

**DESMETALIZACIÓN DE FONDOS DE VACÍO: PREDICCIÓN DE
RENDIMIENTOS DE DMO UTILIZANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES**

**ANGIE PAOLA GÓMEZ APARICIO
PAOLA ANDREA PLATA SÁNCHEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

**DESMETALIZACIÓN DE FONDOS DE VACÍO: PREICCIÓN DE RENDIMIENTOS
DE DMO UTILIZANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES**

**ANGIE PAOLA GÓMEZ APARICIO
PAOLA ANDREA PLATA SÁNCHEZ**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar por el título de
INGENIERA QUÍMICA**

**DIRECTOR
GIOVANNI MORALES MEDINA
Dr. En Ingeniería Química**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

DEDICATORIA

A Dios por tantas bendiciones recibidas cada día.

A mis padres Carlos y Gladys por su constante esfuerzo y sacrificio para así lograr culminar esta etapa de mi vida. Por su paciencia y buen ejemplo durante todo este tiempo.

A mis hermanos Marly y David por su apoyo y compañía. Ustedes son mi mayor motivación.

A mis nonos Victor, Ernesto, Angela, Ana y a toda mi familia por su colaboración y apoyo durante este camino.

A Oscar Manosalva por ser una persona incondicional.

A Paola por su amistad y por ser mi compañera de proyecto.

A mis amigos Silvia, Diane, Wendy, Tania, Álvaro, Angélica, Kelly, Karla y Sergio por su amistad y compañía a lo largo de esta etapa.

Angie Paola Gómez Aparicio

A Dios por permitirnos cumplir este sueño, por guiarnos en este camino e iluminarnos día a día en cada paso, sin su infinito amor nada de esto sería posible.

A mis padres Álvaro y Gloria por su constante apoyo, amor y comprensión, ustedes son mi fuerza y mi motor, la motivación más grande para levantarme ante cada tropiezo, las palabras son obsoletas para expresar el orgullo que siento de ser su hija.

A mis hermanos Jhon y Leonardo por su apoyo, complicidad e incondicionalidad durante todo este camino.

A Angie por su amistad sincera e incondicional, la mejor compañera que pude tener en esta etapa de mi vida.

A mis amigas Alejandra, Anny, Carmen y Yenny por ser parte fundamental durante esta y otras etapas, por su apoyo y cariño que no conoce distancia, y mucho menos años.

A mis amigos Sergio, Maria Angélica, Edith, Brayan, Jose, Carolina, Marly, Santiago, Angélica M, Alvaro, y Jhonny por cruzarse en mi camino y hacer más amena esta experiencia, compilando tantos recuerdos y emociones que llevaré a donde vaya, cada uno de ustedes hace parte de mi rompecabezas.

A mis amigas Vanessa, Angélica A, Giovana, y a Edinson por ser esos angelitos que Dios puso en mi camino cuando más los necesitaba, solo puedo decir que el destino me ha jugado una maravillosa pasada.

Paola Andrea Plata

AGRADECIMIENTOS

A Dios por guiarnos e iluminarnos cada día de nuestras vidas.

A nuestros padres y familia por su apoyo y confianza, sin ellos no hubiera sido posible este logro.

Al ingeniero y profesor *Giovanni Morales Medina* por la confianza que depositó en nosotras, por su dedicación, paciencia y por sus enseñanzas en este camino.

A la *Gerencia Refinería de Barrancabermeja* y al ingeniero *Gabriel Morales Salazar* por los datos suministrados.

Al ingeniero *Juan David Niño* por su colaboración y aportes para llevar a cabo este proyecto.

A nuestros amigos y a todas las personas que nos acompañaron durante esta etapa.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN.....	15
1. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA.....	18
1.1 ETAPA 1: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....	19
1.2 ETAPA 2: ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LAS VARIABLES QUE INFLUYEN EN EL PROCESO.....	19
1.3 ETAPA 3: SELECCIÓN DE ARQUITECTURAS DE LA RED NEURONAL	20
1.4 ETAPA 4: APLICACIÓN DE REDES NEURONALES Y PREDICCIÓN DE RENDIMIENTO DE DMO.	21
2. RESULTADOS: PRESENTACIÓN, ANÁLISIS Y DISCUSIÓN	23
2.1 ANÁLISIS ESTADÍSTICO.....	23
2.2 REDES NEURONALES ARTIFICIALES	25
2.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	31
3. CONCLUSIONES	36
4. RECOMENDACIONES.....	37
CITAS BIBLIOGRÁFICAS.....	38
BIBLIOGRAFÍA.....	42
ANEXOS.....	46

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Resultados de la red neuronal para el conjunto de los tres escenarios operativos	27
Tabla 2. Resultados de la red con 7 PCA	27
Tabla 3. Resultados de la red con 4 PCA	28
Tabla 4. Resultados de la red para el escenario operativo 1	29
Tabla 5. Resultados de la red para el escenario operativo 2	29
Tabla 6. Resultados de la red para el escenario operativo 3	30
Tabla 7. Resultados de la red para el escenario 3.....	30

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Estructura de una red neuronal feedforward (Backpropagation)	16
Figura 2. Descripción metodológica.....	18
Figura 3. Zonas pseudo-estacionarias respecto a la carga total.....	24
Figura 4. Resultados análisis ANOVA	25
Figura 5. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 1	32
Figura 6. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 2	32
Figura 7. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 3	33
Figura 8. Influencia de las variables (Escenario 1)	34
Figura 9. Influencia de las variables (Escenario 2)	34
Figura 10. Influencia de las variables (Escenario 3)	35

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A. Variables del proceso.....	46
ANEXO B. Método Normalización Z-score	47
ANEXO C. Análisis de componentes principales (7 PCA) para el caso 2.....	48
ANEXO D. Análisis de componentes principales (4 PCA) para el caso 3.....	49
ANEXO E. Diagramas de caja y bigotes de la carga total y el rendimiento	50
ANEXO F. Matriz de correlación	51
ANEXO G. Determinación del número de capas ocultas de la red.....	52
ANEXO H. Resultados de red con 7 PCA y función de activación TANSIG	53
ANEXO I. Predicción de rendimientos de DMO	54
ANEXO J. Mejores desempeños de las redes neuronales (Caso 4).....	56

RESUMEN

TÍTULO: DESMETALIZACION DE FONDOS DE VACÍO: PREDICCIÓN DE RENDIMIENTOS DE DMO UTILIZANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES*

AUTORES: ANGIE PAOLA GÓMEZ APARICIO
PAOLA ANDREA PLATA SÁNCHEZ**

PALABRAS CLAVE: Redes neuronales artificiales, DEMEX, DMO, Extracción líquido-líquido.

DESCRIPCIÓN:

Actualmente las redes neuronales son ampliamente usadas para el tratamiento de datos complejos con múltiples aplicaciones debido a su capacidad para predecir y clasificar. La implementación de redes neuronales artificiales RNA en la predicción de rendimiento de DMO en el proceso de desmetalización de fondos de vacío permite identificar arquitecturas de red con un desempeño adecuado que sea útil para la predicción cuantitativa de las variables del proceso.

Para el desarrollo de este proyecto se emplearon datos históricos correspondientes a la unidad DEMEX de la Gerencia Refinería de Barrancabermeja (GRB), a partir de esto se manejaron 4 casos de estudio, los cuales se subdividen en 3 escenarios operativos con diferente rango de operación. Para cada uno de estos casos se realizó un análisis estadístico a las variables. Las redes neuronales fueron entrenadas con la herramienta toolbox de MATLAB. Los resultados obtenidos en este estudio determinaron que el mejor desempeño fue para el escenario operativo 2 con componentes principales (PCA), reportando los errores cuadrado promedio MSE más bajos. Asimismo el análisis de sensibilidad muestra que el escenario operativo 2 presenta mayor capacidad de predicción semi-cuantitativa, es decir, es posible mejorar estos resultados explorando nuevos escenarios. Finalmente se identificaron tres escenarios compuestos por un conjunto de datos según los diferentes rangos para la carga de entrada.

* Trabajo de grado

** Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director: Giovanni Morales Medina, Dr. Ing. Químico

ABSTRACT

TITLE: DEMETALLIZATION OF VACUUM FUNDS: PREDICTION OF DMO YIELD USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS*

AUTHORS: Angie Paola Gómez Aparicio
Paola Andrea Plata Sánchez**

KEY WORDS: Artificial neural networks, DEMEX, DMO, Liquid-liquid extraction.

DESCRIPTION:

Neural networks are now widely used for the treatment of complex data with multiple applications due to their ability to predict and classify. The implementation of artificial neural networks RNA in the prediction of BMD performance in the vacuum fund demetallization process allows to identify network architectures with adequate performance that is useful for the quantitative prediction of process variables.

For the development of this project, historical data were used for the DEMEX U2500 unit of the ECOPETROL refinery in the city of Barrancabermeja. From this, 4 studies case were managed, which are subdivided into 3 operating scenarios with different operating ranges. For each of these cases, a statistical analysis was performed on of variables. The neural networks were training with the MATLAB toolbox. The results obtained in this study determined that the best performance was for the operational scenario 2 with PCA, reporting the lowest mean square errors MSE. Likewise, the sensitivity analysis shows that the operational scenario 2 presents greater capacity of semi-quantitative prediction, that is, it is possible to improve these results by exploring new scenarios. Finally, we identified three scenarios composed by a set of data according to the different ranges for the input load.

* Degree Work

** Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director: Giovanni Morales, Dr. Ing. Chemical.

INTRODUCCIÓN

El petróleo en Colombia presenta un panorama de escasez de crudo liviano y un potencial de yacimientos de crudo pesado [1]. Los crudos pesados contienen gran cantidad de impurezas (metales) que afectan la integridad de los equipos y disminuyen el rendimiento de los productos. El proceso DEMEX de la Gerencia Refinería de Barrancabermeja (GRB) es el encargado de purificar los fondos y retirar los metales por medio de extracción con solvente. Sin embargo, este proceso ha reportado rendimientos por debajo del estipulado en su diseño, lo cual impacta negativamente la economía del negocio.

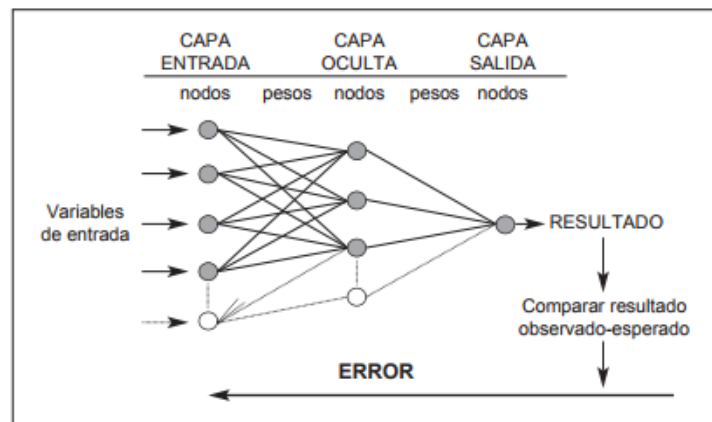
La desmetalización de fondos de vacío (DEMEX) es el proceso mediante el cual se separan los compuestos pesados y livianos provenientes de las unidades de destilación de crudo por medio de la extracción líquido-líquido; la separación se lleva a cabo usando como solvente una mezcla de propano-butano y se obtiene como producto principal una corriente de cima denominado aceite desmetalizado (DMO) con bajo contenido de carbón conradson y metales como níquel y vanadio. Según datos suministrados por la GRB, la unidad DEMEX procesa 45000 bpd de fondos de vacío, produciendo ca. 24750 bpd de DMO y ca. 20250 bpd de fondos con alto contenido de metales y asfáltenos.

La extracción líquido-líquido es la técnica que tiene como objetivo separar los constituyentes de una disolución acuosa. Se aplica cuando uno de estos constituyentes es soluble en un líquido orgánico, prácticamente inmisible con el agua, mientras que los otros constituyentes son mucho menos solubles. Al poner en contacto el líquido orgánico con la disolución, el constituyente de mayor solubilidad en el medio orgánico tenderá a pasar a dicha fase, mientras que los demás tenderán a permanecer en la disolución acuosa [2]. La selección del solvente

juega un papel importante teniendo en cuenta que de su selección depende el buen funcionamiento de la columna de extracción por ello la selectividad, la capacidad de extracción y la recuperabilidad son criterios determinantes, y más este último si el disolvente es costoso [3] [4].

Con lo anterior, el proceso DEMEX presenta una complejidad elevada y un reto para la aplicación de redes neuronales artificiales (RNA); el análisis de datos históricos y la regresión de los mismos utilizando RNA puede guiar la identificación de mejores escenarios operativos para el aumento del rendimiento de DMO. Las RNA tratan de emular el comportamiento del cerebro humano, a partir de un conjunto de datos de entrada que son sumados antes de ingresar a unas unidades de procesamiento denominadas neuronas, en donde la información es transformada según una función de activación preseleccionada [5]. El flujo de información en las RNA puede cambiar, sin embargo, una de las redes de mayor uso en la literatura abierta corresponde a la denominada como feedforward [6]

Figura 1. Estructura de una red neuronal feedforward (Backpropagation)



Fuente: Trujillano Cabello, et al (2005)

Las redes neuronales presentan múltiples aplicaciones en diferentes ámbitos. Respecto a la refinación de crudos, Tarazona, 2012, presentó un modelo predictivo para determinar la concentración de níquel y vanadio en los fondos de vacío de

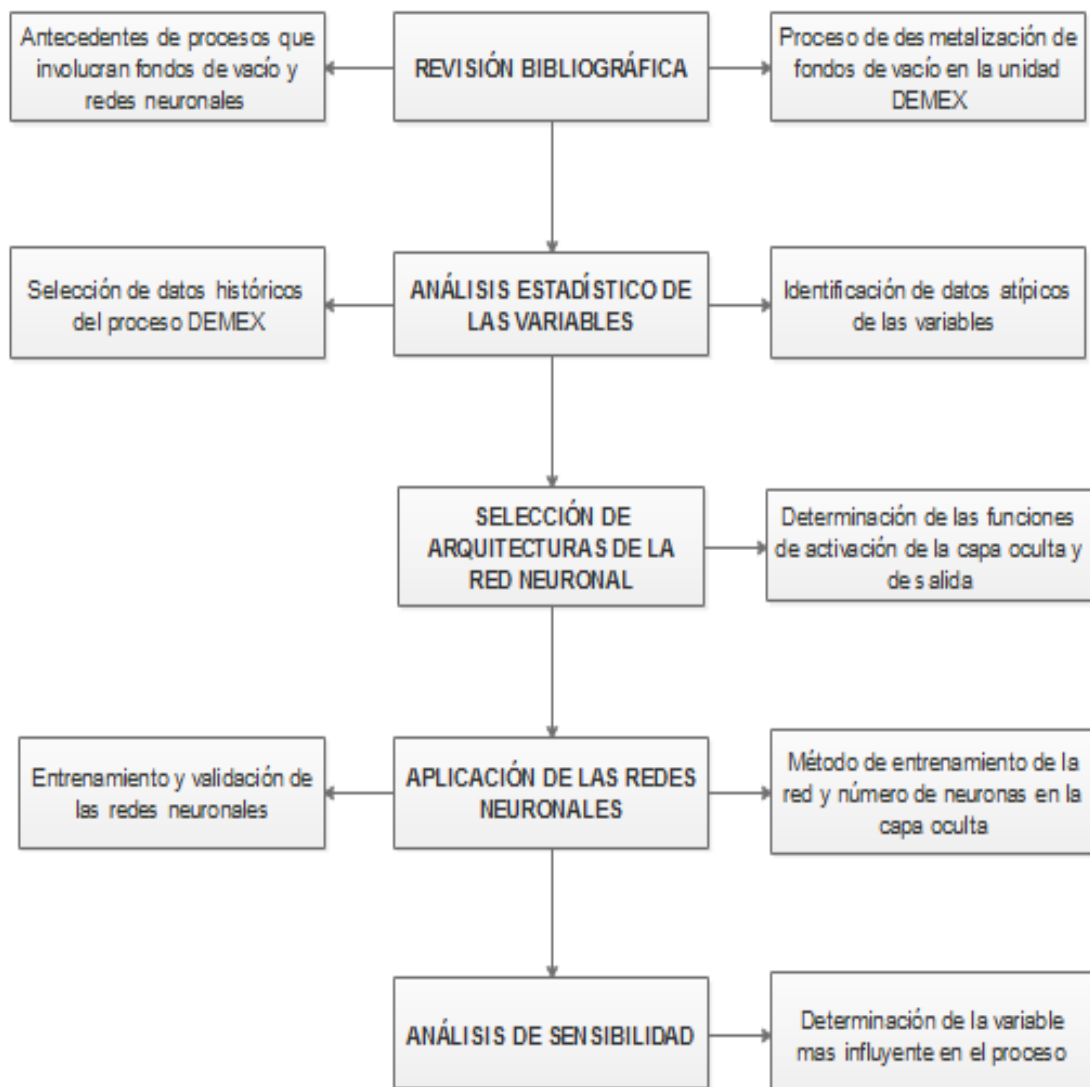
crudos colombianos, en el que exploró diferentes arquitecturas de RNA y con errores entre 5% y 7% [5]. Por su parte, Sánchez & Rey, 2009, utilizaron algoritmos genéticos con el fin de generar configuraciones de RNA para la predicción de propiedades fisicoquímicas de 30 crudos colombianos [7].

El presente documento desarrolla una metodología para aplicar las RNA en la predicción del rendimiento (%) de DMO obtenido en el proceso DEMEX de la GRB, el cual está en función de los parámetros descritos en el anexo A. El objetivo general corresponde a proponer y validar una red neuronal que considere las variables más significativas del proceso DEMEX para la predicción de rendimientos de flujo de DMO. Para lograr este objetivo se requiere la determinación de los estadísticos de las variables que influyen en el proceso de desmetalización de fondos de vacío en una ventana operativa definida, así como, la selección de la arquitectura de la RNA más adecuada para el proceso DEMEX.

1. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA

En la figura que se presenta a continuación, se muestra cada uno de los pasos que se siguieron para el desarrollo del presente trabajo de grado.

Figura 2. Descripción metodológica



1.1 ETAPA 1: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Se realizó una consulta bibliográfica acerca de la desmetalización de fondos de vacío llevada a cabo en la unidad DEMEX de la GRB. Asimismo, se revisaron los antecedentes correspondientes a dicho proceso o a procesos en donde se involucran los fondos de vacío con las RNA para tener un punto de referencia para la correspondiente arquitectura.

Carrillo, 1996 estudió el comportamiento de los solventes de desasfaltado (propano, propileno, *n*-butano e *i*-butano) para tres fondos de vacío, analizando las relaciones solvente-carga y la influencia de la temperatura, obteniendo un aumento en el rendimiento de 50%-55% a 55%-58% empleando los solventes DEMEX y *n*-butano [2].

Por otra parte Camargo & Oviedo, 2014 realizaron un modelo predictivo para determinar el porcentaje de carbón conradson presente en los fondos de vacío, a partir de espectros ATR y redes neuronales (MLP), logrando coeficientes de determinación entre 0,86 y 0,99 [8].

1.2 ETAPA 2: ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LAS VARIABLES QUE INFLUYEN EN EL PROCESO

Los datos históricos registrados en la unidad DEMEX fueron suministrados por la GRB considerando la ventana de operación para un periodo de 3 años, comprendido entre el 2014 y el 2016. Las filas de la matriz de datos históricos corresponden a las diferentes muestras tomadas en el intervalo de tiempo y las columnas presentan las variables involucradas en el proceso, las cuales son: Temperaturas de extracción, temperaturas de rectificación, grados API, carga total de DMO, carga de carbón conradson, carga de vanadio, viscosidades de la carga,

penetración, concentración de propano, concentración de isobutano, concentración de normal butano, concentración de iso pentano, relación solvente-carga, carga de carbón y rendimiento (ver anexo A).

Con base a esta matriz, se calcularon los respectivos estadísticos para cada variable (media, desviación estándar, máximo y mínimo, etc.). Por otra parte, mediante el análisis de diagrama de caja y bigotes (box-plot) se identificaron los datos atípicos para su posterior eliminación. A continuación, se procede a identificar las zonas pseudo-estacionarias. Los diferentes estados pseudo-estacionarios fueron comprobados estadísticamente por medio de un análisis de varianza con un solo factor (ANOVA); se tomaron las respectivas temperaturas de rectificación presentes en el proceso para identificar escenarios operativos diferentes.

Los datos se normalizan mediante el método Z-score restándole a la variable su media y dividiéndola por la desviación estándar (ver anexo B) [9] [10], con el fin de que todas las variables se encuentren en un mismo grado de magnitud.

1.3 ETAPA 3: SELECCIÓN DE ARQUITECTURAS DE LA RED NEURONAL

Para definir la arquitectura que presenta un mejor desempeño para la predicción del rendimiento de DMO en el proceso de desmetalización de fondos de vacío, se plantearon 4 casos diferentes para encontrar las mejores regresiones con los errores más bajos posibles y así determinar la arquitectura de red más apropiada para lograr una predicción de rendimientos de DMO.

Los casos planteados fueron los siguientes:

Caso 1: Redes neuronales para el conjunto de los tres escenarios operativos seleccionados.

Caso 2: Redes neuronales para el conjunto de 7 componentes principales, derivados de un análisis por componentes principales (PCA). El análisis de componentes principales transforma un conjunto de variables originales en otro de variables no correlacionadas, llamadas componentes principales resultantes de combinaciones lineales de las variables originales; es decir, el PCA reduce la dimensionalidad de los datos [9] [11]. Las 7 variables resultantes (7 PCA) contienen información de las 18 variables involucradas en el proceso, es decir, a cada una de las muestras le es asignada una puntuación diferente para cada componente principal. La matriz final resulta de multiplicar el valor de los loadings (ver anexo C) obtenidos en el análisis por los valores de las muestras de la matriz original. Se obtiene así una matriz de 7 columnas y 23111 filas.

Caso 3: Redes neuronales para 4 componentes principales, elegidos del conjunto descrito anteriormente. Mediante los loadings obtenidos en el análisis de componentes principales (ver anexo D) se obtiene una matriz de 4 columnas y 23111 filas.

Caso 4: Redes neuronales para tres nuevos escenarios operativos seleccionados mediante un nuevo análisis estadístico en donde se eliminan atípicos de la variable rendimiento. Asimismo mediante los loadings obtenidos en el análisis PCA se obtiene una matriz para cada escenario operativo descrita por los componentes principales.

1.4 ETAPA 4: APLICACIÓN DE REDES NEURONALES Y PREDICCIÓN DE RENDIMIENTO DE DMO.

Para llevar a cabo el entrenamiento y la validación de las redes neuronales, se empleó el Toolbox nntool que se encuentra en el paquete MATLAB R2013b (The MathWorks, inc.). La RNA Perceptrón multicapa (MultiLayer Perceptron, MLP) fue

seleccionada, mientras que el algoritmo Backpropagation fue utilizado para el entrenamiento de las redes [12]. La mejor RNA fue escogida con base a los estadísticos R^2 y error cuadrático promedio (MSE).

2. RESULTADOS: PRESENTACIÓN, ANÁLISIS Y DISCUSIÓN

Según la revisión bibliográfica realizada, la red neuronal de mayor aplicación para la predicción es el perceptrón multicapa empleando un algoritmo Backpropagation, funciones de activación en la capa oculta *tan-sig* y *log-sig* y en la capa de salida *purelin* [5] [8].

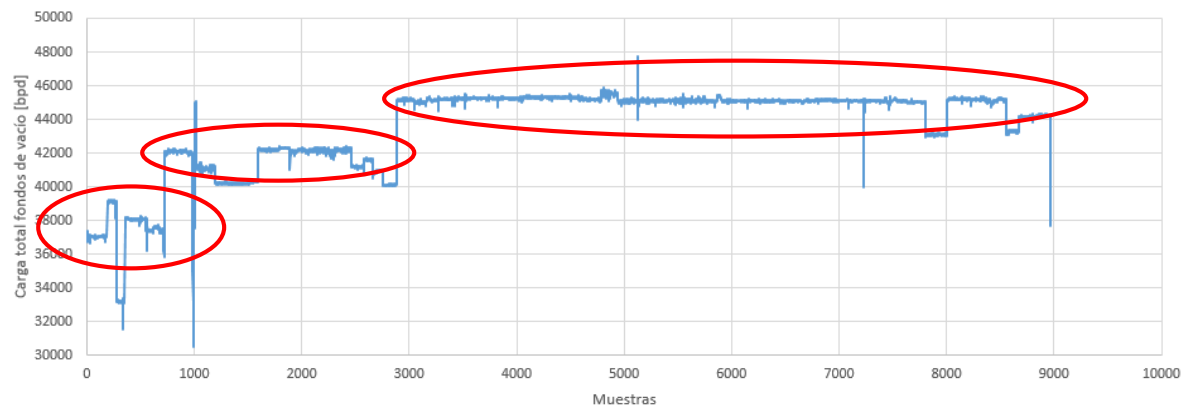
2.1 ANÁLISIS ESTADÍSTICO

Mediante el análisis del diagrama de caja y bigotes para las variables carga total y rendimiento, se identificaron los datos atípicos que posteriormente fueron eliminados (ver anexo E). Asimismo, las variables viscosidad carga 300, viscosidad carga 275 e iso pentano Y+ fueron descartadas del grupo de variables debido a que permanecieron invariables durante la ventana de operación analizada. Asimismo, la matriz de correlación fue obtenida para identificar la relación existente entre las variables independientes. Se requiere que la RNA reciba variables con bajo grado de correlación entre ellas para no sesgar el modelo y provocar el respectivo sobreajuste de la red [13]. La matriz de correlación se puede apreciar en el anexo C.

Según los resultados de la correlación, las temperaturas de extracción presentan una alta correlación, por lo que se hace conveniente solo tener en cuenta una de ellas para los análisis posteriores. De igual forma, la concentración de isobutano y *n*-butano también presentan una alta correlación (ver anexo F). En este caso se tiene en cuenta la concentración de *n*-butano debido a que el solvente empleado en el proceso está compuesto mayoritariamente por *n*-butano.

Por otra parte, la Figura 3 presenta el gráfico para la selección de los estados pseudo-estacionarios. Los estados pseudo-estacionarios se describen a continuación en términos del flujo de cara a la unidad.

Figura 3. Zonas pseudo-estacionarias respecto a la carga total



Según la figura anterior, se evidencian 3 estados pseudoestacionarios correspondientes a las zonas de carga 40000, 42500 y 45000 bpd. A partir de esto se plantean 3 escenarios operativos para los casos 1,2 y 3.

Estos estados fueron validados con el análisis de varianza de un solo factor (ANOVA); con esta se aprecia que las temperaturas de rectificación conllevan a escenarios operativos diferentes. En la figura 4 se observa que por medio de la prueba de Tukey se llega a esta conclusión debido a que la hipótesis nula (todas las medias son iguales) se descarta porque el valor de los parámetros sig y alfa son iguales a 1 y 0,05 respectivamente, es decir, se afirma la hipótesis alternativa de que al menos una o más medias son diferentes.

Figura 4. Resultados análisis ANOVA

Means Comparisons

Tukey Test

		MeanDiff	SEM	q Value	Prob	Alpha	Sig	LCL	UCL
Zona 230	Zona 220	12.77074	0.08583	210.41213	3.33067E-16	0.05	1	12.56957	12.97191
Zona 240	Zona 220	20.6086	0.08583	339.54968	3.33067E-16	0.05	1	20.40743	20.80977
Zona 240	Zona 230	7.83786	0.08583	129.13755	3.33067E-16	0.05	1	7.63669	8.03903

Sig equals 1 indicates that the means difference is significant at the 0.05 level.
 Sig equals 0 indicates that the means difference is not significant at the 0.05 level.

Homogeneity of Variance Test

Levene's Test(Absolute Deviations)

	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
Model	2	1177.85883	588.92941	133.63641	0
Error	8187	36079.72508	4.40695		

At the 0.05 level, the population variations are significantly different.

Así mismo, a partir de la figura 3 y de la eliminación de los datos atípicos respecto al rendimiento, se obtienen 3 nuevos escenarios operativos para el caso 4 a tratar, los cuales corresponden a las zonas de carga menor a 40000 bpd, entre 40000-42500 bpd y mayor a 42500 bpd.

2.2 REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Mediante la aplicación de las RNA se predice el rendimiento de DMO con respecto a sus parámetros de operación (variables de entrada), empleando dos estructuras que presentan diferente función de activación en la capa oculta. En primera instancia se utilizó la función tangente sigmoideal (TANSIG) en la capa oculta y PURELIN en la capa de salida, después se modificó la función de activación en la capa oculta por logística sigmoideal (LOGSIG), mientras que la función de salida se mantuvo.

Con respecto a la arquitectura de la red, el número de neuronas de la capa oculta se fue aumentando de dos en dos hasta completar el doble de sus variables de entrada, cumpliendo con la regla de *ad hoc* (capa oculta-capla entrada) [14]. Los

resultados obtenidos indican que se obtienen mejores desempeños cuando se emplea una sola capa oculta (ver anexo G).

Con respecto a los datos, se manejaron 2 distribuciones: en la primera (D1) se dividen los datos en dos grupos 70% y 30% para entrenamiento y validación respectivamente y en la segunda (D2) se utiliza el 100% de los datos para entrenar y validar.

Camargo y Oviedo, 2014 lograron coeficientes de determinación entre 0,86 y 0,99. Por otra parte, Tarazona, 2012 obtuvo coeficientes de determinación entre 0,87 y 0,99; esto indica que valores cercanos a estos reportes son buenos desempeños de la red neuronal.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para los diferentes casos planteados luego de realizar sus respectivos procesos de entrenamiento y validación mediante las redes neuronales.

Caso 1: Redes neuronales para el conjunto de los tres escenarios operativos (40000 bpd, 42500 bpd y 45000 bpd).

Según la tabla 1, el mejor desempeño se registró con la función de activación TANSIG; sin embargo a partir de 6 neuronas la red no generó resultados de entrenamiento y validación con esta función, por lo tanto el mejor desempeño se evidencia con la función de activación LOGSIG para la distribución 1, con una arquitectura de red 14:16:1.

CASO 2: Redes neuronales para el conjunto de componentes principales.

Los componentes principales propuestos por Morales & Pinzón [15] (ver anexo C) en su análisis de rendimientos de DMO mediante regresión multivariada, fueron

ajustados por regresión RLM. A partir de esta información se obtienen los resultados que se muestran en la tabla 2.

Tabla 1. Resultados de la red neuronal para el conjunto de los tres escenarios operativos

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	6	6
	R ²	0,719	0,666
	MSE Entrenamiento	0,293	0,334
	MSE Validación	0,264	0,326
LOGSIG	Neuronas	16	8
	R ²	0,695	0,671
	MSE Entrenamiento	0,310	0,331
	MSE Validación	0,287	0,320

Tabla 2. Resultados de la red con 7 PCA

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	4	6
	R ²	0,600	0,605
	MSE Entrenamiento	0,404	0,396
	MSE Validación	0,402	0,401
LOGSIG	Neuronas	14	10
	R ²	0,611	0,599
	MSE Entrenamiento	0,387	0,400
	MSE Validación	0,384	0,418

La tabla 2 muestra los resultados obtenidos por la red neuronal, se evidencia que para la D1 con la función LOGSIG se obtuvo el mejor rendimiento. La arquitectura de la red es 7:14:1. Cabe resaltar que la función de activación TANSIG no generó resultados de entrenamiento y validación a partir de 4 y 6 neuronas para las distribuciones propuestas respectivamente (ver anexo H). Esto se debe a que el

análisis estadístico y de componentes puede contener información poco relevante para el proceso.

CASO 3: Redes neuronales para 4 componentes principales.

A partir de la matriz de 4 componentes principales, se realiza el entrenamiento y validación de las redes para las dos distribuciones con diferentes funciones en su capa oculta.

Tabla 3. Resultados de la red con 4 PCA

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	6	6
	R ²	0,534	0,562
	MSE Entrenamiento	0,465	0,442
	MSE Validación	0,497	0,425
LOGSIG	Neuronas	4	8
	R ²	0,546	0,534
	MSE Entrenamiento	0,452	0,460
	MSE Validación	0,501	0,469

De los resultados mostrados anteriormente en la tabla 3 se puede deducir que la función TANSIG presenta un mejor desempeño de la red para la D2, empleando 6 neuronas y con una arquitectura de red 4:6:1. Asimismo, se observa que este escenario presenta los valores de coeficientes de regresión bajos y errores altos. Con lo anterior, este escenario no es eficiente para la predicción de rendimiento de DMO.

CASO 4: Redes neuronales para tres nuevos escenarios operativos.

Según la tabla 4 se observa que el mejor desempeño se presenta con la función de activación TANSIG en la capa oculta y con una arquitectura de red 7:14:1.

Tabla 4. Resultados de la red para el escenario operativo 1

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	14	14
	R ²	0,746	0,748
	MSE Entrenamiento	0,149	0,222
	MSE Validación	0,186	0,154
LOGSIG	Neuronas	10	14
	R ²	0,712	0,721
	MSE Entrenamiento	0,252	0,305
	MSE Validación	0,215	0,181

Tabla 5. Resultados de la red para el escenario operativo 2

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	8	10
	R ²	0,880	0,876
	MSE Entrenamiento	0,118	0,120
	MSE Validación	0,110	0,137
LOGSIG	Neuronas	14	10
	R ²	0,856	0,848
	MSE Entrenamiento	0,138	0,143
	MSE Validación	0,139	0,160

En la tabla 5 se aprecia que la D1 con función de activación TANSIG presenta el mejor desempeño de la red, con errores MSE bajos tanto para el entrenamiento y validación. Con respecto a la regresión se obtiene el mejor valor para un número de neuronas igual a 8. A partir de esto, la arquitectura de la red es 7:8:1.

Tabla 6. Resultados de la red para el escenario operativo 3

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	10	12
	R ²	0,736	0,745
	MSE Entrenamiento	0,257	0,253
	MSE Validación	0,270	0,278
LOGSIG	Neuronas	14	12
	R ²	0,700	0,709
	MSE Entrenamiento	0,296	0,290
	MSE Validación	0,259	0,286

En la tabla 6 se muestra que la función de activación TANSIG presenta el mejor desempeño. D1 y D2 tienen un comportamiento similar pero D1 logra su mejor desempeño con tan solo 10 neuronas, por lo tanto se prefiere el caso en el cual se obtengan buenos resultados con el menor número de neuronas posibles. La arquitectura de red en esta zona es 7:10:1.

Para mejorar el desempeño de las redes neuronales en el escenario operativo mayor a 42500 bpd se optó por eliminar los residuales presentes en esta zona. El análisis se realizó con TANSIG como función de activación en la capa oculta, debido a que la red neuronal presenta su mejor desempeño trabajando con esta función, como se observa en la tabla 6.

Los resultados obtenidos fueron los siguientes:

Tabla 7. Resultados de la red para el escenario 3.

FUNCIÓN ACTIVACIÓN CAPA OCULTA	PARÁMETROS OBTENIDOS	D1	D2
TANSIG	Neuronas	10	14
	R ²	0,803	0,797
	MSE Entrenamiento	0,200	0,201
	MSE Validación	0,182	0,190

Se puede observar que los resultados obtenidos en la tabla 7 presentan mejores rendimientos que los mostrados en la tabla 6, lo cual indica que al eliminar los residuales de la zona la red mejora su desempeño; la regresión mostró un aumento mientras que los errores correspondientes disminuyeron, mostrando un mejor desempeño para la distribución 1, empleando 10 neuronas en la capa oculta y una arquitectura de red 7:10:1.

2.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

El caso 4 correspondiente a los tres escenarios operativos de las zonas de carga <40000bpd, entre 40000-42500 bpd y >42500 bpd presenta los mejores desempeños de las redes neuronales y por lo tanto una mejor predicción del rendimiento de DMO. Según esto, los escenarios mencionados anteriormente presentan los mejores modelos de red para la predicción y por lo tanto se realiza un análisis de sensibilidad con el fin de determinar cuál o cuáles son las variables que presentan una mayor influencia en el proceso. El análisis *input perturbation* consiste en evaluar el cambio en el error cuadrático medio (MSE) de la red agregando una variación a cada neurona de entrada, es decir, perturbando cada variable de entrada en un 50% de su valor; a su vez se mantienen todas las demás neuronas de entrada en sus valores observados. El cambio resultante en el MSE para cada perturbación de entrada ilustra la importancia relativa de las variables predictoras [16] [17]. Se debe tener en cuenta que un error de estimación MSE menor implica que el coeficiente de determinación R^2 tome valores próximos a 1 y por ende se logra un mejor ajuste del modelo para predecir el rendimiento de DMO.

Los resultados del análisis de sensibilidad muestran que el escenario operativo 2 correspondiente a la zona de carga entre 40000 bpd y 42500 bpd presenta el mejor desempeño en la predicción de rendimiento de DMO; esto se puede observar al comparar las figuras 5, 6 y 7, en donde la figura 6 que corresponde al escenario

operativo 2 describe un patrón definido, lo que indica que los valores predichos por la red se aproximan a los valores experimentales. Los otros dos escenarios no presentan patrones definidos por lo que su capacidad de predicción es más baja.

A continuación se presenta la comparación de la predicción de rendimientos de DMO en los tres escenarios operativos con perturbación en la variable de entrada carga total (Figuras 5-7).

Figura 5. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 1

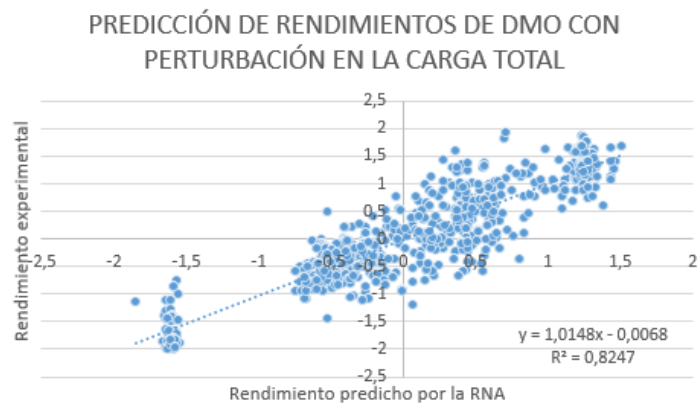


Figura 6. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 2

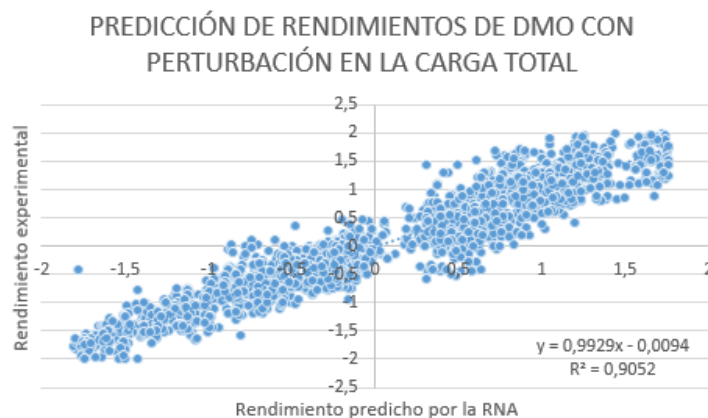
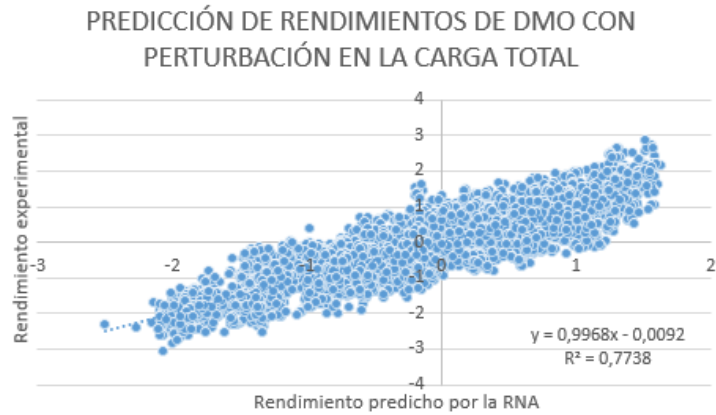


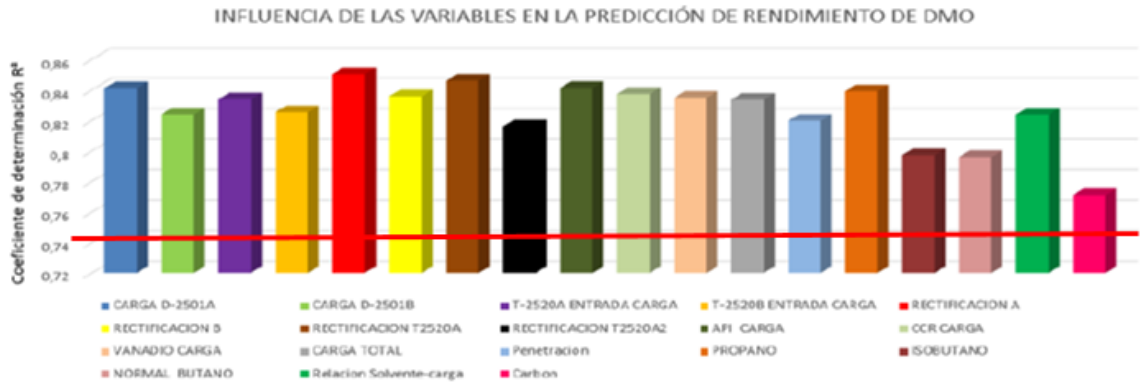
Figura 7. Distribución de variable predicha vs experimental para el escenario operativo 3



El coeficiente de determinación R^2 de los escenarios operativos 1 y 3 no son adecuados para una predicción semi-cuantitativa del rendimiento de DMO. Las predicciones del escenario 2 fueron más acertadas, sin embargo no tiene la capacidad suficiente para arrojar resultados más precisos. En el anexo I se presentan las gráficas con mejor comportamiento correspondientes al escenario 2 con los resultados obtenidos luego de perturbar cada una de las variables.

Asimismo se llevó a cabo la identificación de las variables más influyentes en el proceso, por medio de la figura de los coeficientes de relación obtenidos luego de perturbar cada variable de entrada al proceso. Cabe resaltar que los resultados registrados a continuación, representan los coeficientes de determinación obtenidos a partir de la perturbación de cada una de las variables de entrada y posteriormente son comparados con el valor predicho por la RNA sin restricciones, el cual hace referencia al mejor desempeño presentado por la red neuronal en cada uno de los escenarios (ver anexo J).

Figura 8. Influencia de las variables (Escenario 1)



En la figura 8 se registran los resultados obtenidos para el escenario 1 en donde se espera un coeficiente de determinación de 0,747, debido a que este fue su mejor desempeño cuando se realizó el análisis de regresión mediante la RNA. Se observa que todas las predicciones sobrepasan este valor (línea roja), con lo cual este escenario no predice de manera correcta el rendimiento de DMO. El rendimiento de DMO está limitado en la planta DEMEX, razón por la cual estas predicciones predicen una disminución en la calidad del producto.

Figura 9. Influencia de las variables (Escenario 2)



Para el escenario 2 se inicia con un coeficiente de determinación de 0,880. La figura 9 indica que al perturbar la temperatura de rectificación de la torre T2520A2, la

predicción se aleja de los valores de referencia y por lo tanto, esta variable representa el mayor error en el proceso. Una posible causa corresponde a que su lectura no se realizó de manera aleatoria durante el rango de operación, generando que para este caso el coeficiente de determinación presente una desviación de su valor.

Figura 10. Influencia de las variables (Escenario 3)



Por último en el escenario 3, se inicia con un ajuste de 0,802. Según los resultados, se observa que al realizar una perturbación en la temperatura de rectificación del tren A de la planta, las predicciones se alejan de los valores esperados y se puede decir que, para este rango de operación, esta variable no fue medida exitosamente y genera un error en el proceso. Por otra parte al perturbar la variable correspondiente a la composición de *n*-butano, la predicción es cercana a la deseada. Se debe tener en cuenta que el *n*-butano hace parte de la mezcla de solventes empleados en mayor proporción para la extracción, por lo cual es una variable de gran influencia en el proceso debido a que un aumento en la temperatura crítica del solvente provoca un incremento del rendimiento de DMO; pero la calidad disminuye.

3. CONCLUSIONES

Según los resultados obtenidos durante el desarrollo del presente análisis, la arquitectura de red 7:8:1, con función de activación tansig-purelin del escenario operativo 2 (zona de carga entre 40000-42500 bpd) utilizando los componentes principales, reportó los menores MSE durante el entrenamiento y validación de 0,118 y 0,110 respectivamente, con un coeficiente R^2 de 0,880. Aunque la red neuronal presente el mejor desempeño, su aplicación se limita a la predicción del rendimiento de DMO desde una perspectiva semi-cuantitativa.

Asimismo, los resultados del presente proyecto de grado permitieron identificar 3 escenarios compuestos por un conjunto de datos según los diferentes rangos para la carga de entrada. Los escenarios corresponden a las zonas de carga menor a 40000 bpd, entre 40000-42500 bpd y mayor a 42500 bpd.

4. RECOMENDACIONES

Para mejorar el desempeño de las redes neuronales en el proceso de desmetalización de fondos de vacío, se recomienda llevar a cabo los análisis empleando diferentes combinaciones de las funciones de activación en la capa oculta y en la de salida.

Se recomienda aplicar otros métodos de agrupamiento de datos que permitan una selección adecuada de los rangos de operación pseudo-estacionarios del proceso, con el fin de prescindir de estados transitorios y así mejorar la predicción.

CITAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] SANTA JAIMES, Judith; LÓPEZ GÓMEZ, Jairo. Comparative studio of the normal visbreaking process and the thermal fixed-bed process applied on Colombia heavy oils. [Base de datos en línea]. Octubre 28 de 2014. CT&F-Ciencia Tecnología y Futuro, 5(5), 75-96. (Recuperado en 8 de Diciembre de 2016). Disponible en http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0122-53832014000200005

[2] OCON GARCÍA, Joaquín. TOJO BARREIRO, Gabriel. Problemas de Ingeniería Química: Operaciones básicas. Tomo I. Madrid: Aguilar de Ediciones, 111p.

[3] CARRILLO, J; CÁCERES, J. Solventes de desasfaltado. [Base de datos en línea]. Diciembre de 1996. CT&F-Ciencia Tecnología y Futuro, 1(2), 67-76. (Recuperado en 3 de Diciembre de 2016). Disponible en http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0122-53831996000100006

[4] CORREA, Noguez; AUSTREBERTO, Guillermo. Proceso de separación y operaciones unitarias. México D.F: Instituto Politécnico Nacional. 2004, 49p
Está en línea
<http://ezproxy.uis.edu.co:2051/lib/bibliouissp/reader.action?docID=10450275&ppg=150>

[5] TARAZONA, José. Construcción de un modelo predictivo para la concentración de níquel y vanadio en fondos de vacío de crudos colombianos utilizando redes neuronales artificiales y espectroscopía de plasma inducido por láser. Tesis de

Magíster en Física, mención en Física. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias, 2012. Disponible en <http://tangara.uis.edu.co>

[6] SERRANO, Antonio; SORIA, Emilio; MARTÍN, José. Redes neuronales artificiales. [En línea]. Open Course Ware. Valencia: Universidad de Valencia. 2009 (Recuperado en 14 de Diciembre de 2016). Disponible en http://ocw.uv.es/ingenieria-y-arquitectura/1-2/Course_listing

[7] SÁNCHEZ VILLALVA, Alvaro; REY GARCIA, Vanessa. Implementación de algoritmos genéticos en un sistema distribuido como herramienta para la generación automática de redes neuronales utilizando datos de crudos y fracciones. Tesis de grado, mención en Ingeniería de Sistemas. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas, 2009. Disponible en <http://tangara.uis.edu.co>

[8] CAMARGO REINA, Katherine; OVIEDO HERNÁNDEZ, Steffany. Construcción de un modelo predictivo para la determinación del porcentaje de carbón conradson en fondos de vacío usando redes neuronales. Tesis de grado, mención en Química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias, 2014. Disponible en <http://tangara.uis.edu.co>

[9] JIMÉNEZ, Fernando. Redes neuronales y preprocesado de variables para modelos y sensores en bioingeniería. Tesis de doctorado en Ingeniería electrónica. Valencia: Universidad Politécnica de Valencia, 2012, 44p. Disponible en <https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/16702/tesisUPV3874.pdf?sequence=1>

[10] BERROCAL ALONSO, José; GARCÍA FIGUEROLA, Carlos; ZAZO RODRÍGUEZ, Ángel. Mejoras en la recuperación de información en la web mediante el tratamiento de la información en los enlaces. [Base de datos en línea]. Junio de

2006. Scire: Representación y organización del conocimiento, 12(1), 2006, 197-209. (Recuperado en 12 de marzo de 2017). Disponible en <http://ibersid.eu/ojs/index.php/scire/article/view/1595/1567>

[11] GONZÁLEZ MARTÍN, Pilar, *et al.* Una aplicación del análisis de componentes principales en el área educativa. [En línea]. Economía. Mérida: Universidad de Los Andes. Recuperado en (15 mayo 2017). Disponible en http://iies.faces.ula.ve/revista/articulos/revista_09/pdf/rev09gonzalez_diaz.pdf

[12] CASTILLO, Enrique. A very fast learning method for neural networks based on sensitivity analysis. [Base de datos en línea]. Julio de 2006. Journal of Machine Learning Research, Vol.7, 2006, 1160. (Recuperado en 21 de marzo). Disponible en <http://www.jmlr.org/papers/volume7/castillo06a/castillo06a.pdf>

[13] MENDENHALL, William; BEAVER, Robert & BEAVER, Barbara. Introducción a la probabilidad y estadística. Cengage Learning. 2006. p.580-581. ISBN 978-607-481-466-8

[14] ZEPEDA HERNÁNDEZ, José Ángel, *et al.* Metodología para determinar la topología, patrones de parámetros eléctricos y entrenamiento de una Red Neuronal Artificial para un control inteligente. Revista Tecnología Digital. Vol. 5 No 1, 2015. Disponible en http://www.revistatecnologiadigital.com/pdf/05_009_metodolog%C3%ADa_topolog%C3%ADa_patrones_par%C3%A1metros_el%C3%A9ctricos_entrenamiento_red_neuronal.pdf

[15] MORALES ROJAS, Ángelica; PINZÓN ARIAS, Jenny. Análisis del desempeño del proceso de desmetalización de fondos de vacío utilizando estadística multivariada. Tesis de grado, mención en Ingeniería Química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingenierías Fisicoquímicas, 2017.

[16] OLDEN, Julian; JOY, Michael; DEATH, Russell. An accurate comparison of methods for quantifying variable importance in artificial neural networks using simulated data. [Base de datos en línea]. Marzo 15 de 2004. Ecological modelling, Vol. 178, 2004, 389-97. (Recuperado en 16 de mayo de 2017). Disponible en <http://www.sciencedirect.com>

[17] GEVREY, Muriel; DIMOPOULOS, Ioannis; LEK, Sovan. Review and comparison of methods to study to contribution of variables in artificial neural network models. [Base de datos en línea]. Marzo 22 de 2003. Ecological modelling, Vol. 160, 2003, 349-264. (Recuperado en 27 de mayo de 2017). <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304380002002570>

BIBLIOGRAFÍA

BERROCAL ALONSO, José; GARCÍA FIGUEROLA, Carlos; ZAZO RODRÍGUEZ, Ángel. Mejoras en la recuperación de información en la web mediante el tratamiento de la información en los enlaces.. Scire: Representación y organización del conocimiento, 12(1), 2006, 197-209.

CARRILLO, J; CÁCERES, J. Solventes de desasfaltado. CT&F-Ciencia Tecnología y Futuro, 1(2), 67-76.

CASTILLO, Enrique. A very fast learning method for neural networks based on sensitivity analysis.. Journal of Machine Learning Research, Vol.7, 1160, 2006.

CORREA, Noguez; AUSTREBERTO, Guillermo. Proceso de separación y operaciones unitarias. México D.F: Instituto Politécnico Nacional. 2004, 49p

GEVREY, Muriel; DIMOPOULOS, Ioannis; LEK, Sovan. Review and comparison of methods to study to contribution of variables in artificial neural network models. Marzo 22 de 2003. Ecological modelling, Vol. 160, 2003, 349-264.

GONZÁLEZ MARTÍN, Pilar, *et al.* Una aplicación del análisis de componentes principales en el área educativa. Economía. Mérida: Universidad de Los Andes.

GURNEY, Kevin. An introduction to neural networks. London: CRC Press, 2003. 122,129p

JIMÉNEZ, Fernando. Redes neuronales y preprocesado de variables para modelos y sensores en bioingeniería. Tesis de doctorado en Ingeniería electrónica. Valencia: Universidad Politécnica de Valencia, 2012, 44p.

KIREW, D, *et al.* Application of Kohonen Neural Networks in Classification of Biologically Active Compounds. Septiembre 24 de 2006. Sar and Qsar Environmental research, Vol. 8, 1-2.

MENDENHALL, William; BEAVER, Robert & BEAVER, Barbara. Introducción a la probabilidad y estadística. Cengage Learning. 2006. p.580-581. ISBN 978-607-481-466-8

MOGHADAM, M; ASGHARZADEH, S. On the application of artificial neural network for modeling liquid-liquid equilibrium. Mayo 8 de 2016. Journal of Molecular Liquids, 220(2016), 339-345.

MONTGOMERY, Douglas; RUNGER, George. Probabilidad y estadística aplicadas a la ingeniería, México. Mc Graw –Hill, 1996.

MORALES ROJAS, Ángelica. PINZÓN ARIAS, Jenny. Análisis del desempeño del proceso de desmetalización de fondos de vacío utilizando estadística multivariada. Tesis de grado, mención en Ingeniería Química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingenierías Fisicoquímicas, 2017.

NIÑO LIZCANO, Juan David. Aplicación de la regresión lineal múltiple y las redes neuronales artificiales en el análisis del proceso de hidrotreatmento de ACPM. Tesis de grado en Ingeniería Química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas, 2016.

OCÓN GARCÍA, Joaquín. TOJO BARREIRO, Gabriel. Problemas de Ingeniería Química: Operaciones básicas. Tomo I. Madrid: Aguilar de Ediciones, 111p.

OLDEN, Julian; JOY, Michael; DEATH, Russell. An accurate comparison of methods for quantifying variable importance in artificial neural networks using simulated data. Marzo 15 de 2004. Ecological modelling, Vol. 178, 2004, 389-97.

OVANDO, Gustavo; BOCCO, Mónica y SAYAGO, Silvina. Redes neuronales para modelar predicción de heladas. Marzo de 2005. Agricultura técnica, 5(1), 65-73.

SÁNCHEZ VILLALVA, Alvaro. REY GARCIA, Vanessa. Implementación de algoritmos genéticos en un sistema distribuido como herramienta para la generación automática de redes neuronales utilizando datos de crudos y fracciones. Tesis de grado, mención en Ingeniería de Sistemas. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas, 2009.

SANTA JAIMES, Judith; LÓPEZ GÓMEZ, Jairo. Comparative studio of the normal visbreaking process and the thermal fixed-bed process applied on Colombia heavy oils. Octubre 28 de 2014. CT&F-Ciencia Tecnología y Futuro, 5(5), 75-96.

SERRANO, Antonio; SORIA, Emilio; MARTÍN, José. Redes neuronales artificiales. Open Course Ware. Valencia: Universidad de Valencia. 2009

TARAZONA, JÓse. Construcción de un modelo predictivo para la concentración de níquel y vanadio en fondos de vacío de crudos colombianos utilizando redes neuronales artificiales y espectroscopía de plasma inducido por láser. Tesis de Magíster en Física, mención en Física. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias, 2012.

YU, Chuanbo. ZHANG, Linzhou. GUO, Xiuying. XU, Zhiming. SUN, Xuewen. XU, Chnuming. Zhao, Suoqi. Association model for nickel and vanadium with asphaltene during solvent the asphaltting. *_Energy & fuels* Vol. 29, 2015.

ZEPEDA HERNÁNDEZ, José Ángel, *et al.* Metodología para determinar la topología, patrones de parámetros eléctricos y entrenamiento de una Red Neuronal Artificial para un control inteligente. *Revista Tecnología Digital*. Vol. 5 No 1, 2015.

ANEXOS

ANEXO A. Variables del proceso

Tabla 1. Unidades de las variables del proceso

NOMBRE	NOMENCLATURA	UNIDADES
Temperatura de extracción en el sedimentador D-2501A	TE CARGA D-2501A	°F
Temperatura de extracción en el sedimentador D-2501B	TE CARGA D-2501B	°F
Temperatura de extracción en la torre desasfaltadora T-2520A	T-2520A ENTRADA CARGA	°F
Temperatura de extracción en la torre desasfaltadora T-2520B	T-2520B ENTRADA CARGA	°F
Temperatura de rectificación en el tren A	T RECTIFICACION A	°F
Temperatura de rectificación en el tren B	T RECTIFICACION B	°F
Temperatura de rectificación en la torre T2520A	T RECTIFICACION T2520A	°F
Temperatura de rectificación en la torre T2520A U2500-TI25225	T RECTIFICACION T2520A2	°F
Grados API de la carga	°API CARGA	° API
Contenido de carbón conradson en la carga	CCR CARGA	% masa
Contenido de vanadio en la carga	VANADIO CARGA	ppm
Carga total de fondos de vacío	CARGA TOTAL	BPD
Penetración	PENETRACIÓN	mm
Composición de propano	PROPANO	% molar
Composición de isobutano	ISOBUTANO	% molar
Composición de normal butano	NORMAL BUTANO	% molar
Relación solvente-carga	RELACIÓN SOLVENTE-CARGA	
Contenido de carbón en la carga	CARBÓN	% masa
Rendimiento de DMO	RENDIMIENTO	% masa

ANEXO B. Método Normalización Z-score

Para obtener los datos normalizados se empleó la siguiente expresión:

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j}$$

Dónde:

x'_{ij} es la variable autoescalada

x_{ij} es el dato a autoescalar

\bar{x}_j es la media de la variable correspondiente

s_j es la desviación estándar de la variable correspondiente

ANEXO C. Análisis de componentes principales (7 PCA) para el caso 2

Tabla 1. Loadings para los 7 PCA

VARIABLES DEL PROCESO		PC-1	PC-2	PC-3	PC-4	PC-5	PC-6	PC-7
CARGA D-2501A	U2500-TIC25001	0,3091749	0,3461556	-0,08131433	0,06367068	-0,1166124	-0,008728348	0,03520144
CARGA D-2501B	U2500-TIC25003	0,3115714	0,3495961	-0,0715549	0,07553523	-0,1068123	-0,01231364	0,04286885
T-2520A ENTRADA CARGA	U2500-TIC25212	-0,2772315	0,3858241	0,1172832	-0,1670234	-0,151171	-0,04320189	-0,1858999
T-2520B ENTRADA CARGA	U2500-TIC25224	-0,2858891	0,3719844	0,1104365	-0,1372531	-0,1867927	-0,008561549	-0,1685003
RECTIFICACION A	U2500-TI25005	0,2366019	0,1087642	-0,4108087	-0,275363	-0,2622148	0,06642938	-0,05987549
RECTIFICACION B	U2500-TI25010	0,2707334	0,06624075	-0,2695405	-0,3144732	-0,1480491	-0,1833272	-0,1832048
RECTIFICACION T2520A	U2500-TI25214	-0,2738349	0,2742864	0,04143986	-0,3015927	-0,009939866	0,1525828	0,1581637
RECTIFICACION T2520A	U2500-TI25225	0,06370491	0,2174761	0,1398015	-0,4157111	0,3336149	0,1282431	0,5950569
API CARGA	U2500-API CARGA	-0,2596879	0,07019612	-0,396019	0,1864161	0,05371858	0,1782809	0,1838938
CCR CARGA	U2500-CCR CARGA	0,2210335	-0,09886742	0,2119743	-0,113282	0,0420768	-0,289447	0,1468882
VANADIO CARGA	U2500-VANADIO CARGA	0,138694	-0,07612726	0,2118505	-0,16999	-0,02734768	0,4904286	-0,5266273
CARGA TOTAL	U2500-FQ25001	-0,3483978	0,2386383	0,03148714	-0,01736316	0,1174539	-0,1586164	-0,1871195
Penetracion	U2500-PENETRACION CARGA	-0,1243595	0,03913702	-0,5571222	0,1822315	-0,04280295	0,2469498	0,1146082
PROPANO	U2500-PROPANO	-0,2583446	-0,08281806	0,1547358	0,2569681	-0,3648558	-0,05057234	0,1585077
ISOBUTANO	U2500-ISO-BUTANO	-0,1494807	-0,3386745	-0,1803665	-0,485986	0,1232739	-0,009998075	-0,05621059
NORMAL BUTANO	U2500-N-BUTANO	0,2531063	0,333722	0,1206926	0,2657897	0,1676096	-0,07504912	-0,02431815
Relacion Solvente-carga	U2500-FQ25005	0,1072077	-0,0875721	0,2653369	-0,02800722	-0,4915968	0,5197585	0,2864124
Carbon	U2500-CCR DMO	0,05835	0,1113726	0,01310092	0,1462169	0,5254213	0,4465613	-0,1610236

ANEXO D. Análisis de componentes principales (4 PCA) para el caso 3

Tabla 1. Loading para los 4 PCA

VARIABLES DEL PROCESO		PC-1	PC-2	PC-3	PC-4
CARGA D-2501A	U2500-TIC25001	0,3091749	0,3461556	-0,08131433	0,06367068
CARGA D-2501B	U2500-TIC25003	0,3115714	0,3495961	-0,0715549	0,07553523
T-2520A ENTRADA CARGA	U2500-TIC25212	-0,2772315	0,3858241	0,1172832	-0,1670234
T-2520B ENTRADA CARGA	U2500-TIC25224	-0,2858891	0,3719844	0,1104365	-0,1372531
RECTIFICACION A	U2500-TI25005	0,2366019	0,1087642	-0,4108087	-0,275363
RECTIFICACION B	U2500-TI25010	0,2707334	0,06624075	-0,2695405	-0,3144732
RECTIFICACION T2520A	U2500-TI25214	-0,2738349	0,2742864	0,04143986	-0,3015927
RECTIFICACION T2520A	U2500-TI25225	0,06370491	0,2174761	0,1398015	-0,4157111
API CARGA	U2500-API CARGA	-0,2596879	0,07019612	-0,396019	0,1864161
CCR CARGA	U2500-CCR CARGA	0,2210335	-0,09886742	0,2119743	-0,113282
VANADIO CARGA	U2500-VANADIO CARGA	0,138694	-0,07612726	0,2118505	-0,16999
CARGA TOTAL	U2500-FQ25001	-0,3483978	0,2386383	0,03148714	-0,01736316
Penetracion	U2500-PENETRACION CARGA	-0,1243595	0,03913702	-0,5571222	0,1822315
PROPANO	U2500-PROPANO	-0,2583446	-0,08281806	0,1547358	0,2569681
ISOBUTANO	U2500-ISO-BUTANO	-0,1494807	-0,3386745	-0,1803665	-0,485986
NORMAL BUTANO	U2500-N-BUTANO	0,2531063	0,333722	0,1206926	0,2657897
Relacion Solvente-carga	U2500-FQ25005	0,1072077	-0,0875721	0,2653369	-0,02800722
Carbon	U2500-CCR DMO	0,05835	0,1113726	0,01310092	0,1462169

ANEXO E. Diagramas de caja y bigotes de la carga total y el rendimiento

Figura 1. Box-plot carga total

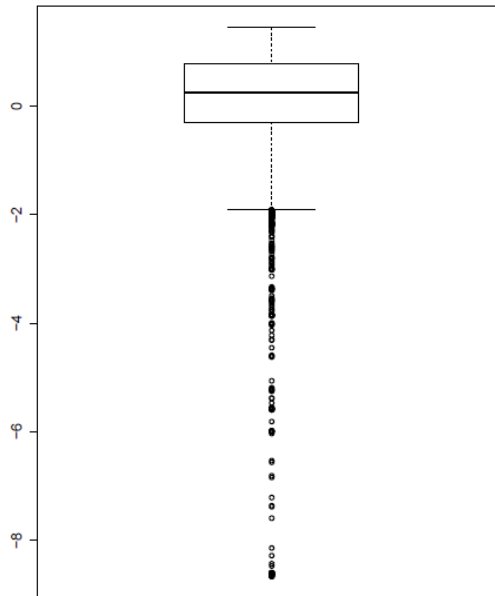
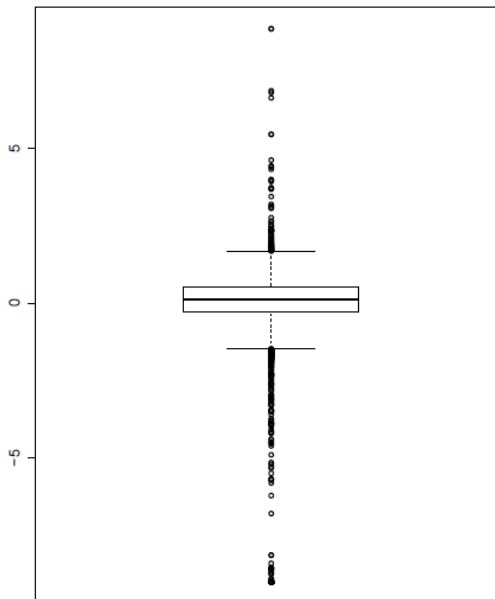


Figura 2. Box-plot rendimiento



ANEXO F. Matriz de correlación

Tabla 1. Matriz de correlación de las variables

	TE D-2501A	TE D-2501B	TE T-2520A	TE T-2520B	TR A	TR B	TR T2520A	TR T2520A	GRADOS API
TE D-2501A	1,000								
TE D-2501B	0,969	1,000							
TE T-2520A	-0,099	-0,112	1,000						
TE T-2520B	-0,113	-0,126	0,922	1,000					
TR A	0,627	0,592	-0,152	-0,156	1,000				
TR B	0,590	0,580	-0,199	-0,236	0,773	1,000			
TR T2520A	-0,186	-0,208	0,661	0,656	-0,131	-0,230	1,000		
TR T2520A	0,191	0,202	0,079	0,046	0,103	0,139	0,159	1,000	
GRADOS API	-0,258	-0,268	0,304	0,346	-0,111	-0,299	0,381	-0,148	1,000
CARGA CCR	0,230	0,242	-0,347	-0,366	0,173	0,244	-0,362	0,154	-0,490
CARGA VANADIO	0,109	0,119	-0,200	-0,201	0,088	0,092	-0,174	0,096	-0,316
CARGA TOTAL	0,039	0,022	0,698	0,671	-0,072	-0,104	0,495	0,014	0,397
Penetracion	-0,116	-0,128	0,105	0,156	0,086	-0,134	0,174	-0,191	0,584
[] PROPANO	-0,302	-0,303	0,318	0,391	-0,301	-0,338	0,258	-0,271	0,358
[] ISOBUTANO	-0,204	-0,220	-0,026	-0,032	0,016	-0,003	0,200	-0,178	0,125
[] NORMAL BUTANO	0,253	0,279	-0,056	-0,075	0,063	0,101	-0,267	0,264	-0,245
SOLVENTE/CARGA	-0,158	-0,144	-0,163	-0,139	-0,085	-0,168	-0,088	-0,009	-0,200
CARGA CARBÓN	0,103	0,110	-0,063	-0,066	0,028	0,007	-0,029	0,107	0,015
RENDIMIENTO	0,351	0,357	0,277	0,265	0,202	0,090	0,167	-0,017	0,281

Tabla 2. Matriz de correlación de las variables (continuación)

	CARGA CCR	CARGA VANADIO	CARGA TOTAL	Penetracion	[] PROPANO	[] ISOBUTANO	[] NORMAL BUTANO	SOLVENTE/CARGA	CARGA CARBÓN	RENDIMIENTO
TE D-2501A										
TE D-2501B										
TE T-2520A										
TE T-2520B										
TR A										
TR B										
TR T2520A										
TR T2520A										
GRADOS API										
CARGA CCR	1,000									
CARGA VANADIO	0,180	1,000								
CARGA TOTAL	-0,349	-0,241	1,000							
Penetracion	-0,342	-0,189	0,130	1,000						
[] PROPANO	-0,314	-0,249	0,362	0,142	1,000					
[] ISOBUTANO	-0,082	-0,036	0,048	0,129	0,143	1,000				
[] NORMAL BUTANO	0,161	0,076	-0,118	-0,183	-0,402	-0,872	1,000			
SOLVENTE/CARGA	0,077	0,207	-0,563	-0,124	0,007	-0,041	0,004	1,000		
CARGA CARBÓN	-0,020	0,097	-0,005	0,010	-0,149	-0,089	0,130	-0,021	1,000	
RENDIMIENTO	-0,168	-0,128	0,600	0,262	0,120	-0,101	0,041	-0,350	0,120	1,000

ANEXO G. Determinación del número de capas ocultas de la red

Tabla 1. Elección del número de capas ocultas

CAPAS OCULTAS	NEURONAS	R²	MSE [Entrenamiento]	MSE [Validación]
1	2	0,698	0,264	0,257
2	2	0,633	0,303	0,352
3	2	0,639	0,323	0,285

ANEXO H. Resultados de red con 7 PCA y función de activación TANSIG

**Tabla 1. Resultados de la red para 7 PCA y función de activación TANSIG
(Distribución 1)**

NEURONAS	REGRESIÓN	MSE [Entrenamiento]	MSE [Validación]
2	0.718	0.485	0.483
4	0.775	0.404	0.402
6	0.076	0	-
8	0.056	0	-
10	0.122	0	-
12	-0.448	0	-
14	-0.246	0	-

**Tabla 2. Resultados de la red para 7 PCA y función de activación TANSIG
(Distribución 2)**

NEURONAS	REGRESIÓN	[MSE] Entrenamiento	[MSE] Validación
2	0.719	0.487	0.473
4	0.776	0.401	0.383
6	0.778	0.396	0.401
8	0.382	0	-
10	0.006	0	-
12	-0.041	0	-
14	-0.315	0	-

ANEXO I. Predicción de rendimientos de DMO

Figura 1. Predicción de rendimientos perturbando TE D-2501A

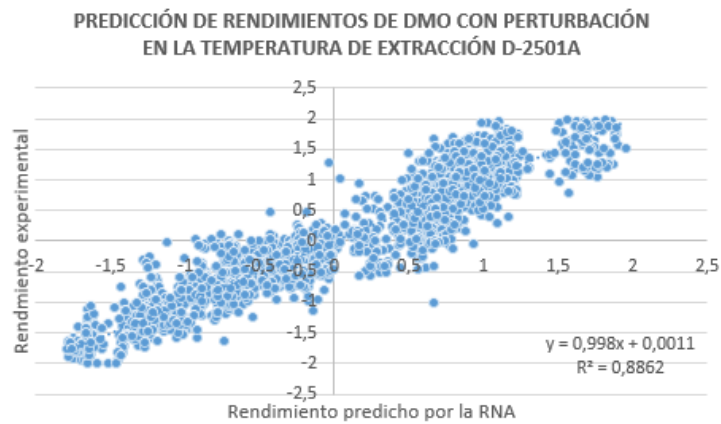


Figura 2. Predicción de rendimientos perturbando normal butano

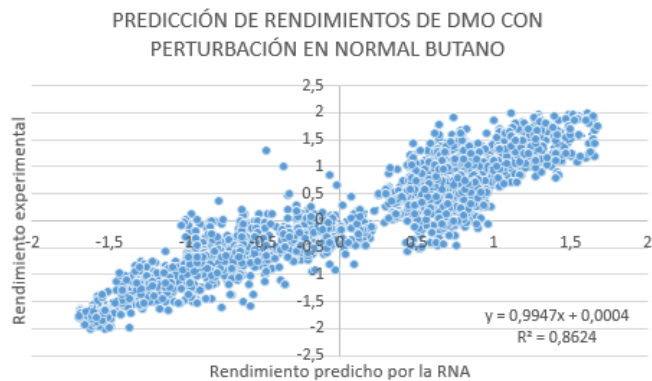
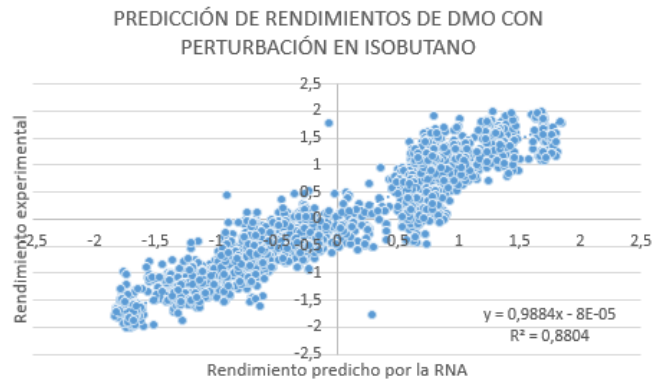


Figura 3. Predicción de rendimientos de DMO con perturbación en isobutano



ANEXO J. Mejores desempeños de las redes neuronales (Caso 4)

Tabla 1. Mejores desempeños de las redes neuronales

ESCENARIO OPERATIVO 1	Neuronas	14,000
	R²	0,747
ESCENARIO OPERATIVO 2	Neuronas	8,000
	R²	0,880
ESCENARIO OPERATIVO 3	Neuronas	10,000
	R²	0,802