

**PREDICCIÓN DE TEMPERATURAS DE EVAPORADOS DE DIÉSEL  
UTILIZANDO ESPECTROS NIR Y ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO**

**TANIA PAOLA PÉREZ ARÉVALO  
ÁLVARO JOSÉ PICÓN VARGAS**



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

**2017**

**PREDICCIÓN DE TEMPERATURAS DE EVAPORADOS DE DIÉSEL  
UTILIZANDO ESPECTROS NIR Y ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO**

**TANIA PAOLA PÉREZ ARÉVALO  
ÁLVARO JOSÉ PICÓN VARGAS**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar por el título de  
Ingeniero Químico**

**Director:**

**GIOVANNI MORALES MEDINA  
Dr. Ingeniería Química**



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

**2017**

## DEDICATORIA

*Principalmente a Dios por permitirme alcanzar un peldaño más en mi vida.*

*A mis padres, Yolanda Arévalo y Álvaro Pérez que fueron mi más grande motivación. Mil gracias por su incomparable amor, dedicación, paciencia y por sus sabios consejos para hacer de mí una mejor persona cada día.*

*A mi hermano, Jose Luis Pérez por su apoyo constante y por hacer parte de todos los mejores momentos de mi vida.*

*A Pastora López, por estar presente al inicio de mi carrera y por sus palabras de aliento en cada momento.*

*A mi novio, Anuar Amaya por hacer parte de todo mi proceso universitario, por brindarme su incondicional apoyo en los buenos y malos momentos de mi carrera.*

*Tania Paola Pérez Arévalo*

## DEDICATORIA

*A Dios, por haberme dado salud para lograr mis objetivos.*

*A mis padres, Álvaro Picón y Berenice Vargas por ser el pilar fundamental en todo lo que soy y por su apoyo incondicional.*

*A mis hermanos Carlos, Andrés y Santiago por ser el incentivo para seguir adelante con este objetivo y por estar conmigo en cada momento.*

*A mi familia en general, por haberme brindado su apoyo y por compartir conmigo buenos y malos momentos.*

*A mis compañeros y amigos, por su apoyo y por su indispensable ayuda cuando la necesite.*

*Álvaro José Picón Vargas*

## **AGRADECIMIENTOS**

A Dios por su infinito amor y grandeza para alcanzar esta meta.

Al director del proyecto Giovanni Morales Medina, por su confianza en nosotros para realizar este trabajo de investigación, con el cual tuvimos la oportunidad de enriquecer nuestros conocimientos acerca de estadísticas multivariadas aplicadas a las propiedades del diésel colombiano. También agradecemos por su paciencia, dedicación y disponibilidad al momento de compartir sus valiosos conocimientos en el tema.

A todos y cada uno de los docentes de la Escuela de ingeniería Química por acompañarnos y brindarnos los pilares necesarios en nuestra formación como profesionales íntegros y competentes.

A los compañeros y demás personas que intervinieron durante este proceso de trabajado de grado.

## CONTENIDO

	<b>Pág.</b>
INTRODUCCIÓN .....	15
1. METODOLOGÍA .....	18
2. ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	21
2.1. ANÁLISIS ESPECTRAL .....	21
2.2. REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE (MLR) .....	22
2.3. ANÁLISIS POR COMPONENTES PRINCIPALES (PCA) .....	23
2.4. REGRESIÓN DE MÍNIMOS CUADRADOS PARCIALES (PLS) .....	26
3. CONCLUSIONES .....	33
4. RECOMENDACIONES .....	34
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	35
BIBLIOGRAFÍA .....	38
ANEXOS .....	42

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
Tabla 1. Calibración y validación de las temperaturas MLR .....	23
Tabla 2. Calibración y validación PLS. ....	26
Tabla 3. Calibración y validación de las temperaturas PLS por validación cruzada con un 30%, 70%,80% de aporte de los números de onda. ....	27
Tabla 4. Calibración y validación de las temperaturas PLS por validación cruzada .....	29
Tabla 5. Calibración y validación de las temperaturas PLS con un 50% de aporte en números de onda .....	30

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Pág.</b>
Figura 1. Diagrama de bloques descripción metodología. ....	18
Figura 2. Rango espectral NIR para determinar las temperaturas de evaporados. ....	22
Figura 3. Score de propiedades PCA .....	24
Figura 4. Loadings de números de onda. ....	25
Figura 5. Varianza vs PCs .....	25
Figura 6. Pesos coeficientes de regresión T30 PLS. ....	27
Figura 7. Pesos coeficientes de regresión T50 PLS. ....	28
Figura 8. Pesos coeficientes de regresión T70 PLS. ....	28
Figura 9. Pesos coeficientes de regresión para T30.....	31
Figura 10. Pesos coeficientes de regresión para T50.....	31
Figura 11. Pesos coeficientes de regresión para T70.....	32

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
ANEXO A. MATRIZ 61X20 DE LAS ÁREAS MÁS NEGATIVAS .....	43
ANEXO B. PROPIEDADES ESPECÍFICAS DEL DIÉSEL CORRIENTE COLOMBIANO.....	45
ANEXO C. REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE (MLR).....	47
ANEXO D. FRECUENCIAS DE ABSORCIÓN DE GRUPOS FUNCIONALES PARA LA REGIÓN NIR .....	49

## RESUMEN

**TITULO:** PREDICCIÓN DE TEMPERATURAS DE EVAPORADOS DE DIÉSEL UTILIZANDO ESPECTROS NIR Y ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO.\*

**AUTORES:** TANIA PAOLA PÉREZ ARÉVALO & ÁLVARO JOSÉ PICÓN VARGAS.\*\*

**PALABRAS CLAVES:** DIESEL, ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CERCANA, QUIMIOMETRÍA, MLR, PCA, PLS, TEMPERATURAS DE EVAPORADO.

### DESCRIPCIÓN:

En el presente trabajo se desarrolló una regresión de las temperaturas de evaporado en muestras de diésel utilizando los respectivos espectros NIR. El ajuste utilizó una base de datos de 61 espectros NIR, suministrados por la Gerencia de la refinería de Barrancabermeja (GRB) de ECOPETROL S.A. Las técnicas estadísticas multivariadas aplicadas fueron: regresión lineal múltiple (MLR), análisis por componentes principales (PCA) y regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS); estos procedimientos matemáticos fueron efectuados con la ayuda del software *The Unscrambler X* versión 10.3.

El análisis estadístico consideró el rango espectral de 6442.35 - 9001.749  $\text{cm}^{-1}$ ; sobre este rango se aplicaron diferentes pre-tratamientos tales como: corrección de línea base, derivadas (Savitzky-Golay), normalización y auto-escalado de datos, con el fin de corregir posibles errores instrumentales y de manipulación de muestras y datos. Según el análisis PCA, es posible identificar las muestras analizadas por similitud respecto a su naturaleza química y el número de componentes principales que reflejan la mayor variación de la información que está contenida en las variables originales. Respecto a las regresiones, RLM reportó un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) y una validación desfavorable para las tres temperaturas de evaporado.

Según los resultados, los modelos obtenidos por PLS presentan el mejor desempeño en la predicción de T30, T50 y T70 a partir de los espectros NIR. Por último, la ampliación de la base de datos de espectros NIR de muestras de diésel es recomendable para una mejora en los resultados de las regresiones y su aplicabilidad a nivel predictivo.

---

\* Trabajo de Grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina, Dr. Ing. Químico.

## ABSTRACT

**TITLE:** PREDICTION OF EVAPORATED TEMPERATURES FOR DIESEL SAMPLES USING NIR SPECTRA AND CHEMOMETRIC ANALYSIS.\*

**AUTHOR:** TANIA PAOLA PÉREZ ARÉVALO & ÁLVARO JOSÉ PICÓN VARGAS.\*\*

**KEYWORDS:** DIESEL; NEAR INFRARED SPECTROSCOPY; CHEMOMETRY; MULTIPLE LINEAR REGRESSION; PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS, PARTIAL LEAST SQUARES; EVAPORATED TEMPERATURES.

### DESCRIPTION:

In the present work a regression of the evaporation temperatures in the samples of diesel was developed using the respective NIR spectra. The adjustment used a database of 61 NIR spectra, provided by the Barrancabermeja refinery management (GRB) of ECOPETROL SA. The multivariate statistical techniques applied were: multiple linear regression (MLR), principal component analysis (PCA), and regression by partial least squares (PLS); These mathematical procedures were carried out using The Unscrambler X version 10.3.

Statistical analysis considered the spectral range from 6442.35 - 9001.749  $\text{cm}^{-1}$ ; (Savitzky-Golay), data normalization and self-scaling, in order to correct potential errors in data. According to the PCA analysis, it is possible to identify the analyzed samples by similarity with respect to their chemical nature and the number of main components that reflect the greater variation of the original information. Regarding the regressions, RLM reported a coefficient of determination ( $R^2$ ) and validation unfavorable for the three evaporation temperatures.

The results of this project suggest that the models obtained by PLS present the best performance in the prediction of T30, T50 and T70 from the different NIR spectra. Finally, the expansion of the NIR spectra database of diesel samples is advisable for an improvement in the results of the regressions and the application of a predictive level.

---

\* Degree Work

\*\* Faculty of Phisico-Chemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director: Giovanni Morales Medina, Dr. Ing. Chemical

## INTRODUCCIÓN

El diésel es utilizado principalmente en la industria automotriz como combustible en motores, automotores de trabajo medio y pesado y en máquinas utilizadas en actividades de explotación minera, en construcción y en agricultura, entre otros. El consumo de diésel a nivel nacional en el año 2016 fue de 49011598.8 barriles al año, con un precio promedio de combustible de 7206 \$/Galón. No obstante, para el año 2013 la producción nacional de ACPM fue de 33684120 barriles al año [1] [2].

El diésel está formado por una mezcla de una gran cantidad de hidrocarburos exhibiendo cadenas de entre 10 y 28 átomos de carbono. Debido a lo anterior, el intervalo de temperaturas de ebullición del diésel está comprendido entre 180°C y 390°C, aproximadamente. El diésel comercial debe cumplir diferentes requisitos de calidad; en Colombia, los parámetros de calidad del diésel se encuentran regulados por la norma: ASTM D 975 / NTC 1438 reportada en el Anexo B. Entre las propiedades que debe cumplir el diésel comercial se encuentran las referentes al porcentaje de evaporado. En una refinería, los diferentes flujos de diésel (de las unidades de destilación, de las unidades de hidrotratamiento y los importados) son mezclados con el fin de obtener un producto que cumpla con los requerimientos de ley [3] [4].

Los métodos de laboratorio tradicionales para la validación del valor de las propiedades siguen procedimientos estándar que requieren condiciones específicas, infraestructura mínima y un tiempo de seguimiento apreciable; es importante mencionar que cada propiedad requiere de una prueba particular de laboratorio, dichos procedimientos no suministran información detallada sobre la naturaleza y la composición de la muestra. Con lo anterior, estos métodos llegan a ser poco prácticos para emplearlos como herramientas en el control de procesos [5] [6].

En este contexto, el desarrollo de metodologías analíticas instrumentales de caracterización de respuestas rápidas y confiables ha generado un gran interés en el sector industrial [5].

De esta forma, técnicas como la del infrarrojo cercano (*NIR: near infrared spectra*) ha presentado una gran aplicabilidad en la industria petroquímica. Pero se debe considerar que dicha técnica tiene limitaciones cuando se trabaja con muestras complejas, por lo que el análisis de los espectros suele ser combinado con la aplicación de técnicas estadísticas multivariadas, enmarcadas en lo que se ha denominado como quimiometría. Con la aplicación de la estadística, los espectros NIR han sido utilizados en la predicción de propiedades físicas y químicas, todo esto con un solo análisis [7] [8] [9].

Entre los métodos multivariados utilizados en los análisis de espectros NIR se encuentran, la regresión lineal múltiple (MLR), análisis por componentes principales (PCA) y el de mínimos cuadrados parciales (PLS). El análisis PCA permite condensar la variabilidad presente en los datos en unos pocos parámetros representativos, denominados componentes principales, los cuales resultan de una combinación lineal de los datos originales. Por otra parte, PLS es una técnica de regresión de datos, empleada con el fin de relacionar una o más variables de respuesta con diferentes variables independientes basándose en el uso de factores obtenidos según una ruta que disminuye la covarianza de los datos originales, incluyendo la variable dependiente [3] [10].

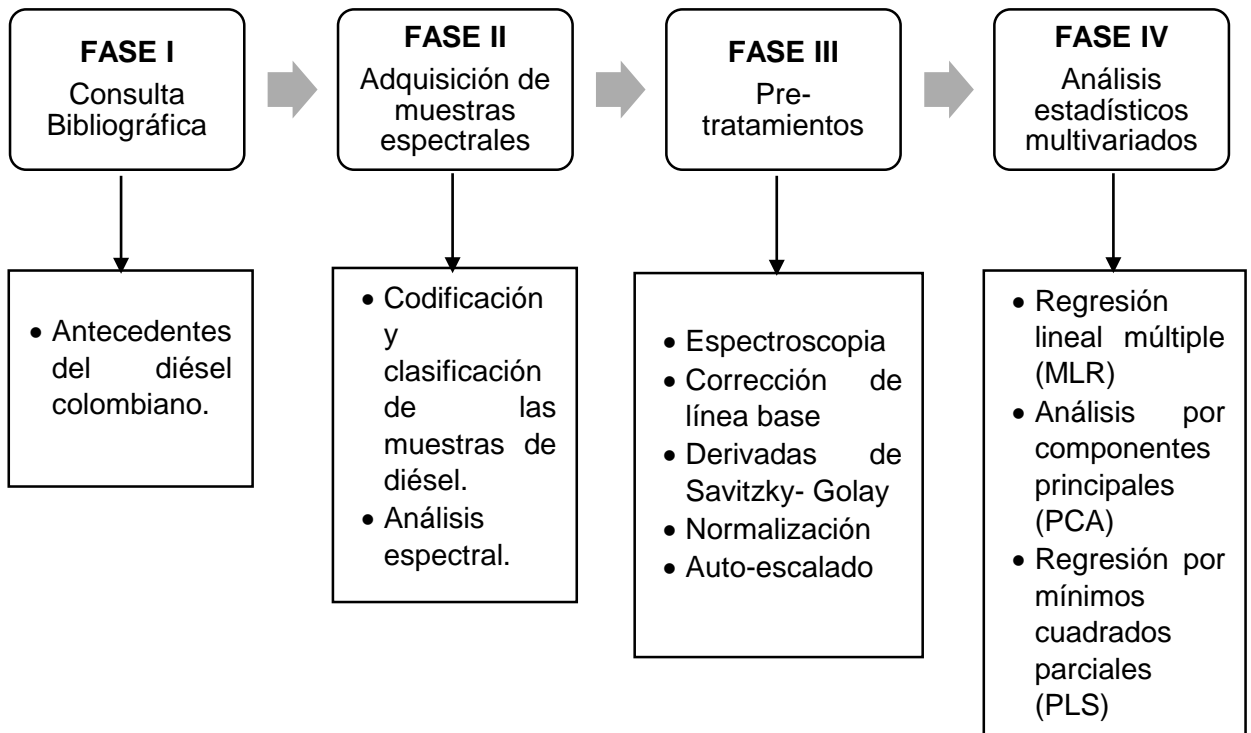
En la industria del petróleo se ha estado implementando la técnica NIR como herramienta de monitoreo y predicción en tiempo real, dando soporte a la toma de decisiones y generando beneficios económicos y operacionales para el negocio. Los espectros NIR junto con la estadística multivariada pueden ser utilizados en la predicción de las temperaturas de evaporado, con lo cual los ingenieros de proceso pueden establecer las variables operacionales para un mejor aprovechamiento del

flujo de proceso; a continuación, se resumen algunos trabajos reportados en la literatura. Alves & colaboradores [11], desarrollaron modelos de regresión utilizando PLS y la espectroscopia NIR para mejorar la eficacia en la determinación de algunos parámetros de calidad (entre ellos las temperaturas de evaporado T50, T85, y T90) en el proceso de hidrotreamiento de diésel. Asimismo, Echeverría [12] utilizó técnicas de regresión multivariantes mediante análisis por componentes principales (PCA) y regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS) para predecir el contenido de biocombustible, punto de chispa y T95 para un conjunto de 129 espectros NIR de muestras de diésel. Los desempeños en la predicción de las propiedades estuvieron por encima del 95% en la reproducción de las propiedades. Por otra parte, Xing & colaboradores [13], utilizaron la medición NIR a la calidad de aceite en motores Diésel, para predecir las propiedades tales como la velocidad de cambio de la viscosidad cinemática y el punto de inflamación. Estos autores reportan el análisis de 30 muestras utilizando el método de mínimos cuadrados (PLS). Los resultados reportados por estos autores sugieren que el NIR es una técnica favorable para la estimación de las propiedades referidas. También, Morales [14], utilizó una base de datos de 140 muestras de propiedades macroscópicas del diésel que fueron analizadas mediante las técnicas de regresión mediante modelos lineales y modelos no-lineales: Regresión Lineal Múltiple (MLR) y Regresión por mínimos cuadrados (PLS) para obtener modelos matemáticos que permitan cuantificar el índice de cetano del diésel. Además, se analizaron 62 espectros infrarrojos de muestras de diésel donde se encontró una relación entre las intensidades espectrales y el índice de cetano, los cuales fueron utilizados para la creación del modelo no-lineal. Por facilidad de disposición y obtención de los datos se afirma que el mejor modelo de predicción corresponde a la regresión parcial de mínimos cuadrados a partir de espectroscopia NIR.

El propósito del presente trabajo consiste en predecir las temperaturas al 30, 50 y 70% de evaporado para diferentes muestras de diésel, a partir de espectros NIR y métodos quimiométricos.

# 1. METODOLOGÍA

Figura 1. Diagrama de bloques descripción metodología.



**FASE I:** Se realizó una consulta bibliográfica acerca de análisis estadísticos multivariados, y métodos de predicción con MLR. Además, se buscaron antecedentes de la técnica de espectroscopia infrarroja cercana (NIR) y la quimiometría en la regresión de propiedades de diésel de origen colombiano.

**FASE II:** La GRB suministró una base de datos de 61 muestras de diésel con su respectiva absorbancia a distintos números de onda. Asimismo, esta base de datos fue complementada con los valores de las temperaturas de evaporados T30, T50 y T70, provenientes del sistema de información del laboratorio de la refinería (SILAB).

Los espectros adquiridos por la GRB contaban con un rango de números de onda entre 100.77 y 11998.96  $\text{cm}^{-1}$ ; que para el propósito de este trabajo se estudiará el rango correspondiente a espectroscopia NIR de 6442.35-9001.749  $\text{cm}^{-1}$ . Las principales bandas del espectro fueron analizadas según los probables grupos funcionales reportados en el Anexo D para el diésel.

**FASE III:** Diferentes pre-tratamientos fueron aplicados a los datos espectroscópicos, como corrección de línea base para ajustar el cero espectral y eliminar así efectos no químicos del levantamiento del espectro, derivadas de Savitzky-Golay para de esta forma eliminar el ruido espectral y otras interferencias, normalización para lograr que dichos espectros se encuentren a la misma escala y auto-escalado de datos con el fin de centrar cada columna y transformar las unidades originales de cada variable a unidades de desviación estándar de esta forma todos los ejes tienen la misma longitud y cada variable la misma influencia de cálculo [9], según las rutinas codificadas en el software *The Unscrambler X* versión 10.3.

**FASE IV:** Como métodos de regresión de análisis fueron utilizadas las siguientes técnicas estadísticas:

- Regresión lineal múltiple (MLR), realizando los siguientes pretratamientos: corrección de línea base, derivada de segundo orden (Savitzky-Golay) y finalmente normalización. Una vez aplicados estos pre-tratamientos se procedió a seleccionar diferentes números de onda en donde se presentara la mayor contribución de absorbancias para aplicar la regresión MLR.
- Análisis por componentes principales (PCA), fue aplicada a la base de datos para dilucidar posibles similitudes entre las muestras.

- Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS), fue aplicado al conjunto de datos de las 61 muestras de diésel comprendidas entre los números de onda de espectros NIR en un rango de 6444.278-8999.82  $\text{cm}^{-1}$ , para la aplicación de PLS fueron utilizados los pre-tratamientos de: espectroscopia, auto-escalado y segunda derivada (Savitky-Golay).

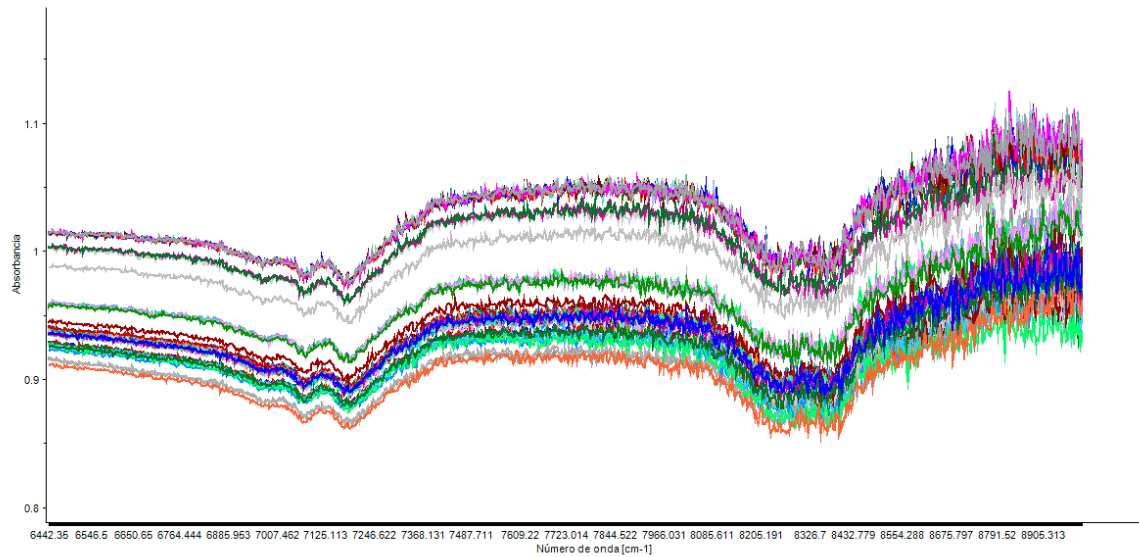
## 2. ANÁLISIS DE RESULTADOS

### 2.1. ANÁLISIS ESPECTRAL

La base de datos de espectros NIR suministrada por la GRB se encuentra conformada por 61 muestras de diferente tipo de diésel; estos diésel son utilizados en la sección de mezcla de productos finales de la GRB. La zona del espectro NIR de interés para el presente trabajo corresponde a la región de 6442.35 – 9001.75  $\text{cm}^{-1}$ , la cual es recomendada por Alves & colaboradores [8] en su trabajo. En este intervalo se observan las bandas de absorción de la primera armónica de los grupos NH y OH, la segunda región de combinación y los segundos armónicos del grupo CH de los compuestos parafínicos de metilo, metino y metileno (alcanos de cadena larga) e hidrocarburos cíclicos y aromáticos [15].

En la Figura 2 se ilustran los espectros NIR en la región 6442.35 – 9001.75  $\text{cm}^{-1}$  para las muestras utilizadas en el presente trabajo; en esta figura es posible observar distintas bandas de absorción fuertes, donde se denota la presencia de grupos funcionales, entre los cuales se encuentran acetilenos (6580- 6400  $\text{cm}^{-1}$ ), alcoholes (7140 – 7010  $\text{cm}^{-1}$ ), aromáticos (8000  $\text{cm}^{-1}$ ) y alcanos con radicales  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2-$ ,  $\equiv\text{CH}$ , así como algunos alquenos.

Figura 2. Rango espectral NIR para determinar las temperaturas de evaporados.



## 2.2. REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE (MLR)

Para el ajuste de este modelo se normalizaron los datos mediante el método de área normalizada; posteriormente se selecciona la matriz A reportada en el Anexo A, en la cual se van a conformar los conjuntos de calibración y validación. Se usaron un total de 1220 datos de espectroscopia NIR para conformar la matriz de calibración.

Los resultados obtenidos inicialmente de error cuadrático medio (RMSE) y coeficiente de determinación ( $R^2$ ), se encuentran resumidos en la Tabla 1 y en el Anexo C, donde se presentan las distintas gráficas MLR para las regresiones y validaciones de las temperaturas para 30, 50 y 70% de evaporado.

Tabla 1. Calibración y validación de las temperaturas MLR

TEMPERATURAS	CALIBRACIÓN		VALIDACIÓN	
	$R^2$	$RMSE$	$R^2$	$RMSE$
T30	0.472	4.875	NA	10.395
T50	0.533	3.009	NA	5.617
T70	0.552	2.166	NA	2.874

Como se aprecia en la Tabla 1, la MLR no registra un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) apreciable para las tres temperaturas, ya que su valor es menor a 0.9; de igual forma los resultados de validación para este estadístico resultan fallidos, lo que indica que la definición apropiada del número de regiones para la aplicación de la MLR limita su aplicación en el caso de análisis.

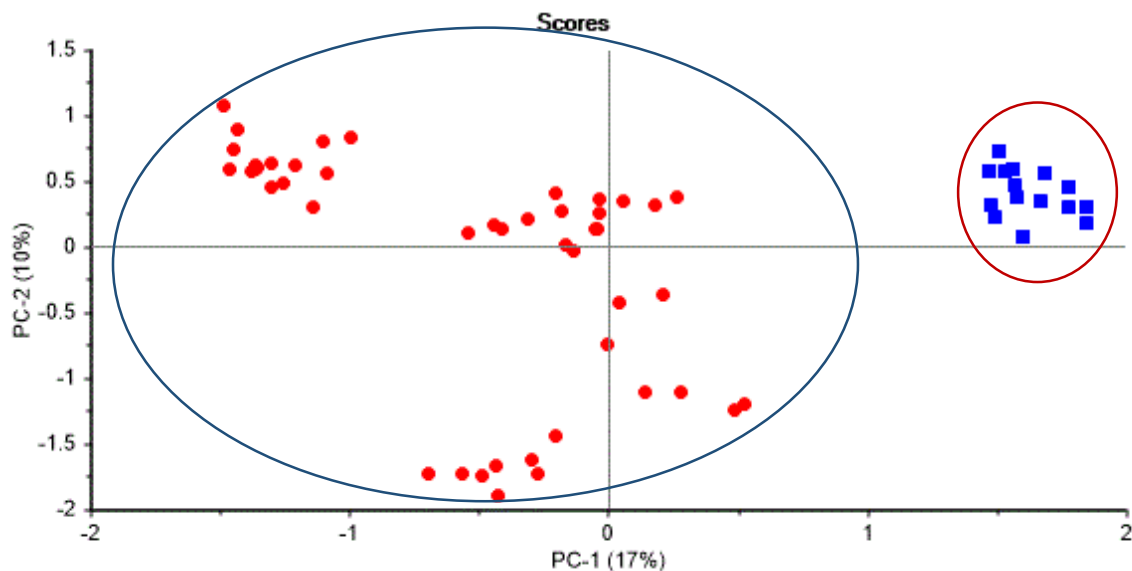
### 2.3. ANÁLISIS POR COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)

El análisis por componentes principales realizado sobre la información espectral, permitió identificar las muestras analizadas de acuerdo a su naturaleza química. Se aplicó PCA a toda la matriz de espectros, con el propósito de identificar grupos similares en cuanto a su naturaleza y el número de componentes principales que reflejan la mayor variación de la información que está contenida en las variables originales. Para determinar de forma objetiva la pertenencia de estas muestras a sus respectivos grupos, el método de clasificación denominado *k-mean* fue aplicado, según la distancia euclidiana, a las muestras en el respectivo rango de números de onda.

La Figura 3 de puntuaciones o scores, presenta la dispersión en dos dimensiones de los componentes principales PC1 y PC2 (27% de varianza) que permite identificar relaciones entre las muestras según su cercanía relativa; los distintos colores muestran los resultados del método *k-mean* considerando dos

agrupaciones. Según esta figura es posible apreciar dos agrupaciones formadas por el signo del PC1; la formación de estas agrupaciones puede deberse a diferencias en los tiempos de recolección de las muestras de diésel, en donde es posible que la carga de los respectivos crudos presentara variaciones en sus propiedades.

Figura 3. Score de propiedades PCA



Complementariamente, la Figura 4 presenta la gráfica de dispersión de los *loading*. Según esta figura, los números de onda que poseen una mayor influencia en los *loading* corresponden a 8970.89 y 8974.747  $\text{cm}^{-1}$ ; estos números de onda hacen referencia a grupos funcionales pertenecientes a compuestos parafínicos de metilo y metileno. Así mismo, la Figura 5 muestra que al aumentar el número de componentes principales mejora la explicación de la varianza aproximadamente al 50% (línea azul), aunque la validación se encuentre lejana debido a la diferente naturaleza química de las muestras que lleva a la formación de dos agrupaciones en el espacio PC1-PC2 (línea roja).



## 2.4. REGRESIÓN DE MÍNIMOS CUADRADOS PARCIALES (PLS)

Considerando los resultados del análisis por PCA, la regresión PLS fue aplicada a la agrupación con mayor número de muestras según el espacio PC1-PC2. La validación de la regresión PLS fue efectuada según las muestras de la agrupación restante. La Tabla 2, resume los estadísticos de desempeño obtenidos para la regresión y el porcentaje de aporte de los números de onda que presentan la mayor contribución en el rango espectral; en esta tabla se muestra que los desempeños resultantes de la calibración son mejores que los correspondientes a la regresión MLR, para las tres temperaturas de evaporado. En oposición, la validación reporta desempeños bajos para la predicción de las temperaturas de evaporado; esta desmejora en el desempeño puede deberse al reducido número de muestras utilizadas en la validación. La temperatura que mejor rendimiento presenta es la T50 con un porcentaje de aporte del 70% de los números de onda, seguida por la T30 con un 50% de aporte y finalmente la T70 con un porcentaje de aporte del 90%.

Tabla 2. Calibración y validación PLS.

TEMPERATURAS	CALIBRACIÓN		VALIDACIÓN		% APORTE NÚMEROS DE ONDA
	$R^2$	RMSE	$R^2$	RMSE	
T30	0.925	0.242	0.388	1.016	50
T50	0.904	0.257	0.534	0.988	70
T70	0.903	0.298	0.208	1.047	90

De otro lado, en las Figuras 6, 7 y 8 se observan los coeficientes de las regresiones para los diferentes números de onda; en estas figuras se presentan los coeficientes para los distintos rangos alrededor de 7534-8911.1  $\text{cm}^{-1}$ , 7144.4-8911.1  $\text{cm}^{-1}$  y 6444.278-8911.1  $\text{cm}^{-1}$ ; en estos rangos espectrales se presentan las mayores contribuciones a los modelos PLS.

La Tabla 3 registra el desempeño de las regresiones PLS para las tres temperaturas de evaporados, utilizando todas las muestras para calibración y aplicando validación interna o cruzada. En esta tabla se evidencia que, utilizando todas las muestras, también las regresiones PLS reportan bajos desempeños.

Tabla 3. Calibración y validación de las temperaturas PLS por validación cruzada con un 30%, 70%,80% de aporte de los números de onda.

TEMPERATURAS	CALIBRACIÓN		VALIDACIÓN		% APORTE NÚMEROS DE ONDA
	$R^2$	RMSE	$R^2$	RMSE	
T30	0.948	0.201	0.652	0.528	30
T50	0.831	0.341	0.201	0.756	70
T70	0.891	0.307	0.248	1.021	80

Figura 6. Pesos coeficientes de regresión T30 PLS.

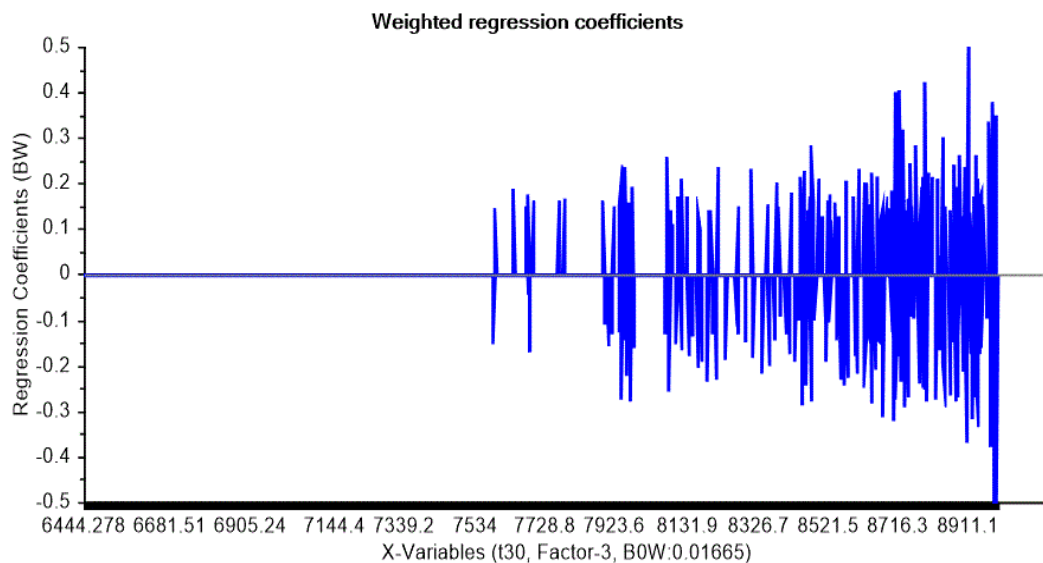


Figura 7. Pesos coeficientes de regresión T50 PLS.

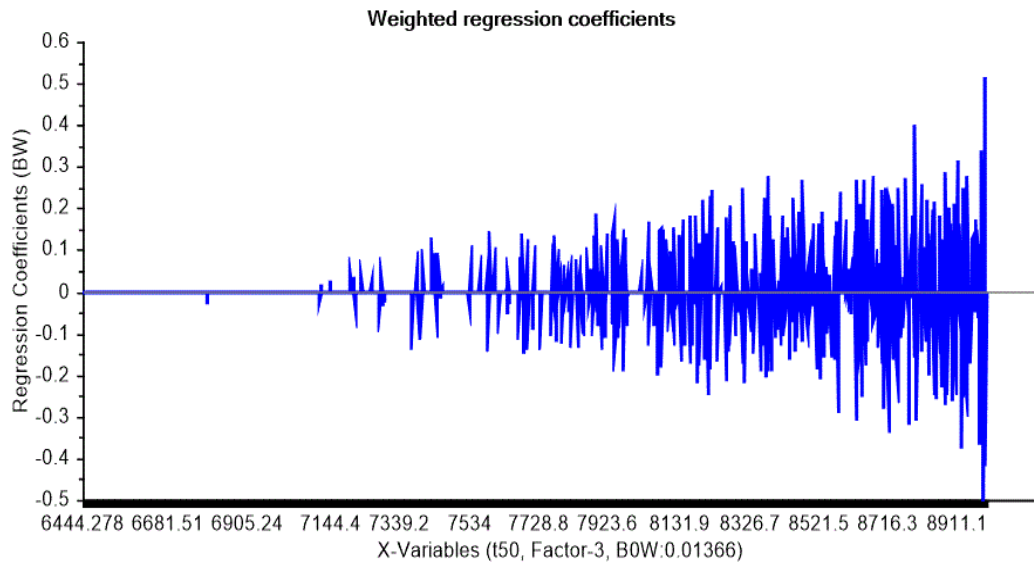
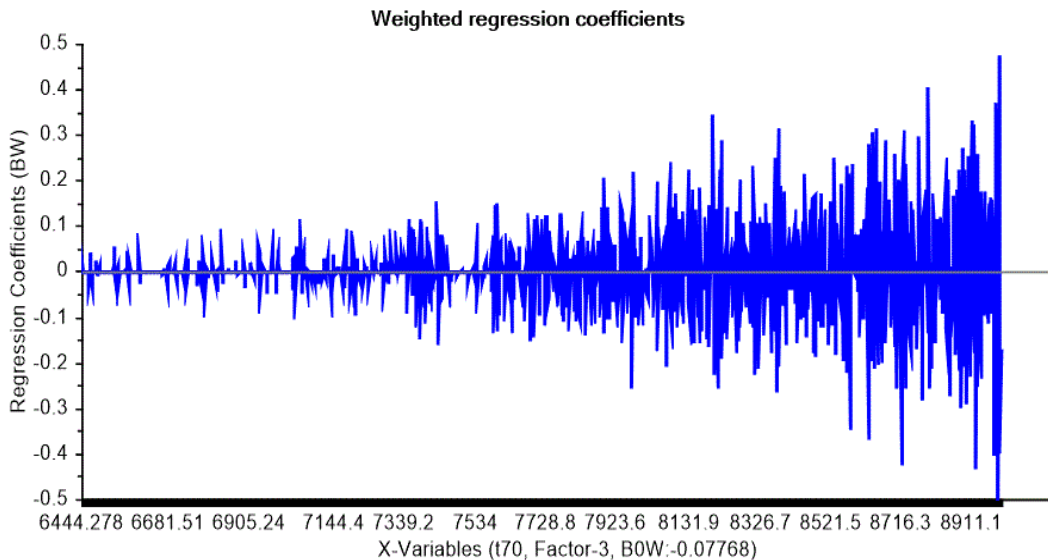


Figura 8. Pesos coeficientes de regresión T70 PLS.



En los modelos PLS se consideró la opción de modificar los pesos asignados a cada número de onda; los pesos de los números de onda con aportes inferiores al 50% fueron reducidos según el inverso de la varianza antes de una nueva aplicación de la regresión PLS. En la Tabla 4 se presentan los resultados de la anterior

modificación a los pesos de los números de onda. Según esta tabla, los modelos PLS reportan un desempeño bajo en la predicción de las temperaturas de evaporado; igualmente, la validación cruzada reporta bajos desempeños.

Tabla 4. Calibración y validación de las temperaturas PLS por validación cruzada

Temperaturas	Calibración		Validación	
	$R^2$	$RMSE$	$R^2$	$RMSE$
<b>T30</b>	0.833	0.406	0.414	0.769
<b>T50</b>	0.821	0.420	0.333	0.823
<b>T70</b>	0.622	0.609	0.094	0.957

En una nueva estrategia para mejorar los desempeños de las regresiones, los pesos de los números de onda con aporte inferior al 50% son anulados para la aplicación de las PLS. Asimismo, la validación es realizada con las 15 muestras de la segunda agrupación dada por el espacio PC1-PC2. Los resultados de la anterior modificación en los pesos se presentan en la Tabla 5. Según esta tabla, las regresiones exhiben los mejores desempeños para las predicciones hechas en el presente trabajo para las temperaturas de evaporado T30, T50 y T70. Tanto para la etapa de calibración como para la etapa de validación los coeficientes de determinación y los RMSE reportan valores superiores a 0.96 e inferiores a 0.2, respectivamente. Esta mejora en los desempeños de las regresiones se obtiene al centralizar el aporte en ciertos números de onda.

Tabla 5. Calibración y validación de las temperaturas PLS con un 50% de aporte en números de onda

Temperaturas	Calibración		Validación	
	<i>R</i> <sup>2</sup>	<i>RMSE</i>	<i>R</i> <sup>2</sup>	<i>RMSE</i>
<b>T30</b>	0.974	0.160	0.975	0.194
<b>T50</b>	0.972	0.166	0.984	0.164
<b>T70</b>	0.966	0.183	0.982	0.152

Según los resultados, la contribución para la regresión de las temperaturas de evaporado T30, T50 y T70, presenta el mismo rango de números de onda, el cual corresponde a 7534-8911.1 cm<sup>-1</sup> (Figuras 9,10, y 11). Lo anterior sugiere que en dicho rango de números de onda se encuentra la mayor composición de grupos funcionales que aportan al valor de las temperaturas de evaporado; Estos grupos funcionales hacen referencia a hidrocarburos aromáticos, compuestos parafínicos de metilo, metino y metileno, reportados en el Anexo D. Asimismo, la mejora en los desempeños de la validación externa sugiere que las muestras presentan una composición aproximada de grupos funcionales asociados a los números de onda con peso diferente de cero.

Figura 9. Pesos coeficientes de regresión para T30

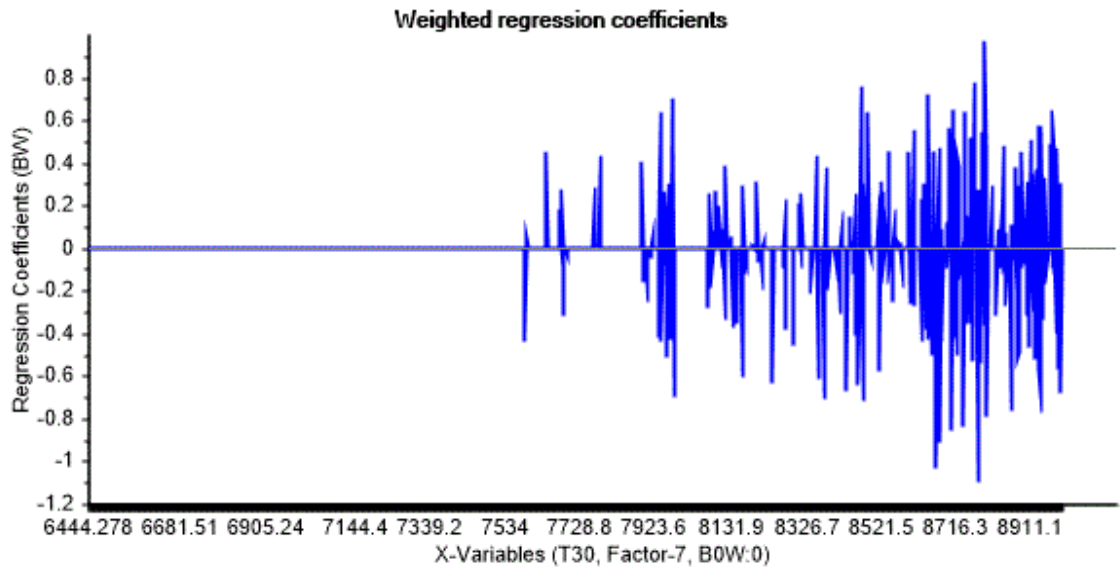


Figura 10. Pesos coeficientes de regresión para T50

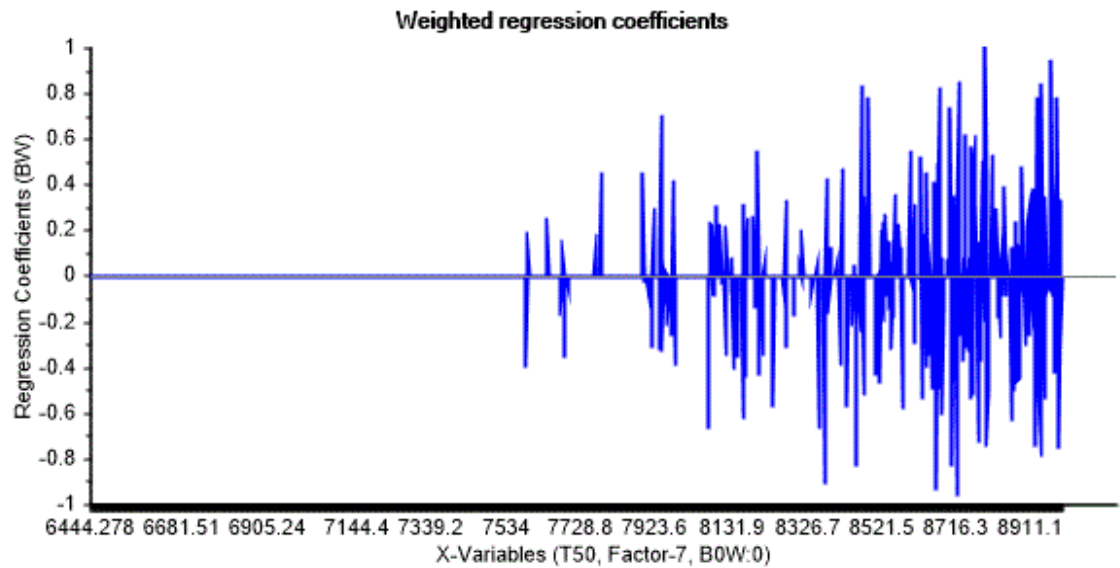
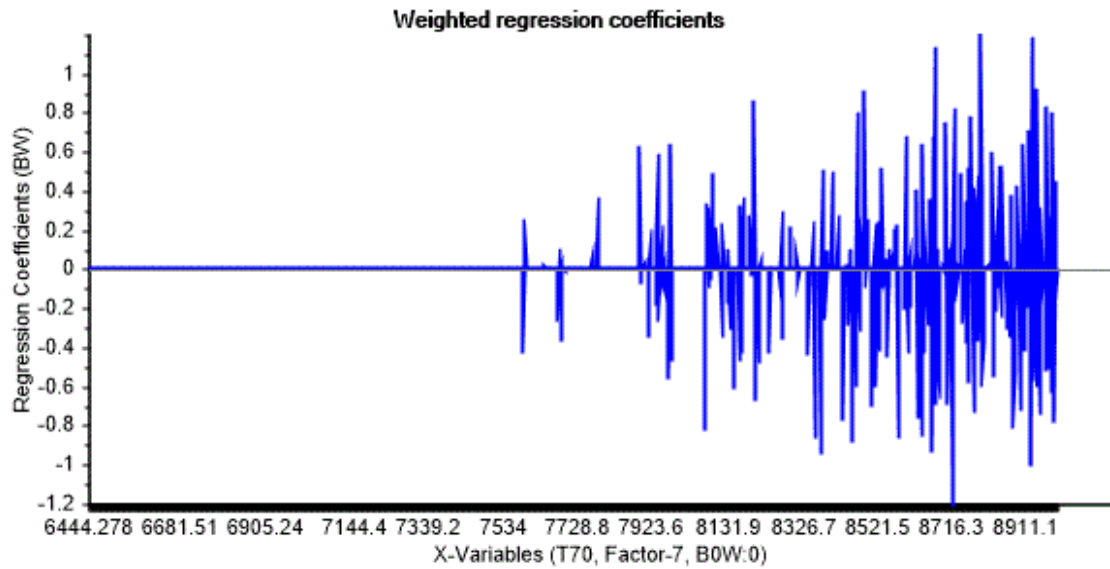


Figura 11. Pesos coeficientes de regresión para T70



Para resumir lo obtenido en el presente trabajo, la selección de los números de onda es la clave para mejorar los procesos de ajuste de una regresión para la predicción de las temperaturas de evaporado T30, T50 y T70 en las muestras de diésel analizadas.

### 3. CONCLUSIONES

- Con base en las 61 muestras que conforman la base de datos, la zona del espectro NIR adecuada para el ajuste de regresiones referentes a las temperaturas de evaporado T30, T50 y T70 corresponde al rango de 7534-8911.1  $\text{cm}^{-1}$ . Con esta región espectral se obtuvieron los mejores desempeños por regresión PLS ( $R^2 > 0.97$  y  $\text{RMSE} < 0.2$ ) para la predicción de estas propiedades.
- Los resultados del análisis por componentes principales (PCA) conllevaron a la identificación de dos agrupaciones de muestras con similitudes composicionales. La aplicación de una validación externa realizada por PLS para la agrupación de menor cantidad de muestras reportó resultados satisfactorios para las propiedades T30, T50 y T70.

#### **4. RECOMENDACIONES**

El número de muestras de la base de datos debe ser ampliado con el propósito de verificar los modelos PLS propuestos en el presente trabajo.

Continuar con el presente trabajo aplicando regresiones PLS para la predicción de propiedades fisicoquímicas de diésel colombiano.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] SISTEMA DE INFORMACIÓN DE PETROLEO Y GAS COLOMBIANO. Estadísticas de petróleo. 20 de Julio de 2017]. Disponible en: <http://www.sipg.gov.co/sipg/Home/Sectores/tabid/105/language/es-ES/Default.aspx>

[2] DIAZ SERRANO, Julieth A. Aplicación de la regresión lineal múltiple y las redes neuronales artificiales para la predicción del índice de cetano en el diésel utilizando propiedades macroscópicas y espectros NIR. 2015. p.17-20.

[3] ECOPETROL S.A. Diesel Corriente B2/B4. 27 de marzo de 2016. Disponible en: <http://aescolombia.com.co/images/Normatividad/Normatividad%20del%20sector/Hidrocarburos/Fichas%20tecnicas%20combustibles/Ecopetrol%20Diesel%20corriente%20B2-B4%20VSM-01.pdf>

[4] BENJUMEA, Pedro N.; AGUDELO, Jhon R.; BENAVIDEZ, Alirio Yovany.; Análisis de calidad de los biogasoleos de aceite de palma e higuierilla, 2004. p. 12-13.

[5] BUENO V, Alexis. Caracterización de corrientes de la planta de aromáticos de la GCB mediante espectroscopia NIR y métodos quimiométricos de análisis.2008. p.1.

[6] FERNÁNDEZ FERNÁNDEZ, R.; DAGO MORALES, A.; LINCHENAT DENNES, E. Desarrollo de un modelo SIMCA de reconocimiento de patrones para la clasificación de combustible diésel. Tecnología Química, vol. XXIX, núm. 2, mayo-agosto, 2009. p. 34-41.

[7] ARAUJO PANTOJA, Patricia. Espectroscopia de infrarrojo cercano como respuesta alternativa en la caracterización y valoración de crudo en la refinería de petróleo. 2013. p. 62-70.

[8] LAMUS BLANCO, Cesar R. Uso de análisis multivariado en la determinación sara de crudos mediante la espectroscopia NIR. 2010. p.26-34.

[9] PASQUINI, C.; FERREIRA BUENO, A. Characterization of petroleum using near-infrared spectroscopy: Quantitative modeling for the true boiling point curve and specific gravity. 2007. p. 1-8.

[10] MACHO APARICIO, Santiago. Metodologías analíticas basadas en espectroscopia de infrarrojo y calibración multivariante: Aplicación a la industria petroquímica. 2002. p. 21-42.

[11] L ALVES, Julio C.; POPPI, Ronei J.; Diesel oil quality parameter determinations using support vector regression and near infrared spectroscopy for hydrotreating feedstock monitoring, 2012.

[12] ECHEVERRÍA, Oscar. Análisis y correlación del contenido de biocombustibles, punto de chispa y T95 para el diésel utilizando espectroscopia infrarroja y métodos quimiométricos.

[13] XING, Zhi-Na.; WANG, J.; JUN, Q.; Rapid Measurement of Diesel engine oil quality by near infrared spectroscopy (nirs), 2012.

[14] MORALES MONTAÑO, Jorge M. Regresión del índice de cetano del diésel a partir de propiedades macroscópicas y espectros infrarrojos utilizando MLR y PLS. 2015. p.24, 71,72.

[15] PATNAIK, P. Dean's Analytical Chemistry Handbook. Second edition. New York: McGraw-Hill Professional, 2004.

## BIBLIOGRAFÍA

ARAUJO PANTOJA, Patricia. Espectroscopia de infrarrojo cercano como respuesta alternativa en la caracterización y valoración de crudo en la refinería de petróleo. 2013, p. 62-70.

BENJUMEA, Pedro N.; AGUDELO, Jhon R.; Benavidez, Alirio Yovany.; Análisis de calidad de los biogaseleos de aceite de palma e higuera, 2004, p. 12-13.

BUENO V, Alexis. Caracterización de corrientes de la planta de aromáticos de la GCB mediante espectroscopia NIR y métodos quimiométricos de análisis. 2008, p.1.

COLOMBIA. MINISTERIO DE ECONOMÍA, INDUSTRIA Y COMERCIO. Resolución No.218. (12 de Noviembre). Gaceta. Bogotá D.C. No. 218 de 12 de noviembre de 1997. Disponible en: <http://www.dse.go.cr/es/02ServiciosInfo/Legislacion/PDF/Hidrocarburos/Combustibles/DE-26443-MEICRegl.pdf>

CUBA EDUCA: PORTAL EDUCATIVO CUBANO. Manual del Petróleo y Derivados. 24 de marzo de 2016. p. 42-46. Disponible en: <http://educaciones.cubaeduca.cu/medias/pdf/2428.pdf>

DIAZ SERRANO, Julieth A. Aplicación de la regresión lineal múltiple y las redes neuronales artificiales para la predicción del índice de cetano en el diésel utilizando propiedades macroscópicas y espectros NIR. 2015, p. 95.

ECHEVERRÍA, Oscar. Análisis y correlación del contenido de biocombustibles, punto de chispa y T95 para el diésel utilizando espectroscopia infrarroja y métodos quimiométricos.

ECHEVERRÍA, Oscar. Análisis y correlación del contenido de biocombustibles, punto de chispa y T95 para el diésel utilizando espectroscopia infrarroja y métodos quimiométricos.

ECOPETROL S.A. Diesel Corriente B2/B4. [Citado el 27 de marzo de 2017]. Disponible en <http://aescolombia.com.co/images/Normatividad/Normatividad%20del%20sector/Hidrocarburos/Fichas%20tecnicas%20combustibles/Ecopetrol%20Diesel%20corriente%20B2-B4%20VSM-01.pdf>

FENG, Fei; WU, Qiongshui & ZENG, Libo. Rapid analysis of diesel fuel properties by near infrared reflectance spectra. 2015, p. 8.

FERNÁNDEZ FERNÁNDEZ, R.; DAGO MORALES, A.; LINCHENAT DENNES, E. Desarrollo de un modelo SIMCA de reconocimiento de patrones para la clasificación de combustible diésel. Tecnología Química, vol. XXIX, núm. 2, mayo-agosto, 2009. p. 34-41.

L. ALVES, Julio C.; HENRIQUES, Claudete B. & POPPI, Ronei J. Determination of diesel quality parameters using support vector regression and near infrared spectroscopy for an in-line blending optimizer system. 2012, p.8.

L. ALVES, Julio C.; POPPI, Ronei J.; Diesel oil quality parameter determinations using support vector regression and near infrared spectroscopy for hydrotreating feedstock monitoring, 2012.

LAMUS BLANCO, Cesar R. Uso de análisis multivariado en la determinación sara de crudos mediante la espectroscopia NIR. 2010, p. 26-34.

LI, Yankun & JING, Jing. A consensus PLS method based on diverse wavelength variables models for analysis of near-infrared spectra. 2014, p.5.

LÓPEZ, Diana-C., MAHECHA, Cesar-A & colaboradores. Optimization model of a system of crude oil distillation units with heat integration and metamodeling. En: revista ciencia, tecnología y futuro. Vol. 3, Núm. 5 Dic. 2009.

MACHO APARICIO, Santiago. Metodologías analíticas basadas en espectroscopia de infrarrojo y calibración multivariante: Aplicación a la industria petroquímica. 2002, p. 21-42.

MARTIN M, Francisca.; SALA G.; Estudio comparativo entre los combustibles tradicionales y las nuevas tecnologías energéticas para la propulsión de vehículos destinados al transporte, 2004, p. 29.

MORALES MONTAÑO, Jorge M. Regresión del índice de cetano del diésel a partir de propiedades macroscópicas y espectros infrarrojos utilizando MLR y PLS. 2015, p.85.

PASQUINI, C.; FERREIRA BUENO, A. Characterization of petroleum using near-infrared spectroscopy: Quantitative modeling for the true boiling point curve and specific gravity. 2007. p. 1-8.

PATNAIK, P. Dean's Analytical Chemistry Handbook. Second edition. New York: McGraw-Hill Professional, 2004.

POMA F, Karim L., Evaluación de la calidad del Diesel 2 basado en sus propiedades cetánicas, 2004, p. 23-.

SISTEMA DE INFORMACIÓN DE PETROLEO Y GAS COLOMBIANO.  
Estadísticas de petróleo. 20 de Julio de 2017. Disponible en:  
<http://www.sipg.gov.co/sipg/Home/Sectores/tabid/105/language/es-ES/Default.aspx>

WANG, Songjiing; WU, Di & LIU, Kangsheng. Semi-supervised machine learning algorithm in near infrared spectral calibration: A case study to determine cetane number and total aromatics of diesel fuels. 2012, p.4.

XING, Zhi-Na.; WANG, J.; JUN, Q.; Rapid Measurement of Diesel engine oil quality by near infrared spectroscopy (nirs), 2012.

# **ANEXOS**

## ANEXO A. MATRIZ 61X20 DE LAS ÁREAS MÁS NEGATIVAS

Muestras	8806.949	8980.533	8988.248	8961.246	8947.745	8934.244	8670.011	8953.531	8994.034	8874.454	8905.313	8899.527	8882.169	8639.151	8770.304	8970.89	8700.87	8779.947	8974.747	8731.729
1	-0.5088549	-0.5298769	-0.6049356	-0.3167563	-0.4248241	-0.7717913	-0.4506472	-0.6595082	-0.6562662	-0.6019008	-0.5757279	-0.2934844	-0.2930146	0.01951622	-0.6467142	-0.6603845	-0.5858585	-0.2480285	0.4624669	-0.09006247
2	-1.057328	-0.5952507	-2.20871	-1.499066	-0.345553	-1.732839	0.05809375	-1.24982	0.7379937	-1.472552	-0.1791853	-1.241527	-0.5117628	-0.2551229	-1.437102	-2.234996	-1.184285	1.007043	1.711906	0.4642649
3	-1.344659	-0.3931181	-1.387247	-2.637308	-1.123821	-1.050681	-0.5888296	-1.291843	-0.1573003	-0.8413166	0.08328713	-1.757158	-1.289707	-0.6280592	-0.9856803	-1.075995	-0.5452396	-0.9120046	1.265317	-0.9636092
4	-2.138618	-1.106092	-2.303758	-1.128726	-1.543298	-1.6401	-0.2559	-0.8096347	-0.8649853	-2.115108	-0.28856	-1.270716	-0.8864935	-0.4680953	-1.193645	-1.570791	-0.9268173	0.5095727	1.508783	0.6121375
5	-0.8898886	-0.5921105	-1.275548	-1.795916	-0.693609	-0.7422611	-0.1577742	-1.302864	-0.3018063	-0.5698144	-0.6798713	-1.045533	-0.6078426	-0.6155368	-0.7784537	-0.9113943	-1.00628	0.1071267	0.7014824	0.1868141
6	-1.033289	0.6526354	-0.9146537	-1.641022	-1.221213	-1.334121	-0.1927744	-0.8949722	-0.4458717	-0.6873699	-0.658279	-0.5130836	-0.1188933	-0.6141946	-0.6063477	-1.35173	-0.9798609	-0.6023642	1.499027	-0.04764101
7	-1.64488	-0.9549019	-0.9579422	-1.662062	-1.193856	-1.221321	0.2800573	-0.5271124	-0.3226602	-0.9032213	-0.2459465	-1.166052	-0.2615083	-0.147704	-0.929517	-1.243624	-0.4283578	0.3026564	0.8599772	-0.1342649
8	-0.8812382	-0.5403705	-0.8464149	-0.7385051	-0.4938707	-0.7131767	0.07104187	-1.190809	-0.9696883	-1.115109	-0.5910437	-1.273665	-0.5200763	-0.1823879	-0.727627	-1.145175	-0.5095116	-0.3459138	0.5141495	0.09628781
9	-1.096839	-0.4545839	-0.9845567	-0.891371	-1.287011	-0.9308601	-1.125579	-0.9958119	-0.4112974	-0.4369707	-0.4013943	-0.9926071	-0.3406238	-0.1795964	-0.9943464	-1.413861	-0.2571711	0.3491905	0.7868888	0.1052772
10	-0.7687937	-0.714909	-0.1579512	-1.36853	-1.243319	-0.851374	-0.0304585	-1.079361	0.4521531	-0.6919055	-0.6882507	-0.8114249	-0.7228178	-0.3167037	-0.7499832	-1.508147	-0.8748941	0.1182964	1.262756	-0.3409923
11	-1.105747	0.02309238	-1.2258	-1.920015	-0.4145561	-1.447302	0.1386029	-0.6049021	-0.1357078	-0.96795	-0.6512725	-1.095895	-1.230421	-0.5085328	-0.3490916	-1.429258	-1.215994	-0.3043714	1.267439	-0.1510772
12	-1.478541	-0.9716637	-0.8711984	-0.9902585	-1.265535	-1.640254	-0.5585984	-2.667849	-0.03851981	-1.999594	-0.2547463	-1.747716	-1.275472	-0.8725004	-1.520797	-2.370856	-0.1255718	-0.5886638	1.587932	1.016781
13	-2.40631	-3.813037	-2.330129	-4.07508	-2.184433	-3.614902	-0.1652482	-3.761582	1.181732	-1.526191	-0.1093687	-3.305368	-1.87252	-1.531296	-2.900623	-1.660073	-1.700197	-0.2158542	1.033126	0.2273307
14	-0.8898886	-1.056831	-1.437952	-0.9754377	-0.4238093	-0.722061	0.2929471	-1.054552	-0.7719397	-0.937774	-0.5017796	-1.107146	0.06041915	-0.3190449	-0.7687955	-1.01354	-1.067473	0.2506883	0.5407791	-0.00742463
15	-1.571494	-0.3921798	-1.509242	-0.885406	-0.7192851	-2.204359	-1.112314	-2.330378	-1.052718	-1.969427	-1.25825	-3.032629	-0.2398818	-0.09365511	-1.096194	-2.256863	-2.447692	-1.765194	2.069672	0.08798067
16	-3.590873	-2.943839	-1.320147	0.6662396	-3.187712	-1.159214	1.593447	-6.356919	-3.347655	-2.260293	-3.071579	-6.958309	-1.052994	-3.152814	-4.074046	3.847626	-1.515672	-0.2834871	-2.134746	-0.8597326
17	-8.799547	2.34097	1.17387	2.253182	-8.57233	-0.0867678	2.823494	0.930563	-2.965882	-3.640255	-3.185717	-4.231479	6.561757	-1.120229	1.749833	6.40919	-4.892835	2.978886	-11.19758	-4.680042
18	-2.107843	0.1547279	0.1454385	-1.277172	-1.760332	-0.7764429	0.3367823	1.279542	-0.6466031	-1.097828	-2.03982	-0.6030996	-0.6317356	-0.1488456	-0.9609247	0.1241062	-0.07184391	-0.3712648	-0.4830068	-2.239956
19	4.163845	0.1201234	5.376259	-0.5783245	4.727111	4.41805	-1.55465	0.06453777	-0.8012556	4.943289	2.134983	6.078686	3.116022	0.1100856	4.154198	-1.635206	0.8968155	4.282722	2.123598	3.911054
20	-21.76693	-1.877087	-29.42035	15.43163	-30.17627	0.8631622	2.372343	7.558494	9.900027	-9.607798	-18.52169	-18.56225	-0.9002472	-17.52475	-10.43451	5.327503	-3.716907	-2.704488	-8.345864	-16.31687
21	-5.485498	2.8255	-6.97141	2.064461	-5.68712	0.8423809	3.054888	2.252063	0.6192624	-5.284899	-9.177276	-2.514783	1.582794	-2.994854	-9.047565	6.311096	-2.544269	-2.001712	-7.23418	-5.726914
22	0.1430529	-9.462988	-0.413838	-2.415313	-1.082065	-3.523206	-2.492834	-1.859472	-0.00790474	-0.8842787	2.956256	-2.030149	0.9755514	-1.39513	-0.9392667	2.150915	1.576369	0.6586547	-0.4088678	-0.4588781
23	-1.057841	-2.090371	0.5148085	0.3150448	-1.328431	-1.751825	-0.4863071	-0.8734403	0.6064963	0.3953098	0.8006244	-0.3337448	0.1144216	-0.6226138	-0.3243721	1.014659	0.8100739	-0.5195994	-1.300448	-0.7662513
24	-3.828148	1.855467	0.8006613	3.389559	-0.2716176	0.6274379	5.96832	1.884738	3.301069	3.381699	4.539809	3.366157	4.94899	6.770982	5.504079	-3.876343	-0.3261105	4.201864	-1.019948	2.272085
25	0.3911684	-0.7823688	-0.5716681	-0.7041121	0.1404801	0.9577589	-2.198629	-0.08408668	-2.231575	-0.9612238	-1.014583	-0.1653083	-1.712571	-1.733567	-1.046263	0.3379901	-1.406877	-1.314947	0.704327	-0.1942313
26	2.393777	-1.324613	-0.6225557	0.454531	-0.7036387	-0.6379495	-2.766472	-3.061019	-3.669092	-2.861974	-2.016329	-0.4834242	-3.681106	-2.21157	-1.25643	1.16625	-0.8833752	-1.238251	1.374563	-2.666055
27	-2.208038	-2.387072	0.5858554	-0.2752097	1.593653	0.08446872	4.129164	3.241022	2.684059	4.169042	3.298368	1.647393	4.082168	3.747324	1.476404	0.6376352	1.350391	2.020334	-2.280225	1.050196
28	0.5277001	-0.6561925	-0.9662418	-0.7560118	0.05383752	0.3234137	-1.39096	-0.8254538	-1.155205	-1.231631	-0.891134	0.8422341	-1.901337	-1.442986	-0.1304127	-0.00968893	0.01051352	-0.4712015	0.5553209	0.06896347
29	0.3579347	-0.7036656	-0.4437083	-1.231543	1.598451	-0.6382998	-2.55355	-1.961036	-2.358386	-2.669528	0.01262571	0.7273268	-1.800587	-1.211016	-1.186621	0.0233431	-0.430354	-0.6065971	0.9479473	-1.767811
30	1.725453	8.557709	0.302809	2.449445	-1.384532	1.093059	6.341711	9.023251	14.111889	7.65019	0.9832014	3.609898	13.71351	4.42625	6.179324	-4.793055	4.530836	2.140685	0.1736727	3.209027

## Anexo A. (Continuación)

31	14.79023	-17.71439	-4.669355	-11.96443	-8.735947	2.697161	-14.14826	-12.68756	-16.74279	-28.07382	-19.82852	14.44849	-24.18242	-19.06141	-9.109075	-10.34656	-8.294677	-4.877802	18.36199	-5.078334
32	0.6392419	-0.517929	-0.34384	-0.5036604	0.2498045	0.2068975	-0.9531505	-0.4648117	-0.1830809	-0.7644769	-0.5179672	-0.03109336	-0.4120322	-0.6397589	-0.2264987	-0.4026751	-0.5160654	-0.4409443	0.6495156	0.1109641
33	2.113364	-0.8528737	0.06813791	-2.805254	-0.339429	1.277438	-4.110942	-1.786023	-1.34504	-4.975908	-1.339743	-0.02252722	-2.38667	-3.28693	-1.092408	0.3081208	-1.575856	-2.801121	1.764875	-0.6796488
34	0.9517013	-1.509833	0.2554612	-1.555062	-1.424743	0.5274196	-2.453877	-2.874665	-2.720374	-3.725907	-1.101308	0.476102	-2.499416	-1.538403	-1.095464	1.71365	-0.2714393	-0.9073232	-0.8997027	-0.6610183
35	1.896308	-2.273727	-0.9239407	-1.793505	-0.308295	-0.8139798	-2.394806	-3.342028	-2.696235	-1.552316	-2.456061	-0.1877206	-2.665075	-2.786997	-0.8171403	-0.7086883	-1.604024	-0.2437866	1.640764	-0.2142147
36	0.8349257	-1.128531	-0.4583149	-0.409023	-0.1114271	-0.3731078	-1.653364	-0.9167808	-1.693538	-1.465157	-0.5284197	0.1833655	-0.7762694	-1.615443	-1.349946	0.776779	-0.2664683	-0.8388876	-0.09963915	0.02170227
37	0.9385048	-1.123425	-0.02085855	-0.8576835	-0.3524247	-0.6114581	-1.66931	-0.7388638	-1.75563	-1.836935	-0.3743	1.200972	-2.507007	-2.055092	-1.401771	0.2388194	-0.7008065	-1.608301	0.8015687	-1.513313
38	3.917275	-4.237183	-1.387768	0.759358	0.02923216	3.546029	-5.005685	-1.132866	-8.202626	-6.718494	-4.01965	1.138369	-5.215438	-3.811994	-4.239272	1.080622	-0.859778	-1.784033	3.070752	-0.4275897
39	-1.133614	-3.652837	-1.662122	-2.020653	-1.390978	-1.989896	-1.955189	-0.9896413	-0.7560958	0.05405254	-3.681282	0.00776881	-0.9879168	-1.709107	0.5913647	1.267614	-0.8270478	-0.8062168	-1.168299	-1.438108
40	-1.228985	-2.63545	-1.495442	-2.17591	0.5180544	-3.127803	-0.6459733	-0.6180641	-1.038416	-1.613096	-3.89231	-0.7433688	-1.420666	-0.5800135	0.2289812	1.131324	-1.538994	-0.4182143	-2.563229	-2.865216
41	-2.627142	-3.251346	-1.19338	-2.290994	-0.2434395	-2.678536	-2.768946	-1.449548	-1.782468	-0.5829807	-4.252294	-0.5216691	-1.732152	-1.099946	-1.285252	2.343274	0.3285889	-0.6887016	-2.724431	-1.744512
42	-2.240681	-2.865617	-3.257308	-1.554329	-1.205771	-5.254272	-1.915203	-2.773011	-0.4822803	-1.676176	-2.955411	-0.9049286	-2.565587	-2.642133	0.9136049	2.972052	-1.2834	-0.280153	-2.05842	-2.725554
43	-0.6727669	-0.5904464	-0.6816247	0.2544618	-0.2361244	-0.5567217	-0.8096143	-0.3682581	-0.5051383	-0.356311	-1.306603	-0.2987728	-0.5364671	-0.5308093	-0.2700632	0.5929071	-0.01967521	-0.662034	-0.8362359	-0.3293776
44	-0.8898422	-3.824128	0.4041023	-0.5714807	-6.474018	-3.247104	-4.773671	-1.970875	-3.449448	-1.436769	-6.808042	-0.4307541	-1.749517	-2.985133	-2.431174	0.4045881	-5.697354	-1.377046	-5.312306	-3.530549
45	-1.349506	-2.080328	-1.333075	-0.3653743	-1.450695	-1.298593	-1.278038	0.5113245	-1.418038	0.3489912	-2.490067	0.1386867	-0.937376	-0.01118831	0.3452595	-0.2047418	-1.016424	0.1044092	-0.4078116	-1.605376
46	-1.12793	-1.001982	-0.738827	-0.8805275	-0.5069683	-0.9427244	-0.9136795	0.3404995	-0.4886515	0.08485647	-0.5182914	-0.3931408	-0.385874	-0.3036079	0.1660616	0.7430239	-0.2001393	-0.1001165	-0.8167555	-0.7783602
47	-1.73813	-1.136849	-0.7295927	-0.7746423	0.08294591	-1.08094	-1.083036	-0.8109137	-1.221143	-0.4030758	-2.735055	-0.754688	-0.8290992	-1.204724	0.3582384	1.442152	-0.1917225	-0.01397192	-1.64826	-1.475335
48	-2.00479	-2.084588	-0.6499121	-0.7247167	-1.472325	-1.357205	-1.23895	0.08996179	-0.9498712	-0.8397615	-1.862003	-1.067536	-0.9249675	-1.206461	0.1267781	-0.2399999	-0.2750256	-0.4645462	-0.7496448	-0.7608809
49	-1.127611	-5.802957	0.4699294	-0.776454	0.4853089	-1.821316	-2.624931	-1.219855	-0.3984431	-1.192473	-3.738924	-1.751623	-2.966886	-2.152989	-0.7217739	0.4292367	-0.5953283	-2.64502	-2.029426	-2.76346
50	-2.654521	-3.402628	-1.897768	-0.1055853	-1.630303	-0.6835696	-2.292745	-0.1118951	0.3399158	-0.3105233	-1.508511	-0.3726843	0.7406169	-1.008501	0.7613985	1.84741	-0.168909	-1.870071	-3.576097	-1.025941
51	-0.9061133	-1.449813	-0.9768546	-1.137369	-0.4047108	-1.156869	-0.6935338	-0.6137845	-0.8005316	-0.04120706	-0.4193332	0.2587765	-0.00914733	-0.6378438	0.5572982	0.5362011	-0.6320485	-0.2864158	-1.067478	-0.9201167
52	-5.298879	-11.04686	-2.329331	-10.6545	-7.354569	-6.500391	-3.151037	-2.704537	-3.000787	-4.23228	-4.569054	-1.390563	-6.880633	-6.431743	1.527797	7.736303	-6.684294	-2.431604	-7.98398	-10.94157
53	0.6787358	-2.793934	-2.764484	-1.300013	-0.8656675	-2.218615	-2.110226	-0.8846201	-2.334423	0.7146778	-0.6693841	-0.6402033	-1.997553	-1.035926	0.5447797	1.509856	-0.5221418	0.2858374	-1.625048	-1.344014
54	-1.289958	-1.589458	-1.00919	0.5363099	-1.563249	-0.9987799	-0.782795	0.2621717	-0.9909944	-0.4010528	-1.815161	0.9114609	-0.6841033	-0.1048651	0.08031223	1.1917	-0.5695258	-1.2979	-1.270382	-1.527779
55	-2.352975	-0.9975932	-0.06339423	-0.04587321	-1.668476	0.3066379	-0.8352398	0.00757238	-0.9461319	-0.6518217	-0.88928	-1.032789	-0.868911	-0.2274961	0.1006436	0.07174056	-0.7320884	-1.589252	-0.5664959	-0.8284736
56	-2.852958	-1.000456	-1.620472	-0.6202648	-1.888396	0.1767986	-0.7126501	-0.6787844	-0.5053132	-0.5745732	-0.8954158	-1.803709	-0.9839162	-1.808624	0.4061675	1.603482	-0.9740204	-1.367482	-2.061627	-1.954208
57	-1.760793	0.3038633	0.0412107	-0.02346034	-0.9305945	-0.7086306	-0.6954165	0.09036987	-1.019799	-0.3871031	-1.08161	-0.8259073	-2.4111744	-1.075891	-0.2143674	-0.2819945	-1.440958	-0.800738	-0.2546189	-1.064341
58	-1.486535	-0.9812647	-1.27355	-1.265269	-1.426981	0.05819455	-0.4098407	0.05651417	-2.321133	-0.5355942	-0.8939957	-1.369406	-0.6049764	-0.7000511	-1.021357	0.6902052	-0.917981	-1.760126	-0.9800389	-0.2544028
59	-1.389977	-1.028484	-0.3909667	-0.7254195	-1.368107	-0.6298612	-0.3754444	-0.07324243	-1.088001	-0.7912747	-0.5072017	-0.9805069	-0.7452368	-1.165362	0.2616024	0.4316593	-0.917042	-1.696972	-0.3797167	-0.0142081
60	-7.698304	-2.897681	-5.627722	-6.606662	-4.536472	0.04383522	-0.01261203	-3.04485	-4.315762	-0.4530264	-2.798777	-3.714275	-2.788297	-1.920249	0.1580838	4.131395	-3.494334	-5.013215	-2.202228	-0.8483813
61	-1.36306	-1.115741	-0.8569341	-1.434405	-0.9991294	-0.413381	-0.7386501	0.2230443	-0.652467	0.006788	-0.04083517	-0.2793856	-0.0946473	-0.8070845	-0.4469083	0.1004468	-0.2697781	-0.8238983	-0.4938205	-0.02811054

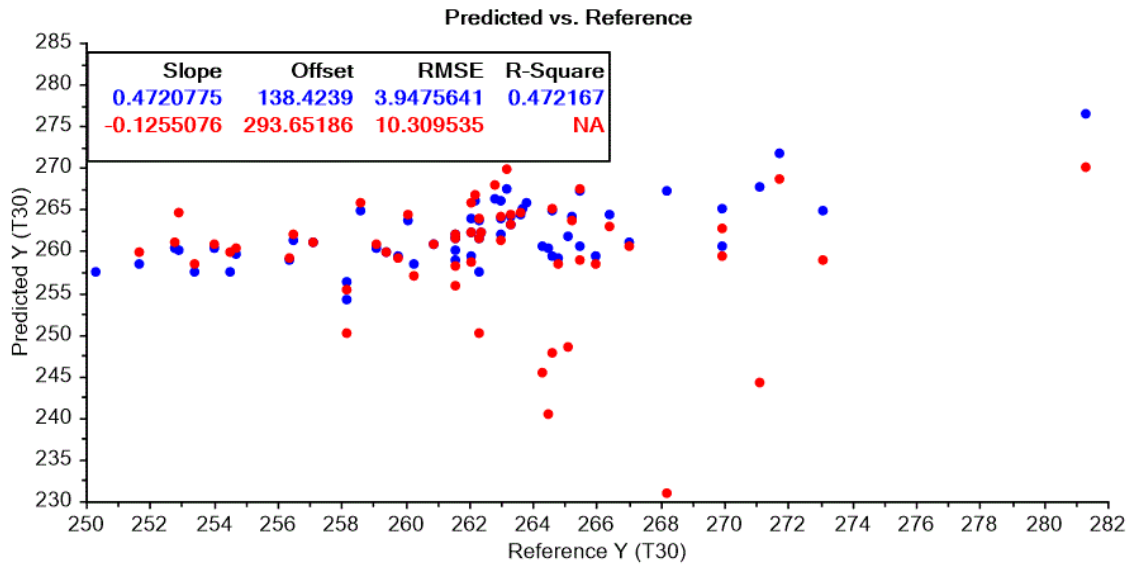
**ANEXO B. PROPIEDADES ESPECÍFICAS DEL DIÉSEL CORRIENTE  
COLOMBIANO**

<b>Diésel corriente (ACPM)</b>				
<b>Norma: ASTM D 975 / NTC 1438 (norma técnica colombiana)</b>				
<b>PROPIEDADES / CARACTERÍSTICAS</b>	<b>UNIDADES</b>	<b>MÉTODO</b>	<b>ESPECIFICACIÓN</b>	
			<b>Mínimo</b>	<b>Máximo</b>
<i>Agua y sedimentos</i>				0.05
<i>Azufre</i>	mL/100 mL	ASTM D-1796 ó ASTM D-2709		50
<i>Contenido de aromáticos</i>	mg/kg	ASTM D-2622 ó ASTM D-4294 ó ASTM D-5453		35
<i>Cenizas</i>	mL/100 mL	ASTM D-1319 ó ASTM D-5186		0.01
<i>Contenido de biocombustible</i>	g/100 g	ASTM D 482	1.8	2.2
<i>Color ASTM</i>	mL/100 mL	EN 14078		3.0
<i>Corrosión lámina de cobre 3 h a 50°C</i>	Clasificación	ASTM D 1500		2
<i>Destilación</i>	Clasificación	ASTM D 130		
<i>Punto inicial de ebullición</i>	°C	ASTM D 86	Reportar	
<i>T50%</i>			Reportar	
<i>T95%</i>				360
<i>Punto final de ebullición</i>				390
<i>Gravedad API</i>	° API	ASTM D-4052 ó ASTM D-1298	Reportar	
<i>Índice de cetano</i>	N/A	ASTM D-4737 ó ASTM D-976	45	
<i>Número de cetano</i>	N/A	ASTM D-613 ó ASTM D-6890	43	

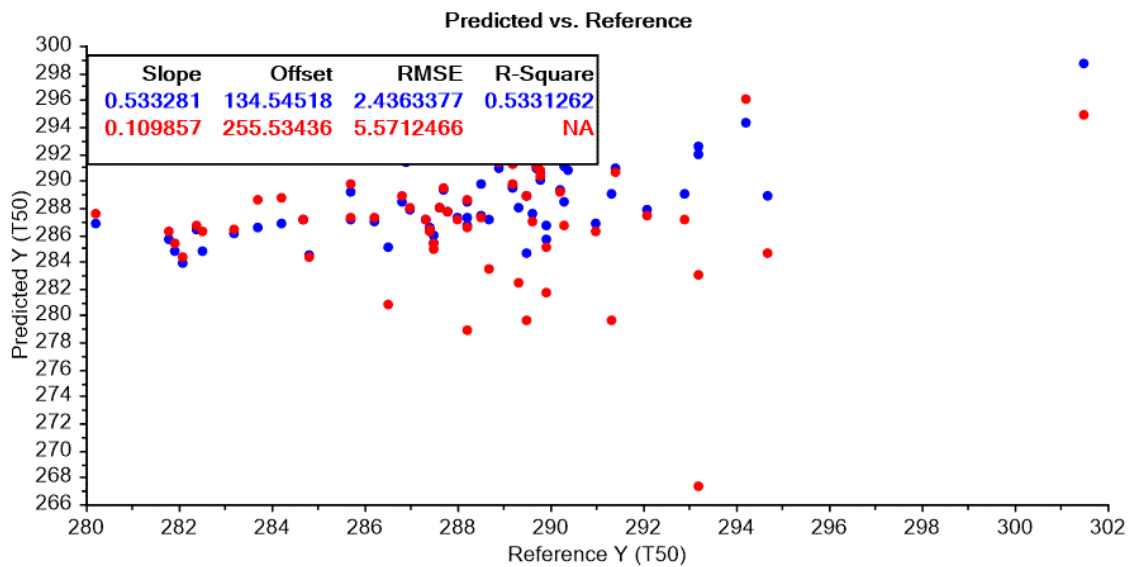
<b>Punto de fluidez</b>	°C	ASTM D 97 ó ASTM D 5949		3
<b>Punto de nube</b>	°C	ASTM D 2500	Reportar	
<b>Punto de inflamación</b>	°C	ASTM D 93	52	
<b>Temperatura obturación filtro frío</b>	°C	ASTM D 6371	Reportar	
<b>Residuos carbón micro (10% fondos)</b>	g/100 g	ASTM D 4530		0.20
<b>Viscosidad cinemática a 40°C</b>	mm <sup>2</sup> /s	ASTM D 445	1.9	5.0
<b>Estabilidad térmica</b>	% reflectancia	ASTM D 6468	70% a 90 minutos	
<b>Estabilidad de oxidación</b>	g/100 mL	ASTM D 2274		25
<b>Lubricidad a 60°C</b>	Micrómetros	ASTM D 6079		450

## ANEXO C. REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE (MLR)

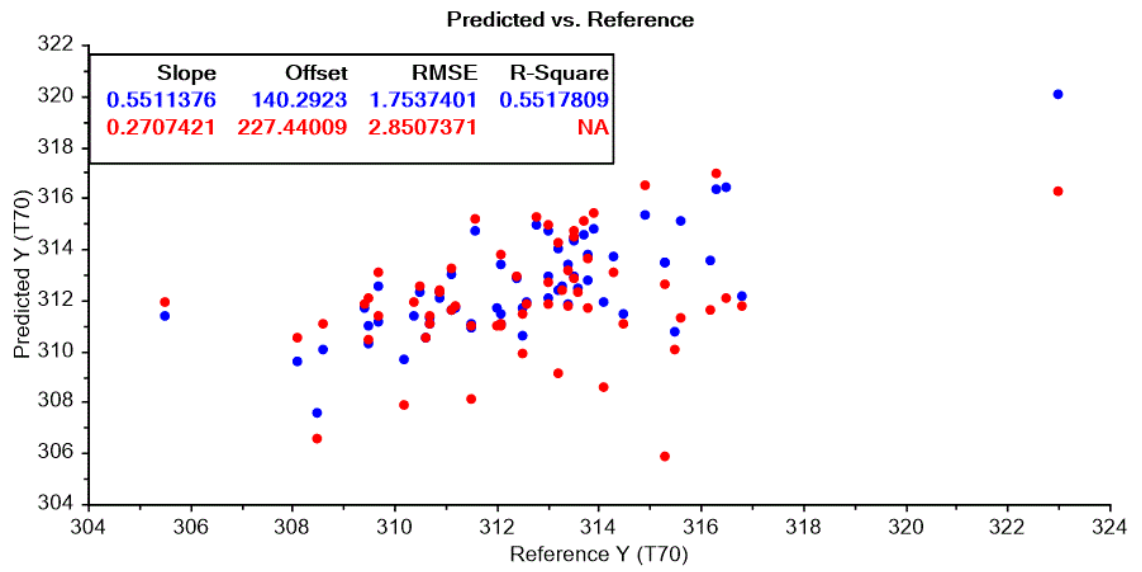
- **T30**



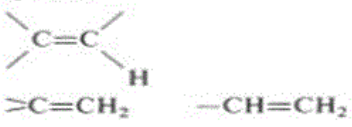
- **T50**



- T70



**ANEXO D. FRECUENCIAS DE ABSORCIÓN DE GRUPOS FUNCIONALES  
PARA LA REGIÓN NIR**

Grupo funcional	Banda $\text{cm}^{-1}$	Comentario
Acetilenos	9 800–9 430 6 580–6 400 (1.0)	Sobretono $\equiv\text{CH}$ Estiramiento
Alcoholes	7 140–7 010 (2.0)	Sobretono OH Estiramiento
Aldehidos Alifáticos Aromáticos Formaldehido	4 640–4 520 (0.5) ca 8 000 ca 4 525 ca 4 445 4 775–4 630 (1.0)	Combinación $\text{C}=\text{O}$ y CH Estiramiento
Alcanos — $\text{CH}_3$  — $\text{CH}_2$ —  $\equiv\text{CH}$  Ciclopropano	9 000–8 350 (0.02) 5 850–5 660 (0.1) 4 510–4 280 (0.3) 9 170–8 475 (0.02) 5 830–6 640 (0.1) 4 420–4 070 (0.25) 8 550–8 130 7 000–6 800 5 650–5 560 6 160–6 060 4 500–4 400	Bandas muy débiles
Alquenos  $\text{>C}=\text{CH}_2$ $-\text{CH}=\text{CH}_2$	6 850–6 370 (1.0)  7 580–7 300 (0.02) 6 140–5 980 (0.2) 4 760–4 700 (1.2)	