

**Predicción de la penetración del asfalto generado en la T205 de la GRB a través de un
sensor virtual**

Milton José Martínez Mantilla

Proyecto de grado para optar al título de Magister en Ingeniería Química

Director

Giovanni Morales Medina

PhD en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Faculta de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Maestría en Ingeniería Química

Bucaramanga

2018

Contenido

	Pág.
Introducción	10
1. Marco Teórico.....	12
1.1 Unidad de destilación.....	12
1.1.1 Torre de destilación al vacío T-205.	15
1.2 Redes neuronales artificiales (ANN)	19
1.3 Objetivos.....	23
1.3.1 General.....	23
1.3.2 Específicos	23
1.4 Alcance	23
2. Metodología	24
2.1 Desarrollo base de datos	24
2.2 Análisis de la base de dato	24
2.3 Aplicación de la regresión lineal múltiple para la predicción de la penetración.	25
2.4 Definición de arquitecturas de ANN.....	25
2.5 Entrenamiento de las redes	25
2.6 Validación de las redes	26
2.7 Análisis de la influencia de las variables utilizando el método <i>input perturbation</i>	27
3. Resultados.....	27

3.1 Base de datos.....	27
3.2 Entrenamiento de diferentes arquitecturas de ANN	34
3.3 Validación de las redes y selección del modelo.....	41
3.3 Influencia variables en la ANN.....	46
4. Conclusiones	49
5. Recomendaciones	50
Referencias Bibliográficas	51

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1. Valores para la penetración obtenida en el cemento asfáltico preparado en 2016.	15
Figura 2. Unidad de destilación al vacío T-205	16
Figura 3. Representación gráfica de una red neuronal multinivel con todas las conexiones hacia adelante donde se describe la (mesoestructura).....	20
Figura 4. Funciones de activación tangente sigmoidal (Tansig) y logística sigmoidal (Logsig). 25	25
Figura 5. Gráfico de dispersión para la carga a la T-205. (a) Datos en la ventana de operación. (b) Datos depurados.....	29
Figura 6. Diagrama boxplot para datos de flujo, en bpd, de sensores de la T-205 en la ventana de operación.....	29
Figura 7. Resultados ajuste de la penetración con el mejor modelo obtenido por MLR utilizando el programa denominado R.....	31
Figura 8. Resultados después de la eliminación de datos influyentes en el mejor modelo obtenido para la predicción de la penetración por MLR utilizando el programa denominado R. 32	32
Figura 9. Tendencia de la penetración a 77 °F respecto a la viscosidad a 212 °F del cemento asfáltico generado en la T-205.....	33
Figura 10. Creación de la arquitectura de red en el nntool de Matlab R2014a.....	36
Figura 11. Desempeño ANN según el número de neuronas en la capa interna con función de activación tangente sigmoidal (Tansig) en la predicción de la penetración.	37

Figura 12. Desempeño ANN según el número de neuronas en la capa interna con función de activación logística sigmoideal (Logsig) en la predicción de la penetración. 37

Figura 13. Residuales estándar de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Tansig para la predicción de la penetración..... 38

Figura 14. Desempeños de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Tansig omitiendo los datos atípicos en la predicción de la penetración. 39

Figura 15. Desempeños de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Logsig omitiendo los datos atípicos en la predicción de la penetración. 40

Figura 16. Variación del MSE promedio –10 entrenamientos– en el punto mínimo de validación respecto al incremento en el número de neuronas en la capa interna. 42

Figura 17. Desempeño de las regresiones de la penetración con la arquitectura 47:60:1 Tansig para los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y proceso global. 44

Figura 18. Desempeño de las regresiones de la penetración con la arquitectura 47:80:1 Logsig para los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y proceso global..... 44

Figura 19. Histograma de los errores con las regresiones arquitectura 47:60:1 Tansig. 45

Figura 20. Histograma de los errores con las regresiones arquitectura 47:80:1 Logsig. 45

Figura 21. Impacto de la inclusión de la viscosidad del fondo en la variación del coeficiente de determinación con el número de neuronas en la capa interna..... 46

Figura 22. Errores obtenidos con la inclusión de la viscosidad del fondo..... 46

Figura 23. Resultados del análisis de sensibilidad sobre la red 47:60:1 Tansig según el procedimiento input perturbation. MSE línea roja; línea segmentada negra representa el valor de R^2 promedio reportado por el entrenamiento de la red 47:60:1 Tansig. 48

Lista de Tablas

	Pág.
Tabla 1. Algunas especificaciones técnicas para un CA comercial (Página de INVIAS).	13
Tabla 2. Reporte diario del comportamiento de la penetración del fondo de vacío de la T- 205.Fuente departamento de control de la calidad de la GRB CDLAB.	19
Tabla 3. Variación MSE en el punto mínimo de validación respecto al número de neuronas en la capa oculta.....	41

Resumen

Título: Predicción de la penetración del asfalto generado en la T205 de la GRB a través de un sensor virtual*

Autor: Milton José Martínez Mantilla**

Palabras Clave: Predicción, asfalto, T205, GRB, Sensor, Virtual

En la GRB, el asfalto se prepara con proporciones de fondos de vacío ajustadas utilizando un procedimiento de prueba y error, para conseguir un valor de penetración entre 60 y 70 mm/10. La preparación puede ser mejorada con la aplicación de un sensor virtual en línea. En el presente documento se describen los resultados del desarrollo de un sensor virtual utilizando redes neuronales artificiales a partir de datos de proceso de la unidad U-200, recolectados entre enero de 2012 hasta febrero de 2016. La arquitectura *feedforward-backpropagation* fue utilizada para las redes, según el *anntool* de MATLAB; asimismo, las funciones de transferencia ensayadas fueron Logsig y Tansig.

Según los resultados, los valores de R^2 corresponden a 0.875 para la arquitectura 47:60:1-Tansig, y 0.826 para la arquitectura 47:80:1-Logsig. También, las redes muestran resiliencia respecto a datos atípicos. Por otra parte, el procedimiento *input perturbation* aplicado a la red 47:60:1-Tansig mostró que las variables con mayor influencia corresponden al flujo del reflujo inferior de la T-205 y a su vapor de despojo. Con lo anterior, el protocolo de entrenamiento de las redes aplicado en el presente documento constituye una herramienta para la predicción semicuantitativa de la penetración del asfalto producido en la U-200.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, escuela de Ingeniería Química. Maestría en Ingeniería Química. Director Giovanni Morales Medina

Abstract

Title: Prediction of the penetration of the asphalt generated in the T205 of the GRB through a virtual sensor *

Author: Milton José Martínez Mantilla **

Key Words: Prediction, asphalt, T205, GRB, Sensor, Virtual

In the GRB, the asphalt is prepared with proportions of adjusted vacuum funds using a trial and error procedure, to achieve a penetration value between 60 and 70 mm / 10. The preparation can be improved with the application of a virtual online sensor. This document describes the results of the development of a virtual sensor using artificial neural networks based on process data from the U-200 unit, collected between January 2012 and February 2016. The feedforward-backpropagation architecture was used for the networks, according to the ANN tool of MATLAB; likewise, the transfer functions tested were Logsig and Tansig.

According to the results, the values of R2 correspond to 0.875 for architecture 47: 60:1-Tansig, and 0.826 for architecture 47:80:1-Logsig. Also, networks show resilience with respect to atypical data. On the other hand, the input perturbation procedure applied to the 47: 60: 1-Tansig network showed that the variables with the greatest influence correspond to the lower reflux of the T-205 and its stripping vapor. With the above, the network training protocol applied in this document is a tool for the semiquantitative prediction of the penetration of the asphalt produced in the U-200 this document is a tool for the semiquantitative prediction of the penetration of the asphalt produced in the U-200..

* Project of grade

** Faculty of Physicochemical Engineering, School of Chemical Engineering, Master's Degree in Chemical Engineering. Director Giovanni Morales Medina

Introducción

El incremento en el país de las reservas de crudos pesados y la baja disponibilidad de crudos livianos han llevado a un aumento en los flujos de fondos de vacío en las refinerías. En la GRB, la generación de fondos de vacío supera el 27% por barril de crudo cargado, *i.e.* 65 kbpd (Departamento PLP GRB año 2015). Estos 65 kbpd superan en 20 kbpd la capacidad de procesamiento de las unidades de refinación de fondos, lo cual conlleva a las alternativas de producción de combustóleo o a la producción de cemento asfáltico. La generación de combustóleo es la actividad menos rentable debido al requerimiento de grandes volúmenes de diluyente (ALC) para cumplir con las especificaciones comerciales. De otro lado, la producción de cemento asfáltico es una alternativa que ofrece mayores beneficios económicos debido a su valor comercial (47,3 U\$/bbl) y a la demanda creciente del mercado. Con lo anterior el departamento de PLP de la GRB dedica esfuerzos importantes para la preparación de cemento asfáltico con posibilidades comerciales principalmente para su uso en la calzada vehicular.

Los asfaltos comerciales deben cumplir con las especificaciones del mercado, dentro de las cuales la penetración es una de las caracterizaciones físicas más importantes; el ensayo de penetración estima la dureza o consistencia relativa de un cemento asfáltico por medio de la distancia vertical que una aguja normalizada recorre en una muestra, en condiciones específicas de temperatura, carga y tiempo (ASTM D5-06, 2011). El valor de penetración que debe cumplir el cemento asfáltico corresponde al intervalo entre 60 y 70 mm/10 –nombrado como 60/70–.

En la GRB, el cemento asfáltico convencional base con calidad 60/70 se puede preparar por medio de la mezcla de los fondos de vacío provenientes de las torres T-131, T-205, T-253, T-2103 y T-2003. Las proporciones de estos fondos son ajustadas utilizando un procedimiento de prueba y error basado en un índice para la estimación de la penetración de la mezcla. El valor predicho para la penetración de la mezcla es verificado por el laboratorio después de cuatro horas, tiempo para el cual ya se ha preparado una cantidad apreciable de cemento asfáltico. Cuando se obtiene un asfalto mezcla con penetración por fuera del valor 60/70, debe ser reprocesado ocasionando retrasos en la producción con la consecuente pérdida económica y de la imagen de la GRB ante los clientes; actualmente se producen *ca.* 350 kbpd de cemento asfáltico.

El esquema de preparación del cemento asfáltico en la GRB presenta una importante limitación, reflejado en la cantidad de reprocesos (20 por mes), debido a que la correlación para el índice de mezcla exhibe bajo desempeño en sus estimaciones. La estrategia de preparación del cemento asfáltico puede ser mejorada con la aplicación de un sensor que reporte la penetración en tiempo real, evitando las 4 horas requeridas actualmente por el laboratorio. Sin embargo, dentro de los sensores comerciales no se cuenta con un equipo que permita medir la penetración en línea.

Una opción para la medición de propiedades en línea corresponde a la aplicación de los denominados sensores virtuales (*soft sensors*) o “estimadores de estado”, los cuales aplican modelos matemáticos creados a partir de datos experimentales o datos de planta, para inferir las variables de proceso que no cuentan con su respectivo sensor físico. Uno de los modelos utilizados para los sensores virtuales corresponde a los obtenidos a partir de redes neuronales artificiales (ANN), las cuales son utilizadas industrialmente debido a su alto desempeño y exactitud en diferentes áreas tales como control de procesos, predicción de la precipitación de asfaltenos,

estimación continua de la calidad de productos, procesamiento de datos en línea y optimización del uso de recursos (Fortuna, 2007).

En este documento se exponen los principales resultados de una metodología para construir un sensor virtual de ANN a partir de históricos de variables de proceso y dos propiedades para el crudo reducido procesado en la unidad U-200 de la GRB.

1. Marco Teórico

1.1 Unidad de destilación

Una unidad de destilación tiene por objeto fraccionar el petróleo crudo en un cierto número de cortes o fracciones clasificadas en función de las temperaturas de ebullición de los hidrocarburos. Los hidrocarburos más livianos (alta volatilidad y menor peso molecular) se obtienen por la parte superior de la torre de fraccionamiento atmosférico, siendo la nafta virgen el componente líquido más liviano obtenido en esta unidad y en orden descendente se obtiene el turbo combustible Jet A1, seguido del ACPM, el gasóleo atmosférico y el producto de fondo llamado crudo reducido (Watkins, 1979). Este producto de fondo es adicionalmente fraccionado en una torre de destilación al vacío para generar aún más gasóleo y un residuo denominado fondo de vacío o asfalto.

La composición química del fondo de vacío (FV) es compleja; básicamente, el FV está constituido en mayor proporción por anillos aromáticos policondensados con cadenas laterales formando los denominados compuestos de resinas y asfáltenos (Wauquier, 2004). Adicionalmente,

las resinas y los asfáltenos poseen heteroátomos como el azufre, el oxígeno y el nitrógeno y metales como el vanadio, el níquel, el hierro, el calcio y el magnesio (Riazi, 2005). En menor proporción, el FV posee moléculas de hidrocarburos saturados y compuestos aromáticos de pocos anillos. La composición específica de un FV en particular dependerá de la procedencia de los crudos destilados y del modo de operación de la torre de destilación; cada modo de operación impacta la composición de productos volátiles y pesados en los FV. Las diferentes propiedades de los FV dependen de su composición. En general, los asfáltenos son los responsables de la complejidad en las propiedades de flujo (*e.g.* la viscosidad) y de la resistencia mecánica (Wauquier, 2004; Riazi, 2005). De otro lado, los máltenos (resinas, saturados y aromáticos) son los responsables de las propiedades adhesividad, flexibilidad y aglutinación; desde luego, las propiedades se ven alteradas por las cantidades de otros compuestos (medios y livianos) que contenga el FV.

Según lo anterior, los fondos de vacío deben ser mezclados en proporciones adecuadas para conseguir los niveles de asfáltenos y máltenos que cumplan con los requerimientos comerciales para los cementos asfálticos (CA); la Tabla 1 presenta los valores para las propiedades de un CA comercial exigidos por el INVIAS.

Tabla 1.

Algunas especificaciones técnicas para un CA comercial (Página de INVIAS).

Asfalto 60/70				
Propiedades/características	Unidades	Método	Especificación	
		ASTM	Mínimo	Máximo
Ductilidad al 25°C,5cm/min	Cm	D113	100	
Penetración a 25°C,100g, 5S	mm/10	D5	60	70
Punto de ablandamiento	°C	D36	45	55
Punto de inflamación	°C	D92	232	

En la GRB, la preparación del CA con calidad 60/70 (Tabla 1) se alcanza con un proceso de prueba y error basado en una correlación desarrollada para la predicción de la penetración de la mezcla; este proceso presenta varias debilidades como incertidumbre de la correlación y carencia de verificación en línea (tiempo para la verificación experimental de la penetración aprox. 4 horas), las cuales conllevan a los inconvenientes de preparación de grandes volúmenes de CA con especificaciones por fuera del rango requerido (Tabla 1), reprocesamiento de estos volúmenes y retrasos en las entregas e incumplimientos en la cantidades comprometidas con los clientes.

Los inconvenientes mencionados se presentan con frecuencia dificultando el cumplimiento de las metas de programación; la Figura 2 presenta el comportamiento de la penetración de un CA preparado durante abril de 2016, lo cual condujo a un porcentaje de reproceso de 31.5% (Departamento de control de la calidad GRB, 2016). En la Figura 2 se observa que el registro de los datos de laboratorio de verificación (línea color purpura) se encuentra por fuera de la especificación (60/70), en repetidas ocasiones, tanto por debajo del límite inferior (60), (línea color naranja), como por encima del límite superior (70), (línea amarilla). Las preparaciones realizadas se basan en un índice de mezcla para la penetración (*know-how* de ECP), con una estimación previa de esta propiedad para cada flujo disponible basado en el último dato de laboratorio. Las preparaciones por fuera de la especificación son debidas principalmente a los cambios en las propiedades de las cargas, a los modos operativos y al tiempo muerto del laboratorio.

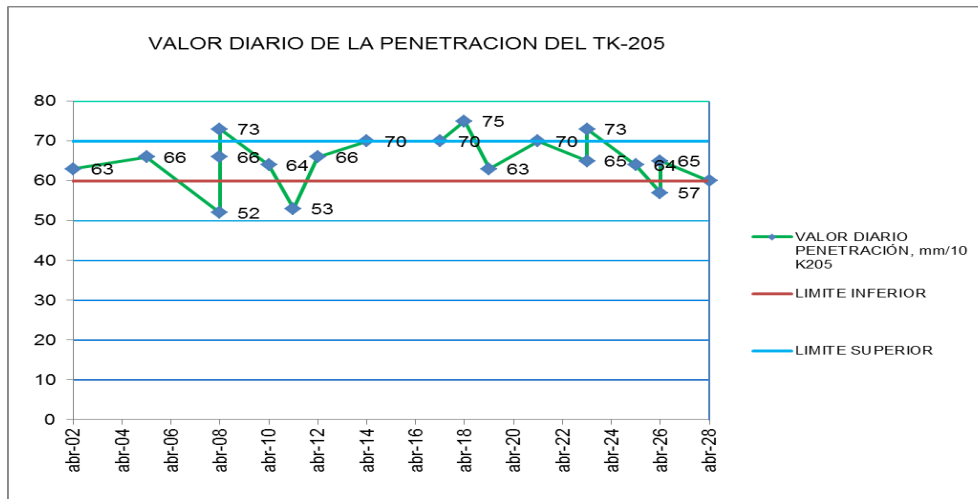


Figura 1. Valores para la penetración obtenida en el cemento asfáltico preparado en 2016.

Nota. Adaptada de: Departamento de control de la calidad de la GRB CDLAB.

El reproceso de asfalto fuera de especificación impacta en el flujo de caja de la GRB, la cual deja de percibir *ca.* 6\$MMUS al mes (calculado con un precio de 60 dólares por barril). Con esto, un incremento en la efectividad en la preparación del CA 60/70 impactaría positivamente en el margen de refinación de la GRB. De otro lado, la T-205 genera un asfalto de importancia para la mezcla ya que debido a su valor alto de penetración permite ablandar el CA generado y elevar su valor de penetración hasta el intervalo exigido comercialmente. Luego, el aseguramiento del valor de penetración para el asfalto de la T-205 mejoraría la eficiencia de preparación del cemento asfáltico.

1.1.1 Torre de destilación al vacío T-205. La Torre T-205 extrae gasóleo a partir de carga pesada mediante una operación de destilación al vacío. La carga a la torre T-205 es la totalidad del crudo reducido del fondo de la T-204 y parte del crudo reducido de la T-201, el cual llega a la zona flash por encima del plato 5 y tiene como ventana operativa máxima 20.5 kbpd. Los rendimientos

de gasóleos obtenidos son de *ca.* 45% de la carga alimentada, valor que es inferior a los reportados por otras unidades (*ca.* 60%), debido a que la T-205 no cuenta con un horno que permita calentar el crudo reducido.

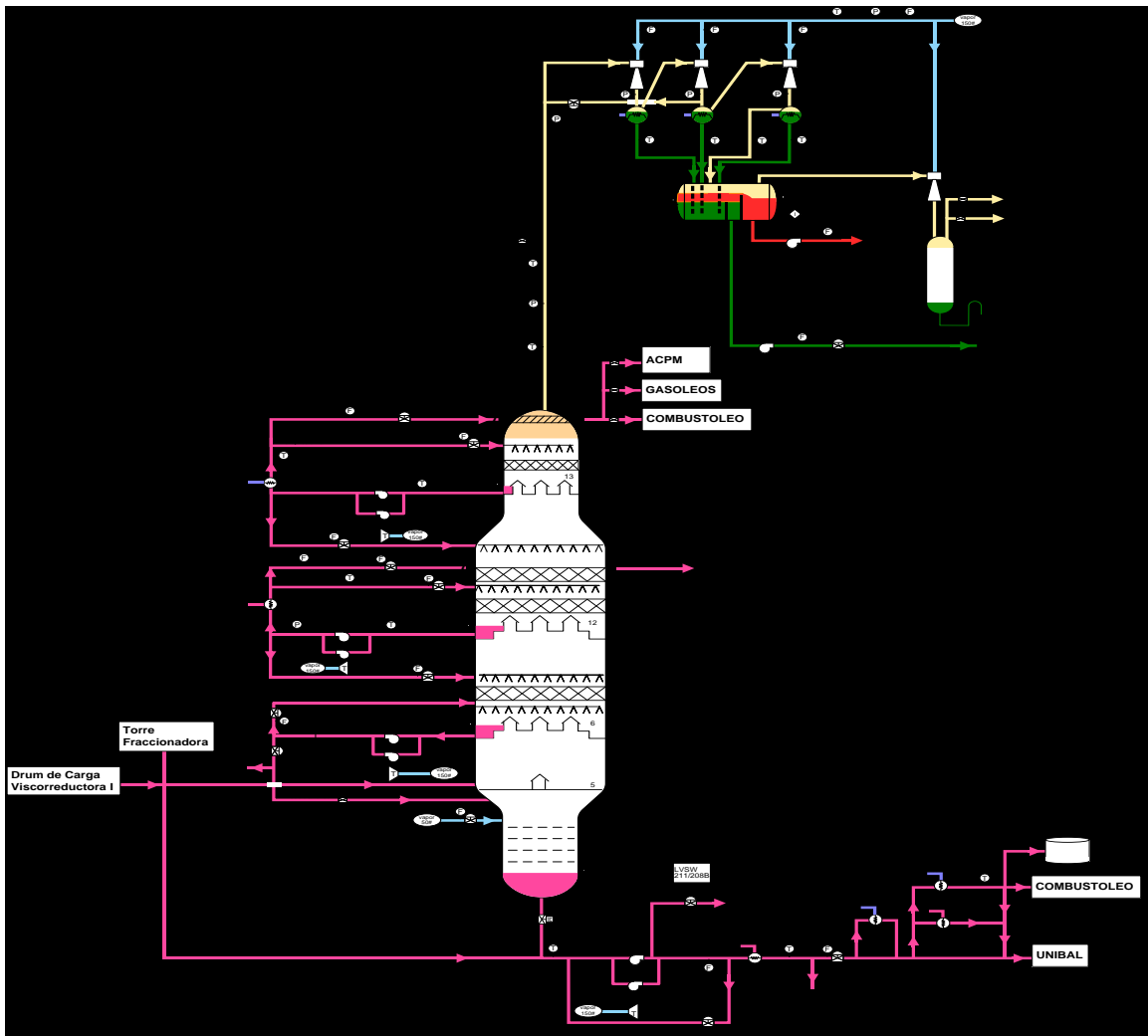


Figura 2. Unidad de destilación al vacío T-205

Nota. Adaptada de: Manual de descripción de procesos de la unidad 200.

Los circuitos principales que componen esta unidad son (Figura 3):

El circuito de cima: en este circuito los vapores salen de la torre a 180°F y contienen vapor de agua, gases condensables y no condensables, Los hidrocarburos y el vapor de agua condensado se acumulan y se separan en el tambor de sello D-228 donde se obtiene como producto gasóleo liviano en proporciones no mayores al 1% respecto a la carga, los no condensables son enviados a la atmosfera o al sistema de tea.

El circuito de gasóleo liviano: La corriente de GLV se extrae del plato 13 de la torre vacío T-205, llega a la succión de las bombas de GLV P-220C/D, para luego dividirse en dos corrientes, la primera retorna a la torre como reflujo caliente superior por encima de la malla. El flujo es manipulado por el controlador FIC250, la segunda va a enfriarse por el lado casco en los E-214A/B y se divide en dos corrientes: una regresa a la torre como reflujo a través del controlador de flujo FIC220 y la otra sale como gasóleo producto a través de la válvula de control de nivel LIC250 y medido por el Indicador de flujo FI214B. La producción de gasóleo liviano tiene facilidades para enviarse al sistema de ACPM, gasóleo o combustóleo y tiene un rendimiento típico del 15% al 18% respecto a la carga.

Circuito de Gasóleo pesado: La corriente de GPV se extrae del plato 12 de la torre vacío T-205, el líquido llega a la succión de las bombas P-212C/D, para luego dividirse en dos corrientes, la primera retorna a la torre como reflujo caliente inferior debajo del colector del plato 12, el flujo es manipulado por el Controlador de flujo FIC234, la segunda va por el lado casco a los Intercambiadores E-233A/B y se divide en dos corrientes, una regresa a la torre como reflujo a través del controlador de flujo FIC221, la otra sale como gasóleo pesado de vacío producto a través indicador de flujo FI207A y manipulado por la válvula de control de nivel LIC209 hacia el cabezal de gasóleos y tiene un rendimiento típico del 25% al 28% en volumen respecto a la carga.

Circuito de Reciclo: El reciclo se extrae del plato 6 de la torre vacío T-205, llega a la succión de las bombas de reciclo P-212A/B y se divide en dos corrientes, la primera retorna a la torre por encima del plato a través del controlador de flujo FIC255, la segunda pasa a través de la válvula de control de nivel LIC251 y se divide en dos circuitos, uno retorna al fondo de la torre manualmente como recirculación y el otro sale como gasóleos, esta corriente por ser una fracción muy pesada y con un alto contenido de Carbón, níquel, vanadio, normalmente no se alinea al cabezal de gasóleos, solo recircula en la torre.

Circuito de Fondos: Del fondo de la torre sale la corriente de asfalto a la succión de las bombas de fondos P-223A/B, esta corriente se puede dividir en tres, una exportarse como carga de crudo reducido a otras unidades a través de la válvula de control de nivel LIC208B, otra como recirculación de las bombas por medio del controlador FIC296 con el fin de mantener el flujo mínimo en los escenarios de baja carga y la última llega al Intercambiador E-235C que cede calor al crudo y es manipulada por el LIC211 donde envía el flujo a tres posibles sistemas, el primero puede ir a la unidad de balance o destilación de fondos, el segundo pasa por el lado casco del enfriador E-223A/B para disminuir su temperatura y enviarlos a los tanques de asfalto de ventas como CA, o a combustóleo.

La tabla 2, muestra el comportamiento típico de la penetración del fondo de vacío de la T-205. Los valores de la penetración reportados presentan variaciones abruptas, ocasionados por los cambios en la composición de la carga y las fluctuaciones en las variables de proceso. Estos cambios en las condiciones de operación alteran la dinámica de la preparación del cemento asfáltico y ocasionan reprocesamiento en la unidad.

Tabla 2.

Reporte diario del comportamiento de la penetración del fondo de vacío de la T-205. Fuente departamento de control de la calidad de la GRB CDLAB.

T-205	
Fecha	Penetración, mm/10
abril 4-2015	80
abril 5-2015	82
abril 6-2015	75
abril 7-2015	77
abril 8-2015	84
abril 9-2015	143
abril 10-2015	92
abril 11-2015	73
abril 12-2015	57
abril 13-2015	86
abril 14-2015	74
abril 15-2015	75
abril 16-2015	74
abril 17-2015	58
abril 18-2015	74
abril 19-2015	87
abril 20-2015	75

Nota. Adaptada de: Departamento de control de la calidad de la GRB CDLAB.

1.2 Redes neuronales artificiales (ANN)

Una red neuronal artificial ANN es una interconexión masiva de elementos simples en paralelo usualmente adaptativos y con una organización jerárquica definida, las cuales interactúan con

objetos o elementos del entorno o el mundo real de forma similar que lo hace el sistema nervioso biológico y que proporcionan el modelado de un conjunto de datos no lineales (Hilera, 2000).

El modelo de la ANN se obtiene mediante entrenamiento con datos experimentales en una estructura de prueba, donde se realizan las asociaciones posibles considerando número de niveles o capas, numero de neuronas por nivel, patrones de conexión y el flujo de información; las variables de construcción de la ANN pueden ser modificadas en este entrenamiento para obtener la mejor reproducción de las variables importantes del proceso. Una de las ventajas en su funcionamiento es el de requerir múltiples entradas, con lo cual la probabilidad de error en sus predicciones es reducida, mucho menor que la de un sensor real (Robert, 2002).

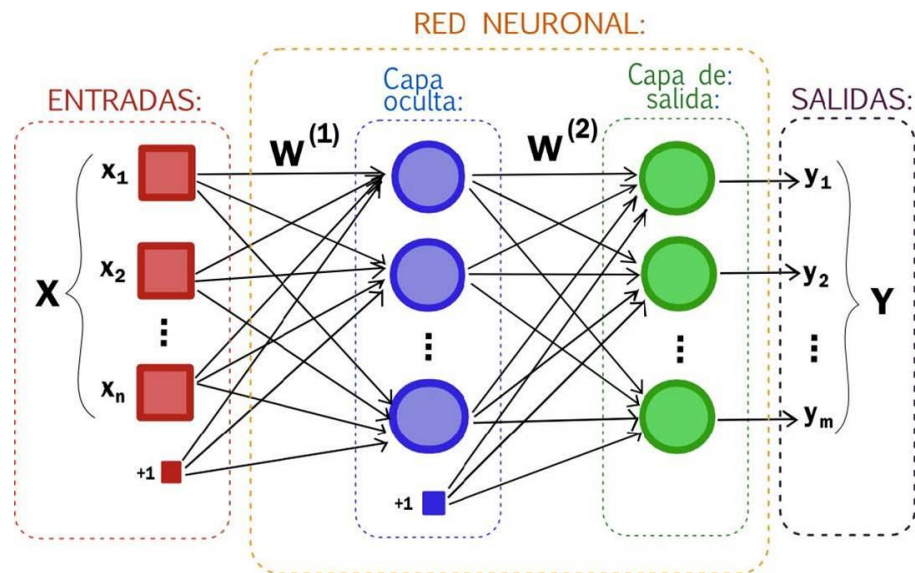


Figura 3. Representación gráfica de una red neuronal multinivel con todas las conexiones hacia adelante donde se describe la (mesoestructura).

La teoría y el diseño de redes neuronales artificiales están basados en la estructura y funcionamiento de los sistemas nerviosos, en donde la neurona es la unidad más simple o elemental de una red. Una red neuronal está organizada en función de (Figura 4):

- Número de niveles o capas.
- Número de neuronas por nivel.
- Patrones de conexión.
- Flujo de información

El arreglo o distribución de las neuronas dentro de la red se realizan formando niveles o capas de un número determinado de neuronas. Partiendo de su ubicación dentro de la red se pueden distinguir tres tipos de capas diferentes (Figura 4):

- **Capa de entrada:** Es la capa expuesta que recibe la información que proviene del entorno o fuentes externas a la red.
- **Capa oculta:** Pertenecen al conjunto de niveles formados por neuronas que no tienen contacto directo con el entorno exterior, el número de estas capas puede variar entre cero y un número considerable determinando así las distintas tipologías de las redes neuronales.
- **Capa de salida:** Es la capa encargada de realizar la transferencia de información desde la red hacia el entorno exterior o los dispositivos asociados a esta (Hilera, 2000).

Una ANN puede adaptarse para procesar información de planta de las variables típicas de operación, con lo cual es posible predecir el comportamiento dinámico de la calidad de un producto o determinada propiedad de un compuesto y así definir el máximo rendimiento posible sin afectar otras corrientes valiosas en el proceso. A continuación, se presentan algunos trabajos de aplicación de las ANN en el área del petróleo:

- Bhat *et al.* (2003) y Rogina *et al.* (2011) construyeron sensores virtuales para la predicción de propiedades de productos y procesamiento de datos en línea para unidades de destilación de crudos.

- Fortuna *et al.* (2005) desarrollaron una metodología para la construcción de un soft sensor para el monitoreo de la calidad de productos en una columna estabilizadora de nafta.
- Bolf *et al.* (2008) elaboraron un *soft sensor* para la estimación y control de las propiedades del keroseno en una unidad de destilación de crudo.

Es importante mencionar que en la búsqueda de literatura realizada no se encontraron trabajos de desarrollo de sensores virtuales para la predicción o el análisis de las propiedades para los asfaltos.

De otro lado, es posible construir una red neuronal a partir de las variables operacionales que gobiernan el desempeño de la unidad de destilación al vacío T-205, que permita predecir con cierto grado de exactitud la calidad y los rendimientos estimados según el tipo de carga. Con esto, es posible inferir la penetración del asfalto producido en la unidad para estimar su efecto en la preparación de un asfalto convencional base.

Los datos disponibles y susceptibles de ser registrados en línea mediante la herramienta (PI Data Link), corresponde a variables de operación (i.e. temperaturas, presiones y caudales), el registro de la viscosidad en línea de la mezcla de asfaltos en la unidad de preparación y dos propiedades de laboratorio del crudo reducido tratado (densidad y azufre). Los anteriores valores conformaran la base de datos con la que es posible construir los vectores de entrada a la red neuronal y así crear un vector de salida que reporte el valor de la penetración del asfalto producto de fondo de la T-205.

1.3 Objetivos

1.3.1 General. Proponer un sensor virtual para la predicción de la penetración del asfalto generado en la T-205 por medio del entrenamiento y la validación con datos de proceso de una red neuronal adecuada.

1.3.2 Específicos

- Generar una base de datos depurada con las variables de operación de las torres T-201, T-204 y T-205.
- Proponer un modelo de ANN que prediga la penetración del asfalto generado en la T-205 a partir de la base de datos depurada.
- Determinar la influencia de las variables de operación en la predicción de la penetración del asfalto efectuada por medio de ANN.

1.4 Alcance

Validar una red neuronal para la estimación de la penetración del asfalto generado en la T-205 a partir de los históricos de la operación de las torres T-201, T-204 y T-205.

2. Metodología

2.1 Desarrollo base de datos

En esta actividad se recopilarán los datos históricos de las variables de operación de las torres T-201, T-204 y T-205.

2.2 Análisis de la base de dato

Según las tendencias, se clasificarán los datos en modos operativos de acuerdo al valor de penetración del asfalto generado y el estado estacionario presentado en cada caso. Asimismo, se aplicará estadística univariada para determinar los valores promedio, valores máximos y mínimos, desviación estándar e intervalos de confianza para las variables de la base de datos. También, se obtendrá la matriz de dispersión bivariada para inferir correlaciones entre pares de variables que permitan visualizar las posibles fuentes de variación en los valores de penetración del asfalto producido en cada modo operativo identificado.

2.3 Aplicación de la regresión lineal múltiple para la predicción de la penetración.

2.4 Definición de arquitecturas de ANN

De acuerdo a la consulta bibliográfica se ensayarán diferentes arquitecturas de construcción de la red neuronal, definiendo el número de capas internas, el número de neuronas en cada capa, el algoritmo de entrenamiento y las funciones neuronales tangencial sigmoidal (Tansig) y logística sigmoidal (Logsig). Estas funciones de activación son mostradas en la Figura 2.1.

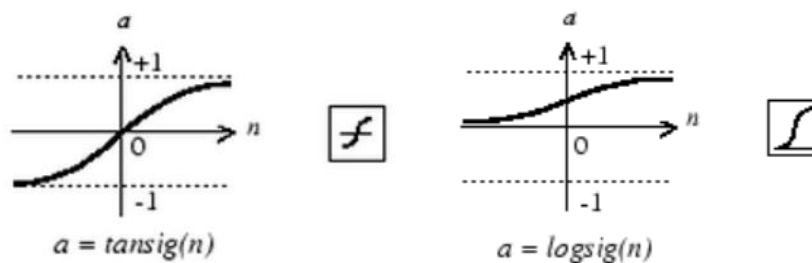


Figura 4. Funciones de activación tangente sigmoidal (Tansig) y logística sigmoidal (Logsig).

2.5 Entrenamiento de las redes

La base de datos se dividirá en un conjunto de entrenamiento (70% de los datos totales) y en un conjunto de validación (los datos restantes). Con el conjunto de datos de entrenamiento se ensayarán las diferentes arquitecturas propuestas en la actividad anterior, calculando para cada una

la raíz del error medio cuadrático (RMSE)¹ y el coeficiente de determinación (R²)². Con los anteriores estadísticos es posible discernir sobre el desempeño de cada red neuronal.

2.6 Validación de las redes

Las ANN de mejor desempeño en la calibración serán sujetas a la etapa de validación con el 30% del conjunto de datos. En esta etapa las redes entrenadas predecirán los datos de penetración según los valores de las variables independientes respectivas. Estos datos serán comparados con los experimentales de la base de datos para determinar el desempeño de cada red según los estadísticos RMSE y Q² de esta etapa de validación (ver notas al pie 2 y 3). Según la escala jerárquica, se seleccionará la red que mejor reproduzca los datos de penetración del conjunto de muestras de validación. Asimismo, la resiliencia de la red fue verificada omitiendo los datos atípicos identificados utilizando el concepto de residuales estándar, según (Yau, 2015)

$$rs_i = \frac{r_i}{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum r_i^2}}$$

Donde, rs_i corresponde al residual estándar i -ésimo, r_i es el residual i -ésimo y n corresponde al número de datos de la muestra. Las muestras atípicas se encuentran fuera del rango [-2; 2].

¹ Para calibración $RMSE = \sqrt{RSS/N}$, donde RSS corresponde a la suma de los cuadrados de los residuos de calibración y N es el número total de muestras de calibración. Para validación $RMSE = \sqrt{PRESS/N}$ donde PRESS es la suma de los cuadrados de los residuos de predicción según el conjunto externo (30%) y N es el número de muestras de la validación externa.

² Para calibración $R^2 = 1 - RSS/SST$, donde SST representa la varianza total del conjunto. Para validación R^2 corresponde a $Q^2 = 1 - PRESS/SST$, donde y SST representa la varianza total del conjunto de validación.

2.7 Análisis de la influencia de las variables utilizando el método *input perturbation*.

En este procedimiento, una neurona de la capa de entrada es sometida a una perturbación del 50% en su variable asociada, con lo cual se evalúa el cambio en el coeficiente de determinación promedio; la variable es modificada a su valor inicial, mientras la misma perturbación es aplicada en otra neurona; el proceso es repetido para todas las neuronas de la capa de entrada (Olden *et al.*, 2004; Gevrey *et al.*, 2003).

3. Resultados

3.1 Base de datos

Los datos medidos por los sensores de las torres de destilación de la U-200, desde enero de 2012 hasta febrero de 2016 (ventana de operación), fueron descargados del sistema de almacenamiento y visualización de datos de la Gerencia Refinería Barrancabermeja (GRB) denominado PI. La ventana de operación se encuentra constituida por un total de 3357 muestras correspondientes a los reportes de las torres T-201, T-204 y T-205 cada 8 horas, tiempo para el cual se tiene una actualización del valor de la penetración del asfalto generado en la T-205 –esta torre procesa los fondos de las torres T-204 y T-205–. Cada muestra contiene un total de 57 variables, considerando propiedades del crudo reducido procesado (densidad, azufre, penetración), presiones y temperaturas de las torres, cargas procesadas, sistemas de reflujo y flujos de salida.

La base de datos fue depurada para retirar muestras con reportes referentes a “[-11059] No Good Data For Calculation”, así como datos atípicos según el rango intercuartíl de cada variable; las Figuras 3.1a y 3.2 presentan la gráfica de dispersión para la carga a la T-205 y los diagramas *boxplot* para algunas variables con datos atípicos, respectivamente. Después de la depuración, la base de datos fue reducida a un total de 2877 muestras (Figura 3.1b). De otro lado, ca. 30% de los datos para el flujo del reflujo de cima (FT-220, Figura 1.1) reportaron valores con “[-11059] No Good Data For Calculation”. Debido a la importancia de este reflujo en la generación de un perfil de temperatura adecuado para la operación de la torre, estas entradas faltantes fueron adjudicadas según una regresión ajustada con el flujo de gasóleo liviano de salida (FT-214B, Figura 1.1) y con el reflujo de gasóleo al segundo empaque (FT-250, Figura 1.1). La regresión para el reflujo de cima reportó un coeficiente de determinación de 0.91, de acuerdo a la siguiente expresión,

$$F_{RC} = 7823,7 + 1,190 * F_{GL} - 1.744 * F_{RG}$$

Donde, F_{RC} , F_{GL} y F_{RG} corresponden a los flujos del reflujo de cima, gasóleo liviano y reflujo de gasóleo, respectivamente, en bpd. Los estadísticos descriptivos de la base de datos final depurada pueden ser consultados en el anexo 1; los coeficientes de correlación mostrados en la tabla 2 de este anexo muestran una baja colinealidad entre las variables de la base de datos, excepto para los pares de variables PT202 y PI244, PT202 y PI272, PI244 y PI272, FT217 y TI37, PI274 y PI275, TI257 y TI116, TI257 y FI214B, TI257 y FT255, TI116 y FI214B, TI116 y FT221, TI251 y TI47, FT220 y FI214B, FT250 y FI224 y FI207A y FT296 (Anexo 1, tabla 2). Los anteriores pares de variables presentaron coeficientes de correlación de Pearson con valores superiores a 0.65, debido a esto, las variables PT-202, FT-217, PI-275, TI257, FI214B, FT221, TI47, FT-250 y FI207A, fueron omitidas como entradas para el modelo de ANN, según recomendación de literatura (Hilera *et al.*, 2000; Fortuna *et al.*, 2007); la selección de las variables omitidas fue

realizada por su grado de dispersión y/o estabilidad e incertidumbre en la medición *–i.e.* los sensores de temperatura por lo general reportan una mayor estabilidad y una menor incertidumbre que los sensores de flujo—. La omisión anterior redujo el tamaño de la base de datos a 2877 muestras y 48 variables.

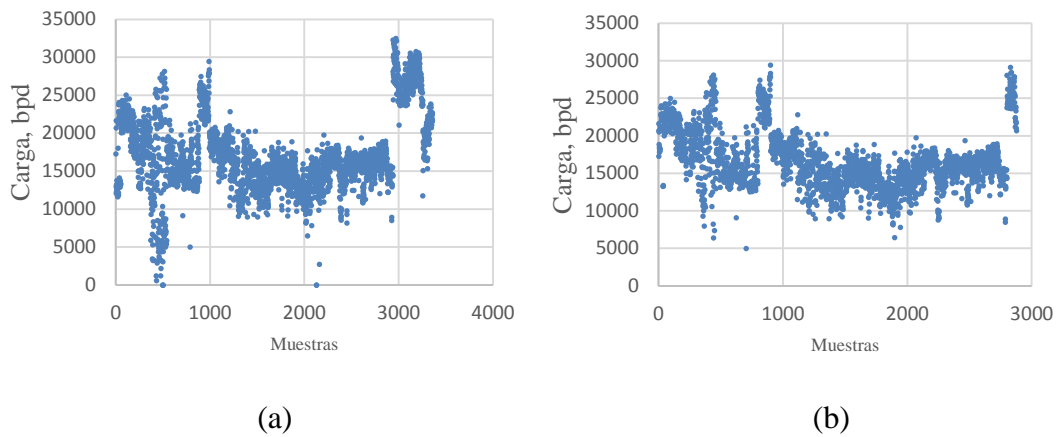


Figura 5. Gráfico de dispersión para la carga a la T-205. (a) Datos en la ventana de operación. (b) Datos depurados.

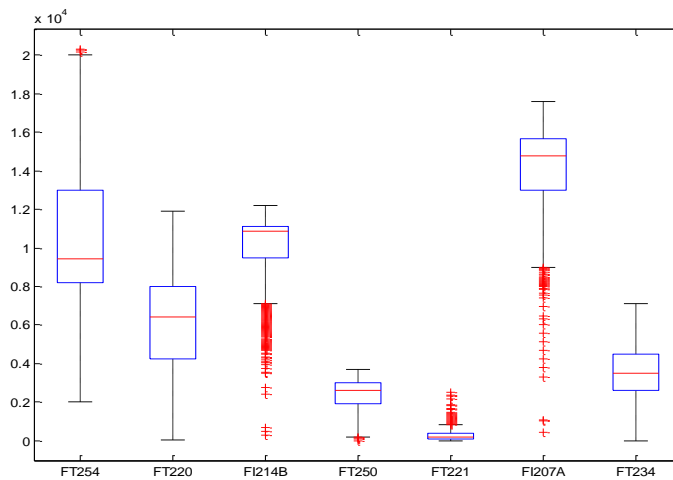


Figura 6. Diagrama *boxplot* para datos de flujo, en bpd, de sensores de la T-205 en la ventana de operación.

La penetración fue ajustada por MLR utilizando la selección del modelo por el algoritmo *backward-forward elimination* con el criterio de información de Akaike como función de selección, según el código disponible en el programa de uso libre denominado R versión 3.4.2. Los coeficientes del modelo final resultante y su desempeño son mostrados en la Figura 3.3a. Según esta figura, el modelo final reproduce el 45.2% de la varianza de la penetración en la base de datos, lo cual es insuficiente para obtener una regresión válida. La Figura 3.3b presenta los puntos influyentes en el modelo, en donde el eje de las ordenadas indica los residuos estudentizados, el eje de la abscisa hace referencia a los valores de la diagonal de la matriz *hat* y el tamaño de los círculos se encuentra en correspondencia con la distancia de Cook (Fox, 2008). Los puntos con residuos estudentizados por fuera del rango $[-2; 2]$, con valores *hat* por encima de 0.02 (puntos *leverage*) y con tamaños de círculos mayores presentan gran influencia en el desempeño de la regresión. Estos puntos (10% del total de los puntos) fueron eliminados en un nuevo ajuste; sin embargo, el coeficiente de determinación mostró una leve mejoría de sólo 0.6 (Figura 3.4). Por otra parte, otros modelos fueron probados utilizando pretratamientos y transformación de variables; sin embargo, el desempeño de la regresión no presentó mejora significativa.

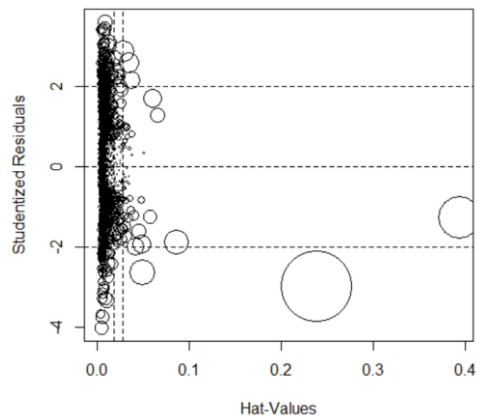
```

Coeficientes:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  1.44132    0.09551  15.091 < 2e-16 ***
FI228        0.12538    0.03173   3.951 7.96e-05 ***
FI250A      -0.02772    0.01325  -2.092 0.03650 *
FI205        0.10040    0.01935   5.189 2.27e-07 ***
FI207        0.14339    0.01810   7.921 3.35e-15 ***
FI211       -0.08383    0.02584  -3.244 0.00119 **
FI216        0.20320    0.03121   6.511 8.82e-11 ***
FI216A     -0.25678    0.02439 -10.529 < 2e-16 ***
FI218       -0.11180    0.01931  -5.789 7.86e-09 ***
FI225       -0.52468    0.04711 -11.138 < 2e-16 ***
FI234        0.07992    0.02437   3.280 0.00105 **
FI254        0.19167    0.01464  13.096 < 2e-16 ***
FI255       -0.09410    0.01743  -5.398 7.31e-08 ***
FI280       -0.05929    0.02780  -2.133 0.03301 *
FI296       -0.10346    0.01593  -6.494 9.84e-11 ***
PI223A      0.03039    0.01401   2.169 0.03018 *

PI244        0.44209    0.07436   5.945 3.10e-09 ***
PI250A      0.38420    0.03966   9.686 < 2e-16 ***
PI272       -0.35564    0.07514  -4.733 2.32e-06 ***
PI280        0.28694    0.02697  10.641 < 2e-16 ***
TI39        -0.29839    0.04317  -6.913 5.84e-12 ***
TI40        -0.03298    0.01605  -2.055 0.04000 *
TI116       0.29633    0.05257   5.637 1.90e-08 ***
TI251       -0.38086    0.10804  -3.525 0.00043 ***
TI253       -0.72596    0.03997 -18.161 < 2e-16 ***
TI203        0.21196    0.03566   5.944 3.12e-09 ***
TI254       -0.05123    0.02212  -2.316 0.02064 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.1353 on 2850 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.4522, Adjusted R-squared:  0.4472
F-statistic: 90.5 on 26 and 2850 DF, p-value: < 2.2e-16
    
```

(a) ANOVA



(b) Gráfico de Influencia

Figura 7. Resultados ajuste de la penetración con el mejor modelo obtenido por MLR utilizando el programa denominado R.

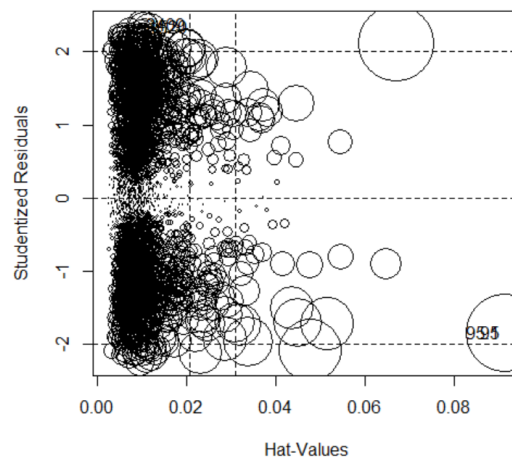
```

Coefficients:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.05808    0.01105  -5.254 1.61e-07 ***
FI228        0.06294    0.01529   4.117 3.97e-05 ***
FI250A      -0.05097    0.01723  -2.958 0.00312 **
FI205        0.11419    0.01534   7.444 1.32e-13 ***
FT207        0.19156    0.02054   9.328 < 2e-16 ***
FT211       -0.06957    0.01321  -5.265 1.52e-07 ***
FT216        0.11970    0.01341   8.926 < 2e-16 ***
FT216A     -0.18823    0.01514 -12.435 < 2e-16 ***
FT218       -0.13956    0.02079  -6.713 2.33e-11 ***
FT225      -0.21377    0.01518 -14.079 < 2e-16 ***
FT234        0.03809    0.01544   2.467 0.01368 *
FT254        0.26587    0.01388  19.155 < 2e-16 ***
FT255      -0.09316    0.01961  -4.750 2.15e-06 ***
FT280      -0.03847    0.01463  -2.630 0.00859 **

FI296       -0.11501    0.01450  -7.930 3.22e-15 ***
PI223A       0.03520    0.01361   2.587 0.00974 **
PI244        0.19289    0.02940   6.560 6.47e-11 ***
PI250A       0.19830    0.01675  11.841 < 2e-16 ***
PI272       -0.17157    0.03070  -5.588 2.54e-08 ***
PI280        0.32082    0.02069  15.504 < 2e-16 ***
TI39        -0.07548    0.01219  -6.193 6.86e-10 ***
TI40        -0.04326    0.01348  -3.209 0.00135 **
TI116       0.20931    0.02372   8.825 < 2e-16 ***
TI251      -0.10967    0.02599  -4.220 2.53e-05 ***
TI253      -0.38066    0.01789 -21.272 < 2e-16 ***
TI203       0.09062    0.01365   6.641 3.79e-11 ***
TI254      -0.05079    0.01199  -4.237 2.34e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.5621 on 2582 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6048, Adjusted R-squared:  0.6008
F-statistic:  152 on 26 and 2582 DF, p-value: < 2.2e-16
    
```

(a) ANOVA



(b) Gráfico de Influencia

Figura 8. Resultados después de la eliminación de datos influyentes en el mejor modelo obtenido para la predicción de la penetración por MLR utilizando el programa denominado R.

Debido al bajo desempeño del modelo de regresión MLR, la viscosidad del fondo de vacío fue incluida para un nuevo proceso de ajuste; las dos propiedades, viscosidad y penetración corresponden a medidas que reflejan la consistencia de materiales bituminosos (Blanco *et al.*, 2001; ASTM D-4402; ASTM D5/D5M-13). La Figura 3.5 presenta la variación de la penetración del cemento asfáltico respecto a su propia viscosidad. Esta viscosidad fue obtenida de los datos históricos de un viscosímetro en línea; actualmente este viscosímetro no se encuentra en operación. El coeficiente de correlación obtenido entre la penetración y la viscosidad corresponde a -0.34, exhibiendo una tenue dependencia; esto puede deberse a los diferentes tiempos de medición entre estas propiedades.

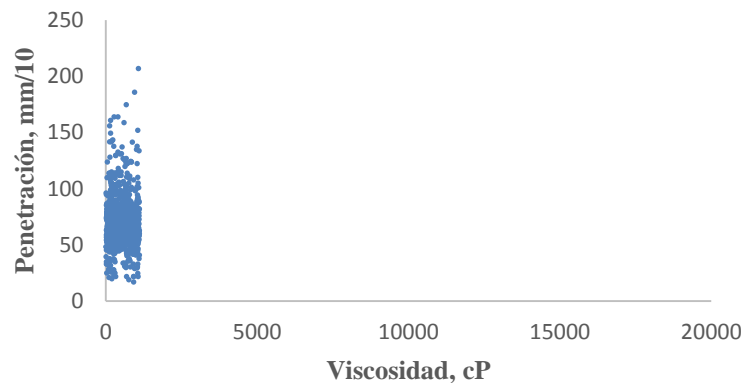


Figura 9. Tendencia de la penetración a 77 °F respecto a la viscosidad a 212 °F del cemento asfáltico generado en la T-205.

La viscosidad normalizada fue incluida en la matriz para el algoritmo *backward-forward elimination* con lo cual se obtuvo el mejor modelo lineal según el criterio de información de Akaike. Sin embargo, el algoritmo descartó a la viscosidad como variable de entrada para el modelo de regresión para la penetración. Lo anterior se encuentra en contradicción con algunos reportes en la literatura que presentan una adecuada correlación entre la penetración y la viscosidad

(ver Mirza & Witzak, 1995; Heukelon, 1973). Adicional a los diferentes tiempos de medición entre la penetración y la viscosidad, otra posible causa del descarte de la viscosidad puede deberse a inconvenientes en el sensor o falta de calibración del mismo.

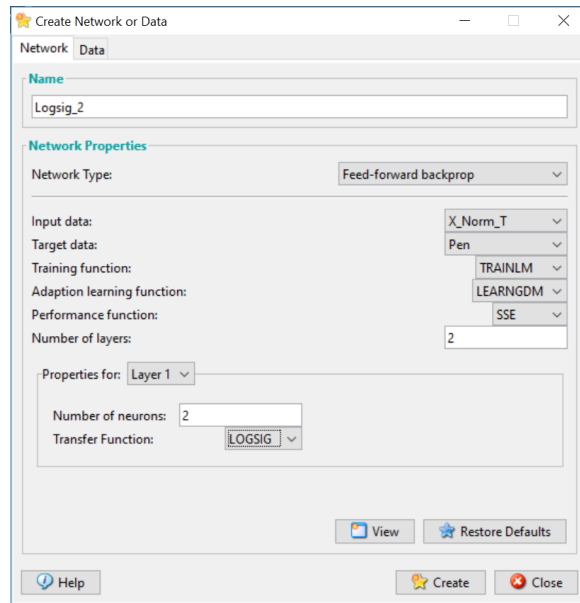
3.2 Entrenamiento de diferentes arquitecturas de ANN

La base de datos fue sometida a la normalización para ajustar las variables al intervalo entre 0 y 1. Asimismo, el 70% de las muestras (2040 muestras) fueron seleccionadas al azar para el proceso de entrenamiento de las diferentes arquitecturas de ANN disponibles en el *nntool* de Matlab versión R2014a. El 15% restante de las muestras totales fueron utilizadas para validaciones de la ANN y el faltante 15% utilizadas para pruebas adicionales.

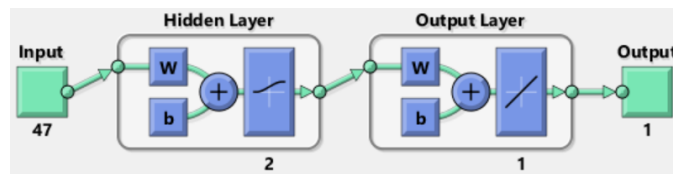
La Figura 3.6a muestra la ventana de creación de la arquitectura de ANN en el *nntool* de Matlab; en esta figura se define la arquitectura *feedforward* con algoritmo de entrenamiento *backpropagation*, la función de entrenamiento según la optimización de Levenberg-Marquardt (TRAINLM), la función de desempeño SSE (*sum of squared errors*), la función de aprendizaje por gradiente descendente (LEARNGDM), el número de capas (1 oculta y de salida), el número de neuronas por capa y la función de transferencia o activación logística sigmoideal (LOGSIG); la capa de salida utiliza la función de activación lineal (PURELIN). La arquitectura de red definida en la Figura 3.6a es ilustrada en la Figura 3.6b y los parámetros de entrenamiento seleccionados para la misma red se muestran en la Figura 3.6c.

Las arquitecturas de red creadas consideraron el aumento del número de neuronas de la capa oculta hasta completar el doble de sus variables de entrada, cumpliendo con la regla *ad hoc* capa oculta-capas de entrada (ver Zepeda *et al.*, 2015). Las redes probadas fueron entrenadas 10 veces,

según lo recomendado por Prechelt, con lo cual se seleccionaron las de mejor desempeño según los valores de MSE y R^2 . En el anexo se presentan los resultados de los entrenamientos de las diferentes redes definiendo un valor objetivo de MSE de $1e-7$. Las Figuras 3.7 y 3.8 presentan la variación en el desempeño de las redes entrenadas (anexo) según el número de neuronas en la capa interna considerando funciones de activación Tansig y Logsig, respectivamente. De estas figuras se sigue que, al aumentar el número de neuronas en la capa oculta, el desempeño de las redes, en general, mejora según la función objetivo MSE. De acuerdo a los valores de R^2 , las redes con la función de activación Tansig presentan mejores desempeños que las redes con Logsig; para 40 neuronas en la capa interna, R^2 reporta los valores de 0.91 y 0.89, para las funciones Tansig y Logsig, respectivamente. La tendencia en el coeficiente de determinación es oscilante presentando su máximo global en un número de neuronas igual a 40 para las dos funciones de activación.



(a) Ventana de creación.



(b) Arquitectura definida.

Training Info		Training Parameters	
showWindow	true	mu	0.001
showCommandLine	false	mu_dec	0.1
show	25	mu_inc	10
epochs	10000	mu_max	10000000000
time	Inf		
goal	1e-6		
min_grad	1e-07		
max_fail	100		

(c) Parámetros de entrenamiento.

Figura 10. Creación de la arquitectura de red en el nntool de Matlab R2014a.

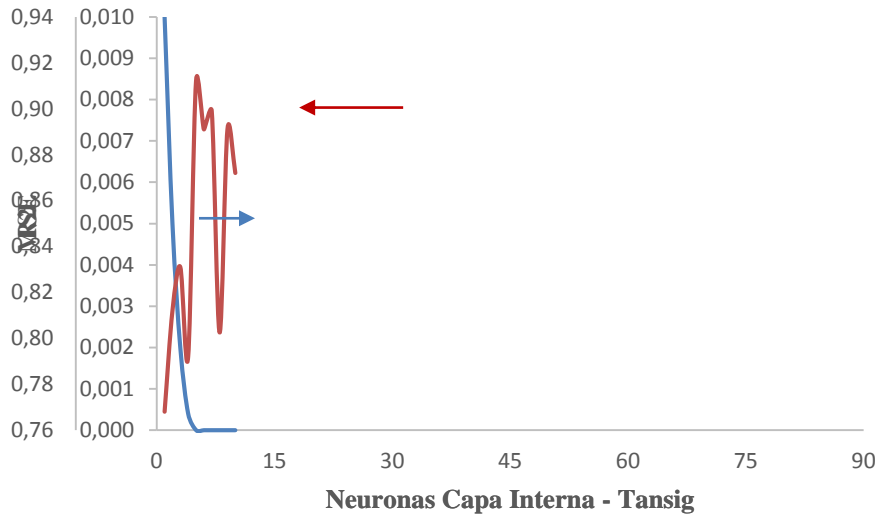


Figura 11. Desempeño ANN según el número de neuronas en la capa interna con función de activación tangente sigmoial (Tansig) en la predicción de la penetración.

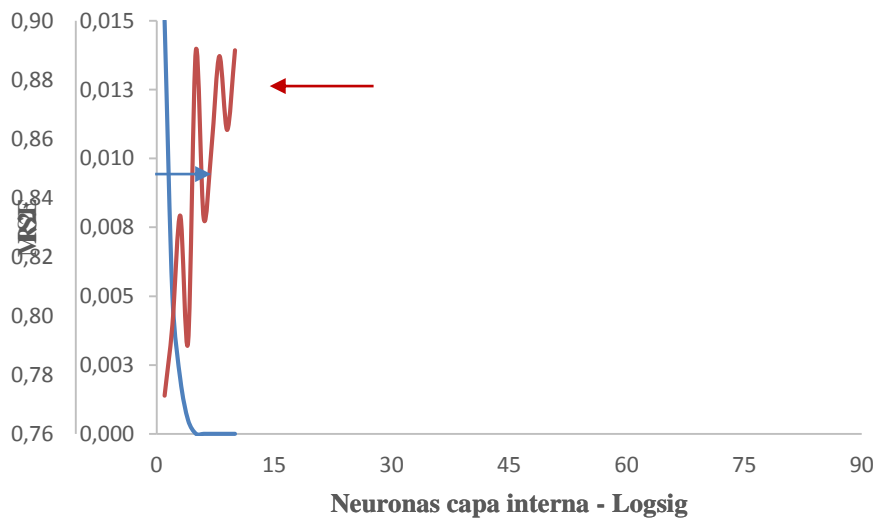


Figura 12. Desempeño ANN según el número de neuronas en la capa interna con función de activación logística sigmoial (Logsig) en la predicción de la penetración.

La red entrenada resultó resiliente a los datos atípicos encontrados basados en los residuales estándar (Figura 3.9). Según los valores de los residuales estándar, 178 residuales (ca.10% de los

datos) reportaron valores fuera del rango [-2; 2]. Estos 178 datos atípicos fueron omitidos del conjunto de datos históricos iniciales. Las redes 47:40:1 Tansig y 47:40:1 Logsig fueron re-entrenadas con el nuevo conjunto de datos sin atípicos –previamente normalizados–, reportando los desempeños mostrados en las Figuras 3.10 y 3.11, respectivamente. Según los desempeños mostrados en estas figuras, las redes presentan un nivel de predicción semejante con los dos conjuntos –i.e. el conjunto de datos totales y el conjunto de datos sin atípicos–. Khamis *et al.*, 2005, reportan que esta resiliencia es característica en arquitecturas de redes entrenadas con un conjunto de datos conteniendo hasta 15% de valores atípicos. Con esta resiliencia, los procesos de entrenamiento siguientes consideran el conjunto total de los datos iniciales.

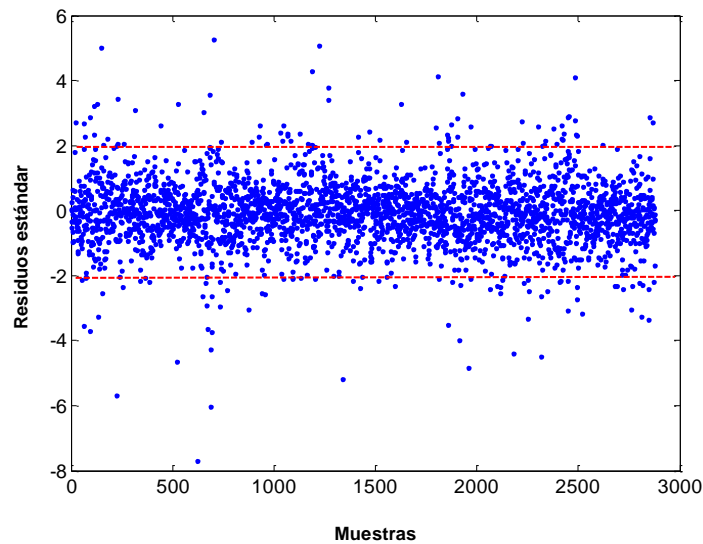
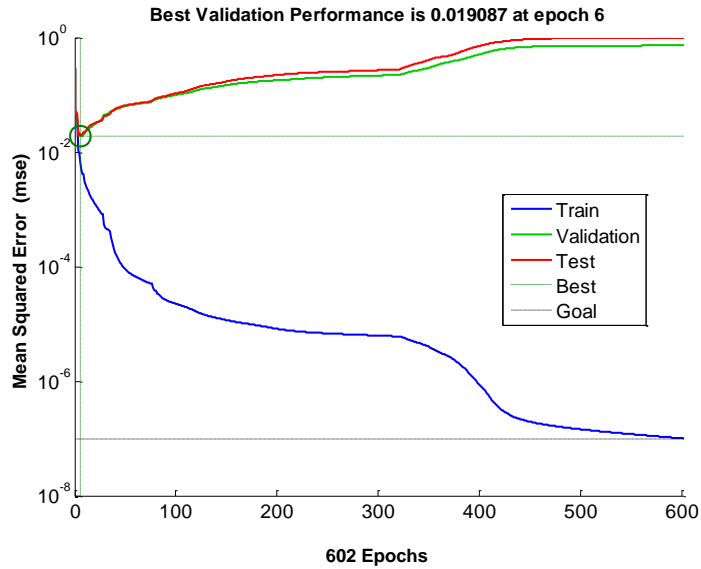
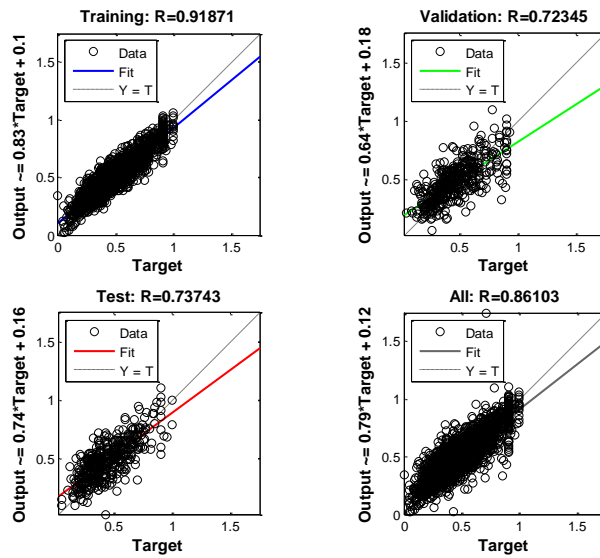


Figura 13. Residuales estándar de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Tansig para la predicción de la penetración

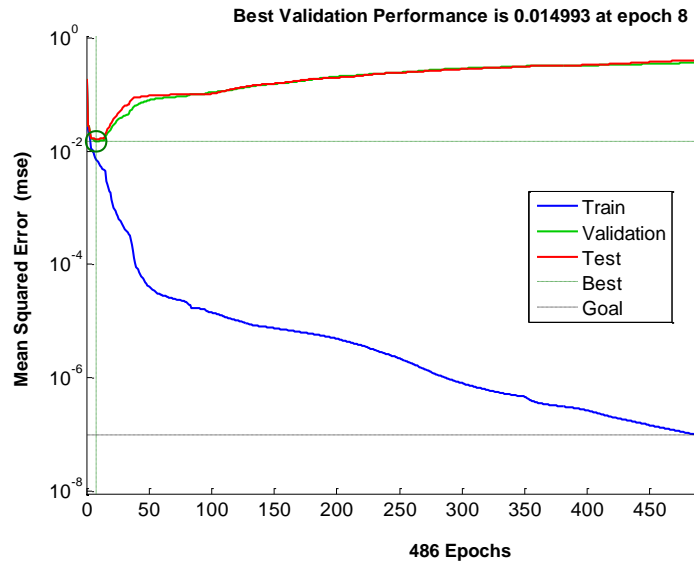


(a) Desempeño de la red según las iteraciones.

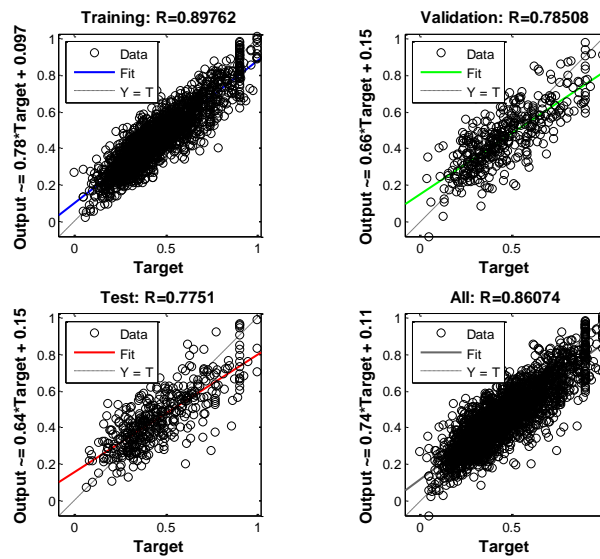


(b) Desempeños de la red en los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y global.

Figura 14. Desempeños de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Tansig omitiendo los datos atípicos en la predicción de la penetración.



(a) Desempeño de la red según las iteraciones.



(b) Desempeños de la red en los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y global.

Figura 15. Desempeños de la arquitectura de red 47:40:1 con función de activación Logsig omitiendo los datos atípicos en la predicción de la penetración.

3.3 Validación de las redes y selección del modelo

Las 837 muestras sin utilizar (30%) fueron consideradas para realizar las validaciones y las pruebas adicionales con las redes entrenadas. Los resultados de las validaciones y las pruebas adicionales (anexo y Figuras 3.10a y 3.11a) sugieren que todas las redes entrenadas exhiben un único mínimo en MSE durante el proceso –a pocas épocas de iniciado el entrenamiento–. El conjunto de validación es utilizado para evaluar el desempeño de la red entrenada (Prechelt, 1994); el desempeño es evaluado en el punto mínimo de la curva de validación MSE vs épocas. La Tabla 3.1 y la Figura 3.12 presentan la variación en el MSE en el punto mínimo de validación para 10 procesos de entrenamiento, respecto al número de neuronas de la capa interna para las redes con las dos funciones de activación. Según la Tabla 3.1 y la Figura 3.12, el menor valor de MSE promedio se reporta para 60 neuronas con la función de activación tangente sigmoïdal (Tansig), mientras que utilizando la función de activación logística sigmoïdal (Logsig) el menor valor de MSE se obtiene con 80 neuronas; este número de neuronas se ajusta a la regla *ad hoc* capa oculta-capla entrada (ver Zepeda *et al.*, 2015). En términos generales, los valores de MSE para las etapas de validación y prueba son similares (ver anexo), indicando que las redes carecen de sobreajustes.

Tabla 3.

Variación MSE en el punto mínimo de validación respecto al número de neuronas en la capa oculta.

Tansig	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Promedio	Desv. Est.
5	1.0E-02	1.3E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	7.0E-04
10	1.1E-02	1.2E-02	1.1E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.1E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	4.2E-04
20	1.3E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	3.3E-04
30	1.1E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	6.0E-04
40	9.6E-03	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	8.0E-04
50	1.6E-02	9.8E-03	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.8E-03

Tansig	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Promedio	Desv. Est.
60	5.5E-03	9.6E-03	9.7E-03	6.9E-03	8.2E-03	7.8E-03	8.0E-03	8.1E-03	8.1E-03	8.0E-03	8.0E-03	1.2E-03
70	1.3E-02	1.4E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.2E-02	1.3E-02	6.2E-04
80	1.5E-02	9.9E-03	1.0E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.3E-03
90	1.3E-02	8.0E-03	9.0E-03	9.0E-03	8.3E-03	8.7E-03	8.6E-03	9.0E-03	8.8E-03	8.6E-03	9.1E-03	1.3E-03
Logsig	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Promedio	Desv. Est.
5	1.6E-01	1.5E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.4E-02	1.3E-02	1.4E-02	2.8E-02	4.5E-02
10	1.5E-02	1.4E-02	1.5E-02	1.4E-02	1.5E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	2.6E-04
20	1.4E-02	1.5E-02	1.5E-02	1.5E-02	1.5E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.4E-02	1.5E-02	1.5E-02	1.5E-02	4.6E-04
30	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.2E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	3.5E-04
40	1.3E-02	1.2E-02	1.4E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.4E-02	1.3E-02	1.4E-02	1.3E-02	1.4E-02	1.3E-02	4.5E-04
50	1.2E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.3E-02	4.4E-04
60	9.8E-03	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.1E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.2E-02	7.7E-04
70	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.3E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	1.2E-02	3.2E-04
80	7.9E-03	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	1.0E-02	1.0E-02	8.9E-04
90	7.8E-03	1.0E-02	1.0E-02	1.1E-02	1.0E-02	9.8E-03	9.9E-03	1.0E-02	1.1E-02	1.1E-02	1.0E-02	8.7E-04

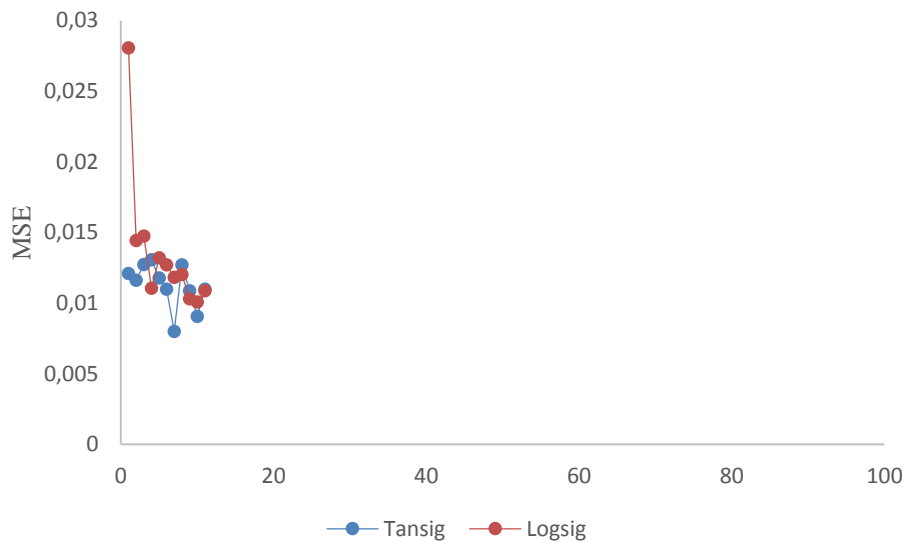


Figura 16. Variación del MSE promedio –10 entrenamientos– en el punto mínimo de validación respecto al incremento en el número de neuronas en la capa interna.

Los coeficientes de determinación para los procesos de ajuste de las redes 47:60:1 Tansig y 47:80:1 Logsig en las diferentes etapas ajustadas hasta el punto mínimo de validación, son mostrados en las Figuras 3.13 y 3.14, respectivamente. Según estas figuras, el desempeño global

de las etapas para la red 47:60:1 Tansig ($R^2=0.875$) excede al desempeño global exhibido por la red 47:80:1 Logsig ($R^2=0.826$). Asimismo, en las Figuras 3.15 y 3.16 se presentan los histogramas de los residuales promediados obtenidos con los entrenamientos de las redes 47:60:1 Tansig y 47:80:1 Logsig, respectivamente. Según estos histogramas, las distribuciones de los residuales promediados corresponden a la forma de campana de Gauss con su centro en el valor cero, mostrando un sesgo nulo en las predicciones realizadas por las redes. También, la desviación estándar de los residuales presenta menor valor para la red 47:60:1 Tansig que para la red 47:80:1 Logsig, comprobando el mejor desempeño de la penetración con la primer arquitectura de red.

Adicionalmente, la viscosidad normalizada del fondo de vacío de la T-205 fue incluida dentro de las variables independientes para las arquitecturas de red trabajadas. Las Figuras 3.17a y 3.17b muestran los desempeños de las redes entrenadas hasta el punto mínimo de MSE para el conjunto de validación, incluyendo la viscosidad como variable independiente. Según estas figuras, la inclusión de la viscosidad disminuye el desempeño para la red con función de activación Tansig, mientras que mejora el desempeño para la red con función de activación Logsig; la mejora en el desempeño de la red Logsig con la inclusión de la viscosidad, no sobrepasa el desempeño de la red Tansig entrenada sin considerar esta propiedad. También, las Figuras 3.18a y 3.18b presentan los histogramas de los errores para las mejores redes entrenadas incluyendo la viscosidad. Con la comparación con las Figuras 3.15 y 3.16 es posible apreciar la mayor desviación estándar de los errores incluyendo la medición de la viscosidad realizada por el sensor de la línea de fondo de la T-205. El resultado de los desempeños de las redes con y sin considerar la viscosidad se encuentra en concordancia con lo obtenido utilizando el método de regresión lineal (sección 3.1). Lo anterior sugiere una revisión del valor sensado o una revisión del hardware del medidor de viscosidad.

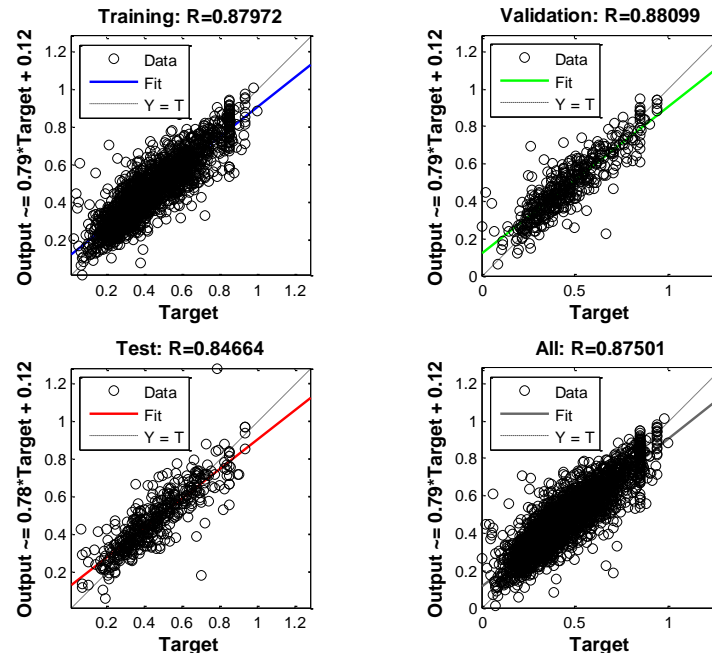


Figura 17. Desempeño de las regresiones de la penetración con la arquitectura 47:60:1 Tansig para los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y proceso global.

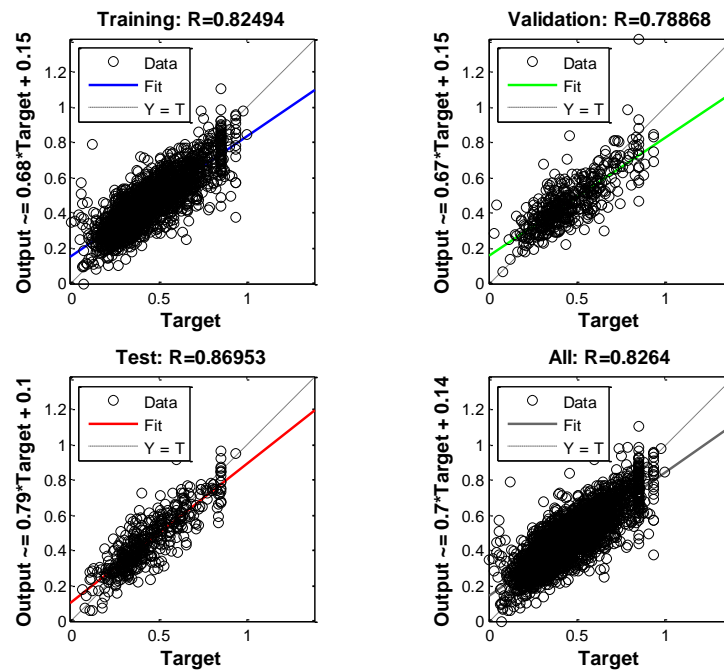


Figura 18. Desempeño de las regresiones de la penetración con la arquitectura 47:80:1 Logsig para los conjuntos de entrenamiento, validación, prueba y proceso global.

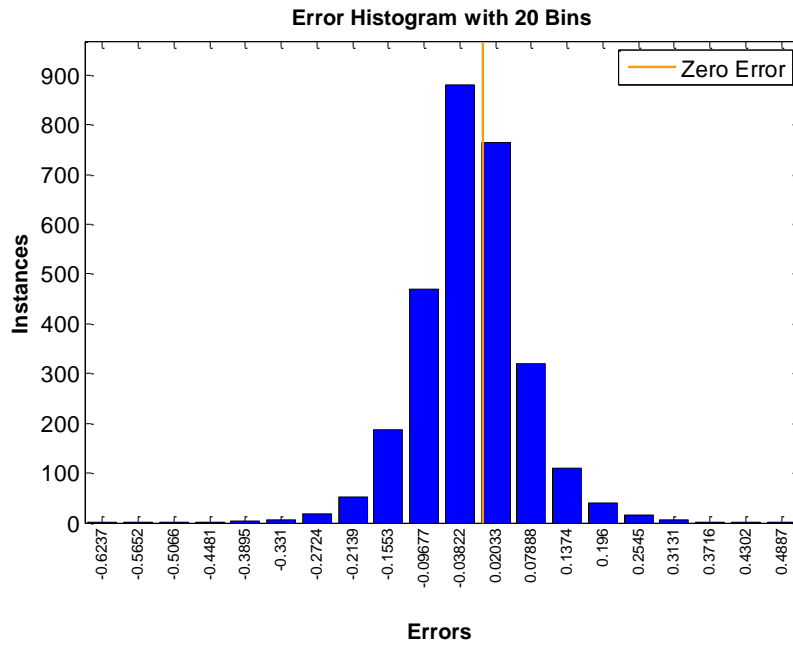


Figura 19. Histograma de los errores con las regresiones arquitectura 47:60:1 Tansig.

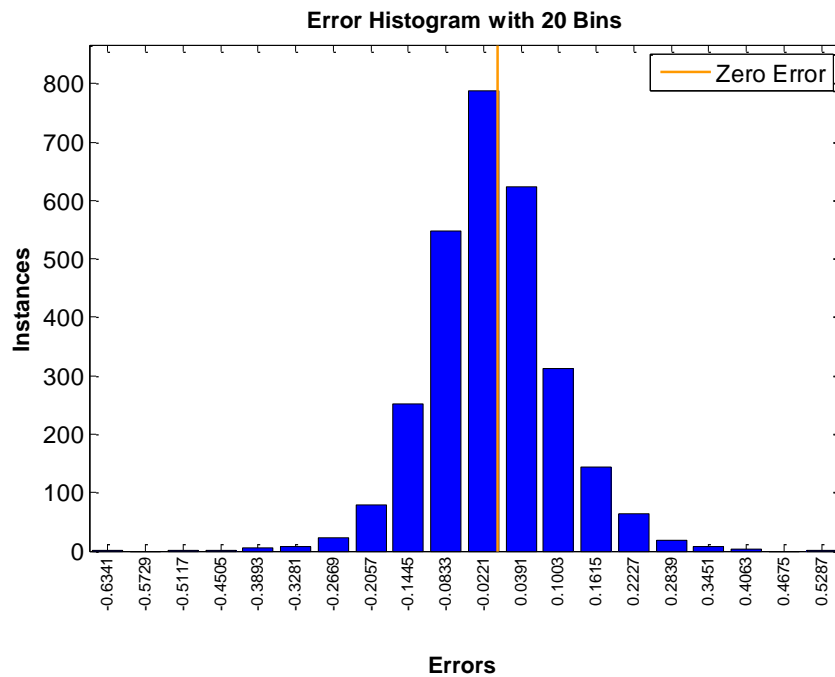
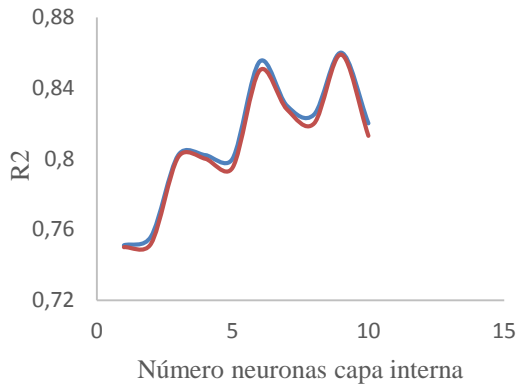
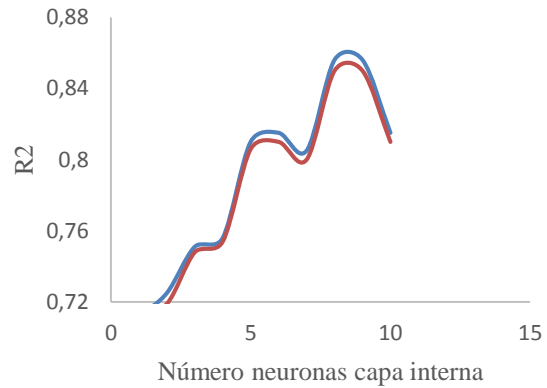


Figura 20. Histograma de los errores con las regresiones arquitectura 47:80:1 Logsig.

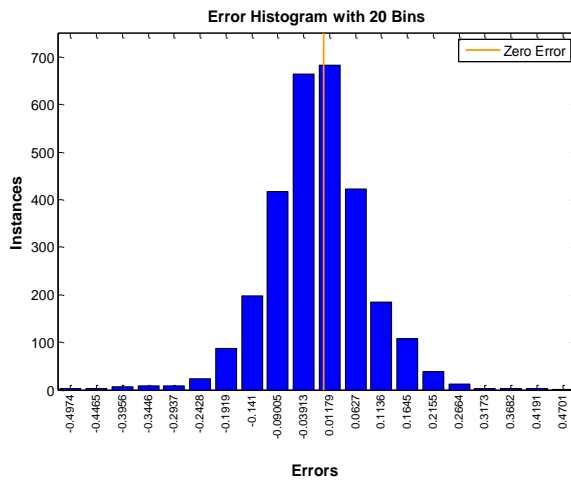


(a) Tansig

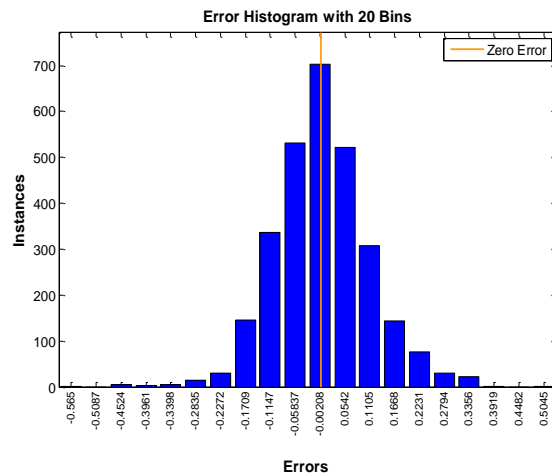


(b) Logsig

Figura 21. Impacto de la inclusión de la viscosidad del fondo en la variación del coeficiente de determinación con el número de neuronas en la capa interna.



(a) 48:50:1 - Tansig



(b) 48:70:1 - Logsig

Figura 22. Errores obtenidos con la inclusión de la viscosidad del fondo.

3.3 Influencia variables en la ANN

Seleccionado el mejor modelo, un análisis de sensibilidad según el procedimiento *input perturbation* es aplicado para determinar la influencia de cada variable en el modelo ANN. La

Figura 3.16 presenta el cambio en el coeficiente de determinación según el procedimiento *input perturbation* para cada una de las 47 variables, así como la referencia de comparación (*i.e.* el valor de R^2 promedio para la red 47:60:1 Tansig, Figura 3.12); la variación en el MSE mostrado en la Figura 3.16 (línea roja) corresponde al punto mínimo reportado por la validación durante el procedimiento de *input perturbation*. Según la Figura 3.16, las condiciones operacionales de la T-205 afectan en gran medida la predicción de la penetración según la red 47:60:1 Tansig; las variables que presentan la mayor influencia corresponden a la FT255 y la FT261A, las cuales corresponden al flujo del reflujo inferior de la T-205 y al vapor de despojo, respectivamente.

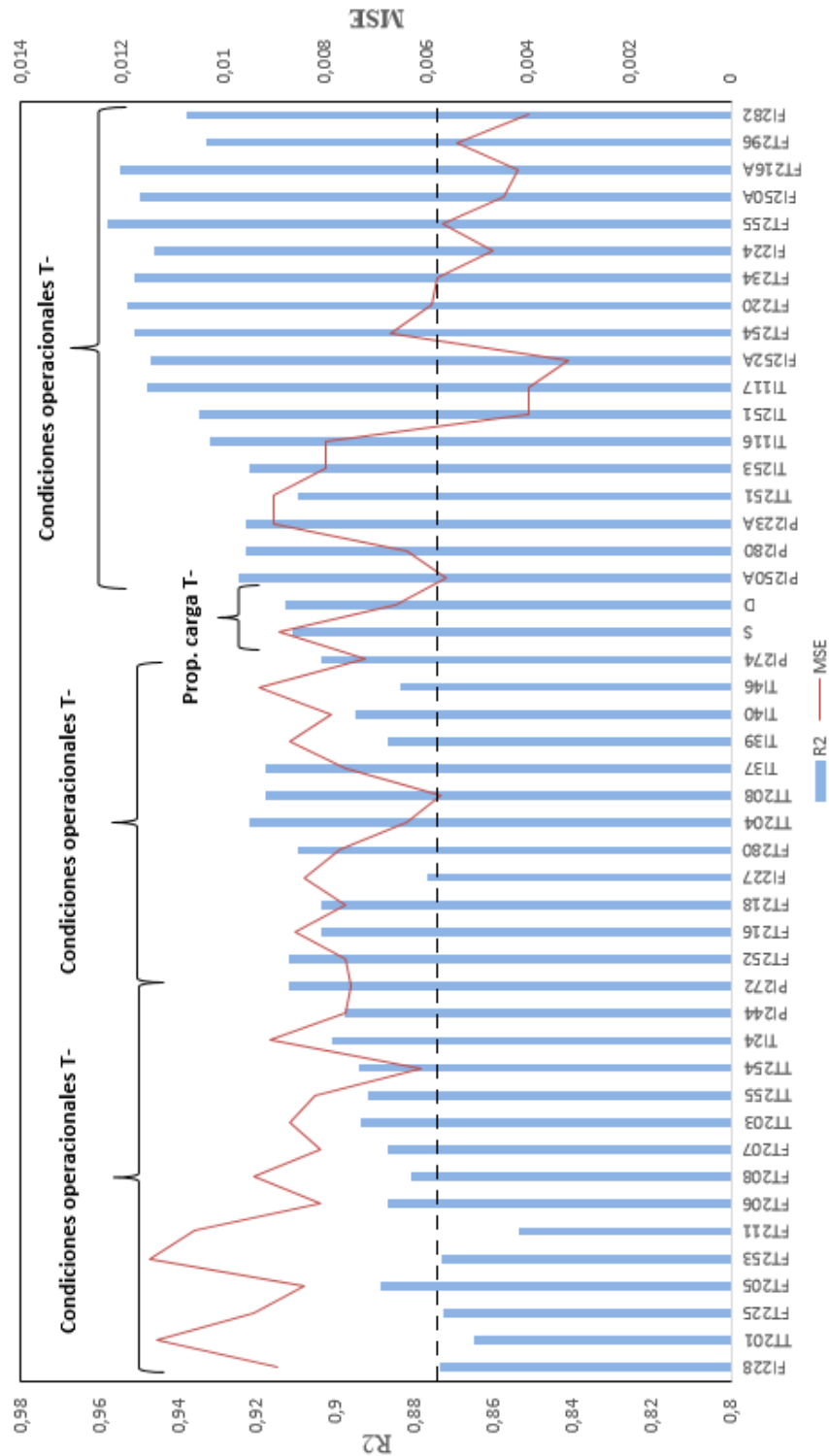


Figura 23. Resultados del análisis de sensibilidad sobre la red 47:60:1 Tansig según el procedimiento *input perturbation*. MSE línea roja; línea segmentada negra representa el valor de R^2 promedio reportado por el entrenamiento de la red 47:60:1 Tansig.

4. Conclusiones

El protocolo de entrenamiento de las redes aplicado en el presente documento constituye una herramienta de utilidad para la predicción semicuantitativa de la penetración del cemento asfáltico producido en la torre T-205 de la unidad 200 de la GRB; el protocolo requiere 47 variables predictoras referentes a los sensores de variables de proceso de las torres T-201, T-204 y T-205. Las redes entrenadas exhiben valores de coeficientes de determinación de 0.875 con la arquitectura 47:60:1 utilizando funciones de activación tangente sigmoideal (Tansig) y 0.826 con la arquitectura 47:80:1 utilizando la función de activación logística sigmoideal (Logsig). Asimismo, las redes muestran resiliencia respecto a la presencia de datos atípicos en las variables predictoras. También, el procedimiento *input perturbation* aplicado a la red 47:60:1 Tansig mostró que las variables con mayor influencia en la predicción corresponden al flujo del reflujo inferior de la T-205 y al flujo del vapor de despojo.

Por otra parte, la inclusión de la viscosidad como variable de entrada en la ANN reportada por la línea de fondo de la T-205 dentro de las variables de predicción, disminuye el desempeño de las redes neuronales validadas. El bajo aporte de la viscosidad fue también obtenido en el modelo de regresión lineal múltiple. Debido a la aparente contradicción con reportes de literatura, en donde se presentan regresiones entre la viscosidad y la penetración de asfaltos, una verificación de los datos medidos y del hardware del sensor es requerida para corroborar los resultados obtenidos en el presente trabajo final de aplicación.

5. Recomendaciones

Aplicar el protocolo definido en el presente documento para el entrenamiento de redes predictoras de propiedades en otros flujos de asfalto de las unidades de destilación de la GRB.

Incluir valores de propiedades de la carga de crudos como variables de entrada adicionales para determinar si es posible incrementar la capacidad de predicción de la penetración por parte las redes neuronales.

Referencias Bibliográficas

Asphentech . (2008). Generalidades Control Avanzado U-200.

Blanco, M., MasPOCH, S., Villarroya, I., Peralta, X., González, J., & Torres, J. (2001). Determination of physical properties of bitumens by use of near-infrared spectroscopy with neural networks. Joint modelling of linear and non-linear parameters. *Analyst*, 126, 378–382.

Fortuna, L., Grazioni, S., Rizzo, A., & Xibilia, M. (2007). Soft sensor for Monitoring and control of Industrial Proceses.

Fox, J. (2008). *Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models*. Sage Publications. Second Edition.

Gevrey, M., Dimopoulos, L., Lek, S. (2003). Review and comparison of methods to study to contribution of variables in artificial neural network models. *Ecological modelling*, 160, 349-264.

Heukelon, W. (1973). An improved method of characterizing asphaltic bitumens with the aid of their mechanical properties. *Proc Assoc Asphalt Paving Technol*, 42, 67–98.

Hilera Gonzáles, J. R., & Martinez HeANNndo, V. J. (2000). *Redes Neuronales Artificiales Fundamentos, Modelos y Aplicaciones*. Madrid España: ALFAOMEGA GRUPO EDITOR, S.A.

International, ASTM. (2013, Published February Originally). Standar Test Method for Penetration of Bituminous Materials. Designation: D5/D5M-13. Current edition approved Jan. 1, 2013., New York, NY 10036.

International: ASTM. (2011). Metodo ASTM D-4402. Metodo de Ensayo Estandar para determinar la viscosidad de asfaltos a Temperaturas Elevadas Usando un Viscosimetro Rotacional.

International:ASTM D5-06. (2011). Método de Ensayo Estandar para Penetración de Materiales Bituminosos. Método de Ensayo Estandar para Penetración de Materiales Bituminosos ASTM D05-06, soporte técnico Coordinación de Inspeccion de Calidad GRB.

Khamis, A., Ismail, Z., Haron, K., Mohammed, A.T. (2005). The Effects of Outlier Data on Neural Network Performance. *J. Applied Science*, 5, 1394-1398.

Mirza, M.W. and Witczak, M.W. (1995). Development of a global aging system for short and long term aging of asphalt cements. *Proc Assoc Asphalt Paving Technol*, 64, 393–430.

Olden, J., Joy, M., Death, R. (2004). An accurate comparison of methods for quantifying variable importance in artificial neural networks using simulated data. *Ecological modelling*, 178, 389-97.

Orrego, J. A., Guzmán, A., Molina, D., Mejía, E. (2014). Mid-infrared Attenuated Total Reflectance (MIR-ATR) Predictive Models for Asphaltene contents in Vacuum Residua: Asphaltene structure-Functionality Correlations Based on Partial Least-Squares Regression (PLS-R). Bucaramanga, Colombia.

Prechelt, L. (1994). Proben1 – *A set of neural network benchmark problems and benchmarking rules*. Technical Report 21/94, Universität Karlsruhe, Germany.

Riazi, M. (2005.). Characterization and Properties of Petroleum Fractions. ASTM international.

Robert, R. (2002). Neural virtual sensor for the inferencial prediction of product quality from process variables. Universitat Rovira i Virgili.

Watkins, R. (1979). Petroleum Refinery Distillation (Segunda edición ed.). Gulf publishing Co.

Wauquier, J. (2004). El Refino Del Petróleo: Petróleo crudo, Productos Petroliferos, Esquemas de Fabricación. España: Ediciones Díaz de Santos.

Yau, C. (2015). *R Tutorial with Bayesian Statistics Using OpenBugs*. Copyright by Chi Yau, USA.

Zepeda, J.A., Aguilar, A.E., Hernández, S., Salgado, M.C. (2015). Metodología para determinar la topología, patrones de parámetros eléctricos y entrenamiento de una Red Neuronal Artificial para un control inteligente. *Revista Tecnología Digital*, 5, 103-113.