

ÍNDICE

LISTADO DE TABLAS	ii
LISTADO DE FIGURAS	iii
LISTADO DE SIGLAS, ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS	iv
RESUMEN	vi
ABSTRACT	vii
INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVO GENERAL	3
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	3
HIPÓTESIS	3
CAPÍTULO 1	4
ANTECEDENTES	4
1.1 Reactores químicos. Reactor tubular continuo de lecho fijo	9
1.2 Glicerol	10
1.3 Hidrógeno como vector energético	12
1.4 Reacción de intercambio agua-gas ("Water-Gas Shift")	12
1.5 Reformado en fase acuosa	13
CAPÍTULO 2	16
REDES NEURONALES ARTIFICIALES	16
2.1 Fundamentos de redes neuronales artificiales	16
2.2 Descripción de la red neuronal	18
2.3 Arquitectura de una red neuronal	21
2.4 Proceso de aprendizaje de una red neuronal artificial	23
2.5 Algoritmos de aprendizaje "Back-propagation"	23
2.6 Matlab® aplicado a RNAs	25
CAPÍTULO 3	27
MATERIALES Y MÉTODOS	27
3.1 Equipo experimental	27
3.2 Funcionamiento de la unidad Microactivity Reference	28
3.3 Analizador portátil de Biogás y Syngas	31
3.4 Catalizador y reactivos para el APR	32
3.5 Desarrollo de las reacciones químicas	33
3.6 Desarrollo del modelo de RNAs	35
3.7 Elaboración de la base de datos	36

3.8	Desarrollo y evaluación del modelo RNA	39
3.9	Comparación estadística.....	40
CAPÍTULO 4		42
RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....		42
4.1	Actividad experimental	42
4.2	Determinación del modelo de RNA óptimo.....	45
4.3	Validación del modelo de redes neuronales artificiales para el modelado del proceso de reformado en fase acuosa de glicerol.....	52
CONCLUSIONES		62
PERSPECTIVAS.....		64
BIBLIOGRAFÍA		65

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1.1	Comparación del uso de modelos de RNAs en diferentes trabajos de investigación. ..	8
Tabla 2.1	Algoritmos de entrenamiento “Back-propagation”	25
Tabla 3.1	Parámetros de operación para cada reacción.....	34
Tabla 3.2	Variables de entrada y salida empleados en el modelado	38
Tabla 4.1	Evaluación de diversas arquitecturas aplicando el algoritmo Levenberg Marquardt.	48
Tabla 4.2	Pesos del modelo-óptimo de RNA desarrollado.....	51
Tabla 4.3	Bias obtenidos del modelo óptimo de RNA desarrollado.....	52
Tabla 4.4	Datos experimentales y simulados por la RNA a T= 270°C	54
Tabla 4.5	Datos experimentales y simulados por la RNA a T= 266 °C	55
Tabla 4.6	Datos experimentales y simulados por la RNA a T= 262 °C	56
Tabla 4.7	Datos experimentales y simulados por la RNA a T= 258 °C	57
Tabla 4.8	Datos experimentales no utilizados en la fase de entrenamiento y datos simulados por el modelo RNA a T= 262 °C	58

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1.1	Fórmula estructural del glicerol o 1,2,3 propanotriol [23].....	11
Figura 2.1	Estructura de neurona biológica [37].	18
Figura 2.2	Modelo simplificado de una RNA [63].	19
Figura 2.3	RNA básica con R entradas [39].....	20
Figura 2.4	Algunas funciones de activación [41].....	21
figura 2.5	Arquitectura de una red neuronal: a) red monocapa, “feedforward” y completamente conectada, b) red multicapa, “feedback” y parcialmente conectada.....	22
Figura 2.6	Estructura de un algoritmo “Back-propagation” [43].....	24
Figura 3.1	Interfaz del sistema de reacción automatizado Microactivity Reference	27
Figura 3.2	Reactor catalítico tubular de lecho fijo y flujo continuo.....	28
Figura 3.3	Microactivity Reference [64]	29
Figura 3.4	Bomba de tipo jeringa serie D Teledyne ISCO	30
Figura 3.5	Analizador portátil ETG.....	32
Figura 3.6	Preparación del catalizador	33
Figura 3.7	Metodología para la obtención del modelo de RNAs.	37
Figura 3.8	Procedimiento para la obtención de la arquitectura de la red neuronal óptima	39
Figura 4.1	Rendimiento de hidrógeno en función del tiempo de estabilización para las 4 reacciones.....	42
Figura 4.2	Rendimiento de los gases producidos a 270 °C y 62 bar.....	43
Figura 4.3	Rendimiento de los gases producidos a 266 °C y 60,5 bar.....	44
Figura 4.4	Rendimiento de los gases producidos a 262 °C y 59 bar.....	44
Figura 4.5	Rendimiento de los gases producidos a 258 °C y 57,5 bar.....	45
Figura 4.6	Comportamiento Error Cuadrático Medio.....	46
Figura 4.7	Comportamiento Coeficiente de determinación	46
Figura 4.8	Comportamiento Error Porcentual Medio Absoluto	47
Figura 4.9	Arquitectura óptima para el modelado del proceso de reformado en fase acuosa de glicerol.....	49
Figura 4.10	Mejor Ajuste lineal para datos experimentales y datos simulados por la RNA	50
Figura 4.11	Datos experimentales y datos simulados por el modelo RNA a T= 270 °C.....	54
Figura 4.12	Datos experimentales y datos simulados por el modelo RNA a T= 266 °C.....	55
Figura 4.13	Datos experimentales y datos simulados por el modelo RNA a T= 262 °C.....	56
Figura 4.14	Datos experimentales y datos simulados por el modelo RNA a T= 258 °C.....	57

Figura 4.15 Comparación de datos experimentales no utilizados en la fase de entrenamiento y datos simulados por el modelo RNA a T= 262 °C.....59

LISTADO DE SIGLAS, ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS

AC.....	Carbón activado
APR.....	Reformado en fase acuosa
BP.....	“Back-propagation of error”
C ₃ H ₈ O ₃	Glicerol
°C.....	Grados Celsius
CO ₂	Dióxido de carbono
CO.....	Monóxido de Carbono
CH ₄	Metano
EP.....	Elemento procesador
f.....	Función de transferencia
H ₂	Hidrógeno
l.....	Número de iteraciones
Ir.....	Iridio
Matlab®.....	Mathworks
MAPE.....	Error medio porcentual
MLPNN.....	Modelo de red neuronal de perceptrón de múltiples capas.
n.....	Entrada neta
N.....	Número de neuronas en la capa oculta
OH.....	Hidróxido
Pd.....	Paladio
Pt.....	Platino

RMSE..... Error cuadrático medio

RNAs..... Redes neuronales artificiales

Rh..... Radio

Ru..... Rutenio

R^2 Coeficiente de determinación

t.....Tiempo

T.....Temperatura

UER..... Unidad Energía Renovable

WHSV..... Velocidad especial en peso

WGS..... Water Gas Shift

w.....Peso

RESUMEN

En el presente trabajo se utilizó un esquema basado en redes neuronales artificiales para modelar el comportamiento de las variables principales durante el proceso de estabilización de la reacción de reformado de glicerol en fase acuosa. En un sistema de reacción automatizado Microactivity Reference se realizaron 4 reacciones para conformar la base de datos experimental necesaria para el entrenamiento, validación y prueba de la red neuronal. Se entrenaron varias arquitecturas de tres capas utilizando la caja de herramientas destinada a redes neuronales del software Matlab®, versión 2017. Se escogieron como variables de entrada el tiempo y la temperatura mientras que las variables de salida fueron los rendimientos de los gases CH₄, CO, CO₂ y H₂.

Para el proceso de optimización de la red neuronal se utilizó el algoritmo de aprendizaje de retro-propagación Levenberg-Marquardt junto con las funciones tangente hiperbólica sigmoidea y la función lineal. El mejor ajuste de regresión lineal se obtuvo usando 12 neuronas en la capa oculta con lo cual fue posible predecir los rendimientos de los gases del proceso con gran eficiencia ($R^2=0,997$). Una buena precisión mostró el modelo con un Error Porcentual Medio Absoluto de 3,16 % y un Error Cuadrático Medio de 0,01842. Todas las salidas simuladas por el modelo de redes neuronales fueron analizadas estadísticamente y comparadas con los datos obtenidos en el laboratorio experimentalmente. Con los resultados obtenidos se puede utilizar el modelo desarrollado para la estimación de las salidas del reformado en fase acuosa de glicerol durante la fase de estabilización del catalizador a diferentes condiciones de operación.

ABSTRACT

In the present work, a scheme based on artificial neural networks was used to model the behavior of the main variables during the stabilization process of the glycerol reforming reaction in the aqueous phase. In a Microactivity Reference automated reaction system, 4 reactions were carried out to form the experimental database necessary for the training, validation and testing of the neural network. Several three-layer architectures were trained using the toolbox for neural networks of the Matlab® software, version 2017. Time and temperature were chosen as input variables while the output variables were the yields of the gases CH₄, CO, CO₂ and H₂. For the neural network optimization process, the Levenberg-Marquardt “Back-propagation” learning algorithm was used together with the Sigmoid Hyperbolic Tangent functions and the linear function. The best fit of linear regression was obtained using 12 neurons in the hidden layer, with which it was possible to predict the yields of the process gases with great efficiency ($R^2 = 0,997$).

Good precision showed the model with an Absolute Mean Percentage Error of 3,16% and a Mean Square Error of 0,01842. All the outputs simulated by the neural network model were statistically analyzed and compared with the data obtained in the experimental laboratory. With the results obtained, the model developed can be used to estimate the outputs of the reforming in the aqueous phase of glycerol during the stabilization phase of the catalyst at different operating conditions.