima a presión atmosférica y a una concentración de 82,9% mol de THF. Como consecuencia, la solución de THF-agua no se puede separar completamente por simple destilación (Fan et al., 2013, p.830).

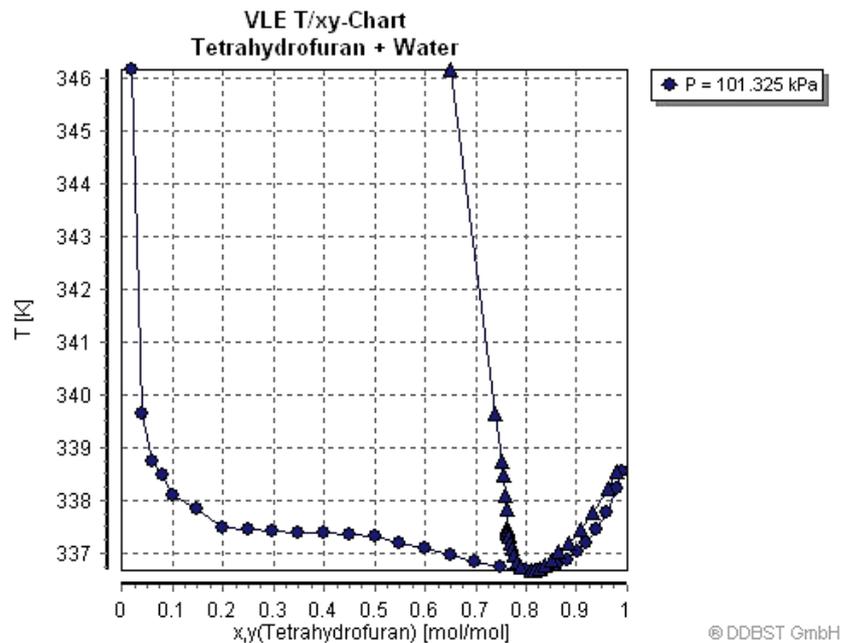


Figura 2-2. Diagramas de equilibrio del punto de ebullición para la mezcla THF-agua

Fuente: (GmbH DDBST, 2020)

2.2.3 Métodos de separación de tetrahidrofurano - agua

2.2.3.1 Pervaporación por membrana

La tecnología de separación por membrana es catalogada como una tecnología limpia ya que ofrece numerosas ventajas sobre otros procesos de transferencia de masa: son altamente selectivas, con bajo consumo de energía y un diseño bastante compacto. Por ello, puede ser usada en la purificación de diversos químicos. Como las membranas son muy sensibles a determinadas sustancias e impurezas, en el proceso hay una unidad de pre-separación (Koczka et al. 2007, p.240). En la Figura 3-2 se observa el diagrama de flujo de la separación con membranas y la unidad de pre-separación, donde el azeótropo es separado en la membrana y el compuesto orgánico (agente de arrastre) es recuperado.

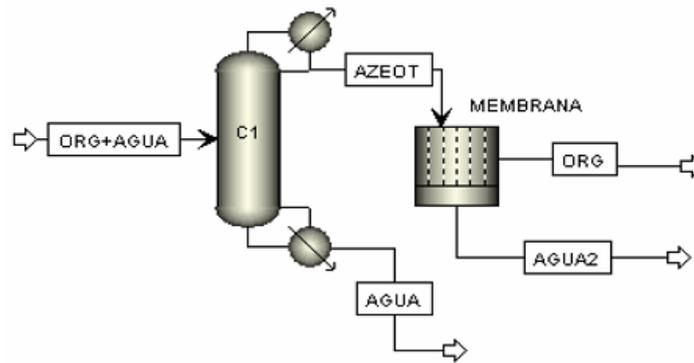


Figura 3-2. Diagrama de flujo de la deshidratación por pervaporación

Fuente: Gómez, 2007, p.14.

Sin embargo, el proceso de pervaporación depende en gran medida de la capacidad de la membrana, que puede presentar varios inconvenientes, como el alto costo inicial, la obstrucción de la membrana y el fracaso para lograr una alta pureza del producto (Gu et al., 2018, p.5).

2.2.3.2 Destilación por oscilación de presión (PSD)

La destilación por oscilación de presión es factible para separar la mezcla THF-agua ya que el azeótropo de THF-agua es sensible a la presión. Lee et al. (2011) estudiaron el proceso de PSD para la mezcla de THF y agua minimizando la cantidad de calor necesario en los calderines de las columnas de destilación.

En la PSD la separación del azeótropo se puede lograr con dos columnas de destilación que operan a diferentes presiones. Es por ello que, se debe tener en cuenta el comportamiento del azeótropo frente a la presión, con el fin de determinar las presiones de operación adecuadas para las columnas. Para destilar una mezcla azeotrópica de ebullición mínima como THF-agua, se consideraría el siguiente proceso: se alimenta con la mezcla a separar a la primera columna, operada a alta presión. Como producto de cima se obtiene al azeótropo (a alta presión) y como producto de cola se obtiene el componente ligero. En una segunda columna se alimenta el destilado de la primera columna y se obtiene como residuo el componente pesado y en la cima nuevamente el azeótropo (que puede recircularse) (Repke y Klein, 2005, p.725). En la Figura 4-2, se muestra el diagrama de flujo del proceso y el diagrama Txy donde se evidencia la separación.

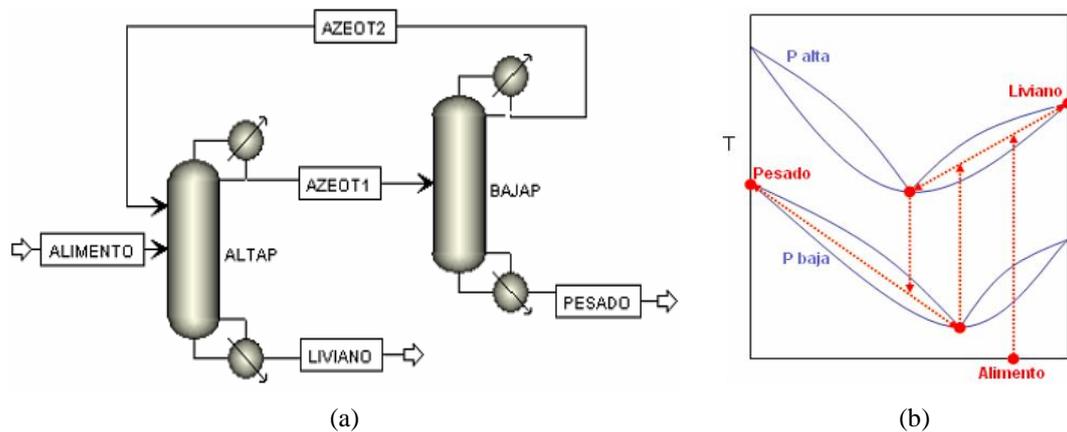


Figura 4-2. (a) Diagrama de flujo PSD, (b) Diagrama Txy para azeótropos de Eb. mínima.

Fuente: Gómez, 2007, p.15.

2.2.3.3 Destilación extractiva (DE)

Un estudio reciente Ghuge et al. (2017) demostró que el proceso de destilación extractiva exhibe una reducción del 5,2% en el costo anual total en comparación con el proceso de destilación por oscilación de presión.

Para el proceso de destilación extractiva, se incluye en la columna de destilación un agente de arrastre, con el fin de incrementar la volatilidad relativa de los componentes clave de la alimentación. Esta alteración en las volatilidades se utiliza en sistemas que presentan un azeótropo. El agente de arrastre interactúa con uno (o más) componentes, incrementando la volatilidad relativa (Seader, 2004).

Para que un agente de arrastre sea eficiente en una destilación extractiva debe ebullicir a una temperatura mucho mayor que los componentes de la alimentación y no debe formar azeótropos con ninguno de los componentes, tal que este agente de arrastre pueda ser recuperado por destilación convencional en otra columna. Con el fin de tener una alta concentración del agente de arrastre; este ingresa en la cima de la columna de destilación extractiva (Van Winkle, 1967; citado en Gómez, 2007, p.16).

En la Figura 5-2 se indica el diagrama de flujo general de la destilación extractiva, el proceso presenta dos columnas: la columna de destilación extractiva y la columna que recupera el agente de arrastre. La corriente de alimentación entra en la columna de DE mezclándose con el solvente o agente de arrastre. En el destilado se separa el componente más ligero de la mezcla azeotrópica, mientras que como residuo se tiene el componente más pesado junto al agente de arrastre. Esta mezcla ingresa a una segunda columna que recupera el agente de arrastre como residuo en la cola de la columna y luego lo recircula al proceso (Fan et al., 2013, p.831).

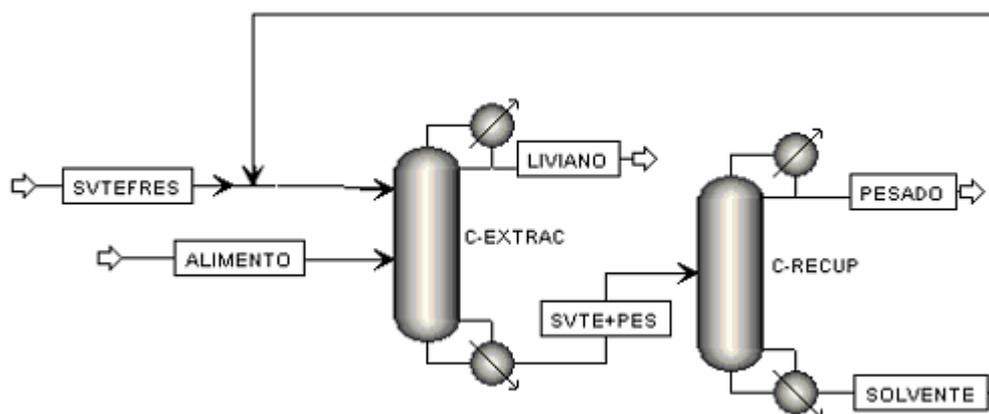


Figura 5-2. Diagrama de Flujo de Destilación Extractiva

Fuente: Gómez, 2007, p.17.

2.2.4 DWSIM

DWSIM el simulador de procesos químicos de código abierto nació en 2004 a partir de macros Excel VBA que implementaron PR EOS y un algoritmo Flash básico. Más tarde en el mismo año, Daniel Wagner Oliveira de Medeiros (el desarrollador) usó una muestra de trabajo para una superficie de dibujo para crear el Diseñador de dibujo de la hoja de flujo del proceso. Unos años y muchas líneas de código después, DWSIM estaba listo para su lanzamiento. Hoy en día, DWSIM se ejecuta en las plataformas más populares y lo utilizan cientos de estudiantes, profesores y consultores independientes de todo el mundo (Medeiros, 2020).

Como punto de partida para el desarrollo del trabajo se utilizará DWSIM cuenta con interfaz gráfica de usuario; y permite a los estudiantes de ingeniería química comprender el comportamiento de sistemas químicos mediante el uso de rigurosos modelos termodinámicos y de operaciones unitarias (Medeiros, 2020). DWSIM, permitirá desarrollar un modelo de simulación del proceso de recuperación de tetrahidrofurano para conformar una base de datos de aprendizaje y validación de la red neuronal artificial.

2.2.4.1 Características importantes de DWSIM

DWSIM es un simulador de procesos químicos compatible con CAPE-OPEN (Ingeniería de procesos asistida por computadora de próxima generación Entorno de simulación abierto) y tiene una interfaz gráfica fácil de usar con muchas características que antes solo estaban disponibles en simuladores comerciales de procesos químicos (ver en ANEXO K la tabla de las principales características en DWSIM).

2.2.5 Redes neuronales artificiales

Las redes neuronales artificiales son modelos computacionales inspirados en el sistema nervioso de los seres vivos. Tienen la capacidad de adquirir y mantener conocimientos (basados en información) y pueden definirse como un conjunto de unidades de procesamiento, representadas por neuronas artificiales, interconectadas por una gran cantidad de interconexiones (Da Silva et al., 2016, p.5).

Los componentes computacionales o unidades de procesamiento, llamadas neuronas artificiales, son modelos simplificados de neuronas biológicas. Las neuronas artificiales utilizadas en las redes neuronales artificiales son no lineales, por lo general proporcionan salidas continuas y realizan funciones simples, como recopilar señales disponibles en sus entradas, ensamblarlas de acuerdo con sus funciones operativas y producir una respuesta considerando sus funciones de activación innatas. McCulloch y Pitts (1943) propusieron el modelo de neurona más simple que incluye las principales características de una red neuronal biológica (paralelismo y alta conectividad), y sigue siendo el modelo más utilizado en diferentes arquitecturas de redes neuronales artificiales (Da Silva et al., 2016, p.11).

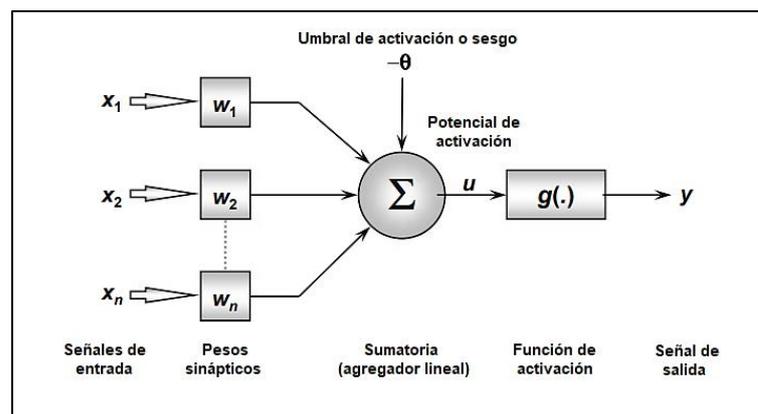


Figura 6-2. Estructura de una neurona artificial

Fuente: Da Silva et al., 2016, p.12

En ese modelo, cada neurona de una red se puede implementar como se muestra en la Figura 6-2. Las múltiples señales de entrada provenientes del entorno externo (aplicación) están representadas por el conjunto $\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\}$, análogo a los impulsos eléctricos externos recogidos por las dendritas en la neurona biológica. El pesaje realizado por las uniones sinápticas de la red se implementa en la neurona artificial como un conjunto de pesos sinápticos $\{w_1, w_2, \dots, w_n\}$. De manera análoga, la relevancia de cada una de las entradas de neurona $\{x_i\}$ se calcula multiplicándolas por su peso sináptico correspondiente $\{w_i\}$, ponderando así toda la información externa que llega a la neurona. Por lo tanto, es posible verificar que la salida del cuerpo celular artificial, denotado por u , es la suma ponderada de sus entradas. Considerando la

Figura 6-2, es posible ver que la neurona artificial está compuesta por siete elementos básicos, a saber:

- a) Las señales de entrada (x_1, x_2, \dots, x_n) son señales o muestras provenientes del entorno externo y que representan los valores asumidos por las variables de una aplicación particular.
- b) Los pesos sinápticos (w_1, w_2, \dots, w_n) son valores que se utilizan para ponderar cada una de las variables de entrada, lo que permite cuantificar su relevancia con respecto a la funcionalidad de la neurona.
- c) El agregador lineal (Σ) reúne todas las señales de entrada ponderadas por los pesos sinápticos para producir una señal de activación.
- d) El umbral de activación o sesgo (θ) variable que se utiliza para especificar el umbral adecuado que debe tener el resultado producido por el agregador lineal para generar un valor de activación hacia la salida de la neurona.
- e) El potencial de activación (u) resultado producido por la diferencia entre el agregador lineal y el umbral de activación.
- f) Función de activación (g) limita la salida de la neurona dentro de un rango razonable de valores, asumido por su propia imagen funcional.
- g) La señal de salida (y) valor final producido por la neurona dado un conjunto particular de señales de entrada, y también se puede usar como entrada para otras neuronas interconectadas secuencialmente.

Las siguientes ecuaciones sintetizan el resultado producido por la neurona artificial propuesta por McCulloch y Pitts:

$$u = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i - \theta \quad \text{Ec. 1-2}$$

$$y = g(u) \quad \text{Ec. 2-2}$$

Por tanto, el funcionamiento de la neurona artificial se puede resumir en los siguientes pasos:

- 1) Establece un conjunto de valores a la neurona, que representan las variables de entrada.
- 2) Multiplica cada entrada de la neurona por su peso sináptico correspondiente.
- 3) Obtiene el potencial de activación producido por la suma ponderada de las señales de entrada y resta el umbral de activación.
- 4) Aplica una función de activación adecuada para limitar la producción de neuronas.
- 5) Obtiene la salida empleando la función de activación neural en el potencial de activación.

Tabla 1-2. Funciones de activación más comunes

Nombre	Relación entrada / salida	Gráfico	Función MATLAB
Hard Limit	$a = 0 \quad n < 0$ $a = 1 \quad n \geq 0$		hardlim
Symmetrical Hard Limit	$a = -1 \quad n < 0$ $a = +1 \quad n \geq 0$		hardlims
Linear	$a = n$		purelin
Saturating Linear	$a = 0 \quad n < 0$ $a = n \quad 0 \leq n \leq 1$ $a = 1 \quad n > 1$		satlin
Symmetric Saturating Linear	$a = -1 \quad n < -1$ $a = n \quad -1 \leq n \leq 1$ $a = 1 \quad n > 1$		satlins
Log-Sigmoid	$a = \frac{1}{1 + e^{-n}}$		logsig
Hyperbolic Tangent Sigmoid	$a = \frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}$		tansig
Positive Linear	$a = 0 \quad n < 0$ $a = n \quad 0 \leq n$		poslin
Competitive	$a = 1 \quad \text{neurona con max } n$ $a = 0 \quad \text{demás neuronas}$		compet

Fuente: Du y Swamy, 2006, p.41

2.2.5.1 Arquitectura de la red neuronal artificial

La arquitectura de la red neuronal artificial permitirá definir cómo se organizan o colocan las diversas neuronas en relación con las demás. Estos arreglos se estructuran esencialmente dirigiendo las conexiones sinápticas de las neuronas. La topología de una red neuronal dada, dentro de una arquitectura particular, puede definirse como las diferentes composiciones estructurales que puede asumir. Es decir, es posible tener dos topologías pertenecientes a la misma arquitectura, donde la primera topología está compuesta por 10 neuronas y la segunda está compuesta por 20 neuronas. Además, una puede estar formada por neuronas con función de activación logística, mientras que la otra puede estar formada por neuronas con la tangente hiperbólica como función de activación. Por otro lado, entrenar una arquitectura particular

implicará aplicar un conjunto de pasos ordenados para ajustar los pesos y umbrales de sus neuronas. Por lo tanto, dicho proceso de ajuste, también conocido como algoritmo de aprendizaje, tiene como objetivo sintonizar la red para que sus salidas estén cerca de los valores deseados (Panerati et al. 2019, p.7).

En general, una red neuronal artificial se puede dividir en tres partes, denominadas capas, que se conocen como:

(a) *Capa de entrada*: Capa responsable de recibir información (datos), señales, características o mediciones del entorno externo. Estas entradas (muestras o patrones) generalmente se normalizan dentro de los valores límite producidos por las funciones de activación. Esta normalización da como resultado una mejor precisión numérica para las operaciones matemáticas realizadas por la red.

(b) *Capas ocultas, intermedias o invisibles*: Responsables de extraer patrones asociados con el proceso o sistema que se analiza. Estas capas realizan la mayor parte del procesamiento interno de una red.

(c) *Capa de salida*: Responsable de producir y presentar las salidas finales de la red, que resultan del procesamiento realizado por las neuronas en las capas anteriores.

Para diseñar la red neuronal artificial es necesario seleccionar entre las principales arquitecturas de las redes neuronales artificiales, considerando la disposición de las neuronas, cómo se interconectan y cómo se componen sus capas, es decir su arquitectura o topología de red.

- *Arquitecturas de alimentación hacia adelante de múltiples capas*

Las redes de alimentación hacia adelante con múltiples capas están compuestas por una o más capas neuronales ocultas (Figura 7-3). Se emplean en la solución de diversos problemas, como los relacionados con la aproximación de funciones, clasificación de patrones, identificación de sistemas, control de procesos, optimización, robótica, etc. La Figura 7-3 muestra una red de alimentación hacia adelante con múltiples capas compuestas por una capa de entrada con n señales de muestra, dos capas neuronales ocultas que consisten en n_1 y n_2 neuronas respectivamente y, finalmente, una capa neuronal de salida compuesta por m neuronas que representan los valores de salida respectivos del problema que se analiza (Panerati et al., 2019, p.9).

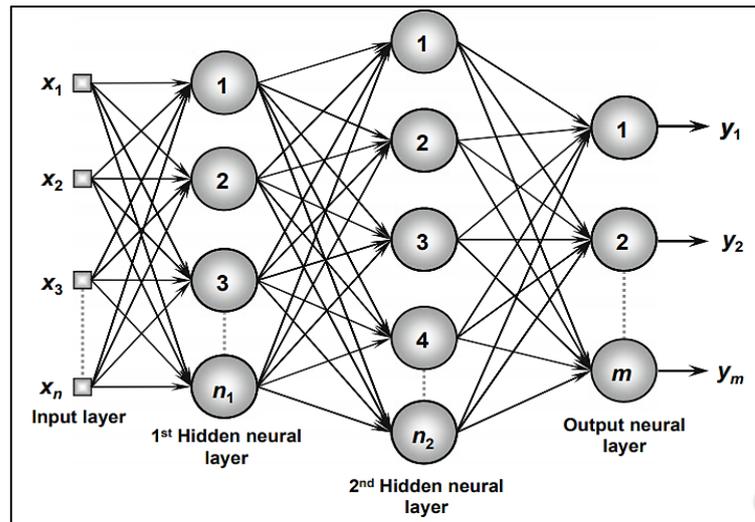


Figura 7-2. Ejemplo de una red de alimentación hacia adelante con múltiples capas

Fuente: Panerati et al., 2019, p.12

2.2.6 Entrenamiento de la red neuronal

Una de las características más relevantes de las redes neuronales artificiales es su capacidad de aprender a partir de patrones, que expresan el comportamiento del sistema. Por lo tanto, una vez que la red ha aprendido la relación entre entradas y salidas, puede generalizar soluciones, lo que significa que la red puede producir una salida cercana a la salida esperada (o deseada) de cualquier valor de entrada dado. Por tanto, el proceso de entrenamiento de una red neuronal consiste en aplicar los pasos ordenados necesarios para sintonizar los pesos sinápticos y los umbrales de sus neuronas, con el fin de generalizar las soluciones producidas por sus salidas (Sandip, 2020, p.98).

El conjunto de pasos ordenados utilizados para entrenar la red se denomina algoritmo de entrenamiento. Durante su ejecución, la red podrá extraer características discriminantes sobre el sistema que se está mapeando a partir de muestras adquiridas del sistema. Por lo general, el conjunto completo que contiene todos los datos disponibles del comportamiento del sistema se divide en dos subconjuntos, que se denominan subconjunto de entrenamiento y subconjunto de prueba. El subconjunto de entrenamiento, compuesto por un 60-90% de muestras aleatorias del conjunto completo, se utilizará fundamentalmente en el proceso de aprendizaje. Por otro lado, el subconjunto de prueba, que está compuesto por un 10-40% del conjunto de muestra completo, se utilizará para verificar si las capacidades de la red de generalizar soluciones están dentro de niveles aceptables, permitiendo así la validación de una topología determinada. No obstante, al dimensionar estos subconjuntos, también se deben considerar las características estadísticas de los datos. Durante el proceso de entrenamiento de la red neuronal artificial, cada presentación completa de todas las muestras pertenecientes al conjunto de entrenamiento, con el fin de ajustar los pesos y umbrales sinápticos, se denomina época de entrenamiento (Da Silva et al., 2016, p.25).

Las redes neuronales puedes aprender según los siguientes tipos de aprendizaje:

a. *Aprendizaje supervisado*

La estrategia de aprendizaje supervisado consiste en tener disponibles las salidas deseadas para un conjunto dado de señales de entrada; en otras palabras, cada muestra de entrenamiento se compone de las señales de entrada y sus correspondientes salidas. En adelante, requiere una tabla con datos de entrada / salida, también llamada tabla de atributo / valor, que representa el proceso y su comportamiento. Es a partir de esta información que las estructuras neuronales formularán "hipótesis" sobre el sistema que se está aprendiendo (Goh et al., 2017, p.1295).

La aplicación del aprendizaje supervisado solo depende de la disponibilidad de esa tabla de atributo / valor, y se comporta como si un "coach" estuviera enseñando a la red cuál es la respuesta correcta para cada muestra presentada para su input. Los pesos y umbrales sinápticos de la red se ajustan continuamente mediante la aplicación de acciones comparativas, ejecutadas por el propio algoritmo de entrenamiento, que supervisan la discrepancia entre las salidas producidas con respecto a las salidas deseadas, utilizando esta diferencia en el procedimiento de ajuste. La red se considera "entrenada" cuando esta discrepancia se encuentra dentro de un rango de valores aceptable, teniendo en cuenta los propósitos de generalizar soluciones (Goh et al., 2017, p.1297).

b. *Aprendizaje no supervisado*

A diferencia del aprendizaje supervisado, la aplicación de un algoritmo basado en el aprendizaje no supervisado no requiere ningún conocimiento de los respectivos resultados deseados. Así, la red necesita organizarse cuando existen particularidades entre los elementos que componen el conjunto muestral completo, identificando subconjuntos (o clusters) que presentan similitudes. El algoritmo de entrenamiento ajusta los pesos y umbrales sinápticos de la red para reflejar estos grupos dentro de la propia red. Alternativamente, el diseñador de la red puede especificar (a priori) la cantidad máxima de estos posibles conglomerados, utilizando sus conocimientos sobre el problema.

c. *Aprendizaje reforzado*

Los métodos basados en el aprendizaje reforzado se consideran una variación de las técnicas de aprendizaje supervisado, ya que analizan continuamente la diferencia entre la respuesta producida por la red y el resultado deseado correspondiente.

Los algoritmos de entrenamiento utilizados en el aprendizaje reforzado ajustan los parámetros neuronales internos basándose en cualquier información cualitativa o cuantitativa adquirida a través de la interacción con el sistema (entorno) que se está mapeando, utilizando esta información para evaluar el rendimiento del aprendizaje. El proceso de aprendizaje en red generalmente se

realiza mediante prueba y error porque la única respuesta disponible para una entrada determinada es si fue satisfactoria o insatisfactoria. Si es satisfactorio, los pesos y umbrales sinápticos se incrementan gradualmente para reforzar (recompensar) esta condición de comportamiento involucrada con el sistema (Da Silva et al., 2016, p.30).

2.2.6.1 Algoritmos de entrenamiento

El proceso de entrenamiento es normalmente iterativo, actualizándose los pesos una y otra vez hasta que se alcanza el objetivo deseado. El entrenamiento de una red neuronal multicapa es formulado entonces como un problema de optimización no lineal con respecto a los pesos. En el software Matlab, se tienen los siguientes algoritmos de entrenamiento: Levenberg-Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient (Jaiswal et al., 2018, p.1).

2.2.7 Redes neuronales en Matlab

Para implementar en Matlab una red neuronal artificial se lo puede realizar a través de tres maneras:

1. Mediante programación en el workspace.
2. Utilizando la herramienta Neural Net Fitting.
3. Empleando la interfaz gráfica de usuario mediante el comando *nntool* (MathWorks, 2020).

Por lo tanto, al digitar el comando *nntool* en el espacio de trabajo de Matlab se abre la ventana Administradora de redes neuronales artificiales. Cuando se utiliza la GUI, es posible exportar los resultados al espacio de trabajo. Del mismo modo, es posible importar resultados del área de trabajo para la GUI. Una vez que la ventana Network/Data Manager está en funcionamiento se puede crear una red, entrenarla, simularla y exportar los resultados al workspace (MathWorks, 2020).

CAPÍTULO III

3 METODOLOGÍA

En este caso de estudio, el proyecto es de tipo predictivo porque se utilizan redes neuronales artificiales para predecir la composición de tetrahidrofurano recuperado por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre. Para ello, la metodología establecida está comprendida en las siguientes etapas, descritas en la figura 1-3.

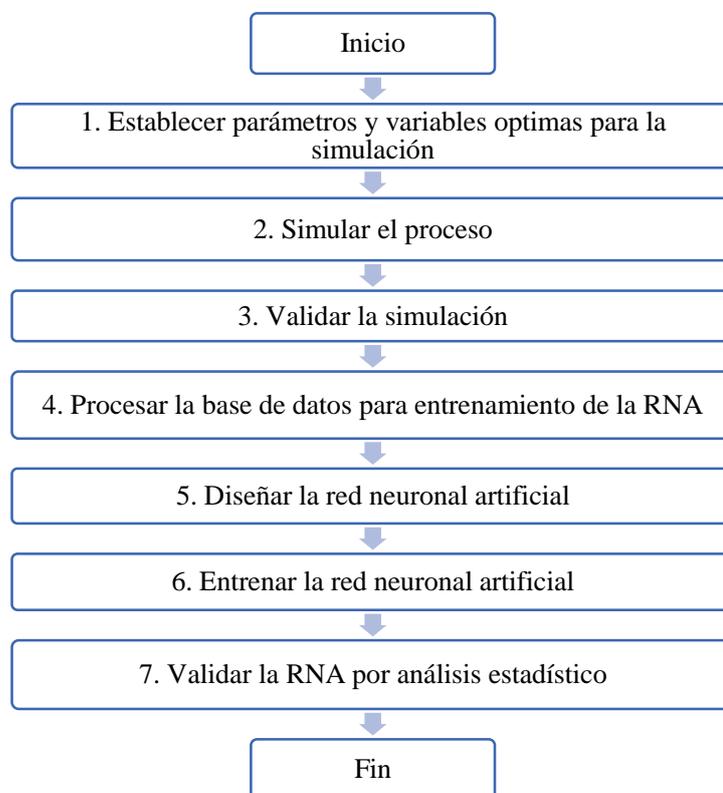


Figura 1-3. Metodología a seguir en el trabajo

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

A su vez, el trabajo tiene un enfoque cuantitativo debido que se utilizan los datos obtenidos en la simulación del proceso de recuperación de THF en DWSIM para alimentar la red neuronal artificial y así obtener los datos de la composición de THF.

Finalmente se realizará un análisis estadístico comparativo como método de interpretación y validación entre los datos cuantitativos predichos por la RNA y los datos obtenidos en la simulación.

3.1 Establecimiento de parámetros y variables

Para el desarrollo de la propuesta tecnológica planteada es necesario basarse en la información propuesta en el artículo científico de título “Design and Control of Extraction Distillation for Dehydration of Tetrahydrofuran”, propuesto por Zhidong Fan, Xubin Zhang, Wangfeng Cai y Fumin Wang, de la escuela de ingeniería química y tecnología, Universidad de Tianjin, China. En dicha investigación los autores simulan el proceso de recuperación de tetrahidrofurano por destilación extractiva de la mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre (Ver Figura 2-3) usando Aspen Plus; software comercial que se usa con frecuencia.

El artículo mencionado se tomará como base para identificar los parámetros y variables óptimas en el proceso de recuperación de tetrahidrofurano por destilación extractiva de la mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre y se simulará el proceso en el software libre DWSIM, para luego, obtener un conjunto de datos validados para el entrenamiento de una RNA que prediga el flujo y fracción másica de tetrahidrofurano recuperado en el proceso.

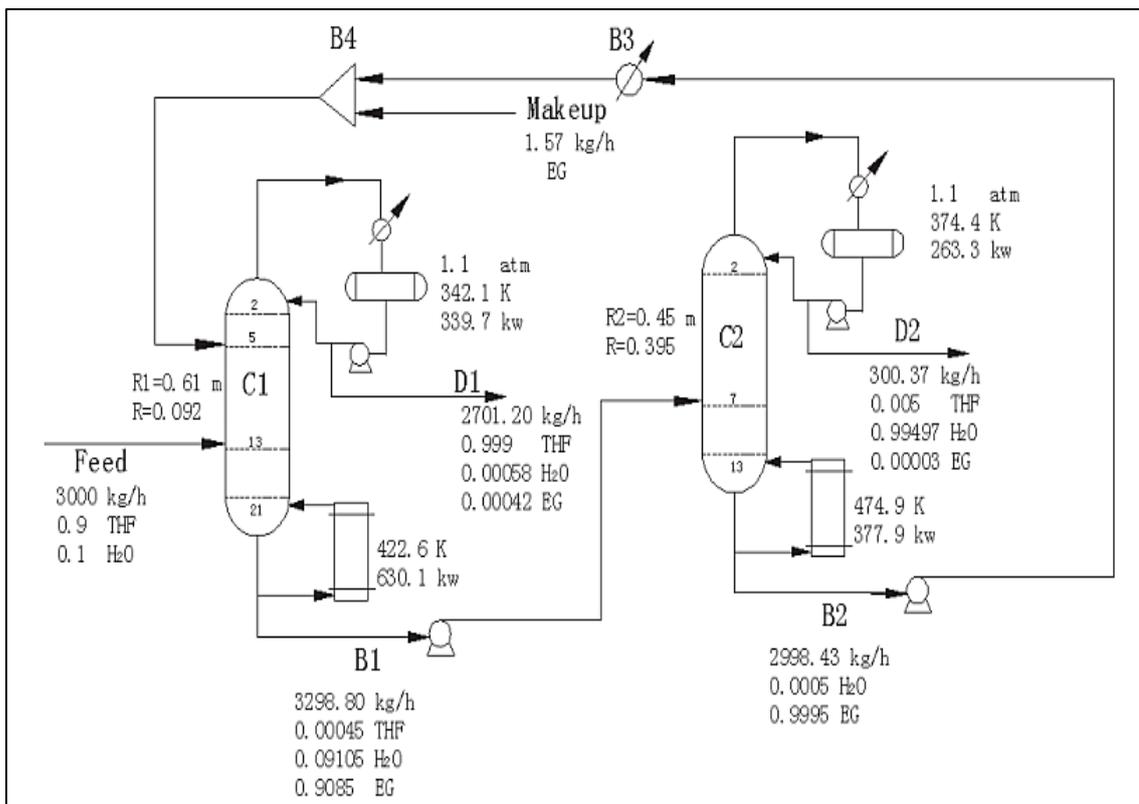


Figura 2-3. Diagrama de flujo del proceso de separación de tetrahidrofurano - agua.

Fuente: Fan et al., 2013, p.830

Las condiciones y variables óptimas de operación en el proceso de recuperación de tetrahidrofurano establecidas en Fan et al. (2013) se describen a continuación en la Tabla 1-3.

Tabla 1-3. Parámetros de operación óptimos del proceso.

Parámetros	Columna de destilación extractiva	Columna de recuperación de Etilenglicol	Unidades
Presión	1,1	1,1	atm
Platos totales	22	14	adimensional
Plato de alimentación	13	7	adimensional
Plato de recirculación	5	–	adimensional
Relación de reflujo	0,092	0,395	adimensional
Temperatura en el condensador	342,1	374,4	K
Temperatura en el calderín	422,6	474,9	K
Calor en el condensador	339,7	263,3	kW
Calor en el calderín	630,1	377,9	kW

Fuente: Fan et al., 2013, p.830

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

3.1.1 Operacionalización de variables

3.1.1.1 Selección de variables

- Variables Independientes:
 - Fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación
 - Relación de reflujo en la primera columna
 - Temperatura del calderín en la primera columna
 - Relación de reflujo en la segunda columna
- Variables Dependientes:
 - Fracción molar de tetrahidrofurano recuperado
 - Flujo másico de tetrahidrofurano recuperado

3.1.1.2 Operación de variables

Tabla 2-3. Variables del proceso

Tipos de variables	Variable		Unidad
Independientes	Fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación	$X_{\text{THF,F}}$	adimensional
	Relación de reflujo en la primera columna de destilación extractiva	RR_{C1}	adimensional

	Temperatura del calderín en la primera columna de destilación extractiva	TR_{C1}	adimensional
	Relación de reflujo en la segunda columna de recuperación del agente de arrastre (EG)	RR_{C2}	adimensional
Dependientes	Flujo másico de destilado en la primera columna	D_1	kg/h
	Fracción molar de tetrahidrofurano recuperado en la primera columna	$X_{THF,D1}$	adimensional

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

3.2 Simulación DWSIM

En este apartado se emplean los datos propuestos en el artículo científico base y descritos en la **Tabla 1-3**. Parámetros de operación óptimos del proceso. Tabla 1-3; estos parámetros iniciales se utilizan para simular el proceso de recuperación de THF de la mezcla azeotrópica en el software DWSIM.

En el simulador DWSIM, se selecciona la herramienta “*ChemSep Rigorous separation Column*”, esta columna *ChemSep* nos permite interconectar tanto la columna de destilación extractiva donde se obtiene separado el THF y la columna de destilación simple donde se recupera el agente de arrastre (EG) con las corrientes de alimentación y salida de destilados y residuos (Figura 3-3).

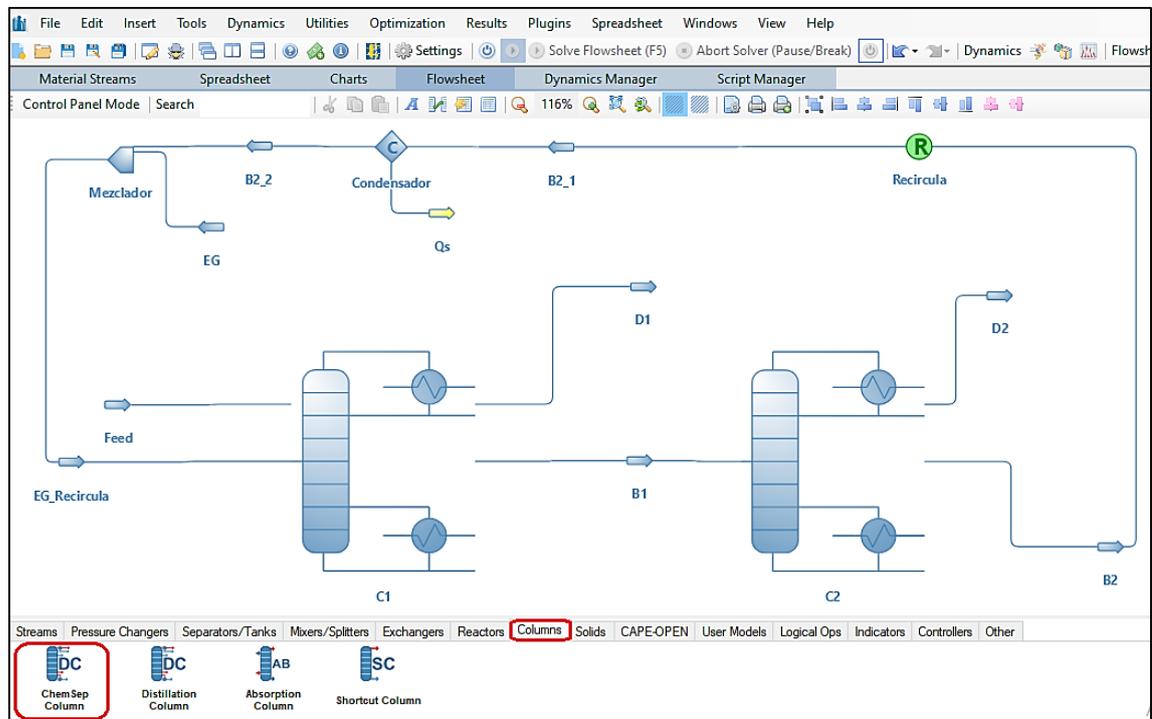


Figura 3-3. Diagrama de flujo del proceso de recuperación de THF en DWSIM

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

En la Figura 3-3, se ilustra un diagrama de flujo general para la separación de THF-H₂O. La columna C1 es la columna de destilación extractiva, mientras que la columna C2 representa la

columna de recuperación del agente de arrastre. La mezcla azeotrópica y el agente de arrastre se introducen en la columna C1, cuyo producto obtenido en el destilado es el producto objetivo (THF). El producto de cola de la columna C1 se alimenta luego a la columna C2, donde el agente de arrastre se separa del agua y se recircula a la columna C1. Debido a que no se puede despreciar la pérdida del agente de arrastre en los vapores D1 y D2, la corriente reciclada debe mezclarse con una corriente de reposición del agente de arrastre (EG). Knight y Doherty (1989) recomendaron que se utilice un condensador para enfriar la corriente de recirculación, ya que la temperatura de alimentación del agente de arrastre debe estar por debajo de la temperatura superior de la columna C1. Solo de esta manera, el costo total del proceso podría minimizarse.

El flujo de la corriente de alimentación fresca es de 3000 kg/h con una temperatura inicial de 320 K. Es una mezcla azeotrópica que contiene 90% en peso de THF y 10% en peso de H₂O. Para facilidad del proceso, se supone que las presiones de operación de ambas columnas son 1,1 atm. A continuación, en la Tabla 3-3, se especifican las condiciones de simulación en DWSIM para la corriente de alimentación.

Tabla 3-3. Condiciones de la corriente de alimentación

Parámetro	Valor	Unidad
Paquete de propiedades termodinámicas	NRTL	adimensional
Algoritmo flash termodinámico	Nested Loops (VLE)	adimensional
Temperatura	320	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	3000	kg/h
Flujo molar	44,979	kmol/h
Flujo volumétrico	3,45149	m ³ /h
Fraccion molar de THF	0,9	adimensional
Fraccion molar de H ₂ O	0,1	adimensional

Realizado por: Taipei, Jennifer, 2021

Adicionalmente, el paquete de propiedades termodinámicas empleado en la simulación de ambas columnas es el DECHEMA y las especificaciones generales de las columnas de destilación están definidas por el modelo termodinámico NRTL para describir la no idealidad de la mezcla. En la Tabla 4-3 se describen las especificaciones de simulación para ambas columnas.

Tabla 4-3. Especificaciones en las columnas

Parámetro	Columna de destilación extractiva	Columna de recuperación de Etilenglicol	Unidad
Valor K	DECHEMA	DECHEMA	adimensional
Coefficiente de actividad	NRTL	NRTL	adimensional
Presión de vapor	Antoine	Antoine	adimensional

Presión	1,1	1,1	atm
Número de platos	22	14	adimensional
Plato de alimentación	13	7	adimensional
Plato de recirculación	5	–	adimensional
Relación de reflujo	0,092	0,395	adimensional
Temperatura del condensador	342,1	374,4	K
Temperatura del calderín	422,6	474,9	K

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

3.2.1 Validación de la simulación

Una vez desarrollada la simulación del proceso de separación de THF-H₂O es necesario validar los resultados obtenidos en DWSIM comparándolos con aquellos reportados por Fan et al. (2013). La validación de la simulación se muestra en la Tabla 7-3 con sus respectivos porcentajes de error.

Tabla 5-3. Validación de la simulación

Corriente de Flujo	Parámetro	Apen Plus Fan et al. (2013)	DWSIM	Error (%)
Destilado de la columna de recuperación de tetrahydrofurano	Flujo másico	2701,20	2954,56	9,38
	Fracción molar de tetrahydrofurano recuperado	0,999	0,954	4,48

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

De los resultados presentados en la Tabla 5-3, el error porcentual promedio en la validación de la simulación para la recuperación de THF de la mezcla azeotrópica THF-H₂O es de 6,93%, este margen de error puede estar relacionado con el método de Newton, un método iterativo predeterminado en las columnas tipo ChemSep de CAPE-OPEN de DWSIM para calcular los resultados. DWSIM, como software libre, está en constante actualización de sus versiones para mejorar en sus métodos de cálculo.

3.3 Procesamiento de la base de datos para entrenamiento de la RNA

Una vez realizada y validada la simulación; a partir de las variables y rangos establecidos en la Tabla 6-3 se obtendrá una base de datos de entrenamiento y validación necesarios para la red almacenada en Microsoft Excel. Para ello, se generarán 110 datos aleatorios de las variables independientes para obtener las salidas dependientes mediante la simulación en DWSIM. De los 110 datos obtenidos, 100 datos se utilizarán para el entrenamiento de la red y 10 datos para su correspondiente validación.

Tabla 6-3. Rangos de operación de las variables independientes

Parámetro	Rango	Unidad
Fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación	0,20 - 0,96	adimensional
Relación de reflujo en la primera columna de destilación extractiva	0,01 - 1,00	adimensional
Temperatura del calderín en la primera columna de destilación extractiva	320 - 425	K
Relación de reflujo en la segunda columna de recuperación del agente de arrastre	0,1 - 1,0	adimensional

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

3.4 Diseño de la red neuronal artificial

En el diseño de la red neuronal artificial primero se establecen los variables de la capa de entrada y salida, para este caso se tienen 4 variables de entrada y 2 variables de salida como se observa en la siguiente tabla.

Tabla 7-3. Variables de entrada y salida de la red neuronal artificial

Capas	Variables	Unidades
Entrada	Fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación	$X_{THF,F}$ adimensional
	Relación de reflujo en la primera columna de destilación extractiva	RR_{C1} adimensional
	Temperatura del calderín en la primera columna de destilación extractiva	TR_{C1} K
	Relación de reflujo en la segunda columna de recuperación del agente de arrastre	RR_{C2} adimensional
Salida	Flujo másico de destilado en la primera columna	D_1 kg/h
	Fracción molar de tetrahidrofurano recuperado en la primera columna	$X_{THF,D1}$ adimensional

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

Antes de poder realizar el diseño y desarrollo de la red neuronal artificial se debe importar la base de datos desde Microsoft Excel hacia el espacio de trabajo de Matlab. Khayet et al. (2012) sugieren normalizar los datos importados de entrada y salida con el propósito de evitar redundancia en los datos, mejorando el entrenamiento y predicción de la red, mediante siguiente ecuación:

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

Donde:

X' = valor normalizado

X = valor que se desea normalizar

X_{\min} = valor mínimo

X_{\max} = valor máximo

Luego de normalizar los datos, se utiliza la herramienta Neural Fitting app (*nftool*) del toolbox de Matlab. Se abrirá el asistente de diseño de la red como se observa en la Figura 4-3.

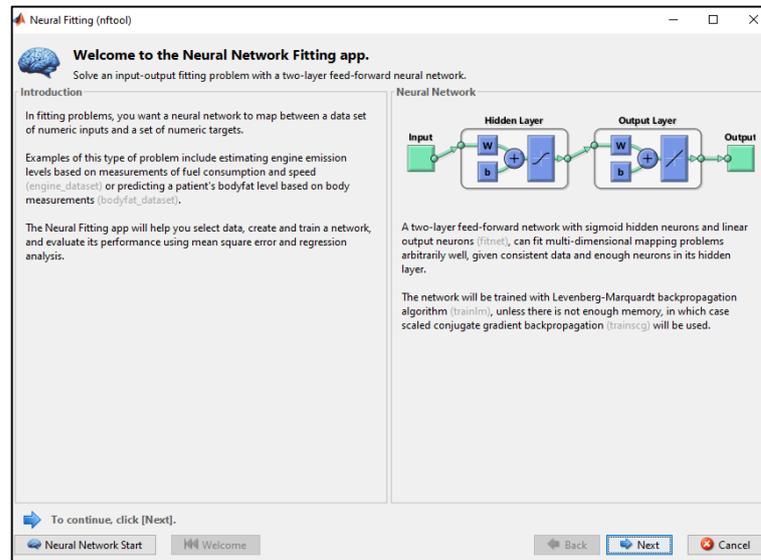


Figura 4-3. Herramienta Neural Fitting app de Matlab

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Luego, en la ventana del asistente de diseño de red se seleccionan las entradas y salidas normalizadas como se observa en la figura 5-3.

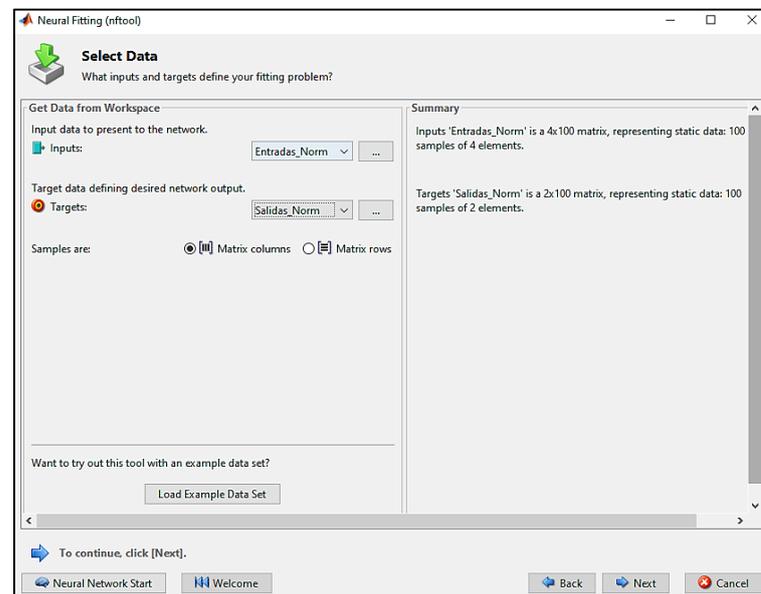


Figura 5-3. Selección de entradas y salidas normalizadas

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

3.5 Entrenamiento de la red neuronal artificial

Es importante para el diseño de la red determinar el número óptimo de neuronas en la capa oculta, las mismas que se establece en base a la minimización del error cuadrático medio (MSE) y la

correlación lineal (R) que presente la predicción de la red. Es así que, como punto de partida se establecen 5 neuronas en la capa oculta y en base al MSE y la correlación (R) obtenido con estas, se aumenta progresivamente el número de neuronas en la capa oculta. Se selecciona el número óptimo de neuronas en función del menor MSE y el R más cercano a 1, cuyas ecuaciones son:

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n (y' y) - [\sum_{i=1}^n y'] [\sum_{i=1}^n y]}{\sqrt{[n \sum_{i=1}^n y^2 - [\sum_{i=1}^n y]^2] [n \sum_{i=1}^n y'^2 - [\sum_{i=1}^n y']^2]}} \quad \text{Ec. 2-3}$$

Donde:

R = coeficiente de correlación lineal.

y = resultados reales (Por simulación en DWSIM)

y' = resultados predichos (Por la red neuronal artificial)

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (y_t - y'_t)^2 \quad \text{Ec. 3-3}$$

Donde:

n = número de experimentaciones.

y_t = resultados reales (Por simulación en DWSIM)

y'_t = resultados predichos (Por la red neuronal artificial)

En la Tabla 8-3, se presentan los diferentes ensayos realizados con los valores correspondientes de correlación lineal (R) y de error cuadrático medio (MSE) de varias tipologías de red para selección del número óptimo de neuronas en la capa oculta y el algoritmo de entrenamiento. En cada ensayo, los valores del coeficiente de correlación y el error cuadrático medio, se obtuvieron a partir de los gráficos generados por Matlab.

Tabla 8-3. Ensayos de entrenamiento de la red neuronal artificial.

Arquitectura de red	Levenberg-Marquardt		Bayesin Regularization		Scaled Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
4-5-2	5,32E-02	0,71550	9,40E-03	0,93622	3,40E-02	0,75263
4-10-2	2,11E-02	0,85572	9,98E-03	0,93223	2,59E-02	0,81212
4-20-2	3,55E-02	0,74784	1,24E-02	0,91943	3,53E-02	0,75153
4-40-2	3,88E-02	0,70964	9,55E-03	0,93722	2,55E-02	0,84876
4-80-2	2,87E-02	0,84532	9,89E-03	0,93987	4,35E-02	0,75456
4-160-2	1,20E-01	0,62183	9,32E-03	0,94019	6,19E-02	0,74453
4-320-2	1,48E-01	0,56650	7,27E-03	0,95663	1,93E-01	0,48245
4-350-2	2,08E-01	0,53758	8,44E-03	0,94280	2,67E-01	0,42718
4-370-2	1,84E-01	0,49779	1,19E-02	0,91833	2,78E-01	0,33837
4-390-2	1,75E-01	0,44411	9,09E-03	0,94298	5,57E-01	0,23894
4-400-2	3,97E-01	0,40714	5,17E-03	0,97225	6,64E-01	0,16434

4-410-2	5,52E-01	0,55157	4,17E-03	0,96981	2,08E-01	0,45075
4-425-2	2,61E-01	0,50425	8,42E-03	0,91582	5,36E-01	0,31402
4-450-2	2,80E-01	0,49612	8,55E-03	0,94430	8,17E-01	0,29197
4-470-2	4,18E-01	0,35367	8,31E-03	0,94477	1,75E-01	0,60465
4-500-2	2,98E-01	0,34353	9,45E-03	0,92899	4,31E-01	0,37339
4-550-2	7,13E-01	0,41289	1,09E-02	0,93196	1,09E+00	0,25076

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

Por lo tanto, se estableció que la mejor arquitectura de red consta de los siguientes parámetros de diseño (ver Figura 6-3):

- 4 neuronas de entrada como variables predictoras.
- 400 neuronas en la capa oculta (Presentó un MSE bajo y la mejor correlación R)
- 2 neuronas en la capa de salida correspondientes a las variables predichas.

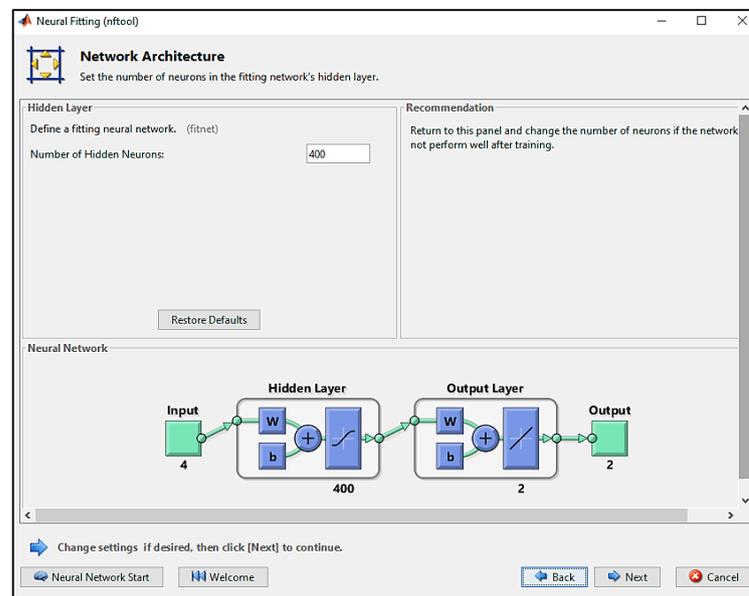


Figura 6-3. Arquitectura de la red neuronal artificial

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

Durante el entrenamiento de la red neuronal es importante obtener una buena generalización de los datos. Existe un problema frecuente que enfrentan las redes neuronales relacionado con sobreajuste de los resultados. Para entrenar la red neuronal artificial, se selecciona el algoritmo de regularización bayesiana porque este algoritmo ayuda a evitar el problema de sobreajuste y logra resultados de estimación más precisos (Balam et al., 2019; citado en Rosario, 2020, p.48).

En la Tabla 8-3, se presentan diferentes topologías de red, mediante un entrenamiento con diferentes topologías de red es posible establecer que en este caso con algoritmo de regularización bayesiana se obtiene mejor correlación lineal y menor error cuadrático medio que el algoritmo Levenberg-Marquardt y el algoritmo Scaled Conjugate Gradient. El asistente de diseño de la red

identifica el algoritmo Bayesian Regularization con el comando “*trainbr*”, como se observa en las siguientes figuras.

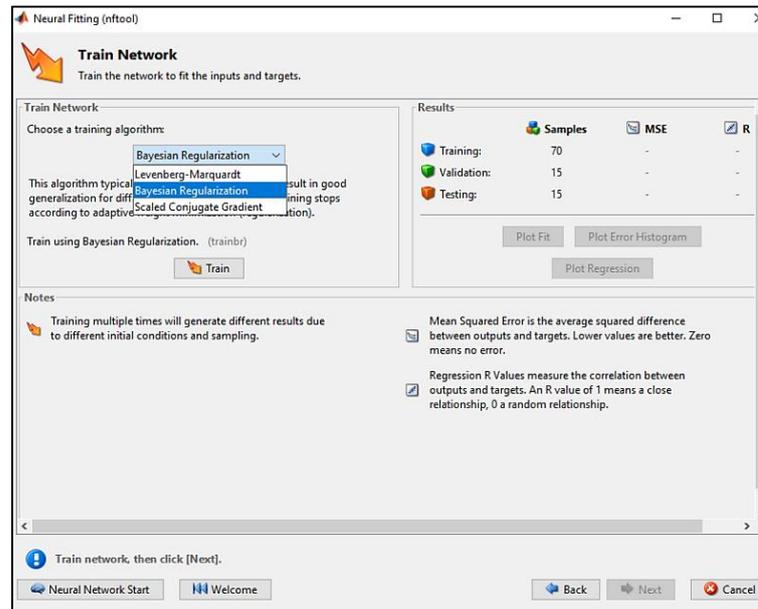


Figura 7-3. Selección del algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021.

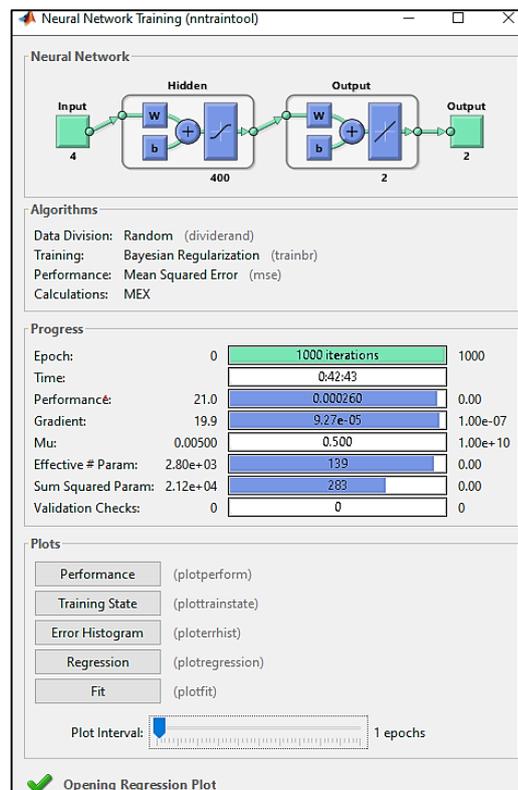


Figura 8-3. Proceso de entrenamiento de la RNA

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021.

3.6 Validación de la red neuronal artificial por análisis estadístico

Para validar la red neuronal artificial, se comparan los resultados obtenidos por la red con los resultados obtenidos por simulación en DWSIM; empleando un nuevo conjunto conformado por 10 datos, evaluando la predicción mediante un análisis ANOVA.

Para analizar la varianza entre las medias de los datos reales y predichos, se plantean dos hipótesis:

- Hipótesis nula: las medias son iguales o aceptables
- Hipótesis alternativa: las medias son diferentes

El rechazo de la hipótesis nula indicará que los datos pertenecen a variables con medias diferentes.

Tabla 9-3. Tabla ANOVA para el análisis de la varianza

<i>Fuente</i>	<i>Suma de Cuadrados</i>	<i>Gl</i>	<i>Cuadrado Medio</i>	<i>Razón-F</i>	<i>Valor-P</i>
Entre grupos	513,901	1	513,901	0,14	0,7104
Intra grupos	176784,	48	3682,99		
Total (Corr.)	177298,	49			

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021.

En el análisis ANOVA, valores-P mayores que 0,05 llevan a aceptar la hipótesis nula. Por Ejemplo, en el caso de la tabla 9-3, como el valor-P es mayor que 0,05, se concluirá que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de las variables analizadas con un 95,0% de confianza.

CAPÍTULO IV

4 GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1 Cronograma

En la siguiente tabla se describe el cronograma de actividades.

Tabla 1-4. Cronograma del proyecto

ACTIVIDAD	MESES																			
	Noviembre				Diciembre				Enero				Febrero				Marzo			
	SEMANAS																			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Elaboración del anteproyecto				■	■															
Determinación de variables óptimas de operación para la simulación					■	■	■													
Simulación del proceso y obtención de la base de datos								■	■	■	■									
Determinación de entradas y salidas para la RNA									■	■	■									
Diseño de la red neuronal									■	■	■	■								
Validación de la RNA mediante análisis estadístico													■	■	■					
Redacción del trabajo final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■					
Revisión del documento final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■					
Auditoria Académica																	■	■		
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Taipe, Jennifer., 2021

4.2 Presupuesto

En la siguiente tabla se describen los costos del proyecto.

Tabla 2-4. Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Licencia estudiantil de Matlab	\$55	X	
Internet	\$125	X	
Impresión del documento final	\$30	X	
Copias e impresiones adicionales	\$20	X	
Empastados	\$40	X	
Imprevistos	\$30	X	
TOTAL	\$300		

Realizado por: Taípe, Jennifer., 2021

4.3 Recursos humanos y materiales

4.3.1 Talento humano

Tabla 3-4. Talento humano

Talento humano	Descripción
Jennifer Taípe	Estudiante que desarrolla el proyecto titulado “simulación y predicción por RNA de la composición de tetrahidrofurano separado de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando DWSIM”
Ing. Darío Guamán Ing. Linda Flores	Docentes de apoyo en la revisión y corrección del proyecto

Realizado por: Taípe, Jennifer., 2021

4.3.2 Recursos materiales y software

Tabla 4-4. Softwares y equipos utilizados para desarrollar el proyecto

Equipo y software	Descripción	Uso
Computadora	Procesador Intel (R) Core (TM) i7-8565U CPU a 1.99 GHz con 8 GB de memoria RAM y un sistema operativo de 64 bits con Microsoft Windows 10 Home.	Simulación Diseño de la red neuronal artificial Análisis estadístico
DWSIM	Software simulador de procesos químicos	Simular el proceso de recuperación de tetrahidrofurano
Matlab	Software simulador de redes neuronales artificiales	Diseñar la red neuronal artificial.
SPSS	Software de análisis estadístico	Validar el modelo de predicción

Realizado por: Taípe, Jennifer., 2021

4.4 Resultados

4.4.1 Simulación del proceso en DWSIM

Al simular el proceso de separación de la mezcla azeotrópica THF – H₂O en el software DWSIM con las condiciones iniciales mencionadas en el capítulo 3 (ver Tabla 3-3 y Tabla 4-3) se obtienen los siguientes resultados para la corriente de destilado y residuo en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (D1) Tabla 5-4 y Tabla 6-4 respectivamente), la corriente de destilado y residuo en la columna de recuperación de etilenglicol (ver Tabla 7-4 y Tabla 8-4) y los resultados para la corriente de recirculación del etilenglicol se describen en la Tabla 9-4.

Tabla 5-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (D1)

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	340,21	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	2954,56	kg/h
Flujo molar	44,2977	kmol/h
Flujo volumétrico	3,53373	m ³ /h
Peso molecular	66,8526	kg/kmol
Entalpía específica	-413,621	kJ/kg
Entropía específica	-1,08371	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-27651,6	kJ/kmol
Entropía molar	-7,24E+01	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,116046	W/ [m. K]
Fracción molar de tetrahidrofurano	0,902858	adimensional
Fracción molar de agua	0,0971365	adimensional
Fracción molar de etilenglicol	5,86E-06	adimensional

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Tabla 6-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de tetrahidrofurano (B1)

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	422,6	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	194,027	kg/h
Flujo molar	3,22235	kmol/h
Flujo volumétrico	0,193923	m ³ /h
Peso molecular	60,213	kg/kmol
Entalpía específica	-703,237	kJ/kg
Entropía específica	-1,33521	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-42344	kJ/kmol
Entropía molar	-80,3972	kJ/ [kmol. K]

Conductividad térmica	0,25441	W/ [m. K]
Fracción molar de tetrahidrofurano	0,0217656	adimensional
Fracción molar de agua	0,0470652	adimensional
Fracción molar de etilenglicol	0,9311690	adimensional

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Tabla 7-4. Corriente de destilado en la columna de recuperación de etilenglicol (D2)

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	346,346	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	9,76154	kg/h
Flujo molar	0,25251	kmol/h
Flujo volumétrico	0,01039	m ³ /h
Peso molecular	38,6571	kg/kmol
Entalpía específica	-981,433	kJ/kg
Entropía específica	-2,38565	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-37939,4	kJ/kmol
Entropía molar	-92,2223	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,22108	W/ [m. K]
Fracción molar de tetrahidrofurano	0,27775	adimensional
Fracción molar de agua	0,59472	adimensional
Fracción molar de etilenglicol	0,12753	adimensional

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Tabla 8-4. Corriente de residuo en la columna de recuperación de etilenglicol (B2)

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	473,062	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	184,266	kg/h
Flujo molar	2,96984	kmol/h
Flujo volumétrico	0,190147	m ³ /h
Peso molecular	62,0458	kg/kmol
Entalpía específica	-555,359	kJ/kg
Entropía específica	-1,06223	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-34457,7	kJ/kmol
Entropía molar	-65,9069	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,251449	W/ [m. K]
Fracción molar de tetrahidrofurano	2,46E-09	adimensional
Fracción molar de agua	0,000499	adimensional
Fracción molar de etilenglicol	0,999500	adimensional

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Tabla 9-4. Corriente de recirculación de etilenglicol recuperado (EG_Recircula)

Variable	Valor	Unidades
----------	-------	----------

Temperatura	320	K
Presión	1,1	atm
Flujo másico	186,281	kg/h
Flujo molar	3,00231	kmol/h
Flujo volumétrico	0,17021	m ³ /h
Peso molecular	62,046	kg/kmol
Entalpía específica	-981,788	kJ/kg
Entropía específica	-2,14674	kJ/ [kg. K]
Entalpía molar	-60916	kJ/kmol
Entropía molar	-133,196	kJ/ [kmol. K]
Conductividad térmica	0,258854	W/ [m. K]
Fracción molar de tetrahidrofurano	2,37E-09	adimensional
Fracción molar de agua	0,000496	adimensional
Fracción molar de etilenglicol	0,999504	adimensional

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021

4.4.1.1 Balance de masa del proceso

Se realiza un balance de masa en el sistema de destilación de tetrahidrofurano con la finalidad de validar mediante cálculos, la cantidad de tetrahidrofurano recuperado mediante simulación. Para ello, las condiciones del balance se describen en el siguiente diagrama de flujo.

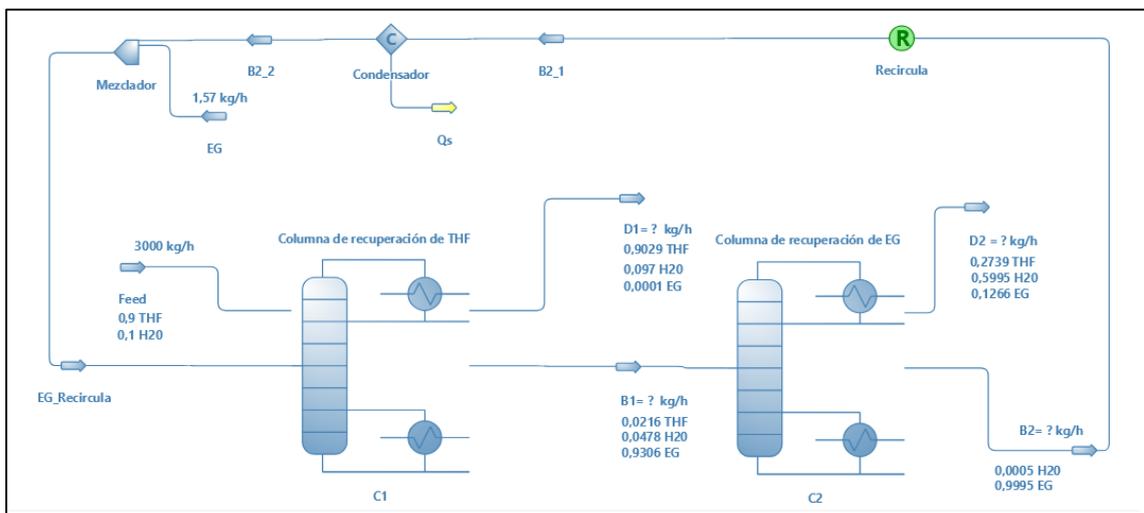


Figura 1-4. Diagrama del proceso de recuperación de tetrahidrofurano.

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

- Balance de masa global

$$\text{Feed} + \text{EG} = \text{D1} + \text{D2} \quad \text{Ec. 1-4}$$

$$3000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + 1,57 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \text{D1} + \text{D2} \quad \text{Ec. 2-4}$$

$$\text{D1} = 3001,57 \frac{\text{kg}}{\text{h}} - \text{D2g} \quad \text{Ec. 3-4}$$

Donde:

Feed = Flujo másico de alimentación

EG = Flujo másico de etilenglicol adicional

D1 y D2 = Flujo másico de destilado en la primera y segunda columna

- *Balance de masa en la columna de recuperación de tetrahidrofurano*

$$\text{Feed} + \text{EG_Recircula} = \text{D1} + \text{B1} \quad \text{Ec. 4-4}$$

$$3000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + (\text{B2} + \text{EG}) = \text{D1} + \text{B1} \quad \text{Ec. 5-4}$$

$$3000 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + \text{B2} + 1,57 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \text{D1} + \text{B1} \quad \text{Ec. 6-4}$$

$$3001,57 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + \text{B2} = \text{D1} + \text{B1} \quad \text{Ec. 7-4}$$

Donde:

Feed = Flujo másico de alimentación

EG = Flujo másico de etilenglicol adicional

D1 = Flujo másico de destilado en la primera columna

B1 = Flujo másico de residuo en la primera columna

- *Balance de masa en la columna de recuperación de etilenglicol*

$$\text{B1} = \text{D2} + \text{B2} \quad \text{Ec. 8-4}$$

Donde:

B1 = Flujo másico de residuo en la primera columna

D2 = Flujo másico de destilado en la segunda columna

B2 = Flujo másico de residuo en la segunda columna

- *Balance de tetrahidrofurano en la primera columna*

$$\begin{aligned} (X_{\text{THF}})\text{Feed} + (X_{\text{THF}})\text{EG_Recircula} &= (X_{\text{THF}})\text{D1} + (X_{\text{THF}})\text{B1} \\ (0,9)3000 + (0)\text{EG_Recircula} &= (0,9029)\text{D1} + (0,0216)\text{B1} \\ 2700 &= (0,9029)\text{D1} + (0,0216)\text{B1} \end{aligned} \quad \text{Ec. 9-4}$$

- *Balance de tetrahidrofurano en la segunda columna*

$$\begin{aligned} (X_{\text{THF}})\text{B1} &= (X_{\text{THF}})\text{D2} \\ (0,0216)\text{B1} &= (0,2739)\text{D2} + (0)\text{B2} \\ (0,0216)\text{B1} &= (0,2739)\text{D2} \end{aligned} \quad \text{Ec. 10-4}$$

- *Balance de etilenglicol en la primera columna*

$$(X_{\text{EG}})\text{Feed} + (X_{\text{EG}})\text{EG_Recircula} = (X_{\text{EG}})\text{D1} + (X_{\text{EG}})\text{B1}$$

$$(0)3000 + (0,9995)(B2 + 1,57) = (0,0001)D1 + (0,9306)B1$$

$$(0,9995)B2 + 1,5692 = (0,9306)B1$$

$$B2 = \frac{(0,9306)B1 - 1,5692}{0,9995} \quad \text{Ec. 11-4}$$

- *Balance de etilenglicol en la segunda columna*

$$(X_{EG})B1 = (X_{EG})D2 + (X_{EG})B2$$

$$(0,9306)B1 = (0,1266)D2 + (0,9995)B2$$

$$B2 = \frac{(0,9306)B1 - (0,1266)D2}{0,9995} \quad \text{Ec. 12-4}$$

Igualando Ec. 11-4 en Ec. 12-4

$$\frac{(0,9306)B1 - 1,5692}{0,9995} = \frac{(0,9306)B1 - (0,1266)D2}{0,9995}$$

$$(0,1266)D2 = 1,5692$$

$$D2 = \frac{1,5692}{0,1266}$$

$$D2 = 12,3951 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 13-4}$$

Reemplazando D2 en Ec.3-4

$$D1 = 3001,57 \frac{\text{kg}}{\text{h}} - 12,3951 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

$$D1 = 2989,1749 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 14-4}$$

Reemplazando D2 en Ec. 10-4

$$(0,0216)B1 = (0,2739) \left(12,3951 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \right)$$

$$B1 = \frac{3,3950}{0,0216}$$

$$B1 = 157,1759 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 15-4}$$

Reemplazo B1 en Ec.11-4

$$B2 = \frac{(0,9306)(157,1759) - 1,5692}{0,9995}$$

$$B2 = \frac{144,6987}{0,9995}$$

$$B2 = 144,7711 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad \text{Ec. 16-4}$$

Corriente de etilenglicol que recircula desde la segunda columna:

$$EG_{\text{Recircula}} = B2 + E$$

$$EG_Recircula = 144,7711 \frac{kg}{h} + 1,57 \frac{kg}{h}$$

$$B2 = 146,34 \frac{kg}{h}$$

Ec. 17-4

Tabla 10-4. Resumen de resultados del balance de masa del proceso

Variable	Calculo	Columna 1 (Recupera THF)				Columna 2 (Recupera EG)		Unidades
		Feed	EG_Recircula	D1	B1	D2	B2	
Flujo másico	DWSIM	3000	186,73	2992,21	194,52	9,813	184,71	kg/h
	Balance	3000	146,34	2989,17	157,18	12,395	146,34	
	Error (%)		21,630	0,10160	19,197	26,312	20,773	

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

Los resultados permiten validar, mediante balances de masa, la corriente de flujo de interés en este estudio (el flujo de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano); determinándose un 0,10% de error en la simulación.

4.4.2 Base de datos para desarrollar la red neuronal artificial

La tabla de datos presentada en el ANEXO B, corresponde al conjunto de datos utilizados para el entrenamiento de la red y el conjunto de datos presentados en el ANEXO C son los datos utilizados en la validación de la red neuronal artificial.

4.4.3 Programación de la red neuronal artificial

4.4.3.1 Normalización de los datos

Empleando la ecuación de la normalización descrita en el Diseño de la red neuronal artificial, en el espacio de trabajo de Matlab, se normalizan los datos para las variables de entrada y salida de la red neuronal artificial. La normalización de los datos de entrenamiento se presenta en el código del ANEXO K y la normalización de los datos de validación en el ANEXO E.

4.4.3.2 Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial

Con los datos normalizados, se inicia el desarrollo de la red neuronal artificial (Ver ANEXO K). En el código de la red existe una variable denominada “hiddenLayerSize”, un comando importante al momento de establecer el número de neuronas en la capa oculta de la red neuronal. En función de coeficiente de correlación R y el error cuadrático medio (MSE) (Ver ANEXO K), se determinó que una topología de red con 400 neuronas en la capa oculta es ideal para el aprendizaje de la red neuronal artificial. En el ANEXO K, también se presenta algunos de los resultados obtenidos al modificar el número de neuronas en la capa oculta. Los datos predichos en el entrenamiento de la red neuronal se describen en el ANEXO K.

4.4.3.3 Validación de la red neuronal artificial

Empleado el conjunto de datos de validación (ver ANEXO C) como entrada, se realiza un nuevo código para validar la red neuronal y predecir el flujo y la fracción molar de tetrahidrofurano en función de los parámetros aprendidos por la red neuronal durante el entrenamiento. Es importante mencionar que la variable “net” contiene las principales propiedades de predicción de la red neuronal adquiridas durante su entrenamiento, como se observa en el código del ANEXO I los datos predichos por la red neuronal para su validación por análisis estadístico se describen en el ANEXO J.

4.4.4 Análisis estadístico de los datos predichos por la red

Para determinar la efectividad de la predicción por parte de la red neuronal artificial se lleva a cabo un análisis estadístico tomando en cuenta los datos reales y predichos para la corriente de flujo en el destilado de la columna de recuperación de tetrahidrofurano y la fracción molar de tetrahidrofurano recuperado.

4.4.4.1 Análisis de la varianza ANOVA para el flujo másico

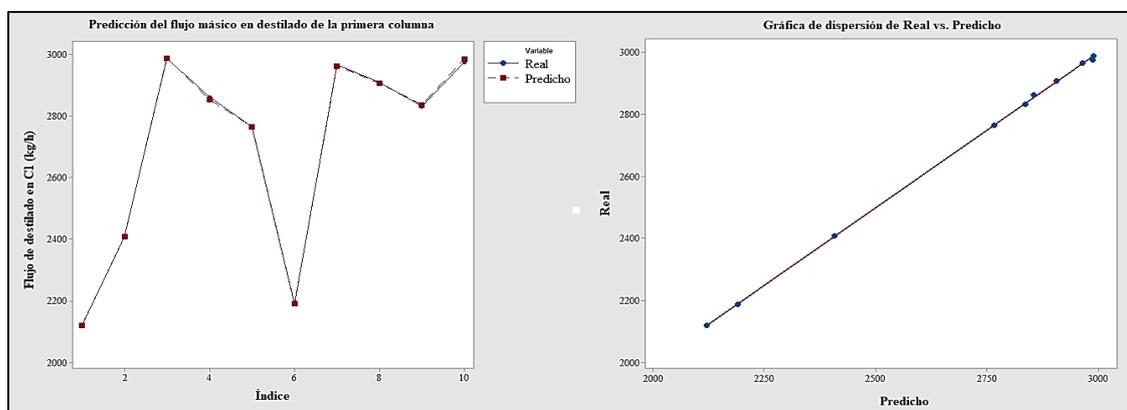


Gráfico 1-4. Flujo másico de destilado en la columna de recuperación de THF.

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

Tabla 11-4. Tabla de Medias para el flujo másico de destilado en la primera columna

Variable	Casos	Media	Límite Inferior	Límite Superior
Flujo másico Real	10	2701,88	2544,8	2858,96
Flujo másico Predicho	10	2702,33	2545,25	2859,41
Total	20	2702,1		

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

Tabla 12-4. Tabla ANOVA para el flujo másico de destilado en primera columna

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	1,03512	1	1,03512	0,00000925875	0,9976
Intra grupos	2,01239E6	18	111800,		
Total (Corr.)	2,01239E6	19			

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

En el Gráfico 1-4 se observa el flujo másico real y predicho del destilado en la columna de recuperación de THF y la Tabla 11-4 muestra la media de los datos reales y predichos para el flujo másico de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano. En la Tabla 12-4 y el gráfico Anova (ver ANEXO K) el valor-P es mayor a 0,05; por tanto, no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales obtenidos mediante simulación en DWSIM y los predichos por la red neuronal para el flujo másico de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano con un 95,0% de confianza.

4.4.4.2 Análisis de la varianza ANOVA para la fracción molar

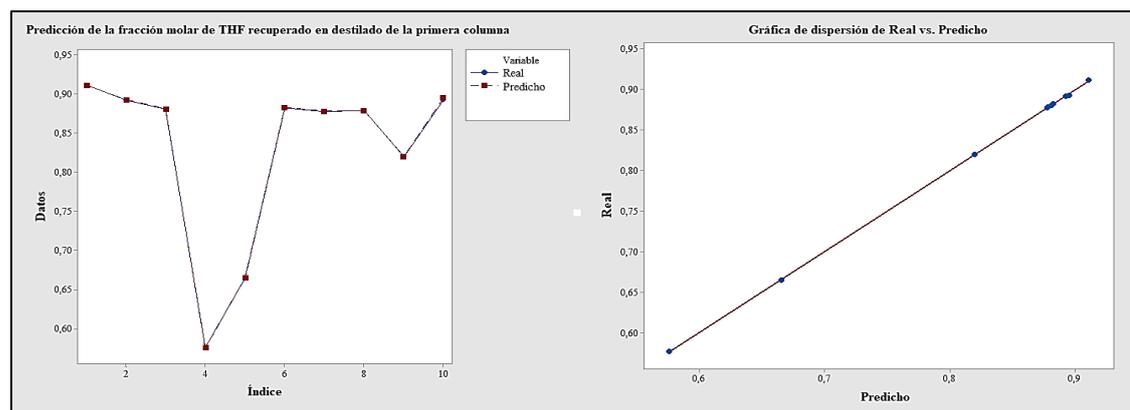


Gráfico 2-4. Fracción molar de THF recuperado en destilado de la primera columna

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

Tabla 13-4. Tabla de Medias para la fracción molar de THF real y predicha.

Variable	Casos	Media	Límite Inferior	Límite Superior
Fracción molar de THF Real	10	0,82731	0,773978	0,880642
Fracción molar de THF Predicha	10	0,82782	0,774488	0,881152
Total	20	0,827565		

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

Tabla 14-4. Tabla ANOVA para la fracción molar de THF real y predicha

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Entre grupos	0,0000013005	1	0,0000013005	0,000100908	0,9921

Intra grupos	0,231984	18	0,012888		
Total (Corr.)	0,231985	19			

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021.

En el Gráfico 2-4 se observa la fracción molar real y predicha del THF recuperado en destilado de la primera columna y la Tabla 13-4 muestra la media de los datos reales y predichos para el flujo másico de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano. En la Tabla 14-4 y el gráfico Anova (ver ANEXO K). Puesto que el valor-P es mayor que 0,05 en las variables comparadas; se acepta la hipótesis nula, evidenciando que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre las medias de los datos reales y predichos por la red neuronal artificial con un 95% de confianza.

CONCLUSIONES

- La red neuronal artificial desarrollada predice la composición de tetrahidrofurano recuperado de una mezcla azeotrópica de tetrahidrofurano – agua; el modelo de predicción se basó en la simulación en DWSIM de la destilación extractiva utilizando etilenglicol como agente de arrastre y el modelo termodinámico NRTL para separar la mezcla azeotrópica.
- La simulación del proceso de la obtención de tetrahidrofurano por destilación extractiva de una mezcla azeotrópica tetrahidrofurano - agua utilizando etilenglicol como agente de arrastre se realizó en base al artículo científico “Design and Control of Extraction Distillation for Dehydration of Tetrahydrofuran” donde se simula el proceso en Aspen Plus. La simulación en DWSIM, frente a los resultados reportados por los autores del artículo usando Aspen Plus; presenta un error de 9,38% para el flujo másico de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano y de 4,48% en la fracción molar de tetrahidrofurano recuperado. Adicionalmente se realizó una validación del flujo másico de destilado en la columna de recuperación de tetrahidrofurano mediante un balance de masa en hoja de cálculo, obteniendo un error del 0,10%.
- A partir de diferentes simulaciones en DWSIM se recopilaron 110 pares de datos para el flujo másico de destilado y la fracción molar de tetrahidrofurano recuperado en la columna de destilación extractiva en función de diferentes valores de la fracción molar de tetrahidrofurano en la alimentación, la relación de reflujo y temperatura del calderín en la columna de destilación extractiva; y la relación de reflujo en la columna de recuperación del etilenglicol. De los 110 datos, 100 datos se destinaron para entrenamiento y prueba de la red y 10 datos para la validación estadística de la red neuronal artificial.
- La red neuronal artificial se alimenta con 4 variables de entradas, una capa oculta con 400 neuronas y 2 variables de salida; también se basa en un esquema de aprendizaje supervisado con el algoritmo de regularización bayesiana; obteniendo un coeficiente de correlación de 0,97225 y error cuadrático medio de $5,17 \text{ E-}03$ durante el entrenamiento y prueba de la red.
- El análisis de la varianza para el flujo másico de destilado y la fracción molar de tetrahidrofurano recuperado en la columna de destilación extractiva arrojó un valor P mayor que 0,05 en las variables comparadas; demostrando que no existe una diferencia estadística significativa entre la media de los datos reales por simulación en DWSIM y la media de los datos predichos por la red neuronal artificial.

RECOMENDACIONES

- Para la simulación en DWSIM del sistema de destilación extractiva se recomienda comparar los resultados utilizando otro agente de arrastre como el glicerol también considerado en otros estudios por su costo y baja toxicidad.
- Emplear la metodología del trabajo para desarrollar modelos de predicción que calculen la composición de los productos separados de otras mezclas azeotrópicas mediante destilación extractiva.
- Evaluar otros parámetros que influyen en el rendimiento de la red neuronal artificial, como las funciones de activación y cantidad de capas ocultas, analizando su influencia en la tasa de aprendizaje.
- Predecir la cantidad de agente de arrastre recuperado en la segunda columna y recirculado en el proceso incluyendo las variables que influyen en su destilación como entradas de la red neuronal artificial.

GLOSARIO

Agente de arrastre: también conocido como “Entrainer” se refiere al agente de separación utilizado para romper el azeótropo en una mezcla binaria. La adición de un agente de arrastre es muy importante en el proceso de separación por destilación azeotrópica o extractiva. Desempeña un papel vital en hacer una diferencia de punto de ebullición en los componentes de la mezcla azeotrópica. Los agentes de arrastre son específicos de cada mezcla (Onkar et al., 2016, p.30).

Azeótropo: mezcla azeotrópica.

Algoritmo de entrenamiento: es un algoritmo inteligente que puede obtener sensibilidad a partir de un conjunto de datos de entrenamiento y se utiliza para ajustar los pesos de conexión de una red neuronal artificial (Kim et al., 2015, p.105).

Coefficiente de actividad: es una función de desviación que se utiliza para tener en cuenta el comportamiento de líquido no ideal en una mezcla (Gebreyohannes et al., 2014, p.12445).

Destilación: es un método para separar mezclas líquidas por vaporización y condensación. Como técnica de separación, la destilación aprovecha el hecho de que cuando un líquido se vaporiza parcialmente, las composiciones de las dos fases son diferentes. Al separar las fases y repetir el procedimiento, a menudo es posible separar completamente la mezcla original (King, 2019).

Destilación extractiva: es uno de los principales procesos de destilación para la separación de azeótropos de mínimo o máximo punto de ebullición y mezclas de baja volatilidad relativa (Gerbaud et al., 2014, p.202).

Mezcla azeotrópica: es una solución de dos o más líquidos, cuya composición no cambia con la destilación simple. La composición de la fase líquida en el punto de ebullición es idéntica a la del vapor en equilibrio con ella, y tales mezclas o azeótropos forman soluciones de ebullición constante (Johnston, 2019).

Modelo termodinámico: ecuaciones que pueden ayudar a comprender el comportamiento de un sistema. Las categorías del modelo incluyen ecuaciones de estado, coeficientes de actividad, empíricos o específicos del sistema. Los modelos termodinámicos se pueden utilizar para predecir varias propiedades como la entalpía o el equilibrio de fases. La selección del modelo puede depender de parámetros tales como especies y composiciones del proceso, rangos de presión y temperatura, disponibilidad de datos, entre otros aspectos (Tillman et al., 2012, p.277).

NRTL: el modelo no aleatorio de dos líquidos (Non Random Two Liquid) fue propuesto por Renon y Prausnitz (1968) para la determinación de coeficientes de actividad para fases líquidas

ante la incapacidad para manejar los sistemas en los que la fase líquida estaba compuesta por dos líquidos inmiscibles. Basado en algunas suposiciones hechas por Wilson, se dedujo el modelo NRTL. La suposición principal de este modelo radica en que, para una mezcla de moléculas con interacciones fuertemente no ideales, las moléculas se agrupan de una manera no aleatoria en donde debido a las propiedades físicas de las moléculas se forman composiciones localizadas diferentes a la composición global (Oreje y González, 2008, p.53).

Red neuronal artificial: es un modelo computacional que consta de varios elementos de procesamiento denominadas neuronas que reciben entradas y entregan salidas en función de sus funciones de activación predefinidas (Shichkin et al., 2018, p.150). Las redes neuronales artificiales se utilizan para modelar problemas no lineales y predecir los valores de salida para parámetros de entrada dados a partir de sus valores de entrenamiento (Roy, 2014, p.118).

Red neuronal artificial de prealimentación: también conocida como red neuronal feedforward, donde la señal o información pasa de las neuronas de entrada, a través de las neuronas ocultas, a los nodos de salida (Peng et al., 2011, p.1413).

Regularización bayesiana: es un proceso matemático que convierte una regresión no lineal en un problema estadístico "bien planteado". La ventaja de las redes neuronales entrenadas con el algoritmo de regularización bayesiana radica en que los modelos son robustos y el proceso de validación es innecesario (Burden y Winkler, 2008, p.25).

Simulación: es un comportamiento basado en variables que cambian con el tiempo y que permiten tomar decisiones basadas en datos pasados y actuales para comprender tendencias futuras (Lagarda et al., 2019, p.376).

BIBLIOGRAFÍA

BURDEN, F., & WINKLER, D. "Bayesian regularization of neural networks". *Methods in Molecular Biology* [en línea], 2008, 458, pp. 25-44. [Consulta: 24 enero 2021]. ISSN 10643745. DOI 10.1007/978-1-60327-101-1_3.

DA SILVA; et al. *Artificial neural networks: A practical course*. 2016 S.l.: s.n. ISBN 9783319431628.

DEORUKHKAR; et al. "Purification of tetrahydrofuran from its aqueous azeotrope by extractive distillation: Pilot plant studies". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2016, 105, pp. 79-91. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2016.04.006.

DU, K., & SWAMY, M. "Neural networks in a softcomputing framework". *Neural Networks in a Softcomputing Framework* [en línea], 2006, pp. 1-566. [Consulta: 14 enero 2021]. DOI 10.1007/1-84628-303-5.

FAN, Z; et al. "Design and Control of Extraction Distillation for Dehydration of Tetrahydrofuran". *Chemical Engineering and Technology* [en línea], 2013, 36, pp. 829-839. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 09307516. DOI 10.1002/ceat.201200611.

GEANKOPLIS, C. *Procesos de transporte y operaciones unitarias* [en línea], 1998, S.l.: Continental. Grupo Patria Cultural. ISBN 9789682613166. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=aEpaAAAACAAJ>.

GEBREYOHANNES, S; et al. "Generalized interaction parameter for the modified nonrandom two-liquid (NRTL) activity coefficient model". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2014, 53, pp. 20247-20257. [Consulta: 26 febrero 2021], ISSN 15205045. DOI 10.1021/ie503135c.

GERBAUD, V., & RODRIGUEZ, I. *Extractive Distillation* [en línea], 2014, S.l.: Elsevier Inc. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISBN 9780123868794. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-386878-7.00006-1>.

GHUGE, P; et al. "Comparative analysis of extractive and pressure swing distillation for separation of THF-water separation". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2017, 103, pp. 188-200. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 00981354. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.03.019>.

GMBH. "Vapor-Liquid Equilibrium Data". *Dortmund Data Bank* [en línea], 2020. [Consulta: 14 enero 2021]. Disponible en: <http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/VLE-Tetrahydrofuran%3BWater.php>.

GOH, G; et al. "Deep learning for computational chemistry". *Journal of Computational Chemistry* [en línea], 2017, 38, pp. 1291-1307. [Consulta: 11 diciembre 2020]. ISSN 1096987X. DOI 10.1002/jcc.24764.

GÓMEZ, A. *Simulación del proceso de deshidratación del tetrahidrofurano por medio De destilación extractiva utilizando Aspen Plus* [en línea], 2007. Bogotá, Colombia: Universidad de Los Andes. [Consulta: 11 diciembre 2020]. Disponible en: <https://repositorio.uniandes.edu.co/bitstream/handle/1992/26033/u295542.pdf?sequence=1>

GÓMEZ, P., & GIL, I. "Simulation of the tetrahydrofuran dehydration process by extractive distillation". *Latin American Applied Research* [en línea], 2009, 39, pp. 275-284. ISSN 03270793.

GU, J; et al. "Improved design and optimization for separating tetrahydrofuran–water azeotrope through extractive distillation with and without heat integration by varying pressure". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2018, 133, pp. 303-313. [Consulta: 13 enero 2021]. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2018.03.015. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.03.015>

HILMEN, E. *Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation* [en línea], 2000. S.l.: s.n. [Consulta: 14 enero 2021]. Disponible en: https://web.archive.org/web/20070615185910/http://www.chemeng.ntnu.no/thesis/download/2000/hilmen/Thesis_Hilmen.pdf.

JAISWAL, P; et al. "Comparative study of various training algorithms of artificial neural network". *Proceedings - IEEE 2018 International Conference on Advances in Computing, Communication Control and Networking, ICACCCN 2018* [en línea], 2018, pp. 1097-1101. DOI 10.1109/ICACCCN.2018.8748660.

JOHNSTON, F. "Azeotropic mixture". *AccessScience* [en línea], 2019, [Consulta: 26 febrero 2021]. Disponible en: <https://www.accessscience.com/content/azeotropic-mixture/066800>.

KHAYET, M., & COJOCARU, C. "Artificial neural network modeling and optimization of desalination by air gap membrane distillation". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2012, 86, pp. 171-182. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 13835866. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2011.11.001>.

KIM, D; et al. "Nonlinear Vibration Control of 3D Irregular Structures Subjected to Seismic Loads". *IGI Global* [en línea], 2015, pp. 103-119. [Consulta: 25 enero 2021]. DOI 10.4018/978-1-4666-9479-8.ch003.

KIM, K; et al. "Entrainer selection and solvent recycling in complex batch distillation". *Chemical Engineering Communications* [en línea], 2004, 191, pp. 1606-1633. ISSN 00986445. DOI 10.1080/00986440490472724.

KING, C. "Distillation". *AccessScience* [en línea], 2019, [Consulta: 26 febrero 2021]. Disponible en: <https://www.accessscience.com/content/distillation/201100>.

KNIGHT, J., & DOHERTY, M. "Optimal Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillation Sequences". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 1989, 28, pp. 564-572. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 15205045. DOI 10.1021/ie00089a011.

KOCZKA, K; et al. "Novel hybrid separation processes based on pervaporation for THF recovery". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2007, 46, pp. 239-246. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2006.05.016.

LAGARDA, E., & VEGA, E.A. "Application of System Dynamics in a Gasoline Service Station". *Handbook of Research on Industrial Applications for Improved Supply* [en línea], 2019 pp. 375-403. [Consulta: 26 febrero 2021]. DOI 10.4018/978-1-7998-0202-0.ch016.

LEE, J; et al. "Separation of tetrahydrofuran and water using pressure swing distillation: Modeling and optimization". *Korean Journal of Chemical Engineering* [en línea], , 2011, 28, pp. 591-596. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 02561115. DOI 10.1007/s11814-010-0467-1.

LIANG, S; et al. "Insight into pressure-swing distillation from azeotropic phenomenon to dynamic control". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2017, 117, pp. 318-335. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 02638762. DOI 10.1016/j.cherd.2016.10.040. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2016.10.040>.

LLADOSA, E; et al. "Separation of di-n-propyl ether and n-propyl alcohol by extractive distillation and pressure-swing distillation: Computer simulation and economic optimization". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2011, 50, pp. 1266-1274. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2011.07.010.

MATHWORKS. *Redes neuronales*. [Blog], 2020. [Consulta: 23 noviembre 2020]. Disponible en: <https://es.mathworks.com/discovery/neural-network.html#redes-neuronales-con-matlab>

MEDEIROS, D. *DWSIM Simulator*. [Blog], 2020. [Consulta: 14 enero 2021]. Disponible en: <https://dwsim.inforside.com.br/new/>

MOHAMMADI, A., & RICHON, D. "Hydrate phase equilibria for hydrogen+water and hydrogen+tetrahydrofuran+water systems: Predictions of dissociation conditions using an artificial neural network algorithm". *Chemical Engineering Science* [en línea], 2010, 65, pp. 3352-3355. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 00092509. DOI 10.1016/j.ces.2010.02.015. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2010.02.015>.

ONKAR, D; et al. "Entrainer Selection Approach for Distillation Column". *International Journal of Chemical Engineering Research* [en línea], 2016, 8, pp. 29-38. [Consulta: 26 febrero 2021]. Disponible en: <http://www.ripublication.com>.

OREJE, J. & GONZÁLEZ, R. "Solución matricial de modelos para cálculo de equilibrio líquido-vapor". *Informacion Tecnologica* [en línea], 2008, 19, pp. 51-58. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISSN 07168756. DOI 10.4067/s0718-07642008000300008.

PANERATI, J; et al. "Experimental methods in chemical engineering: Artificial neural networks–ANNs". *Canadian Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2019, 97, pp. 2372-2382. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 1939019X. DOI 10.1002/cjce.23507.

PENG, C., & MAGOULAS, G. "Sequence Processing with Recurrent Neural Networks". *Encyclopedia of Artificial Intelligence* [en línea], 2011, pp. 1411-1417. [Consulta: 26 febrero 2021]. DOI 10.4018/9781599048499.ch207.

REPKE, J. & KLEIN, A. "Homogeneous azeotropic pressure swing distillation: Continuous and batch process". *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2005, 20, pp. 721-726. [Consulta: 25 enero 2021]. ISSN 15707946. DOI 10.1016/S1570-7946(05)80242-1.

RODRIGUEZ, I; et al. "Heterogeneous batch distillation processes for waste solvent recovery in pharmaceutical industry". *Computer Aided Chemical Engineering* [en línea], 2009, 27, pp. 1119-1124. ISSN 15707946. DOI 10.1016/S1570-7946(09)70407-9.

ROSARIO, Brayan. Modelo de predicción de la concentración de cloroformo durante el proceso de destilación de una mezcla metanol-cloroformo [en línea] (Trabajo de titulación). Escuela Superior Politécnica De Chimborazo, Riobamba, Ecuador. 2020.

ROY, C. *Instrumental colourant formulation* [en línea], 2014. S.l.: Woodhead Publishing Limited. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISBN 9781782423881. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1533/9781782423881.117>.

SANDIP, K. "Process Modeling by the Artificial Neural Network". *Techniques, Profit Maximization Plants, Operating Chemical* [en línea], 2020.S.l.: John Wiley & Sons Ltd, pp. 99-130. ISBN 9781119532231.

SHICHKIN, A; et al. "Training algorithms for artificial neural network in predicting of the content of chemical elements in the upper soil layer". *AIP Conference Proceedings* [en línea], 2018, 2048, pp. 148-157. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISSN 15517616. DOI 10.1063/1.5082119. Disponible en: <https://doi.org/10.1063/1.5082119>.

SONGLIN, X., & WANG, H. "Separation of tetrahydrofuran-water azeotropic mixture by batch extractive distillation process". *Chemical Engineering Research and Design* [en línea], 2006, 84, pp. 478-482. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 02638762. DOI 10.1205/cherd05050.

TILLMAN, D; et al. "Modeling and Fuel Blending". *Solid Fuel Blending* [en línea], 2012, pp. 271-293. [Consulta: 26 febrero 2021]. DOI 10.1016/b978-0-12-380932-2.00007-6.

XU, S. & WANG, H. "A new entrainer for separation of tetrahydrofuran-water azeotropic mixture by extractive distillation". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2006, 45, pp. 954-958. [Consulta: 26 febrero 2021]. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2006.02.001.

ZHANG, Z; et al. "Entrainer selection for separating tetrahydrofuran/water azeotropic mixture by extractive distillation". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2014, 122, pp. 73-77. [Consulta: 14 enero 2021]. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2013.10.051. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2013.10.051>.

ANEXOS

ANEXO A. Características importantes de DWSIM

Característica	Descripción
Compatibilidad CAPE-OPEN	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Socket de paquete de propiedades Thermo 1.0 / 1.1 ✓ Servidor de paquete de propiedades Thermo 1.1 ✓ Socket de operación de unidad y soporte de objetos de monitoreo de diagrama de flujo. ✓ DWSIM expone su operación de unidad Python Script (personalizada) para todos los simuladores compatibles con CAPE-OPEN.
Modelos termodinámicos	<ul style="list-style-type: none"> ✓ GERG-2008 ✓ PC-SAFT ✓ CoolProp ✓ Peng-Robinson ✓ Peng-Robinson (1978) ✓ Soave-Redlich-Kwong ✓ Lee-Kesler ✓ Lee-Kesler-Plöcker ✓ UNIFAC ✓ UNIFAC modificado (Dortmund), UNIQUAC ✓ NRTL ✓ Chao-Seader ✓ Grayson-Streed ✓ Ley de Raoult ✓ Tablas de vapor IAPWS-IF97 ✓ Agua de mar IAPWS-08 ✓ Aceite negro ✓ Agua agria y electrolitos acuosos
Modelado y simulación dinámicos	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Controlador PID ✓ Programador de eventos ✓ Variables supervisadas ✓ Integrador configurable ✓ Matrices de causa y efecto ✓ Modo de panel de control (tiempo real), Indicadores ✓ Medidores analógicos y digitales ✓ Campos de entrada e interruptores
Operaciones de la unidad (estado estable)	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Mezcladores ✓ Divisores ✓ Separadores ✓ Bombas ✓ Compresores ✓ Expansores ✓ Calderas ✓ Condensadores ✓ Válvulas ✓ Segmento de tuberías ✓ Columna de acceso directo ✓ Intercambiadores de calor ✓ Conversión / equilibrio / reactores de Gibbs, PFR, CSTR ✓ Separador de componentes ✓ Orificio Placa ✓ Columnas de destilación / absorción, ✓ Separador de sólidos ✓ Filtro de torta

	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Hoja de cálculo, secuencia de comandos de Python y operación de la unidad de hoja de flujo
Operaciones de la unidad (dinámica):	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Mezcladores ✓ Divisores ✓ Separadores ✓ Bombas ✓ Compresor ✓ Expansores ✓ Calderas ✓ Condensadores ✓ Válvulas ✓ Reactores PFR, CSTR ✓ Intercambiadores de calor ✓ Hoja de cálculo y script de Python
Utilidades	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Envolvente de fase ✓ Cálculos de hidratos ✓ Propiedades de componentes puros ✓ Punto crítico ✓ Dimensionamiento de PSV ✓ Dimensionamiento de recipientes ✓ Hoja de cálculo ✓ Propiedades de flujo frío de petróleo
Herramientas	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Ajuste del controlador PID ✓ Regresión de datos binarios ✓ Creador de compuestos ✓ C7 + a granel y Curvas de destilación ✓ Asistente de caracterización y reacciones del petróleo
Análisis de procesos	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Análisis de sensibilidad y optimización restringida multivariante
Extras	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Interfaz de complementos y sistema de secuencias de comandos Python / IronPython

Fuente: Medeiros, 2020.

ANEXO B. Conjunto de datos de entrenamiento de la red neuronal artificial

No.	ENTRADAS				SALIDAS	
	Fracción molar THF (Feed)	Relación de reflujo (C1)	Temperatura Reboiler (C1)	Relación de reflujo (C2)	Flujo másico de destilado en C1 (D1)	Fracción molar THF separado (D1)
1	0,90	0,092	422,60	0,395	2954,56	0,9543
2	0,78	0,700	400,00	0,710	2844,07	0,9440
3	0,43	0,120	382,00	0,750	2332,48	0,8760
4	0,73	0,650	419,20	0,750	2938,55	0,7811
5	0,77	0,745	417,56	0,320	2947,30	0,8176
6	0,81	0,990	401,10	0,530	2881,65	0,9368
7	0,65	0,870	418,30	0,520	2948,56	0,6847
8	0,68	0,190	417,90	0,800	2947,34	0,7184
9	0,50	0,410	402,70	0,710	2889,15	0,6216
10	0,20	0,300	388,60	0,940	2708,63	0,6604
11	0,46	0,430	390,80	0,590	2758,40	0,5691
12	0,59	0,370	390,30	0,750	2747,56	0,7694
13	0,74	0,210	381,10	0,610	2842,55	0,8501
14	0,77	0,260	414,50	0,290	2936,76	0,8278
15	0,47	0,480	384,60	0,450	2629,42	0,6654
16	0,72	0,700	389,10	0,720	2763,55	0,9527
17	0,88	0,770	420,10	0,780	2950,31	0,9365
18	0,62	0,790	380,00	0,770	2743,66	0,9497
19	0,61	0,020	395,10	0,960	2999,32	0,6111
20	0,60	0,600	420,30	0,100	2991,47	0,6048
21	0,61	0,730	407,10	0,740	2975,10	0,6247
22	0,69	0,200	416,70	0,240	2983,95	0,7015
23	0,61	0,460	414,70	0,450	2982,29	0,6204

24	0,64	0,140	399,20	0,780	2960,82	0,6654
25	0,69	0,090	383,30	0,980	2847,96	0,8185
26	0,84	0,300	424,90	0,850	2988,49	0,8515
27	0,83	0,790	403,70	0,850	2968,96	0,8611
28	0,85	0,960	408,10	0,570	2982,93	0,8641
29	0,72	0,290	395,10	0,430	2946,96	0,8401
30	0,89	0,700	401,50	0,850	2989,28	0,8897
31	0,83	0,160	388,10	0,220	2940,82	0,8873
32	0,82	0,880	389,10	0,360	2947,64	0,8682
33	0,80	0,260	391,40	0,340	2931,49	0,8674
34	0,77	0,800	383,40	0,700	2892,09	0,8710
35	0,47	0,360	402,10	0,640	2974,20	0,8944
36	0,92	0,910	391,10	0,340	2985,03	0,9196
37	0,86	0,420	396,70	0,540	2965,76	0,8925
38	0,96	0,290	398,70	0,720	2987,67	0,9598
39	0,89	0,590	397,80	0,820	2986,57	0,8907
40	0,51	0,120	386,70	0,300	2882,69	0,5660
41	0,54	0,500	395,10	0,360	2939,89	0,5699
42	0,81	0,700	414,60	0,600	2978,34	0,8306
43	0,67	0,510	423,60	0,260	2985,32	0,6800
44	0,74	0,330	407,70	0,670	2969,56	0,7650
45	0,75	0,830	423,90	0,870	2985,29	0,7622
46	0,63	0,950	386,40	1,000	2869,85	0,7204
47	0,62	0,210	421,80	0,230	2983,64	0,6298
48	0,89	0,690	381,50	0,370	2976,05	0,8908
49	0,93	0,190	401,70	0,350	2987,22	0,9300
50	0,83	0,670	386,20	0,820	2937,64	0,8868

51	0,80	0,080	415,30	0,370	2985,21	0,8158
52	0,60	0,530	395,70	0,930	2949,12	0,6299
53	0,89	0,010	384,80	0,920	3001,40	0,8895
54	0,95	0,040	400,80	0,150	2998,10	0,9495
55	0,77	0,150	413,20	0,300	2981,54	0,7860
56	0,74	0,790	400,20	0,790	2964,00	0,7698
57	0,56	0,350	400,20	0,770	2963,65	0,5788
58	0,69	0,690	394,20	0,980	2946,49	0,7300
59	0,57	0,130	382,10	0,380	2813,48	0,6856
60	0,68	0,760	402,20	0,380	2966,54	0,7039
61	0,71	0,090	390,60	0,840	2930,98	0,7665
62	0,90	0,940	413,30	0,300	2992,55	0,8998
63	0,89	0,600	407,40	0,400	2991,13	0,8898
64	0,90	0,470	384,40	0,550	2982,53	0,8997
65	0,84	0,260	390,80	0,750	2947,30	0,8924
66	0,62	0,030	410,00	0,550	2999,50	0,6210
67	0,80	0,800	387,10	0,500	2985,18	0,9498
68	0,45	1,000	411,70	0,940	2992,44	0,8698
69	0,63	0,300	393,50	0,870	2943,09	0,6666
70	0,81	0,280	406,20	0,920	2972,80	0,8360
71	0,73	0,260	409,60	0,990	2976,77	0,7485
72	0,54	0,680	391,00	0,340	2929,25	0,5756
73	0,69	0,720	401,40	0,410	2963,94	0,7165
74	0,79	0,870	416,30	0,250	2982,47	0,8059
75	0,71	0,400	390,40	0,900	2985,16	0,9097
76	0,88	0,730	405,20	0,980	2989,95	0,8802
77	0,85	0,880	401,90	0,330	2976,62	0,8699

78	0,61	0,060	385,70	0,410	2956,05	0,6374
79	0,89	0,100	413,80	0,380	2994,27	0,8902
80	0,67	0,020	390,40	0,740	2997,72	0,6723
81	0,90	0,280	400,50	0,270	2989,74	0,9001
82	0,69	0,100	323,10	0,590	2943,81	0,7326
83	0,88	0,820	392,80	0,470	2987,16	0,8796
84	0,61	0,050	419,90	0,560	2998,00	0,6522
85	0,65	0,310	386,40	0,210	2898,78	0,7219
86	0,70	0,100	401,70	0,510	2967,70	0,7246
87	0,87	0,030	386,40	0,320	2990,49	0,6671
88	0,86	0,250	399,50	0,210	2985,92	0,8716
89	0,89	0,520	408,60	0,570	2991,88	0,8899
90	0,80	0,320	413,90	0,720	2981,67	0,8170
91	0,56	0,570	410,40	0,400	2978,22	0,5711
92	0,79	0,410	380,50	0,830	2900,08	0,8841
93	0,83	0,110	413,70	0,490	2980,97	0,8488
94	0,73	0,040	420,30	0,560	2999,03	0,7318
95	0,75	0,120	393,50	0,590	2945,29	0,7973
96	0,77	0,440	386,10	0,880	2894,43	0,8716
97	0,69	0,470	386,10	0,650	2893,39	0,7746
98	0,53	0,430	400,80	0,670	2964,44	0,5468
99	0,89	0,980	395,60	0,810	2988,00	0,8896
100	0,55	0,110	385,40	0,760	2880,04	0,6152

Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

ANEXO C. Conjunto de datos de validación de la red neuronal artificial

No.	ENTRADAS				SALIDAS	
	Fracción molar THF (Feed)	Relación de reflujo (C1)	Temperatura Reboiler (C1)	Relación de reflujo (C2)	Flujo másico de destilado en C1 (D1)	Fracción molar THF separado (D1)
101	0,89	0,410	344,06	0,900	2119,38	0,9111
102	0,48	0,430	368,37	0,780	2408,25	0,8917
103	0,88	0,730	397,05	0,610	2987,57	0,8801
104	0,51	0,230	384,77	0,120	2863,23	0,5765
105	0,53	0,760	381,30	0,150	2765,30	0,6648
106	0,81	0,930	343,28	0,830	2189,56	0,8818
107	0,85	0,750	392,33	0,120	2967,23	0,8769
108	0,79	0,670	387,63	0,100	2909,36	0,8785
109	0,68	0,300	383,57	0,770	2832,18	0,8194
110	0,87	0,470	406,38	0,820	2976,71	0,8923

Realizado por: **Taipe**, Jennifer, 2021.

ANEXO D. Normalización de los datos de entrenamiento

```
%01. EXTRACCIÓN DE BASE DE DATOS DE EXCEL
Extraer=readtable('Base Datos.xlsx','Sheet','DatosE');
Data = table2array(Extraer)';

%02. NORMALIZACIÓN DE DATOS
%Parámetros de entrada
entradas=Data(1:4,:);

%Fracción molar de THF en la alimentación
Xthf_F_max=max(entradas(1,:));
Xthf_F_min=min(entradas(1,:));
Xthf_F_N =[(entradas(1,1:end)-Xthf_F_min)/(Xthf_F_max-Xthf_F_min)];

%Relación de reflujo en la primera columna
RR1_max=max(entradas(2,:));
RR1_min=min(entradas(2,:));
RR1_N =[(entradas(2,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];

%Temperatura de reboiler en la primera columna
TR1_max=max(entradas(3,:));
TR1_min=min(entradas(3,:));
TR1_N =[(entradas(3,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];

%Relación de reflujo en la segunda columna
RR2_max=max(entradas(4,:));
RR2_min=min(entradas(4,:));
RR2_N =[(entradas(4,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];

%entradas normalizadas
Entradas_Norm=[Xthf_F_N;RR1_N;TR1_N;RR2_N];

%Parámetros de salida
salidas=Data(5:6,:);

%Flujo másico de destilado en primera columna
D1_max=max(salidas(1,:));
D1_min=min(salidas(1,:));
D1_N =[(salidas(1,1:end)-D1_min)/(D1_max-D1_min)];

%Fracción molar de THF recuperado en primera columna
Xthf_D1_max=max(salidas(2,:));
Xthf_D1_min=min(salidas(2,:));
Xthf_D1_N =[(salidas(2,1:end)-Xthf_D1_min)/(Xthf_D1_max-Xthf_D1_min)];

%salidas normalizadas
Salidas_Norm=[D1_N;Xthf_D1_N];
```

ANEXO E. Normalización de los datos de validación

```
%01. EXTRACCIÓN DE BASE DE DATOS DE EXCEL
Extraer=readtable('Base Datos.xlsx','Sheet','DatosV');
Datav = table2array(Extraer)';

%02. CARGAR VARIABLES DE ENTRENAMIENTO
load('RNA400BR.mat');

%02. NORMALIZACIÓN DE DATOS
% Parámetros de Entrada
entradasv=Datav(1:4,:);

%Fracción molar de THF en la alimentación
Xthf_F_Nv =[(entradasv(1,1:end)-Xthf_F_min)/(Xthf_F_max-Xthf_F_min)];

%Relación de reflujo en la primera columna
RR1_Nv =[(entradasv(2,1:end)-RR1_min)/(RR1_max-RR1_min)];

%Temperatura de reboiler en la primera columna
TR1_Nv =[(entradasv(3,1:end)-TR1_min)/(TR1_max-TR1_min)];

%Relación de reflujo en la segunda columna
RR2_Nv =[(entradasv(4,1:end)-RR2_min)/(RR2_max-RR2_min)];

%ENTRADAS NORMALIZADAS
Entradas_Normval=[Xthf_F_Nv;RR1_Nv;TR1_Nv;RR2_Nv];
```

ANEXO F. Desarrollo y entrenamiento de la red neuronal artificial

```
%03 DESARROLLO DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
% Script generated by Neural Fitting app
% Created 17-ene-2021 10:39:32
%
% This script assumes these variables are defined:
%
% Entradas_Norm - input data.
% Salida_Norm - target data.

x = Entradas_Norm;
t = Salidas_Norm;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help nntain
% 'trainlm' is usually fastest.
% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
trainFcn = 'trainbr'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

% Create a Fitting Network
hiddenLayerSize = 400;
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

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

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

% View the Network
view(net)

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

%04. RESULTADOS DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL

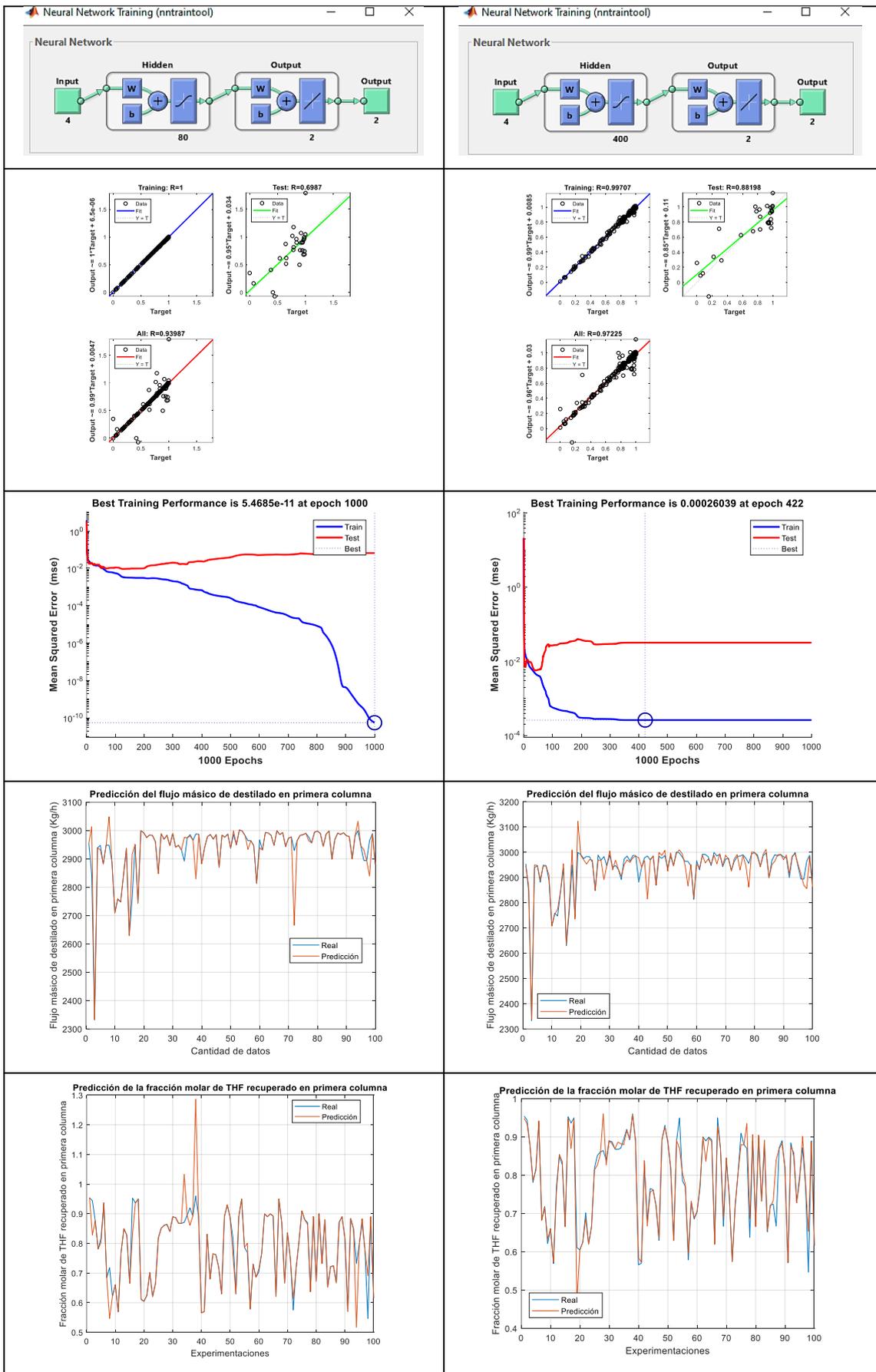
DatosPred = net(Entradas_Norm(1:end,:))

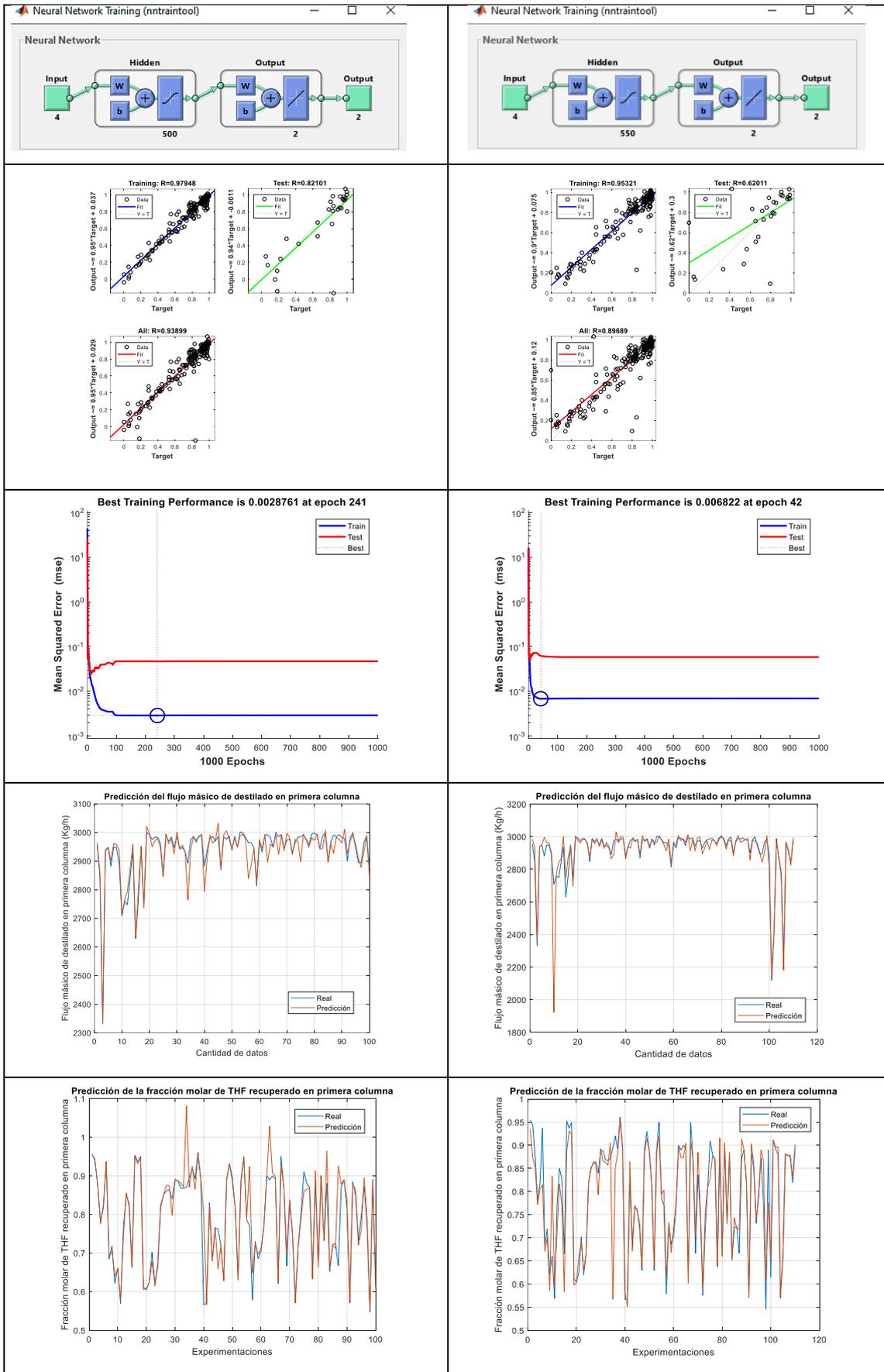
%Flujo másico de destilado en primera columna predicho
D1_pred = DatosPred(1,:).*(D1_max-D1_min)+D1_min';

%Fracción molar de THF recuperado en primera columna predicho
Xthf_D1_pred = DatosPred(2,:).*(Xthf_D1_max-Xthf_D1_min)+Xthf_D1_min';

%Resultados predichos
Resultados_Pred=[D1_pred;Xthf_D1_pred]';
```

ANEXO G. Resultados del entrenamiento de la red con diferentes neuronas en la capa oculta





Realizado por: Taípe, Jennifer, 2021.

ANEXO H. Datos predichos durante el entrenamiento de la red neuronal artificial

No	Flujo másico en destilado de la primera columna		Fracción molar de THF recuperado en destilado de la primera columna	
	Real	Predicho	Real	Predicho
1	2954,56	2961,87	0,9543	0,9473
2	2844,07	2908,64	0,9440	0,9324
3	2332,48	2346,50	0,8760	0,8758
4	2938,55	2933,93	0,7811	0,7842
5	2947,30	2953,93	0,8176	0,8160
6	2881,65	2869,79	0,9368	0,9384
7	2948,56	2947,53	0,6847	0,6839
8	2947,34	2951,04	0,7184	0,7194
9	2889,15	2953,89	0,6216	0,6175
10	2708,63	2705,44	0,6604	0,6600
11	2758,40	2763,06	0,5691	0,5785
12	2747,56	2795,67	0,7694	0,7578
13	2842,55	2837,69	0,8501	0,8513
14	2936,76	3016,53	0,8278	0,7862
15	2629,42	2634,07	0,6654	0,6596
16	2763,55	2915,02	0,9527	0,8568
17	2950,31	2964,66	0,9365	0,9375
18	2743,66	2735,02	0,9497	0,9492
19	2999,32	3007,05	0,6111	0,6129
20	2991,47	2993,66	0,6048	0,6059
21	2975,10	2967,85	0,6247	0,6213
22	2983,95	3072,22	0,7015	0,6457
23	2982,29	2986,81	0,6204	0,6213
24	2960,82	2975,00	0,6654	0,6641
25	2847,96	2853,33	0,8185	0,8177
26	2988,49	2989,35	0,8515	0,8512
27	2968,96	2966,95	0,8611	0,8623
28	2982,93	2989,88	0,8641	0,8611
29	2946,96	2936,98	0,8401	0,8449
30	2989,28	2976,48	0,8897	0,8921
31	2940,82	2927,35	0,8873	0,8813
32	2947,64	2974,44	0,8682	0,8704
33	2931,49	2936,66	0,8674	0,8659
34	2892,09	2913,33	0,8710	0,8671
35	2974,20	2943,68	0,8944	0,8889
36	2985,03	2991,43	0,9196	0,9205
37	2965,76	2967,56	0,8925	0,8985
38	2987,67	2980,60	0,9598	0,9588
39	2986,57	2974,75	0,8907	0,8867

40	2882,69	2886,45	0,5660	0,5667
41	2939,89	2943,81	0,5699	0,5717
42	2978,34	2958,98	0,8306	0,8333
43	2985,32	2981,16	0,6800	0,6779
44	2969,56	2978,56	0,7650	0,7578
45	2985,29	2979,05	0,7622	0,7631
46	2869,85	2868,63	0,7204	0,7201
47	2983,64	3156,91	0,6298	0,5896
48	2976,05	3032,19	0,8908	0,8425
49	2987,22	3004,79	0,9300	0,9168
50	2937,64	2917,79	0,8868	0,8897
51	2985,21	2982,70	0,8158	0,8170
52	2949,12	2952,11	0,6299	0,6306
53	3001,40	2733,42	0,8895	1,0214
54	2998,10	3000,63	0,9495	0,9498
55	2981,54	3006,29	0,7860	0,8163
56	2964,00	2953,72	0,7698	0,7772
57	2963,65	2930,41	0,5788	0,5870
58	2946,49	3065,81	0,7300	0,4727
59	2813,48	2736,81	0,6856	0,7768
60	2966,54	2969,66	0,7039	0,7072
61	2930,98	2906,69	0,7665	0,7805
62	2992,55	2979,57	0,8998	0,9000
63	2991,13	2986,97	0,8898	0,8875
64	2982,53	2977,97	0,8997	0,8956
65	2947,30	2971,26	0,8924	0,8453
66	2999,50	3054,53	0,6210	0,5136
67	2985,18	2941,18	0,9498	0,9494
68	2992,44	2997,55	0,8698	0,8696
69	2943,09	2939,39	0,6666	0,6743
70	2972,80	2970,05	0,8360	0,8393
71	2976,77	2971,98	0,7485	0,7417
72	2929,25	2926,31	0,5756	0,5744
73	2963,94	2951,66	0,7165	0,7167
74	2982,47	2989,38	0,8059	0,8066
75	2985,16	2922,71	0,9097	0,9061
76	2989,95	2989,84	0,8802	0,8764
77	2976,62	2974,59	0,8699	0,8649
78	2956,05	2959,26	0,6374	0,6407
79	2994,27	2989,47	0,8902	0,8913
80	2997,72	2985,81	0,6723	0,6735
81	2989,74	2998,37	0,9001	0,8961
82	2943,81	2941,58	0,7326	0,7328
83	2987,16	2994,26	0,8796	0,8837
84	2998,00	2997,16	0,6522	0,6530

85	2898,78	2913,86	0,7219	0,7218
86	2967,70	2986,13	0,7246	0,7184
87	2990,49	2989,66	0,6671	0,6690
88	2985,92	2986,26	0,8716	0,8783
89	2991,88	2950,07	0,8899	0,9964
90	2981,67	2989,81	0,8170	0,8198
91	2978,22	2973,76	0,5711	0,5712
92	2900,08	2915,09	0,8841	0,8842
93	2980,97	2961,04	0,8488	0,8591
94	2999,03	2942,89	0,7318	0,6767
95	2945,29	2955,89	0,7973	0,7922
96	2894,43	2946,74	0,8716	0,8765
97	2893,39	2860,18	0,7746	0,7757
98	2964,44	2924,56	0,5468	0,5500
99	2988,00	3069,75	0,8896	0,8052
100	2880,04	2851,22	0,6152	0,6138

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021.

ANEXO I. Validación de la red neuronal artificial

%VALIDACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL

```
DatosPred_val = net(Entradas_Normval(1:end,:));
```

%Resultados

```
%Flujo másico de destilado en primera columna predicho  
Dl_predv = DatosPred_val(1,:).*(Dl_max-Dl_min)+Dl_min';
```

```
%Fracción molar de THF recuperado en primera columna predicho  
Xthf_Dl_predv = DatosPred_val(2,:).*(Xthf_Dl_max-Xthf_Dl_min)+Xthf_Dl_min';
```

%Resultados predichos

```
Datos_PredVal=[Dl_predv;Xthf_Dl_predv]';
```

%Gráficos

Parámetros de salida

```
salidasv=Datav(5:6,:);  
Datos_RealesVal=salidasv';
```

%Valores reales por DWSIM y valores predichos por la RNA

```
Realval= Datos_RealesVal';  
Prediccionval= Datos_PredVal';
```

%Flujo másico de destilado en primera columna

```
figure;  
plot(Realval(1,:))  
hold on  
plot(Prediccionval(1,:));grid;legend('Real','Predicción')  
xlabel('Cantidad de datos')  
ylabel('Flujo másico de destilado en primera columna (Kg/h)')  
title('Predicción del flujo másico de destilado en primera columna')
```

%Fracción molar de THF recuperado en primera columna

```
figure;  
plot(Realval(2,:))  
hold on  
plot(Prediccionval(2,:));grid;legend('Real','Predicción')  
xlabel('Experimentaciones')  
ylabel('Fracción molar de THF recuperado en primera columna')  
title('Predicción de la fracción molar de THF recuperado en primera columna')
```

ANEXO J. Datos predichos durante la validación de la red neuronal artificial

No	Flujo másico en destilado de la primera columna			Fracción molar de THF recuperado en destilado de la primera columna		
	Real	Predicho	Error (%)	Real	Predicho	Error (%)
1	2119,38	2120,28	0,043	0,9111	0,9107	0,041
2	2408,25	2407,35	0,037	0,8917	0,8924	0,071
3	2987,57	2989,89	0,078	0,8801	0,8807	0,073
4	2863,23	2854,53	0,304	0,5765	0,5756	0,156
5	2765,3	2765,97	0,024	0,6648	0,6655	0,115
6	2189,56	2190,72	0,053	0,8818	0,8826	0,091
7	2967,23	2963,75	0,117	0,8769	0,8777	0,086
8	2909,36	2906,65	0,093	0,8785	0,8780	0,052
9	2832,18	2837,18	0,177	0,8194	0,8200	0,064
10	2976,71	2987,00	0,346	0,8923	0,8950	0,297

Realizado por: **Taipe**, Jennifer, 2021.

ANEXO K. Gráficos Anova para validación de la red neuronal artificial

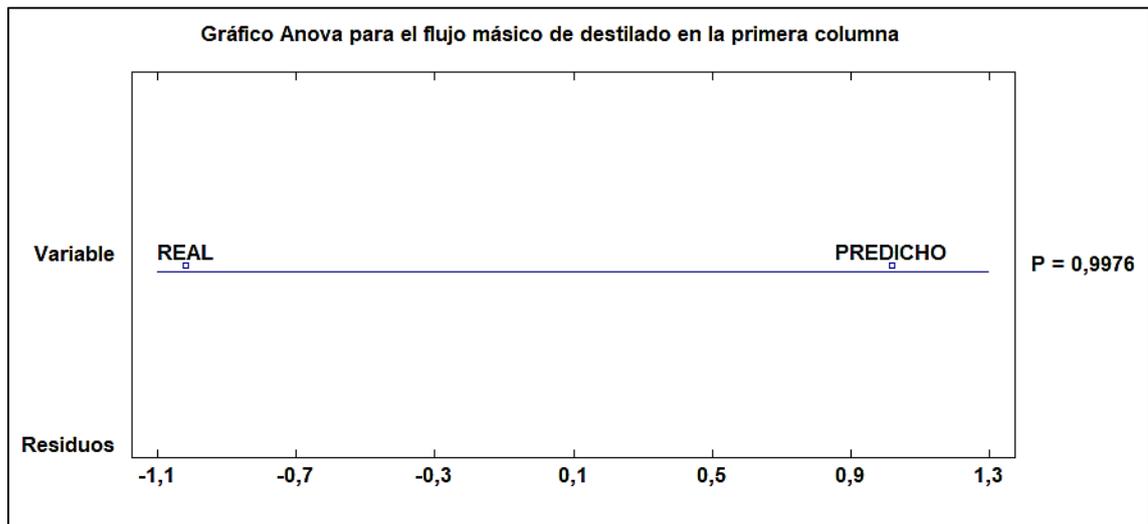


Gráfico 1. Gráfico Anova del flujo másico de destilado en columna de recuperación de THF.

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021

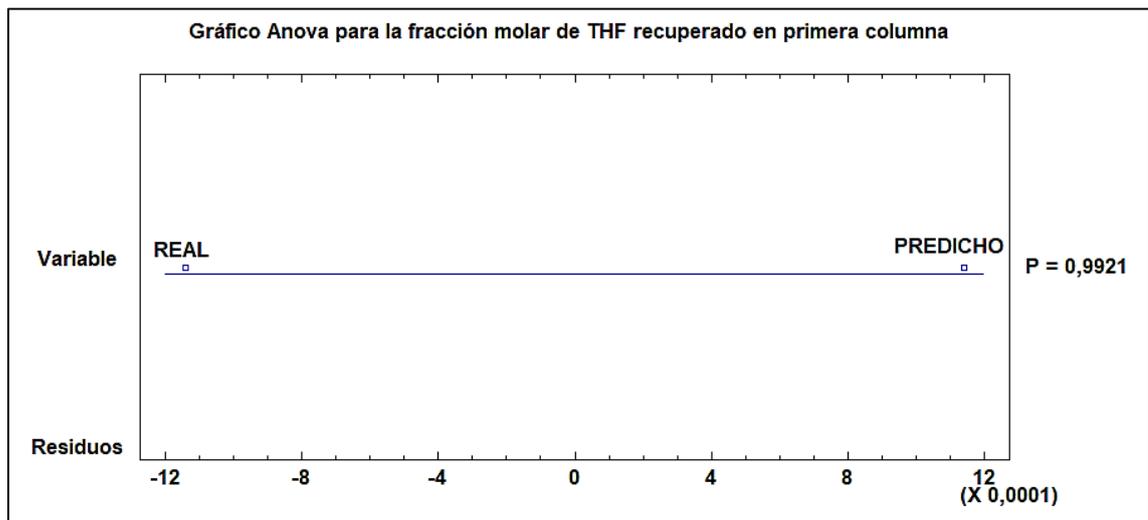


Gráfico 2. Gráfico Anova de la fracción molar de THF recuperado en la primera columna.

Realizado por: Taipe, Jennifer, 2021