



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA PREDICCIÓN DE LA
CONCENTRACIÓN DE ALCOHOL FURFURÍLICO A PARTIR DE
LA SIMULACIÓN DE SU PROCESO INDUSTRIAL**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: JORGE BERNARDO CAPELO LATORRE

DIRECTOR: Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO, Mgs.

Riobamba – Ecuador

2022

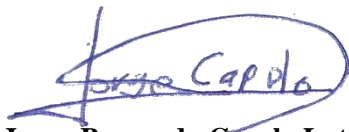
© 2022, **Jorge Bernardo Capelo Latorre**

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

Yo, JORGE BERNARDO CAPELO LATORRE, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular 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 Integración Curricular. El patrimonio intelectual a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 01 de noviembre de 2022






Jorge Bernardo Capelo Latorre

060510008-0

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: el Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Proyecto Técnico, **DESARROLLO DE UNA RNA PARA LA PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE ALCOHOL FURFURÍLICO A PARTIR DE LA SIMULACIÓN DE SU PROCESO INDUSTRIAL**, realizado por el señor: **JORGE BERNARDO CAPELO LATORRE**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Iliana Elizabeth Carrera Flores, Mgs. PRESIDENTA DEL TRIBUNAL	 _____	2022-11-01
Ing. Daniel Antonio Chuquín Vasco, Mgs. DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 _____	2022-11-01
Ing. Juan Pablo Chuquín Vasco, Mgs. MIEMBRO DEL TRIBUNAL	 _____	2022-11-01

DEDICATORIA

El presente Trabajo de Integración Curricular primeramente va dedicado a mi madre, Bernardita Latorre que siempre ha sido un apoyo para mi durante toda mi formación académica como profesional y por ser una fuente de motivación y a mi padre, Jorge Capelo estoy seguro de que estaría orgulloso de todo lo que he logrado. Finalmente, a mí mismo por todo mi esfuerzo, dedicación puesta durante todo este tiempo, también a los maestros que en algún punto de mi formación académica trataron de evitar que siga creciendo y no lo consiguieron.

Jorge

AGRADECIMIENTO

En primer lugar, agradezco a mi madre, por todo el apoyo que me ha otorgado hasta el día de hoy de manera incondicional, quién me ha enseñado que a base de mucho esfuerzo y disciplina no existe nada que no se pueda lograr en la vida, todas las enseñanzas que me da son las que me han formado hasta el día de hoy.

Agradezco al Ing. Daniel Chuquín por brindarme esta oportunidad y por la confianza puesta en mí para desarrollar el presente Trabajo de Integración Curricular, por ser una fuente de motivación durante todo mi proceso de formación académica, por sus enseñanzas, por su apoyo incondicional, sin duda alguna, es una persona a quien admiro y aprecio todo lo que ha hecho por mí.

De igual manera, gracias a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, por la oportunidad de formarme académicamente y como persona, por permitirme conocer personas que me ayudaron a formarme de manera adecuada.

Jorge

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	x
ÍNDICE DE ANEXOS	xii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	xiii
RESUMEN	xiv
ABSTRACT.....	xv
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA	2
1.1. Antecedentes	2
1.2. Planteamiento del problema	3
1.3. Justificación	4
1.4. Objetivos	5
1.4.1. <i>Objetivo General</i>	5
1.4.2. <i>Objetivos Específicos</i>	6

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	7
2.1. Antecedentes de investigación	7
2.1.1. <i>Simulación de procesos en la producción de alcoholes</i>	7
2.1.2. <i>Redes neuronales artificiales en los procesos químicos</i>	10
2.2. Referencias Teóricas	13
2.2.1. <i>Alcohol furfurílico</i>	13
2.2.2. <i>Azeótropo</i>	14
2.2.3. <i>Catálisis heterogénea</i>	14
2.2.4. <i>Destilación</i>	14
2.2.5. <i>Producción de alcohol furfurílico</i>	15
2.2.5.1. <i>Reacciones y cinéticas</i>	16
2.2.5.2. <i>Destilación en el proceso de producción del FOL</i>	17
2.2.6. <i>DWSIM</i>	18
2.2.6.1. <i>Características</i>	19

2.2.7. <i>ChemSep</i>	20
2.2.8. <i>Red Neuronal Artificial</i>	20
2.2.8.1. <i>Elementos básicos</i>	20
2.2.8.2. <i>Ventajas y desventajas</i>	21
2.2.9. <i>MATLAB</i>	22
2.2.10. <i>NEURAL NETWORK TOOLBOX</i>	22
2.2.11. <i>Análisis de sensibilidad</i>	23

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO	24
3.1. Partes de la metodología	24
3.2. Parámetros de funcionamiento	25
3.2.1. <i>Condiciones de operación</i>	25
3.2.2. <i>Condiciones operativas iniciales en el reactor</i>	26
3.2.3. <i>Condiciones operativas iniciales en la columna de destilación</i>	27
3.3. Simulación en DWSIM	28
3.3.1. <i>Proceso aplicado en DWSIM</i>	28
3.3.2. <i>Crear componente</i>	28
3.3.3. <i>Diseño del flowsheet</i>	29
3.3.3.1. <i>Descripción del flowsheet</i>	30
3.3.4. <i>Configuración de entradas</i>	32
3.3.5. <i>Indicar condiciones de reacción</i>	32
3.3.6. <i>Configurar Operaciones</i>	34
3.3.6.1. <i>Precaentamiento</i>	34
3.3.6.2. <i>Reactor</i>	35
3.3.6.3. <i>Separador Gas-Líquido</i>	36
3.3.6.4. <i>Destilación</i>	36
3.3.6.5. <i>Datos adicionales</i>	39
3.4. Análisis de sensibilidad	39
3.4.1. <i>Procedimiento para el análisis de sensibilidad</i>	39
3.5. Tratamiento de datos	40
3.6. Creación de la RNA en MATLAB	41
3.7. Entrenamiento de la RNA	43
3.8. Validación de los resultados	45
3.9. Análisis estadístico	46

CAPÍTULO IV

4.	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	47
4.1.	Resultados de la simulación en DWSIM	47
4.2.	Validación de resultados de la simulación	49
4.3.	Balance de masa del sistema	50
4.3.1.	<i>Balance de masa en el mezclador</i>	50
4.3.2.	<i>Balance de masa en la columna de destilación</i>	52
4.3.3.	<i>Balance de masa en el reactor</i>	54
4.4.	Resultados del análisis de sensibilidad	55
4.4.1.	<i>Resultados del análisis de sensibilidad en el Reactor</i>	55
4.4.1.1.	<i>Resultados análisis A_1</i>	56
4.4.1.2.	<i>Resultados análisis A_2</i>	57
4.4.1.3.	<i>Resultados análisis A_3</i>	57
4.4.2.	<i>Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de destilación</i>	58
4.4.2.1.	<i>Resultados del análisis A_4</i>	59
4.4.2.2.	<i>Resultados del análisis A_5</i>	59
4.4.2.3.	<i>Resultados del análisis A_6</i>	60
4.5.	Resultados del entrenamiento de la RNA	61
4.6.	Reporte completo de resultados de la RNA	64
4.6.1.	<i>Desempeño de la RNA</i>	65
4.7.	Resultados de la predicción de valores reales de la RNA	66
4.7.1.	<i>Análisis de los datos predichos por la RNA</i>	67
4.7.1.1.	<i>Datos del entrenamiento</i>	67
4.7.1.2.	<i>Datos de la validación externa</i>	69
4.8.	Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion 19	72
	CONCLUSIONES	73
	RECOMENDACIONES	75
	BIBLIOGRAFÍA	
	ANEXOS	

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Puntos de ebullición de componentes puros y azeótropos a 1 atm	17
Tabla 2-2: Principales características de DWSIM	19
Tabla 3-2: Ventajas y desventajas de RNA	21
Tabla 1-3: Datos iniciales para la simulación	25
Tabla 2-3: Parámetros operativos del reactor	26
Tabla 3-3: Parámetros de operación de la columna de destilación	27
Tabla 4-3: Parámetros precalentamiento en DWSIM	35
Tabla 5-3: Parámetros separación en DWSIM	36
Tabla 6-3: Parámetros binarios paquete termodinámico NRTL	36
Tabla 7-3: Detalles suplementarios para la simulación	39
Tabla 8-3: Parámetros para el análisis de sensibilidad	40
Tabla 9-3: Variables escogidas de entradas de la RNA	41
Tabla 10-3: Variables de salida del entrenamiento de la RNA	41
Tabla 1-4: Resultados de las corrientes obtenidas en DWSIM	49
Tabla 2-4: Resultados del reactor obtenidos en DWSIM	49
Tabla 3-4: Validación de la simulación en DWSIM	50
Tabla 4-4: Reconocimiento de las variables del análisis de sensibilidad	55
Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad en el Reactor	56
Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad en la Columna de Destilación	58
Tabla 7-4: Resultados del entrenamiento de la RNA	61
Tabla 8-4: MSE en cada etapa de ajuste de la RNA	64
Tabla 9-4: ANOVA	72

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1-2: Estructura química del FOL	13
Ilustración 2-2: Diagrama esquemático de una columna de destilación.....	15
Ilustración 3-2: FAL y sus posibles reacciones de hidrogenación	16
Ilustración 4-2: Interfaz del simulador.....	19
Ilustración 5-2: Ejemplo de RNA	20
Ilustración 1-3: Metodología para crear una RNA.....	24
Ilustración 2-3: Diagrama de flujo del proceso.....	26
Ilustración 3-3: Proceso de simulación aplicado.....	28
Ilustración 4-3: Componente creado en DWSIM.....	29
Ilustración 5-3: Diagrama de producción de FOL en DWSIM	31
Ilustración 6-3: Interfaz de elección de reacciones en DWSIM	32
Ilustración 7-3: Configuración para la hidrogenación del furfural	33
Ilustración 8-3: Configuración para predicción de 2-MF.....	34
Ilustración 9-3: Panel de configuración para el reactor.....	35
Ilustración 10-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep	37
Ilustración 11-3: Disposición operativa de la columna de destilación	37
Ilustración 12-3: Detalles de presiones de funcionamiento.....	38
Ilustración 13-3: Condiciones iniciales de funcionamiento	38
Ilustración 14-3: Proceso para análisis de sensibilidad	39
Ilustración 15-3: Pasos para la creación de la RNA.....	42
Ilustración 16-3: Composición de la matriz de datos en Excel	43
Ilustración 17-3: Porcentaje para el entrenamiento, validación y prueba.....	44
Ilustración 18-3: Selección del algoritmo de entrenamiento	45
Ilustración 1-4: Simulación finalizada del proceso industrial para lo obtención de FOL.....	47
Ilustración 2-4: Resultados obtenidos en DWSIM.....	48
Ilustración 3-4: Diagrama de balance general de masa en el mezclador	50
Ilustración 4-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de destilación	52
Ilustración 5-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de destilación	54
Ilustración 6-4: Resultados del análisis A_1	56
Ilustración 7-4: Resultados del análisis A_2.....	57
Ilustración 8-4: Resultados del análisis A_3.....	58
Ilustración 9-4: Resultados del análisis A_4.....	59
Ilustración 10-4: Resultados del análisis A_5.....	60
Ilustración 11-4: Resultados del análisis A_6.....	60

Ilustración 12-4: Comparación entre las mejores configuraciones para cada algoritmo de entrenamiento	63
Ilustración 13-4: Esquematización de la RNA en MATLAB	64
Ilustración 14-4: Progreso del MSE durante el entrenamiento	65
Ilustración 15-4: Resultados de la capacidad predictiva de la RNA	66
Ilustración 16-4: Fracción molar de FOL real vs predicho en el fondo de la columna.....	67
Ilustración 17-4: Fracción molar de H ₂ O real vs predicho en el destilado de la columna	68
Ilustración 18-4: Porcentaje de conversión del FAL real vs predicho en el reactor	69
Ilustración 19-4: Fracción molar de FOL en el fondo de la columna en la validación.....	70
Ilustración 20-4: Fracción molar de H ₂ O en el destilado de la columna en la validación.....	70
Ilustración 21-4: Porcentaje de conversión del FAL en el reactor en la validación	71

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: BASE DE DATOS CREADOS PARA LA RNA

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

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

ANEXO D: VARIABLES EMPLEADAS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

ANEXO E: CÓDIGO EN MATLAB DE VALIDACIÓN DE LA RNA

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

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

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
FOL	Alcohol furfurílico
FAL	Furfural
2-MF	2-metilfurano
RNA	Red Neuronal Artificial
wt	En peso
bp	Punto de ebullición
DC	Columna de destilación
RC	Reactor
P_DC	Presión en la etapa superior de la columna
T_DC	Temperatura en la etapa superior de la columna
C_RC	Carga del catalizador
V_RC	Volumen del reactor
X_FOL	Fracción molar de alcohol furfurílico en el fondo de la columna
X_H2O	Fracción molar de agua en el destilado de la columna
C_FAL	Porcentaje de conversión de furfural en la reacción
LM	Levenberg-Marquardt
BR	Bayesian Regularization
SCG	Scaled Conjugate Gradient
BFGS	Algoritmo cuasi-Newton con Broyden-Fletcher-Goldfrab-Shanno
RNA-LM	Redes neuronales artificiales entrenadas con Levenberg-Marquardt
RNA-BR	Redes neuronales artificiales entrenadas con Bayesian Regularization
RNA-SCG	Redes neuronales artificiales entrenadas con Scaled Conjugate Gradient
MSE	Erros cuadrático medio
R	Regresión
TAC	Coste total anual
nftool	Neuronal Fitting

RESUMEN

El propósito del presente Trabajo de Integración fue predecir la concentración de alcohol furfurílico mediante una Red Neuronal Artificial (RNA), para esto se simuló su proceso industrial en el software libre DWSIM, el mismo se usó para un análisis de sensibilidad de las variables de diseño del proceso. Las variables que afectaron a la concentración final de alcohol furfurílico se usaron como entradas para la RNA. La base de datos consta de 200 datos con cuatro entradas: presión y temperatura en la etapa superior en la columna de destilación, carga del catalizador y volumen del reactor, y sus correspondientes tres salidas: fracción molar del alcohol furfurílico en el fondo de la columna, fracción molar de H₂O y el porcentaje de conversión de furfural en el reactor. Los algoritmos que se aplicaron en el entrenamiento de la red fueron tres: Levenberg Marquardt, Bayesian Regularization y Scaled Conjugate Gradient. Los tres algoritmos se compararon y el que obtuvo un mejor rendimiento fue el algoritmo Levenberg Marquardt. La red se desarrolló en MATLAB con 10 neuronas ocultas en su arquitectura y se entrenó con el algoritmo Levenberg Marquardt. Se consiguió un error cuadrático medio (MSE) de 0.0007854 y un coeficiente de regresión de 0.9905. La red se validó mediante un análisis estadístico comparativo obteniéndose un 95 % de confiabilidad. En la simulación se logró una concentración molar final de alcohol furfurílico de 0.9903. Por lo tanto, se demostró la viabilidad del proceso industrial para la obtención de alcohol furfurílico. Se recomienda aplicar un estudio detallado en los productos secundarios que se generan en el proceso de producción del alcohol furfurílico y ampliar el rango de aprendizaje de la red con diferentes entradas y salidas para la generación de una nueva RNA entrenada con otro algoritmo para que se convierta en una herramienta didáctica.

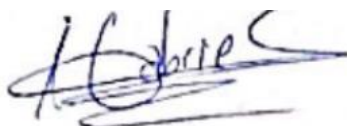
Palabras clave: <ALCOHOL FURFURÍLICO>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <RED NEURONAL ARTIFICIAL (RNA)>, <ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <LEVENBERG MARQUARDT>, <BAYESIAN REGULARIZATION>, <SCALED CONJUGATE GRADIENT>.



ABSTRACT

The purpose of this integration work was to predict the concentration of furfuryl alcohol by means of an Artificial Neural Network (ANN), for this purpose, an industrial process was simulated in the free software DWSIM, which was used for a sensitivity analysis of the design variables of the process. The variables that affected the final concentration of furfuryl alcohol were used as inputs for the ANN. The database consists of 200 data with four inputs: pressure and temperature at the upper stage in the distillation column, catalyst loading and reactor volume, and their corresponding three outputs: mole fraction of furfuryl alcohol at the bottom of the column, mole fraction of H₂O and the percentage conversion of furfural in the reactor. The algorithms applied in the training of the network were three: Levenberg Marquardt, Bayesian Regularization and Scaled Conjugate Gradient. The three algorithms were compared and the one with the best performance was the Levenberg Marquardt algorithm. The network was developed in MATLAB with 10 hidden neurons in its architecture and trained with the Levenberg Marquardt algorithm. A mean squared error (MSE) of 0.0007854 and a regression coefficient of 0.9905 were achieved. The network was validated by means of a comparative statistical analysis obtaining a 95 % reliability. A final molar concentration of furfuryl alcohol of 0.9903 was achieved in the simulation. Therefore, the feasibility of the industrial process for obtaining furfuryl alcohol was demonstrated. It is recommended to apply a detailed study on the secondary products generated in the furfuryl alcohol production process and to extend the learning range of the network with different inputs and outputs for the generation of a new ANN trained with another algorithm to become a didactic tool.

Key words: <FURFURYL ALCOHOL>, <DWSIM (SOFTWARE)>, <ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK (ANN)>, <SENSITIVITY ANALYSIS>, <MATLAB (SOFTWARE)>, <LEVENBERG MARQUARDT>, <BAYESIAN REGULARIZATION>, <SCALED CONJUGATE GRADIENT>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso Espinosa, Mgs.

CI: 110369613-2

INTRODUCCIÓN

En el presente Trabajo de Integración Curricular se procura desarrollar una Red Neuronal Artificial (RNA), que sea capaz de predecir la concentración final de alcohol furfúrico (FOL). El FOL se lo puede obtener de manera sostenible a partir de la hidrogenación catalítica del furfural (FAL) en fase gaseosa. El FAL se produce a partir de residuos agrícolas, por lo que sus derivados son considerados como productos respetuosos con el medio ambiente. Mediante la simulación de su proceso industrial en DWSIM, identificando las variables críticas del proceso con el fin de realizar un análisis de sensibilidad de todo el proceso con el enfoque principal sobre las variables de diseño, teniendo presente las variables que más influencia tenga en la concentración de FOL se les colocara como entradas para la RNA.

La simulación de procesos químicos es un campo de la ingeniería que en la actualidad está en auge debido a los beneficios que posee entre estos el más destacado es la modificación de variables críticas de los procesos con el propósito de analizar el impacto de dicha variable en todo el proceso lo que permite realizar un estudio completo del proceso a detalle y mejorándolo de manera considerable.

Esto asegura que la simulación de procesos es una herramienta primordial en la investigación, diseño y optimización de procesos. Incluso en la actualidad en este campo se lo combina con la aplicación de inteligencias artificiales en este trabajo se usará una de estas como son las Redes Neuronales Artificiales.

El simulador empleado cuenta con la principal ventaja de ser de código libre es decir que se encuentra disponible de manera gratuita, también cuenta con un espacio de trabajo intuitivo lo que facilita su aprendizaje y cuenta con herramientas como su propio estudio de creación de componentes lo que lo convierte en un simulador competitivo en el mercado.

El uso de Redes Neuronales Artificiales como una herramienta predictiva es un tema que cuenta con varios estudios con diferentes procesos industriales la ventaja de usarlo se ver radicada al momento de tener la capacidad de poder usar cualquier parámetro de entrada y obteniendo resultados con un alto porcentaje de confiabilidad, lo que convierte a esta tecnología en una herramienta predictiva potente.

Para el presente Traba de Integración Curricular se empleará Neuronal Fitting (nftool) disponible en MATLAB, esta herramienta permite elegir los datos, diseñar y entrenar una RNA y valorar su rendimiento mediante pruebas estadísticas como: el error cuadrático medio (MSE) y un análisis de regresión (R). Para poner en evidencia la efectividad de la red desarrollada se realizará una validación externa con otros datos no involucrados en el entrenamiento de igual manera se emplea un análisis estadístico mediante la herramienta ANOVA con el propósito de poner en evidencia la capacidad predictiva de la RNA y demostrando la confiabilidad que posee la misma.

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

1.1. Antecedentes

Debido a la continua demanda mundial y a las preocupaciones relacionadas con los productos químicos, los combustibles y los materiales producidos a partir de la industria petrolera, en la actualidad suministra la mayor parte de estas sustancias consumidas a nivel mundial, y la dependencia económica de las mismas, los recursos renovables alternativos han cobrado impulso en la industria (Millán y Sixta, 2020: p.1).

El interés por la producción de bioquímicos y biocombustibles a partir de la biomasa, principalmente de la biomasa lignocelulósica (Cao Nhien et al., 2019, p.144), es una materia prima renovable, de las alternativas más llamativas y prometedoras para lograr una producción sostenible y tolerante con el medio ambiente (Mishra, Kumar y Shukla, 2020: p.324).

El furfural (FAL) es considerado el compuesto renovable clave para productos que puedan competir con los combustibles y productos químicos de origen fósil (Cao Nhien et al., 2019, p. 144). En particular, el alcohol furfurílico (FOL), en el que se utiliza hasta el 70% de su producción como materia prima para su síntesis (Millán y Sixta, 2020: p.2).

El FOL es un producto químico industrial empleado en aglutinantes para arenas de fundición en la elaboración de núcleos y moldes en la metalurgia. Puede producirse por hidrogenación del FAL en fase gaseosa con un catalizador de cromita de cobre (Tseng et al., 2015, p.44). La tecnología de conversión de FAL en FOL en fase de vapor con un catalizador de Cu fue patentada por primera vez por DU Pont de Nemours in 1927 (Laizer,1937, p.2). El proceso de hidrogenación se puede dar tanto en reactores discontinuos y continuos de lecho fijo se puede obtener tanto en fase líquida y gaseosa, siendo la fase gaseosa la más adaptable a nivel industrial (Mishra, Kumar y Shukla, 2020: p. 328).

En la hidrogenación del FAL se pueden obtener diferentes productos secundarios dependiendo las condiciones en las que se dé la reacción, el coproducto que se obtiene en mayor cantidad es el 2-metilfurano (2-MF), siendo separado del FOL mediante la operación unitaria de la destilación. Actualmente, hay varios modos de obtener el FOL como cambios en el catalizador con el fin de mejorar la selectividad de la reacción, intentado que el proceso sea más amigable con el ambiente porque el uso de cromita de cobre tiene una elevada toxicidad, este catalizador sufre una importante desactivación tanto en las reacciones en fase gaseosa como en fase líquida (Gong et al., 2017, p.2172).

En la búsqueda de la constante mejoría de los procesos industriales, para poder cubrir la demanda actual existente en el mundo, constantes cambios en las condiciones de operación de todos estos

procesos, con la tecnología actual se puede solventar de manera eficaz y con un bajo costo operativo se puede afrontar todos estos problemas se dan tanto a nivel académico, industrial, empresarial o proyectos.

La simulación de procesos es la opción primordial para dar solución y un análisis de manera detallada, rápida y de bajo costo económico.

La simulación se fundamenta en el análisis matemático de un problema real que se pueda predecir con la ayuda de una herramienta tecnológica. Existen software tanto de libre acceso como de paga, con diferentes características propias de cada uno, en la actualidad les convierte en un instrumento confiable y fácil de usar, colocándolo como un medio para evaluar, controlar y optimizar procesos industriales.

Se debe tener en cuenta que, la simulación de procesos es la representación de un proceso con la ayuda de un modelo matemático, que inmediatamente se resuelve para conseguir información sobre el rendimiento del proceso químico, con el uso de ayudas informáticas para realizar cálculos de equilibrio térmico y de masa en estado estacionario, de dimensionamiento y de costes para un proceso químico (Foo y Elyas, 2017: p.3).

1.2. Planteamiento del problema

En la actualidad el FOL posee diversas aplicaciones a nivel industrial, es un producto químico manejado principalmente en aglutinantes para fundición en la producción de metalurgia, puede producirse por la hidrogenación del furfural que se halla en fase gaseosa lo ideal de este alcohol es que se puede producir de manera sostenible a partir de residuos agrícolas (Tseng et al., 2015, p.44). Al poder producir un alto nivel de concentración del producto mediante la hidrogenación del furfural en un reactor de lecho empacado, va a presentar una alta selectividad y conversión, en las condiciones convenientes, tanto de temperatura como de presión. Uno de los problemas que se presentan al momento de obtener el alcohol es la presencia de varios productos secundarios, estos productos suelen disminuir la pureza obtenida al final (Rojas et al., 2007, p.654). A pesar de esto los productos secundarios que se consiguen en la producción del FOL pueden ser usados en varias tecnologías posteriores luego de ser tratados de un modo beneficioso para a continuación utilizarlos en la obtención de otros productos.

Según Tseng et al., (2015, p.44), el alcohol que se produce es separado del furfural sin reaccionar y de los subproductos agua y 2-metilfurano en una sola columna de destilación a baja presión. El autor menciona que para poder mantener al mínimo la producción de estos subproductos se tiene que considerar el uso de controladores para poder mantener la temperatura del reactor, también nos recuerda que el uso de estos controladores nos permite mantener la temperatura en un solo punto de la columna de destilación es lo idóneo para asegurar la pureza del producto.

Varios autores nos mencionan la influencia que tiene el catalizador sobre la producción del FOL. Para el estudio de este trabajo se va a considerar el catalizador más mencionado en literatura, la cromita de cobre, empleado en la fase gaseosa en el reactor, se ve disuelto en el reactor presentando la gran ventaja del aumento del área disponible para la transferencia de calor en el reactor.

Al tener en cuenta las condiciones al momento que se obtiene el FOL, con la idea de poder caracterizar la reacción que se produce, lo ideal es aplicar un método en el cual todas las variables a estudiar sean modificadas desde un punto que se pueda tomar como base, para poder asimilar el efecto de cada una de ellas por separado. De esta manera se va a poder encontrar las condiciones óptimas para cada una de las variables presentes en el proceso (Sánchez, 2018, p.13).

Para este Trabajo de Integración Curricular se propone la simulación y validación del proceso para la obtención del alcohol furfúrico a partir de la hidrogenación del furfural, alcanzando una alta concentración en los productos obtenidos y mejorar la eficiencia de este proceso, para la simulación se utilizará el software libre multiplataforma para procesos químicos DWSIM, los resultados logrados en la simulación serán comparados con un artículo de alto impacto para validarlos al obtener resultados cercanos a los que se muestran en simulaciones hechas con otros programas usados a nivel profesional.

A continuación, se creará una base de datos y se extraerá de la simulación realizada con anterioridad para la generación de una Red Neuronal Artificial (RNA) con la asistencia del sistema de cómputo numérico MATLAB, esta será capaz de estimar los valores que se obtengan de los compuestos en interés, como en este caso se trata un enfoque directo en el alcohol furfúrico, de esta forma se va a generar un análisis de modo detallado para poder optimizar el proceso, y así lograr un descenso de costos al momento de crear una planta piloto con las condiciones que se presentan, simultáneamente se podrá reducir gastos energéticos innecesarios.

1.3. Justificación

Al momento de realizar todo el proceso de la obtención del alcohol furfúrico se presentan varios productos secundarios debido a la hidrogenación del furfural que es la principal reacción que se produce para la obtención del FOL, estos productos pueden afectar de manera directa a la concentración del producto final ya que estos se presentan en forma de mezcla de para solventar esto, está la propuesta del uso de una columna de destilación para poder obtener la mayor cantidad de FOL, con una alta concentración, las condiciones en las que se ponen en funcionamiento todos los equipos se tienen que buscar las que produzcan los mejores resultados.

En la actualidad es de suma importancia el ahorrar recursos energéticos para evitar el consumo innecesario de energía por los costos que pueden llegar a generarse, siempre en todo proceso se tiene que buscar la manera de optimizarlo con el fin de producir la mayor cantidad de producto

sin la necesidad de generar un alto consumo de recursos que puedan causar un impacto directo en el medio ambiente.

Al producirse de manera sostenible, el FOL es un recurso que se puede generar para aplicarlo en diferentes sectores industriales, por esto se tiene que encontrar la manera idónea para obtenerlo con un alto nivel de concentración.

En el presente estudio está radicado en la simulación aplicando el software DWSIM, en este se va a estudiar el comportamiento de todo el sistema de manera detallada, teniendo en cuenta los parámetros y variables críticas que se tiene que controlar en el proceso para que se lleve a cabo de forma óptima. De esta manera se encontrarán resultados que sean los más validos estadísticamente hablando a partir de valores que se encuentren establecidos en bibliografía.

Dado que el software DWSIN es una multiplataforma para proceso químicos, su código es completamente abierto, las personas que se hallen interesadas en el tema cuentan con la oportunidad de poder acceder a él de manera completamente libre para futuros estudios, para poder fortificar los estudios sobre la producción del alcohol furfurílico a nivel industrial, por esto se pretende que toda esta información sea de libre acceso para todas las personas que pretendan usar este trabajo como una guía para desarrollar futuros proyectos.

Una de las grandes ventajas del uso de la simulación de procesos químicos es la facilidad con la que se pueden manipular todas las variables que se lleguen a presentar al momento de realizar cualquier tipo de producción de cualquier producto, en este caso se podrá manipular todas las variables presentes en la producción del alcohol furfurílico.

Al emplear la base de datos obtenida de la simulación se podrá entrenar la red neuronal artificial utilizando el *Toolbox* disponible en MATLAB, esta es una herramienta pedagógica, confiable y rápida para poder predecir las fracciones molares de todos los compuestos que estén involucrados de forma directa, mediante las condiciones de temperatura, presión. De esta manera se puede estudiar la variación de sus condiciones de forma inmediata y simplificada.

Finalmente, el actual proyecto de titulación se encuentra centrado industriales en la línea de modelado y simulación computacional de procesos industriales de la carrera de Ingeniería Química y del Grupo de Investigación en Seguridad Ambiente e Ingeniería de la ESPOCH, "GISAI".

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Desarrollar una RNA para predecir la concentración de alcohol furfurílico con el uso de la simulación de su proceso industrial.

1.4.2. Objetivos Específicos

- Validar la simulación del proceso para obtención de alcohol furfurílico con referencias bibliográficas.
- Identificar las variables de diseño y realizar un análisis de sensibilidad del proceso.
- Diseñar una RNA que permita la predicción de las composiciones molares de los productos finales de la destilación.
- Realizar un análisis estadístico para validar la RNA.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes de investigación

2.1.1. *Simulación de procesos en la producción de alcoholes*

La simulación de procesos químicos en los últimos años ha venido cobrando impacto por su versatilidad y aplicabilidad en la obtención de todo producto químico usando un proceso conocido, conociendo los datos iniciales y condiciones en las que operan todos los equipos involucrados.

Muñoz et al., (2006), evaluaron la separación del alcohol isobutílico y del acetato de isobutilo por destilación extractiva y destilación por presión, la simulación la realizaron mediante el paquete software comercial (Aspen HYSYS) utilizando el modelo termodinámico UNIQUAC con parámetros binarios que fueron obtenidos de manera experimental. Los dos procesos evaluados fueron optimizados de forma independiente entre sí, la separación que fue considerada los llevo a la conclusión que para una planta de 12 000 Tm/año, la destilación por presión-oscilación es más atrayente que la destilación extractiva empleando propionato de n-butilo como arrastre.

Sobre los catalizadores usados en la hidrogenación de FAL, hay varios estudios que se encargaron en encontrar el catalizador que tengan una mejor selectividad y al mismo tiempo den una mayor conversión. Los catalizadores que presenta una mejor propiedad catalítica fueron las muestras de Cu-MgAlO en la hidrogenación FAL, pudo proporcionar la mayor conversión de FAL en un 93.2 % y la selectividad del FOL en un 89.2 % (Xu et al., 2011, p.691).

Tseng et al., (2015), presentaron un diseño y control de un proceso para la producción de FOL, el FAL fue hidrogenado a FOL en un reactor del tipo de lecho empacado en fase gaseosa con una alta selectividad y conversión. El alcohol obtenido fue separado del FAL sin reaccionar y coproductos como agua y 2-MF en una sola columna de destilación a baja presión.

En esta simulación, se basaron en diagramas de flujo conceptuales para el proceso de obtención del FOL (Zeitsch, 2000), a pesar de esto no había estudios detallados de modelización de este proceso. Las simulaciones indicaron que el proceso es capaz de producir FOL con una alta pureza, con una capacidad de producción de 50 kmol/h, sus estudios indicaron que el proceso puede ser controlado y se puede desalojar las perturbaciones manteniendo siempre la pureza deseada del producto. El proceso puede ser usado en la producción de productos químicos valiosos a partir de residuos agrícolas (Tseng et al., 2015, p. 52).

Tseng, Ward y Lee (2016), con el apoyo de su estudio previo se propusieron desarrollar un proceso para producir tanto FOL como 2-MF, de esta manera aprovechando el subproducto obtenido

mediante el diseño y control de un proceso continuo multiproducto con cambio de distribución de productos: fabricación sostenible de alcohol furfúrico y 2-metilfurano. El diseño fue propuesto mediante simulación de procesos con el apoyo del software comercial Aspen Plus y para el proceso de control se modela con Aspen Plus Dynamics.

Este proceso fue diseñado para la producción de un total de 50 kmol/h de producto y un 20% de 2-metilfurano en el caso base, el proceso puede transitar sin problemas entre estados estables en los que la distribución del producto se sitúa entre el 10 % y 30 % de 2-metilfurano. Es decir que los cambios en la tasa de producción y en la pureza del FOL también pueden ser acomodados por una estructura de control (Tseng, Ward y Lee: 2016, p.13).

Las operaciones presentes en las conocidas biorrefinerías, para el uso de la biomasa lignocelulósica, como son la fermentación, la separación, la adsorción y la destilación, se investiga la optimización de estos con el fin de generar ahorros significativos en uso de energía y costos económicos. El diseño e integración se basó en modelos matemáticos que retroceden y extrapolan los datos experimentales para los cálculos de escalado, esta integración de procesos implica retos en la síntesis de productos obtenidos en biorrefinería entre estos se encuentra el FOL (Pyrgakis et al., 2016, p.179).

Wang et al., (2016), plantearon el diseño y el análisis de control de la columna de pared divisoria extractiva y la destilación por presión para separar el sistema acetonitrilo/n-propanol empleando Aspen Plus y Aspen Dynamics, su diseño en estado estacionario de los dos procesos se optimizan minimizando el coste total anual (TAC) mediante un procedimiento de optimización iterativo secuencial. Con los resultados obtenidos se ostenta un control dinámico de los dos procesos y la comparación entre ellos. Los resultados indicaron que la destilación por presión y oscilación muestran ventajas en cuanto al ahorro en costos económicos y permanencia del control en comparación con el proceso de columna de pared divisoria extractiva.

La búsqueda continua de nuevos procesos para el uso industrial que consuman la mejor cantidad de energía posible y económica sean accesibles, un método novedoso para separar mezclas azeotrópicas (n-butanol-isobutanol-agua) con una destilación extractiva de doble efecto con 1,4-butanediol como disolvente, el proceso y configuraciones de la columna se investigan en el software Aspen Plus. A pesar, de que el nuevo proceso es un poco complicado, lo que lleva a dificultades de funcionamiento. Con la creciente escasez de energía, la nueva destilación extractiva de doble efecto posee una gran viabilidad económica en comparación con el proceso de destilación azeotrópica (Gai et al., 2018, p.2045).

Cao Nhien et al., (2019) plantean un proceso integral de reacción-destilación en la producción de FOL a partir de bio-furfural crudo. Consecutivamente, sugieren un novedoso proceso híbrido de extracción-destilación para optimizar el método convencional desarrollado con anterioridad. Teniendo en consideración la integración del calor tanto para los procesos convencionales como para los híbridos, todos los procesos se simularon con Aspen Plus V.9.

Este modelo nos propone una producción de FOL a gran escala a partir de biomasa, primero se con el diseño y optimización del proceso convencional reacción-destilación conteniendo la hidrogenación de FAL y la purificación de FOL. Posteriormente, se diseñó el novedoso proceso de reacción-híbrido-extracción-destilación para mejorarlo mediante su simulación y su posterior análisis comprando con los resultados del método convencional. Este proceso híbrido es altamente eficiente e integrado en comparación con el proceso tradicional, de esta manera demostraron una solución atractiva para su implementación en el proceso industrial de FOL, la configuración híbrida espera una mayor explotación en otras biorrefinerías (Cao Nhien et al., 2019, p.151).

Sarath Yadav et al., (2020), realizaron un estudio del compartimiento de componentes binarios sometidos al proceso de destilación mediante la simulación con Aspen Plus para el estado estacionario y Aspen Dynamics en estado dinámico, usaron el alcohol isopropílico y el agua, los resultados de la simulación en estado estacionario y dinámico describieron el comportamiento del sistema y permite la comprensión de cómo reacciona el sistema en el entorno virtual, para efectuar el comportamiento del sistema en tiempo real.

Respecto al reactor aplicado en la síntesis del FOL, Audemar et al., (2020) realizaron una comparativa entre los reactores Batch y de flujo continuo, mediante el estudio catalítico en cada uno de los reactores, en el estudio se logró demostrar que el uso de un reactor de flujo continuo puede ser la solución cuando un catalizador llegue a sufrir algún tipo de envenenamiento durante los procesos en reactores del tipo Batch. La optimización de las condiciones de reacción, que no son las mismas en los dos procesos, debe realizarse para alcanzar una conversión de FAL y una selectividad a FOL similares.

En los recientes años los bioproductos obtenidos de biomasa han cobrado un gran interés. En los desarrollos industriales de la producción de nuevos bioproductos es necesario la estimación de su potencial mediante un prediseño de las conocidas biorrefinerías. Se propone un método que evalúa la relevancia de esta producción industrializada. Con el uso de una herramienta con una metodología multiescalar de apoyo a la toma de decisiones en una biorrefinería óptima a partir de una estructura compleja mediante la simulación de procesos industriales, evaluaciones económicas y medioambientales. Una biorrefinería requiere de grandes cantidades de energía para funcionar, sobre todo en las etapas de pretratamiento y purificación del proceso mediante destilación debido al enorme caudal de agua. El diseño propuesto de la biorrefinería fue eficiente, rentable y sostenible. Al demostrar las capacidades de la metodología con la producción de acetona, butanol y etanol a partir de biomasa lignocelósica, con el apoyo de la simulación del diseño propuesto (Belletante et al.,2020, p.11).

Lee, You y Chen. (2022), plantearon un diseño energético eficiente en el proceso de purificación del biobutanol a partir de la fermentación de acetona-butanol, el butanol tiene un gran potencial como combustible para el transporte. La fermentación Acetona-Butanol-Etanol (ABE) es el

método actual para la producción del biobutanol, se propusieron un desarrollo de secuencias de separación eficientes para purificar componente individuales de la fermentación, basados en un diseño estudiado con anterioridad y con el uso de modelos termodinámicos actuales, presentaron varias alternativas de diseño novedosas para reducir el consumo de energía en las secuencias de separación, junto a la propuesta de eliminar en primer lugar la acetona y purificar el etanol mediante la integración de la destilación, reduciendo el coste total anual en un 57% y un 52%, también alcanzaron el objetivo de pureza del 99.5% para el butanol, la acetona y el etanol. Sus resultados demostraron que las desviaciones del producto no superan el 0.05% en las perturbaciones de rendimiento y composición de la alimentación. Todo este estudio fue realizado mediante la simulación de cada etapa por separado para luego acoplar cada una y ser modificadas para controlarse sin la relación de reflujo o el trabajo del rehervidor.

La simulación de procesos químicos es una herramienta que nos permite realizar un análisis detallado de cada variable involucrada en el proceso, debido a la versatilidad que tiene se lo puede aplicar en todo tipo de proceso industrial con la ayuda de esta herramienta junto con un análisis de sensibilidad se proponen diferentes maneras de optimizar dichos procesos para tener mejores resultados y al mismo tiempo generar menos gastos energéticos y económicos garantizando la rentabilidad del mismo.

2.1.2. Redes neuronales artificiales en los procesos químicos

Las redes neuronales artificiales (RNA) son un conjunto interconectado de elementos de procesamiento simples, las neuronas, que pueden operar relaciones complejas y no lineales entre los datos de entrada y salida sin poseer conocimiento previo de estas relaciones (Manohar y Divakar, 2005, p.3375). Las RNA se han empleado al modelado de diferentes procesos químicos, bioquímicos, desde el reconocimiento de patrones hasta el modelado detallado de cinéticas de reacciones (Pal et al., 2009,p.755).

Adnani et al., (2011), llevaron a cabo un análisis mediante RNA de la esterificación del ácido palmítico con Xilitol catalizada por la lipasa B. Como parámetros de entrada importantes usaron la temperatura, el tiempo, la cantidad de enzima, la proporción molar de sustrato y el volumen de disolvente estos parámetros fueron usados como entradas de la red entrenada por el algoritmo de Levenberg-Marquart. La configuración más idónea de la red consistía en dos capas ocultas con seis y siete neuronas en la primera y segunda capa respectivamente. Los valores del coeficiente de determinación y el error cuadrático medio entre las respuestas reales y predichas fueron 1 y 1.5025×10^{-24} para el entrenamiento y 0.97239 y 0.03259 para los conjuntos de datos de prueba. Estos resultados indican que se puede predecir y lograr un alto rendimiento de conversión aplicando el enfoque de la red neuronal. Usando las RNA se puede evitar la ejecución de un gran

número de experimentos de prueba y error para lograr tener los mismos resultados, esto puede llevar a la reducción del tiempo, el costo del proceso y optimizar la calidad del producto.

Sharma y Singh, (2012), proporcionaron una revisión profunda sobre el uso de las redes neuronales en el control de procesos químicos mediante una simulación dinámica para comprender las particularidades del proceso, en la obtención del Éter etil tert-amílico mediante la aplicación de una columna de destilación reactiva, este proceso tiene múltiples reacciones mostrando un comportamiento altamente no lineal, esta complicada dinámica hace que el control del proceso sea difícil. Por eso se recurre al uso de una RNA, en el método predictivo, dando un rendimiento de control más suave y preciso comparado con los métodos de control tradicionales. Por lo tanto, inclusive en ausencia de un modelo esencial apropiado, el control predictivo de modelos de redes neuronales se consigue aplicar con un rendimiento de control satisfactorio tanto para el punto de consigna como para los cambios de carga en el caudal de alimentación de metanol.

La gran versatilidad de las aplicaciones de las Redes Neuronales Artificiales les permite ser capaces de predecir con precisión el rendimiento por destilación por membrana por cámara de aire para diferentes condiciones de funcionamiento, se demostró que dichas predicciones de la RNA y los datos experimentales están en concordancia mostrando un coeficiente de correlación de 0.992, para evidenciar de manera detallada se realiza un análisis de la varianza (ANOVA). Según la prueba ANOVA, el modelo RNA es estadísticamente válido y puede emplearse para la predicción del índice de rendimiento (Khayet y Cojocar, 2012: p.179).

Ochoa-Estopier, Jobson y Smith (2013), plantearon una tecnología innovadora basada en Redes Neuronales Artificiales para la optimización de los sistemas de destilación de crudo integrados en el calor. Con el fin de determinar las condiciones de funcionamiento que reduzcan los gastos de manera considerable. Se realizan simulaciones rigurosas utilizando Aspen HYSYS para construir una base de datos utilizada para entrenar el modelo RNA. El resultante muestra ser capaz de representar el comportamiento de la columna de destilación sin la necesidad de realizar cálculos complejos o solicitar presunciones iniciales.

Los disolventes conocidos como líquidos iónicos han adquirido un potencial en la química industrial debido a sus deseables propiedades, por esta razón es importante comprender sus propiedades fisicoquímicas. Aplicando un modelo con RNA, se logra predecir el índice de refracción líquidos iónicos binarios que contiene alcohol (metanol o etanol o 1-propanol). La arquitectura más adecuada de la red neuronal tiene seis nodos en la primera capa oculta y nueve nodos en la segunda capa oculta. Los datos de índice de refracción predichos estaban en concordancia con los datos experimentales, como muestra un error absoluto medio global de 0.00783, con un error porcentual medio de 0.55. Finalmente, la correlación desarrollada puede utilizarse satisfactoriamente para predecir el índice de refracción del sistema de disolventes binarios, líquido iónico y alcohol (Soriano et al., 2016, p.89).

Mulero et al., (2017), modelaron una RNA para el cálculo y predicción de la tensión superficial de los alcoholes. Para el entrenamiento, validación y la prueba del modelo de red se consideró 4316 valores de tensión superficial de 147 alcoholes. El 70% de los datos se utilizaron en entrenamiento de la RNA y el 10% para comprobar la capacidad de predicción del modelo propuesto. Luego de probar varias arquitecturas, la que dio mejores resultados incluye una capa de entrada que usa cuatro variables independientes (temperatura, temperatura del punto crítico, densidad crítica y radio de giro), dos capas ocultas con 21 neuronas cada una, y una capa de salida dando el mejor resultado en las predicciones. La desviación media porcentual absoluta fue del 1.04%, mientras que los modelos fundados en el principio de los estados convenientes dan desviaciones medias superiores al 11.3%. El modelo propuesto se considera como una herramienta muy precisa para reproducir los datos de tensión superficial actualmente disponibles para los alcoholes con el potencial de poder predecirlos.

Las redes neuronales multicapa en la modelización para la estimación de solubilidades Vapor-Líquido de los solutos en sus propios disolventes requeridos para la conversión del gas de síntesis en alcoholes y/o hidrocarburos. El modelo de red neuronal, limitado a una capa oculta y cinco neuronas en la capa oculta, indicó ser eficiente en el modelado de los datos del equilibrio vapor-líquido. Los resultados obtenidos demostraron tener menores desviaciones de los datos experimentales comparados con resultados anteriores expuestos en literatura relevante. El modelo fue capaz de trazar la relación entre los parámetros de interacción binaria, dicha relación se puede aplicar para la predicción de solubilidades gas-líquido desconocidas sin necesidad de ejecutar nuevos experimentos detallados (Eze y Masuku, 2018, p.84).

Shin, Smith y Hwang (2020), desarrollaron un sistema de control predictivo por red neuronal para el caso de estudio usaron una columna de una planta de alta amor. Se desarrollo un modelo matemático de la columna de destilación utilizando Aspen HYSYS, luego se propusieron dos modelos de control y se separaron sus resultados: 1) Control proporcional e integral y diferencial para una entrada y salida y 2) Control predictivo por red neuronal artificial para varias entradas y varias salidas. Mediante, una simulación dinámica se recogieron los resultados para el entrenamiento de la RNA. Se incorporó con un algoritmo de optimización en el sistema de control predictivo de modelos para comprobar su rendimiento, se aplicaron cambios perturbaciones en un punto de la columna, y se comparó la eficiencia de este modelo con el control convencional, como el control PID feedback. Los resultados del análisis indicaron un mejor rendimiento en el método predictivo (menor tiempo de asentamiento y de subida). La metodología usada en este estudio puede ser empleada en varios tipos de sistemas de control en la industria.

Actualmente, la búsqueda constante de nuevas formas de producir productos sostenibles llegando a la implementación de las biorrefinerías teniendo un enfoque del procesamiento sostenible de la biomasa para producir producto de base biológica y energía de manera más económica y eficiente. Con el propósito de optimizar los productos deseados, la implementación de redes neuronales

artificiales es la herramienta más idónea por sus ventajas para el reconocimiento de patrones a la hora de interpretar la influencia de las composiciones, ya que no requieren ningún conocimiento previo de los mecanismos de reacción ni de los fenómenos termodinámicos para ser programadas adecuadamente. Por lo que resulta provechoso para las aplicaciones de control dinámico en tiempo real para la monitorización y regulación rápida de los parámetros. La conversión de la biomasa, las RNA requieren un conjunto de datos de entrenamiento de mayor tamaño para tener en consideración las desviaciones de la materia prima, que pueden afectar de manera directa en las condiciones de funcionamiento y en el rendimiento del producto. Al no contar con tantos de estos datos empíricos puede causar un sobreajuste y dificultad en la convergencia de la RNA a un valor apropiado. Estos datos empíricos se amplían todos los días en relación de los procesos de conversión de la biomasa, pero requieren un desarrollo considerable para operar la intensa variabilidad. No existe un método estandarizado para escoger el número adecuado de neuronas en la capa oculta va a depender de la intuición del operador. La aplicación de RNA en las biorrefinerías se encuentra en fase inicial, por ende, la bibliografía sigue siendo relativamente limitada y centrada en sistemas sencillos. Debido a que la predictibilidad de estos modelos depende de los datos empíricos para tener un entrenamiento eficaz, se requiere el desarrollo de estrategias computacionales más poderosos y bases de datos más amplias para los procesos de conversión específicos de las biorrefinerías para poder mejorar su capacidad de aplicación. A pesar de estas dificultades la modelización matemática será un instrumento decisivo para el progreso de nuevos conceptos de biorrefinería (Pomeroy, Grilc y Likozar: 2022, p.19).

2.2. Referencias Teóricas

2.2.1. Alcohol furfurílico

El alcohol furfurílico (FOL), $C_5H_6O_2$, es un líquido móvil incoloro o amarillo pálido con un olor suave. Forma un azeótropo con el agua a presión atmosférica (80 wt% H_2O , bp 98.5 °C) (Hoydonckx et al.,2012: p.296). Es el derivado más importante del furfural (FAL) (Cao Nhien et al., 2019, p.144).

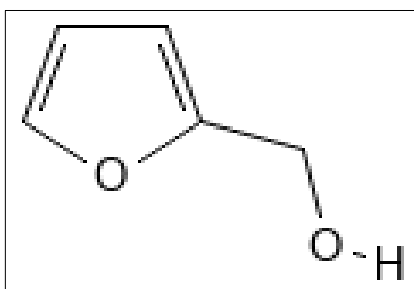


Ilustración 1-2: Estructura química del FOL

Fuente: PubChem,2022.

El FOL posee numerosos usos industriales y de consumo por lo que está considerado como un producto químico de alto volumen de producción (Cao Nhien et al., 2019, p.144). La mayor parte se utiliza como monómero. El FOL es la materia prima para la producción de resinas de furano para su uso como núcleos y moldes de alta calidad para la fundición de metales en la industria de la fundición (Mishra, Kumar y Shukla, 2020: p.328).

2.2.2. Azeótropo

Varias mezclas se comportan como si estuvieran formados de manera individual y con características de punto ebullición definidos. En estas mezclas sus puntos de ebullición suelen ser más bajos o altos que los de cualquier componente que forme parte de la mezcla (Cavendish Marshall Corporation, 2003, p.663).

Este tipo de mezclas ocurre por el equilibrio de fases no ideales obtenidas de la interacción entre las moléculas de diversos compuestos químicos, al momento de llegar a obtener este tipo de mezcla es un indicador de inutilidad de la separación de sus componentes por destilación simple (Luyben L. y Chien, 2010: pp.11-43).

2.2.3. Catálisis heterogénea

Las reacciones que se darán son del tipo catálisis heterogénea, en donde el catalizador se encuentra en fase sólida y los reactivos y productos existen en fase gaseosa o líquida. Lo fundamental en este tipo de reacciones es maximizar la superficie del catalizador mediante el tamaño de las partículas del catalizador debido a que las moléculas solo pueden reaccionar en la superficie del catalizador sólido (Prins, Wang y Li, 2016: p.3). La catálisis heterogénea es uno de los pilares de la industria química y energética (Friend y Xu 2017: p.517).

2.2.4. Destilación

Es una operación unitaria con el objetivo de separar los componentes de mezclas, pueden ser líquidas o vapor (Maroto Valiente y Muñoz Andrés, 2013: p.252). La destilación es el proceso de separación más significativo en la industria química, a pesar de consumir mucha energía (Chia, Duanmu y Sorensen, 2021: p.153).

De manera práctica, la destilación se da por dos métodos principales. El primero se basa en la producción de vapor mediante la ebullición de la mezcla líquida a separar y la condensación de los vapores, sin dejar que exista ningún tipo de recirculamiento. Para este método no hay reflujo. El segundo se basa en el retorno de una porción del condensado a la columna de destilación en

circunstancias tales que este líquido se encuentra en íntimo contacto con los vapores en su camino, ambos métodos se pueden realizar como un proceso continuo (McCabe, Smith y Harriott, 2005: p.663).

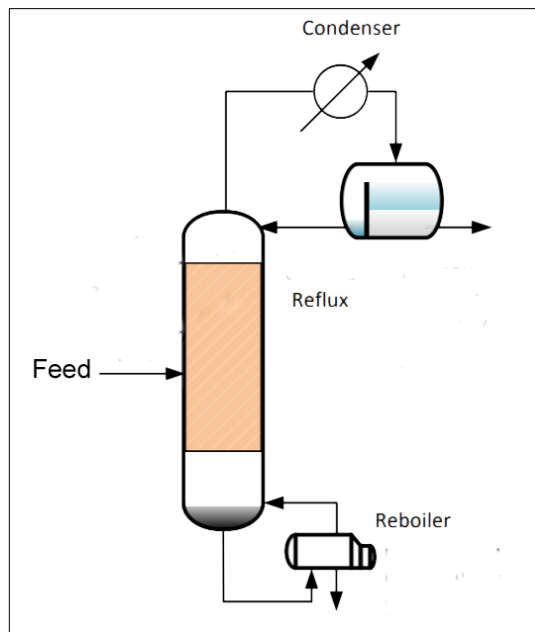


Ilustración 2-2: Diagrama esquemático de una columna de destilación

Fuente:(Lee y Hsiao, 2017: p.329).

2.2.5. Producción de alcohol furfurílico

La producción actual de FOL se basa en la hidrogenación del FAL aplicando un catalizador heterogéneo, cuyo elemento activo es el cobre en fase líquida o en fase vapor (Mishra, Kumar y Shukla, 2020: p.333). La composición de este catalizador es de exagerada importancia para lograr un rendimiento a FOL elevado e impedir la rápida desactivación del catalizador (Sánchez 2018, p. 23). El FAL puede obtenerse de manera sostenible a partir de residuos agrícolas mazorcas de maíz, bagazo, etc. Lo que convierte al FOL y otros derivados del furfural en productos químicos sostenibles y respetuosos con el medio ambiente (Tseng et al., 2015, p.44).

Sin embargo, la reacción puede llevarse a cabo tanto en fase líquida como gaseosa, y en los dos casos son factibles económicamente, la reacción en fase gaseosa es más aplicada industrialmente en vista a que el hidrógeno puede alimentarse a presión atmosférica, los equipos son más factibles, por tanto, más baratos en esta fase (Hoydonckx et al., 2012, p.296).

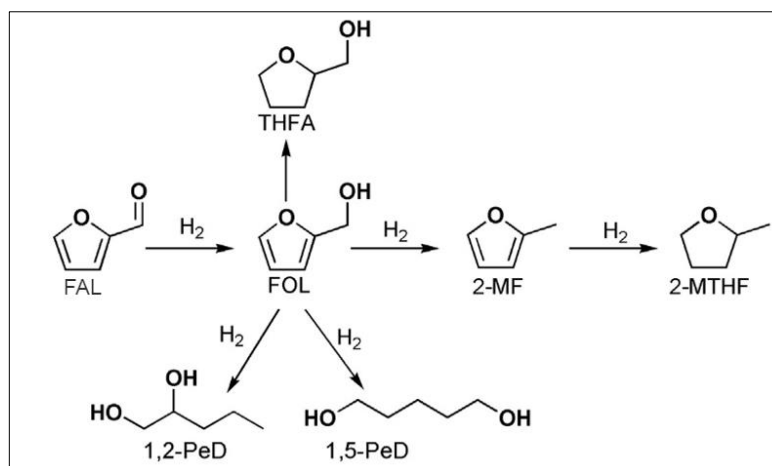


Ilustración 3-2: FAL y sus posibles reacciones de hidrogenación

Fuente:(Mishra, Kumar y Shukla, 2020: p.327).

Durante la producción de alcohol furfurílico se pueden obtener varios productos secundarios en menor concentración, pero pueden llegar a representar impurezas en la concentración final del FOL obtenido en la Ilustración 3-2 se representan los posibles vías en la hidrogenación de FAL, los más destacados entre los productos son FOL y 2-Metilfurano (2-MF) (Sánchez, 2018, p.13).

2.2.5.1. Reacciones y cinéticas

La reacción deseada es la hidrogenación del furfural:



La hidrogenación posterior del alcohol furfurílico produce el subproducto no deseado subproducto: 2-metilfurano:



Aunque la reacción deseada es teóricamente reversible, la constante de equilibrio permite una conversión superior al 99% en condiciones de funcionamiento estándar y, por tanto, muchos de los modelos cinéticos divulgados en la literatura acercan la reacción como irreversible. La cromita de cobre es el catalizador más utilizado en la industria y ofrece un buen rendimiento y una alta selectividad al FOL siendo el 2-metilfurano y el agua el único subproducto significativo (Tseng et al., 2015, p.44).

Para este trabajo se usará la cinética de reacción conseguida por Borts et al., (1986) utilizando un catalizador de cromita de cobre:

$$r_{FOL} = 3.14 \times 10^{15} \exp\left(-\frac{10740}{T}\right) C_{FAL} C_{H_2}^2 \quad (\text{Ec 3-2})$$

Donde las concentraciones C_{FAL} y C_{H_2} están en mol/l y la temperatura está en Kelvin. Borts et al., (1986) no dio a conocer datos ni un modelo cinético de la reacción no deseada (Tseng et al., 2015, p.44). Pero, Zeitsch (2000), provee información sobre la producción de 2-metilfurano a una

conversión del 99% del FAL y a diferentes temperaturas. Esos datos se usaron en una regresión de los parámetros de una expresión de velocidad cinética para la segunda reacción (Tseng et al., 2015, p.44). El resultado obtenido es:

$$r_{2-MF} = 1.41 \times 10^{20} \exp\left(-\frac{19\,000}{T}\right) C_{FOL} C_{H_2} \quad (\text{Ec 4-2})$$

Donde la temperatura y concentración tienen las mismas unidades que la reacción deseada. En este proceso, en el reactor pueden formarse pequeñas cantidades de otros compuestos químicos además del FOL, 2-MF y agua. Entre los posibles subproductos se encuentran alcohol tetrahidrofural, el 1,2- y 1,5- pentanediol y el alcohol n-amílico. Pero, al usar cromita de cobre, como catalizador estos subproductos se producen en cantidades lo suficientemente pequeñas como para no perturbar el proceso (Tseng et al., 2015, p.45).

2.2.5.2. Destilación en el proceso de producción del FOL

En el diseño para la reacción y separación, se considera los puntos de ebullición (bp) y los azeótropos a 1 atm de presión obtenidos de la base de datos de Aspen (Tabla 1-2). Los resultados indican que se pueden formar tres azeótropos heterogéneos entre el H₂O-FAL, el H₂O-5-metilfurfural y el H₂O-FOL, lo que da lugar a una etapa difícil de separación. A pesar, de esto la hidrogenación del FAL es superior al 99%, dando una pequeña cantidad de furfural en la etapa de separación (Cao Nhien et al., 2019, p.145).

Tabla 1-2: Puntos de ebullición de componentes puros y azeótropos a 1 atm

Componentes/Azeótropos	Punto de ebullición (°C)
2-Metilfurano	64.1
Metanol	64.5
2,5-dimetil furano	93.6
Azeótropo binario heterogéneo: Agua - Furfural (65.16 wt. % - 34.84 wt. %)	97.9
Azeótropo binario heterogéneo: Agua - Alcohol Furfurílico (80 wt. % - 60 wt. %)	98.5
Azeótropo binario heterogéneo: Agua -5-Metilfurfural (81.11 wt. % - 18.89 wt. %)	99.4
Agua	100
Ácido acético	118
Furfural	161.3
Alcohol Furfurílico	170
5-metilfurfural	187

Fuente: (Cao Nhien et al., 2019, p.146).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Los azeótropos formados entre el furfural y otros componentes son intrascendentes. La principal dificultad se presenta en la producción de FOL es la separación del azeótropo formado entre el FOL y el agua. Este problema puede ser resuelto mediante dos métodos: utilizar un disolvente para extraer el FOL del agua mediante un extractor (Cao Nhien et al., 2019, p.145), o diseñar una columna de destilación manejando a una presión de vacío para evitar el azeótropo (Boldyrex, Komarov y Krichevtsov, 1973). Para el presente trabajo se empleará una destilación con una presión baja, siguiendo los reportes encontrados en literatura.

El proceso requiere una única columna de destilación para separar el producto FOL del FAL no consumido y de los subproductos agua y 2-metilfurano. Es ventajoso operar la columna a presión reducida porque la volatilidad relativa entre el FAL y el FOL es mayor a menor presión.

La presión de la columna superior se fijó en 0.2 bar para que el agua de refrigeración pudiera ser para enfriar el destilado. La composición del fondo de la columna se fijó en un 99.2 % de alcohol furfural ajustando el caudal de fondo, y la fracción molar de alcohol furfural en el producto superior se fijó en el 1% ajustando la relación de reflujo (Tseng et al., 2015, p. 48).

2.2.6. DWSIM

DWSIM nació en 2004 a partir de macros VBA de Excel que implementaban el PREOS y un Algoritmo Flash básico, desarrollado por Daniel Wagner Oliveira de Medeiros, es un simulador de procesos químicos, de código abierto que efectúa con CAPE–OPEN, un estándar de ingeniería de procesos que promueve la interoperabilidad de las soluciones de simulación, consintiendo unir interfaces de componentes de modelamiento de diferente software entre sí. DWSIM tiene una interfaz gráfica intuitiva y sencilla de usar, posee una lista completa de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas reactivos y herramientas de caracterización de crudos hoy en día, DWSIM funciona en las plataformas más populares y es utilizado por estudiantes, profesores y consultores independientes de todo el mundo (Medeiros , 2022).

2.2.6.1. Características

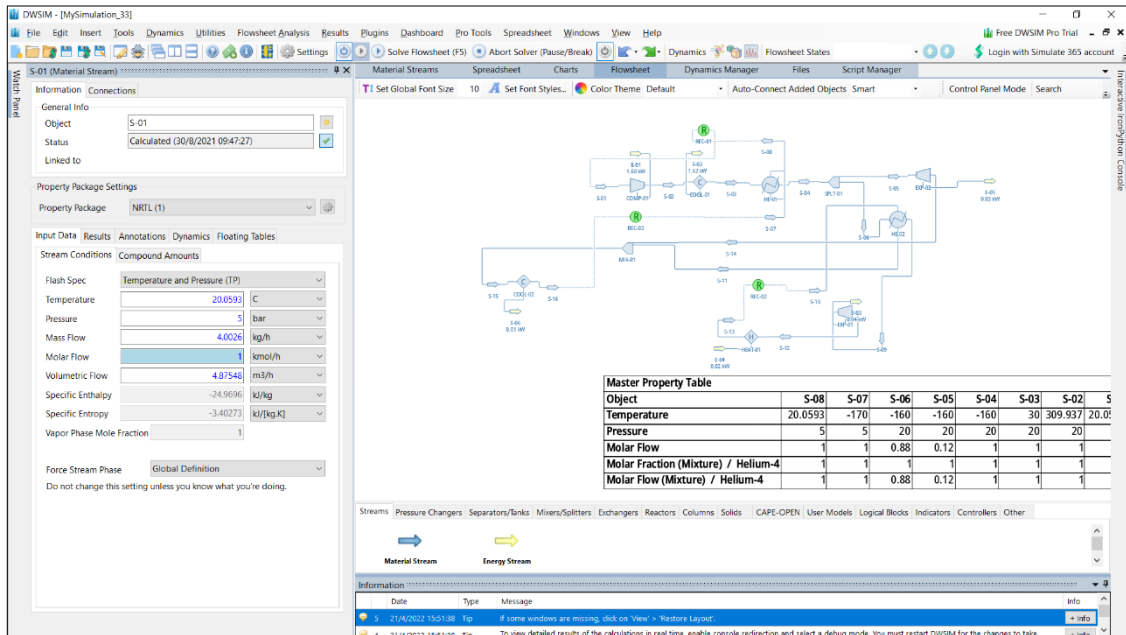


Ilustración 4-2: Interfaz del simulador

Fuente: DWSIM,2022.

Tabla 2-2: Principales características de DWSIM

Característica	Disponibles
Operaciones Unitarias	Mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores, separador de componentes, placa de orificio, columnas de destilación/absorción, separador de sólidos, filtro de torta, hoja de cálculo, Python Script y Diagrama de Flujo de operaciones unitarias.
Modelos termodinámicos	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, IAPWS-IF97 Tablas de Vapor, IAPWS-08 Agua de Mar, Black-Oil, Agua Amarga y Electrolitos Acuosaos.

Fuente: (Medeiros 2022a).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

2.2.7. ChemSep

ChemSep es un programa para modelización para operaciones de destilación, adsorción y extracción. Combina el modelo convencional de columna de equilibrio con un modelo de columna sin equilibrio, tiene una interfaz fácil e intuitiva. ChemSep es el único programa que permite la visualización de los coeficientes de difusión de los componentes múltiples (Kooijman y Taylor, 2020). Se lo puede usar de manera independiente o integrada con un diagrama de flujo, proporcionando un robusto simulador de columnas al no requerir conjeturas iniciales. Permite una amplia variedad de configuraciones y especificación de columnas. Se lo puede ejecutar con todos los programas comerciales de simulación que cumplan con CAPE-OPEN (Kooijman y Taylor, 2020).

2.2.8. Red Neuronal Artificial

Las redes neuronales artificiales (RNA) son, redes computacionales que procuran simular, las redes de células nerviosas (neuronas) del sistema nervioso biológico. Se trata de una simulación tosca célula a célula (Graupe, 2007, p.18). Estos modelos empíricos no lineales representan los datos de entrada-salida cuenta con la capacidad de imitar los modelos de procesos mediante el aprendizaje de patrones mediante un grupo de datos adecuadamente amplio, no hace falta un conocimiento previo de la estructura de este (Bahar et al., 2004, p.6110).

2.2.8.1. Elementos básicos

En la Ilustración 5-2 se muestra una representación de una red neuronal:

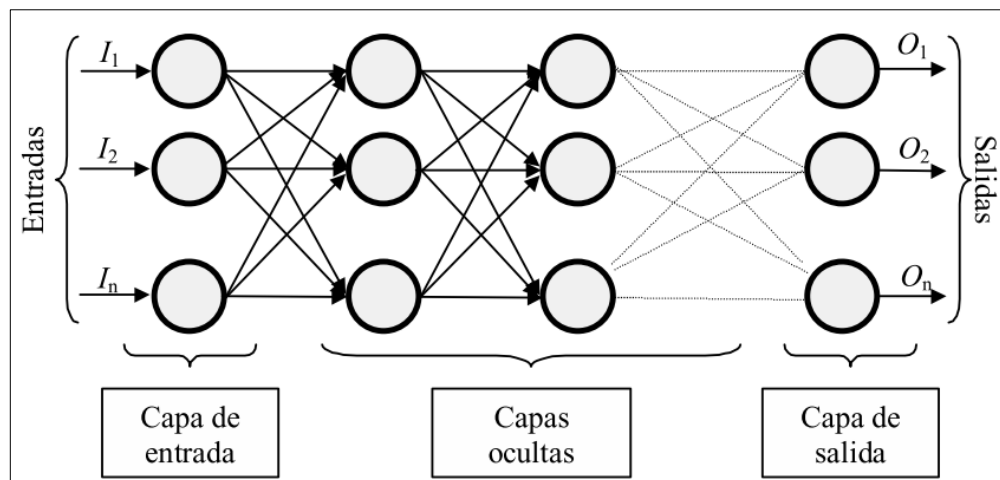


Ilustración 5-2: Ejemplo de RNA

Fuente: (Match, 2001, p.12).

Están formadas por neuronas conectadas entre sí y establecidas en tres capas. Cada una de estas cumple con una función propia al momento modelar la red. La base de datos pasa por la “capa de entrada”, luego van a la “capa oculta” (compuesta por diversas capas) y por ultimo los resultados son proporcionados por la “capa de salida” (Matich, 2001, p.12).

2.2.8.2. Ventajas y desventajas

Al momento de ocupar RNA en procesos debemos tener en cuenta su constitución y todos sus fundamentos, su capacidad de aprender mediante un entrenamiento es una característica que le hace semejante al comportamiento de un cerebro humano, tiene la capacidad de disolver información importante, por eso y más tienen un sin número de ventajas, pero también tienen varias desventajas a considerar como se indican en la Tabla 3-2.

Tabla 3-2: Ventajas y desventajas de RNA

Ventajas	Desventajas
<ul style="list-style-type: none"> • Se necesita menos aprendizaje estadístico • Medición sensible de los problemas de no repetibilidad • Reaprender la capacidad para reforzar su precisión cuando se consiguen nuevos datos. • Disponibilidad de diferentes algoritmos de entrenamiento. • Flexibilidad para aumentar o eliminar entradas y salidas • Posibilidad de funcionar en modo online gracias a la rápida convergencia de la RNA. • Acomodación de múltiples entradas para estimar múltiples salidas. • Facilidad de optimización, lo que lleva a un análisis no lineal asequible y adaptable de grandes datos. • Capacidades robustas de mapeo no lineal que pueden estimar cualquier característica cuantitativa discreta. • Tener numerosas variables interconectadas para abordar estructuras grandes y complicadas. • No es necesario realizar largos cálculos iterativos para resolver las ecuaciones diferenciales. • Posibilidad de unirlos con otros enfoques de optimización. 	<ul style="list-style-type: none"> • Susceptible a la sobre figuración • Convergencia incierta. • Se necesitan grandes datos • Por lo general, no se conoce la estructura óptima de la red (prueba y error). • Dificultad para identificar posibles correlaciones de causa y efecto (caja negra). • La normativa sobre la cantidad y el tipo de formación de datos es limitada • No se conocen bien los criterios de elección del mejor algoritmo de entrenamiento con la rápida convergencia de nuevos patrones. • No hay una norma señalada para determinar el número de neuronas en la capa oculta. • Inestabilidad con neuronas insuficientes, en particular redes de capa oculta con una o dos neuronas. • A pesar de brindar más estabilidad y precisión, se necesita más entrenamiento y validación de datos para la optimización mediante el algoritmo genético

Fuente: (Veza et al., 2022, p.8366).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

2.2.9. MATLAB

MATLAB® (Matrix Laboratory) es un software de aplicación con un sofisticado lenguaje de programación y un ambiente interactivo para ejecutar análisis numéricos, visualización de datos, cálculo de matrices, procesamiento de señales, vídeo y procesamiento de imágenes. Más de un millón de ingenieros y científicos de todo el mundo utilizan MATLAB® para la enseñanza, la investigación y el aprendizaje basado en proyectos.

Las aptitudes de MATLAB® incluyen:

- Cálculo numérico.
- Análisis y visualización de datos.
- Programación y desarrollo de algoritmos.
- Desarrollo e implantación de aplicaciones.

MATLAB® se utiliza para probar y alcanzar conceptos matemáticos de forma interactiva antes de codificarlos en un lenguaje de programación tradicional, es adaptable para el procesamiento de señales e imágenes, comunicaciones, modelado y análisis financiero, entre otros. Se logran completar con Toolbox, los cuales son recopilaciones de funciones para una intención en especial, que desarrollan significativamente las funciones incorporadas en el programa principal (UTRGV, 2020).

2.2.10. NEURAL NETWORK TOOLBOX

El uso de este Toolbox es debido a las funciones para el diseño, inicialización, simulación y entrenamiento de los modelos neuronales, los más conocidos por su uso extendido son: Perceptrón, redes lineales, redes de retropropagación, redes de base radial, aprendizaje asociativo y competitivo, aplicaciones autoorganizativas, aprendizaje de cuantización vectorial, redes del Elman y redes de Hopfield. Dicho Toolbox aprueba el uso de funciones propias realizadas por el usuario puede ser de transferencia e inicialización, reglas de aprendizaje, funciones de entrenamiento y estimación de error para usarlas a continuación con las funciones básicas; contribuyen las facilidades y prestaciones gráficas de MATLAB para el aprender sobre el comportamiento de las redes esta herramienta nos presenta: visualización gráfica de la matriz de pesos y vector de desplazamiento con el uso de los diagramas de Hinton, representación de errores a lo largo del entrenamiento, mapas de superficie de error en función de pesos y vector de desplazamiento, etc (Cabezas y Páez, 2010, p.5).

Esta herramienta cuenta con el soporte de MATLAB 4.2c y SIMULINK. La librería de SIMULINK posee modelos de capas de redes neuronales de cada clase de neurona efectuada en el toolbox de redes neuronales. Por lo tanto, es viable diseñar sistemas SIMULINK para simular redes neuronales hechas usando esta herramienta. Absolutamente, las capas se vinculan según su

arquitectura de la red y se proveen como acceso a la ventana de diálogo de cada capa la matriz de pesos convenientes y el vector de desplazamiento. Aplicando el generador de código C de SIMULINK es puede establecer de modo automática el código de un diseño neuronal (Cabezas y Páez, 2010, p.5).

2.2.11. Análisis de sensibilidad

Los métodos de análisis de sensibilidad se emplean para estudiar la respuesta de un modelo a la variación de los datos de entrada con el fin de identificar el impacto en la salida. Suministra información valiosa sobre el modelo, como la comprensión de lo que está influyendo en los niveles de los parámetros clave y sus interacciones. Los métodos de análisis de sensibilidad intentan identificar los parámetros más influyentes para reducir su incertidumbre, para simplificar el modelo estadístico eliminando las entradas no influyentes o agrupando las entradas correlacionadas. Los métodos de análisis de sensibilidad también pueden utilizarse para comprobar si el modelo físico describe correctamente el fenómeno y para afinar el espacio de espacio de entrada eliminando realizaciones absurdas (Rivalin et al., 2018, p.492).

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Partes de la metodología

Para el presente Trabajo de Integración Curricular luego de tener las bases teóricas requeridas se propone la siguiente metodología con sus partes detalladas en la Ilustración 1-3:

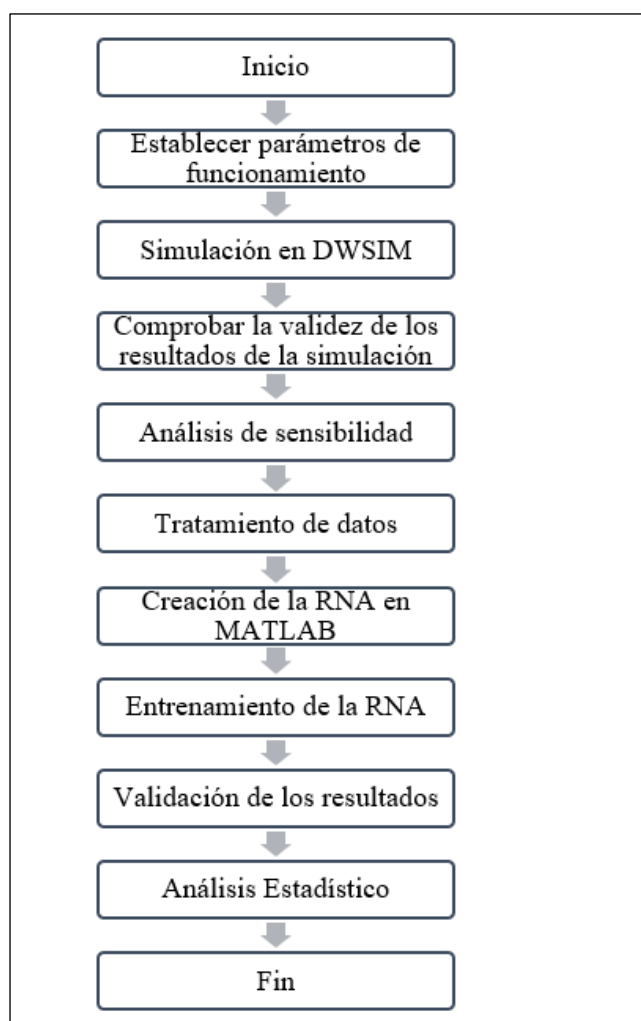


Ilustración 1-3: Metodología para crear una RNA

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Para el presente Trabajo de Integración Curricular se parte de la simulación del proceso industrial en la obtención de FOL, se realizara un análisis de sensibilidad en DWSIM de esta manera se identificara con facilidad las variables que afectan en la producción de FOL, la creación de la RNA capaz de pronosticar la composición final del FOL obtenido, el enfoque se dará será del tipo

cuantitativo al tener una base de datos generada de simulaciones empleadas en DWSIM, esos datos numéricos podrán usarse para el proceso de entrenamiento de la red.

Al momento de ya tener todos los resultados planteados como objetivos se procede a realizar un análisis estadístico para poder validar la confiabilidad de los valores adivinados por la RNA y los obtenidos en la simulación.

3.2. Parámetros de funcionamiento

Los datos iniciales para la simulación se obtuvieron del artículo:

“*Design and control of a process to produce furfuryl alcohol*” llevado a cabo por Yu-Ti Tseng, Wei-Jyun Wang, Jeffrey D. Warda y Hao-Yeh Lee (2015) del Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Taiwán, al no tener información concreta sobre la simulación del proceso fueron los primeros en diseñarlo.

En base a la información proporcionada por Tseng et al., (2015) se divide el proceso en tres partes a tener en cuenta al momento de la simulación en DWSIM: condiciones operativas iniciales, condiciones operativas en el reactor y condiciones operativas en la columna de destilación.

3.2.1. Condiciones de operación

Tabla 1-3: Datos iniciales para la simulación

Parámetros	Entradas			Unidades
	S-01		S-02	
	Valor			
Flujo Molar	51.3		51	kmol/h
Composición	FAL	H ₂ O	H ₂	
	0.98	0.02	1	%mol
Temperatura	50		135	°C
Presión	1.3		1.3	bar

Fuente: (Tseng et al., 2015, p.49).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

A partir de los datos de la Tabla 1-3, se obtendrá FOL mediante la hidrogenación de FAL con la mayor conversión posible.

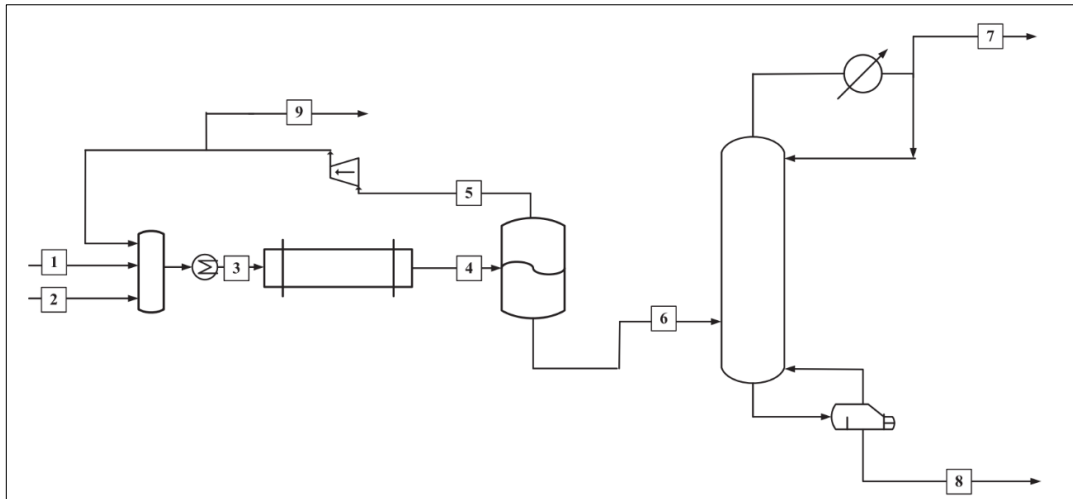


Ilustración 2-3: Diagrama de flujo del proceso

Fuente: (Tseng et al., 2015, p.46).

3.2.2. Condiciones operativas iniciales en el reactor

La alimentación del reactor es hidrógeno que está por poco saturado de vapor de furfural a la temperatura y presión de entrada del reactor (135 °C y 1.1. bar) (Tseng et al., 2015, p.49). Por esa razón es importante realizar un calentamiento previo a la entrada del reactor para llegar a las condiciones ideales de temperatura y presión de esta forma asegurando la conversión del FAL.

Tabla 2-3: Parámetros operativos del reactor

Propiedades del reactor (RC)		
Parámetros	Valor	Unidades
Temperatura de entrada	135	°C
Presión de entrada	1.1	bar
Volumen del reactor	20	m ³
longitud del reactor	4.66	m
Carga del catalizador	1200	kg/m ³
Tamaño de los gránulos del catalizador	0.1	m

Fuente: (Tseng et al., 2015., p.49).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Con estos parámetros de diseño propuesto por Tseng et al., (2015), se logra una disolución con una empaquetadura inerte con el propósito de reducir la velocidad de reacción específica e impidiendo sobrecalentamiento del reactor. Al emplear estas condiciones de diseño para el reactor se podrá asegurar una conversión del 99% del furfural.

3.2.3. Condiciones operativas iniciales en la columna de destilación

El proceso solo necesita una columna de destilación para separar el producto de interés, alcohol furfurílico del furfural no consumido y de los subproductos generados agua y 2-metilfurano (Tseng et al., 2015, p.49). Los parámetros operativos de la columna de destilación se muestran en la Tabla 3-3.

Tabla 3-3: Parámetros de operación de la columna de destilación

Propiedades de la columna de destilación (DC)		
Parámetros	Valor	Unidades
Número de total de etapas	12	-
Etapas de alimentación	9	-
Rehervidor	Líquido Parcial	-
Condensador	Vapor Parcial	-
Presión de la etapa inferior	0.27	bar
Presión de la etapa superior	0.2	bar
Trabajo del rehervidor	375.05	kW
Temperatura del condensado	76.6	°C
Caudal de la corriente de fondo	50	kmol/h

Fuente: (Tseng et al., 2015, p.49).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Los parámetros que se usan en la simulación fueron obtenidos por Tseng et al., (2015), en su diseño para la columna de destilación lo hicieron de manera iterativa solo ajustando el fondo de la columna en 99.2 % de alcohol furfurílico en el caudal y en la etapa superior se fijó en un 1 % de alcohol furfurílico logrando ajustar la relación de reflujo, cabe recalcar que lo ideal es controlar la presión de la columna para evitar la formación de un azeótropo.

3.3. Simulación en DWSIM

3.3.1. Proceso aplicado en DWSIM

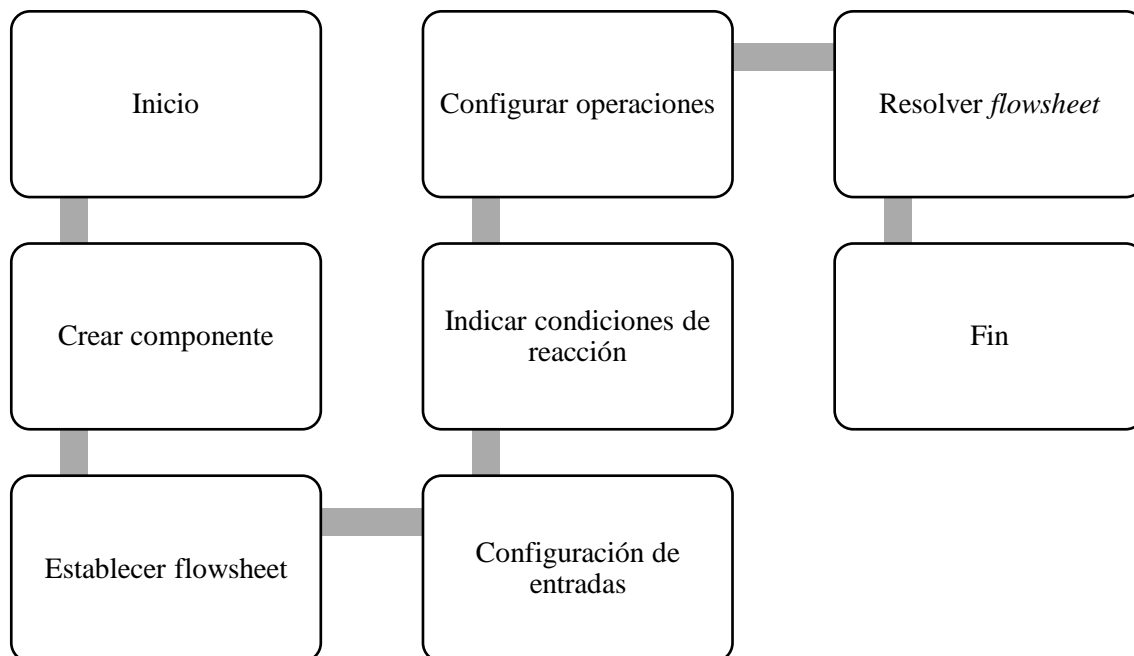


Ilustración 3-3: Proceso de simulación aplicado

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.2. Crear componente

En la actualidad en la base de datos de DWSIM publicada en “*List of available Compounds in DWSIM Database*” (Medeiros,2022b), no se cuenta con el FOL, pero una de las ventajas es el poder crear componentes mediante su “*Compound Creator Study*”, logrando obtener propiedades estimadas por el propio programa, se tuvo que usar esta herramienta para poder continuar con la simulación, en la Ilustración 4-3 se indica el resultado final del componente creado desde DWSIM.

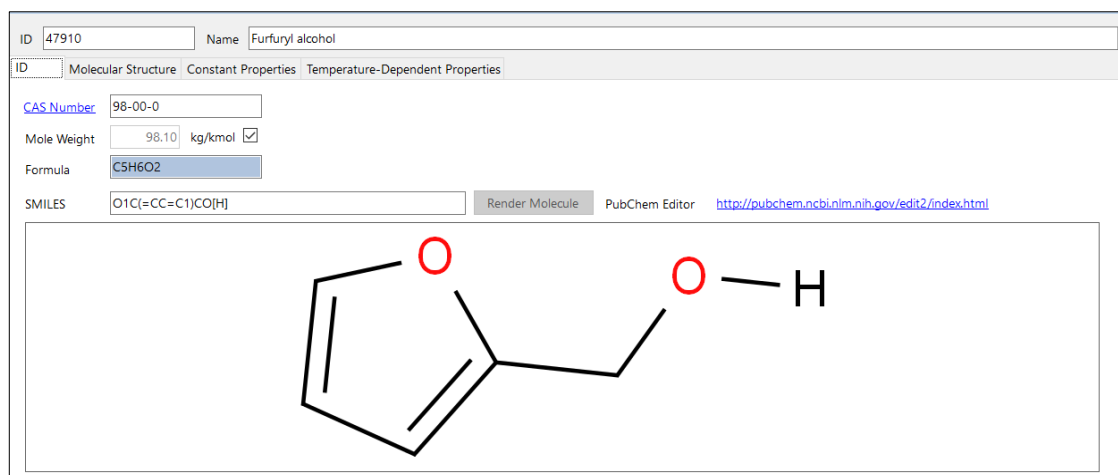


Ilustración 4-3: Componente creado en DWSIM

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Esta herramienta es muy intuitiva se puede importar datos conocidos de compuestos con la ayuda de base de datos como son “KDB/CHERIC Thermo Database”, “Cheméo Database” y “DDB UNIFAC/MODFAC Structure Database” para el caso de este estudio, el FOL no presenta estructura UNIFAC, revisada con la Base de datos de Dortmund (DDBST, 2022). Se colocó los grupos según su estructura que se indica en la Ilustración 1-2, cuando se obtiene la estructura deseada como se muestra en la Ilustración 4-3, las propiedades requeridas serán calculadas de manera automática por el programa, cabe recalcar que al ser un compuesto que no cuenta con grupos UNIFAC en su estructura no se puede usar ningún paquete termodinámico del mismo o sus derivados, al usar un compuesto creado se puede estimar el comportamiento del compuesto de manera precisa teniendo en cuenta el paquete termodinámico que mejor se adapte al compuesto creado.

3.3.3. Diseño del flowsheet

Para el diagrama de flujo empleado en la simulación está basado en la Ilustración 2-3 este proceso de producción para el FOL fue propuesto por Tseng et al., (2015), en su trabajo este proceso fue simulado con ASPEN PLUS, también presentan datos detallados sobre el diseño del reactor y la columna de destilación estos parámetros encontrados en su trabajo serán aplicados para la simulación en DWSIM y adaptados con los paquetes termodinámicos con los que cuenta en la Ilustración 3-3 se muestra el diseño del *flowsheet* propuesto para la producción del FOL en DWSIM.

3.3.3.1. Descripción del flowsheet

Como se muestra en la Ilustración 3-3, primero se mezclan las tres corrientes: hidrogeno gaseoso (S-02), furfural en estado líquido (S-01) y la corriente de reciclaje (S-09 (R)), pasan por el mezclador (Mixer), luego se las precalienta (Heater) previo a la entrada del reactor (RC), seguidamente de obtener los productos de la reacción se dan en una mezcla gas-liquido (S-04), por lo que se emplea un separador bifásico gas-liquido (SEP_GL), en donde se dividen en dos subprocesos: destilación y reciclaje. La corriente liquida (S-06) en donde se encuentra el producto de interés (FOL) en forma de mezcla es sometido a una destilación al vacío (DC), en donde se tienen dos corrientes el destilado (S-07) en estado gaseoso en donde se encuentran los coproductos que no son el enfoque de este estudio (2-MF y H₂O) y la corriente de fondo (S-08) en esta se encuentra el FOL a cierta concentración. Finalmente, la corriente S-05 se la recicla se aumenta su presión con un compresor (Comp) para luego pasar por un separador (Splitter) con una corriente de purga, al final pasa por el bloque lógico de reciclaje (REC) para retornar al mezclador (Mixer).

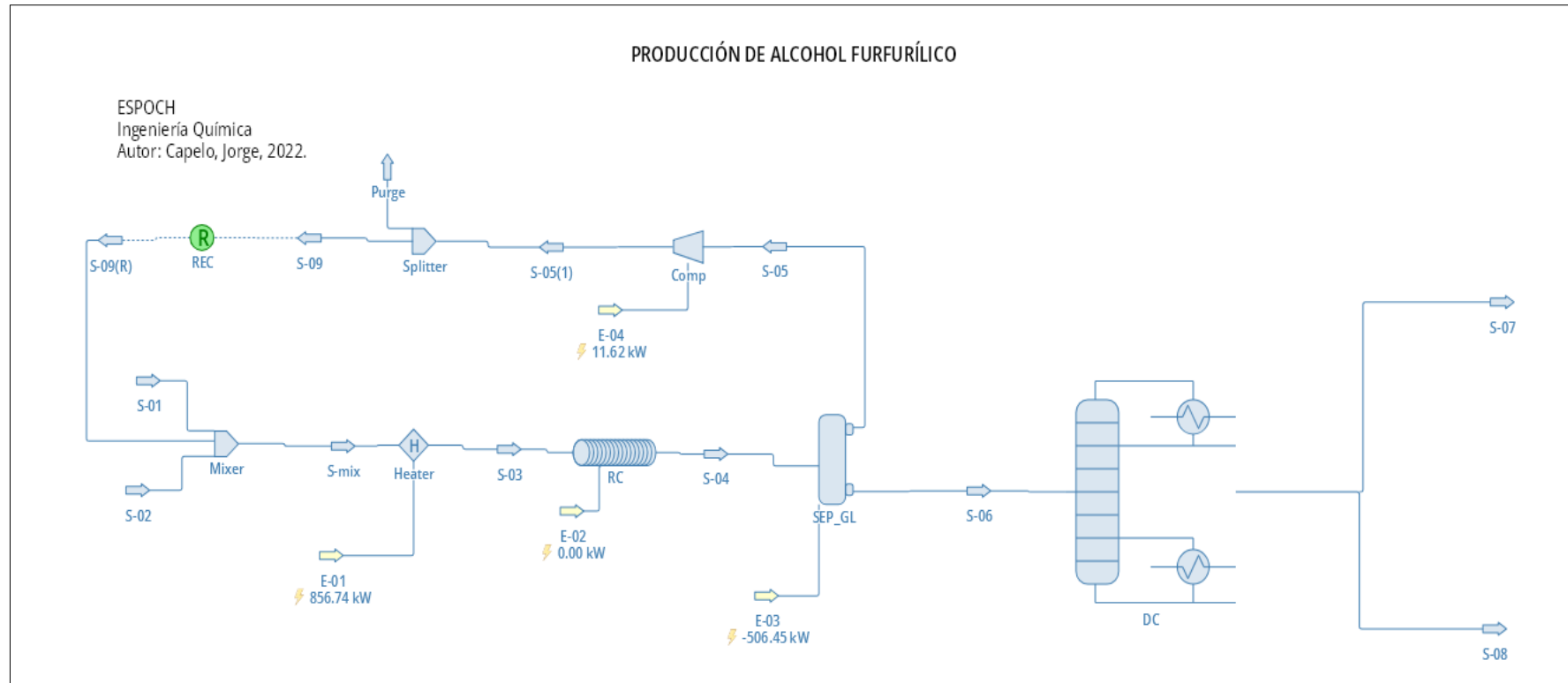


Ilustración 5-3: Diagrama de producción de FOL en DWSIM

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.4. Configuración de entradas

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

3.3.5. Indicar condiciones de reacción

Para poder simular se necesita especificar las reacciones que se darán durante todo el proceso con el propósito de poder predecir los productos que se tendrán en las reacciones, se necesita conocer el tipo de reacción, la reacción y su cinemática. El tipo de reacción que se tendrá serán una catálisis heterogénea, debido a las fases en las que se encuentran se tendrá una mezcla de fases usando un catalizador.

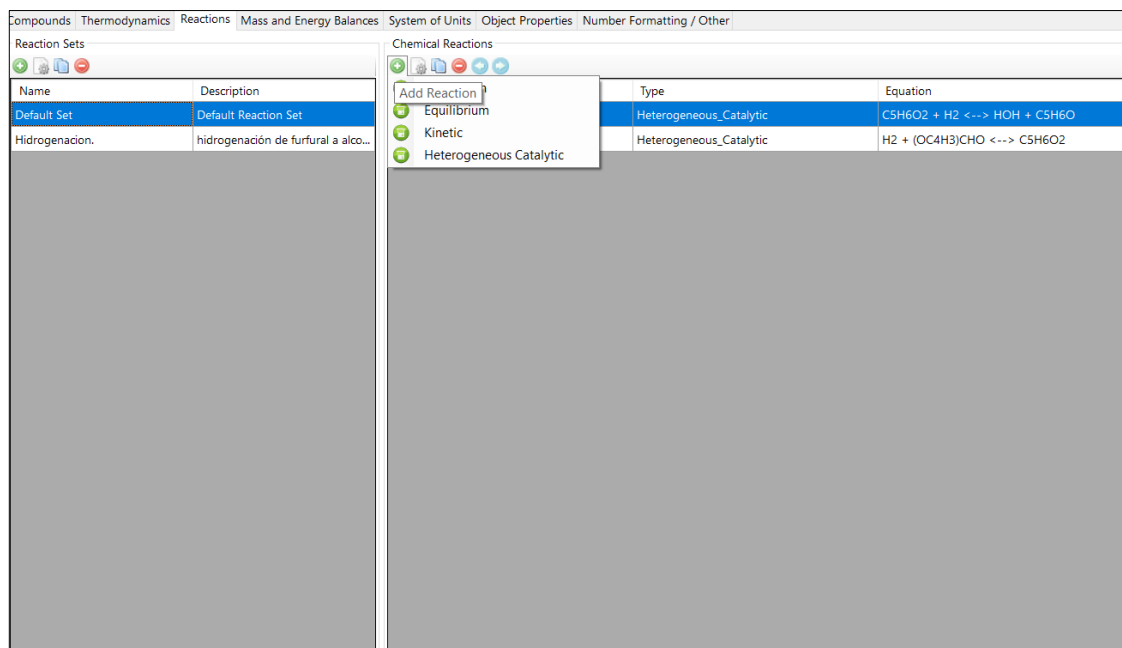


Ilustración 6-3: Interfaz de elección de reacciones en DWSIM

Fuente: DWSIM, 2022.

Al tener claro el tipo de reacción, las reacciones que se dan en el reactor son dos: Hidrogenación Furfural, como se muestra en Ec 1-2 y para la Predicción del 2-MF, como se indica en Ec 2-2. La cinética para Ec 1-2, está basada en Ec 3-2, puesto que fue la que demostró tener una mayor selectividad y un mayor porcentaje de conversión para el furfural. En la Ilustración 7-3 se muestra la interfaz en DWSIM para colocar la correspondiente reacción junto con su cinética de reacción.

Para la segunda reacción se usará la cinética propuesta en Ec 4-2, en la Ilustración 8-3 se indica el panel de configuración para esta reacción junto con sus respectivas condiciones para optimas requeridas para tener la reacción.

Heterogeneous Catalytic Reaction

Identification
 Name: Hidrogenación furfural
 Description:

Components and Stoichiometry

Name	Molar Weight	ΔH_f (kJ/kg)	include	BC	SC
Furfural	96.0841	-1571.54	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	-1
Furfuryl Alcohol	98.1	-2159	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1
Hydrogen	2.01588	0	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-1
Water	18.0153	-13422.7	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0
2-Methylfuran	82.1005	0	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0

Stoichiometry: OK Balance Heat of Reaction (kJ/kmol_BC): -60797.9
 Equation: $(OC_4H_3)CHO + H_2 \leftrightarrow C_5H_6O_2$ Base Component: Furfural

Heterogeneous Kinetic Reaction Parameters
 Basis: Molar Concentrations Phase: Mixture Tmin (K): 0 Tmax (K): 2000
 Kinetics Specification: Simple Advanced Python Script: Help

Reaction Rate (Base Component) = Numerator / Denominator
 Numerator: $3.14E+16 \cdot \exp(-10740/T) \cdot R_2 \cdot R_1^2$
 Denominator: 1

Expression Variables: Temperature (T) in K, reactant amounts (R1, R2, ..., Rn) and product amounts (P1, P2, ..., Pn) in the selected amount unit, reaction rate (r) in the selected velocity unit.

Amount Units: mol/L Rate Units: kmo/(kg.h)

Use '.' as the decimal separator on math expressions. Cancel OK

Ilustración 7-3: Configuración para la hidrogenación del furfural

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Heterogeneous Catalytic Reaction

Identification
 Name: Predicción 2-MF
 Description:

Components and Stoichiometry

Name	Molar Weight	ΔH_f (kJ/kg)	Include	BC	SC
Furfural	96.0841	-1571.54	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0
Furfuryl Alcohol	98.1	-2159	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	-1
Hydrogen	2.01588	0	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-1
Water	18.0153	-13422.7	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1
2-Methylfuran	82.1005	0	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1

Stoichiometry: OK Balance Heat of Reaction (kJ/kmol_BC): -30016.1
 Equation: $C_5H_6O_2 + H_2 \leftrightarrow HOH + C_5H_6O$ Base Component: Furfuryl Alcohol

Heterogeneous Kinetic Reaction Parameters
 Basis: Molar Concentrations Phase: Mixture Tmin (K): 0 Tmax (K): 2000
 Kinetics Specification: Simple Advanced Python Script: Help
 Reaction Rate (Base Component) = Numerator / Denominator
 Numerator: $1.41E+20 \cdot \exp(-19000/T) \cdot R_1 \cdot R_2$
 Denominator: 1
 Expression Variables: Temperature (T) in K, reactant amounts (R1, R2, ..., Rn) and product amounts (P1, P2, ..., Pn) in the selected amount unit, reaction rate (r) in the selected velocity unit.
 Amount Units: mol/L Rate Units: kmol/[kg.h]
 Use '.' as the decimal separator on math expressions. Cancel OK

Ilustración 8-3: Configuración para predicción de 2-MF

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.6. Configurar Operaciones

Luego de tener listo las reacciones y las entradas es necesario especificar las condiciones de trabajo para todos los equipos que intervienen en el proceso de producción de FOL, Precalentamiento (Heater), Reactor (RC), Separador Gas-Líquido (SEP_GL), Compresor (Comp) y Separador (Splitter).

3.3.6.1. Precalentamiento

Para conseguir una mejor conversión del FAL se requiere un calentamiento antes de la entrada del reactor, al conocer las condiciones de diseño para el reactor por estudios previos se conoce la temperatura de salida en S-03 y la caída de presión que se requiere, en la Tabla 4-3 se indica los parámetros empleados en la simulación en DWSIM.

Tabla 4-3: Parámetros precalentamiento en DWSIM

Precalentamiento (Heater)		
Parámetros	Valor	Unidades
Tipo de calculo	Temperatura de salida	-
Caída de presión	0.2	bar
Eficiencia	100	%
Temperatura de salida	135	°C

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.6.2. Reactor

Las condiciones de reacción establecidas en la Ilustración 7-3 e Ilustración 8-3 favorecen la configuración de las condiciones iniciales del Rector (RC), los parámetros aplicados en DWSIM se especifican en la Tabla 2-3, el panel de configuración para el reactor seleccionando se muestra en la Ilustración 9-3.

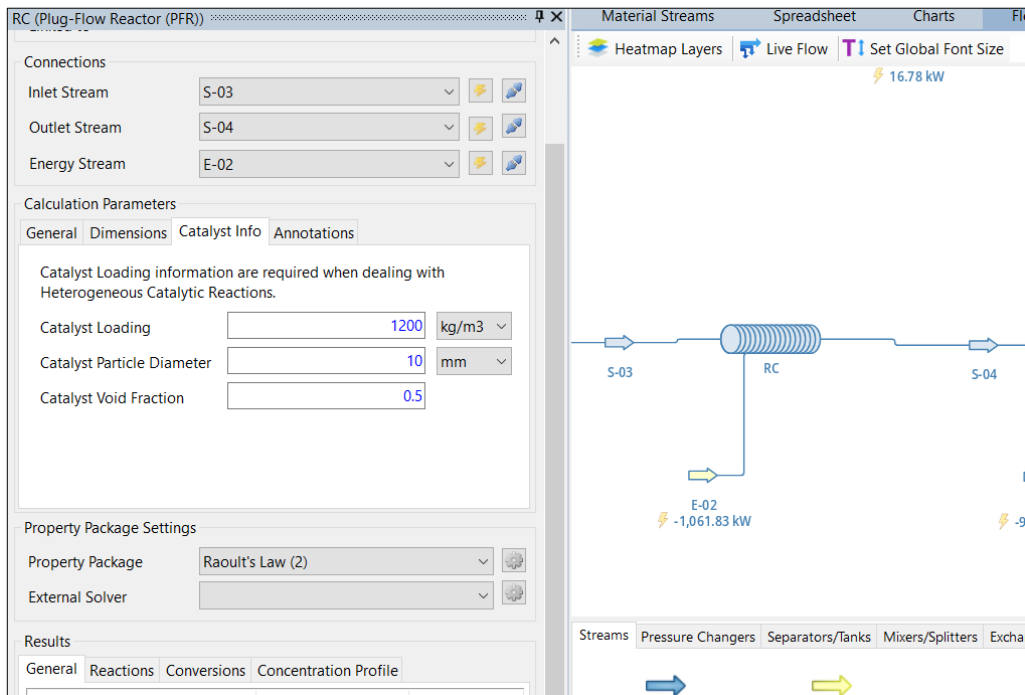


Ilustración 9-3: Panel de configuración para el reactor

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.6.3. Separador Gas-Líquido

Para poder separar las dos fases del proceso se emplea un separador Gas-Líquido (SEP_GL) en la Tabla 5-3 las condiciones de funcionamiento propuesta en la simulación de DWSIM en el separador bifásico.

Tabla 5-3: Parámetros separación en DWSIM

Separador Gas-Líquido (SEP_GL)		
Parámetros	Valor	Unidades
Temperatura de separación	40	°C
Presión de separación	1.04	bar

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Las condiciones colocadas favorecen la separación de las dos fases en donde la parte líquida se lleva a una columna de destilación a presión baja, la parte gaseosa se recircula para aprovechar el hidrógeno.

3.3.6.4. Destilación

Para la columna de destilación se emplea el modelo incluido en DWSIM conocido como “ChemSep Column”, las condiciones de funcionamiento se detallan en la Tabla 3-3, se emplea el modelo termodinámico Gamma-Phi/Hayden O’Connell/NRTL/T correlation/Ideal, para modelar el equilibrio vapor-líquido en la simulación la fuente para los parámetros de interacción binaria se emplean los datos obtenidos en el trabajo de Tseng et al., (2015) estos parámetros fueron obtenidos de la base de datos del simulador Aspen Plus y adaptados a DWSIM.

Tabla 6-3: Parámetros binarios paquete termodinámico NRTL

Componente i Componente j	FAL FOL	FAL H ₂ O	FOL H ₂ O	FOL 2-MF	2-MF FAL	2-MF H ₂ O
a _{ij}	0	-4.7563	0	1.6849	0.007942	0
a _{ji}	0	4.2362	0	0.1097	-0.001577	0
b _{ij}	69.0106	1911.4222	60.3941	-154.3	1319.049	852.5202
b _{ji}	24.0213	-262.2408	845.5429	-126.8	-279.9706	1915.0555
α _{ij}	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3

Fuente: (Tseng et al., 2015, p.45).

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Los parámetros de interacción conocidos se indican en la Tabla 6-3 para las interacciones faltantes entre los componentes binarios del paquete termodinámico se coloca el valor por defecto en ChemSep.

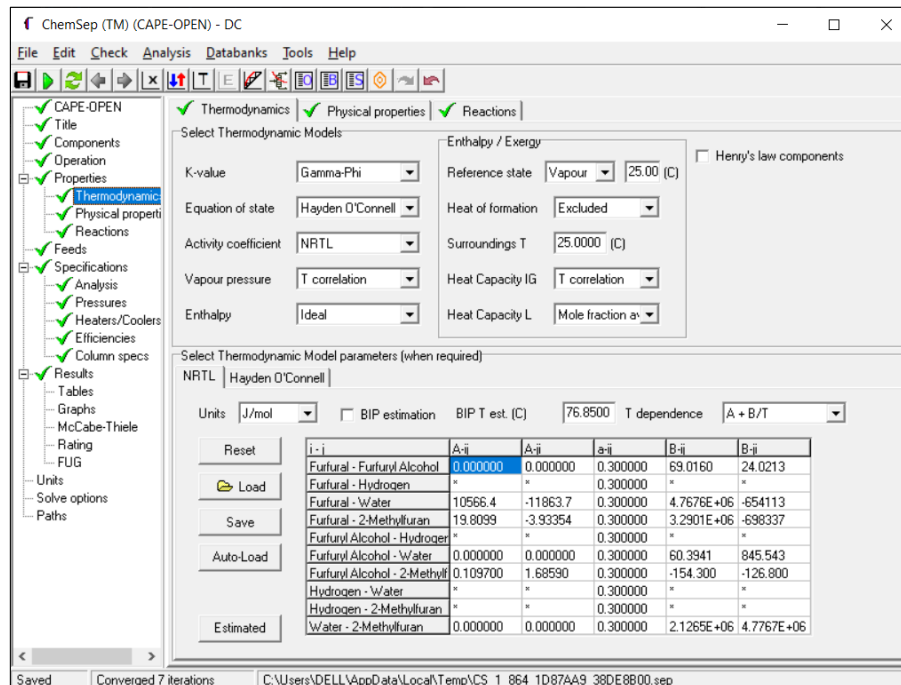


Ilustración 10-3: Elección del modelo termodinámico en ChemSep

Nota: Los valores por defecto son representados por un asterisco. (*)

Realizado por: Capelo, J., 2022.

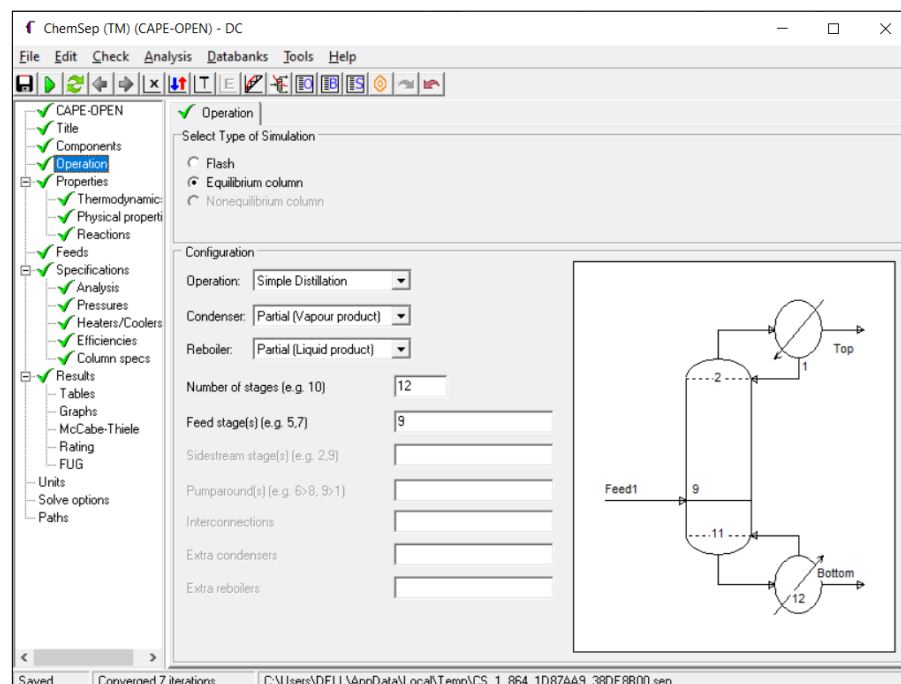


Ilustración 11-3: Disposición operativa de la columna de destilación

Realizado por: Capelo, J., 2022.

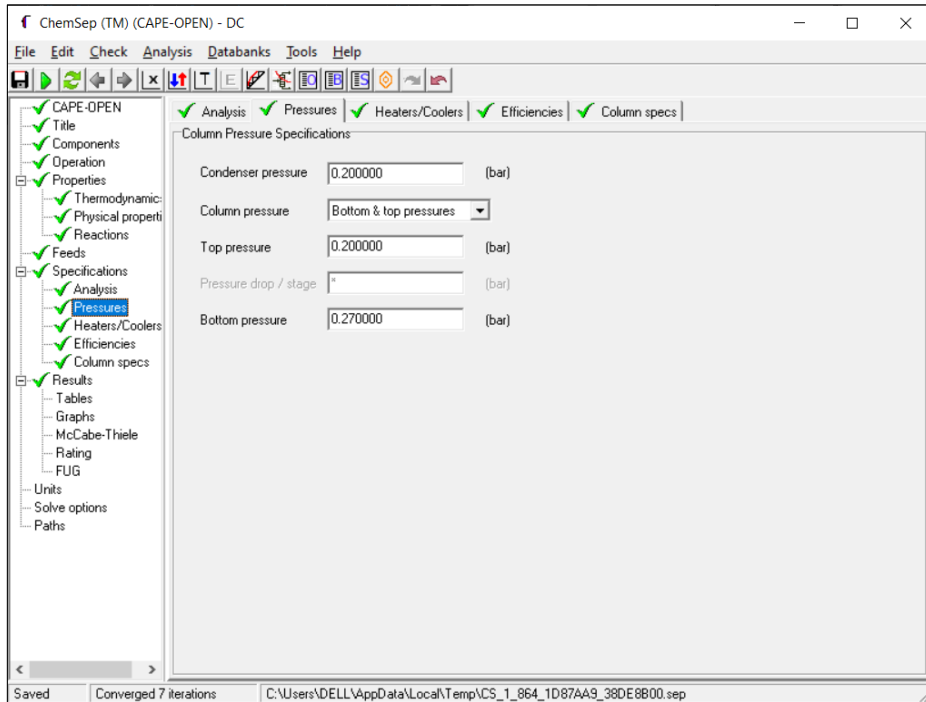


Ilustración 12-3: Detalles de presiones de funcionamiento

Realizado por: Capelo, J., 2022.

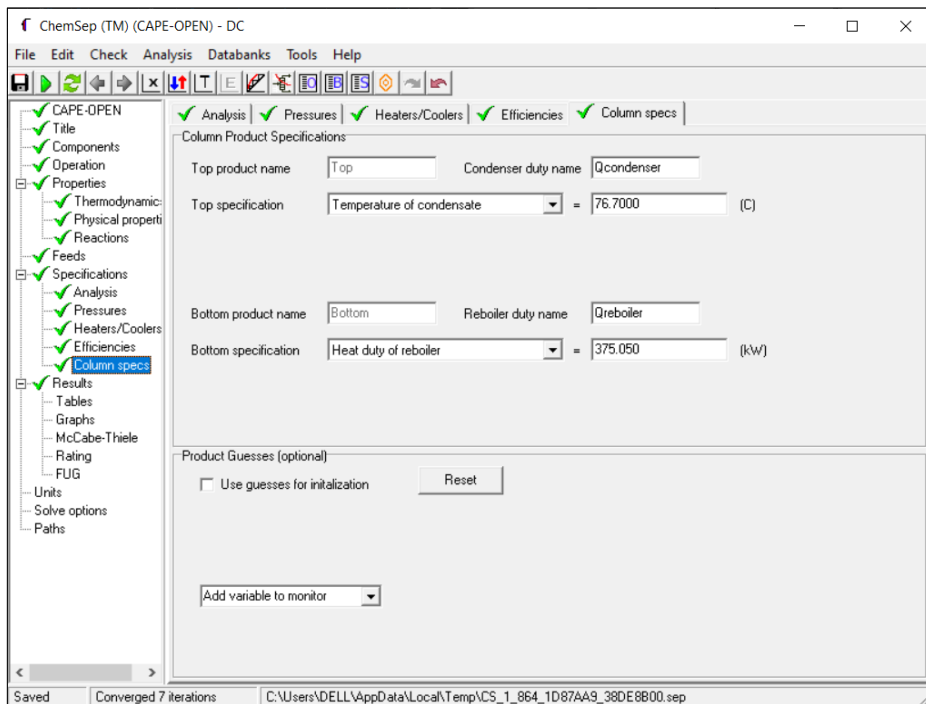


Ilustración 13-3: Condiciones iniciales de funcionamiento

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.3.6.5. Datos adicionales

Los datos indicados en la Tabla 7-3 se emplean para la recirculación del hidrogeno obtenido luego de la separación de la fase líquida-gaseosa, el bloque lógico de recirculación (REC) posee las configuraciones presentadas por defecto en DWSIM.

Tabla 7-3: Detalles suplementarios para la simulación

Parámetros	Valor	Unidades
Presión de salida en el compresor (Comp)	1.3	bar
Flujo 1 de salida en el divisor (Splitter)	0.25	kmol/h

Realizado por: Capelo, J., 2022.

3.4. Análisis de sensibilidad

3.4.1. Procedimiento para el análisis de sensibilidad

En la Ilustración 14-3 se muestra el proceso requerido para el análisis de sensibilidad.

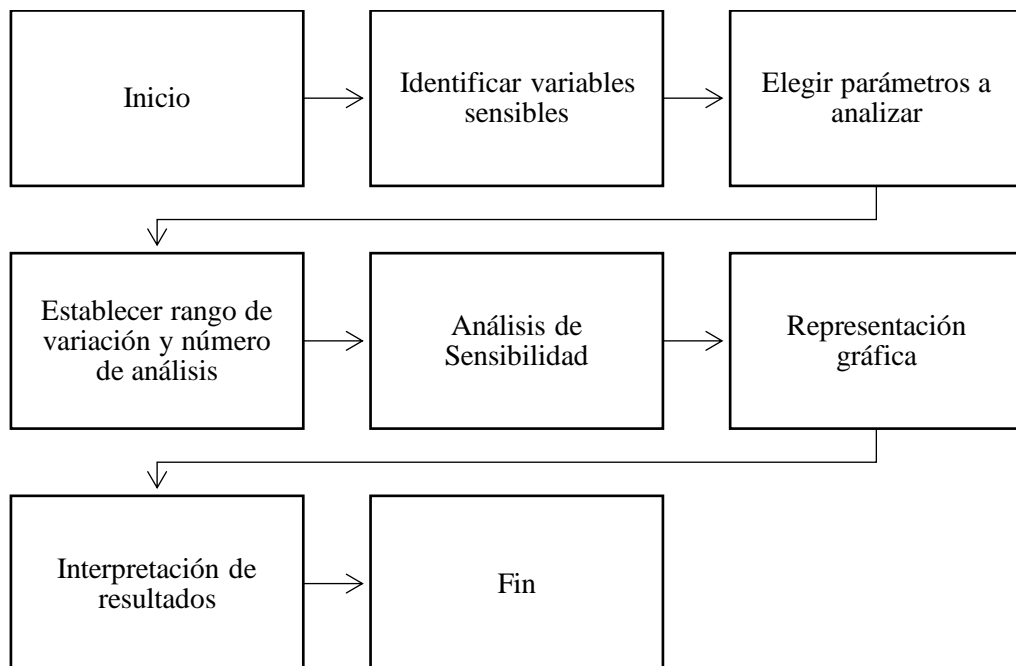


Ilustración 14-3: Proceso para análisis de sensibilidad

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Al momento de llevar a cabo el análisis de sensibilidad del proceso se debe tener en cuenta las propiedades fisicoquímicas de todos los componentes en especial del FOL el cual representa el principal interés en este estudio evitando la formación de un azeótropo al momento de la

destilación, al tener en cuenta esto se identifica las variables que serán modificadas para analizar cómo afectan en el proceso de esta manera se facilita la identificación de las entradas de la red neural que posteriormente será creada en base a las variables críticas que afecte de manera más significativa la concentración obtenida de FOL, luego de tener claro la razón del porque se realiza el análisis de sensibilidad lo primero que se tiene que conocer son los rangos de modificación, número de análisis, repeticiones, variables independientes y variables dependientes todos estos parámetros de interés son establecidos en la Tabla 8-3.

Tabla 8-3: Parámetros para el análisis de sensibilidad

Número de análisis	Repeticiones	Variables independientes	Unidades	Rango de variación	Variables Dependientes	Unidades
A_1	10	RC-Carga del catalizador	kg/m ³	700-1300	S-08 - X _{FOL} , Fracción Molar	.
A_2	10	RC-Longitud del reactor	m	1-10	S-08 - X _{FOL} , Fracción Molar	.
A_3	10	RC-Volumen del reactor	m ³	2-50	S-08 - X _{FOL} , Fracción Molar	.
A_4	10	DC-Presión de la etapa superior	bar	0.2-1	S-08, Flujo molar	kmol/h
A_5	10	DC-Temperatura de la etapa superior	°C	70-100	S-08, Flujo molar	kmol/h
A_6	10	DC-Trabajo del rehervidor	kW	375.05-500	S-08, Flujo molar	kmol/h

Realizado por: Capelo, J., 2022.

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

3.5. Tratamiento de datos

Una vez culminado la simulación, análisis de sensibilidad y validar los resultados con el artículo de alto impacto del proceso para la obtención de alcohol furfúrico, se establecen las entradas y salidas respectivas para la creación de la RNA con el propósito de formar una base de datos la simulación será efectuada 200 veces en cada una de estas veces se cambian los valores considerados como entradas para la RNA luego de esto se anota los valores de salida obtenidos de esta manera se consigue los datos suficientes para el posterior entrenamiento de la red neuronal.

Tabla 9-3: Variables escogidas de entradas de la RNA

Variable	Detalle	Rango	Unidades
P_DC	Presión en la etapa superior de la columna.	0.1 - 1	bar
T_DC	Temperatura en la etapa superior de la columna.	70 - 100	°C
C_RC	Carga del catalizador.	500 - 1200	kg/m3
V_RC	Volumen del reactor.	5 - 30	m3

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Las salidas que presentaron una variación considerable al momento de emplear el análisis de sensibilidad y tiene interés en el presente estudio se indican en la Tabla 10-3. Dichas variables se consideran como las entradas durante el entrenamiento de la RNA.

Tabla 10-3: Variables de salida del entrenamiento de la RNA

Variable	Detalle	Unidades
X_FOL	Fracción molar de FOL en el fondo de la columna.	
X_H2O	Fracción molar de H2O en el destilado de la columna.	
C_FAL	Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.	%

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Se estableció una base de datos con 200 datos como se muestra en el Anexo A, 175 son usados para entrenar la RNA en MATLAB, los 25 últimos datos de la base que se encuentran resaltados son excluidos en la creación de la red, estos datos se emplean para una validación externo, de esta manera se comprueba el funcionamiento de la RNA.

3.6. Creación de la RNA en MATLAB

Para la creación de la red neuronal, se aplica la herramienta Neuronal Fitting (nftool) disponible en el toolbox de MATLAB. En la Ilustración 15-3 se indica el diagrama de flujo aplicado en la creación de la RNA.

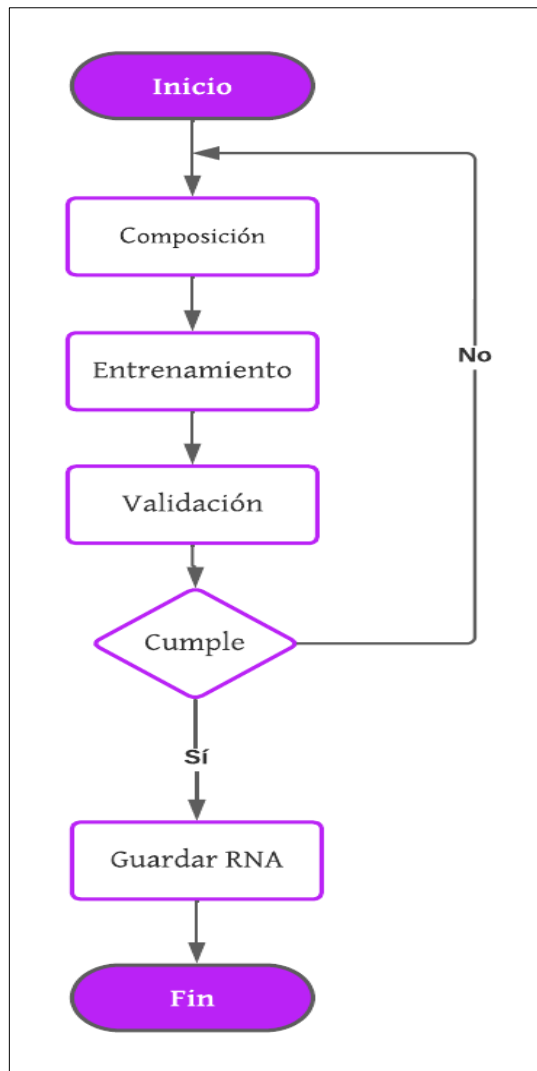


Ilustración 15-3: Pasos para la creación de la RNA

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Lo primero que hace es configurar los datos de entrada para la Red Neuronal Artificial (RNA) cuenta con cuatro entradas: presión (P_{DC}), temperatura (T_{DC}) de la etapa superior de la columna de destilación, carga del catalizador en el reactor (C_{RC}) y el volumen del Reactor (V_{RC}). Las salidas de la RNA son: la fracción molar de alcohol furfúrico (X_{FOL}) en el fondo, fracción molar de agua (X_{H2O}) en el destilado y el porcentaje de conversión de furfural en la reacción (C_{FAL}) como se aprecia en las Tablas 9-3 y 10-3.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
1	Datos																	
2	0.15	0.89	0.86	0.54	0.27	0.74	0.89	0.61	0.84	0.81	0.98	0.66	0.12	0.48	0.78	0.44	0.3	0.42
3	98	88	88	82	99	83	70	75	92	90	83	71	72	82	98	82	82	83
4	1163	871	665	1156	1081	869	758	1184	532	577	925	756	1100	930	985	550	546	688
5	20	25	26	16	14	22	12	5	19	17	15	27	24	18	23	19	22	8
6	0.998	0.988	0.986	0.987	0.985	0.987	0.933	0.940	0.979	0.978	0.948	0.936	0.990	0.986	0.988	0.980	0.982	0.961
7	0.453	0.677	0.691	0.681	0.584	0.685	0.344	0.630	0.723	0.727	0.541	0.489	0.617	0.684	0.656	0.714	0.687	0.763
8	99.272	99.192	98.905	99.003	98.786	99.042	97.926	96.452	98.182	98.121	98.672	90.102	99.292	98.892	99.187	98.242	98.477	96.449
9																		
10																		
11																		
12																		
13																		
14																		
15																		
16																		
17																		
18																		
19																		
20																		
21																		
22																		
23																		
24																		
25																		
26																		
27																		
28																		
29																		
30																		

Ilustración 16-3: Composición de la matriz de datos en Excel

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Para tener una mejora significativa en el tratamiento de la base de datos, se aplica la función normalize, generando automáticamente una base de datos con rangos de 0 entre 1, como se muestra en la línea 21 del código presente en el Anexo C.

3.7. Entrenamiento de la RNA

MATLAB cuenta con tres algoritmos para el entrenamiento de redes neuronales como son: Levenberg-Marquardt (LM), Bayesian Regularization (BR) y Scaled Conjugate Gradient (SCG). Además, de estos existen más algoritmos empleados en el entrenamiento de redes neuronales: el algoritmo cuasi-Newton con Broyden-Fletcher-Goldfrab-Shanno (BFGS) (Mohammadi et al., 2020, p.4). El algoritmo LM es uno de los algoritmos de entrenamiento habituales más aplicados y ha sido elegido algoritmo de entrenamiento adecuado en varios estudios (Besliu-Ionescu et al., 2019).

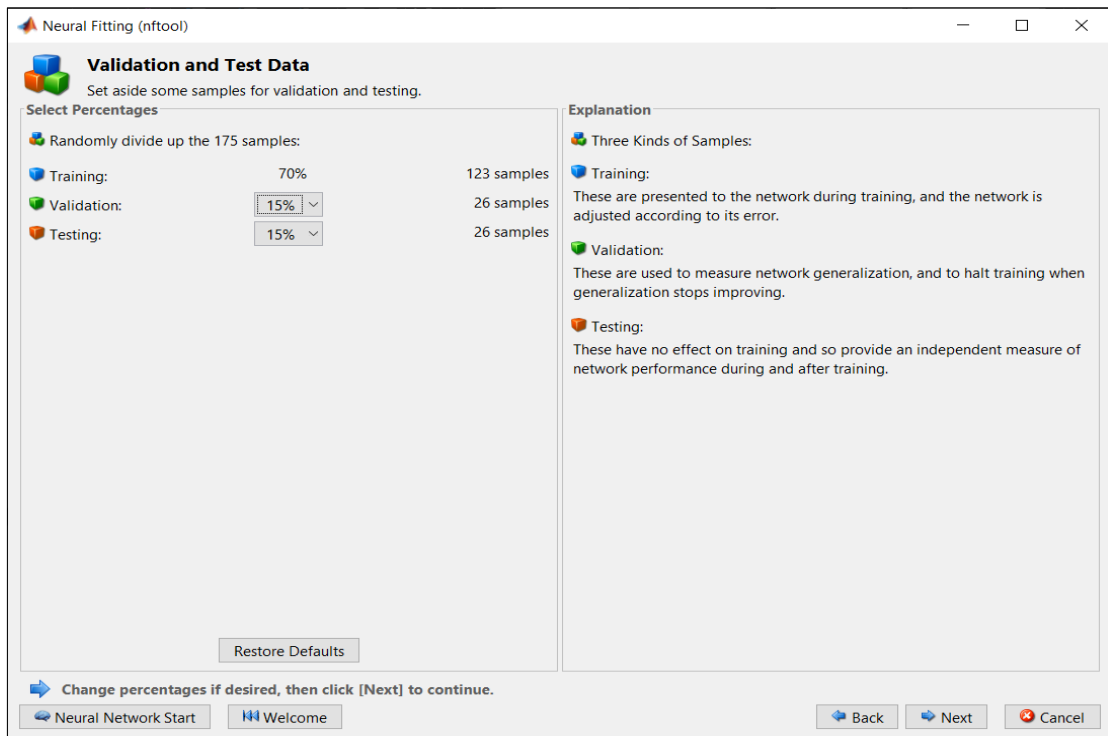


Ilustración 17-3: Porcentaje para el entrenamiento, validación y prueba

Realizado por: Capelo, J., 2022.

En el proceso de entrenamiento se tiene que considerar que MATLAB proporciona tres tipos de muestras en los datos colocados como entradas y salidas con diferentes objetivos:

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

Los 175 datos empleados para el entrenamiento de la RNA se dividen de la siguiente manera: 70% usado para el entrenamiento (123), 15% usado para la validación (26) y 15% usado en el proceso de prueba de la RNA (26), como se muestra en la Ilustración 17-3, cabe recalcar que estos porcentajes se pueden modificar según se lo requiera.

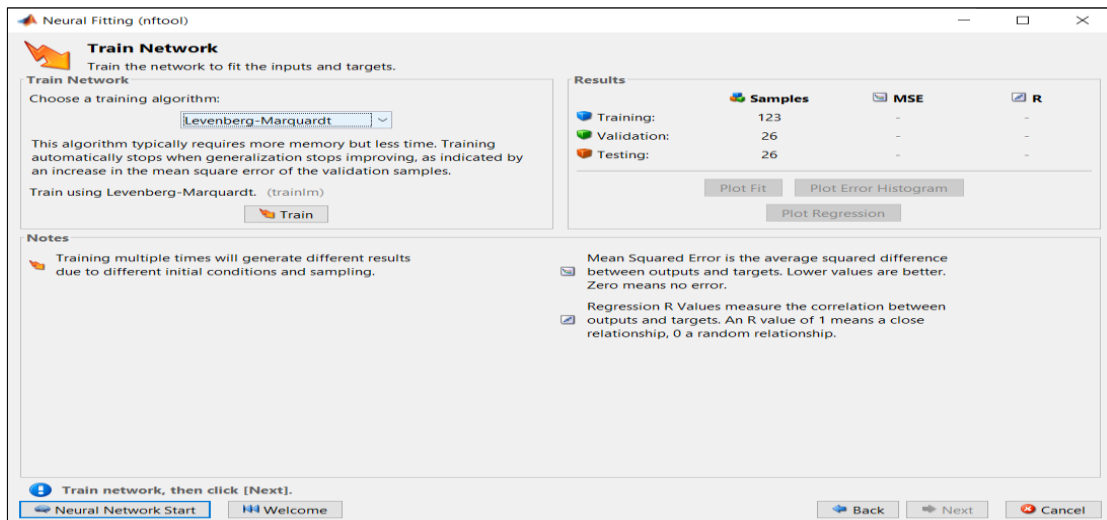


Ilustración 18-3: Selección del algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Capelo, J., 2022.

- Algoritmo LM suele pedir más memoria, pero ocupa menos tiempo de entrenamiento. Se detiene de manera automática al momento de que la generalización no mejore, se basa con un acrecentamiento del error cuadrático medio en las muestras de validación.
- Algoritmo BR suele demandar más tiempo, pero ocasionar una buena generalización para conjuntos de datos difíciles, pequeños o ruidosos. El entrenamiento se interrumpe según la minimización adaptativa del peso (regularización).
- Algoritmo SCG solicita menos memoria. El entrenamiento se interrumpe automáticamente cuando la generalización abandona su mejoramiento, muestra un acrecentamiento del error cuadrático medio en las muestras de validación.

3.8. Validación de los resultados

Luego de conseguir la mejor configuración para la RNA y este entrenada, se necesita indicar la confiabilidad para la predicción de la concentración final de FOL, H₂O y el porcentaje de conversión de FAL en el proceso de obtención de alcohol furfurílico, aplicando indicadores del desempeño incluidos en MATLAB como son: error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de regresión (R).

- El MSE es la diferencia cuadrática media aplicada entre las salidas obtenidas y los objetivos. Mientras el valor tienda a cero mejores son los resultados de la RNA.
- El valor de R calcula la correlación que hay entre los objetivos y productos. Mientras el valor de R este más cercano a 1 tiene una relación mejor, por lo que los resultados de la RNA son más precisos.

MATLAB no cuenta con una validación interna con los datos ingresados (175 datos), se ejecutará una validación externa con nuevas entradas adicionales no usadas para el entrenamiento de la RNA estos datos son los 25 últimos de la base de datos (Anexo A), con el propósito de poner a prueba la capacidad predictiva de la red se pone a prueba mediante una comparación de los resultados de las salidas predichos por la RNA y los resultados conseguidos con la simulación en DWSIM.

3.9. Análisis estadístico

Luego de tener la validación externa se realiza un análisis que consiste en la comparación de los valores de las fracciones molares de interés, FOL y H₂O, junto con el porcentaje de conversión de FAL en la reacción, conseguidos con la simulación en DWSIM y los resultados predichos por la RNA creada en MATLAB.

La valoración de los resultados se ejecuta con el programa estadístico Statgraphics Centurion19 utilizando la prueba estadística:

- **ANOVA:** Se lo conoce como el análisis de varianzas permite establecer si las puntuaciones medias de diferentes grupos o condiciones difieren (Rutherford, 2011, p17), el ANOVA pretende explicar los datos (las puntuaciones de la variable dependiente) en términos de los parámetros experimentales (el modelo) y un componente de error (Rutherford, 2011, p. 21).

El análisis de varianza consiste con una metodología en desagrupar en dos unidades: el primero en grupos y otro dentro del propio grupo, garantizando que se cuantifiquen las diferencias entre los mismos. La tabla final de resultados del ANOVA tiene P-valores que son usados para diferenciar la confiabilidad estadística en los diferentes grupos. La prueba F de la tabla ANOVA comprueba si existe diferencias relevantes entre las medias. En el caso de requerir medir la presencia de valores atípicos se puede considerar la prueba estadística conocida como Kruskal-Wallis, su propósito es evidenciar las medianas en lugar de las medias diferenciándose del ANOVA (Statgraphics Technologies, 2020, p. 206).

CAPÍTULO IV

4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1. Resultados de la simulación en DWSIM

En la Ilustración 1-4 se muestra la simulación concluida del proceso de obtención de alcohol furfúrico mediante su proceso industrial, ejecutada en DWSIM.

Se produjeron algunos cambios en la simulación en comparación del problema base, las principales modificaciones se pueden observar en la recirculación al no poseer datos específicos de las condiciones de funcionamiento del compresor (Comp), divisor (Splitter) y bloque de reciclaje (REC) las condiciones se dieron en base a las composiciones y fase en la que se encuentra toda esta parte de la simulación, para el bloque de reciclaje se emplea los valores por defecto de DWSIM.

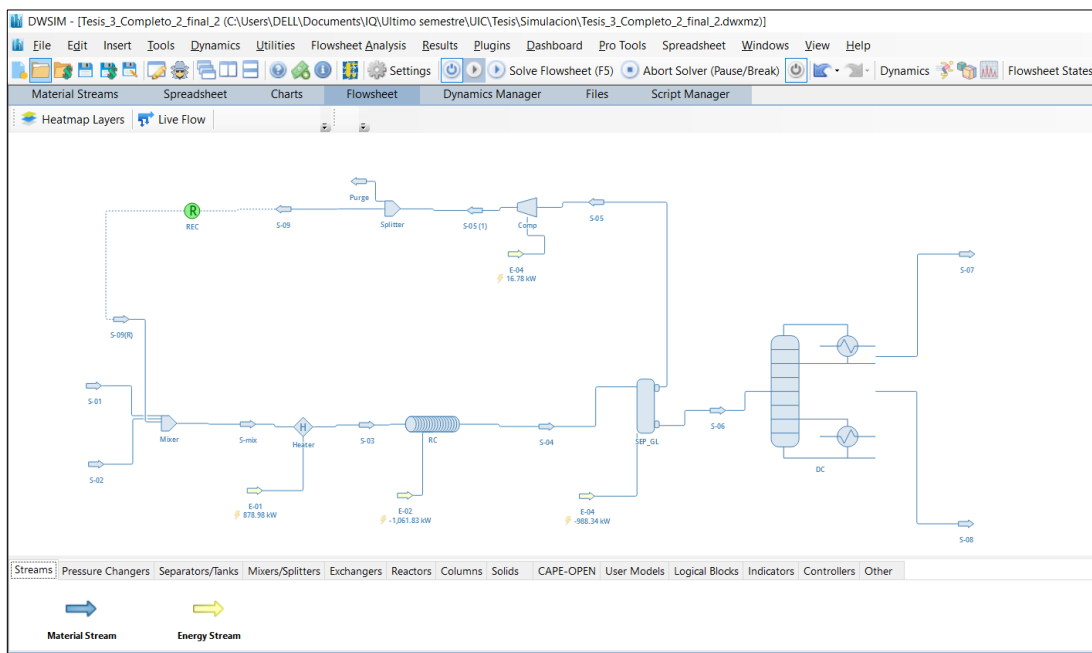


Ilustración 1-4: Simulación finalizada del proceso industrial para lo obtención de FOL

Realizado por: Capelo, J., 2022.

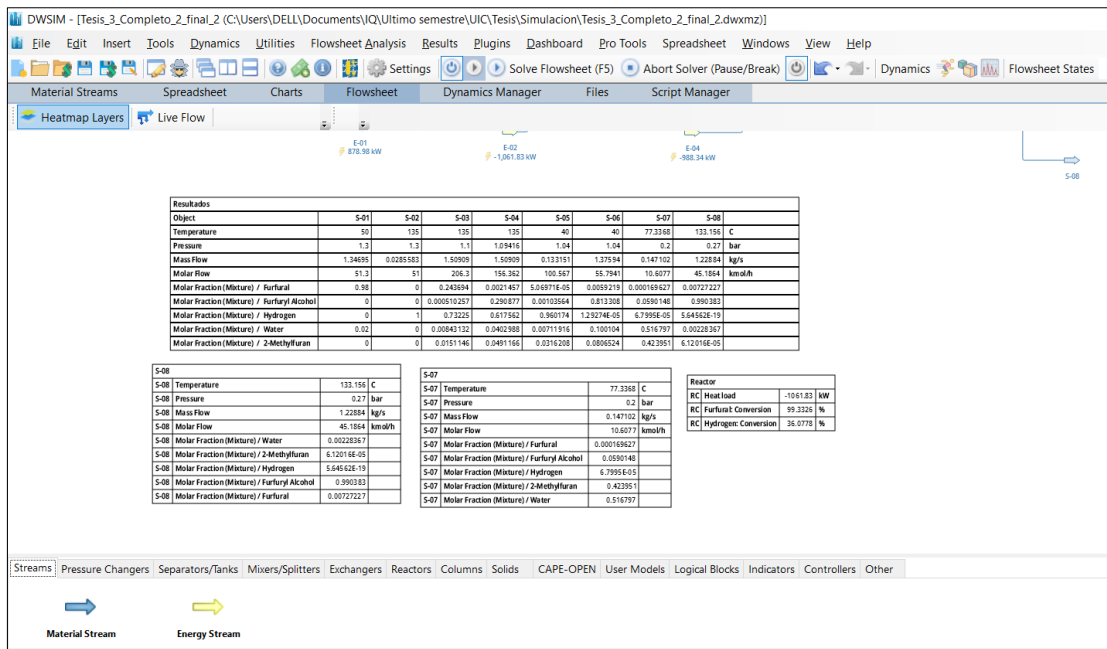


Ilustración 2-4: Resultados obtenidos en DWSIM

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Los resultados de la simulación obtenidos se muestran en la Tabla 1-4, están en concordancia con los logrados por Tseng et al., (2015), utilizaron Aspen Plus para el diseño y simulación del proceso. La simulación muestra una concentración final de FOL (X_{FOL}) en el fondo de la columna de destilación de 0.990383, las otras fracciones molares del flujo de fondo son consideradas trazas debido a sus cantidades pequeñas presentes, en el destilado se tiene una concentración de H_2O (X_{H_2O}) de 0.516797, en cuanto a las condiciones de funcionamiento del proceso en cuanto a la destilación se dan con una temperatura en la etapa superior (T_{DC}) de 77.33 °C y una presión en la etapa superior (P_{DC}) de 0.2 bar en cuanto a la parte inferior de la columna de destilación se da a una temperatura 133.15 °C, cabe recalcar que estas condiciones están consideradas dentro de los rangos adecuados para evitar la formación de un azeótropo entre el FOL y H_2O con el propósito de evitar aplicar un proceso externo para la separación del azeótropo, en el reactor los resultados más relevantes se indican en la Tabla 2-4, logrando conseguir una conversión del FAL (C_{FAL}) de 99.3326 % con un tiempo de residencia de 11.31s la conversión del FAL me demuestra la posible formación de FOL pero algo que se tiene que considerar es la generación de coproductos como el 2-MF siendo el más relevante del cual se consiguió tener una concentración molar de 0.423951 en el destilado, los flujos molares obtenidos en la simulación son de 45.1864 kmol/h en el fondo de la columna y 10.6077 kmol/h en el destilado de la columna.

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

Flujos Propiedades	S-01	S-02	S-03	S-04	S-05	S-06	S-07	S-08	Unidades
Temperatura	50	135	135	135	40	40	77.3368	133.156	°C
Presión	1.3	1.3	1.1	1.09416	1.04	1.04	0.2	0.27	bar
Flujo Molar	51.3	51	206.3	156.362	100.567	55.7941	10.6077	45.1864	kmol/h
Fracción Molar (Mezcla) /FAL	0.98	0	0.243694	0.0021457	5.07E-05	0.0059219	0.0001697	0.0072723	
Fracción Molar (Mezcla) /FOL	0	0	0.0005103	0.290877	0.0010356	0.813308	0.0590148	0.990383	
Fracción Molar (Mezcla) /H ₂	0	1	0.73225	0.617562	0.960174	1.29E-05	6.80E-05	5.65E-19	
Fracción Molar (Mezcla) /H ₂ O	0.02	0	0.0084313	0.0402988	0.0071192	0.100104	0.516797	0.00228367	
Fracción Molar (Mezcla) /2-MF	0	0	0.0151146	0.0491166	0.0316208	0.0806524	0.423951	6.12E-05	

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Tabla 2-4: Resultados del reactor obtenidos en DWSIM

Reactor (RC)		
Propiedad	Valor	Unidad
Tiempo de residencia	11.3135	s
Conversión FAL	99.3326	%
Conversión H ₂	36.0778	%
Carga térmica	-1061.83	kW

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.2. Validación de resultados de la simulación

Luego de obtener los resultados mediante la simulación en DWSIM, es inevitable validar los resultados obtenidos con una bibliografía ya establecida y de confianza, mediante la comparación de los resultados con la aplicación de la fórmula Ec 1-4, para calcular el error porcentual. El artículo usado para la validación de los resultados, fue realizado por Tseng et al., (2015).

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

Fórmula para el cálculo del error porcentual:

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

Tabla 3-4: Validación de la simulación en DWSIM

Variabl e	Detalle	Unidade s	DWSIM	Tseng et al. (2015)	Error (%)
X_FOL	Fracción molar de FOL en el fondo de la columna.		0.990383	0.992	0.163
C_FAL	Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.	%	99.00	99.33	0.332
S-03	Flujo molar a la entrada del reactor.	kmol/h	206.3	216.33	4.636
S-04	Flujo molar a la salida del reactor.	kmol/h	156.362	166.55	6.117
S-05	Flujo molar salida del separador (Reflujo).	kmol/h	100.567	115.181	12.688
S-06	Flujo molar a la entrada de la columna.	kmol/h	55.7941	51.369	8.614
S-08	Flujo molar en el fondo de la columna.	kmol/h	45.1864	50	9.627

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.3. Balance de masa del sistema

4.3.1. Balance de masa en el mezclador

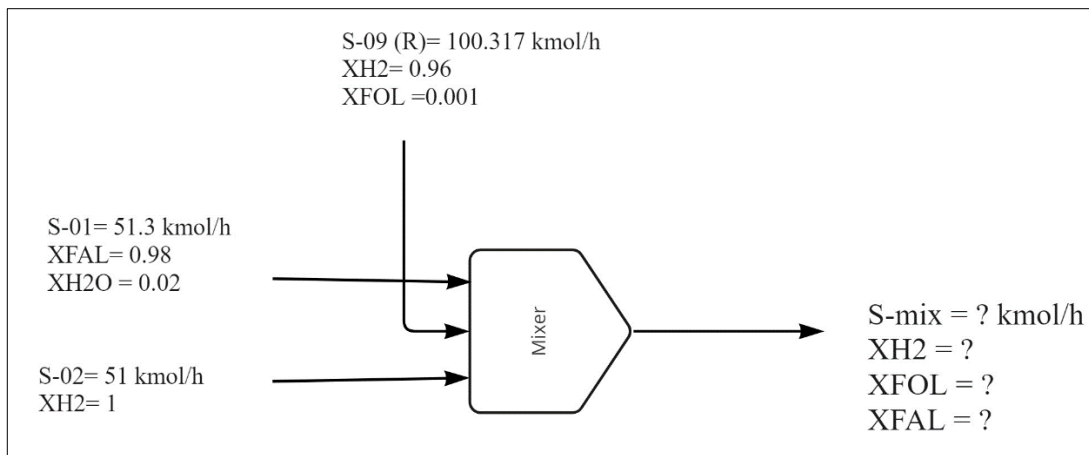


Ilustración 3-4: Diagrama de balance general de masa en el mezclador

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Balance global de materia:

$$S - 01 + S - 02 + S - 09(R) = S - \text{mix} \quad (\text{Ec 2-4})$$

Donde:

S-01 = Flujo molar de FAL de entrada.

S-02 = Flujo molar de H₂ de entrada.

S-09 (R) = Flujo molar de recirculación.

S-mix = Flujo de salida del mezclador.

Flujos de entrada:

$$S - 01 = 51.3 \text{ kmol/h}$$

$$S - 02 = 51 \text{ kmol/h}$$

$$S - 09 (R) = 100.317 \text{ kmol/h}$$

Entonces,

$$S - \text{mix} = S - 01 + S - 02 + S - 09 (R)$$

$$S - \text{mix} = (51.3 + 51 + 100.317) \text{ kmol/h}$$

$$\mathbf{S - mix = 202.617 \text{ kmol/h}}$$

Balance de masa por componente (H₂):

$$S - 02 * X_{H_2-02} + S - 09(R) * X_{H_2-09(R)} = S - \text{mix} * X_{H_2-Mix} \quad (\text{Ec 3-4})$$

Donde:

X_{H_2-02} = fracción molar de H₂ en la entrada S-02.

$X_{H_2-09(R)}$ = fracción molar de H₂ en la recirculación.

X_{H_2-Mix} = fracción molar de H₂ en la salida del mezclador.

$$X_{H_2-Mix} = \frac{(S - 02 * X_{H_2-02} + S - 09(R) * X_{H_2-09(R)})}{S - \text{mix}}$$

$$X_{H_2-Mix} = \frac{(51 * 1 + 100.317 * 0.96) \text{ kmol/h}}{202.617 \text{ kmol/h}}$$

$$\mathbf{X_{H_2-Mix} = 0.727}$$

Balance de masa por componente (FOL):

$$S - 09(R) * X_{FOL_{09}} = S - \text{mix} * X_{FOL_{Mix}} \quad (\text{Ec 4-4})$$

Donde:

$X_{FOL_{09}}$ = fracción molar de FOL en la recirculación.

$X_{FOL_{mix}}$ = fracción molar de FOL en la salida del mezclador.

$$X_{FOL_{Mix}} = \frac{S - 09(R) * X_{FOL_{09}}}{S - \text{mix}}$$

$$XFOL_{\text{Mix}} = \frac{(100.317 * 0.001)\text{kmol/h}}{202.617 \text{ kmol/h}}$$

$$\mathbf{XFOL_{\text{Mix}} = 4.95 \times 10^{-4}}$$

Balance de masa por componente (FAL):

$$S - 01 * XFAL_{01} = S - \text{mix} * XFAL_{\text{Mix}} \quad (\text{Ec 5-4})$$

Donde:

$XFAL_{01}$ = fracción molar de FAL en la entrada S-01.

$XFAL_{\text{Mix}}$ = fracción molar de FAL en la salida del mezclador.

$$XFAL_{\text{Mix}} = \frac{S - 01 * XFAL_{01}}{S - \text{mix}}$$

$$XFOL_{\text{Mix}} = \frac{(51.3 * 0.98)\text{kmol/h}}{202.617 \text{ kmol/h}}$$

$$\mathbf{XFAL_{\text{Mix}} = 0.248}$$

4.3.2. Balance de masa en la columna de destilación

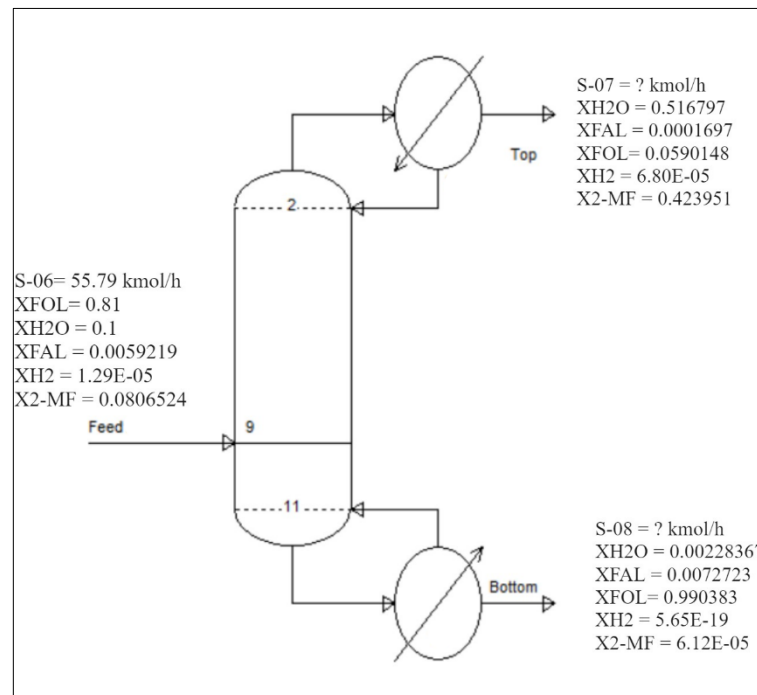


Ilustración 4-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de destilación

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Balance global de materia:

$$S - 06 = S - 07 + S - 08 \quad (\text{Ec 6-4})$$

Donde:

S-06 = Flujo molar a la entrada de la columna.

S-07 = Flujo molar del destilado.

S-08 = Flujo molar en el fondo de la columna.

Flujo de entrada:

$$S - 06 = 55.79 \text{ kmol/h}$$

Balance de masa por componente (FOL):

$$S - 06 * XFOL_{06} = S - 07 * XFOL_{07} + S - 08 * XFOL_{08} \quad (\text{Ec 7-4})$$

Donde:

$XFOL_{06}$ = fracción molar de FOL en la entrada de la columna.

$XFOL_{07}$ = fracción molar de FOL en el destilado.

$XFOL_{08}$ = fracción molar de FOL en el fondo de la columna.

$$S - 08 = \frac{S - 06 * XFOL_{06} - S - 07 * XFOL_{07}}{XFOL_{08}} \quad (\text{Ec 8-4})$$

Balance de masa por componente (H₂O):

$$S - 06 * XH_2O_{06} = S - 07 * XH_2O_{07} + S - 08 * XH_2O_{08} \quad (\text{Ec 9-4})$$

Donde:

XH_2O_{06} = fracción molar de H₂O en la entrada de la columna.

XH_2O_{07} = fracción molar de H₂O en el destilado.

XH_2O_{08} = fracción molar de H₂O en el fondo de la columna.

$$S - 08 = \frac{S - 06 * XH_2O_{06} - S - 07 * XH_2O_{07}}{XH_2O_{08}} \quad (\text{Ec 10-4})$$

Entonces, igualamos las ecuaciones Ec 8-4 y Ec 10-4 para conseguir S-07.

$$S - 08 = S - 08$$

$$\frac{S - 06 * XFOL_{06} - S - 07 * XFOL_{07}}{XFOL_{08}} = \frac{S - 06 * XH_2O_{06} - S - 07 * XH_2O_{07}}{XH_2O_{08}} \quad (\text{Ec 11-4})$$

Despejando S-07 se tiene,

$$S - 07 = \frac{S - 06 * (XH_2O_{06} * XFOL_{08} - XFOL_{06} * XH_2O_{08})}{(XH_2O_{07} * XFOL_{08} - XFOL_{07} * XH_2O_{08})} \quad (\text{Ec 12-4})$$

Entonces,

$$S - 07 = \frac{55.79 \text{ kmol/h} * (0.1 * 0.99 - 0.81 * 0.0022)}{(0.516 * 0.99 - 0.059 * 0.0022)}$$

$$\mathbf{S - 07 = 10.62 \text{ kmol/h}}$$

Finalmente,

$$S - 08 = S - 06 - S - 07$$

$$S - 08 = (55.79 - 10.62) \text{ kmol/h}$$

$$\mathbf{S - 08 = 45.17 \text{ kmol/h}}$$

4.3.3. Balance de masa en el reactor

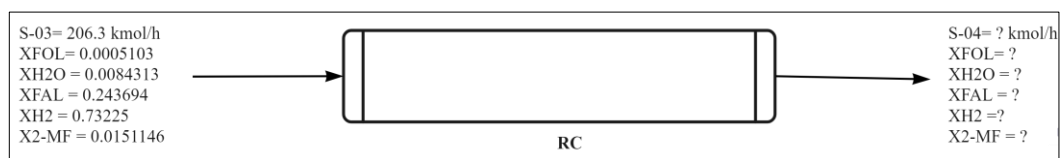
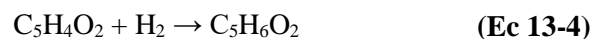


Ilustración 5-4: Diagrama de balance general de masa en la columna de destilación

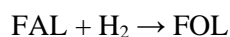
Realizado por: Capelo, J., 2022.

El balance de masa se centra en el FOL producido en el reactor por lo que se evita realizar cálculos extensos.

Reacción química:



Por facilidad la ecuación química es representada de la siguiente manera:



$$206.3 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} (0.243694) * \frac{1 \text{ kmol FOL/h}}{1 \text{ kmol FAL/h}} = 50.274 \text{ kmol FOL /h producido}$$

Flujo de salida del reactor de FOL

$$S - 04_{\text{FOL}} = F_{\text{producido FOL}} + S - 03 * (X_{\text{FOL}}) \quad (\text{Ec 14-4})$$

$$S - 04_{\text{FOL}} = 50.274 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 206.3 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} * (0.0005103)$$

$$\mathbf{S - 04_{FOL} = 50.379 \text{ kmol/h}}$$

4.4. Resultados del análisis de sensibilidad

Las variables críticas más relevantes del proceso se seleccionaron con el fin de ver cómo afecta a las salidas al conocer las variables se dividieron en dos partes más relevantes del proceso: Reactor y Destilación. Los rangos, variables tanto dependientes como independientes, número de repeticiones y rangos de variación para los análisis fueron propuesto en la Tabla 8-3.

Tabla 4-4: Reconocimiento de las variables del análisis de sensibilidad

Enfoque	Identificación	Descripción	Unidades
Reactor	C_RC	Carga del catalizador en el reactor.	kg/m ³
	L_RC	Longitud del reactor.	m
	V_RC	Volumen del reactor.	m ³
Destilación	P_DC	Presión en la etapa superior de la columna.	bar
	T_DC	Temperatura en la etapa superior de la columna.	°C
	W_DC	Trabajo del rehervidor.	kw
Salidas	X_FOL	Fracción molar de FOL en el fondo de la columna.	
	S-08	Flujo molar en el fondo de la columna.	kmol/h

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.1. Resultados del análisis de sensibilidad en el Reactor

En el reactor (RC) se proporcionan tres análisis de sensibilidad con las variables de diseño como son la concentración del catalizador, longitud del reactor y volumen del reactor con el propósito establecer de manera más ordenada cada uno de los análisis fueron etiquetados y su intención se muestran en la Tabla 5-4 todos los análisis se les aplican el mismo número de repeticiones en

diferentes rangos de funcionamiento definido para las condiciones dadas en la simulación base hecha en DWSIM.

Tabla 5-4: Análisis de sensibilidad en el Reactor

Reactor			
Identificación	Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
A_1	C_RC	Análisis de cómo afecta la concentración de la carga del catalizador en la concentración final del FOL.	X_FOL
A_2	L_RC	Análisis de la manera de cómo afecta la longitud del reactor en la concentración final del FOL.	X_FOL
A_3	V_RC	Comparación de como impacta el cambio de volumen del reactor en la concentración final del FOL.	X_FOL

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.1.1. Resultados análisis A_1

Los rangos escogidos para el análisis fueron de 700 entre 1300 kg/m³ con 10 repeticiones los resultados se indican en la Ilustración 6-4 se logra apreciar que al acrecentar la concentración del catalizador se aumenta de manera directa la concentración final de FOL obtenida en el proceso de destilación, la concentración máxima (0.99) se consigue con 1300 kg/m³ los cambios son relativamente pequeños entre cada número de análisis pero si afecta de manera inmediata al FOL conseguido por lo que esta variable se considera como una entrada para la RNA.

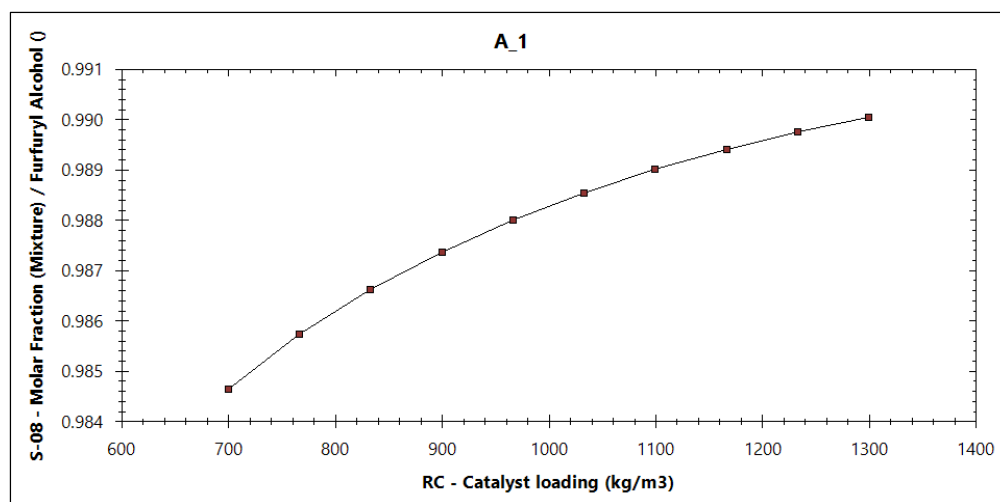


Ilustración 6-4: Resultados del análisis A_1

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.1.2. Resultados análisis A_2

Los rangos elegidos para este análisis son de 1m a 10m con el mismo número de repeticiones empleado para todos los análisis de sensibilidad en la Ilustración 7-4 se evalúa mediante una gráfica de los resultados el cómo afecta el cambio de longitud en el reactor en la concentración final de FOL, como se observa en la Ilustración la concentración se reduce a medida que se aumenta la longitud del reactor la variación con esta variable de diseño no presenta un cambio considerable en la concentración por lo cual no se lo toma en cuenta como una entrada para la red neuronal esto se puede apreciar porque se obtuvo los siguientes resultados con los valores límites del análisis: con 1m se tiene 0.98964 y con 10m se tiene 0.98904 por esto se llegó a la conclusión de excluir esta variable como una entrada de la RNA.

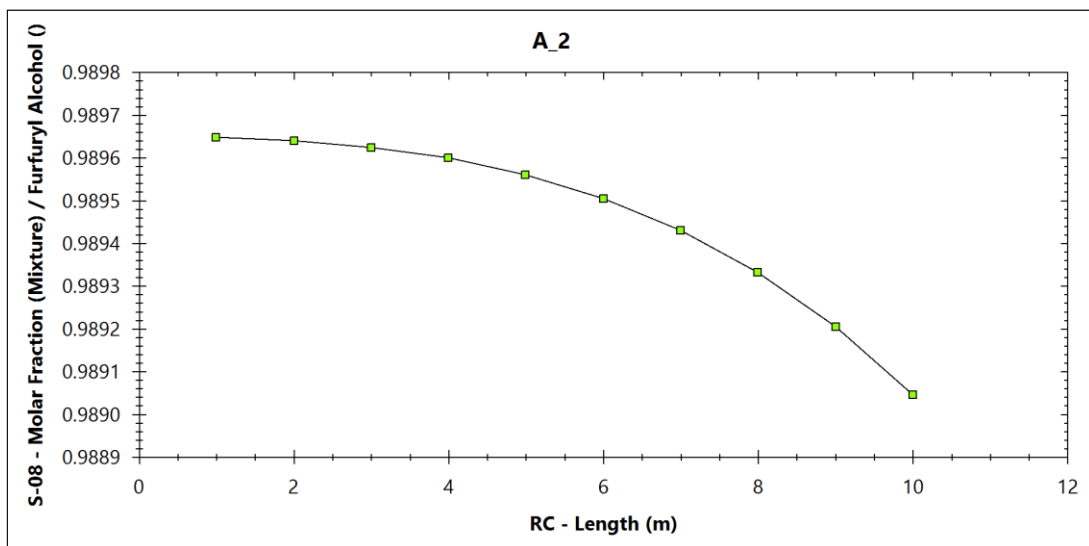


Ilustración 7-4: Resultados del análisis A_2

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.1.3. Resultados análisis A_3

Para el último análisis en el reactor se seleccionaron los rangos desde 2m³ hasta 50m³ para el volumen de este empleando el número de repeticiones establecido, los resultados son representados en la Ilustración 8-4, al aumentar el volumen del reactor la concentración final de FOL aumenta, los cambios más representativos se dan en los siguientes valores: con 2m³ se tiene 0.825, con 7.33m³ se tiene 0.975 y con 23.33m³ se tiene 0.99 esta variable de diseño afecta de manera considerable en todo el proceso por lo cual se le considera como una entrada para la RNA.

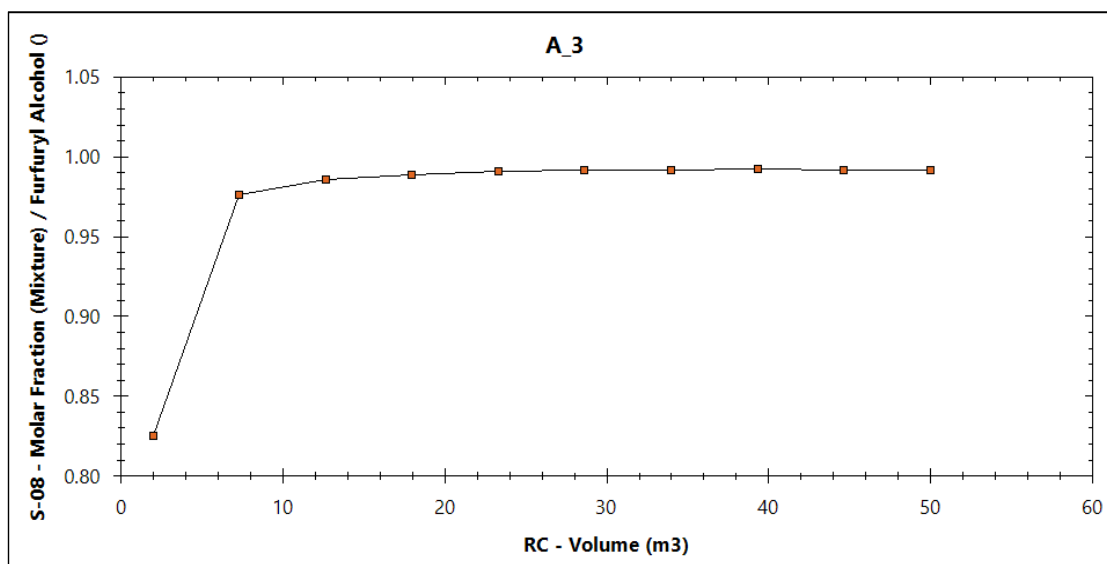


Ilustración 8-4: Resultados del análisis A_3

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.2. Resultados del análisis de sensibilidad en la columna de destilación

En la columna de destilación (DC) se aplican tres análisis de sensibilidad en las variables de diseño más importante como son: la presión, la temperatura en la etapa superior de la columna y el trabajo del rehervidor durante el proceso de destilación de igual manera para llevar un orden de los análisis fueron etiquetados y su propósito se muestra en la Tabla 6-4 todos estos análisis se los aplica desde la herramienta disponible en ChemSep para el estudio paramétrico de columnas de destilación los rangos de funcionamiento para cada análisis fueran establecidos con anterioridad en base a las propiedades de las sustancias involucradas también basándose en la simulación realizada en DWSIM.

Tabla 6-4: Análisis de sensibilidad en la Columna de Destilación

Destilación			
Identificación	Variable Independiente	Descripción	Variable Dependiente
A_4	P_DC	Análisis de cómo afecta la presión de la etapa superior en el proceso de destilación.	S-08
A_5	T_DC	Análisis de la manera de cómo afecta la temperatura de la etapa superior en el proceso de destilación.	S-08
A_6	W_DC	Comparación de cómo afecta el trabajo del rehervidor durante el proceso de destilación.	S-08

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.2.1. Resultados del análisis A_4

Los rangos establecidos para este análisis fueron de 0.2 bar entre 1 bar para evitar la formación de un azeótropo estos rangos son los ideales al momento de analizar el cómo afecta esta variable de diseño al producto final de la destilación, en la Ilustración 9-4 se aprecia como el producto de fondo aumenta su flujo molar conforme aumenta la presión, pero se tiene en cuenta la fase en la que se encuentra el producto de fondo porque tiene que estar como líquido y no como una mezcla vapor-liquido, al afectar de manera directa al producto esta variable se le considera como una entrada para la RNA con el propósito de entrenar la red con mayor precisión.

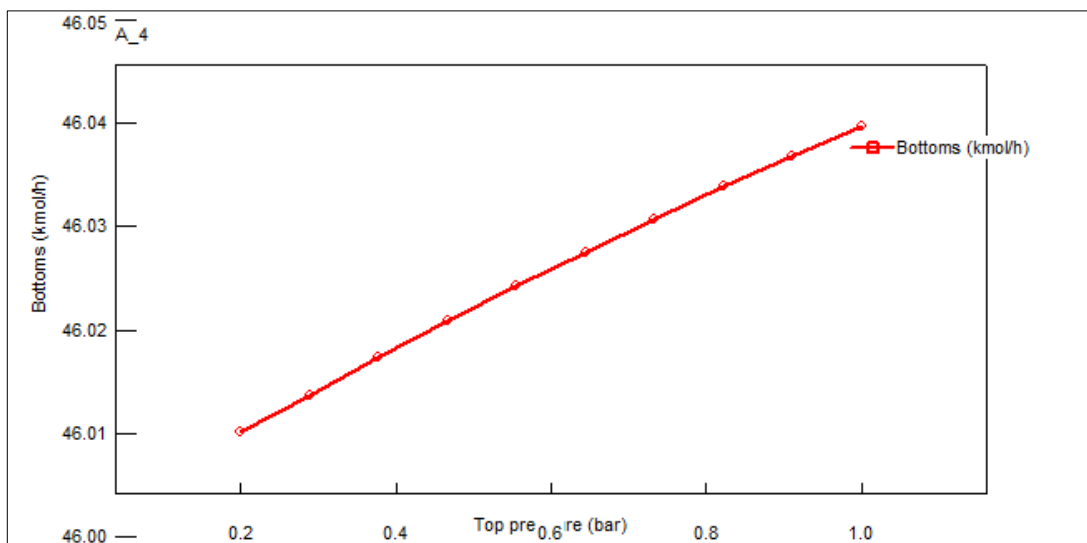


Ilustración 9-4: Resultados del análisis A_4

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.2.2. Resultados del análisis A_5

Los rangos se dan de 70 °C hasta 100 °C de igual manera con el mismo número de análisis propuesto para todos los anteriores, los resultados logrados se muestran en la Ilustración 10-4, el flujo del fondo disminuye de manera considerable al aumentar la temperatura de la etapa superior de la columna de destilación por lo que se obtiene una menor concentración final de FOL siendo los cambios más notables entre los rangos 70 °C a 80 °C con 70 °C se tiene 46.107 kmol/h y con 80 °C se tiene 45.955 kmol/h por lo que esta variable afecta de manera significativa en la concentración de FOL por lo tanto se le considera como una entrada a tener en cuenta para el entrenamiento de la red neuronal.

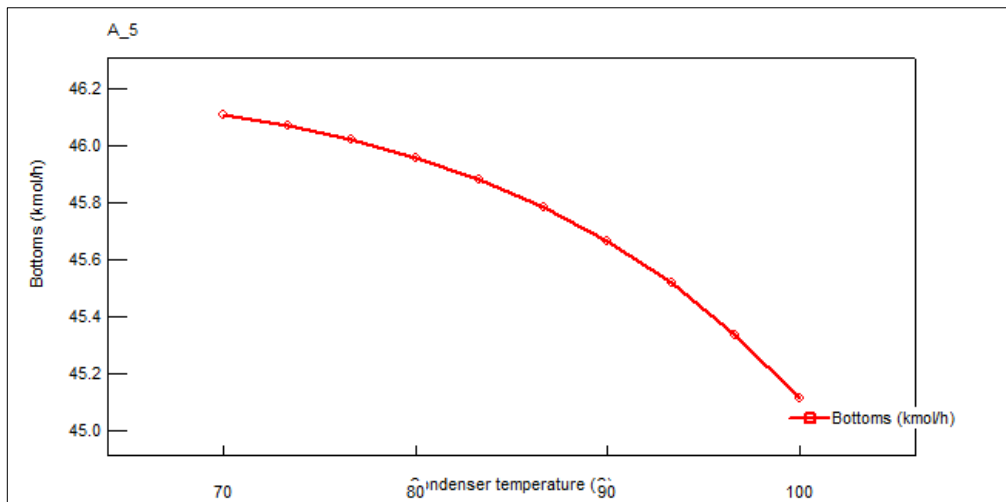


Ilustración 10-4: Resultados del análisis A_5

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.4.2.3. Resultados del análisis A_6

Los rangos determinados son de 300 kW entre 500 kW con el fin de apreciar de mejor manera los resultados se indican en la Ilustración 11-4, al aumentar de manera considerable el trabajo del rehervidor en la columna de destilación el flujo molar del fondo decrece y sería un gasto de energía innecesario debido a que no se obtienen mejores resultados al gastar más energía en el rehervidor el cambio más notorio fue al momento de pasar de 300kW a 411.11 kW con 300kW se tiene un flujo molar de 46.212 kmol/h y con 411.11 kW se obtuvo 45.985 kmol/h por lo que al presentar esta disminución en la concentración y representar un gasto de energía en el proceso el aumentar el trabajo en el rehervidor esta variable no es considerada como una entrada en la RNA.

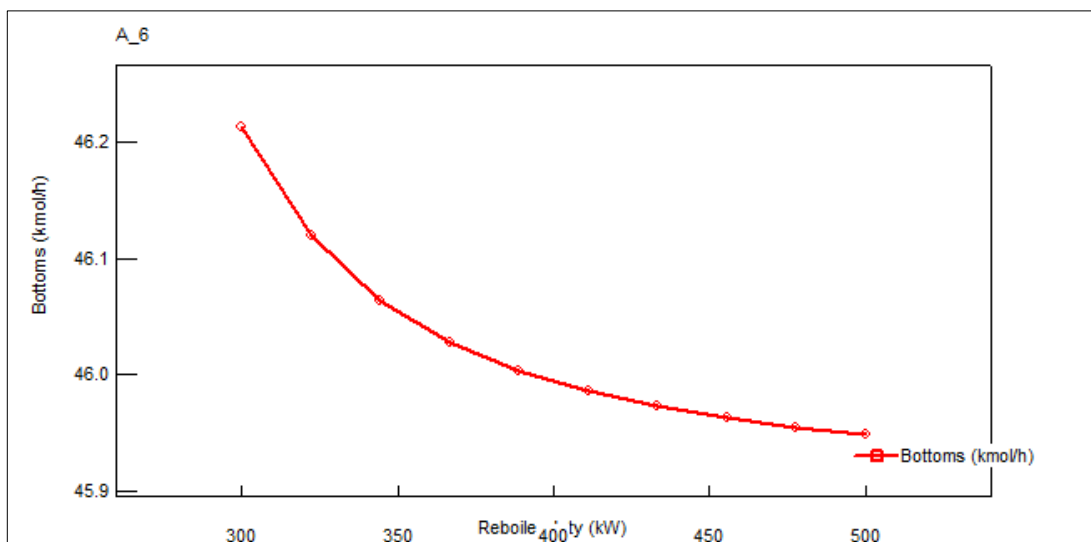


Ilustración 11-4: Resultados del análisis A_6

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.5. Resultados del entrenamiento de la RNA

Durante el entrenamiento de la RNA se aplican los algoritmos de entrenamiento disponibles en MATLAB modificando su configuración, el número de neuronas ocultas inicia en 10 y finaliza en 100, el desempeño de la RNA es puesto a prueba mediante el MSE y R. Mediante la modificación del código en la línea 93 se cambia el algoritmo de entrenamiento, el número de neuronas ocultas se cambia en la línea 96, el código está disponible en el Anexo C. Los resultados logrados para cada uno de los entrenamientos se indican en la Tabla 7-4.

Tabla 7-4: Resultados del entrenamiento de la RNA

Número de neuronas	Levenberg-Marquardt		Bayesian Regularization		Scale Conjugate Gradient	
	MSE	R	MSE	R	MSE	R
10	0.0007854	0.994	0.0042	0.946	0.0183	0.756
20	0.0022	0.971	0.00059092	0.994	0.0028	0.955
30	0.004	0.939	0.011	0.875	0.0035	0.935
40	0.0029	0.945	0.0156	0.862	0.0036	0.947
50	0.013	0.834	0.0037	0.956	0.0087	0.896
60	0.0115	0.829	0.0029	0.973	0.0129	0.762
70	0.0174	0.683	0.0124	0.87	0.0129	0.789
80	0.0153	0.829	0.0088	0.882	0.0465	0.528
90	0.0235	0.816	0.0055	0.995	0.0404	0.682
100	0.0349	0.624	0.0167	0.817	0.0438	0.544

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Con el fin de tener una mejor comparación entre los diferentes algoritmos los datos del MSE y R para los algoritmos LM y SCG se toma el valor de la validación, en el caso del algoritmo BR se toma el valor de las pruebas debido a que el algoritmo solo cuenta con un resultado a diferencia de los dos anteriores algoritmos. Para cada algoritmo de entrenamiento modificando el número de neuronas ocultas, las configuraciones óptimas para las neuronas fueron de 10 para LM, 20 para BR y 20 para SCG el algoritmo, en cuanto los algoritmos que presentaron mejores resultados fueron; LM (MSE= 0.0007854 y R = 0.9905) y BR (MSE=0.00059092 y R= 0.994).

Las ilustraciones 12-4 (A), 12-4 (B) y 12-4 (C) representan los errores de entrenamiento, validación y prueba frente al número de iteraciones para cada modelo de RNA. El error disminuye conforme se realiza más entrenamientos y el algoritmo finaliza después superar las limitaciones de error máximo por cada iteración.

Como se indica en las ilustraciones 12-4 (A), 12-4 (B) y 12-4 (C), los algoritmos de entrenamiento de la RNA-LM, RNA-BR y RNA-SCG finalizan en 24, 422 y 66 iteraciones (debido al error de validación), si bien los errores de entrenamiento son lo suficientemente pequeños para los tres algoritmos de entrenamiento. En el caso del algoritmo BR ocupa más iteraciones debido al tiempo

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

En los análisis de regresión en las ilustraciones 12-4(D), 12-4(E) y 12-4(F) muestran las salidas de la red con relación a los objetivos para las muestras de entrenamiento, validación y prueba. El mejor ajuste se daría cuando los datos estén en una línea de 45 grados, donde las salidas de la red son iguales a los objetivos ($R=1$). Las salidas para los modelos RNA-LN y RNA-BR, tienen un rendimiento levemente superior al de la RNA-SCG en cambio los modelos RNA-LN y RNA-BR sus salidas se observan que siguen muy bien los objetivos en cada etapa del entrenamiento.

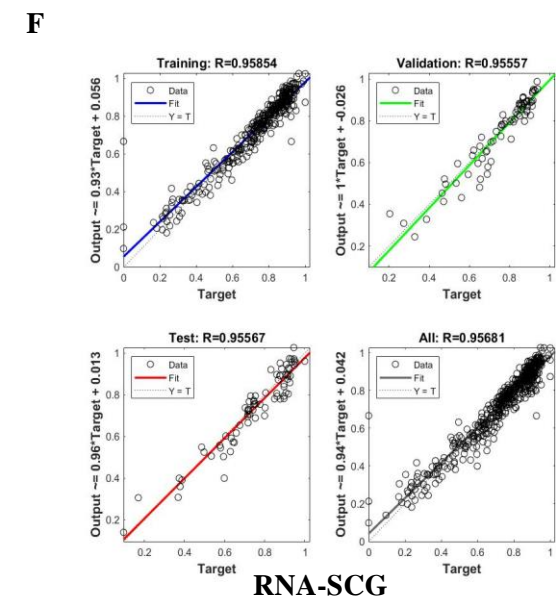
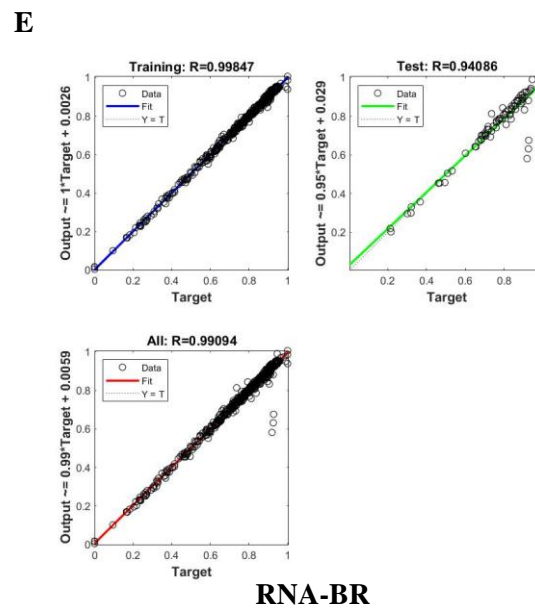
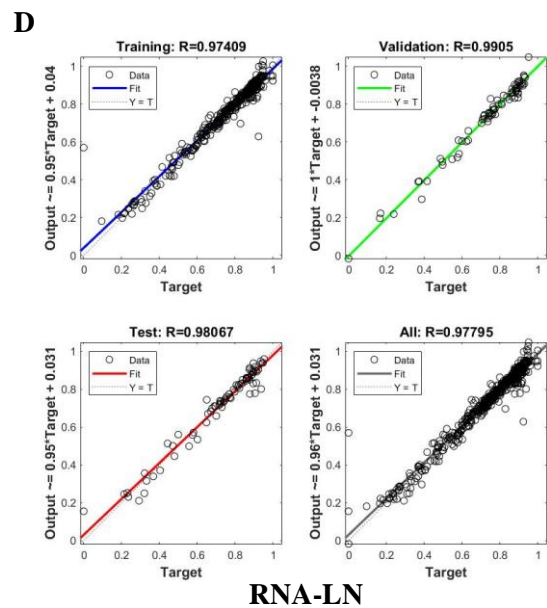
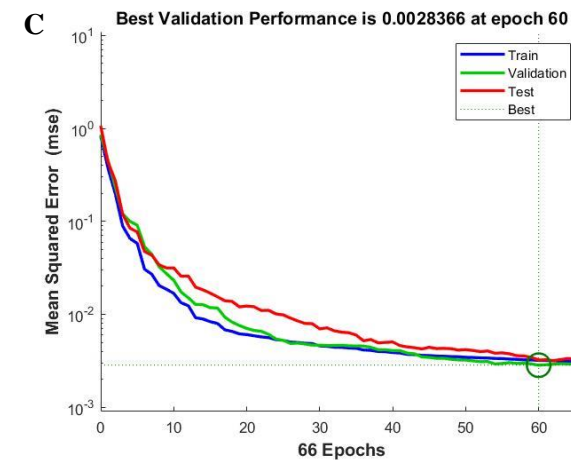
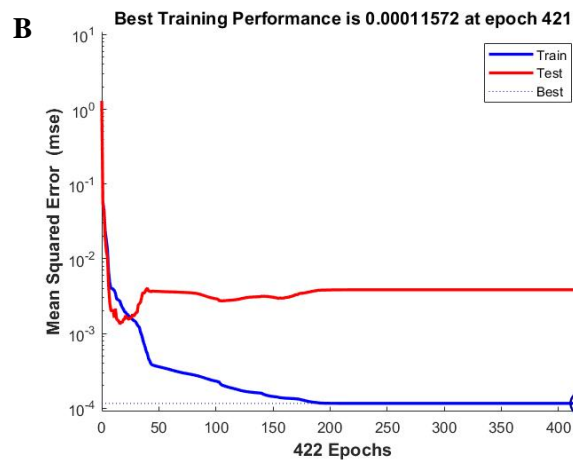
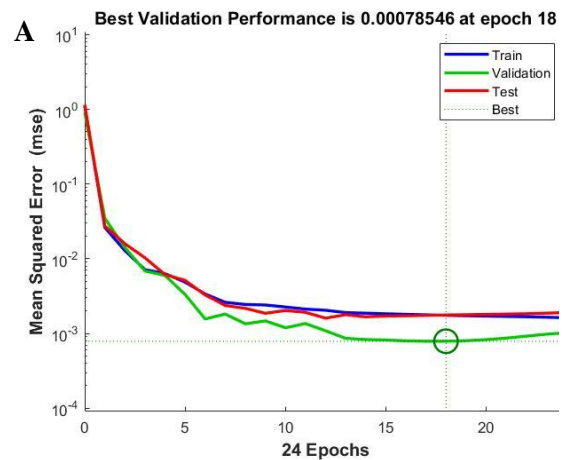


Ilustración 12-4: Comparación entre las mejores configuraciones para cada algoritmo de entrenamiento

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Al tener resultados similares entre las modelos RNA-LN y RNA-BR se decide tomar el modelo RNA-LN porque ocupa menos tiempo para el entrenamiento. Además, su capacidad de predicción se pone a prueba mediante una validación externa y análisis estadísticos para que la respuesta de la RNA esa satisfactoria y se logre introducir cualquier nueva entrada y conseguir resultados validos con el menor error posible.

4.6. Reporte completo de resultados de la RNA

Luego de tener la mejor configuración para la RNA se ejecutó un último entrenamiento con el siguiente diseño: 10 neuronas ocultas y se entrenó con una base de datos de 175 datos con 4 entradas y 3 salidas mediante el algoritmo Levenberg-Marquardt, con un tiempo de ejecución de <1 segundo.

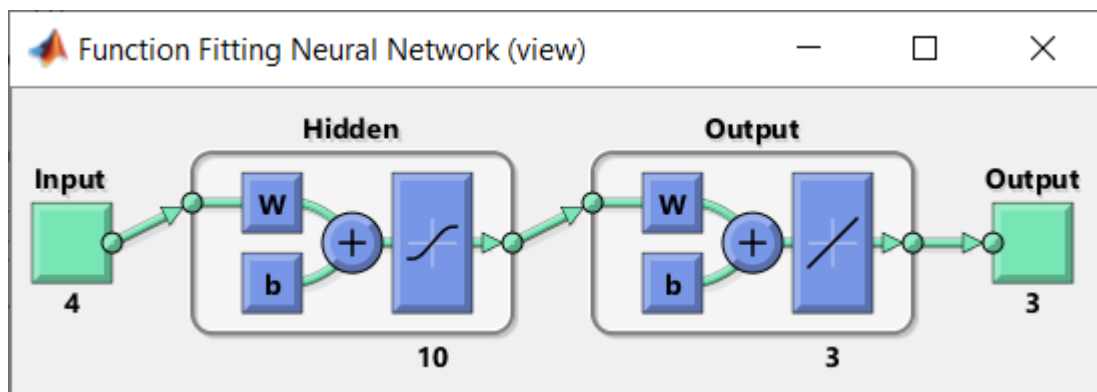


Ilustración 13-4: Esquemización de la RNA en MATLAB

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Tabla 8-4: MSE en cada etapa de ajuste de la RNA

Etapa	MSE
trainPerformance (Entrenamiento)	6.61E-04
valPerformance (Validación)	9.53E-04
testPerformance (Prueba)	0.0119
performance (Desempeño total)	0.0024

Realizado por: Capelo, J., 2022.

En la Tabla 8-4 se observa los errores cuadráticos medios para cada etapa del ajuste de la RNA, entrenamiento, validación y prueba, el valor que tiene un mayor interés es el de la etapa de validación y entrenamiento. El error se reduce al tener valores más próximos a cero, esto me indica que resultados como 6.61E-04 y 9.53E-04 son tolerables para el correcto funcionamiento de la RNA.

4.6.1. Desempeño de la RNA

Los resultados para medir el desempeño de la RNA se indican en la Ilustración 15-4. Estos revelan el grado de acercamiento de la RNA en las cada una de las etapas que lo conforman, entrenamiento, validación y prueba. El coeficiente total es de 0.96735, enseñando que la correlación entre salidas (Output) y los objetivos (Target) es aproximadamente lineal. En la Ilustración 14-4, representa el avance del MSE conforme progresan las iteraciones de cada etapa, el MSE mayor se encuentra en la etapa de prueba.

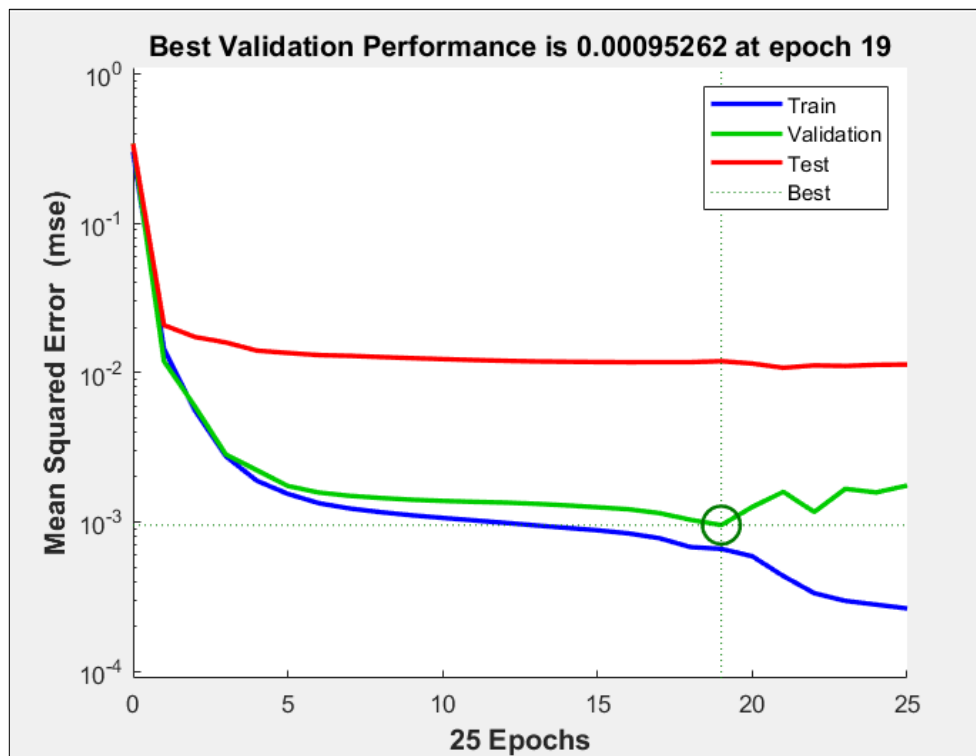


Ilustración 14-4: Progreso del MSE durante el entrenamiento

Realizado por: Capelo, J., 2022.

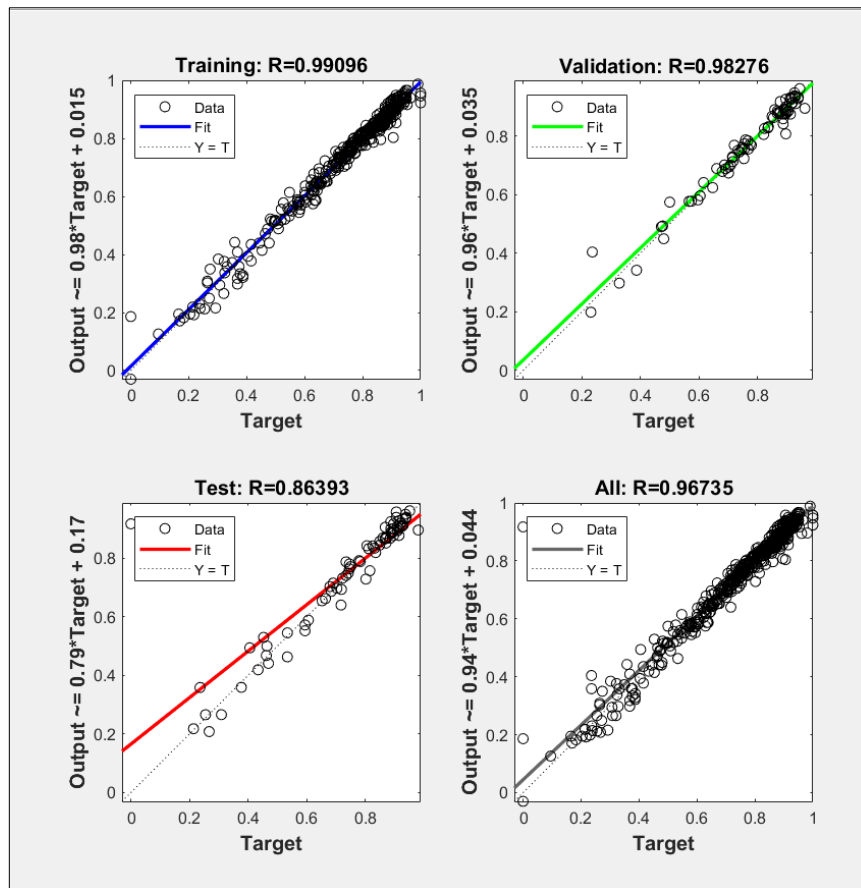


Ilustración 15-4: Resultados de la capacidad predictiva de la RNA

Realizado por: Capelo, J., 2022.

4.7. Resultados de la predicción de valores reales de la RNA

En el Anexo F se hallan los resultados del error porcentual de los 175 datos usados en el proceso de entrenamiento, estos errores son más bajos en comparación con los que se consiguieron con los 25 datos diferentes usados para el proceso de validación externa de la RNA.

En el Anexo G se tiene los errores porcentuales para las predicciones de la RNA, empleando los datos para la validación en cada salida se compran los resultados obtenidos en DWSIM, determinando un error promedio para cada salida. Para la primera salida la fracción molar de FOL en el fondo de la columna (X_{FOL}) es de 0.6806%, para la segunda salida la fracción molar de H_2O en el destilado de columna (X_{H_2O}) es de 3.2008% y para la última salida el porcentaje de conversión de FAL en la reacción (C_{FAL}) es de 0.6819%.

Las predicciones ejecutadas por la RNA son muy precisas al momento de predecir la concentración final de FOL a la salida de la columna, sin embargo, su predicción disminuye de manera considerable en la fracción molar de H_2O , este aumento del error en esta salida se debe a la dispersión que existe en los datos usados para entrenar la RNA en esta salida, pero el porcentaje de error promedio sigue siendo aceptable.

4.7.1. Análisis de los datos predichos por la RNA

Al tener los resultados de los datos predichos por la RNA se interpretan mediante gráficos con una comparación entre resultados obtenidos de manera experimental en DWSIM y los resultados predichos por la RNA, se lo divide en dos secciones: para los datos usados en el entrenamiento (175) y para la validación externa (25).

4.7.1.1. Datos del entrenamiento

Fracción molar de FOL en el fondo de la columna

Durante el proceso de entrenamiento en la predicción de la concentración final del FOL(X_{FOL}) tiene un error promedio del 0.2701%, en la Ilustración 16-4 se evidencia la poca presencia de valores atípicos.

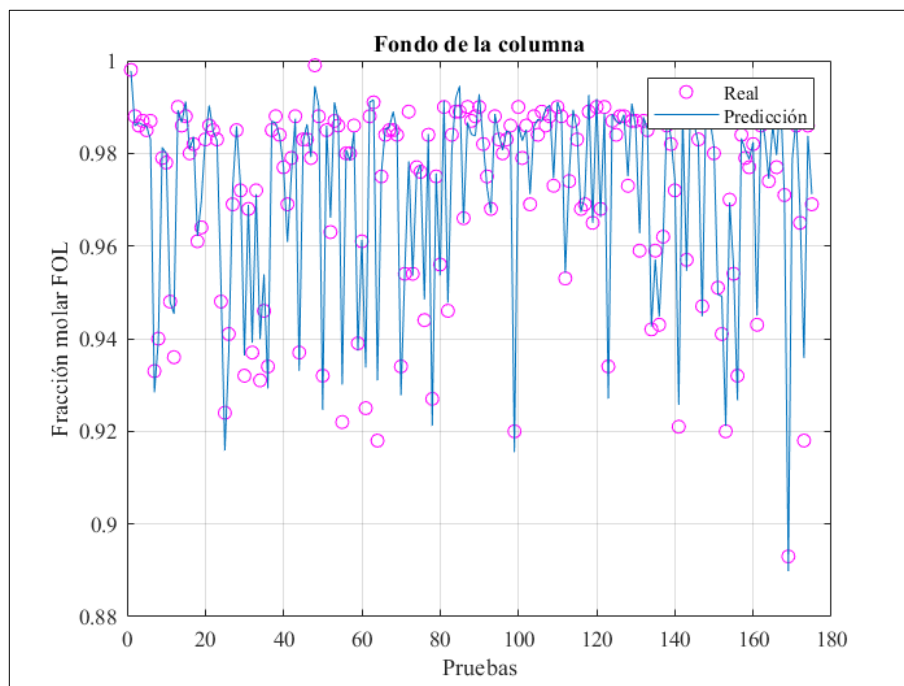


Ilustración 16-4: Fracción molar de FOL real vs predicho en el fondo de la columna

Realizado por: Capelo, J., 2022.

El error de las predicciones con los datos en entrenamiento es bajo lo que indica la buena capacidad de predicción de la RNA frente a la fracción molar final de FOL en la columna de destilación, a pesar de contar con valores atípicos las gráficas se acoplan debido al pequeño porcentaje de error que existe.

Fracción molar de H₂O en el destilado de la columna

En el destilado de la columna se aprecia un error porcentual medio de 1.6886% en la predicción de la fracción molar de H₂O, como se indica en la Ilustración 17-4, existen 11 valores atípicos en comparación de las otras salidas predichas es la que tiene el mayor error, pero siguen siendo valores de error considerados inferiores para las predicciones durante el proceso de entrenamiento.

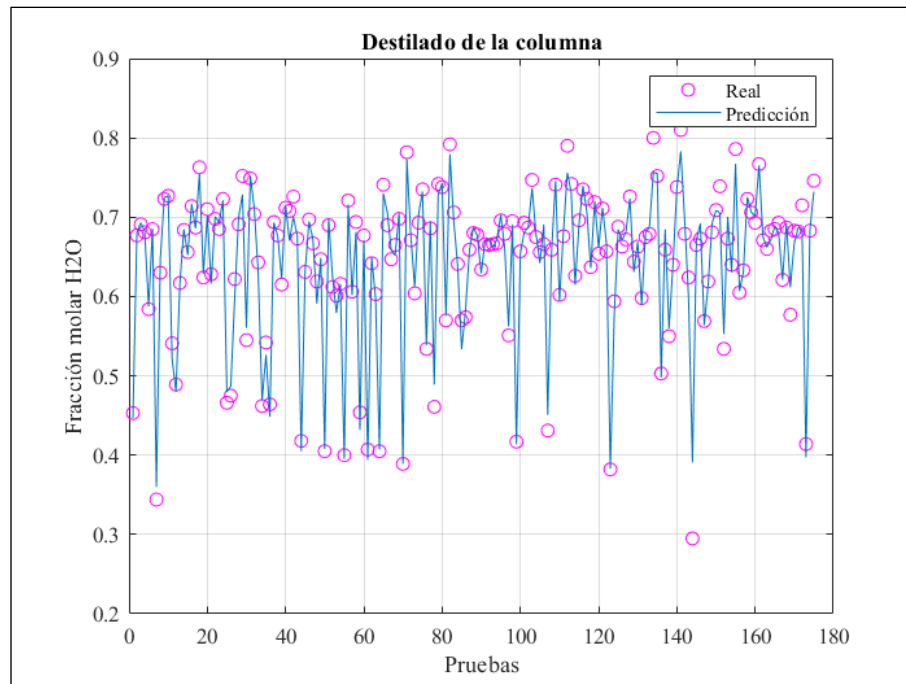


Ilustración 17-4: Fracción molar de H₂O real vs predicho en el destilado de la columna

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Porcentaje de conversión de FAL en la reacción

El error porcentual promedio para el porcentaje de conversión de FAL en la reacción producida en el reactor es de 0.6819%, respecto a la presencia de valores atípicos como se muestra en la Ilustración 18-4 casi no existen de manera considerable por lo que se tiene una buena predicción con los valores de entrenamiento para la RNA.

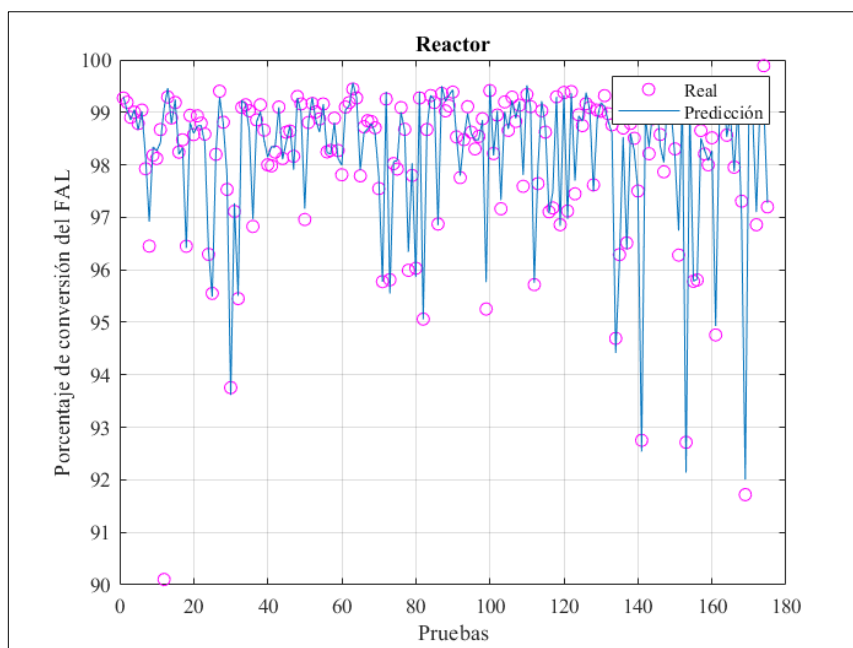


Ilustración 18-4: Porcentaje de conversión del FAL real vs predicho en el reactor

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Al observar los tres gráficos que comparan los valores predichos por la RNA y los valores obtenidos desde el simulador, tienen desfases las gráficas eso se debe al $MSE = 6.61E-04$ pero al ser un valor que se aproxima a cero, queda manifestada la aptitud de aprendizaje de la RNA.

4.7.1.2. Datos de la validación externa

Fración molar de FOL en el fondo de la columna

En la Ilustración 19-4 indica la predicción para la concentración final de FOL en la corriente de fondo de la columna (S-08), mediante una comparación entre los datos de DWSIM (Real) y la predicción hecha con la RNA (Predicción), se tiene una correlación considerable con la poca presencia de valores atípicos esto se ve reflejado en el error promedio porcentual el cual es de 0.6806%.

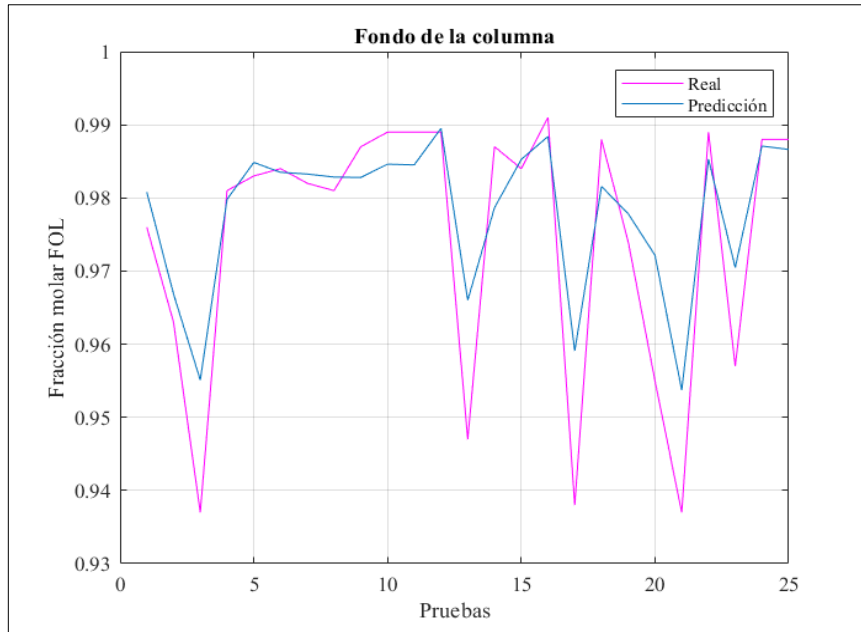


Ilustración 19-4: Fracción molar de FOL en el fondo de la columna en la validación

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Fracción molar de H₂O en el destilado de la columna

Para la corriente del destilado de la columna (S-07) las predicciones fueron menos precisas como se puede ver en la Ilustración 20-4, en la fracción molar de H₂O predicha por la RNA se obtuvo un error promedio porcentual de 3.2008%, se puede evidenciar que existe una mayor presencia de valores atípicos.

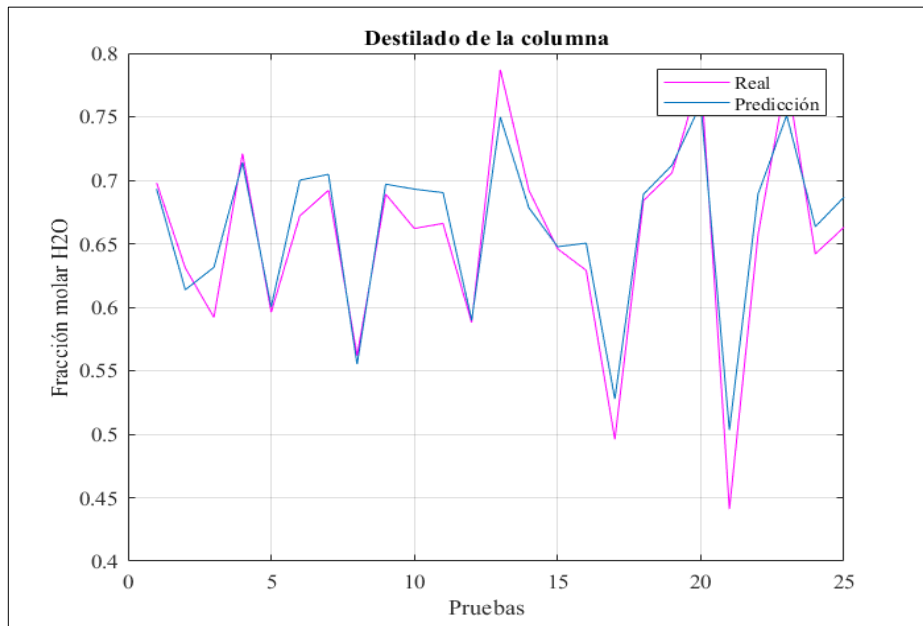


Ilustración 20-4: Fracción molar de H₂O en el destilado de la columna en la validación

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Porcentaje de conversión de FAL en la reacción

En las predicciones realizadas por la RNA en el porcentaje de conversión de FAL en el reactor (RC), como se muestra en la Ilustración 21-4, se tiene mayor cantidad de valores atípicos con un margen de error porcentual medio de 0.6819%.

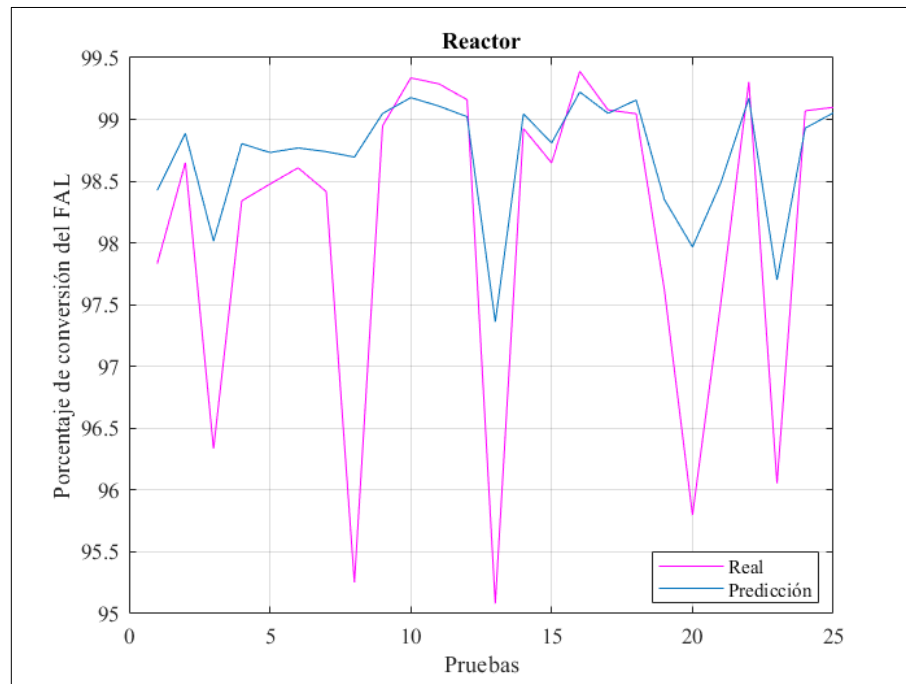


Ilustración 21-4: Porcentaje de conversión del FAL en el reactor en la validación

Realizado por: Capelo, J., 2022.

Los gráficos de la validación externa tienen en cuenta un grado de coincidencia considerable entre los resultados de la simulación en DWSIM (Real, curva morada) y los resultados predichos por la RNA (Predicción, curva azul).

El resultado que más presentó un desfase ligero considerable fue en la predicción de la fracción molar de H_2O , esto se debe al error porcentual que tiene cuenta con varios valores atípicos. Sin embargo, la RNA tiene un funcionamiento adecuado en la validación externa con nuevas entradas, con el fin de demostrar la confiabilidad de la RNA, en la siguiente sección se indica el análisis estadístico para determinar si la red diseñada tiene la capacidad predictiva necesaria que le permita ser considerada como una herramienta confiable de predicción para la concentración final de FOL.

4.8. Resultados del análisis estadístico en Statgraphics Centurion 19

Para demostrar la confiabilidad de los resultados predichos por la RNA y poner en evidencia su capacidad predictiva, se requiere un análisis estadístico en los resultados predichos y los obtenidos en DWSIM el tipo de análisis que se lleva a cabo es comparativo para establecer el nivel de confianza en la predicción de la fracción molar de alcohol furfurílico, H₂O y el porcentaje de conversión de furfural en la reacción.

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

Tabla 9-4: ANOVA

Fuente	Suma de Cuadrados	GI	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
Fracción molar de FOL en el fondo de la columna					
Entre grupos	0.000151032	1	0.000151032	0.68	0.4142
Intra grupos	0.0106845	48	0.000222593		
Total (Corr.)	0.0108355	49			
Fracción molar de H₂O en el destilado de la columna					
Entre grupos	0.000903125	1	0.000903125	0.16	0.6875
Intra grupos	0.264641	48	0.00551336		
Total (Corr.)	0.265544	49			
Porcentaje de conversión de FAL en la reacción					
Entre grupos	4.18218	1	4.18218	4.03	0.0503
Intra grupos	49.8049	48	1.0376		
Total (Corr.)	53.9871	49			

Realizado por: Capelo, J., 2022.

En la Tabla 9-4 mediante el ANOVA la varianza del grupo de datos se divide en dos: entre grupos y dentro de los grupos. La razón-F me indica la estimación entre los grupos y dentro de los grupos para cada uno se obtuvo: en la fracción molar de alcohol furfurílico es igual a 0.678512, en la fracción molar de H₂O es igual a 0.163807 y en el porcentaje de conversión de furfural en la reacción es igual a 4.03062.

El resultado del Valor-P en todos es igual o superior a 0.05, lo que me indica que no hay una diferencia estadísticamente relevante entre las medias de las dos variables es decir que se tienen un nivel de confianza del 95.00 %.

CONCLUSIONES

- Se desarrolló una RNA capaz de predecir la concentración final de alcohol furfurílico (FOL). Simulando su proceso industrial mediante el simulador DWSIM, se estableció una base de datos para el entrenamiento de la RNA. Utilizando Neuronal Fitting disponible en MATLAB se generó un modelo adecuado capaz de predecir con un error porcentual promedio de 0.2701% para la concentración de FOL.
- El diseño para la obtención de alcohol furfurílico propuesto por Tseng et al., (2015), sirvió como referencia en la comparación de los resultados, como se muestra en la Tabla 3-4, la fracción molar del FOL conseguida fue de 0.9903, al ser un valor próximo comparado con el resultado logrado en la referencia bibliográfica, validando la simulación del proceso para la obtención de FOL. Se debe tener en cuenta que estos resultados se obtuvieron con un componente creado en el propio simulador DWSIM, debido a que el compuesto no se encuentra disponible en la base de datos, por lo que los paquetes termodinámicos a elegir quedan un tanto limitados.
- Se identificaron las variables de diseño que afectan de manera directa a la concentración final del alcohol, en la Tabla 8-3 se muestran todas las variables independientes, las operaciones en donde se encuentran estas variables son: Rector (RC) y Destilación (DC). Con estas variables de diseño, se realizó un análisis de sensibilidad determinando las variables que afectan de manera considerable a la concentración final del FOL, estas fueron; presión en la etapa superior de la columna (P_DC), temperatura en la etapa superior de la columna (T_DC), carga del catalizador (C_RC) y volumen del reactor (V_RC). Estas variables luego del respectivo análisis de sensibilidad se usan como las entradas de la Red Neuronal Artificial. Para las salidas se tomaron las fracciones molares más relevantes de la columna de destilación: la fracción molar de alcohol furfurílico en el fondo de la columna (X_FOL) y la fracción molar de agua en el destilado de la columna (X_H2O). Además, de estas se considera el porcentaje de conversión de furfural en el reactor (C_FAL) como una salida para la RNA.
- Aplicando la herramienta Neuronal Fitting junto con la base de datos creada en las simulaciones hechas en DWSIM, se aplicaron los tres algoritmos de entrenamiento para la RNA; Levenberg-Marquardt (LM), Bayesian Regularization (BR) y Scaled Conjugate Gradient (SCG). Comparándolos se determinó el algoritmo con mejor rendimiento y el número de neuronas ocultas idóneo, el que presentó mejor resultado fue el algoritmo LM, con un MSE de 0.0007854 y R de 0.9905. Se diseñó la RNA con una configuración de: 4 entradas, 10 neuronas ocultas y 3 salidas entrenada con el algoritmo LM. Demostrando una capacidad predictiva satisfactoria de las composiciones molares de FOL y H₂O productos finales de beneficio en la columna de destilación. Además, de esto es capaz de predecir el porcentaje de conversión del furfural en la reacción que se lleva a cabo en el reactor.

- Para la valoración del modelo de RNA diseñado, se empleó 25 diferentes datos como parámetros para las entradas. Los resultados obtenidos en la validación externa predichos por la RNA se compararon con los obtenidos en DWSIM, mediante un análisis estadístico comparativo para las fracciones molares de FOL y H₂O, y para el porcentaje de conversión de furfural en el reactor. Consiguiendo un porcentaje de confianza del 95%, mostrando que no hay diferencias relevantes entre los valores analizados, quedando en evidencia la capacidad predictiva de la RNA y su confiabilidad.

RECOMENDACIONES

- Al obtener una concentración considerable de 2-MF en el destilado se debería establecer una producción simultánea del FOL en conjunto del 2-MF para aprovechar la cantidad que se está generando como coproducto puesto que también es un producto químico que se puede aprovechar y producir de manera sostenible.
- Para tener mejores resultados en la creación del componente se puede consultar base de datos de otros simuladores que si cuentan con el componente y realizar los cambios de unidades requeridas entre estos para evitar ningún tipo de dificultad al momento de simular.
- En el diseño del proceso industrial para la obtención de alcohol furfurílico se importante tener en cuenta un análisis de coste total anual (TAC), de todo el proceso siempre buscando tener un menor costo de producción en el mismo esta variable es una de las que se debería de tener en consideración.
- Las Redes Neuronales Artificiales puede ser aplicadas en todos los procesos químicos como una herramienta predictiva, además, con su uso se podría fundamentar una aplicación computacional didáctica con la capacidad de ser empleada en diferentes procesos químicos y a la disposición de todos los estudiantes que se encuentren con la duda de estudiar nuevos procesos y analizarlos de manera detallada.
- Los datos empleados en el entrenamiento de la RNA deben ser normalizados y quitar valores demasiado atípicos debido a que aumentan el error de la capacidad predictiva final que se alcanzara con la RNA.

BIBLIOGRAFÍA

ADNANI, A., BASRI, M., CHAIBAKHSH, N., RAHMAN, M.B.A. y SALLEH, A.B. "Artificial neural network analysis of lipase-catalyzed synthesis of sugar alcohol ester". *Industrial Crops and Products* [en línea], 2011, vol. 33, no. 1, pp. 42-48. ISSN 09266690. DOI 10.1016/j.indcrop.2010.08.006. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2010.08.006>.

AUDEMAR, M., WANG, Y., ZHAO, D., ROYER, S., FRANÇOIS, J., LEN, C. y VIGIER, K.D.O. "Synthesis of Furfuryl Alcohol from Furfural :A Comparison between Batch and Continuous Flow Reactors". *Energies* [en línea], 2020, vol. 13, no. Scheme 1, pp. 1-10. DOI 10.3390/en13041002. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/en13041002>.

BAHAR, A., ÖZGEN, C., LEBLEBICIOĞLU, K. y HALICI, U. "Artificial Neural Network Estimator Design for the Inferential Model Predictive Control of an Industrial Distillation Column". *Industrial and Engineering Chemistry Research* [en línea], 2004, vol. 43, no. 19, pp. 6102–6111. DOI 10.1021/ie030585g. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ie030585g>.

BELLETANTE, S., MONTASTRUC, L., MEYER, M., HERMANSYAH, H. y NEGNY, S. "Multiproduct biorefinery optimal design : application to the acetone-butanol-ethanol system". *Oil & Gas Science and Technology* [en línea], 2020, vol. 75, pp. 1-14. DOI 10.2516/ogst/2020002. Disponible en: <https://doi.org/10.2516/ogst/2020002>.

BESLIU-IONESCU, D., TALPEANU, D.C., MIERLA, M. y MUNTEAN, G.M. "On the prediction of geoeffectiveness of CMEs during the ascending phase of SC24 using a logistic regression method". *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics* [en línea], 2019, vol. 193. ISSN 13646826. DOI 10.1016/j.jastp.2019.04.017. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2019.04.017>.

BOLDYREX, A.V., KOMAROV, V.M. y KRICHEVTSOV, B.K. " Liquid-vapor equilibrium in the system water+furfuryl alcohol". *Zhurnal Prikl*, 1973, vol. 46, no. 2338.

BORTS, M., GILCHENOK, N.D., GUREVICH, G. y IGNATEV, V.M. "Kinetics of vapor-phase hydrogenation of furfural on a copper-chromium catalyst". *J. Appl. Chem. USSR*, 1986, vol. 59:1, pp. 114-17.

CABEZAS, I. y PÁEZ, J.D. *Matlab, Toolbox de optimización, Aplicaciones en ciencias económicas* [en línea]. 2010, (Bogota). Disponible en: http://www.fce.unal.edu.co/media/files/UIFCE/Economia/Matlab_toolbox_de_optimizacion.pdf

CAO NHIEN, L., VAN DUC LONG, N., KIM, S. y LEE, M. "Novel reaction-hybrid-extraction-distillation process for furfuryl alcohol production from raw bio-furfural". *Biochemical Engineering Journal* [en línea], 2019, vol. 148, no. November 2018, pp. 143-151. ISSN 1369-703X. DOI 10.1016/j.bej.2019.05.005. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.bej.2019.05.005>.

CAVENDISH MARSHALL CORPORATION. *How it Works: Science and Technology* [en línea]. 3ra ed. New York: Brown Reference Group plc. 2003. [Consulta: 05 febrero 2022]. ISBN 0-7614-7314-4. Disponible en: https://books.google.com.ec/books?id=eEF4rcwcKoUC&printsec=copyright&hl=es&source=gb_s_pub_info_r#v=onepage&q&f=false

CHIA, D.N., DUANMU, F. y SORENSEN, E. "Optimal Design of Distillation Columns Using a Combined Optimisation Approach". *Computer Aided Process Engineering* [en línea], 2021. En: M. TÜRKAY y R. GANI (eds.), , vol. 50, pp. 153-158. ISSN 1570-7946. DOI <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-88506-5.50025-5>. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780323885065500255>.

DDBST. *Online Group Assignment for UNIFAC and PSRK* [en línea]. Group Assignment - DDBST GmbH, 2022. [Consulta: 8 mayo 2022]. Disponible en: <http://www.ddbst.com/unifacga.html>.

EZE, P.C. y MASUKU, C.M. "Vapour-liquid equilibrium prediction for synthesis gas conversion using artificial neural networks". *South African Journal of Chemical Engineering* [en línea] , 2018, vol. 26, no. September, pp. 80-85. ISSN 10269185. DOI 10.1016/j.sajce.2018.10.001. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.sajce.2018.10.001>.

FOO, D.C.Y. y ELYAS, R. "Introduction to Process Simulation". *Chemical Engineering Process Simulation* [en línea], 2017. S.l.: Elsevier Inc., pp. 3-21. ISBN 9780128038710. DOI 10.1016/B978-0-12-803782-9.00001-7. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803782-9.00001-7>.

FRIEND, C.M. y XU, B. "Heterogeneous catalysis: A central science for a sustainable future". *Accounts of Chemical Research* [en línea], 2017. vol. 50, no. 3, pp. 517-521. ISSN 15204898. DOI 10.1021/ACS.ACCOUNTS.6B00510. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00510>.

GAI, H., LIN, K., FENG, Y., XIAO, M., GUO, K. y SONG, H. "Conceptual design of an extractive distillation process for the separation of azeotropic mixture of n-butanol-isobutanol-water". *Chinese Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2018, pp. 2040-2047. ISSN 10049541. DOI 10.1016/j.cjche.2018.05.003. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.05.003>.

GONG, W., CHEN, C., ZHANG, Yong, ZHOU, H., WANG, H., ZHANG, H., ZHANG, Yunxia, WANG, G. y ZHAO, H. "Efficient Synthesis of Furfuryl Alcohol from H₂-Hydrogenation/Transfer Hydrogenation of Furfural Using Sulfonate Group Modified Cu Catalyst". *ACS Sustainable Chemistry and Engineering* [en línea], 2017, vol. 5, no. 3, pp. 2172-2180. ISSN 21680485. DOI 10.1021/acssuschemeng.6b02343. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.6b02343>.

GRAUPE, D. *Principles of artificial neural networks* [en línea]. 2da ed. Chicago: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. 2007. ISBN 9789812706249. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=GmPICgAAQBAJ&printsec=frontcover#v=onepage&q&f=false>

HOYDONCKX, H., VAN RHIJN, W., VAN RHIJIN, W., DE VOS, W. y JACOBS, P. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Furfural and Derivatives*. 7ma ed. 2012. S.l.: s.n. ISBN 978-3-527-32943-4, pp. 285-309.

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

KOOIJMAN, H. y TAYLOR, R. *ChemSep Modeling Separation Processes* [blog]. 2020. [Consulta: 21 abril 2022]. Disponible en: <http://www.chemsep.org/program/index.html>.

LAIZER, W.A. *Process for hydrogenating furfural* [patente], 1937, US2077422A. United States. US2077422A. Disponible en: <https://patentimages.storage.googleapis.com/16/5e/a0/264033e34b4b5c/US2077422.pdf>.

LEE, H. y HSIAO, T. "Design and Simulation of Reactive Distillation Processes". *Epigenetic Biomarkers and Diagnostics* [en línea], 2017, S.l.: Elsevier Inc., pp. 311-353. ISBN 9780128037829. DOI 10.1016/B978-0-12-803782-9.00014-5. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803782-9.00014-5>.

LEE, H.Y., YOU, T.S. y CHEN, C.L. "Energy efficient design of bio-butanol purification process from acetone butanol ethanol fermentation". *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* [en línea], 2022, vol. 130, pp. 1-11. ISSN 18761070. DOI 10.1016/j.jtice.2021.08.003. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.08.003>.

LUYBEN L., W. y CHIEN, I. *Design and Control of Distillation Systems for Separating Azeotropes* [en línea], 2010. S.l.: John Wiley & Sons. ISBN 9780470575802. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?id=vR8BNxZy5WQC>.

MANOHAR, B. y DIVAKAR, S. "An artificial neural network analysis of porcine pancreas lipase catalysed esterification of anthranilic acid with methanol". *Process Biochemistry* [en línea], 2005, vol. 40, no. 10, pp. 3372-3376. ISSN 13595113. DOI 10.1016/j.procbio.2005.03.045. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.procbio.2005.03.045>.

MAROTO VALIENTE, Á. y MUÑOZ ANDRÉS, V. *Operaciones unitarias y reactores químicos* [en línea], Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2013. ISBN 9788436266313. Disponible en: https://books.google.com.ec/books?id=1pxZZ76eTZIC&lpg=PA1&dq=editions%3AAtfb1_qb8TAkC&pg=PT2#v=onepage&q&f=false

MATICH, D.J. *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones*. [en línea], 2001. S.l.: Informática Aplicada a la Ingeniería de Procesos. Disponible en: https://www.fro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/5_anio/orientadora1/monograis/matic-h-redesneuronales.pdf.

MCCABE, W., SMITH, J. y HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7ma ed. New York: McGraw-Hill, 2005. ISBN 9780072848236, pp. 1- 1140.

MEDEIROS, D. *DWSIM – The Open Source Chemical Process Simulator. About DWSIM* [blog]. 2022a. [Consulta: 21 abril 2022]. Disponible en: <https://dwsim.org/index.php/about/>.

MEDEIROS, D. *DWSIM database. List of available Compounds in DWSIM Database* [blog]. 2022b. [Consulta: 6 mayo 2022]. Disponible en: https://dwsim.fossee.in/data/dwsim_fossee_in/List_of_Available_Compounds_in_DWSIM_Database.pdf.

MILLÁN, G.G. y SIXTA, H. "Towards the green synthesis of furfuryl alcohol in a one-pot system from xylose: A review". *Catalysts* [en línea], 2020, vol. 10, no. 10, pp. 1-23. ISSN 20734344. DOI 10.3390/catal10101101. Disponible: <https://doi.org/10.3390/catal10101101>

MISHRA, D.K., KUMAR, S. y SHUKLA, R.S. *Chapter 12 - Furfuryl alcohol—a promising platform chemical* [en línea]. *Biomass, Biofuels, Biochemicals: Recent Advances in Development of Platform Chemicals*. 2020. [Consulta: 20 abril 2022]. S.l.: Elsevier, pp. 323-353. ISBN 9780444643070. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64307-0.00012-3>.

MOHAMMADI, F., BINA, B., KARIMI, H., RAHIMI, S. y YAVARI, Z. "Modeling and sensitivity analysis of the alkylphenols removal via moving bed biofilm reactor using artificial neural networks: Comparison of levenberg marquardt and particle swarm optimization training algorithms". *Biochemical Engineering Journal* [en línea], 2020, vol. 161, pp. 1-39. ISSN 1873295X. DOI 10.1016/J.BEJ.2020.107685. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.bej.2020.107685>.

MULERO, Á., PIERANTOZZI, M., CACHADIÑA, I. y DI NICOLA, G. "An Artificial Neural Network for the surface tension of alcohols". *Fluid Phase Equilibria* [en línea], 2017, vol. 449, pp. 28-40. ISSN 03783812. DOI 10.1016/j.fluid.2017.06.003. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2017.06.003>.

MUÑOZ, R., MONTÓN, J.B., BURGUET, M.C. y DE LA TORRE, J. "Separation of isobutyl alcohol and isobutyl acetate by extractive distillation and pressure-swing distillation: Simulation and optimization". *Separation and Purification Technology* [en línea], 2006, vol. 50, no. 2, pp. 175-183. ISSN 13835866. DOI 10.1016/j.seppur.2005.11.022. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2005.11.022>

OCHOA-ESTOPIER, L.M., JOBSON, M. y SMITH, R. "Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks". *Computers and Chemical Engineering* [en línea], 2013, vol. 59, pp. 178-185. ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2013.05.030. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.05.030>.

PAL, M.P., VAIDYA, B.K., DESAI, K.M., JOSHI, R.M., NENE, S.N. y KULKARNI, B.D. "Media optimization for biosurfactant production by *Rhodococcus erythropolis* MTCC 2794: Artificial intelligence versus a statistical approach". *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology* [en línea], 2009, vol. 36, no. 5, pp. 747-756. ISSN 13675435. DOI 10.1007/s10295-009-0547-6. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s10295-009-0547-6>.

POMEROY, B., GRILC, M. y LIKOZAR, B. "Artificial neural networks for bio-based chemical production or biorefining : A review". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2022, vol. 153, no. June 2021, pp. 1-22. DOI 10.1016/j.rser.2021.111748. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111748>.

PRINS, R., WANG, A. y LI, X. *Introduction to Heterogeneous Catalysis* [en línea]. S.I.: WORLD SCIENTIFIC (EUROPE), Advanced Textbooks in Chemistry. 2016. [Consulta: 14 mayo 2022]. ISBN 978-1-78634-080-1. Disponible en: <https://doi.org/10.1142/q0024>.

PYRGAKIS, K.A., DE VRIJE, T., BUDDE, M.A.W., KYRIAKOU, K., LÓPEZ-CONTRERAS, A.M. y KOKOSSIS, A.C. "A process integration approach for the production of biological iso-propanol, butanol and ethanol using gas stripping and adsorption as recovery methods". *Biochemical Engineering Journal* [en línea], 2016, vol. 116, pp. 176-194. ISSN 1873295X. DOI 10.1016/j.bej.2016.07.014. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.bej.2016.07.014>.

RIVALIN, L., STABAT, P., MARCHIO, D., CACIOLO, M. y HOPQUIN, F. "A comparison of methods for uncertainty and sensitivity analysis applied to the energy performance of new commercial buildings". *Energy and Buildings* [en línea], 2018, vol. 166, pp. 489-504. ISSN 03787788. DOI 10.1016/j.enbuild.2018.02.021. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2018.02.021>

ROJAS, H.A., GUERRA, G.B., MURCIA, J.J. y NUÑEZ, P.R. "OBTENCIÓN DE ALCOHOL FURFURÍLICO A PARTIR DE FURFURAL SOBRE CATALIZADORES DE PLATINO SOPORTADO". *Scientia et Technica* [en línea], 2007, no. 36, pp. 653-657. ISSN 0122-1701. Disponible en:

<https://revistas.utp.edu.co/index.php/revistaciencia/article/view/4917/2727>.

RUTHERFORD, A. *ANOVA and ANCOVA: A GLM Approach* [en línea], 2da ed., 2011. S.l.: Wiley. ISBN 9781118491713. Disponible en: <https://elibro.net/es/lc/epoch/titulos/185473>.

SÁNCHEZ, A. Diseño de un proceso integrado para la producción de alcohol furfurílico a partir de residuos lignocelulósicos [en línea] (Trabajo de fin de grado). Universidad del País Vasco, Escuela de ingeniería de Bilbao, Ingeniería en tecnología industrial. Bilbao.2018. pp. 1-128. Disponible en: <https://core.ac.uk/download/pdf/168407426.pdf>.

SARATH YADAV, E., INDIRAN, T., NAYAK, D., ADITYA KUMAR, C. y SELVAKUMAR, M. "Simulation study of distillation column using Aspen plus". *Materials Today: Proceedings* [en línea], 2020, vol. 48, no. xxxx, pp. 330-337. ISSN 22147853. DOI 10.1016/j.matpr.2020.07.609. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.609>.

SHARMA, N. y SINGH, K. "Model predictive control and neural network predictive control of TAME reactive distillation column". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2012, vol. 59, pp. 9-21. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2012.05.003. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2012.05.003>.

SHIN, Y., SMITH, R. y HWANG, S. "Development of model predictive control system using an artificial neural network: A case study with a distillation column". *Journal of Cleaner Production* [en línea], 2020, vol. 277, no. 124124, pp. 1-14. ISSN 09596526. DOI 10.1016/j.jclepro.2020.124124. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.124124>.

SORIANO, A.N., ORNEDO-RAMOS, K.F.P., MURIEL, C.A.M., ADORNADO, A.P., BUNGAY, V.C. y LI, M.H. "Prediction of refractive index of binary solutions consisting of ionic liquids and alcohols (methanol or ethanol or 1-propanol) using artificial neural network". *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* [en línea], 2016, vol. 65, pp. 83-90. ISSN 18761070. DOI 10.1016/j.jtice.2016.05.031. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jtice.2016.05.031>.

STATGRAPHICS TECHNOLOGIES. *STATGRAPHICS*® *Centurion 19 User Manual*. [en línea]. 2020. [Consulta: 28 junio 2022]. Disponible en: https://402067.fs1.hubspotusercontent-na1.net/hubfs/402067/Manuals/Statgraphics_Centurion_19_User_Guide.pdf.

TSENG, Y.T., WANG, W.J., WARD, J.D. y LEE, H.Y. "Design and control of a process to produce furfuryl alcohol". *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* [en línea], 2015, vol. 51, pp. 44-52. ISSN 18761070. DOI 10.1016/j.jtice.2015.01.001. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jtice.2015.01.001>.

TSENG, Y.T., WARD, J.D. y LEE, H.Y. "Design and control of a continuous multi-product process with product distribution switching: Sustainable manufacture of furfuryl alcohol and 2-methylfuran". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2016, vol. 105, pp. 10-20. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2016.04.003. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2016.04.003>.

UTRGV. *MATLAB* [blog]. 2020. [Consulta: 21 abril 2022]. Disponible en: <https://www.utrgv.edu/it/software/matlab/index.htm>.

VEZA, I., AFZAL, A., MUJTABA, M.A., TUAN HOANG, A., BALASUBRAMANIAN, D., SEKAR, M., FATTAH, I.M.R., SOUDAGAR, M.E.M., EL-SEESY, A.I., DJAMARI, D.W., HANANTO, A.L., PUTRA, N.R. y TAMALDIN, N. "Review of artificial neural networks for gasoline, diesel and homogeneous charge compression ignition engine: Review of ANN for gasoline, diesel and HCCI engine". *Alexandria Engineering Journal* [en línea], 2022, vol. 61, no. 11, pp. 8363-8391. ISSN 11100168. DOI 10.1016/j.aej.2022.01.072. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.01.072>.

WANG, X., XIE, L., TIAN, P. y TIAN, G. "Design and control of extractive dividing wall column and pressure-swing distillation for separating azeotropic mixture of acetonitrile/N-propanol". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* [en línea], 2016, vol. 110, pp. 172-187. ISSN 02552701. DOI 10.1016/j.cep.2016.10.009. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2016.10.009>.

XU, C., ZHENG, L., LIU, J. y HUANG, Z. "Furfural hydrogenation on nickel-promoted Cu-containing catalysts prepared from hydrotalcite-like precursors". *Chinese Journal of Chemistry* [en línea], 2011, vol. 29, no. 4, pp. 691-697. ISSN 1001604X. DOI 10.1002/cjoc.201190142. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/cjoc.201190142>.

ZEITSCH, K.J. *The Chemistry and Technology of Furfural and its Many By-Products* [en línea]. 2000. [Consulta: 10 de abril]. Amsterdam, New York: Sugar Series Vol 13. Elsevier B.V. ISBN 9780080528991. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/bookseries/sugar-series/vol/13/suppl/C>.



ANEXOS

ANEXO A: BASE DE DATOS CREADOS PARA LA RNA

N°	Entradas				Salidas		
	P_DC	T_DC	C_RC	V_RC	X_FOL	X_H2O	C_FAL
1	0.15	98	1163	20	0.998	0.453	99.272
2	0.89	88	871	25	0.988	0.677	99.192
3	0.86	88	665	26	0.986	0.691	98.905
4	0.54	82	1156	16	0.987	0.681	99.003
5	0.27	99	1081	14	0.985	0.584	98.786
6	0.74	83	869	22	0.987	0.685	99.042
7	0.89	70	758	12	0.933	0.344	97.926
8	0.61	75	1184	5	0.940	0.630	96.452
9	0.84	92	532	19	0.979	0.723	98.182
10	0.81	90	577	17	0.978	0.727	98.121
11	0.98	83	925	15	0.948	0.541	98.672
12	0.66	71	756	27	0.936	0.489	90.102
13	0.12	72	1100	24	0.990	0.617	99.292
14	0.48	82	930	18	0.986	0.684	98.892
15	0.78	98	985	23	0.988	0.656	99.187
16	0.44	82	550	19	0.980	0.714	98.242
17	0.3	82	546	22	0.982	0.687	98.477
18	0.42	83	688	8	0.961	0.763	96.449
19	0.82	82	752	23	0.964	0.624	98.942
20	0.9	90	643	20	0.983	0.710	98.576
21	0.21	85	611	28	0.986	0.628	98.933
22	0.67	83	730	21	0.985	0.698	98.794
23	0.5	91	868	15	0.983	0.685	98.585
24	0.83	86	766	7	0.948	0.723	96.295
25	0.89	77	775	6	0.924	0.466	95.551
26	0.91	78	1044	10	0.941	0.475	98.200
27	0.5	70	1041	30	0.969	0.622	99.403
28	0.75	90	968	16	0.985	0.691	98.812
29	0.62	81	640	12	0.972	0.752	97.531
30	0.15	99	562	6	0.932	0.545	93.756
31	0.57	89	660	10	0.968	0.749	97.113
32	0.92	88	935	5	0.937	0.704	95.452
33	0.65	77	976	21	0.972	0.643	99.094
34	0.76	73	713	30	0.931	0.462	99.143
35	0.94	82	698	27	0.946	0.542	99.029
36	0.97	79	681	9	0.934	0.464	96.826
37	0.95	92	672	24	0.985	0.694	98.856
38	0.95	90	859	25	0.988	0.677	99.145
39	0.31	98	593	23	0.984	0.615	98.660
40	0.77	100	663	14	0.977	0.712	98.001
41	0.5	73	1186	8	0.969	0.708	97.981

42	0.91	89	892	12	0.979	0.726	98.244
43	0.56	84	1077	19	0.988	0.673	99.100
44	0.95	76	906	11	0.937	0.418	98.122
45	0.32	96	747	18	0.983	0.631	98.622
46	0.99	99	613	22	0.983	0.697	98.644
47	0.24	87	925	11	0.979	0.667	98.162
48	0.34	91	1154	23	0.999	0.619	99.302
49	0.29	82	781	28	0.988	0.647	99.160
50	0.76	70	798	8	0.932	0.405	96.959
51	0.82	93	1029	15	0.985	0.690	98.806
52	0.74	79	963	23	0.963	0.612	99.169
53	0.24	92	975	19	0.987	0.601	99.008
54	0.27	93	707	23	0.986	0.616	98.875
55	0.99	76	1053	21	0.922	0.400	99.159
56	0.55	82	822	13	0.980	0.721	98.246
57	0.27	99	766	14	0.980	0.606	98.275
58	0.96	90	658	25	0.986	0.694	98.889
59	0.99	79	907	12	0.939	0.454	98.273
60	0.67	79	1096	8	0.961	0.677	97.811
61	0.86	73	928	22	0.925	0.407	99.100
62	0.57	97	836	27	0.988	0.642	99.186
63	0.21	83	1123	30	0.991	0.603	99.444
64	0.9	74	885	29	0.918	0.405	99.274
65	0.63	83	773	11	0.975	0.741	97.791
66	0.66	91	652	22	0.984	0.690	98.725
67	0.45	97	717	22	0.985	0.647	98.840
68	0.25	80	540	29	0.985	0.665	98.824
69	0.61	85	795	18	0.984	0.698	98.705
70	0.86	72	873	9	0.934	0.389	97.548
71	0.64	88	676	7	0.954	0.782	95.776
72	0.9	87	1195	21	0.989	0.671	99.255
73	0.19	98	1011	5	0.954	0.604	95.811
74	0.58	100	731	13	0.977	0.693	98.023
75	0.75	88	696	13	0.976	0.735	97.921
76	0.88	80	971	21	0.944	0.534	99.090
77	0.65	94	997	14	0.984	0.686	98.677
78	0.73	72	1054	5	0.927	0.461	95.991
79	0.84	89	715	12	0.975	0.742	97.798
80	0.52	99	717	7	0.956	0.738	96.029
81	0.1	78	1017	25	0.990	0.570	99.273
82	0.87	95	702	6	0.946	0.792	95.062
83	0.78	85	926	15	0.984	0.706	98.673
84	0.53	92	1088	25	0.989	0.641	99.319
85	0.26	97	1029	22	0.989	0.570	99.186
86	0.17	97	777	8	0.966	0.574	96.873
87	0.57	80	1169	25	0.990	0.659	99.363
88	0.36	73	907	21	0.987	0.680	99.027
89	0.46	74	728	29	0.988	0.678	99.123

90	0.55	94	1081	28	0.990	0.634	99.385
91	0.48	99	1155	11	0.982	0.666	98.532
92	0.37	99	702	12	0.975	0.665	97.756
93	0.8	83	1029	12	0.968	0.666	98.480
94	0.45	83	935	22	0.988	0.667	99.107
95	0.73	93	834	16	0.983	0.696	98.622
96	0.12	70	849	13	0.980	0.679	98.303
97	0.2	98	1163	11	0.983	0.551	98.542
98	0.74	83	632	26	0.986	0.695	98.878
99	0.99	77	522	8	0.920	0.417	95.254
100	0.57	78	1111	29	0.990	0.657	99.415
101	0.39	89	1190	9	0.979	0.693	98.215
102	0.46	76	696	25	0.986	0.687	98.949
103	0.26	73	671	10	0.969	0.747	97.163
104	0.92	88	764	30	0.988	0.675	99.198
105	0.16	77	528	26	0.984	0.656	98.658
106	0.81	87	928	28	0.989	0.666	99.289
107	0.13	98	921	17	0.986	0.431	98.826
108	0.84	100	1023	21	0.988	0.659	99.135
109	0.6	87	553	14	0.973	0.741	97.591
110	0.17	81	1182	24	0.990	0.602	99.339
111	0.91	92	993	21	0.988	0.676	99.109
112	0.67	83	990	5	0.953	0.790	95.718
113	0.34	73	526	15	0.974	0.742	97.643
114	0.12	74	629	30	0.987	0.626	99.031
115	0.93	99	785	17	0.983	0.696	98.624
116	0.45	90	744	9	0.968	0.735	97.106
117	0.18	75	1197	6	0.969	0.723	97.178
118	0.59	97	936	28	0.989	0.637	99.295
119	0.31	89	688	9	0.965	0.719	96.860
120	0.93	95	996	30	0.990	0.654	99.378
121	0.41	95	975	7	0.968	0.711	97.121
122	0.99	92	1071	29	0.990	0.657	99.394
123	0.84	71	1095	7	0.934	0.382	97.448
124	0.31	99	876	20	0.987	0.594	98.953
125	0.94	100	664	22	0.984	0.688	98.748
126	0.26	72	765	29	0.988	0.663	99.164
127	0.67	89	1010	20	0.988	0.672	99.090
128	0.31	80	1010	8	0.973	0.726	97.618
129	0.33	88	1079	18	0.987	0.644	99.043
130	0.25	76	1177	16	0.987	0.663	99.021
131	1	86	1006	27	0.959	0.598	99.318
132	0.4	81	750	24	0.987	0.675	98.973
133	0.53	91	832	18	0.985	0.679	98.763
134	0.45	76	808	5	0.942	0.800	94.694
135	0.59	96	765	7	0.959	0.752	96.290
136	0.86	78	832	17	0.943	0.503	98.701
137	0.13	84	700	8	0.962	0.659	96.513

138	0.12	87	635	24	0.986	0.550	98.789
139	0.2	86	589	21	0.982	0.640	98.505
140	0.4	81	1118	7	0.972	0.738	97.502
141	0.52	80	601	5	0.921	0.810	92.753
142	0.73	88	749	26	0.987	0.679	99.050
143	0.52	71	606	17	0.957	0.624	98.212
144	0.1	100	963	17	0.988	0.295	98.877
145	0.26	70	871	26	0.989	0.665	99.180
146	0.44	93	619	21	0.983	0.673	98.578
147	0.62	73	885	10	0.947	0.569	97.868
148	0.4	93	978	30	0.990	0.619	99.367
149	0.75	90	1077	17	0.987	0.681	98.994
150	0.42	82	849	13	0.980	0.709	98.303
151	0.5	74	1132	5	0.951	0.739	96.281
152	0.88	80	941	27	0.941	0.534	99.273
153	0.13	86	598	5	0.920	0.673	92.715
154	0.68	78	996	19	0.970	0.640	99.029
155	0.59	84	677	7	0.954	0.786	95.782
156	0.56	72	820	6	0.932	0.605	95.807
157	0.33	96	913	15	0.984	0.633	98.654
158	0.64	85	576	18	0.979	0.723	98.208
159	0.27	80	1197	8	0.977	0.706	98.000
160	0.41	85	728	17	0.982	0.693	98.515
161	0.61	99	551	7	0.943	0.767	94.760
162	0.75	99	718	23	0.986	0.671	98.893
163	0.62	79	1087	28	0.990	0.660	99.388
164	0.78	83	753	17	0.974	0.683	98.565
165	0.53	80	853	21	0.987	0.685	98.967
166	0.15	74	707	13	0.977	0.693	97.955
167	0.4	95	865	28	0.989	0.621	99.239
168	0.19	84	897	8	0.971	0.687	97.307
169	0.92	83	529	5	0.893	0.577	91.718
170	0.61	77	804	25	0.988	0.683	99.088
171	0.81	93	984	18	0.986	0.682	98.952
172	0.12	72	1080	6	0.965	0.715	96.859
173	0.81	72	895	29	0.918	0.414	99.282
174	0.27	71	1187	14	0.986	0.683	99.888
175	0.27	74	768	9	0.969	0.746	97.199
176	0.2	79	726	12	0.976	0.698	97.832
177	0.61	75	909	15	0.963	0.631	98.649
178	0.83	81	1148	5	0.937	0.592	96.335
179	0.61	81	1131	10	0.981	0.721	98.341
180	0.17	90	1027	12	0.983	0.596	98.477
181	0.42	92	552	24	0.984	0.672	98.608
182	0.35	84	1184	10	0.982	0.692	98.416
183	0.18	96	553	19	0.981	0.562	95.252
184	0.55	79	1028	17	0.987	0.689	98.948
185	0.91	91	1176	24	0.989	0.662	99.336

186	0.9	90	1038	25	0.989	0.666	99.288
187	0.17	86	849	26	0.989	0.588	99.159
188	0.89	98	868	5	0.947	0.787	95.081
189	0.56	77	1145	15	0.987	0.692	98.926
190	0.25	88	524	26	0.984	0.646	98.648
191	0.48	93	1130	27	0.991	0.629	99.389
192	0.71	73	690	29	0.938	0.496	99.077
193	0.42	72	667	29	0.988	0.684	99.046
194	0.36	90	900	9	0.974	0.706	97.624
195	0.74	91	521	9	0.955	0.784	95.798
196	0.83	74	1120	7	0.937	0.441	97.507
197	0.48	82	1032	26	0.989	0.657	99.304
198	0.59	83	869	6	0.957	0.782	96.056
199	0.31	87	729	27	0.988	0.642	99.070
200	0.69	95	884	23	0.988	0.663	99.098

Realizado por: Capelo, J., 2022.

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

Diseño y entrenamiento	
Variable	descripción
RNA	Archivo de Excel con la base de datos vinculado en MATLAB.
Datos	Hoja específica del archivo de Excel que tiene la base de datos.
Data	Valores extraídos de Excel.
inputs	Datos de temperatura, presión, carga del catalizador y volumen del reactor.
P_DC	Presión en la etapa superior de la columna.
P_NDC	Presión normalizada en la etapa superior de la columna.
T_DC	Temperatura en la etapa superior de la columna.
T_NDC	Temperatura normalizada en la etapa superior de la columna.
C_RC	Carga del catalizador.
C_NRC	Carga del catalizador normalizada.
V_RC	Volumen del reactor.
V_NRC	Volumen del reactor normalizada.
Inputs_F	Matriz de todas las entradas.
Inputs_N	Matriz de todas las entradas normalizadas.
targets	Datos de salida.
X_FOL	Fracción molar de FOL en el fondo de la columna.
X_NFOL	Fracción molar normalizada de FOL en el fondo de la columna.
X_H2O	Fracción molar de H ₂ O en el destilado de la columna.
X_NH2O	Fracción molar normalizada de H ₂ O en el destilado de la columna.
C_FAL	Porcentaje de conversión de furfural en la reacción.
C_NFAL	Porcentaje normalizado de conversión de furfural en la reacción.
Targets_F	Matriz de todas las salidas.
Targets_N	Matriz de todas las salidas normalizadas.
Pred	Valores normalizados predichos por la RNA.
X_FOLp	Fracción molar de FOL predicho.
X_H2Op	Fracción molar de H ₂ O predicho.
C_FALp	Porcentaje de conversión de furfural predicho.
Val_real	Matriz de resultados predichos por la RNA sin normalizar.

Realizado por: Capelo, J., 2022.

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

```
1 clc
2 clear all
3
4 %Leer Tabla desde Excel
5
6 extract = readtable ('RNA.xlsx', 'Sheet', 'Datos');
7 %Convertir la tabla a Matriz Numérica
8
9 Data = table2array (extract);
10
11 % _____ ENTRADAS _____
12
13 inputs = Data (1:4,:);
14
15 %Presión en la etapa superior de la columna
16
17 P_DC =inputs(1,:);
18
19 %Valor Normalizado
20
21 P_NDC= normalize (P_DC(1,:), 'range');
22
23 %Temperatura en la etapa superior de la columna
24 T_DC = inputs(2,:);
25 %Valor Normalizado
26 T_NDC = normalize (T_DC(1,:), 'range');
27
28 %Carga del catalizador
29 C_RC = inputs (3,:);
30
31 %Valor Normalizado
32 C_NRC = normalize (C_RC(1,:), 'range');
33
34 %Volumen del Reactor
35 V_RC = inputs (4,:);
36
37 %Valor Normalizado
38 V_NRC = normalize (V_RC(1,:), 'range');
39
40 Inputs_F= [P_DC;T_DC;C_RC;V_RC]';
```

```

41 %Entradas Normalizadas finales
42
43 Inputs_N = [P_NDC;T_NDC;C_NRC;V_NRC]';
44
45 % _____ SALIDAS _____
46 targets = Data (5:7,:);
47
48 %Fracción molar de FOL en el fondo de la columna
49 X_FOL = targets (1,:);
50 %Normalización y mínimos y máximos
51 X_NFOL = normalize (X_FOL (1,:), 'range');
52 X_FOL_max=max(X_FOL);
53 X_FOL_min=min(X_FOL);
54
55 %Fracción molar de H2O en el destilado de la columna
56 X_H2O = targets (2,:);
57 %Normalización y mínimos y máximos
58 X_NH2O = normalize (X_H2O (1,:), 'range');
59 X_H2O_max =max(X_H2O);
60 X_H2O_min =min(X_H2O);
61
62 %Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.
63 C_FAL = targets (3,:);
64 %Normalización y mínimos y máximos
65 C_NFAL = normalize (C_FAL (1,:), 'range');
66 C_FAL_max = max(C_FAL);
67 C_FAL_min = min (C_FAL);
68
69 Targets_F = [X_FOL; X_H2O; C_FAL]';
70
71 %Salidas Normalizadas
72 Targets_N = [X_NFOL; X_NH2O;C_NFAL]';
73
74 % Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
75 % Script generated by Neural Fitting app
76 % Created 22-Jun-2022 23:56:25
77 %
78 % This script assumes these variables are defined:
79 %
80 % inputs - input data.
81 % targets - target data.
82 %x = inputs;

```

```

83 %t = targets;
84 %Valores normalizados
85 x = Inputs_N';
86 t = Targets_N';
87
88 % Choose a Training Function
89 % For a list of all training functions type: help nntrain
90 % 'trainlm' is usually fastest.
91 % 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
92 % 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
93 trainFcn = 'trainlm'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.
94
95 % Create a Fitting Network
96 hiddenLayerSize = 10;
97 net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
98
99 % Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions
100 % For a list of all processing functions type: help nnprocess
101 net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
102 net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
103
104 % Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
105 % For a list of all data division functions type: help nndivision
106 net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
107 net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample
108 net.divideParam.trainRatio = 70/100;
109 net.divideParam.valRatio = 15/100;
110 net.divideParam.testRatio = 15/100;
111
112 % Choose a Performance Function
113 % For a list of all performance functions type: help nnperformance
114 net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error
115
116 % Choose Plot Functions
117 % For a list of all plot functions type: help nnplot
118 net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist', ...
119 'plotregression','plotfit'};
120
121 % Train the Network
122 [net,tr] = train(net,x,t);

```

```

123 % Test the Network
124 y = net(x);
125 e = gsubtract(t,y);
126 performance = perform(net,t,y)
127
128 % Recalculate Training, Validation and Test Performance
129 trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
130 valTargets = t .* tr.valMask{1};
131 testTargets = t .* tr.testMask{1};
132 trainPerformance = perform(net,trainTargets,y)
133 valPerformance = perform(net,valTargets,y)
134 testPerformance = perform(net,testTargets,y)
135
136 % View the Network
137 view(net)
138
139 % Plots
140 % Uncomment these lines to enable various plots.
141 %figure, plotperform(tr)
142 %figure, plottrainstate(tr)
143 %figure, ploterrhist(e)
144 %figure, plotregression(t,y)
145 %figure, plotfit(net,x,t)
146
147 % Deployment
148 % Change the (false) values to (true) to enable the following code
    blocks.
149 % See the help for each generation function for more information.
150 if (false)
151 % Generate MATLAB function for neural network for application
152 % deployment in MATLAB scripts or with MATLAB Compiler and Builder
153 % tools, or simply to examine the calculations your trained neural
154 % network performs.
155 genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction');
156 y = myNeuralNetworkFunction(x);
157 end
158 if (false)
159 % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
160 % generation with MATLAB Coder tools.
161 genFunction(net,'myNeuralNetworkFunction','MatrixOnly','yes');
162 y = myNeuralNetworkFunction(x);
163 end

```

```

164  if (false)
165  % Generate a matrix-only MATLAB function for neural network code
166  % generation with MATLAB Coder tools.
167  genFunction(net, 'myNeuralNetworkFunction', 'MatrixOnly', 'yes');
168  y = myNeuralNetworkFunction(x);
169  end
170  if (false)
171  % Generate a Simulink diagram for simulation or deployment with.
172  % Simulink Coder tools.
173  gensim(net);
174  end
175
176  %_____Predicción_____
177
178  %Normalizados
179  Pred = net(Inputs_N(1:end, :));
180  Pred_r = Targets_N';
181
182  %Valores reales - Sin normalizar
183
184  %Fracción molar de FOL en el fondo de la columna
185  X_FOLp= Pred (1, :).*( X_FOL_max- X_FOL_min)+ X_FOL_min;
186
187  %Fracción molar de H2O en el destilado de la columna
188  X_H2Op= Pred (2, :).*( X_H2O_max-X_H2O_min)+X_H2O_min;
189  %Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.
190
191  C_FALp= Pred (3, :).*( C_FAL_max-C_FAL_min)+C_FAL_min;
192
193  %Valores reales predichos por la red
194  Val_real = [X_FOLp;X_H2Op;C_FALp]';

```

ANEXO D: VARIABLES EMPLEADAS PARA LA VALIDACIÓN DE LA RNA

Validación	
Variable	Descripción
RNA	Archivo de Excel con la base de datos vinculado en MATLAB.
Val_RNA	Hoja específica del archivo de Excel que tiene la base de datos.
Dataval	Valores extraídos de Excel.
inputs_val	Datos de temperatura, presión, carga del catalizador y volumen del reactor.
P_VDC	Presión en la etapa superior de la columna para la validación.
P_NVDC	Presión normalizada en la etapa superior de la columna para la validación.
T_VDC	Temperatura en la etapa superior de la columna para la validación.
T_NVDC	Temperatura normalizada en la etapa superior de la columna para la validación.
C_VRC	Carga del catalizador para la validación.
C_NVRC	Carga del catalizador normalizada para la validación.
V_VRC	Volumen del reactor para la validación.
V_NVRC	Volumen del reactor normalizada para la validación.
InputsTotal_V	Matriz de todas las entradas.
InputsTotal_N	Matriz de todas las entradas normalizadas para la validación.
Inputs_DWSIM	Datos de salida del simulador.
Prop_PredV	Valores normalizados predichos por la RNA para la validación.
X_FOL_PredV	Fracción molar de FOL predicho por la RNA para la validación.
X_H2O_PredV	Fracción molar de H ₂ O predicho por la RNA para la validación.
C_FAL_PredV	Porcentaje de conversión de furfural predicho por la RNA para la validación.
Val_realV	Porcentaje de conversión de furfural en la reacción.

Realizado por: Capelo, J., 2022.

ANEXO E: CÓDIGO EN MATLAB DE VALIDACIÓN DE LA RNA

```
1 clear all
2 clc
3 %Leer Tabla desde Excel
4 Extract = readtable('RNA.xlsx', 'Sheet', 'Val_RNA');
5
6 %Convertir la tabla a Matriz Numérica
7 Dataval = table2array(Extract);
8
9 %Cargar el archivo de la RNA
10
11 load('LNRNA.mat');
12
13 % _____ ENTRADA DE DATOS _____
14
15 inputs_val= Dataval(1:4,:);
16
17 %Presión en la etapa superior de la columna
18 P_VDC = inputs_val(1,:);
19
20 %Valor Normalizado
21 P_NVDC = normalize (P_VDC(1,:), 'range');
22
23 %Temperatura en la etapa superior de la columna
24 T_VDC = inputs_val (2,:);
25
26 %Valor Normalizado
27 T_NVDC = normalize (T_VDC(1,:), 'range');
28
29 %Carga del catalizador
30 C_VRC = inputs_val(3,:);
31
32 %Valor Normalizado
33 C_NVRC = normalize (C_VRC(1,:), 'range');
34
35 %Volumen del reactor
36 V_VRC = inputs_val (4,:);
37
38 %Valor Normalizado
39 V_NVRC = normalize (V_VRC(1,:), 'range');
40
41 % _____ ENTRADAS TOTALES _____
```

```

42 %Sin normalizar
43
44 InputsTotal_V = [P_VDC;T_VDC;C_VRC;V_VRC]';
45
46 %Normalizados
47
48 InputsTotal_N = [P_NVDC;T_NVDC;C_NVRC;V_NVRC]';
49
50 % _____ PARÁMETROS PARA TENER EL VALOR REAL _____
51
52 % Salidas DWSIM
53
54 Inputs_DWSIM = Dataval (5:7,:);
55 %Máximos y mínimos
56 %X_VFOL
57 X_VFOL_max=max(Inputs_DWSIM(1,:));
58 X_VFOL_min=min(Inputs_DWSIM(1,:));
59
60 %X_H2O
61
62 X_VH2O_max=max(Inputs_DWSIM(2,:));
63 X_VH2O_min=min(Inputs_DWSIM(2,:));
64
65 %C_FAL
66
67 C_VFAL_max=max(Inputs_DWSIM(3,:));
68 C_VFAL_min=min(Inputs_DWSIM(3,:));
69
70 % _____ VALIDACIÓN RNA _____
71
72 %Predicción salidas
73 Prop_PredV = net (InputsTotal_N(:,1:4)');
74
75 %Valores reales - Sin normalizar
76
77 %Fracción molar de FOL en el fondo de la columna
78
79 X_FOL_PredV= Prop_PredV (1,:).*( X_VFOL_max- X_VFOL_min)+ X_VFOL_min;
80 %Fracción molar de H2O en el destilado de la columna
81
82 X_H2O_PredV= Prop_PredV (2,:).*( X_VH2O_max- X_VH2O_min)+ X_VH2O_min;
83 %Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.

```

```

84 C_FAL_PredV= Prop_PredV (3,:).*( C_VFAL_max- C_VFAL_min)+ C_VFAL_min;
85 %Valores reales predichos por la red
86 Val_realV = [X_FOL_PredV;X_H2O_PredV;C_FAL_PredV]';
87 % ANÁLISIS GRÁFICOS
88 %Valores reales por simulación en DWSIM y valores predichos por la red
    neuronal
89 Real = Inputs_DWSIM;
90 Prediccion = Val_realV';
91
92 %Fracción molar de FOL en el fondo de la columna
93 figure;
94 plot(Real(1,:), 'm')
95 hold on
96 plot (Prediccion (1,:));grid;legend('Real', 'Predicción')
97 xlabel ('Pruebas','FontSize',11,'FontName','Times New Roman')
98 ylabel ('Fracción molar FOL','FontSize',11,'FontName','Times New
    Roman')
99 title ( 'Fondo de la columna','FontSize',11,'FontName','Times New
    Roman')
100
101 %Fracción molar de H2O en el destilado de la columna
102
103 figure;
104 plot(Real(2,:), 'm')
105 hold on
106 plot (Prediccion (2,:));grid;legend('Real', 'Predicción')
107 xlabel ('Pruebas','FontSize',11,'FontName','Times New Roman')
108 ylabel ('Fracción molar H2O','FontSize',11,'FontName','Times New
    Roman')
109 title ( 'Destilado de la columna','FontSize',11,'FontName','Times
    New Roman')
110 %Porcentaje de conversión de FAL en la reacción.
111 figure;
112 plot(Real(3,:), 'm')
113 hold on
114 plot (Prediccion (3,:));grid;legend('Real', 'Predicción')
115 xlabel ('Pruebas','FontSize',11,'FontName','Times New Roman')
116 ylabel ('Porcentaje de conversión del
    FAL','FontSize',11,'FontName','Times New Roman')
117 title ( 'Reactor','FontSize',11,'FontName','Times New Roman')

```

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

Predicción	Salidas								
	Real X_FOL	Predicho X_FOL	Error (%)	Real X_H2O	Predicho X_H2O	Error (%)	Real C_FAL	Predicho C_FAL	Error (%)
1	0.998	0.9978	0.0203	0.453	0.4467	1.3809	99.272	99.2942	0.0223
2	0.988	0.9859	0.2076	0.677	0.6807	0.5469	99.192	99.0355	0.1578
3	0.986	0.9866	0.0636	0.691	0.6930	0.2843	98.905	98.8535	0.0521
4	0.987	0.9862	0.0854	0.681	0.6825	0.2275	99.003	99.0547	0.0522
5	0.985	0.9858	0.0774	0.584	0.5877	0.6268	98.786	98.6668	0.1206
6	0.987	0.9830	0.4042	0.685	0.6859	0.1298	99.042	99.0187	0.0236
7	0.933	0.9284	0.4942	0.344	0.3599	4.6266	97.926	98.1512	0.2300
8	0.940	0.9396	0.0395	0.630	0.6470	2.6926	96.452	96.9174	0.4825
9	0.979	0.9813	0.2308	0.723	0.7246	0.2230	98.182	98.3411	0.1620
10	0.978	0.9800	0.2082	0.727	0.7269	0.0086	98.121	98.2671	0.1489
11	0.948	0.9479	0.0058	0.541	0.5216	3.5849	98.672	98.4153	0.2601
12	0.936	0.9454	1.0003	0.489	0.4799	1.8570	90.102	99.0787	9.9629
13	0.990	0.9893	0.0721	0.617	0.6168	0.0249	99.292	99.4621	0.1713
14	0.986	0.9867	0.0678	0.684	0.6849	0.1308	98.892	98.7859	0.1073
15	0.988	0.9911	0.3175	0.656	0.6522	0.5745	99.187	99.2426	0.0561
16	0.980	0.9809	0.0918	0.714	0.7168	0.3878	98.242	98.1991	0.0437
17	0.982	0.9836	0.1611	0.687	0.6859	0.1605	98.477	98.3271	0.1522
18	0.961	0.9622	0.1202	0.763	0.7551	1.0389	96.449	96.4160	0.0342
19	0.964	0.9697	0.5960	0.624	0.6287	0.7590	98.942	98.8029	0.1406
20	0.983	0.9833	0.0318	0.710	0.7021	1.1146	98.576	98.6006	0.0250
21	0.986	0.9903	0.4367	0.628	0.6163	1.8569	98.933	98.7389	0.1962
22	0.985	0.9848	0.0217	0.698	0.7009	0.4145	98.794	98.7487	0.0458
23	0.983	0.9827	0.0291	0.685	0.6934	1.2224	98.585	98.4193	0.1681
24	0.948	0.9520	0.4210	0.723	0.7213	0.2351	96.295	96.3834	0.0919
25	0.924	0.9158	0.8825	0.466	0.4796	2.9192	95.551	95.4878	0.0662
26	0.941	0.9370	0.4295	0.475	0.4869	2.5074	98.200	98.2337	0.0344
27	0.969	0.9725	0.3610	0.622	0.5972	3.9924	99.403	99.2852	0.1185
28	0.985	0.9859	0.0865	0.691	0.6997	1.2625	98.812	98.7789	0.0335
29	0.972	0.9729	0.0953	0.752	0.7285	3.1238	97.531	97.8046	0.2805
30	0.932	0.9364	0.4670	0.545	0.5604	2.8182	93.756	93.6161	0.1492
31	0.968	0.9689	0.0890	0.749	0.7524	0.4549	97.113	97.2706	0.1623
32	0.937	0.9391	0.2280	0.704	0.7114	1.0580	95.452	95.5055	0.0560
33	0.972	0.9712	0.0815	0.643	0.6312	1.8393	99.094	99.2245	0.1317
34	0.931	0.9399	0.9565	0.462	0.4687	1.4425	99.143	99.1575	0.0146
35	0.946	0.9539	0.8329	0.542	0.5264	2.8762	99.029	98.6629	0.3697
36	0.934	0.9292	0.5105	0.464	0.4483	3.3763	96.826	96.9648	0.1433
37	0.985	0.9869	0.1966	0.694	0.6932	0.1158	98.856	98.8195	0.0370
38	0.988	0.9866	0.1449	0.677	0.6762	0.1123	99.145	99.0120	0.1341
39	0.984	0.9837	0.0354	0.615	0.6226	1.2301	98.660	98.4725	0.1901
40	0.977	0.9769	0.0056	0.712	0.7153	0.4582	98.001	98.1467	0.1487

41	0.969	0.9608	0.8416	0.708	0.6703	5.3295	97.981	98.3478	0.3743
42	0.979	0.9754	0.3646	0.726	0.7007	3.4896	98.244	98.3363	0.0939
43	0.988	0.9875	0.0508	0.673	0.6765	0.5182	99.100	99.0956	0.0044
44	0.937	0.9331	0.4199	0.418	0.4053	3.0317	98.122	98.1068	0.0155
45	0.983	0.9826	0.0429	0.631	0.6321	0.1673	98.622	98.4378	0.1868
46	0.983	0.9863	0.3350	0.697	0.6947	0.3365	98.644	98.7467	0.1041
47	0.979	0.9792	0.0214	0.667	0.6716	0.6903	98.162	97.9068	0.2600
48	0.999	0.9945	0.4494	0.619	0.5912	4.4904	99.302	99.2733	0.0289
49	0.988	0.9902	0.2227	0.647	0.6487	0.2683	99.160	98.9988	0.1626
50	0.932	0.9246	0.7936	0.405	0.4077	0.6747	96.959	97.1656	0.2131
51	0.985	0.9860	0.1002	0.690	0.6987	1.2594	98.806	98.8243	0.0185
52	0.963	0.9661	0.3186	0.612	0.6252	2.1553	99.169	99.2806	0.1126
53	0.987	0.9910	0.4064	0.601	0.5793	3.6055	99.008	98.8468	0.1628
54	0.986	0.9872	0.1180	0.616	0.6160	0.0001	98.875	98.6229	0.2550
55	0.922	0.9301	0.8765	0.400	0.3953	1.1758	99.159	99.1548	0.0042
56	0.980	0.9807	0.0732	0.721	0.7159	0.7132	98.246	98.2330	0.0133
57	0.980	0.9784	0.1660	0.606	0.6020	0.6654	98.275	98.2057	0.0705
58	0.986	0.9846	0.1458	0.694	0.6814	1.8119	98.889	98.8091	0.0808
59	0.939	0.9374	0.1683	0.454	0.4319	4.8675	98.273	98.1196	0.1561
60	0.961	0.9613	0.0323	0.677	0.6706	0.9513	97.811	97.9933	0.1864
61	0.925	0.9338	0.9487	0.407	0.3940	3.1873	99.100	99.0461	0.0544
62	0.988	0.9911	0.3104	0.642	0.6493	1.1404	99.186	99.1230	0.0635
63	0.991	0.9915	0.0520	0.603	0.5985	0.7411	99.444	99.5651	0.1218
64	0.918	0.9310	1.4168	0.405	0.4071	0.5271	99.274	99.2804	0.0064
65	0.975	0.9758	0.0845	0.741	0.7300	1.4828	97.791	97.9035	0.1150
66	0.984	0.9852	0.1218	0.690	0.7063	2.3625	98.725	98.6073	0.1192
67	0.985	0.9856	0.0581	0.647	0.6585	1.7787	98.840	98.6823	0.1595
68	0.985	0.9890	0.4065	0.665	0.6521	1.9390	98.824	98.7860	0.0384
69	0.984	0.9848	0.0802	0.698	0.7049	0.9909	98.705	98.6063	0.1000
70	0.934	0.9278	0.6662	0.389	0.3889	0.0331	97.548	97.7787	0.2364
71	0.954	0.9549	0.0922	0.782	0.7727	1.1934	95.776	95.7715	0.0047
72	0.989	0.9782	1.0875	0.671	0.6771	0.9082	99.255	99.3899	0.1360
73	0.954	0.9536	0.0470	0.604	0.6117	1.2774	95.811	95.5487	0.2737
74	0.977	0.9755	0.1552	0.693	0.7036	1.5324	98.023	98.0635	0.0413
75	0.976	0.9776	0.1609	0.735	0.7324	0.3567	97.921	98.0809	0.1633
76	0.944	0.9484	0.4709	0.534	0.5384	0.8269	99.090	99.0081	0.0826
77	0.984	0.9841	0.0148	0.686	0.6950	1.3111	98.677	98.6463	0.0311
78	0.927	0.9212	0.6285	0.461	0.4889	6.0466	95.991	96.3398	0.3634
79	0.975	0.9757	0.0705	0.742	0.7280	1.8819	97.798	98.0287	0.2359
80	0.956	0.9536	0.2471	0.738	0.7427	0.6345	96.029	95.8616	0.1743
81	0.990	0.9914	0.1377	0.570	0.5757	1.0056	99.273	99.3964	0.1243
82	0.946	0.9477	0.1836	0.792	0.7796	1.5643	95.062	95.0566	0.0057
83	0.984	0.9805	0.3524	0.706	0.6947	1.6059	98.673	98.6764	0.0035
84	0.989	0.9919	0.2936	0.641	0.6374	0.5638	99.319	99.3223	0.0033
85	0.989	0.9945	0.5602	0.570	0.5335	6.4069	99.186	99.2387	0.0531
86	0.966	0.9650	0.1045	0.574	0.5832	1.5959	96.873	96.8511	0.0226

87	0.990	0.9867	0.3356	0.659	0.6586	0.0643	99.363	99.5008	0.1387
88	0.987	0.9841	0.2977	0.680	0.6870	1.0276	99.027	99.2093	0.1841
89	0.988	0.9838	0.4244	0.678	0.6769	0.1679	99.123	99.3293	0.2081
90	0.990	0.9928	0.2795	0.634	0.6291	0.7790	99.385	99.4311	0.0464
91	0.982	0.9825	0.0517	0.666	0.6702	0.6319	98.532	98.5298	0.0023
92	0.975	0.9727	0.2376	0.665	0.6717	1.0129	97.756	97.7929	0.0378
93	0.968	0.9671	0.0892	0.666	0.6622	0.5724	98.480	98.5284	0.0492
94	0.988	0.9885	0.0522	0.667	0.6719	0.7310	99.107	98.9773	0.1309
95	0.983	0.9839	0.0883	0.696	0.7028	0.9741	98.622	98.5875	0.0350
96	0.980	0.9807	0.0751	0.679	0.6613	2.6007	98.303	98.4744	0.1743
97	0.983	0.9848	0.1833	0.551	0.5622	2.0358	98.542	98.4799	0.0630
98	0.986	0.9844	0.1572	0.695	0.6908	0.5978	98.878	98.8533	0.0250
99	0.920	0.9155	0.4870	0.417	0.4137	0.7960	95.254	95.7653	0.5368
100	0.990	0.9860	0.3992	0.657	0.6541	0.4426	99.415	99.5158	0.1014
101	0.979	0.9827	0.3783	0.693	0.6813	1.6935	98.215	98.1774	0.0383
102	0.986	0.9851	0.0895	0.687	0.6870	0.0026	98.949	99.0302	0.0820
103	0.969	0.9712	0.2265	0.747	0.7368	1.3638	97.163	97.3272	0.1690
104	0.988	0.9858	0.2185	0.675	0.6789	0.5787	99.198	99.0134	0.1861
105	0.984	0.9874	0.3409	0.656	0.6421	2.1260	98.658	98.6835	0.0258
106	0.989	0.9870	0.2026	0.666	0.6909	3.7330	99.289	99.2282	0.0613
107	0.986	0.9896	0.3609	0.431	0.4508	4.6041	98.826	98.8863	0.0610
108	0.988	0.9904	0.2407	0.659	0.6581	0.1322	99.135	99.2097	0.0753
109	0.973	0.9747	0.1703	0.741	0.7458	0.6427	97.591	97.8092	0.2235
110	0.990	0.9911	0.1119	0.602	0.5947	1.2170	99.339	99.5159	0.1781
111	0.988	0.9887	0.0696	0.676	0.6806	0.6868	99.109	99.0853	0.0239
112	0.953	0.9542	0.1246	0.790	0.7558	4.3331	95.718	95.7530	0.0365
113	0.974	0.9755	0.1541	0.742	0.7313	1.4372	97.643	97.9573	0.3219
114	0.987	0.9894	0.2443	0.626	0.6147	1.8052	99.031	99.2137	0.1845
115	0.983	0.9849	0.1978	0.696	0.6910	0.7137	98.624	98.7281	0.1056
116	0.968	0.9673	0.0724	0.735	0.7395	0.6097	97.106	97.0798	0.0269
117	0.969	0.9709	0.1972	0.723	0.7067	2.2530	97.178	97.4847	0.3156
118	0.989	0.9926	0.3633	0.637	0.6360	0.1545	99.295	99.2975	0.0025
119	0.965	0.9650	0.0026	0.719	0.7204	0.2010	96.860	96.8378	0.0229
120	0.990	0.9918	0.1782	0.654	0.6614	1.1317	99.378	99.3251	0.0532
121	0.968	0.9662	0.1831	0.711	0.7120	0.1466	97.121	96.9677	0.1578
122	0.990	0.9886	0.1398	0.657	0.6675	1.5917	99.394	99.3620	0.0322
123	0.934	0.9271	0.7436	0.382	0.3830	0.2573	97.448	97.6997	0.2583
124	0.987	0.9885	0.1514	0.594	0.5758	3.0606	98.953	98.9347	0.0185
125	0.984	0.9870	0.3072	0.688	0.6845	0.5019	98.748	98.8318	0.0849
126	0.988	0.9863	0.1741	0.663	0.6709	1.1928	99.164	99.3762	0.2140
127	0.988	0.9884	0.0363	0.672	0.6815	1.4140	99.090	99.0355	0.0550
128	0.973	0.9750	0.2090	0.726	0.7235	0.3456	97.618	97.4990	0.1219
129	0.987	0.9907	0.3790	0.644	0.6311	2.0088	99.043	98.8710	0.1737
130	0.987	0.9858	0.1251	0.663	0.6690	0.9037	99.021	99.1813	0.1619
131	0.959	0.9627	0.3906	0.598	0.5893	1.4496	99.318	99.1070	0.2124
132	0.987	0.9878	0.0816	0.675	0.6798	0.7167	98.973	98.8240	0.1505

133	0.985	0.9850	0.0047	0.679	0.6881	1.3412	98.763	98.6010	0.1641	
134	0.942	0.9426	0.0621	0.800	0.7565	5.4329	94.694	94.4167	0.2928	
135	0.959	0.9571	0.1993	0.752	0.7551	0.4088	96.290	96.1484	0.1470	
136	0.943	0.9448	0.1859	0.503	0.4979	1.0165	98.701	98.5294	0.1739	
137	0.962	0.9613	0.0719	0.659	0.6847	3.9004	96.513	96.3880	0.1295	
138	0.986	0.9888	0.2868	0.550	0.5597	1.7666	98.789	98.5941	0.1973	
139	0.982	0.9832	0.1258	0.640	0.6398	0.0345	98.505	98.2681	0.2405	
140	0.972	0.9743	0.2340	0.738	0.7357	0.3102	97.502	97.5111	0.0094	
141	0.921	0.9257	0.5099	0.810	0.7831	3.3210	92.753	92.5389	0.2308	
142	0.987	0.9883	0.1358	0.679	0.6967	2.6134	99.050	98.9246	0.1266	
143	0.957	0.9546	0.2483	0.624	0.5974	4.2690	98.212	98.3447	0.1351	
144	0.988	0.9916	0.3598	0.295	0.3908	32.4865	98.877	99.0276	0.1523	
145	0.989	0.9860	0.3084	0.665	0.6709	0.8883	99.180	99.3741	0.1957	
146	0.983	0.9823	0.0748	0.673	0.6921	2.8314	98.578	98.3667	0.2143	
147	0.947	0.9448	0.2279	0.569	0.5640	0.8850	97.868	98.0452	0.1811	
148	0.990	0.9937	0.3767	0.619	0.6144	0.7489	99.367	99.2768	0.0908	
149	0.987	0.9872	0.0159	0.681	0.6921	1.6259	98.994	98.9824	0.0117	
150	0.980	0.9814	0.1394	0.709	0.7087	0.0425	98.303	98.1621	0.1433	
151	0.951	0.9495	0.1577	0.739	0.7054	4.5486	96.281	96.7469	0.4839	
152	0.941	0.9491	0.8650	0.534	0.5526	3.4818	99.273	99.2442	0.0290	
153	0.920	0.9212	0.1258	0.673	0.7005	4.0929	92.715	92.1375	0.6229	
154	0.970	0.9694	0.0606	0.640	0.6306	1.4664	99.029	99.1376	0.1097	
155	0.954	0.9555	0.1543	0.786	0.7676	2.3386	95.782	95.7868	0.0050	
156	0.932	0.9267	0.5698	0.605	0.6069	0.3107	95.807	95.8227	0.0164	
157	0.984	0.9832	0.0781	0.633	0.6313	0.2683	98.654	98.5066	0.1494	
158	0.979	0.9807	0.1739	0.723	0.7255	0.3409	98.208	98.2796	0.0730	
159	0.977	0.9787	0.1771	0.706	0.7065	0.0659	98.000	98.0776	0.0791	
160	0.982	0.9824	0.0406	0.693	0.7015	1.2220	98.515	98.2680	0.2508	
161	0.943	0.9450	0.2113	0.767	0.7651	0.2417	94.760	94.9287	0.1780	
162	0.986	0.9876	0.1631	0.671	0.6755	0.6727	98.893	98.8832	0.0099	
163	0.990	0.9836	0.6426	0.660	0.6619	0.2880	99.388	99.5673	0.1804	
164	0.974	0.9745	0.0502	0.683	0.6715	1.6798	98.565	98.5346	0.0309	
165	0.987	0.9860	0.1024	0.685	0.6884	0.5006	98.967	98.9446	0.0226	
166	0.977	0.9796	0.2690	0.693	0.6805	1.7966	97.955	97.8781	0.0786	
167	0.989	0.9924	0.3456	0.621	0.6213	0.0411	99.239	99.1258	0.1141	
168	0.971	0.9707	0.0260	0.687	0.6929	0.8558	97.307	96.9984	0.3172	
169	0.893	0.8898	0.3582	0.577	0.6117	6.0111	91.718	92.0075	0.3156	
170	0.988	0.9786	0.9518	0.683	0.6673	2.3058	99.088	99.2124	0.1255	
171	0.986	0.9878	0.1805	0.682	0.6869	0.7128	98.952	98.9492	0.0029	
172	0.965	0.9675	0.2614	0.715	0.6850	4.1893	96.859	97.1003	0.2491	
173	0.918	0.9358	1.9428	0.414	0.3973	4.0274	99.282	99.1807	0.1020	
174	0.986	0.9838	0.2269	0.683	0.6833	0.0412	99.888	99.1432	0.7457	
175	0.969	0.9712	0.2283	0.746	0.7322	1.8460	97.199	97.2746	0.0777	
Error promedio (%)			0.2701	Error promedio (%)			1.6886	Error promedio (%)		0.1885

Realizado por: Capelo, J., 2022.

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

Rep	Fracción molar de FOL en el fondo de la columna (X_FOL)			Fracción molar de H2O en el destilado de la columna (X_H2O)			Porcentaje de conversión de FAL en la reacción (C_FAL)		
	DWSIM	Predicción	Error (%)	DWSIM	Predicción	Error (%)	DWISM	Predicción	Error (%)
1	0.976	0.9808	0.4934	0.698	0.6932	0.6843	97.832	98.4251	0.6063
2	0.963	0.9669	0.4002	0.631	0.6137	2.7359	98.649	98.8866	0.2409
3	0.937	0.9551	1.9325	0.592	0.6314	6.6591	96.335	98.0154	1.7444
4	0.981	0.9798	0.1225	0.721	0.7140	0.9774	98.341	98.8036	0.4704
5	0.983	0.9849	0.1884	0.596	0.6003	0.7136	98.477	98.7321	0.2591
6	0.984	0.9835	0.0506	0.672	0.7001	4.1774	98.608	98.7690	0.1633
7	0.982	0.9833	0.1287	0.692	0.7046	1.8248	98.416	98.7394	0.3286
8	0.981	0.9829	0.1889	0.562	0.5551	1.2192	95.252	98.6950	3.6146
9	0.987	0.9828	0.4261	0.689	0.6969	1.1520	98.948	99.0483	0.1014
10	0.989	0.9846	0.4437	0.662	0.6930	4.6811	99.336	99.1765	0.1605
11	0.989	0.9845	0.4532	0.666	0.6902	3.6389	99.288	99.1079	0.1814
12	0.989	0.9895	0.0520	0.588	0.5897	0.2873	99.159	99.0217	0.1384
13	0.947	0.9660	2.0081	0.787	0.7498	4.7277	95.081	97.3616	2.3986
14	0.987	0.9787	0.8442	0.692	0.6782	1.9924	98.926	99.0454	0.1207
15	0.984	0.9853	0.1283	0.646	0.6476	0.2535	98.648	98.8097	0.1639
16	0.991	0.9884	0.2619	0.629	0.6504	3.4066	99.389	99.2221	0.1680
17	0.938	0.9591	2.2479	0.496	0.5278	6.4147	99.077	99.0497	0.0275
18	0.988	0.9816	0.6518	0.684	0.6890	0.7295	99.046	99.1572	0.1123
19	0.974	0.9778	0.3935	0.706	0.7119	0.8423	97.624	98.3524	0.7461
20	0.955	0.9722	1.7975	0.784	0.7600	3.0563	95.798	97.9680	2.2652
21	0.937	0.9537	1.7856	0.441	0.5033	14.1237	97.507	98.4843	1.0023
22	0.989	0.9853	0.3753	0.657	0.6890	4.8776	99.304	99.1711	0.1338
23	0.957	0.9705	1.4096	0.782	0.7512	3.9388	96.056	97.7007	1.7123
24	0.988	0.9871	0.0922	0.642	0.6634	3.3365	99.070	98.9293	0.1420
25	0.988	0.9866	0.1387	0.663	0.6867	3.5693	99.098	99.0535	0.0449
	Error promedio (%)		0.6806	Error promedio (%)		3.2008	Error promedio (%)		0.6819

Realizado por: Capelo, J., 2022.