

## MODELO DE LA SÍNTESIS CATALIZADA DE CARBONATO DE GLICEROL EMPLEANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Dolores M. Álvarez, Rocío Jiménez, Nancy F. Bálsamo, Mario R. Modesti, Mónica E. Crivello

Centro de Investigación y Tecnología Química/Facultad Regional Córdoba/Universidad Tecnológica Nacional. Maestro Marcelo López esq. Cruz Roja Argentina, Ciudad Universitaria. Córdoba, Argentina. CP. 5016ZAA. E-mail: [dalvarez@frc.utn.edu.ar](mailto:dalvarez@frc.utn.edu.ar)

**Introducción:** El glicerol es generado en grandes cantidades y requiere ser transformado en derivados de alto valor añadido [1]. Este compuesto contiene una estructura multifuncional, lo que lo convierte en un elemento esencial para la síntesis de derivados valiosos, mediante procesos catalíticos [2], tal el caso de la síntesis del carbonato de glicerol (CG) [3]. Si bien existen varias vías de obtención de este compuesto, la transesterificación entre el glicerol y alquil carbonatos catalizada por óxidos metálicos mixtos derivados de hidróxidos dobles laminares (HDL) resulta prometedora, dados los elevados porcentajes de conversión obtenidos y las características ambientalmente benignas del proceso. Los HDL son nanoarcillas aniónicas con estructura laminar constituida por capas de hidróxidos de fórmula general  $[M(II)_{1-x}M(III)_x(OH)_2]^{x+}(CO_3^{2-})_{x/2} \cdot mH_2O$ , donde M(II) y M(III) representan iones metálicos di- y trivalente, como Mg y Al, mientras que el anión carbonato se ubica en el espacio interlaminar para compensar las cargas. La actividad de los sitios básicos de estos catalizadores puede ser incrementada incorporando un tercer metal, como el Cs. Por otro lado, los modelos empíricos basados en Redes Neuronales Artificiales (RNA) han ganado aceptación debido a su capacidad de estimación, incluso disponiendo de escasos datos [4]. Las redes con estructura *backpropagation* son la más aplicadas para el modelado de procesos químicos [5]. Dado que para el año 2020 se espera la introducción de más de tres millones de toneladas de glicerol en el mercado como consecuencia de la industria del biodiesel [1], la posibilidad de disponer de un modelo que contribuya a mejorar el proceso de obtención de CG es de interés. El objetivo del estudio es desarrollar un modelo matemático por medio de RNA para caracterizar la relación entre el porcentaje de conversión del glicerol y el de rendimiento de CG, empleando catalizador con 10 y 25% de Cs.

**Metodología:** La reacción se llevó a cabo un reactor continuo. Los reactivos carbonato de dimetilo y glicerol se mezclaron en una relación molar constante de 3:1. Una vez que la mezcla de reactivos en agitación alcanzó los 75°C se añadió el catalizador (5% en peso con respecto a la masa de glicerol). Los porcentajes molares de Cs incorporado en la fueron de 10 y 25%, con respecto a los moles de Mg en el material. El glicerol y CG se identificaron mediante espectroscopia infrarroja. Se registraron los espectros de las mezclas de reacción a diferentes tiempos. La intensidad de las bandas representativas fueron a 923  $cm^{-1}$  para el glicerol (reactivo limitante) y a 1785  $cm^{-1}$  para el CG. Así se pudo obtener el porcentaje de conversión molar del glicerol y la masa de carbonato producido. Para seleccionar el modelo que mejor represente la dinámica de la reacción se estudiaron diferentes configuraciones neuronales con estructura *backpropagation*, utilizando *Neural Network* de Matlab®. Como entrada se consideró a la matriz de datos compuesta por el porcentaje molar de conversión del glicerol correspondiente a las 3,5 h