

RESEÑA

Determinación del número de cetano del biodiesel a partir de su composición de ácidos grasos mediante regresión lineal múltiple y redes neuronales artificiales

Ing. Yisel Sánchez Borroto

Centro de Estudio de Tecnologías Energéticas Renovables, Facultad de Ingeniería Mecánica,

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría, La Habana, Cuba.

3 de marzo de 2014

Tesis presentada en opción al título académico de Máster en Ingeniería Mecánica

En la actualidad, la mayor parte de toda la energía que se consume proviene de los combustibles fósiles tales como el petróleo. Sin embargo, el uso indiscriminado de esta fuente de energía no renovable, unido a su creciente demanda, así como los problemas asociados a la contaminación ambiental y el efecto invernadero, condicionan la búsqueda de soluciones con vistas a paliar este mal.

En este sentido, la balanza se ha inclinado hacia el uso de los biocombustibles, dada su aplicación y beneficios medioambientales en los motores de combustión interna (MCI), además por ser combustibles de carácter orgánico, no fósil y renovable. El primer reporte de uso de biocombustibles provenientes de plantas oleaginosas data de 1900, cuando Rudolf Diesel (1858-1913), inventor del motor diesel, utilizó aceite vegetal de maní para demostrar su invención. Hablando a la sociedad de ingeniería de St. Louis, Missouri, en 1912, Diesel dijo, “El uso de los aceites vegetales como combustibles de motor puede parecer insignificante hoy, tales aceites pueden ser en el curso del tiempo tan importantes como el petróleo y los productos de alquitrán de carbón de estos tiempos”.

El biodiesel (BD) es un combustible alternativo derivado de aceites vegetales (comestibles y no comestibles) y grasa animal. El uso de BD en motores diesel en Cuba, puede contribuir en parte a la reducción de la dependencia energética y puede llegar a ser una variante muy económica en flotas locales o directamente en la explotación de vehículos vinculados con la producción agrícola.

La composición química de un biocombustible derivado de aceites vegetales como el biodiesel, se basa en el porcentaje de ésteres metílicos derivados de ácidos grasos (éster de metilo de ácidos

grasos) presentes en el biocombustible. Todas las propiedades del BD están fuertemente influenciadas por las propiedades de sus ácidos grasos individualmente, por lo que es importante saber qué ácidos grasos pueden ser manipulados con el objetivo de mejorar el número de cetano (CN), el cual es una de las propiedades más importantes que caracterizan un combustible diesel desde el punto de vista químico y de su proceso de combustión.

Actualmente, la determinación del número de cetano mediante un procedimiento experimental es un proceso costoso y consume mucho tiempo, además de pasar por estrictas normas. Esta propiedad puede ser determinada a través de mediciones experimentales en bancos de motores diesel, en una cámara de combustión a volumen constante y en un cetaner.

Por todo lo antes expuesto es necesario buscar alternativas para determinar esta propiedad (CN) tan importante, profundizando en las relaciones entre contenido de ácidos grasos y número de cetano para diferentes tipos de fuentes primarias de ácidos grasos, a través de métodos más sencillos, factibles y eficaces como la modelación matemática. Por tal motivo, resulta interesante estimar el número de cetano del BD a partir de su composición de ácidos grasos por medio de herramientas matemáticas tales como la regresión lineal múltiple y las redes neuronales artificiales para intentar encontrar el mejor modelo para predecir el número de cetano de un grupo de biocombustibles estudiados.

Para el desarrollo de los modelos por regresión lineal múltiple y redes neuronales artificiales fueron tomados como referencia 48 BD, incluyendo 10 ácidos grasos puros de diferente procedencia, así como su número de cetano. Las variables de entrada fueron la composición de ácidos grasos y la de salida el número de cetano. Para la obtención de los modelos fueron utilizados el software *Statgraphics Centurion XV.II* y *Statsoft Statistica 7.0.61.0*.

Los modelos obtenidos fueron validados a través de una comparación con datos reportados de la literatura, extraídos de bases de datos referenciadas, los cuales no coinciden con los usados para el desarrollo de los modelos. La comparación entre el número de cetano medido experimentalmente y el ajustado fue expresada a través de R y R^2 . El mejor ajuste estuvo basado en el mayor coeficiente de correlación (R) o determinación (R^2) y el menor error absoluto. Este análisis fue complementado con el análisis de la inclusión o no en el modelo de una constante tratando de garantizar los mayores valores del coeficiente de correlación.

También se analizaron las magnitudes y signos de los coeficientes de regresión para conocer la dependencia entre las variables. Al modelo obtenido se le realizó un análisis de residuales con vistas a evaluar su capacidad de predicción. El criterio de aceptación en el análisis de residuales

estuvo basado en el criterio de sumatoria de residuales al cuadrado o varianza residual buscando la mínima sumatoria.

Con el objetivo de comparar los modelos obtenidos mediante regresión y redes, 60 redes fueron probadas para la estimación del número de cetano. Para el desarrollo de las redes se utilizaron cinco topologías básicas entre (11: 3: 1) y (11: 7: 1). Las redes utilizadas fueron del tipo perceptrones multicapas, con una capa oculta y de 3 a 7 unidades. En la etapa de entrenamiento dos fases fueron implementadas, se mantuvo constante la fase 1 propagación hacia atrás y se varió la fase 2 entre diferentes posibilidades: propagación hacia atrás, gradiente descendiente conjugado (CGD), Levenberg–Marquardt (LM), propagación rápida (PQ), Quasi-Newton (QN) y Delta-bar-Delta (DBD) para todas las redes evaluadas. El entrenamiento fue desarrollado para 10000 épocas con una velocidad de aprendizaje de 0,01. Las funciones usadas fueron: lineal y logística en el intervalo de 0,9 para las diferentes variantes de redes.

Como resultado, se obtuvieron dos modelos para estimar el número de cetano del biodiesel, uno de ellos usando regresión lineal múltiple y el otro a través de redes neuronales. Ambos modelos fueron comparados con datos experimentales extraídos de bases de datos referenciadas, y en el caso específico del modelo de regresión, además, fue comparado con un modelo reportado en la literatura. Se obtuvo como resultado que el modelo obtenido en este trabajo tiene mejor capacidad de predicción que el de la literatura.

Luego, los modelos obtenidos por regresión y por redes fueron comparados entre sí, obteniendo que la red propuesta, cuya topología es CGD (11: 4: 1), tiene mejor ajuste que el modelo obtenido por regresión lineal múltiple para predecir el número de cetano del biodiesel a partir de su composición de ácidos grasos. Un resultado similar fue obtenido por otros investigadores. Los coeficientes de correlación para los modelos de regresión lineal múltiple y redes neuronales artificiales fueron 0,8888 y 0,9382 respectivamente.

También en esta tesis se hizo un análisis económico para calcular cuán factible era determinar el número de cetano a través de la modelación matemática con respecto a un procedimiento experimental. Los resultados de esta investigación mostraron que es más factible determinar el número de cetano a través de herramientas matemáticas tales como regresión lineal múltiple y redes neuronales artificiales que a partir de métodos experimentales.

La tesis además de la introducción consta de cuatro capítulos. En ellos se aporta un marco teórico en el que se describe el estado actual de las investigaciones en el campo de los biocombustibles, su proceso de obtención, composición química, así como algunas propiedades físicas del BD. También se hace referencia al estado actual de la obtención de modelos para predecir el número

de cetano del combustible diesel y biodiesel mediante diferentes métodos estadísticos. Los materiales y métodos empleados describen detalladamente el procedimiento empleado, así como los programas utilizados para la obtención de los modelos. En el capítulo dedicado a los resultados y discusión, se realizan comparaciones de los modelos obtenidos con otros reportados, así como entre ellos mismos. Todos los aspectos de la tesis se desarrollan en 69 páginas, en las que se incluyen 57 referencias bibliográficas (el 54,4 % corresponden al período 2007 a 2013), 13 tablas, 6 figuras y 1foto.

Con los resultados de la tesis se presentan cuatro publicaciones del autor relacionadas con el tema investigado, entre ellas, se encuentra un artículo publicado en la revista *Energy Conversion and Management* indizada por el *Web of Science* y *Scopus*. Asimismo, los resultados de la tesis han sido presentados en eventos nacionales e internacionales desde 2011, entre los que se destaca la Conferencia Internacional de Energía Renovable, la Convención Panamericana de Ingenierías y Solar Word Congress 2013, entre otros.

El trabajo de investigación desarrollado en esta tesis se realizó con financiamiento de un proyecto de Cooperación para el Desarrollo de la Universidad del Consejo Flamenco Interuniversitario (VLIR). Las instalaciones utilizadas en este trabajo fueron adquiridas bajo un proyecto titulado "célula de conocimiento sobre los biocombustibles (provenientes de cultivos no comestibles y productos residuales) para uso en motores de combustión interna", entre el Instituto Superior Politécnico José A. Echeverría y la Universidad de Gent, Bélgica.