RNA PARA PREDECIR MICUM DEL COQUE A PARTIR DE LA COMPOSICIÓN MACERAL DEL CARBÓN

Marco A. Ardila B. [1*], *Pilar Triviño R.* [1], *Jaime E. Torres S.* [2]

- ✓ Este artículo forma parte del "Volumen Suplemento" **S1** de *la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales* (*RLMM*). Los suplementos de la RLMM son números especiales de la revista dedicados a publicar memorias de congresos.
- ✓ Este suplemento constituye las memorias del congreso "*X Iberoamericano de Metalurgia y Materiales (X IBEROMET)*" celebrado en Cartagena, Colombia, del 13 al 17 de Octubre de 2008.
- ✓ La selección y arbitraje de los trabajos que aparecen en este suplemento fue responsabilidad del Comité Organizador del *X IBEROMET*, quien nombró una comisión *ad-hoc* para este fin (véase editorial de este suplemento).
- ✓ La *RLMM* no sometió estos artículos al proceso regular de arbitraje que utiliza la revista para los números regulares de la misma.
- ✓ Se recomendó el uso de las "Instrucciones para Autores" establecidas por la *RLMM* para la elaboración de los artículos. No obstante, la revisión principal del formato de los artículos que aparecen en este suplemento fue responsabilidad del Comité Organizador del *X IBEROMET*.

Suplemento de la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales 2009; **S1** (3): 1355-1365

RNA PARA PREDECIR MICUM DEL COQUE A PARTIR DE LA COMPOSICIÓN MACERAL DEL CARBÓN

Marco A. Ardila B. [1*], *Pilar Triviño R.* [1], *Jaime E. Torres S.* [2]

1: Grupo de Investigación en Carbones y Carboquímica, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja
2: Grupo de Investigación en Materiales Procesos y Diseño, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

* *E-mail: marcoardilab@yahoo.com*

Trabajos presentados en el X CONGRESO IBEROAMERICANO DE METALURGIA Y MATERIALES IBEROMET
Cartagena de Indias (Colombia), 13 al 17 de Octubre de 2008
Selección de trabajos a cargo de los organizadores del evento

Publicado On-Line el 29-Jul-2009
Disponible en: *www.polimeros.labb.usb.ve/RLMM/home.html*

Resumen

En este proyecto se implementa una Red Neuronal Artificial (RNA) de tipo virtual, en matlab, para predecir la resistencia mecánica en frío, del coque siderúrgico, a partir de la composición maceral de los carbones usados en el proceso. La delimitación geográfica comprende el área extendida entre los municipios de Zipaquirá (Cundinamarca) y Samacá (Boyacá), que geológicamente corresponde a la formación Guaduas, sinclinal Checua Lenguazaque. El estudio de correlación de mantos del sinclinal, permite establecer un comportamiento homólogo entre carbones de diferentes sectores en el área, y realizar las operaciones de muestreo y caracterización a nivel de composición maceral de carbones unitarios, y de análisis inmediatos, tanto de carbones unitarios como de mezclas de carbón. Industrialmente se evalúa la resistencia mecánica del coque, bajo procedimientos de la norma ISO 556, que expresa los resultados en términos de Micum 40. Con esta información generada a partir de producción industrial, se crea la base de datos para entrenar y validar la de la red. Se probaron modelos de RNA como: Backpropagation (BP), Probabilistic Neural Network (PNN) y Radial Basis Function (RBF); los resultados descartan la aplicabilidad de los modelos BP y PNN, por no presentar convergencia.

Palabras Claves: *Red Neuronal Artificial RBF, Predicción Micum, Calidad Coque, Petrografía del Carbón.*

Abstract

This project implements a virtual Artificial Neural Network (ANN) in Matlab, to predict the coke's mechanical strength, from the maceral composition of coals that are used in the carbonization process. The geographical demarcation includes the area between Zipaquirá (Cundinamarca) and Samacá (Boyacá); this area corresponds to the Guaduas geological formation, in the Checua Lenguazaque synclinal. The correlation study of the synclinal robes, shows a counterpart behavior between coals of different sectors in the same area, and performs operations of sampling and coal's maceral composition characterization, and immediate analysis of both, coal single and coals blends. The industry evaluates the coke's mechanical strength, under standard procedures of ISO 556; these results are expressed in the Micum´s 40 terms. With this information generated from industrial production, the database is created to train and validate the network. The ANN´s models tested: Backpropagation (BP), Probabilistic Neural Network (PNN) and Radial Basis Function (RBF); the results exclude the applicability of models BP and PNN, they don't submit convergence. Hence, the RBF is selected.

Keywords*: RBF Artificial Neural Network, Micum´s prediction, Coke´s quality, Coal's petrography.*

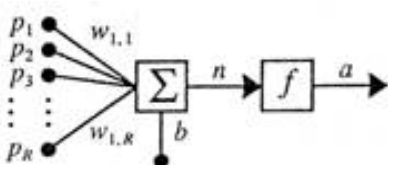
1. INTRODUCCION

1.1 Redes Neuronales Artificiales (RNA)

Forman parte de los desarrollos tecnológicos de la Inteligencia Artificial, se aplican entre otros campos, a predicción, control de procesos y clasificación. Están compuestas por unidades fundamentales de procesamiento de información llamadas neuronas (figura 1). En un modelo neuronal se identifican tres elementos básicos: la *Sinapsis o vínculos de conexión*, que definen el peso de la interacción entre neuronas; el *Sumador* que opera como un combinador lineal de las señales de entrada, los pesos y las sinapsis de la neurona, y una *función de activación* para limitar la amplitud de la salida de la neurona, que típicamente puede estar comprendida en intervalos cerrados [0,1] o [-1,1]. Haykin [1].

Una RNA se define como un *sistema de procesamiento paralelo*, donde la información es tratada en las neuronas, de forma independiente y

simultánea; con *memoria distribuida*, para repartir la información por las diferentes sinapsis de la red y además, con *capacidad de adaptabilidad* al entorno



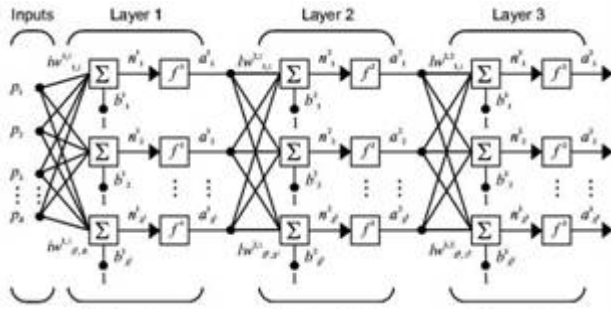
Donde:

P	Datos de entrada
W	Pesos sinápticos
b	Umbral de activación
n	Salida del sumador
f	Función de transferencia
a	Salida o respuesta de la neurona

Figura 1. Modelo estándar de Neurona artificial de varias entradas. (fuente: Hagan [2]).

modificando las sinapsis y aprendiendo de la experiencia para generalizar conceptos a partir de casos particulares. La arquitectura está definida por las capas y la estructura o patrón de conexiones entre las neuronas (topología). Los nodos son las neuronas y las conexiones son las sinapsis. Las conexiones sinápticas son direccionales; es decir, que la información fluye desde la neurona presináptica a la postsináptica.

Las capas según la función y ubicación en la red pueden ser: Capa *de entrada o sensoriales*, sus neuronas reciben los datos o señales externas; *Capa de salida*, está compuesta por las neuronas que emiten los datos o señal de respuesta de la red, y, *Capa oculta*, puede ser más de una y se caracterizan por no tener conexión directa con el entorno. La figura 2 muestra la representación gráfica de una RNA de tres capas con tres neuronas en cada capa.



Donde:

Layer 1 Capa 1 con entradas (inputs) p.
Layer 2 Capa 2 o capa oculta
Layer 3 Capa 3 o capa de salida

Figura 2. Red Neuronal Artificial Multicapa. (Fuente: Hagan [2]).

Las RNA en general tienen dos modos de operación: *Modo de aprendizaje o entrenamiento*; realiza procesos de cómputo aprendido a partir de una serie de ejemplos utilizados como patrones de aprendizaje. *Modo de recuerdo o ejecución*; el sistema ha sido entrenado, el aprendizaje "se desconecta", quedando fijos los pesos y la estructura, lo que implica que la RNA está lista para procesar datos. Martin [3].

1.2 Carbón

Es una roca sedimentaria combustible de origen orgánico compuesto principalmente por escombros de plantas, alterados y consolidados químicamente. Norma ASTM D-121 [4], que dan origen a un gran número de microconstituyentes orgánicos llamados Macerales y otras cantidades menores de sustancias inorgánicas minerales. Los macerales conforman grupos (Tabla 1) con propiedades físicas y químicas específicas, que determinan el comportamiento del carbón. La petrografía del carbón estudia micro y microscópicamente la composición maceral del carbón, sus propiedades, su origen y los subsecuentes cambios originados por su historia geológica. ASTM D-121 [4].

Tabla 1. Grupos de macerales (Fuente Speight [5]).

Grupo	*Macerales*
VITRINITA	Telinita, Colinita, Vitrodetrinita.
LIPTINITA (Exinita)	Esporinita, Cutinita, Resinita, Fluorinita, Suberinita, Bituminita, Alginita, Exudatinita, Liptodetrinita.
INERTINITA	Fusinita, Semifusinita, Inertodetrinita, Macrinita, Esclerotinita, Micrinita
MATERIA MINERAL	Sulfuros, óxidos, etc.

La norma ASTM D-388 clasifica los carbones por rango, de acuerdo con el grado de evolución, definido específicamente por un cambio de las propiedades fisicoquímicas, en orden descendente, así: antracitas, bituminosos, subituminosos y lignitos. Norma ASTM D 388 [6]. Las propiedades fisicoquímicas del carbón, están determinadas por: humedad, cenizas, materia volátil, carbono fijo, índice de hinchamiento, dilatometría, plastometría y composición elemental (C, O, N, H, S).

1.3 Coque

Se define como el producto de la destilación del carbón coquizable a altas temperaturas y se lleva a cabo en tres pasos: Un primer fraccionamiento a

temperaturas por debajo de los 700 ºC donde se descompone en subproductos como agua, óxidos del carbón, sulfuro de hidrógeno, compuestos hidroaromáticos, parafinas, oleofinas, fenoles y compuestos nitrogenados. En un segundo paso, se presentan reacciones térmicas secundarias; por encima de 700 ºC se presenta una gran evolución del hidrógeno y la formación de hidrocarburos y metano. La descomposición de compuestos complejos con altos contenidos de hidrógeno produce amoniaco, cianuro de hidrógeno, bases de piridina y nitrógeno. Finalmente, en un tercer paso, se lleva a cabo la formación del coque por la remoción progresiva de hidrógeno. Durante la carbonización, un 20 a 35% en peso de la carga de carbón evoluciona como una mezcla de gases y vapores, que pueden producir cantidades variables de coque para alto horno, finos de coque, gas de coque, Alquitrán, Sulfato de Amonio y Aceites ligeros. A una presión de 760 mmHg. y 15.5 ºC, los gases contenidos en el gas de coque con H_2, CH_4, C_2H_6, CO, CO_2, gases iluminantes los cuales son esencialmente hidrocarburos insaturados tales como C2H8 y C2H2. Otros gases presentes son el H_2S, NH_3, O_2 y N_2 . Diaz [7].

1.3.1 Resistencia mecánica del coque.

Un coque siderúrgico es de mejor calidad, en función de la resistencia mecánica en frío, cuanto mayor sea el nivel de esfuerzos mecánicos que soporta, sin degradarse. Cuando se somete el coque a una prueba de impacto y fricción (vueltas dentro de un tambor) se fragmenta, constituyendo mínimo dos familias granulométricas distintas; la dimensión media de los trozos disminuye, muy rápidamente al principio y después, paulatinamente muy poco. Se puede entonces diferenciar dos fases en la degradación del coque: Una, que corresponde a la abertura de las fisuras preexistentes, y otra de abrasión pura, en que la dimensión de los trozos disminuyen en menor proporción, por efecto de erosión superficial. Sirgado [8]. Esta prueba corresponde en la Norma Internacional ISO 556 al procedimiento para determinación de resistencia mecánica del coque (en tamaños mayores a 20 mm.). Norma ISO 556 [9].

1.3.2 Predicción de la resistencia mecánica del coque.

El coque tiene funciones fundamentales en el alto horno, que lo hacen prácticamente insustituible: Como combustible, suministrando el calor necesario para que se produzcan las reacciones endotérmicas involucradas en el proceso de reducción, la fusión del arrabio y de la escoria; como productor y regenerador de gases, el coque reacciona con el oxigeno, el agua y el dióxido de carbono, produciendo los gases reductores, que intervienen en la reducción directa e indirecta; como soporte estructural, forma un lecho permeable a gases ascendentes, y a líquidos descendentes en contracorriente. Este hecho tiene importancia capital, sobre todo en la parte inferior del horno, donde el coque es el único material que se mantiene sólido y, por tanto, es el responsable de formar las vías de paso de los fluidos circulantes y el único soporte existente en aquellos niveles de la totalidad del lecho de fusión. Sirgado [8].

Es necesario resaltar que con el progresivo aumento en el tamaño de los hornos altos (hasta 5.000 m3 de volumen útil en algunos hornos Japoneses) y la paralela reducción del consumo especifico del coque, se produce una relativa reducción del volumen de coque respecto del mineral, lo que provoca: Una disminución relativa del volumen del material causante de la permeabilidad del horno alto en sus niveles inferiores. Un aumento de la presión que tiene que soportar el coque y que se concentra en la zona cohesiva, como consecuencia de la mayor altura y densidad de la columna de carga que gravita sobre él. Un aumento del recorrido que tiene que hacer el coque desde que se carga por el tragante hasta que se quema en toberas (como consecuencia del aumento de la temperatura del horno) y, por ello, un aumento de los esfuerzos mecánicos a los que es sometido mientras lo atraviesa. Por todo ello, cuanto mayor es el horno, tanto más necesario es disponer de un coque que, mantenga una granulometría óptima para que el horno funcione de manera eficiente. Sirgado[8].

1.3.3 Métodos de Preestimación de la resistencia mecánica del coque.

Los primeros ensayos se realizaron a partir de las propiedades plásticas de los carbones, tales como el hinchamiento al crisol (FSI), la dilatación Arnu, la fluidez Gieseler, las materias volátiles, etc. Los Rusos Ammosov y Eremin, a partir de datos petrográficos, obtuvieron un índice de la capacidad de aglomeración de los carbones. Posteriormente, los investigadores de la U.S Steel, Schapiro, Gray y Eusner perfeccionaron el método. Los investigadores Alemanes Simonis y Beck, del Bergbau forschung, desarrollaron en la década de los años 60, un método que utilizaban el “poder

coquizante" G, derivado del ensayo de dilatación y que, a diferencia de los anteriores, tenia en cuenta las condiciones de fabricación del coque. Sirgado [8]. La tabla 2 registra los principales métodos de predicción de la Resistencia Mecánica del Coque:

Tabla 2. Métodos de predicción. (Fuente: Sirgado [8]).

Metodo	*Modelo*
Índice de Inertes	Schapiro y Gray
	Illinois State Geological Survey
	Consolidation Coal Co
	Bethlehem Steel Co
	Inland Steel
Australianos	Brown y Taylor
	Cook y Wilson
Canadiense	
National Coal Borrad	
Poder Coquizante	Simonis y Beck
	Simonis y Mackowski
	National Coal Board
	Nippon Steel co. (Matsuoka)
Miyazu	
CRM Belga	

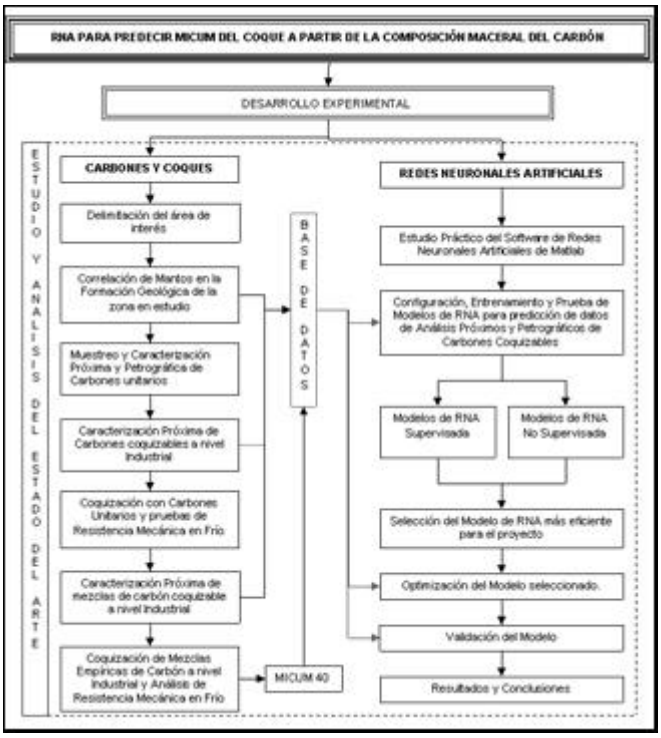


Figura 3. Flujograma metodológico del proyecto.

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1 Planificación de la investigación.

La fase experimental del proyecto se llevó a cabo de acuerdo con el planeamiento metodológico descrito en la figura 3.

2.2 Área de estudio

El área de concesión se encuentra ubicada en las veredas de Peñas coloradas del municipio de Cucunuba y Peñas del cajón, municipio de Sutatausa en el departamento de Cundinamarca (Figura 2). Geológicamente la zona yace sobre el flanco occidental del sinclinal: Checua Lenguazaque, donde aflora la formación guaduas; presenta cinco niveles estratigráficos, dos de los cuales, el Ktg2 y el Ktg3 portan los mantos de carbón. En el Ktg2 se han identificado cuatro mantos y en el Ktg3 nueve, económicamente explotables, con potencias que oscilan entre 0.7 y 1.8 m. Muñoz [10].

2.3 Pruebas de laboratorio y Base de Datos.

Pruebas de laboratorio; se realizaron bajo los procedimientos de las normas ASTM para carbones y coques, e ISO 556 para determinación de Micum, relacionadas en la tabla 3, y de acuerdo con el diagrama de flujo del proceso (figura 5). *Datos fuente*, corresponden los resultados de las pruebas de laboratorio hechas a carbones unitarios y mezclas de carbón usados como patrones.

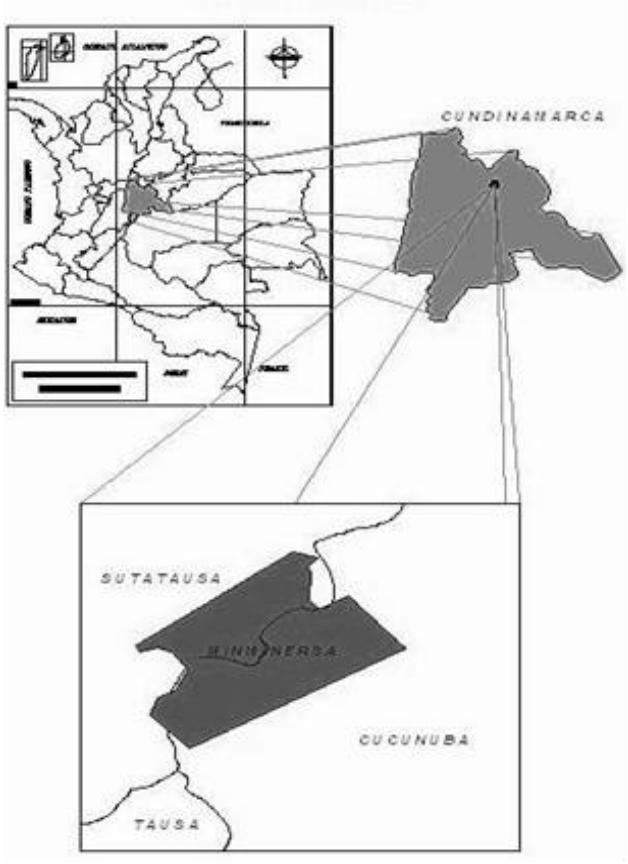


Figura 4. Localización área de estudio (fuente Muñoz [10])

Tabla 3. Pruebas, métodos y normas aplicadas para análisis de carbones.

PRUEBA	METODO	NORMA
Muestreo de canal en mina de carbón.	Método de corte estratigráfico	A.S.T.M D4596
Preparación mecánica de muestras.	Trituración, molienda y clasificación	A.S.T.M D2013
Preparación de muestras para análisis microscópico por luz reflejada	Montaje en resina	A.S.T.M D2797
Determinación microscópica de la reflectancia de la vitrinita en probetas pulidas de carbón	Luz reflejada	A.S.T.M D2798
Determinación microscópica del porcentaje en volumen de los componentes físicos del carbón	Conteo de macerales	A.S.T.M D2799
Humedad Residual	Método Indirecto	A.S.T.M D3173
Cenizas	Calcinación a 750 ºC	A.S.T.M D3174
Materias Volátiles	Calcinación a 950 °C	A.S.T.M D3175
Indice de Hinchamiento Libre del Carbón	Horno de combustión	A.S.T.M D720
Resistencia mecánica del coque	Impacto y fricción en tambor	ISO 556

Datos objetivo, son los valores de resistencia mecánica (M40), de los coques producidos a partir de las mezclas patrón. *Datos de prueba*, son los resultados de petrografía de los carbones unitarios a mezclar para producir coque; a partir de estos, la RNA predice el M40. *Datos para validación*, se obtienen a partir de las pruebas de resistencia mecánica realizadas a los coques de prueba. La tabla 4, muestra la estructura de la base de datos usada para la programación de la red en matlab.

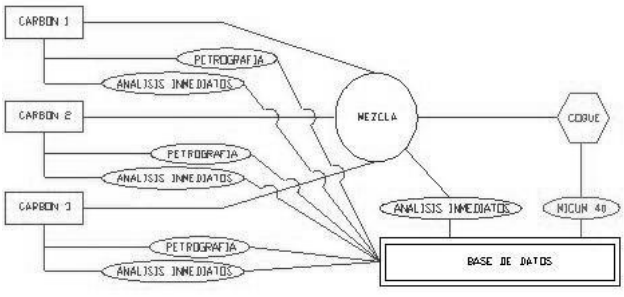


Figura 5. Diagrama de flujo del proceso de coquización y de la base de datos.

2.4 Selección del modelo de RNA

El análisis de los diferentes métodos y modelos matemáticos, relacionados en este estudio, para predecir la resistencia mecánica del coque, permite establecer que la relación de las variables tratadas en cada uno de ellos, genera sistemas no lineales de gran complejidad, más aún si se considera el tratamiento de un mayor número de variables. Con base en las formas de aprendizaje y entrenamiento, arquitectura y aplicaciones de las RNA, se prueban tres modelos: RBF (Radial Basis Function), BP (Backpropagation) PNN (Probabilistic Neural Network). El modelo RBF soluciona el sistema con el menor grado de dispersión en los resultados.

Características de la red RBF. El método de aprendizaje plantea encontrar una superficie en un espacio multidimensional que se ajuste de la forma más eficiente a la información de entrenamiento, con criterios de evaluación estadística; esto equivale a usar una superficie multidimensional para interpolar la información de prueba. Haykin [1].

2.5 Operación de la RBF

Una RBF tiene tres capas: entrada, oculta y salida. Las neuronas de la capa de salida son lineales. Las neuronas de la capa oculta calculan la diferencia entre el vector de entradas y los pesos sinápticos, denominados, centroides; a esta diferencia se aplican una función radial de tipo gaussiano. Esta función de transferencia es de la forma:

$$\phi(r) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \quad (1)$$

Donde r^2 es la función de distancia, generalmente euclídea, de la forma:

Tabla 4. Estructura de la Base de Datos

CARBONES UNITARIOS																														MEZCLA	COQUE
CARBON 1										CARBON 2									CARBON 3												
COMPOSICION MACERAL					ANALISIS INMEDIATOS					COMPOSICION MACERAL					ANALISIS INMEDIATOS				COMPOSICION MACERAL					ANALISIS INMEDIATOS				ANALISIS INMEDIATOS	RESIST. MEC.
RMV	VIT	EXI	INE	MMi	Cz	Mv	Fsi	CP	RMV	VIT	EXI	INE	MMi	Cz	Mv	Fsi	CP	RMV	VIT	EXI	INE	MMi	Cz	Mv	Fsi	CP	Czm	MVm	FSim	M40
Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col	Col
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
x_{1j_1}	x_{1j_2}	x_{1j_3}	x_{1j_4}	x_{1j_5}	x_{1j_6}	x_{1j_7}	x_{1j_8}	x_{1j_9}																						
x_{2j_1}	x_{2j_2}	x_{2j_3}	x_{2j_4}	x_{2j_5}																										
x_{3j_1}	x_{3j_2}	x_{3j_3}																												
x_{4j_1}																														

CONVENCIONES

VIT	:	Vitrinita	**Cz**	:	Cenizas del carbón	**Czm**	:	Cenizas mezcla de carbones
EXI	:	Exinita	**MV**	:	Materia Volátil del carbón	**MVm**	:	Materia Volátil mezcla de carbones
INE	:	Inertinita	**FSI**	:	Índice de hinchamiento libre	**FSIm**	:	Índice de hinchamiento mezcla de carbones
MMi	:	Materia Mineral				**CPm**	:	Composición porcentual mezcla de carbones
RMV	:	Reflectancia Media Vitrinita				**M40**	:	Micum 40

$$r^2 = \sum_{i=1}^{R} \left\| X_i - W_{j,i} \right\|^2 \qquad (2)$$

σ^2 es el parámetro de normalización o factor de escala que mide el ancho de la función gaussiana (figura 6). En MatLab el código de la función es:

$$\phi(r) = radbas(n) = e^{-(n^2)} \qquad (3)$$

Siendo:

$$n = (\|W - X\|) * b \qquad (4)$$

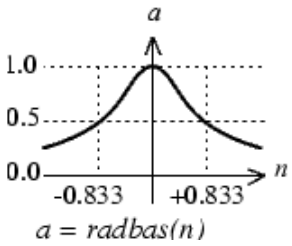


Figura 6. Gráfica función gaussiana (Fuente: Demuth [11]).

Cuando la distancia entre W y X decrece, la función crece. Su máximo sucede cuando W – X = 0, momento en el cual la función devuelve 1. En matlab, el comando para crear una Red RBF, es: *net=newrb(P,T,SPREAD)*, donde: P, es la matriz de datos fuente; T, es la matriz de datos objetivo y SPREAD, es una constante para la función de base radial. Devuelve una red donde las salidas de P son exactamente T. Esta función crea tantas neuronas radiales como vectores de entrada hay en P y establece los pesos de la primera capa como P'. De esta manera se tiene una capa de neuronas radiales en la cual cada neurona actúa como un detector de los diferentes vectores de entrada. Si hay Q vectores de entrada, habrá Q neuronas. Cada umbral en la primera capa es establecido como (0,8326 /SPREAD).

Los pesos de la segunda capa IW{2,1} y sus umbrales b{2} se encuentran simulando las primeras salidas y resolviendo la siguiente expresión lineal:

$$\left[W_{2,1}\, W_{2,2}\, W_{2,3}\, ...W_{2,N}\, b_2\right]*\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ : \\ 1 \end{bmatrix} = T \qquad (5)$$

Se conocen las entradas de la segunda capa A{1}, el objetivo T y se sabe que la capa de salida es lineal. Por lo tanto, al calcular W y b la suma del error cuadrático siempre será cero. El problema es que hay C incógnitas y C + 1 variables y un problema lineal con C incógnitas y C + 1 variables tienen infinitas soluciones. Ante esta condición, newrb crea de manera iterativa una red de base radial añadiendo una neurona en cada ciclo. Las neuronas son sumadas a la red hasta que la suma del error cuadrático cae dentro de un error programado, o un número de neuronas máximo ha sido alcanzado. Estévez [12].

2.6 Diseño de la red RBF para predicción de micum

Arquitectura de la red (Figura 7). Consta de tres capas: Capa de entrada, registra los datos de entrada, (variables del proceso de coquización). Capa oculta, la entrada en cada neurona, es la distancia entre el vector de entradas (variables de los carbones unitarios) y su vector de pesos sinápticos o centroides, multiplicada por el vector umbral correspondiente, a cuyo resultado se le aplica la función radial de tipo gaussiano. Capa de salida, las entradas son el producto de la salida de la función radial por el peso sináptico de la neurona lineal, más el umbral, para emitir como variable respuesta las propiedades de la mezcla a coquizar.

Una segunda red RBF, conectada secuencialmente a la salida de la primera, recibe como datos de entrada las variables respuesta de la capa de salida de la primera red (propiedades de la mezcla a coquizar), para relacionarlas con la resistencia mecánica en frío del coque.

De forma general, el sistema para predecir el Micum 40 del coque a partir de la composición maceral de los carbones de origen, está compuesto por dos redes neuronales del tipo RFB, como se observa en la notación abreviada de la red (Figura 8). En la primera, se tratan las variables de los carbones unitarios para obtener como respuesta las propiedades de las mezclas coquizables que se pueden obtener a partir de los carbones utilizados. La segunda red establece el Micum 40 a partir de las propiedades de las mezclas de carbón.

2.7 Validación del modelo

Los valores de micum 40 obtenidos por simulación a partir de los datos de composición maceral de cada uno de los carbones que conforman la mezcla, con sus respectivos porcentajes, se confrontan con los resultados de la prueba de resistencia mecánica realizada bajo norma ISO 556, a los coques resultantes de la mezcla.

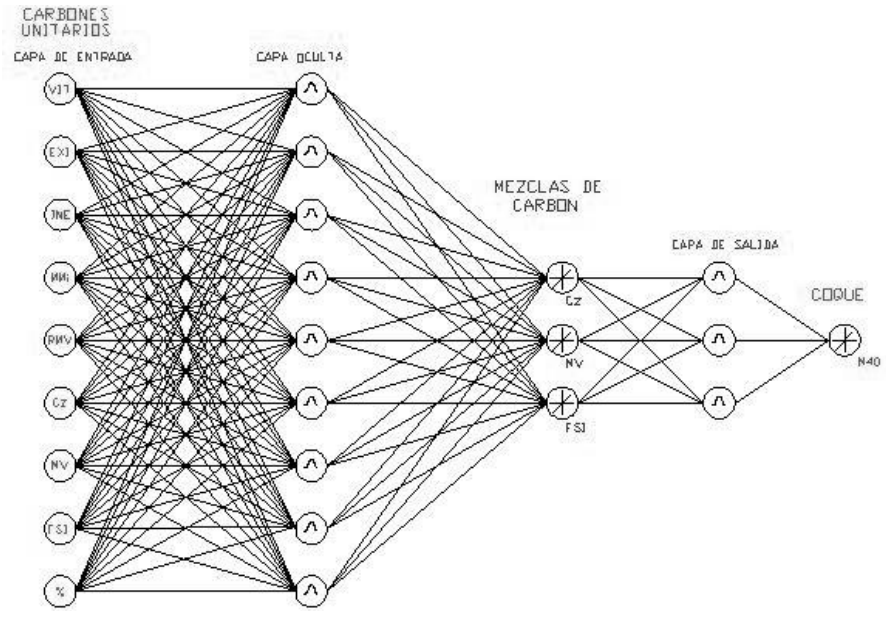


Figura 7. Arquitectura y topología de la red RBF para predicción de Micum 40.

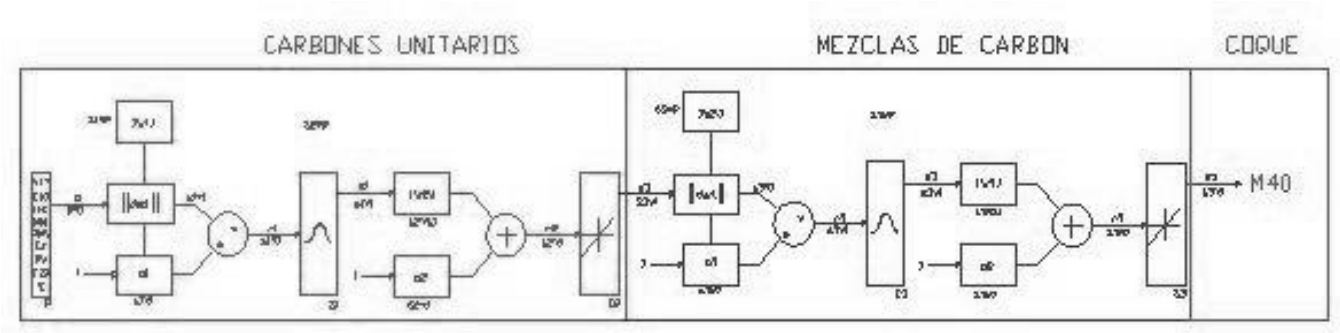


Figura 8. Notación abreviada de la **r**ed RBF para predicción de Micum 40.

3. RESULTADOS Y DISCUSION

La red fue entrenada y probada con 65 datos de carbones unitarios, a partir de los cuales se prepararon 50 ensayos, los cuales fueron carbonizados industrialmente para producir coque. Adicionalmente, se usaron 25 datos de mezclas coquizadas para entrenar y 14 para probar la red.

De las pruebas realizadas se consideró su composición maceral, para predecir cenizas, materia volátil e índice de hinchamiento de carbones unitarios, se muestran los resultados del entrenamiento para predicción de cenizas (figura 9).

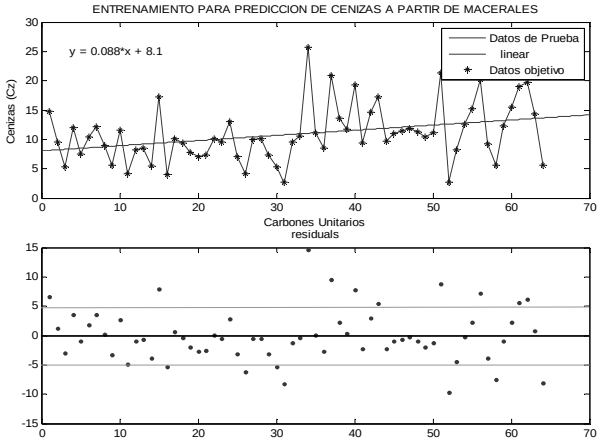


Figura 9. Resultados del entrenamiento para predicción de cenizas en carbones unitarios.

La Configuración con la cual la red alcanza el menor valor en la suma del cuadrado de los errores, SSE = 26.2304, utilizando NEWRB, neurons = 50, corresponde a un porcentaje de error mínimo programado, eg =5, y constante spread sc =0.2. Operaciones previas a este resultado, realizadas por la red: NEWRB, neurons = 0, SSE = 1258.62 y NEWRB, neurons = 25, SSE = 241.621.

Cabe anotar, que en la figura 9 se observa la tendencia de correlación significativa; sin embargo, el ajuste de la curva a una función lineal, genera la expresión $y = 0.008X + 8.1$ que explica una dispersión del 25% de los datos, con respecto al porcentaje mínimo de error propuesto. Bajo estas consideraciones se puede afirmar que la red no esta perfectamente entrenada, pero es susceptible de optimizar con mayor número de datos.

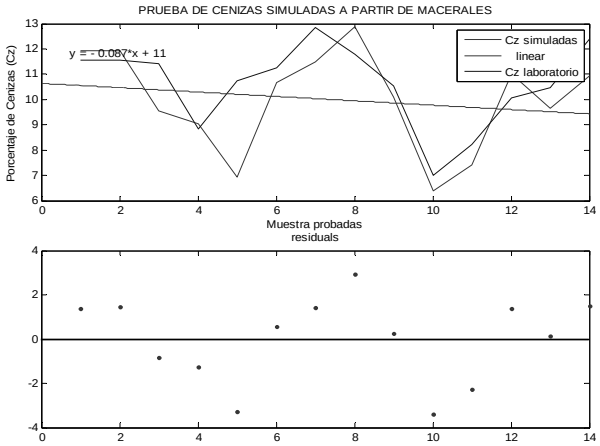


Figura 10. Resultados de la prueba de simulación para predicción de cenizas en carbones unitarios.

Configuración y respuestas de la red
eg =5; % error mínimo
sc =6.1; % constante spread
NEWRB, neurons = 0, SSE = 1412.23
NEWRB, neurons = 25, SSE = 415.741
NEWRB, neurons = 50, SSE = 54.6946

La figura 10 muestra la tendencia de correlación de menor significancia que en el entrenamiento; el ajuste de la curva a una función lineal, genera la expresión $y = 0.0087X + 11$ sin embargo, la dispersión datos no supera el límite de error programado. Este nivel de respuesta permite

proyectar optimización de la RNA con mayor número de datos fuente.

La figura 11 muestra los resultados del entrenamiento de la red para predecir materia volátil en mezclas de carbón

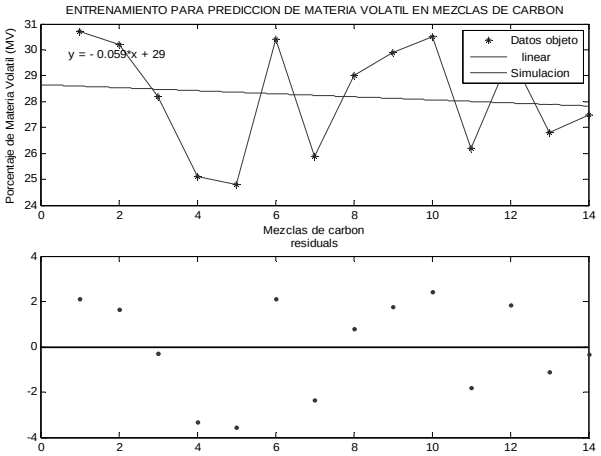


Figura 11. Resultados del entrenamiento para predicción de materia volátil de mezclas.

Configuración y respuestas de la red
eg =5; % error Global
sc = 37.943345; % constante spread
NEWRB, neurons = 0, SSE = 52.2112

La tendencia de correlación en la figura 11 puede considerarse como significativa; sin embargo, la diferencia entre eg y SSE indica que el entrenamiento no ha sido exacto. El ajuste de la curva a una función lineal, genera la expresión $y = 0.0059X + 19$, pero, la dispersión datos no es mayor al 4%.

Los resultados de las pruebas de simulación de la materia volátil de las mezclas, obtenida a partir de los análisis inmediatos de los carbones unitarios utilizados para preparar la mezcla, se representan gráficamente en la figura 12.

Configuración y respuestas de la red
eg =5; % error Global
sc = 1; % constante spread
NEWRB, neurons = 0, SSE = 46.2788

Presenta un comportamiento homólogo a la prueba de simulación de cenizas de carbones unitarios; en este caso, $y = 0.019X + 20$ y la dispersión no excede del 6%.

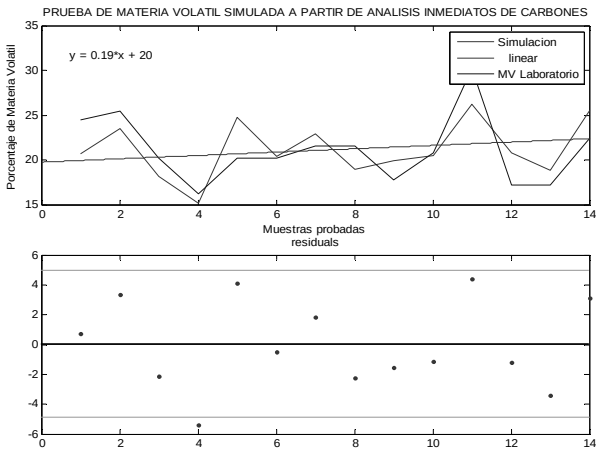


Figura 12. Resultados de la prueba de simulación para predicción de materia volátil en mezclas.

Finalmente, en la figura 13 se presentan gráficamente los resultados de la prueba de simulación para resistencia mecánica del coque.

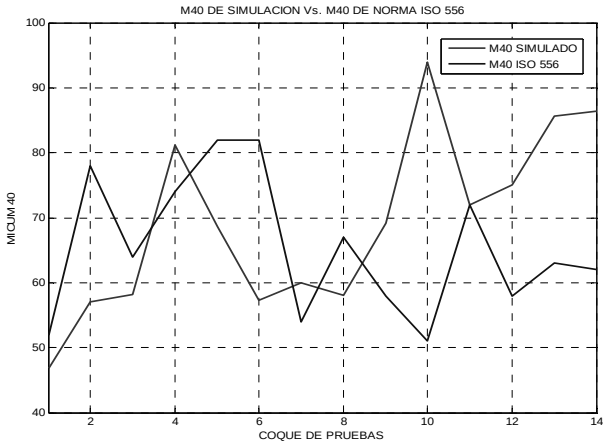


Figura 13. Resultados de la prueba de simulación para predicción de Resistencia mecánica del coque.

Configuración y respuestas de la red
eg =0.1; % error Global
sc = 1.41; % constante spread
NEWRB, neurons = 0, SSE = 975.731

En la figura 13 se observa que los resultados simulados, con respecto a los resultados de laboratorio, no presenta tendencia similar; sin embargo, existen algunos valores comunes o muy cercanos que permiten considerar la posibilidad de un ajuste, tratando un número mayor de muestras.

La figura 14, permite hacer una segunda evaluación de la respuesta, donde se confirma que el ajuste hacia una función lineal, difiere significativamente con respecto a las pruebas anteriores

($y = 2.4X + 52$) y el nivel de dispersión sobrepasa ampliamente el limite de error propuesto.

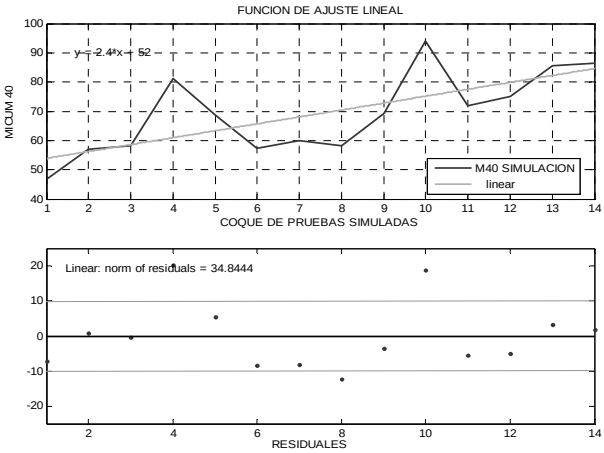


Figura 14. Análisis de la función de ajuste y el umbral de error.

De forma general, se observa un mejor comportamiento en los entrenamientos y pruebas de simulación realizados a los carbones unitarios con respecto a las mezclas.

4. CONCLUSIONES

- Probados los modelos de red neuronal, Backpropagation (BP), Probabilistic Neural Network (PNN) y Radial Basis Function (RBF), en el Neural Network toolbox de Matlab, se pudo establecer que la red RBF es la única que presenta convergencia y simula valores de respuesta coherentes y cercanos a los resultados experimentales, como se puede observar en las pruebas de entrenamiento y validación.
- El valor de correlación obtenido en la predicción de la resistencia mecánica del coque fue de 0.512; indica que el nivel de precisión de la red no es óptimo; sin embargo, es susceptible de ajustar, depurando e incrementando el tamaño de la base de datos.
- La RNA implementada para predecir la resistencia mecánica del coque, opera con información específica del proceso de coquización. Debe entrenarse con casos de producción de los que se tenga información completa de petrografía, análisis inmediatos de carbones unitarios y mezclas de carbón, porcentajes de composición de las mezclas, y micum 40 del coque obtenido. A mayor número de casos registrados en la base de datos fuente (para entrenamiento), mayor nivel de aprendizaje y en consecuencia, mayor nivel de precisión en la predicción.

- Todas las pruebas de entrenamiento de la red RBF, dan como resultado una correlación de 1.0 entre datos fuente y datos objetivo; esto indica que la red se ha entrenado de forma correcta. Los mayores niveles de correlación (0.673 y 0.696 respectivamente) se obtuvieron durante la fase de validación, al relacionar cenizas con materia volátil para predecir FSI de carbones unitarios, y la relación de la composición maceral con análisis inmediatos y la proporción de tres carbones unitarios (30 variables), para predecir materia volátil en mezclas de carbones.

- Las variables índice de propiedades plásticas en carbones unitarios (FSI), y mezclas de carbón (materia volátil), presentan evidencia de mayor interacción (valores máximos de correlación (0.673 y 0.696 respectivamente)); esto refleja la importancia del rango del carbón usado en el proceso. De acuerdo con la tabla de clasificación internacional norma ASTM D 388, deben ser carbones bituminosos de alto, medio y bajo volátil, y en algunos casos, semiantracitas, todos con carácter aglomerante.
- Los resultados del estudio muestran la factibilidad para aplicar la Inteligencia Artificial como herramienta de predicción en el proceso de coquización, mediante el uso de una RNA de tipo RBF, que basa el algoritmo de entrenamiento y aprendizaje en el método multivariable K MEDIAS; el cual permite procesar un número ilimitado de casos, agrupados en función de su afinidad. Este aporte al estado del arte propone una opción más, para superar las limitaciones de los métodos de predicción de resistencia mecánica del coque, basados en índices de inertes y petrografía.

5. SUGERENCIAS Y RECOMENDACIONES

- Proyectar la aplicación de esta herramienta a una empresa de coquización, donde se pueda crear una base de datos fuente para entrenamiento, con información petrográfica y de propiedades fisicoquímicas de carbones, variables del proceso de coquización y calidad del coque. De esta forma la red podría llegar a operar con cien o más variables y un número de casos equivalente

a la producción de la empresa a través del tiempo.

- Optimizar la funcionalidad de la red, proyectando su aplicación para diseño de mezclas, consumo programado del carbón, parametrización de variables y control de proceso.
- Implementar sistemas de registro de información in situ, como: programas de reconocimiento de imagen para los análisis petrográficos, sondas para determinación de propiedades fisicoquímicas de carbones unitarios y mezclas, balanzas y termocuplas para monitoreo y control de proceso, entre otros; para alimentar de forma directa y en tiempo real la base de datos de la red.

6. AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen la colaboración en el desarrollo de este trabajo a la Dirección de investigaciones de la UPTC, y especialmente al Dr. Ing. Lesme Corredor M., Universidad del Norte; al M.Sc. Ing. Luis C. Sarmiento, al Ing. Jose A. Alvarez G., Gerente MINMINER S:A.; al Ing. Bernardo A. Garzon A., de MINMINER S.A, y al Lic. Luis J. Salazar R.

7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Haykin S. *Neural Networks a comprehensive foundation*, 2da Ed. New Jersey (U.S.A.): Prentice Hall, 1999. p. 10-11.

[2] Hagan M, Demuth H, Beale M. *Neuronal Network Design*, Distributed by: Campus Publishing Service, Colorado University Bookstore. Sabim Sileon S.A. www.sabim.info, 2007. p. 2-7.

[3] Martin del brio B, Zans M. A. *Redes Neuronales y sistemas difusos*, 2da. Ed. México: Alfa omega, 2002. p. 10-12.

[4] Norma ASTM D-121-99 *Standard Terminology of Coal and Coke*, Filadelfia (EE.UU.): American Society for Testing and Materials, 1999.

[5] Speight J. G. *The chemistry and technology of coal*. 2da Ed. New York: Marcel Dekker, inc., 1994. p. 90.

[6] Norma ASTM D 388–99 *Standard Classification of Coals by Rank*. Filadelfia (EE.UU.): American Society for Testing and Materials, 1999.

[7] Diaz Ch. Á. *Ciencia y Tecnología del Carbón*. Trabajo Docente. Tunja (Colombia): Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, 2002. p. 63-65.

[8] Sirgado E. M. *Optimización de mezclas de carbón*. España: Departamento de Investigación Cok–Arrabio ENSIDESA, 1987. p. 43.

[9] Norma ISO 556. *International Standard. Coke (greater than 20 mm in size) – Determination of mechanical strength*, First edition – 1980 – 01.

[10] Muñoz S. L. *Informe final de exploración contrato de concesión 1921T. Municipios de Cucunuba y Sutatausa Departamento de Cundinamarca*. Bogotá: MINMINER S.A., 2005. p. 6.

[11] Demuth H, Beale M, Hagan M. *Neural Network Toolbox for use with MATLAB. User's Guide*, version 5. USA, 2006. p. 2-11.

[12] Estévez, P. *Las redes neuronales supervisadas. (2005)*. www.telefonica.net /web2 /pgestevez/publicaciones.htm (Pend. De Publicación).