

**Modelado del proceso de transformación de Bioetanol a Olefinas mediante
Redes Neuronales Artificiales****G. Sorrosal¹, C. Martín¹, C.E. Borges¹, A.M. Macarulla¹, A. Alonso-Vicario¹**

¹ *Instituto Tecnológico de Deusto – DeustoTech Energía, Universidad de Deusto, Avda.
Universidades 24, 48007 – Bilbao (Bizkaia), España*
gsorrosal@deusto.es

INTRODUCCIÓN

La transformación catalítica del bioetanol a olefinas (proceso BTO) en presencia de catalizadores ácidos es un proceso clave en el concepto de la biorefinería, incorporando como alimentación la biomasa o derivados como alternativa a los procesos petroquímicos para la producción de olefinas ligeras (etileno y propileno).

Debido a la elevada complejidad del proceso con un alto número de compuestos en el medio de reacción y condiciones severas de operación que condicionan la vida útil del catalizador [1], para avanzar en la implementación y puesta en marcha del proceso a escala industrial es clave disponer de modelos que permitan desarrollar estrategias de operación y control adecuadas. No obstante, los procesos de modelado matemáticos son complejos y su resolución suele ser computacionalmente costosa comprometiendo su uso en control. Por ello, se hace necesario buscar nuevas estrategias de modelado que permitan reducir los tiempos de diseño del modelo así como de las estrategias de control y/o del propio control reduciendo a su vez los tiempos de cálculo sin perder precisión.

Las redes neuronales artificiales (RNA) están siendo ampliamente empleadas en este contexto por sus propiedades como aproximadores universales [2] y su capacidad para modelar con éxito todo tipo de procesos complejos y reactores químicos, desde reactores de tipo batch, a reactores tanto a escala de laboratorio como a escala industrial [3, 4, 5]. Dentro de los modelos neuronales, destacan los modelos híbridos (HNN) [6], en los que se combinan elementos de los modelos de conocimiento con redes neuronales para modelar aquellas partes más complejas o desconocidas del proceso, como la cinética de reacción [7] posibilitando una posterior escalabilidad del modelo. Este tipo de modelado ha obtenido muy buenos resultados en la literatura, mejorando incluso los obtenidos por los modelos neuronales globales [5, 8, 9].

En el presente trabajo se presenta una metodología de modelado del proceso BTO en un reactor tubular isoterma mediante redes neuronales artificiales que ajusta fielmente los resultados experimentales del proceso y que tiene en cuenta la cinética de desactivación del catalizador.

METODOLOGÍA

El modelo neuronal desarrollado es un modelo HNN basado en RNA de tipo Feed-Forward que combina el modelo de desactivación del catalizador, con un modelo basado en RNA para modelar el proceso de obtención de olefinas ligeras ($C_3=$, $C_4=$). El modelo neuronal recibe como entradas las principales condiciones de operación (temperatura, fracción másica de agua en la alimentación y tiempo espacial), el estado de actividad actual y anterior del catalizador (calculada mediante el modelo de conocimiento) y las estimaciones anteriores de la conversión a olefinas (X_O). Para obtener esta configuración se han ido analizando y mejorando diferentes estructuras neuronales hasta lograr la estructura que mejor se ha ajustado al proceso BTO.

El modelo ha sido entrenado empleando un conjunto de datos simulados mediante el modelo de conocimiento de lumps desarrollado por Gayubo et al. [1, 10]. Los resultados del ajuste de dicho modelo, junto con los datos experimentales reales [1, 10], han sido usados como método de contraste para comprobar la bondad del ajuste del modelo neuronal híbrido propuesto en el presente trabajo.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la siguiente figura se muestra unos ejemplos de la bondad del ajuste del modelo a los datos simulados para dos de las condiciones de operación utilizadas en la validación.

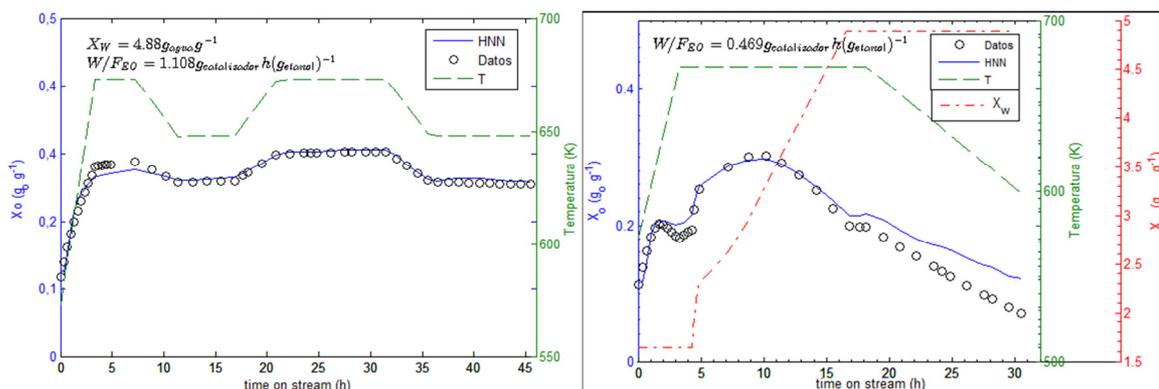


Figura 1. Resultados del ajuste del modelo para diferentes condiciones experimentales.

El modelo HNN presenta un error porcentual absoluto medio respecto de los datos experimentales del 19.63 %. Sólo 3.85 puntos porcentuales por encima del error medio presente en las estimaciones del modelo mecanístico, con una discrepancia entre modelos igualmente baja (5.6 %). Sin embargo, el modelo HNN requiere de mucho menor coste computacional, siendo los tiempos de cálculo de hasta 13 veces inferiores.

En conclusión, los modelos híbridos al combinar elementos de los modelos mecanísticos con RNA, permiten obtener resultados similares a los modelos de conocimiento sin pérdida significativa de precisión. Además, estas metodologías de trabajo basadas en técnicas de *Soft Computing* permiten obtener resultados aceptables en mucho menor tiempo y con unos costes de computación significativamente inferiores, lo cual resulta de gran interés para el desarrollo de estrategias avanzadas de diseño y control de procesos químicos complejos.

AGRADECIMIENTOS

Se desea agradecer al Gobierno Vasco por su financiación a través del proyecto de investigación básica y/o aplicada PI2013-40.

REFERENCIAS

- [1] A. G. Gayubo, A. Alonso, B. Valle, T. Aguayo, and J. Bilbao, *Am. Inst. Chem. Eng.*, 58 (2) (2012) 526
- [2] K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White, *Neural Networks*, 2 (5) (1989) 359.
- [3] M. N. Kashani and S. Shahhosseini, *Chem. Eng. J.*, 159 (1-3) (2010) 195.
- [4] M. R. Rahimpour, M. Shayanmehr, and M. Nazari, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50 (10) (2011) 6044.
- [5] E. J. Molga, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, 42 (8-9) (2003) 675.
- [6] D. C. Psychogios and L. H. Ungar, *AIChE J.*, 38 (10) (1992) 1499.
- [7] G. Zahedi, a. Elkamel, a. Lohi, a. Jahanmiri, and M. R. Rahimpour, *Chem. Eng. J.*, 115 (1-2) (2005) 113.
- [8] H. C. Aguiar and R. M. Filho, *Chem. Eng. Sci.*, 56 (2) (2001) 565.
- [9] J.-S. Chang, S.-C. Lu, and Y.-L. Chiu, *Chem. Eng. J.*, 130 (1) (2007) 19.
- [10] A. G. Gayubo, A. Alonso, B. Valle, A. T. Aguayo, and J. Bilbao, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49 (21) (2010) 10836.