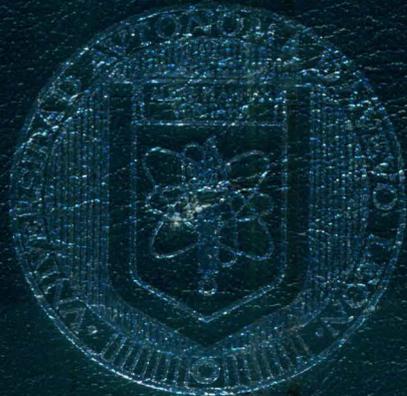


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

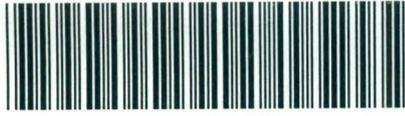


MODELAMIENTO DINÁMICO DE LOS MECANISMOS
DE CRECIMIENTO, AGLOMERACIÓN Y RUPTURA,
DE PARTICULAS EN UN REACTOR DE FLOCULACIÓN

POR:
MONICA MARIA ALCALA RODRIGUEZ

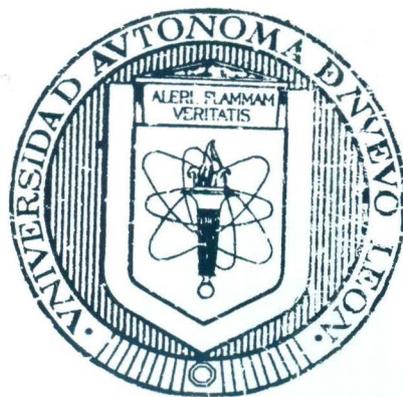
Como requisito parcial para obtener el
Grado de DOCTOR EN CIENCIAS,
con Orientación en Procesos Sustentables

DICIEMBRE 2009



1020163978

**UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS**



**MODELAMIENTO DINAMICO DE LOS MECANISMOS
DE CRECIMIENTO, AGLOMERACION Y RUPTURA,
DE PARTICULAS EN UN REACTOR DE FLOCULACION**

**POR:
MONICA MARIA ALCALA RODRIGUEZ**

**Como requisito parcial para obtener el
Grado de DOCTOR EN CIENCIAS,
con Orientación en Procesos Sustentables**

DICIEMBRE 2008

1487175



FONDO TESIS

040210

TD
Z5521
FCQ
2008
.A475

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



ESTUDIO CINÉTICO DE LOS MECANISMOS DE CRECIMIENTO,
AGLOMERACIÓN Y RUPTURA DE PARTÍCULAS
EN UN REACTOR DE BUBULACIÓN

POR

MONICA MARIA ALCALA RODRIGUEZ

Se requiere parcial para obtener el Grado de DOCTOR EN CIENCIAS
con Orientación en Procesos Sustentables

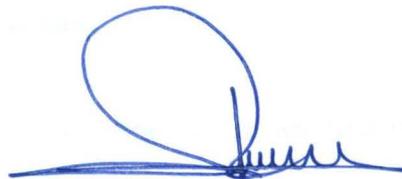
Diciembre 2008

RE 14/01/10

MODELAMIENTO DINÁMICO DE LOS MECANISMOS DE CRECIMIENTO,
AGLOMERACIÓN Y RUPTURA, DE PARTÍCULAS
EN UN REACTOR DE FLOCULACIÓN

Aprobación de Tesis:

Dr. Eduardo Soto Regalado



Asesor de Tesis

Dr. Erardo Mario Elizondo Villarreal

Dr. Felipe de Jesús Cerino Córdova



Dr. J. Arturo Berrones Santos



Dr. Tomás Lozano Ramírez

Dra. Ma.Teresa Garza González



Subdirectora de Estudios de Posgrado

AGRADECIMIENTOS

A DIOS, por que su plan no se detiene, y me brindó durante todo este tiempo, paciencia, salud y vida, para cumplir con esta meta, parte de mi proyecto de vida, *"Mira que te mando que te esfuerces y seas valiente: no temas ni desmayes, porque el señor tu Dios estará contigo en donde quiera que vayas"* Josué 1:9.

A MIS PADRES, por haberme enseñado todos los principios que rigen mi vida, el valor del trabajo y la importancia de la formación y la humildad.

A MI ESPOSO, Felipe, por brindarme su apoyo, tiempo y amor, durante los años que duró esta extraordinaria aventura.

A MIS HIJOS, Diego, Mónica y Jaime, a quienes amo profundamente, y para quienes trato día con día ser un ejemplo de vida.

A MI DIRECTOR DE TESIS, Dr. Eduardo Soto Regalado, quien con su aliento, palabras y visión, además de sus cronogramas, hicieron más llevadero este último año de arduo trabajo.

A MIS REVISORES DE TESIS, Dr. Erardo M. Elizondo V., Dr. J. Arturo Berrones S., Dr. Felipe Cerino C., por que compartieron conmigo sus conocimientos, me brindaron su tiempo y sobre todo sus valiosos cometarios.

AL PERSONAL DEL LABORATORIO DE IQ II, Sra. Martha, D. Juan, Laura, Carlitos y Francisco, quienes se esforzaron por ayudarme y sacrificaron muchas veces su tiempo para cumplir con los programas establecidos.

A LOS ESTUDIANTES QUE COLABORARON EN ESTE ESTUDIO, Francisco, José Luis, Ricardo y Alejandro, por invertir su tiempo, esfuerzo y conocimientos en este proyecto.

A MIS COMPAÑEROS Y AMIGOS, Que me brindaron su constante aliento.

A LA FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS, Dr. Sergio Fernández Delgadillo, M.A. Gloria Nelly Páez Garza, Dra. Tere Garza, Por su constante apoyo para la realización de mis estudios y por brindarme un ambiente propicio para mi desarrollo profesional.

A TODAS las personas que contribuyeron de una forma u otra en la realización de mi trabajo.

GRACIAS!

RESUMEN

Mónica María Alcalá Rodríguez

Fecha de Graduación: Diciembre 2008

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ciencias Químicas

Titulo del Estudio: MODELAMIENTO DINÁMICO DE LOS MECANISMOS DE CRECIMIENTO, AGLOMERACIÓN Y RUPTURA, DE PARTÍCULAS EN UN REACTOR DE FLOCULACIÓN.

Número de páginas: 141

Candidato al grado de Doctor en Ciencias con orientación en Procesos Sustentables.

Área de Estudio: Procesos Sustentables

Propósito y Método de Estudio: En los sistemas de tratamiento de aguas residuales mediante el proceso de coagulación y floculación para la remoción de metales pesados, influyen sobre el tamaño de partícula una serie de factores, tales como: dosis de coagulante, velocidad y tiempo de agitación. En este tipo de tratamiento de aguas residuales, se pretende que el tamaño de partícula sea el mayor posible, ya que esto facilita la separación de las fases sólida y líquida después del tratamiento. Esta investigación surgió con el propósito de modelar y simular el comportamiento de un reactor de floculación en el tratamiento de disoluciones acuosas contaminadas con metales pesados, se trabajó con: disolución modélica preparada con metales por separado, disolución modélica preparada con todos los metales (multimetálica) y con una agua residual cruda de una cromadora de la localidad, los metales estudiados fueron: Cromo, (III), Hierro (III), Níquel y Zinc. Se realizaron pruebas de tratamiento en un equipo de prueba de jarras, manteniendo constantes la dosis de coagulante y la concentración de metales, se modificó la velocidad de agitación de 20 a 40 rpm, las muestras de flóculos fueron muestreadas a intervalos de tiempo de 1 a 10 minutos, el tamaño de la partícula fue determinado mediante microscopía óptica. El tamaño y distribución de partículas fue determinado mediante el software "Image Pro". El tamaño y número de partículas y las variables de sistema fueron alimentados a un modelo de Red Neuronal Artificial, mediante el software "Neuronal Net".

Contribuciones y Conclusiones: Con el estudio realizado fue posible determinar la aglomeración ortocinética, el fenómeno de crecimiento sólo pudo observarse a velocidades bajas de agitación en todas las pruebas estudiadas y para tiempos de agitación superiores a 4 minutos. Se estableció un modelo matemático que describe la distribución de partículas en cada intervalo de tiempo con coeficientes de correlación $R^2 > 0.998$ en todos los casos. Se observó el fenómeno de ruptura a 40 rpm de velocidad de agitación y entre 5 y 7 minutos de agitación. Las pruebas realizadas para una velocidad de agitación de 20 rpm, permitieron identificar a los fenómenos de aglomeración y crecimiento para los cuatro metales probados. En las pruebas a 40 rpm se identificaron los fenómenos de aglomeración y ruptura en las pruebas realizadas para la remoción de los 4 metales. Para la disolución multimetálica y el agua cruda se utilizó para reproducir los fenómenos de aglomeración y crecimiento a 20 rpm, una red neuronal artificial de arquitectura 2-6-6-1. Para los fenómenos de aglomeración y ruptura a 40 rpm, se utilizó una arquitectura 2-8-8-1. El uso de redes neuronales para simular el número de partículas como una función del tiempo, permitió describir el comportamiento de todos los sistemas estudiados, con desviaciones menores a 3%.

FIRMA DEL DIRECTOR DE TESIS:



LISTADO DE FIGURAS

Figura	Página
1 Representación esquemática de las fuerzas que actúan en coloides en una suspensión estable	14
2 Representación de una partícula coloidal negativamente cargada y sus campos electrostáticos	16
3 Principales mecanismos de dispersión: a) ruptura, b) erosión c) aglomeración	28
4 Estructura de red neuronal	43
5 Equipo para pruebas de jarras	68
6 Prueba de sedimentación	68
7 Estructura de red neuronal utilizada para experimentos a 20 rpm	74
8 Estructura de autómata celular	75
9 Coagulantes: a) sulfato ferroso, b) cloruro férrico	81
10 Curvas de sedimentación para las diferentes sustancias coagulantes	81
11 Micrografías representativas de los flóculos utilizando FeCl_3 como coagulante	83
12 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Cr 1	85
13 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Cr2	88
14 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Fe1	89
15 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Fe 2	91
16 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Ni 1	93
17 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Ni 2	95

18 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Zn 1	97
19 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Zn 2	99
20 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del cromo a 20 rpm	101
21 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del fierro a 20 rpm	101
22 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del níquel a 20 rpm	102
23 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del zinc a 20 rpm	102
24 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del cromo a 40 rpm	103
25 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del fierro a 40 rpm	103
26 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del níquel a 40 rpm	104
27 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del zinc a 40 rpm	104
28 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $\text{vel} \rightarrow 0$ y $\text{fc} \rightarrow 1$	105
29 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $\text{vel} \rightarrow 1$ y $\text{fc} \rightarrow 0$	106
30 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $1 < \text{vel} > 0$ y $1 < \text{fc} > 0$	106
31 Distribución de tamaños de partícula obtenida mediante simulación con autómeta celular, y su correspondiente en escala logarítmica	107
32 Comparación de la pendiente de la distribución de tamaños de partícula a) medida y b) obtenida mediante simulación con autómeta celular	107

33 Distribución de tamaños de partícula para el minuto 3 de las pruebas Cr1, Fe1, Ni1 y Zn1 y su correspondiente en escala logarítmica	109
34 Comportamiento de la pendiente conforme aumenta la velocidad	110

LISTADO DE TABLAS

Tabla	Página
1 Comparación de valores objetivos y obtenidos mediante RNA tipo BP	59
2 Trabajo experimental	69
3 Listado de instrucciones para una corrida de simulación mediante redes neuronales artificiales	74
4 Resultados del análisis químico de las aguas tratadas realizado mediante absorción atómica	80
5 Resultados del análisis químico de las aguas tratadas realizado mediante absorción atómica utilizando FeCl ₃ como coagulante	82
6 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de cromo a 20 rpm	84
7 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de cromo a 40 rpm	86
8 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de hierro a 20 rpm	87
9 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de hierro a 40 rpm	90
10 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de níquel a 20 rpm	92
11 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de níquel a 40 rpm	94
12 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de zinc a 20 rpm	96
13 Distribución de tamaño de partículas para prueba de remoción de zinc a 40 rpm	98
14 Distribución de tamaño de partículas para mezcla 1	111
15 Resultados del número de partículas modelado para mezcla 1 utilizando la red neuronal artificial 2-6-6-1	112

16 Distribución de tamaño de partículas para mezcla 2	113
17 Resultados del número de partículas modelado para mezcla 2 utilizando la red neuronal artificial 2-8-8-1	114
18 Distribución de tamaño de partículas para prueba denominada cruda 1	115
19 Resultados del número de partículas modelado utilizando la red neuronal artificial 2-6-6-1	115
20 Distribución de tamaño de partículas para prueba denominada cruda 2	116
21 Resultados del número de partículas modelado utilizando la red neuronal artificial 2-8-8-1	117
22 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Cromo a 20 rpm	128
23 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Cromo a 40 rpm	129
24 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Fierro a 20 rpm	130
25 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Fierro a 40 rpm	131
26 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Níquel a 20 rpm	132
27 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Níquel a 40 rpm	133
28 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Zinc a 20 rpm	134
29 Distribución de tamaño de partículas para la prueba de remoción de Zinc a 40 rpm	135
30 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción del Cromo a 20 rpm	136
31 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción del Cromo a 40 rpm	136
32 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción del Fierro a 20 rpm	137

33 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción del Hierro a 40 rpm	137
34 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción de Níquel a 20 rpm	138
35 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción de Níquel a 40 rpm	138
36 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción de Zinc a 20 rpm	139
37 Resultados de la modelación de la red neuronal artificial, para la remoción de Zinc a 40 rpm	139
38 Constantes de proporcionalidad a , b y % de error que exhibe el modelo para las pruebas de remoción de Cromo	140
39 Constantes de proporcionalidad a , b y % de error que exhibe el modelo para las pruebas de remoción de Hierro	140
40 Constantes de proporcionalidad a , b y % de error que exhibe el modelo para las pruebas de remoción de Níquel	141
41 Constantes de proporcionalidad a , b y % de error que exhibe el modelo para las pruebas de remoción de Zinc	141

Abreviaturas

RNA	Red neuronal artificial
F	Función de activación
AN	Hidrocarburos alifáticos de uno a tres carbonos
RNPM	Red neuronal perceptrón multicapa
RNBR	Red neuronal base radial
BP	Red neuronal backpropagation
RMS	Error cuadrático medio
MAE	Error medio absoluto
MAPE	Error medio absoluto porcentual
PH	Potencial de hidrógeno
% desv	Porcentaje de desviación
rpm	Revoluciones por minuto
AG	Algoritmo genético
ppm	Partes por millón

TABLA DE CONTENIDO

Capítulo	Pág.
1. Introducción	3
1.1 Los metales pesados en la biosfera	3
1.1 Planteamiento del problema a resolver.....	5
1.2 Relevancia científica e implicaciones del estudio	7
1.3 Objeto de estudio.....	8
1.4 Objetivos	8
1.4.1 Objetivo general.....	8
1.4.2 Objetivos específicos	8
1.5 Hipótesis.....	9
1.6 Descripción del proyecto	9
1.7 Descripción del problema	10
2. Análisis Crítico De Literatura	12
2.1 Metales pesados.....	12
2.2 Aspectos fisicoquímicos de la precipitación química.....	13
2.2.1 Fenómenos electroforéticos asociados al tratamiento de aguas.....	20
2.3 Modelos Teóricos de la Coagulación y de la Floculación	22
2.3.1 Mecánica del Proceso.....	22
2.3.2 Sistemas particulados	26
2.4 Estudios de modelación en sistemas particulados	29
2.5 Simulación de procesos.....	34
2.6 Modelos matemáticos para describir procesos	35
2.6.1 El modelo neuronal biológico	38
2.6.2 Modelo de red neuronal artificial.....	39
2.6.2.1 Fundamentos de redes neuronales artificiales.....	39
2.6.2.2 Elementos de una red neuronal artificial.....	40
2.6.3 Autómata celular	65
3. Materiales y Métodos.....	66
3.1 Experimentos de Laboratorio.....	67
3.1.1 Pruebas preliminares	67
3.1.2 Pruebas Experimentales	69
3.1.3 Procesamiento de las muestras.....	70
3.1.4 Distribución del número de partículas por tamaño	71
3.1.5 Modelación mediante redes neuronales artificiales	72
3.1.6 Simulación de resultados mediante autómatas celulares.	74
3.1.6 Optimización de los parámetros de velocidad y tiempo de agitación en el proceso de eliminación de metales pesados.....	78
3.1.7 Estudios en sistemas multimetalicos y con agua cruda.....	78
4. Resultados y Discusión	79
4.1 Efecto de las variables del proceso de tratamiento	79
4.2 Distribución del tamaño y número de partículas, en disoluciones monometálicas.....	83
4.3 Modelo matemático para la distribución del número de partículas con respecto a su tamaño	100
4.4 Desarrollo de un modelo matemático para la descripción del proceso ...	100
4.4 Simulación mediante autómata celular	105

4.5 Aplicación del modelo de red neuronal artificial a una disolución
multimetálica 111

4.6 Aplicación del modelo de red neuronal artificial a un agua residual cruda
..... 114

5. Conclusiones y Recomendaciones 118

Referencias Bibliográficas 121

Apéndice..... 127

1. Introducción

1.1 Los metales pesados en la biosfera

Los metales pesados representan una amenaza para la biosfera, ya que no son biodegradables, se les ha encontrado en vegetales que fueron regados con agua contaminada con estos metales. La alta toxicidad de estos contaminantes, provoca enfermedades y daños a las personas que afectan su salud y su productividad.

En el mundo actual podemos encontrar metales en múltiples aplicaciones, desde empaques de alimentos, autos, aviones y las construcciones, de hecho se vive y trabajamos en ellos. Trazas de algunos metales tales como arsénico, cobalto, germanio, níquel, rubidio y vanadio juegan un importante papel en la vida de muchos organismos y no obstante que algunos metales son esenciales para la vida, un exceso de éstos puede resultar en una amenaza para la salud humana y para el medio ambiente. La creciente presencia de metales pesados en los ecosistemas, obliga a académicos e investigadores a realizar investigaciones con el objetivo de conocer sus efectos sobre el medio ambiente, a encontrar formas de evitar que estos contaminantes afecten el entorno y la salud humana.

El crecimiento industrial de México ha significado una enorme presión sobre el capital natural del país y en particular sobre el agua; lo cual ha generado además un proceso de degradación de nuestro entorno que se debe detener. En materia del cumplimiento de las normas ambientales mexicanas, la industria de galvanoplastia, que es la responsable de la mayor parte de la contaminación por metales pesados, es de las peor calificadas a nivel nacional por la Procuraduría Federal de Protección al Ambiente

(PROFEPA), destacándose lo bien evaluados que resultan algunos giros industriales tales como: la petrolera, la farmacéutica, la automotriz entre otras más.

Por lo tanto es indispensable establecer un nuevo modelo de desarrollo limpio, protector del medio ambiente y restaurador de nuestros ecosistemas. Un modelo sustentable que garantice el equilibrio entre una mejor calidad de vida para las personas y la preservación de nuestro patrimonio natural.

La política del gobierno mexicano en materia de manejo y preservación del agua responde al compromiso de enfrentar con firmeza y con una visión de largo plazo el reto de la disponibilidad de este vital líquido. La instrumentación de esta política requerirá de un importante esfuerzo institucional para organizar la tarea del Estado y alentar la movilización social para colaborar en la solución de esta problemática.

Una parte de las industrias que actualmente se instalan en los países en vías de desarrollo, no cumplen con las normas en materia de descargas de los países de origen, las cuales son más rigurosas en general que las nuestras.

El uso óptimo de las tecnologías básicas de tratamiento de aguas, así como la aplicación de los tratamientos avanzados, representan un área de oportunidad para el desarrollo de investigaciones encaminadas al cuidado del medio ambiente; esta área de trabajo es actualmente atendida por los gobiernos estatales y el gobierno federal mexicano los que asignan recursos para el desarrollo de las mismas.

Durante el tratamiento de aguas residuales mediante coagulación-floculación, se espera que se formen partículas que contengan los contaminantes, y que por sedimentación las fases sólida y líquidas puedan ser separadas, estas partículas en la mayor parte de los sistemas son coloidales, que por su naturaleza tienen a permanecer en suspensión dificultando la separación de las fases. El tratamiento físico químico es el

más difundido pero no es empleado de una manera adecuada y se desconoce la forma de optimizarlo en los procesos de tratamiento de aguas residuales que contienen varios metales pesados, es así que se registran sólo dos industrias que dan tratamiento al agua de desecho.

En estudios realizados por The Royal Society of Chemistry (2003), se muestran los efectos de los metales pesados sobre la salud humana, lo cual es algo bien documentado. Con respecto a lo anterior en el período de 1985 a 2001 el número de publicaciones científicas en el área médica relacionados con problemas de afecciones en la piel, problemas de cáncer y problemas ambientales relacionados con el níquel, se incrementó de 200 a 450; lo cual indica con claridad cómo se avanza en esta área del conocimiento y además cómo el níquel incrementa su presencia en el medio ambiente y cómo afecta la salud del hombre.

1.1 Planteamiento del problema a resolver

Son muchos y muy variados los factores que afectan el proceso de floculación, y por lo tanto los intentos en desarrollar modelos matemáticos que describan este proceso han sido a lo largo del tiempo de relativa aplicación práctica, especialmente cuando se pretende generalizar resultados y promover su aplicación en sistemas de tratamiento de agua, como resultado de esta investigación y análisis se obtiene un modelo matemático, que surge a partir de la observación de ensayos en un reactor de floculación para la eliminación de metales pesados provenientes de agua contaminada, se pretende describir el fenómeno de floculación ortocinética mediante la determinación de expresiones matemáticas que describan las funciones de crecimiento aglomeración y ruptura de

flóculos, las cuales, de acuerdo a estudios preliminares desarrollados presentan una relación con el gradiente de la velocidad, el tiempo de agitación y el pH.

El tiempo y el gradiente de velocidad son importantes en el proceso de floculación, ya que influyen directamente sobre el tamaño de las partículas generadas; en un proceso de coagulación-floculación se pretende que el tamaño de partícula sea máximo, ya que esto facilita la separación de la fase sólida generada por sedimentación.

Por otra parte el pH es un factor prominente en acción desestabilizadora de las sustancias coagulantes y floculantes, ya que la solubilidad de los metales pesados es una función directa del valor de pH de la disolución, en este estudio el pH se estableció para generar el hidróxido metálico correspondiente y favorecer la coagulación y floculación de los sólidos generados por insolubilización de los metales.

El fenómeno de ruptura se ve favorecido con el incremento en la velocidad de agitación y con tiempos prolongados de agitación, mientras que la aglomeración y el crecimiento se ven favorecidos al disminuir la velocidad de agitación. En esta investigación se estudió el proceso de coagulación y floculación para la eliminación de metales pesados, a fin de modelar el mecanismo de crecimiento, aglomeración y ruptura de los flóculos formados durante el tratamiento. La coagulación- floculación son procesos de tratamiento de aguas residuales, que son susceptibles de verse afectados por las variables del proceso como son: velocidad de agitación, tiempo de agitación y dosis de coagulante, particularmente se trabajó con las variables de velocidad y tiempo de agitación, ya que la dosis de coagulante había sido previamente determinada en otra investigación.

La velocidad de agitación, afecta de manera muy importante la formación de sedimentos fácilmente separables de la fase líquida, ya que una velocidad de agitación

baja, no propiciará el contacto entre las partículas para que las fuerzas de atracción (*van der Waals*), provoquen que las partículas se unan; mientras que, una alta velocidad de agitación, provocará que las partículas ya formadas se rompan, ésto debido al esfuerzo de corte. Es importante mencionar que los enlaces que coagulan y flocculan las partículas en estos sistemas son de baja energía, por lo tanto son vencidos fácilmente. El tiempo de agitación también afecta la formación de flóculos, ya que un tiempo de agitación prolongado, propiciaría que por exceso de agitación (aun a velocidad lenta), los flóculos ya formados se rompan, afectando de manera negativa la separación de las fases.

1.2 Relevancia científica e implicaciones del estudio

De acuerdo a la revisión bibliográfica realizada para esta investigación, pudo determinarse que el proceso de coagulación-floculación, ha sido estudiado por otros investigadores para la remoción de diversos contaminantes, por lo que puede concluirse que el tema de investigación es vigente y de importancia en procesos de tratamiento de aguas residuales.

El proceso estudiado en esta investigación, tiene dificultades inherentes a su naturaleza, las cuales, representan para los operadores de plantas de tratamiento de aguas residuales, dificultades operativas que afectan los resultados del proceso de tratamiento. Se han hecho otros estudios para modelar el proceso de coagulación-floculación, sin embargo, la herramienta de "redes neuronales artificiales" no ha sido utilizada para el modelamiento de estos sistemas.

1.3 Objeto de estudio

Sistema de tratamiento de aguas residuales para remover metales pesados por coagulación-floculación.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo general

Desarrollar un modelo matemático que describa el proceso de crecimiento aglomeración y ruptura de flóculos en un reactor de coagulación-floculación, mediante el uso de redes neuronales artificiales.

1.4.2 Objetivos específicos

1. Estudiar el efecto del agente y dosis del coagulante, así como el tiempo de agitación, sobre el proceso de tratamiento.

2. Estudiar el efecto de la velocidad de agitación sobre las DISTRIBUCIONES del tamaño y número de partículas para disoluciones mono metálicas sobre el proceso de tratamiento.

3. Desarrollar un modelo matemático que prediga los mecanismos de crecimiento aglomeración y ruptura en el proceso de eliminación de metales pesados por coagulación-floculación.

4.-Simular el comportamiento del sistema, para predecir el número de partículas con respecto al tiempo y a la velocidad de agitación, empleando redes neuronales artificiales.

1.5 Hipótesis

Los mecanismos de crecimiento, aglomeración y ruptura de flóculos pueden ser modelados mediante el uso de redes neuronales artificiales para predecir el número de partículas como función del tiempo.

1.6 Descripción del proyecto

Se realizaron corridas experimentales para el tratamiento de disoluciones acuosas contaminadas con metales pesados, para la generación de partículas floculadas, los cuales fueron muestreados para la determinación de su tamaño, por microscopía óptica a intervalos de tiempo definidos. Esta información fue alimentada a modelos de redes neuronales y autómatas celulares, para simular el proceso a fin de encontrar un modelo matemático que describiera el proceso de la mejor manera. Los resultados de esta investigación permitieron definir el mejor modelo para predecir el número de partículas como función del tiempo, e identificar los tiempos en que sucede el crecimiento, aglomeración y ruptura de las partículas en el proceso de coagulación-floculación.

Este estudio de investigación surgió para dar respuesta a los problemas que se presentan en plantas de tratamiento de aguas residuales, durante la separación de las fases sólida y líquida como resultado de los cambios en las variables del proceso de tratamiento.

La selección de redes neuronales artificiales como herramienta de modelación responde a la problemática que representa la solución de la ecuación de balance poblacional, que es el método tradicional de análisis para estos sistemas. Además la capacidad predictiva que muestran estos algoritmos es muy grande comparada con cualquier otro método tradicional, ya que poseen mecanismos de auto aprendizaje,

pueden diseñarse a prueba de fallas, siendo además de fácil acceso: Esta herramienta puede ser utilizada en una diversa gama de aplicaciones, sin importar el número de variables que afecten el estado del sistema, los resultados generados son de fácil interpretación y pueden ser correlacionados con las variables para determinar la influencia de éstas sobre las funciones de respuesta del sistema.

1.7 Descripción del problema

Son muchos y muy variados los factores que afectan el proceso de floculación, y por lo tanto los intentos en desarrollar modelos matemáticos que describan este proceso han sido a lo largo del tiempo de relativa aplicación práctica, especialmente cuando se pretende generalizar resultados y promover su aplicación en sistemas de tratamiento de agua, como resultado de esta investigación y análisis se obtiene un modelo matemático, que surge a partir de la observación de ensayos en un reactor de floculación para la eliminación de metales pesados provenientes de agua contaminada, se pretende describir el fenómeno de floculación ortocinética mediante la determinación de expresiones matemáticas que describan las funciones de crecimiento aglomeración y ruptura de flóculos, las cuales, de acuerdo a estudios preliminares desarrollados presentan una relación con el gradiente de la velocidad, el tiempo de agitación y el pH. El tiempo y el gradiente de velocidad son importantes en el proceso de floculación ya que influyen directamente sobre el tamaño de partícula generada; en un proceso de coagulación-floculación se pretende que el tamaño de partícula sea máximo, ya que esto facilita la separación de la fase sólida generada por sedimentación.

Por otra parte el pH es un factor prominente en acción desestabilizadora de las sustancias coagulantes y floculantes, ya que la solubilidad de los metales pesados es una función directa del valor de pH de la disolución, Por lo que esta variable del proceso será controlada en todo momento. El fenómeno de ruptura se ve favorecido con el incremento en la velocidad de agitación y con tiempos prolongados de agitación, mientras que la aglomeración y el crecimiento se ven favorecidos al disminuir la velocidad de agitación.

2. Análisis Crítico De Literatura

2.1 Metales pesados

Algunos metales tales como Arsénico, Cobalto, Germanio, Níquel, Rubidio y Vanadio juegan un importante papel en la vida de muchos organismos, no obstante que algunos metales son esenciales para la vida, un exceso de éstos pueden resultar en una amenaza para la salud humana y para el medio ambiente.

El proceso de remoción de metales pesados por precipitación química, normalmente se desarrolla mediante la insolubilización de los hidróxidos, posteriormente se procede a la floculación a fin de lograr una mejor separación de las fases sólidas y líquidas, este método es habitualmente empleado en las plantas potabilizadores y tratadoras de agua.

Las disoluciones a estudiar contienen: Cromo, Zinc, Níquel y Fierro, estos metales deben ser removidos de aguas residuales hasta un cierto grado, para satisfacer los requerimientos de la norma oficial mexicana NOM-002-ECOL-1996; La remoción de estos metales pesados por precipitación química, genera coágulos por la insolubilización de los hidróxidos metálicos, seguida de la adición de un agente coagulante, produce flóculos. Este sistema puede ser catalogado como un sistema particulado, ya que se integra de porciones de materia que pueden ser divididas, originando partículas más pequeñas, con propiedades y características que dependen, de su tamaño, velocidad y fuerzas a las cuales son sometidas.

La coagulación y floculación son dos procesos que se emplean en la remoción de los metales citados, ambos procesos se pueden resumir como una etapa en la cual las partículas se aglutinan en pequeñas masas llamados flóculos tal que su peso específico supere al del agua y puedan precipitar. La coagulación se refiere al proceso de desestabilización de las partículas suspendidas de modo que se reduzcan las fuerzas de separación entre ellas. La floculación tiene relación con los fenómenos de transporte dentro del líquido para que las partículas hagan contacto, esto implica la formación de puentes químicos entre partículas de modo que se forme una malla de coágulos, la cual sería tridimensional y porosa. Así se formaría, mediante el crecimiento de partículas coaguladas, un flóculo suficientemente grande y pesado como para sedimentar. El término coágulo se refiere a las reacciones que suceden al agregar un reactivo químico (coagulante) en agua, originando productos insolubles. La coagulación comienza al agregar el coagulante al agua y dura fracciones de segundo. (M. Moudgil, 1986)

2.2 Aspectos fisicoquímicos de la precipitación química

La estabilidad coloidal depende de la magnitud relativa de las fuerzas de atracción y repulsión entre las partículas, las que se muestran en la Figura 1 Las fuerzas de atracción son debidas a las fuerzas de van der Waals las cuales sólo son efectivas en el vecindad inmediato de la partícula coloidal. Las fuerzas de repulsión son debidas a las fuerzas electrostáticas de la dispersión coloidal.

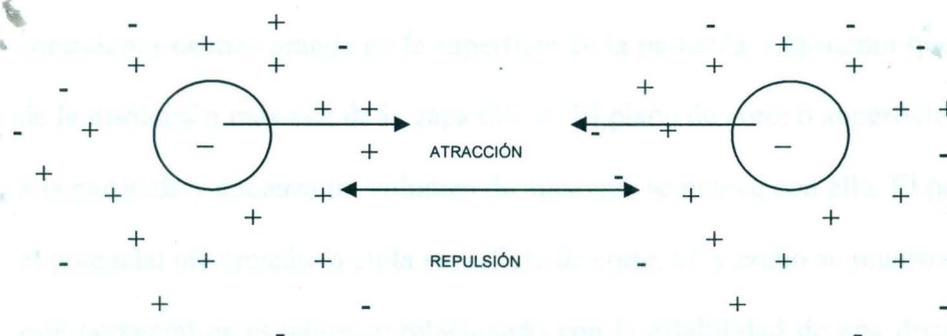


Figura 1 Representación esquemática de las fuerzas que actúan en coloides en una suspensión estable. (Hammer & Hammer, 2001)

Los sólidos coloidales de acuerdo a su afinidad por el agua pueden ser clasificados como hidrofílicos o hidrofóbicos, los coloides hidrofílicos tienen afinidad por el agua, esto se debe a la existencia de grupos solubles en agua en la superficie coloidal. Algunos de los principales grupos son el amino, carboxílico, sulfónico e hidroxílico. Algunos materiales coloidales, tales como gotitas de aceite y algunas otras sustancias químicas, preferentemente adsorben iones negativos, particularmente el ión hidroxilo del medio acuoso que la rodea, consecuentemente la partícula es cargada negativamente. En general, lo que más naturalmente ocurre con los coloides hidrofílicos es que adquieran una carga negativa si el pH está en o sobre el rango de pH neutro. Una partícula coloidal cargada negativamente puede atrapar iones de carga opuesta (contraiones) del medio acuoso que la rodea. La película compacta de contraiones es frecuentemente denominada "capa fija", en el lado de afuera de la capa fija, está la "capa difusa", tal y como se muestra en la Figura 2. Ambas capas pueden contener iones cargados negativa o positivamente; sin embargo, el número de iones positivos será

mayor que negativos. Las dos capas representan la región que rodea a la partícula donde hay un potencial electrostático generado por la misma partícula. La concentración de los contraiones es más grande en la superficie de la partícula y es menor que en el volumen de la disolución más allá de la capa difusa. El plano de corte o superficie de corte, rodea a la partícula y encierra un volumen de agua que se mueve con ella. El potencial zeta, es el potencial electrostático en la superficie de corte, tal y como se muestra en la Figura 2, este potencial es usualmente relacionado con la estabilidad de una dispersión coloidal. Cuando se agrega un coagulante al agua o agua residual, se produce la desestabilización de los coloides y los coágulos empiezan a formarse. Para ilustrar estas interacciones se proponen los siguientes mecanismos: 1) la reducción del potencial zeta a un grado en el que las fuerzas de *van der Waals* y la agitación lenta provocan que las partículas colapsen, 2) la agregación de las partículas ocurre mediante el establecimiento de puentes entre los grupos reactivos en la partícula coloidal y 3) durante la formación de los hidróxidos metálicos, ocurre un “*enmallamiento*” de los coloides negativos con el precipitado formado. Este tipo de coagulación es denominada “coagulación de barrido” (Reynolds, T., 1996).

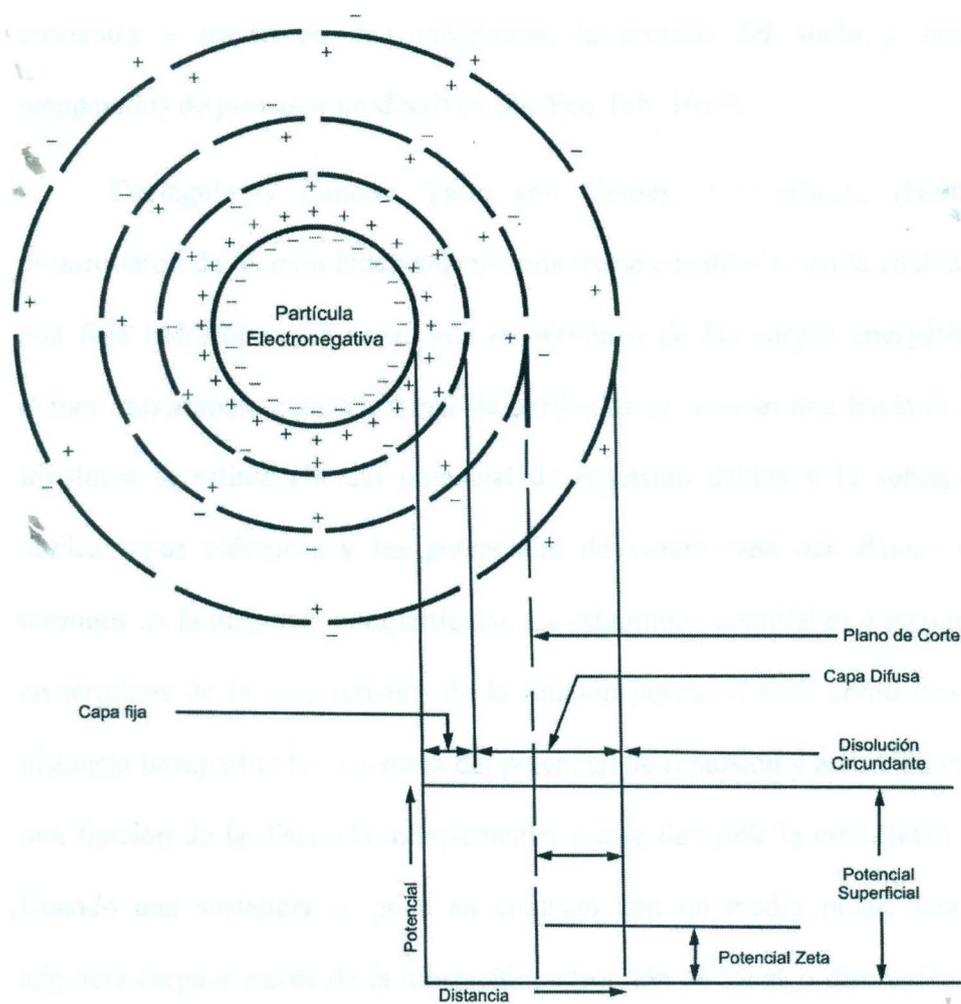


Figura 2 Representación de una partícula coloidal negativamente cargada y sus campos electrostáticos.

Los conceptos de coloide y química superficial en el contexto de la ciencia e ingeniería ambiental son de mucha importancia. Las cinco áreas más importantes son: atmósfera, hidrosfera, pedosfera, biosfera y litosfera, éstas se ven directamente impactadas por los coloides y la química superficial. Unos cuantos ejemplos obvios de éstos son el aerosol en el aire, los procesos de sedimentación en el agua, el transporte de

nutrientes a través de una membrana, la erosión del suelo y muchos recursos recuperados de procesos productivos (Fu Yen Teh, 1999).

Derjaguin y Landau, junto con Verney y Overbeek, (Hunter, R.J.1981) desarrollaron de manera independiente una teoría cuantitativa en la cual la estabilidad de una fase hidrofóbica es expresada en términos de las cargas energéticas, las cuales toman importancia cuando un par de partículas se acercan una hacia la otra. La teoría involucra la estimación del potencial de repulsión debida a la sobreposición de las dobles capas eléctricas y los potenciales de *London-van der Waals*; expresados en términos de la distancia intraparticular. La estabilidad coloidal es a menudo interpretada en términos de la característica de la función potencial total como una función de la distancia intraparticular. La suma del potencial de repulsión y atracción expresada como una función de la distancia intraparticular puede describir la estabilidad de un coloide. Cuando una sustancia se pone en contacto con un medio polar, ésta generalmente adquiere carga a través de la ionización, adsorción de iones o disolución de iones. Esta adquisición de carga influye en la distribución de carga de los iones vecinos y del medio polar. Los iones de carga opuesta, también llamados contraiones, son atraídos hacia la superficie, mientras los iones de carga semejante también denominados coiones son repelidos lejos de la superficie, lo cual puede observarse en la Figura 2.

En el tratamiento del agua las partículas a ser removidas son coloides y formas químicas en suspensión; para removerlas, deben ser desestabilizados mediante la coagulación. El grado de estabilidad de las partículas coloidales depende de la magnitud relativa de dos fuerzas: el potencial de repulsión y las fuerzas de *van der Waals* (Hunter, R.J. 1981).

Las fuerzas de *van der Waals* son la fuerza de atracción natural que mide la tendencia de las partículas para mantenerse juntas y formar grandes cantidades de un mismo material. En el momento que las fuerzas de *van der Waals* de atracción exceden el potencial de repulsión, la coagulación de partículas coloidales se produce y el coloide es desestabilizado. Hay cuatro caminos para comprender el proceso de coagulación: 1) comprensión del fenómeno de la doble película, 2) neutralización de carga, 3) partículas atrapadas en un precipitado y 4) puentes eléctricos entre partículas. Debido a que los coloides están cargados eléctricamente, partículas cargadas con cargas opuestas llamadas contraiones pueden rodearlos. Las cargas opuestas pueden a su vez rodearse por cargas opuestas (los contraiones de las cargas coloidales) y de esta manera se forma una película de doble capa eléctrica. Cuando la concentración de contraiones en una dispersión coloidal es pequeña, el espesor de la doble capa eléctrica es grande. Como una consecuencia de un mayor espesor de la doble capa eléctrica las partículas coloidales no pueden acercarse entre ellas, contribuyendo así a que el coloide se vuelva más estable. Cuando la concentración de contraiones es incrementada, más partículas coloidales cargadas pueden ser neutralizadas, ocasionando que la doble capa eléctrica se vea reducida. La capa es entonces denominada como "*comprimida*". La coagulación sucede en el momento que la capa es comprimida suficientemente y las fuerzas de *van der Waals* exceden las fuerzas de repulsión (Fu Yen Teh, 1999).

La carga de un coloide puede ser neutralizada directamente mediante la adición de iones de cargas opuestas que tienen la capacidad de adsorberse directamente en las superficies coloidales. Por ejemplo, el dodecilamonio cargado positivamente, tiende a ser hidrofóbico y como tal, penetra directamente a la superficie coloidal y lo neutraliza,

al pasar esto se adquiere carga negativa. Esto es denominado como *carga directa de neutralización*. Una característica de algunos metales tales como Al^{3+} y Fe^{3+} es la de formar precipitados cuando se les agrega al agua. En este tipo de precipitación, una partícula coloidal puede ser el sitio de nucleación, de esta forma atrapan al coloide en un precipitado. Electrolitos y polielectrolitos son utilizados como coagulantes, los electrolitos son materiales que cuando se colocan en disolución generan la conducción de la electricidad como una consecuencia de las cargas eléctricas que poseen. Los polielectrolitos son polímeros compuestos de más de un sitio electrolítico en la molécula, además los polímeros son cadenas largas de moléculas juntas en una molécula de gran tamaño. El poder coagulante de un electrolito se establece mediante la regla de *Schulze-Hardy*, la cual establece que la coagulación de un coloide es efectuada por un ión de un electrolito agregado, el cual tiene carga opuesta en signo de la partícula coloidal, el efecto de un ión semejante aumenta notablemente con el número de cargas eléctricas acarreadas. De esta forma, comparativamente al usar el $AlCl_3$ y el $Al_2(SO_4)_3$ en procesos de coagulación de coloides positivos, el sulfato es 30 veces más efectivo que el cloruro, debido a que el sulfato tiene dos cargas negativas mientras el cloruro sólo tiene una. En la coagulación de coloides negativos, sin embargo, los dos tienen aproximadamente el mismo poder de coagulación (Fu Yen Teh, 1999).

2.2.1 Fenómenos electroforéticos asociados al tratamiento de aguas

Se conocen cuatro tipos de fenómenos electrocinéticos los cuales son causados por diferentes efectos:

- Electroforesis. Se refiere al campo eléctrico en partículas con movimiento en una fase dispersa.
- Potencial de sedimentación. Es el que tienen las partículas inmersas en un campo gravitacional.
- Electroósmosis. Campo eléctrico en un tubo de pared o en una cama empacada con movimiento del medio.
- Potencial de flujo. Es el referido al movimiento de un medio en un tubo de pared o en una cama empacada con gradiente de potencial.

Con el objeto de provocar la agregación entre las partículas se deben tomar las medidas necesarias para la reducción de la carga superficial o bien superar el efecto neto de la misma, esto se puede conseguir mediante diferentes mecanismos, por ejemplo: la adición de iones que determinen el potencial, los cuales serán adsorbidos o reaccionarán con la superficie del coloide para reducir la carga superficial, o la adición de electrolitos que produzcan la reducción del espesor de la capa difusa y por tanto reduzcan el valor del potencial zeta. La adición de iones determinantes del potencial para favorecer la coagulación se evidencia mediante la adición de bases o ácidos fuertes que reduzcan a valores cercanos a cero la carga de los hidróxidos y óxidos metálicos, de modo que pueda tener lugar la coagulación y floculación (Metcalf & Eddy, 1999).

Tang Hong-Xiao y col. (1987) estudiaron el comportamiento de polimerización del ión Fe^{3+} en medio acuoso para formar complejos hidróxicos del tipo $\text{Fe}_x(\text{OH})_y^{(3x-y)+}$ de

esta manera se forma una especie en disolución con carga positiva hasta un valor de cinco. Asimismo en este trabajo se reporta el comportamiento del FeCl_3 en disolución para formar complejos entre el cloruro y el hierro para formar el FeCl^{2+} hasta FeCl_4^{1-} de esta forma las posibilidades de comportamiento de esta especie como coagulante es variada y de múltiples aplicaciones para la desestabilización de una dispersión coloidal.

Los complejos hidroximetálicos son polivalentes, poseen altas cargas positivas y son adsorbidos sobre la superficie de los coloides negativos. Esto resulta en una reducción del potencial zeta, hasta un nivel donde los coloides son desestabilizados.

Las partículas desestabilizadas con los complejos hidroximetálicos adsorbidos son agregados mediante la atracción interparticular debido a las fuerzas de van der Waals. Estas fuerzas son catalizadas por la agitación lenta del agua. (Reynolds, Tom, 1996)

Baltpurnivs y col. (1996), publica una herramienta de información útil para realizar la precipitación química de los metales pesados, la cual se denomina "el dominio de solubilidad de los metales", esto es a fin de precipitarlos como hidróxidos insolubles en fase acuosa, la utilización del principio del dominio de solubilidad permite mejorar la eficacia en el proceso de tratamiento por precipitación de hidróxidos metálicos tales como Zn^{2+} , Cr^{3+} , Ni^{2+} y Fe^{3+} . El control del valor de pH de la disolución acuosa permite controlar la solubilidad de los metales, por ejemplo a partir de un $\text{pH}=8$ la solubilidad del zinc como $\text{Zn}_4(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ disminuye abruptamente a valores menores a $0,1 \text{ mmol/L}$, y para el Fe^{3+} la formación del precipitado insoluble se da a partir de un $\text{pH}=4$, manteniéndose la concentración de Fe^{3+} en valores muy bajos hasta un $\text{pH}=11$, el

intervalo de pH estudiado fue de 2 a 11; lo que permite la realización de una remoción selectiva de los metales.

2.3 Modelos Teóricos de la Coagulación y de la Floculación

Existen dos modelos de la coagulación. El modelo físico o de la doble capa, basado en fuerzas electrostáticas de atracción y repulsión. El otro modelo es químico, llamado "puente químico", que relaciona una dependencia entre el coagulante y la superficie de los coloides.

Para la floculación existen también dos modelos: el primero es llamado ortocinético, el cual es promovido por agitación externa principalmente. Incluye partículas de tamaño superior al micrón y tiene relación con los gradientes de velocidad del líquido.

El segundo modelo se llama pericínético y se diferencia del primero en que su fuente de agitación es interna. Principalmente importarán el movimiento browniano y la sedimentación. Su efecto es sobre partículas de tamaño inferior a 1 micrón.

2.3.1 Mecánica del Proceso

La floculación se analiza como un proceso causado por la colisión entre partículas. En ella intervienen, en forma secuencial, tres mecanismos de transporte:

- 1) Floculación pericínética o browniana. Se debe a la energía térmica del fluido.
- 2) Floculación ortocinética o gradiente de velocidad. Se produce en la masa del fluido en movimiento.

3) Sedimentación diferencial. Se debe a las partículas grandes, que al precipitarse, colisionan con las más pequeñas, que van descendiendo lentamente, y ambas se aglomeran.

Al dispersarse el coagulante en la masa de agua y desestabilizarse las partículas, se precisa de la floculación pericinética para que las partículas coloidales de tamaño menor de un micrómetro empiecen a aglutinarse. El movimiento browniano actúa dentro de este rango de tamaño de partículas y forma el microflóculo inicial. Recién cuando este alcanza el tamaño de un micrómetro empieza a actuar la floculación ortocinética, promoviendo un desarrollo mayor del microflóculo. Este mecanismo ha sido estudiado en lugares donde la temperatura baja alrededor de cero grados, rango dentro del cual el movimiento browniano se anula y, por consiguiente, también lo hace la floculación pericinética. La floculación ortocinética es totalmente ineficiente y no tiene importancia alguna sobre partículas tan pequeñas. Bratby (1981) encontró que si los gradientes de velocidad en el agua son mayores de 5 s^{-1} y las partículas tienen un diámetro mayor de un micrómetro, el efecto de la floculación pericinética es despreciable.

Las primeras teorías sobre la cinética de la floculación fueron desarrolladas por Smoluchowski, (1917) quien derivó las expresiones básicas para la frecuencia de colisión de las partículas bajo el efecto del movimiento browniano y en régimen de flujo laminar, y desarrolló la siguiente expresión, que es representativa de la floculación pericinética.

$$J = \frac{1}{6} n_1 n_2 (d_1 + d_2) \frac{dv}{dz} \quad (1)$$

Donde:

J = número de colisiones entre las partículas

n_1 = concentración de partículas de diámetro (d_1)

n_2 = concentración de partículas de diámetro (d_2)

$\frac{dv}{dz}$ = Energía desarrollada en el proceso

Camp y Stein (1943), fueron los primeros en determinar que para fines prácticos, era necesario añadirle turbulencia al proceso y generalizaron la ecuación de Smoluchowski para incluir las condiciones de flujo turbulento. Así, de acuerdo con la expresión de Camp y Stein, la frecuencia de colisiones está expresada por la siguiente ecuación:

$$H_{ij} = \frac{4}{3} n_i n_j R_{ij}^3 G \quad (2)$$

Donde H_{ij} es el número de colisiones por unidad de tiempo y por unidad de volumen entre las partículas de radio R_i y R_j , n_i y n_j son las concentraciones de las partículas colisionantes; R_{ij} es el radio de colisión $R_i + R_j$ y G es el gradiente de velocidad que es igual a:

$$G = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \quad (3)$$

Donde:

ε = potencia total por unidad de volumen del fluido y

ν = viscosidad cinemática.

La principal objeción a la expresión de Camp y Stein, consiste en el hecho de que esta ecuación fue deducida para condiciones de flujo laminar y que pierde mucho de su

sentido físico cuando se la aplica a floculadores cuyo flujo es en su mayor parte turbulento, según expresaron Snel y Arboleda (1982).

A pesar de sus limitaciones teóricas, la ecuación de Camp y Stein, ha tenido amplia aplicación entre los ingenieros sanitarios y muchos investigadores la han encontrado válida bajo determinadas condiciones.

Formas integradas de la ecuación de Camp y Stein, para diferentes tipos de flujo fueron presentadas por Fair y Gemmell (1964), Tambo (1964), Swift y Friedlander (1963), Wang y otros (1966).

Smoluchowski, Harris y col. (1966), establecieron un modelo matemático para la velocidad de aglomeración de las partículas, dado por la ecuación (4), admitiendo que el volumen de la partícula resultante es igual a la suma de los volúmenes de las partículas aglomeradas y que su densidad permanece constante. A la menor de las partículas agregadas se la llama *partícula primaria* y su concentración por unidad de volumen es (n_1). Una fracción de las partículas que colisionan se aglomera, otra no lo hace y otras se pueden desaglomerar, de acuerdo con las características de las partículas, del coagulante y del flujo (por ejemplo, estabilidad de los coloides, esfuerzos hidrodinámicos).

En las ecuaciones que siguen se introducirá, por lo tanto, un coeficiente de aglomeración (n), que representa a la fracción del número total de colisiones realizadas con éxito. Los flóculos restantes están constituidos por las partículas i, j, k, \dots , cuyas concentraciones por unidad de volumen son n_i, n_j, n_k y sus radios $R_i=(1/3)R$, $R_j=(1/3)R$, $R_k=(1/3)R$, donde R es igual al radio del flóculos (Ecuación 5).

Inicialmente, para una suspensión dispersa, $t = 0$

$$\frac{dn_i}{dT} = -n\delta\alpha^3 \frac{dv}{dy} \phi n_1 \quad (4)$$

Donde:

(δ) es una función de la distribución de tamaños definida por:

$$\delta = \frac{\sum_{i=0}^{p-1} n_i [i^{1/3} + 1]^3}{\sum_{i=0}^p i n_i} \quad (5)$$

(a) es una relación entre el radio de colisión de un flóculo y su radio físico:

$$a = \frac{R_{ij}}{r_i i^{1/3} + j^{1/3}} \quad (6)$$

(ϕ) es una fracción del volumen del flóculo:

$$\phi = \frac{4}{3} \pi R_1^3 \sum_{i=1}^p i n_i \quad (7)$$

El gradiente de velocidad, dv/dy , el tamaño máximo de los flóculos está limitado a un flóculo de orden (p) . El modelo propuesto no permite la determinación del tamaño máximo del flóculo.

2.3.2 Sistemas particulados

Estudios realizados por Rwei y col. 1991, 1992, Lee y col., 1993, 1995, Bohin y col., 1996 y Tomokita, 1936 sobre la dispersión de aglomerados y partículas viscoelásticas en fluidos modelo y con condiciones de flujo simple, han conducido a la identificación de los mecanismos de desaglomeración por ruptura y erosión. Durante la ruptura, los aglomerados o partículas (parent particles) se rompen produciendo pocos

fragmentos (daughter fragments) de tamaño similar a los de las partículas de origen (parent particles). La reducción de tamaño es grande durante la ruptura. En la erosión, solo en caso de aglomerados, las partículas primarias se desprenden muy lentamente sobre la superficie de los aglomerados, es decir, la reacción ocurre en la superficie y de esta forma la reducción de tamaño se lleva a cabo progresivamente. En sistemas con aglomerados la ruptura aparece a velocidades de corte elevadas, mientras la erosión se observa a velocidades de corte pequeñas.

La ruptura de partículas viscoelásticas normalmente aparece cuando las fuerzas viscosas exceden a la tensión superficial de éstas. En sistemas con una concentración importante de aglomerados, por interacciones entre sí conducen a una re-aglomeración, como lo demostraron Potente y Flecke, 1997, mientras que en los sistemas que contienen muchas partículas viscoelásticas, la interacción mutua conduce a la coalescencia, asimismo, la aglomeración de copos, aglomerados muy irregulares, se conoce como floculación.

Resumiendo, tres mecanismos de dispersión intervienen en sistemas particulados industriales que es el caso de los floculadores para la separación de metales de aguas residuales: ruptura, erosión y aglomeración, la Figura 3 muestra los mecanismos de dispersión más conocidos. En sistemas industriales no solamente se utiliza una partícula o aglomerado, sino que se tiene un sistema con un gran número de partículas suspendidas.

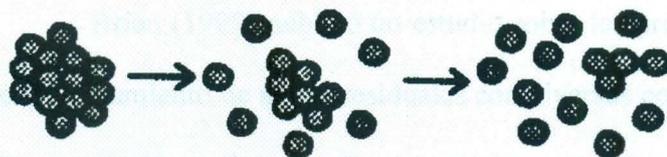
Partiendo de los trabajos realizados, los mecanismos de ruptura y erosión pueden ser identificados utilizando una población completa de aglomerados. Por ejemplo, en experimentos con tiempos de dispersión prolongados y velocidades de corte pequeñas, el mecanismo de erosión pudo ser deducido a partir de las DISTRIBUCIONES de tamaño

de partícula obtenidas experimentalmente. La reducción de tamaño de las partículas más grandes fue muy baja y fue observado un aumento en concentración de partículas primarias del sistema. Cuando el mecanismo de erosión tiene lugar, éste conduce a la formación de partículas primarias. Los aglomerados sólo pierden partículas de su superficie, así que estos últimos permanecen en el material. Además puede observarse también que, utilizando una población de aglomerados, el mecanismo de ruptura no conduce simplemente a un aumento de partículas primarias, sino también a un aumento de los aglomerados hijas (daughter agglomerates).

a)



b)



c)

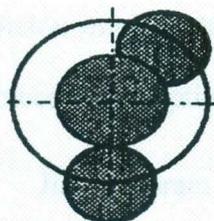


Figura 3. Principales mecanismos de dispersión: a) ruptura, b) erosión
c) aglomeración.

2.4 Estudios de modelación en sistemas particulados

Franceschi y col. (2002) reportan la optimización del proceso de coagulación-floculación utilizando para esto un diseño experimental en dos niveles de los factores inherentes al proceso; así, se reporta el uso de esta técnica para la remoción de dureza y la eliminación de turbidez de agua cruda para el consumo humano, los factores estudiados son: concentración inicial de calcio (mg/L), turbidez inicial (NTU), el uso de una determinada arcilla (kaolinita o bentonita), la temperatura del agua (°C), la concentración de ácido húmico (mg/L), la concentración de sulfato (mg/L) y el pH. Las condiciones del proceso son la velocidad de agitación, el tiempo de agitación y el tiempo de sedimentación, los valores nominales utilizados son: 40 rpm para la velocidad de agitación, 15 minutos para el tiempo de agitación y 20 minutos para el tiempo de sedimentación. La concentración de sulfato de aluminio depende grandemente de la concentración de ácido húmico y del pH.

Brian (1999) publicó un estudio sobre los procesos de coagulación y floculación en el tratamiento de aguas residuales con diversos contaminantes, incluyen la cinética de la coagulación y el desarrollo de modelos matemáticos que describen el proceso, en éste se reporta el uso de cloruro de hierro(III) como agente coagulante, se establece la condición mínima de potencial zeta en la disolución coloidal desestabilizada, a fin de establecer dosis óptimas de coagulante ya sea polimérico o sales inorgánicas.

Jiang y Gram (1998) observaron el desempeño del polisulfato de hierro y sulfato de hierro en un proceso de hidrólisis y precipitación en condiciones típicas de coagulación-floculación, estudiaron la rapidez de desarrollo del tamaño del flóculo, el potencial zeta y la estructura química de los precipitados.

En otros estudios realizados también por Guillard (2002) se realizó un diseño experimental para establecer las condiciones óptimas para la remoción de níquel mediante la precipitación química usando un reactor a escala de laboratorio empacado con "pellets", obteniéndose en este estudio las condiciones óptimas de tratamiento, se muestra el mapa de la superficie de respuesta para la concentración total de níquel en función de los cambios en los parámetros investigados (la relación carbonato/níquel, el pH, la concentración de níquel en la entrada, el número de puntos de alimentación y la razón de recirculación). Los tres primeros factores fueron más significativos en la eficiencia de remoción del metal; en las condiciones óptimas de trabajo se logró una remoción de 98%, se logró una reducción de níquel de 69,5 a 1,38 mg/L. Para la variable de respuesta (concentración final de níquel) se establecieron las condiciones óptimas de tratamiento: pH=9,97; relación de carbonato/níquel =3,5 y concentración inicial de níquel de 69,5 mg/L.

Al-Tarazi y col. (2004) desarrollaron un modelo matemático para caracterizar el proceso de precipitación de dos metales pesados, utilizando sulfuro de hidrógeno, el modelo de penetración de Higbie fue empleado en este estudio para calcular la transferencia del sulfuro gaseoso hasta la capa límite.

Kiparissides y Costas. (2005) desarrollaron un estudio para el modelamiento y optimización del proceso de polimerización de partículas, utilizando la ecuación de balance poblacional unificada, para dar seguimiento al tiempo de evolución de las propiedades de polímeros moleculares y microbiológicos. Utilizaron la colocación ortogonal en elementos finitos para dar solución a la ecuación de balance poblacional en un reactor batch de polimerización. Muestran la evolución dinámica de la distribución de

del tamaño de partícula en suspensión en el reactor de polimerización. Demostró que mediante la aplicación de la ecuación del balance poblacional, es posible calcular la distribución de tamaño de partícula y que mediante la descripción detallada de este parámetro, requiere un completo entendimiento de los mecanismos de nucleación, crecimiento y aglomeración de las partículas.

Aquilano y col. (2007) estudiaron un modelo de nacimiento y crecimiento para un proceso de cristalización, donde pudo observarse que el crecimiento es guiado por el gradiente de concentración. Se propone un modelo no lineal para la concentración, asimismo se propone una nueva formulación basada en la distribución de Schwartz mediante la unión y crecimiento de cristales y la difusión de la concentración. En el estudio se completa el modelo de crecimiento determinístico considerando la nucleación estocástica en espacio y tiempo.

Caboussat y Allison. (2008) proponen un modelo de aglomeración basado en ecuaciones diferenciales y una secuencia de optimización, para la simulación de la evolución de la población de partículas orgánicas de aerosol en un equilibrio interactivo a través de un medio común. Las condiciones óptimas de los problemas de optimización fueron recreadas con ecuaciones diferenciales que son discretizadas en el tiempo en un esquema implícito de primer orden. El sistema resultante de ecuaciones algebraicas no lineales fue resuelto a cada intervalo de tiempo con el método de Newton. Los resultados obtenidos para la evolución dinámica de la población de partículas atmosféricas de aerosol, se reportan para describir la evolución de las partículas de diferentes tamaños.

Haibo y Chuguang. (2008) estudiaron la evolución dinámica de la distribución de partículas a través de un precipitador electrostático, se describe cuantitativamente el proceso de recolección de partículas. La evolución de la distribución del tamaño de

partícula fue obtenida mediante la ecuación de balance poblacional. El estudio explora un método estocástico para resolver la distribución del tamaño de partícula, se basa en el concepto de partículas ficticias. La ecuación fue resuelta mediante el método Monte Carlo, los resultados obtenidos se ajustaron de buena forma a los datos experimentales.

Chouhnet y col. (2008) modelaron el comportamiento reológico de una suspensión de cemento y sílica, asumiendo que la agregación de partículas sucede, con dos parámetros independientes, que fueron: la variación de la viscosidad como una función de la velocidad de corte para suspensiones de cemento o sílica. El modelo reportado genera resultados que dan un buen ajuste a los datos experimentales. El modelo usado es consistente con las observaciones realizadas.

Seyssiecq y col. (1998) determinaron la cinética de aglomeración de "gibbsite" como una función de diferentes parámetros experimentales. Los factores estudiados en el proceso de cristalización fueron: temperatura, sobresaturación, masa de semilla, velocidad de agitación y tamaño de partícula.

Puel, y col. (2003) realizaron un estudio donde se monitoreó y controló los parámetros que caracterizan la forma y tamaño del cristal. Se desarrolló un modelo bidimensional de balance poblacional para simular las variaciones de tiempo de dos tamaños característicos de cristal. Las ecuaciones no lineales del balance poblacional fueron resueltas numéricamente tomando en cuenta el tamaño bidimensional, usando el método de clases. El desempeño del algoritmo de simulación fue exitoso logrando una buena reproducción de los datos experimentales observados.

Anders y William. (2007) reportaron los resultados de un estudio, en donde se empleó, la técnica de gradientes de difusión con mediciones por imagen densitométría

procesada por computadora, fue usado para estudiar "in situ", la distribución bidimensional de la distribución de sulfito produciendo micronichos en sedimentos de lagos que sufrieron eutrofización. Este estudio sugiere que la producción de sulfito en micronichos que introduce un gradiente local redox está comúnmente en sedimentos.

Rivallin y col. (2005) presentaron un estudio en un reactor sol-gel en el que se introdujeron soluciones de óxido de titanio, a través de un mezclador, utilizando un control de gases, un control de temperatura de los reactivos y la medición "in situ" del tamaño de las partículas mediante un detector de fibra óptica. La inyección rápida de toda la cantidad de reactivos provoca un corto tiempo de nucleación, y el rápido micromezclado elimina los gradientes de concentración, resultando en una alta nucleación local y velocidad de agregación. El reactor es usado para la producción de partículas de óxidos de titanio nanométricas. Los resultados de la cinética en el reactor, son reproducibles y están de acuerdo al modelo que describe el incremento promedio del tamaño de las partículas en los procesos de agregación lenta.

Livk y Llievski. (2007) reportaron un modelo de aglomeración macroscópica de kernel para demostrar que es capaz de describir la aglomeración de la gibsita, sobre un amplio rango de condiciones de proceso, incluyendo regimenes de flujo turbulento y laminar, el modelo de aglomeración de kernel fue derivado usando los principios de la ingeniería de las reacciones químicas y datos de un extenso programa experimental, que incluyo un amplio rango de temperaturas, sobresaturación, tamaños de semillas de nucleación, velocidades de corte y regimenes de mezclado. El modelo mostrado es útil para predecir los datos de los experimentos realizados.

Hollander y col. (2003), presentan un estudio numérico para escalar el comportamiento de la aglomeración ortocinética en tanques agitados, la simulación

“Large Eddy” de flujo, fue utilizado para obtener una descripción adecuada del flujo turbulento en los tanques agitados, el fenómeno de aglomeración ortocinética, fue realizada mediante el modelo no lineal de aglomeración propuesto por Mumtaz y col. En 1997. El desempeño del reactor fue simulado para tanques de 1 a 10000 L, se utilizaron tres reglas de escalado. Se encontró que la velocidad de corte del impulsor, el tamaño del tanque y el número de Reynolds tienen un pronunciado efecto sobre el desempeño del reactor.

De acuerdo a esta revisión, es posible asegurar que el modelo basado en la ecuación de balance poblacional, es la ecuación que más se utiliza para estudiar los sistemas con partículas de diversos tipos, así mismo la solución de la misma mediante diferentes métodos numéricos, son las herramientas tradicionalmente utilizadas; en la búsqueda de soluciones que impliquen métodos diferentes, para describir estos procesos, pero manteniendo un grado de confianza tal que podamos asegurar que los modelos obtenidos son consistentes, es que se plantea el uso de redes neuronales artificiales para describir el comportamiento del sistema en estudio, y contribuir a la función de la ciencia y los científicos para describir en forma simple el entendimiento del conocimiento nuevo y los fenómenos que ocurren en la naturaleza.

2.5 Simulación de procesos

La simulación de procesos, consiste en la representación de un proceso o fenómeno mediante un modelo lógico-matemático que lleva al entendimiento de un proceso, esto permite analizar sus características de diferentes maneras, la simulación del proceso es útil para llegar a un modelo matemático. La simulación de procesos es

una de las más grandes herramientas de la ingeniería, algunos tipos de simulación de procesos que se pueden realizar son la simulación de eventos discretos, la simulación mediante agentes y la simulación por discretización de ecuaciones diferenciales. (Fishman, 1978).

2.6 Modelos matemáticos para describir procesos

Hasta el siglo XI, era comúnmente aceptado que la naturaleza estaba regida por leyes matemáticas. A principios del XX la tesis es, que las leyes matemáticas son útiles para describir los fenómenos de la naturaleza. Este cambio nos lleva a plantear que las matemáticas son útiles para modelar la realidad, bajo determinadas condiciones (restricciones que impone el observador), la propia idea de modelación matemática de la realidad lleva aparejada las ideas de incertidumbre y de factibilidad de la resolución matemática de un fenómeno natural. El proceso de inducción que se produce en la búsqueda del modelo es básico para una buena descripción de la realidad. Para Perero (1994) la búsqueda de regularidades y propiedades comunes es básica. Como define Dreyfus (1991), "Cómo encontrar una representación matemática para un objeto o proceso no matemático, es construir una estructura o teoría matemática que incorpora las características esenciales del objeto o proceso. La estructura o teoría, el modelo, puede ser usado en orden a estudiar la conducta del proceso u objeto modelado.

Además hay que tener presente, como resalta Perero (1994), las conclusiones a las que se llega en el modelo son solo posibles (de ahí la incertidumbre) y pueden ser refutadas (de ahí la falibilidad) con otros datos. Con estos referentes se interpreto que un

modelo matemático es el resultado de la búsqueda de regularidades que subyacen en una situación no necesariamente matemática, a partir de unas conjeturas o suposiciones iniciales. El modelo da forma matemática a la situación lo que permite aplicar todas las reglas, procedimientos y procesos de las matemáticas (el razonamiento matemático), no crea una identificación entre ambos (no se debe confundir el modelo con la situación real), pero sí una correspondencia que permitirá interpretar los resultados del modelo en términos de la situación no matemática estudiada.

Tipos de modelos matemáticos:

- Modelo cuantitativo es aquel cuyos principales símbolos representan números. Son los más comunes y útiles en los negocios.
- Modelo cualitativo aquel modelo cuyos símbolos representan en su mayoría a Cualidades no numéricas. Una fuente importante es la teoría de conjuntos.
- Modelo Probabilístico aquellos basados en la estadística y probabilidades (donde se incorporan las incertidumbres que por lo general acompañan las observaciones de eventos reales).
- Modelo Determinístico corresponde a aquel modelo cuantitativo que no contiene consideraciones probabilísticas.
- Modelo Descriptivo cuando el modelo simplemente describe una situación del mundo real en términos matemáticos, descripción que puede emplearse para exponer una situación con mayor claridad, para indicar como pueden reajustarse o aún para determinar los valores de ciertos aspectos de la situación.

- Modelo Optimizador corresponde al modelo ideado para seleccionar entre varias alternativas, de acuerdo a determinados criterios, la más óptima.

Los modelos de cualquier clase, sin importar su refinamiento y exactitud, pueden probar ser poco prácticos si no están respaldados con datos confiables. Si se distorsionan las estimaciones, la solución obtenida, pese a ser óptima en un sentido matemático, en realidad será de calidad inferior desde la perspectiva del sistema real. En consecuencia, la disponibilidad de datos puede tener un efecto directo en la precisión del modelo.

La recopilación de datos puede ser la parte más difícil para determinar un modelo y desgraciadamente no se pueden sugerir reglas para este procedimiento.

Por lo general los modelos matemáticos son de índole iterativa, vale decir, se llega a la respuesta final en pasos o iteraciones y cada iteración acerca la solución al nivel óptimo, pero no todos los modelos matemáticos poseen algoritmos de solución que converjan al nivel óptimo por dos razones:

- El algoritmo de solución converge al nivel óptimo solo en teoría. La convergencia teórica señala que hay un límite superior finito, pero sin indicar cuan alto puede ser ese límite. Por lo tanto, se puede gastar horas y horas de computadora sin alcanzar la iteración final.
- La complejidad del modelo matemático puede hacer imposible idear un algoritmo de solución. Por lo tanto, el modelo puede mantenerse no factible en términos de cálculo (Ríos 1995).

2.6.1 El modelo neuronal biológico

La teoría y modelado de redes neuronales está inspirada en la estructura y funcionamiento de los sistemas nerviosos, donde la neurona es el elemento fundamental. En general, una neurona consta de un cuerpo celular más o menos esférico, de 5 a 10 micras de diámetro, del que salen una rama principal, el axón, y varias ramas más cortas, llamadas dendritas.

Una de las características de las neuronas es su capacidad de comunicarse. En términos generales las dendritas y el cuerpo celular reciben señales de entrada; el cuerpo celular las combina e integra y emite señales de salida. El axón transmite dichas señales a los terminales axónicos, que distribuyen información o un nuevo conjunto de neuronas, se calcula que en el cerebro humano existen del orden de 10^{15} conexiones.

Las señales que se utilizan son de dos tipos: eléctrica y química. La señal generada por la neurona y transportada a lo largo del axón es un impulso eléctrico, mientras que la señal que se transmite entre los terminales axónicos de una neurona y las dendritas de la otra es de origen químico. Para establecer una similitud directa entre la actividad sináptica y la analogía con las redes neuronales artificiales se puede considerar: Las señales que llegan a la sinapsis son las entradas a la neurona; estas son ponderadas (atenuadas o simplificadas) a través de un parámetro, denominado peso asociado a la sinapsis correspondiente. Estas señales de entrada pueden excitar a la neurona (sinapsis con peso positivo) o inhibirla (peso negativo). El efecto es la suma de las entradas ponderadas. Si la suma es igual o mayor que el umbral de la neurona, entonces la neurona se activa (da salida). Esta es una situación de todo o nada; cada neurona se activa o no se activa. La facilidad de transmisión de señales se altera

mediante la actividad del sistema nervioso. Las sinapsis son susceptibles a la fatiga, deficiencia de oxígeno y la presencia de anestésicos, entre otro. Esta habilidad de ajustar señales es un mecanismo de aprendizaje (Hilera y Martínez 2000).

2.6.2 Modelo de red neuronal artificial

El modelo matemático conocido como red neuronal artificial, es un modelo basado en observaciones cuyo objetivo es encontrar una ecuación matemática para un objeto o proceso no matemático, es decir construir una estructura o teoría matemática que incorpora las características esenciales del objeto o proceso. La estructura del modelo, puede ser usado en orden para estudiar la conducta del proceso modelado. Esto se interpreta como el resultado de las búsquedas de regularidades que subyacen en una situación no necesariamente matemática, esto quiere decir que están ocultas a través de otras situaciones, a partir de conjeturas es decir por juicios a través de observaciones ó suposiciones iniciales.

Algunos tipos de problemas que se pueden abordar con redes neuronales artificiales son: clasificación, regresión, aproximación y optimización, el tipo de problema de este trabajo de investigación se aborda con el uso de Redes Neuronales Artificiales de aproximación, debido a que se cuenta con un proceso no lineal el cual será descrito a través de un modelo matemático.

2.6.2.1 Fundamentos de redes neuronales artificiales

Alan Turing, en 1936, fue el primero en estudiar el cerebro como una forma de ver el mundo de la computación, pero quienes primero concibieron algunos fundamentos de la computación neuronal fueron el neurofisiologista Warren McCulloch y Walter

Pitts, quienes diseñaron y desarrollaron la primera neurona artificial en 1943, la tecnología con la que se contaba en la época fue un freno para el desarrollo de sus conceptos, después otras teorías iniciales fueron expuestas por Donald Hebb, fue hasta 1957 que Frank Rosenblatt comenzó el desarrollo del Perceptrón, la red neuronal más antigua.

Del año 1957 hasta 1982 el crecimiento en esta área se frenó, a partir de esta fecha surgieron investigaciones sobre redes como la de Marvin Minsky y Seymour Papert, después James Anderson desarrolló el Asociador Lineal, en Japón Kunihiro Fukushima y Teuvo Kohonen que se centraron en redes neuronales para el reconocimiento de patrones; en USA durante 1980 John Hopfield realizó importantes investigaciones. A partir del año 1985 comenzaron a consolidarse los congresos más importantes como Neuronal Networks for Computing, la Neural Information Processing Systems, entre algunas otras.

Actualmente, son numerosos los trabajos que se realizan y publican. Revistas como Neural Networks, Transactions on Neural Networks, entre otros, son las encargadas de la publicación de los últimos avances.

El Departamento de Defensa de los Estados Unidos, la Sociedad Europea de Redes Neuronales son algunos de los ejemplos del resurgir de la investigación sobre redes neuronales.

2.6.2.2 Elementos de una red neuronal artificial

Las redes neuronales artificiales (RNA) son modelos que intentan reproducir el comportamiento del cerebro, estos modelos realizan una simplificación, averiguando

cuáles son los elementos relevantes del sistema, bien porque la cantidad de información de que se dispone es excesiva o bien porque es redundante. Una elección adecuada de las características de la neurona artificial, además de la estructura (figura 4) donde se insertará, es el procedimiento convencional utilizado para construir redes capaces de realizar determinadas tareas.

Las características de la neurona artificial:

1. Unidad de proceso: Existen tres tipos de unidades en cualquier sistema: entradas, salidas y ocultas. Las unidades de entrada reciben señales desde el entorno; las de salida envían la señal fuera de la red, y las unidades ocultas son aquellas cuyas entradas y salidas se encuentran dentro del sistema. Se conoce como capa o nivel a un conjunto de neuronas cuyas entradas provienen de la misma fuente y cuyas salidas se dirigen al mismo destino.
2. Función de Activación. Los estados del sistema en un tiempo t se representan por un vector $A(t)$, los valores de activación pueden ser continuos o discretos, limitados o ilimitados. Si son discretos, suelen tomar un conjunto discreto de valores binarios, así un estado activo se indicaría con un "1" y un estado pasivo se representaría por un "0". En otros modelos se considera un conjunto de estados de activación, en cuyo valor entre $[0,1]$, o en el intervalo $[-1,1]$, siendo una función sigmoideal.
3. Función de Salida o de Transferencia. Esta función está asociada con cada unidad hay una función de salida, que transforma el estado actual de activación en una señal de salida. Existen cuatro funciones de transferencia típicas que determinan distintos tipos de neuronas:
 - Función Escalón

- Función Lineal y Mixta
- Sigmoidal
- Función Gaussiana.

2.6.2.2.1 Conexiones entre neuronas. Las conexiones que unen a las neuronas que forman una RNA tiene asociado un peso, que es el que hace que la red adquiera conocimiento. Se considera que el efecto de cada señal es aditivo, de tal forma que la entrada neta que recibe una neurona es la suma del producto de cada señal individual por el valor de la sinapsis que conecta ambas neuronas y es lo que se conoce como red de propagación. Se utiliza una matriz "w" con todos los pesos, si w_{ji} es positivo indica que la relación entre las neuronas es excitadora, es decir, siempre que la neurona "i" esté activada, la neurona "j" recibirá una señal que tenderá a activarla. Si w_{ji} es negativo, la sinapsis será inhibitoria. En este caso si "i" está activada, enviará una señal que desactivará a "j". Finalmente si w_{ji} es 0 se supone que no hay conexión entre ambas.

2.6.2.2.2 Función o regla de activación. Se requiere una regla que combine las entradas con el estado actual de la neurona para producir un nuevo estado de activación. Esta función (F) produce un nuevo estado de activación en una neurona a partir del estado que existía y la combinación de las entradas con los pesos de las conexiones. Esa (F) es denominada función de activación, y las salidas que se obtienen en una neurona para las diferentes formas de F serán:

- Función de Activación Escalón
- Función de Activación Identidad
- Función de Activación Lineal -Mixta
- Función de Activación Sigmoidal

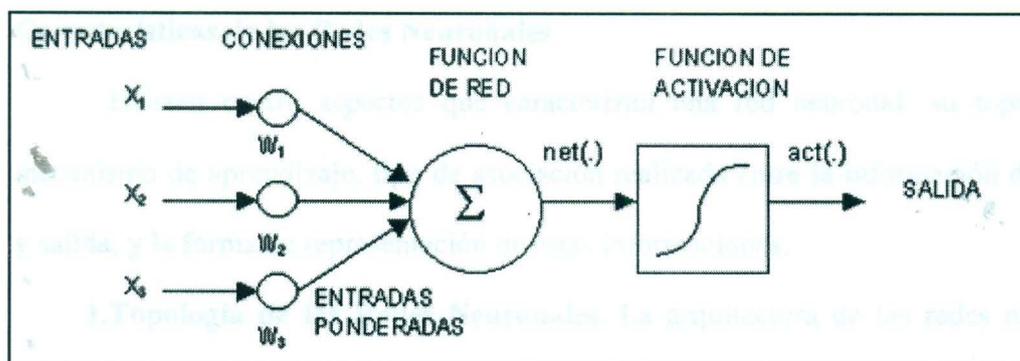


Figura 4 Estructura de red neuronal

2.6.2.2.3 Regla de aprendizaje. El aprendizaje puede ser comprendido como la modificación de comportamiento inducido por la interacción con el entorno y como resultado de experiencias conduce al establecimiento de nuevos modelos de respuesta a estímulos externos. En el cerebro humano el conocimiento se encuentra en la sinapsis. En el caso de las RNA el conocimiento se encuentra en los pesos de las conexiones entre neuronas. Todo proceso de aprendizaje implica cierto número de cambios en estas conexiones. En realidad, puede decirse que se aprende modificando los valores de los pesos de la red.

Anteriormente ya se estableció que la distribución de neuronas dentro de la red se realiza formando niveles o capas de un número determinado de neuronas cada una, y que existen capas de entrada, de salida, y ocultas, ahora veamos las formas de conexión entre neuronas.

Cuando ninguna salida de las neuronas es entrada de neuronas del mismo nivel o de niveles precedentes, la red se describe como de propagación hacia adelante.

Cuando las salidas pueden ser conectadas como entradas de neuronas de niveles previos o del mismo nivel, incluyéndose ellas mismas, la red es de propagación hacia atrás.

Características de las Redes Neuronales

Existen cuatro aspectos que caracterizan una red neuronal: su topología, el mecanismo de aprendizaje, tipo de asociación realizada entre la información de entrada y salida, y la forma de representación de estas informaciones.

1.Topología de las Redes Neuronales. La arquitectura de las redes neuronales consiste en la organización y disposición de las neuronas formando capas más o menos alejadas de la entrada y salida de la red. En este sentido, los parámetros fundamentales de la red son: el número de capas, el número de neuronas por capa, el grado de conectividad y el tipo de conexiones entre neuronas.

Redes Monocapa: Se establecen conexiones laterales, cruzadas o recurrentes entre las neuronas que pertenecen a la única capa que constituye la red. Se utilizan en tareas relacionadas con lo que se conoce como auto asociación; por ejemplo, para generar informaciones de entrada que se presentan a la red incompleta o distorsionada.

Redes Multicapa: Son aquéllas que disponen de conjuntos de neuronas agrupadas en varios niveles o capas. Una forma de distinguir la capa a la que pertenece la neurona, consiste en fijarse en el origen de las señales que recibe a la entrada y el destino de la señal de salida. Según el tipo de conexión, como se vio previamente, se distinguen las redes feedforward, y las redes feedforward/feedback.

2.Mecanismo de Aprendizaje. El aprendizaje es el proceso por el cual una red neuronal modifica sus pesos en respuesta a una información de entrada. Los cambios que se producen durante el proceso de aprendizaje se reducen a la destrucción, modificación y creación de conexiones entre las neuronas, la creación de una nueva conexión implica que el peso de la misma pasa a tener un valor distinto de cero, una conexión se destruye cuando su peso pasa a ser cero. Se puede afirmar que el proceso de

aprendizaje ha finalizado (la red ha aprendido) cuando los valores de los pesos permanecen estables ($dw_{ij} / dt = 0$). Un criterio para diferenciar las reglas de aprendizaje se basa en considerar si la red puede aprender durante su funcionamiento habitual, o si el aprendizaje supone la desconexión de la red. Otro criterio suele considerar dos tipos de reglas de aprendizaje: las de aprendizaje supervisado y las correspondientes a un aprendizaje no supervisado, estas reglas dan pie a una de las clasificaciones que se realizan de las RNA: Redes neuronales con aprendizaje supervisado y redes neuronales con aprendizaje no supervisado. La diferencia fundamental entre ambos tipos estriba en la existencia o no de un agente externo (supervisor) que controle el aprendizaje de la red.

Redes con Aprendizaje Supervisado. El proceso de aprendizaje se realiza mediante un entrenamiento controlado por un agente externo (supervisor, maestro) que determina la respuesta que debería generar la red a partir de una entrada determinada. El supervisor comprueba la salida de la red y en el caso de que ésta no coincida con la deseada, se procederá a modificar los pesos de las conexiones, con el fin de conseguir que la salida se aproxime a la deseada.

Se consideran tres formas de llevar a cabo este tipo de aprendizaje:

- Aprendizaje por corrección de error: Consiste en ajustar los pesos en función de la diferencia entre los valores deseados y los obtenidos en la salida de la red; es decir, en función del error.
- Aprendizaje por refuerzo: Se basa en la idea de no indicar durante el entrenamiento exactamente la salida que se desea que proporcione la red ante una determinada entrada. La función del supervisor se reduce a indicar mediante una señal de refuerzo si la salida obtenida en la red se ajusta a la

deseada (éxito=+1 o fracaso=-1), y en función de ello se ajustan los pesos basándose en un mecanismo de probabilidades.

- Aprendizaje estocástico: Este tipo de aprendizaje consiste básicamente en realizar cambios aleatorios en los valores de los pesos de las conexiones de la red y evaluar su efecto a partir del objetivo deseado y de DISTRIBUCIONES de probabilidad.

Redes con Aprendizaje No Supervisado. Estas redes no requieren influencia externa para ajustar los pesos de las conexiones entre neuronas. La red no recibe ninguna información por parte del entorno que le indique si la salida generada es o no correcta, así que existen varias posibilidades en cuanto a la interpretación de la salida de estas redes.

En algunos casos, la salida representa el grado de familiaridad o similitud entre la información que se le está presentando en la entrada y las informaciones que se le han mostrado en el pasado. En otro caso podría realizar una codificación de los datos de entrada, generando a la salida una versión codificada de la entrada, con menos bits, pero manteniendo la información relevante de los datos, o algunas redes con aprendizaje no supervisado lo que realizan es un mapeo de características, obteniéndose en las neuronas de salida una disposición geométrica que representa una tapa topográfico de las características de los datos de entrada, de tal forma que si se presentan a la red informaciones similares, siempre sean afectadas neuronas de salidas próximas entre sí, en la misma zona del mapa.

En general en este tipo de aprendizaje se suelen considerar dos tipos:

- **Aprendizaje Hebbiano:** Consiste básicamente en el ajuste de los pesos de las conexiones de acuerdo con la correlación, así si las dos unidades son activas (positivas), se produce un reforzamiento de la conexión. Por el contrario cuando una es activa y la otra pasiva (negativa), se produce un debilitamiento de la conexión.
- **Aprendizaje competitivo y cooperativo:** Las neuronas compiten (y cooperan) unas con otras con el fin de llevar a cabo una tarea dada. Con este tipo de aprendizaje se pretende que cuando se presente a la red cierta información de entrada, solo una de las neuronas de salida se active (alcance su valor de respuesta máximo). Por tanto las neuronas compiten por activarse, quedando finalmente una sola, o una por grupo, como neurona vencedora

3. Tipo de Asociación entre las Informaciones de Entrada y Salida. Las RNA son sistemas que almacenan cierta información aprendida; ésta información se registra de forma distribuida en los pesos asociados a las conexiones entre neuronas de entrada y salida. Existen dos formas primarias de realizar esa asociación de entrada/salida. Una primera sería la denominada hetero-asociación, que se refiere al caso en el que la red aprende parejas de datos $[(A_1, B_1), (A_2, B_2)... (A_n, B_n)]$, de tal forma que cuando se presente cierta información de entrada A_i , deberá responder generándola correspondiente salida B_i . La segunda se conoce como auto asociación, donde la red aprende ciertas informaciones $A_1, A_2...A_n$, de tal forma que cuando se le presenta una información de entrada realizará una auto-correlación, respondiendo con uno de los datos almacenados, el más parecido al de la entrada.

Estos dos mecanismos de asociación dan lugar a dos tipos de redes neuronales: las redes hetero asociativas y las redes autoasociativas. Una red heteroasociativa podría considerarse aquella que computa cierta función, que en la mayoría de los casos no podrá expresarse analíticamente, entre un conjunto de entradas y un conjunto de salidas, correspondiendo a cada posible entrada una determinada salida. Existen redes heteroasociativas con conexiones feedforward, feedforward/feedback y redes con conexiones laterales. También existen redes heteroasociativas multidimensionales y su aprendizaje puede ser supervisado o no supervisado.

Por otra parte, una red autoasociativa es una red cuya principal misión es reconstruir una determinada información de entrada que se presenta incompleta o distorsionada (le asocia el dato almacenado más parecido). Pueden implementarse con una sola capa, existen conexiones laterales o también auto recurrentes, habitualmente son de aprendizaje no supervisado.

4. Representación de la información de Entrada y Salida. Las redes neuronales pueden también clasificarse en función de la forma en que se representan las informaciones de entrada y las respuestas o datos de salida, por lo que en un gran número de redes, tanto los datos de entrada como de salida son de naturaleza analógica, cuando esto ocurre, las funciones de activación de las neuronas serán también continuas, del tipo lineal o sigmoideal. Otras redes sólo admiten valores discretos o binarios en su entrada, generando también unas respuestas en la salida de tipo binario. En este caso, las funciones de activación de las neuronas son de tipo escalón. Existe también un tipo de redes híbridas en las que las informaciones de entrada pueden ser valores continuos, aunque las salidas de la red son discretas.

Implementación de las Redes Neuronales

En la búsqueda de sistemas inteligentes en general, se ha llegado a un importante desarrollo del software, dentro de esta línea se encuentran algunos de los neurocomputadores más conocidos. Un neurocomputador es básicamente un conjunto de procesadores conectados con cierta regularidad que operan concurrentemente. En la actualidad ya existen una serie de neurocomputadores comerciales destinados a la realización de redes neuronales. Por otro lado la realización de RNA puede llevarse a cabo por medio de uno o varios circuitos integrados específicos, para así poder obtener una estructura que se comporte lo más similar posible a como lo haría una red neuronal.

Otra tecnología que podría ser apropiada en la implementación de las redes neuronales es la tecnología electro-óptica, con la ventaja de utilizar la luz como medio de transporte de la información, permitiendo la transmisión, masiva de datos.

La realización de redes neuronales más simple e inmediata consiste en simular la red sobre un ordenador convencional mediante un software específico. Es un procedimiento rápido, económico, e instituíble, pero su mayor desventaja radica en que se intentan simular redes con un alto grado de paralelismo sobre máquinas que ejecuten secuencialmente las operaciones. Valores intrínsecos de las redes neuronales no pueden obtenerse de esta forma.

Otro método es la realización de redes neuronales a través de arquitecturas orientadas a la ejecución de procesos con un alto grado de paralelismo, tales como redes de transposicionadores, arquitecturas sistólicas, etc. Este método es una optimización del anterior, ya que éste acelera el proceso, permitiendo una respuesta en tiempo real, pero el comportamiento real de la red sigue siendo simulado por una estructura ajena a la estructura intrínseca de una red neuronal.

Una tercera aproximación radicalmente distinta es la realización de redes neuronales mediante su implementación por uno o varios circuitos integrados específicos. Son los llamados chips neuronales. Las neuronas y las conexiones se emulan con dispositivos específicos, de forma que la estructura del circuito integrado refleja la arquitectura de la red. Se consiguen de esta forma realizaciones que funcionan a alta velocidad.

La comercialización de productos tipo software es la forma más extendida para simular redes neuronales, debido a las ventajas citadas anteriormente. La diferencia entre los distintos productos software radica en aspectos tales como el tipo y el número de arquitecturas de red que soporta, velocidad de procesamiento, interfase gráfica, exportación de código C para el desarrollo automático de aplicaciones, etc.

Algunos de los productos comerciales son: ANSim (DOS), Neural (DOS), ExpertNet (DOS, Windows), Neuralesk (Windows), Neuralworks Pro II/Plus (DOS, OS/2, UNIX, VMS); los paquetes computacionales de propósito especial han sido diseñados para implementar un modelo específico de red neuronal.

Otra forma de reproducir redes neuronales es mediante la implementación microelectrónica (VLSI), en general si la red ha estado previamente simulada y su configuración de conexiones perfectamente determinada, se busca la implementación sobre un circuito de conexiones fijas. La presentación del panorama que actualmente existe en el ámbito de la implementación VLSI de redes neuronales, resulta complicada por la gran cantidad de aportaciones existentes, tanto en soluciones analógicas como digitales y con la alternativa de matriz de neuronas o de sinapsis.

Ventajas de las Redes Neuronales

Debido a su constitución y a sus fundamentos, las RNA presentan un gran número de características semejantes a las del cerebro. Por ejemplo, son capaces de aprender de la experiencia, de generalizar de casos anteriores a nuevos casos, de abstraer características esenciales a partir de entradas que representan información irrelevante, etc. Esto hace que ofrezcan numerosas ventajas y que este tipo de tecnología se esté aplicando en múltiples áreas. Estas ventajas incluyen:

- **Aprendizaje adaptativo.** Es una de las características más atractivas de las redes neuronales, es la capacidad de aprender a realizar tareas basadas en un entrenamiento o una experiencia inicial. En el proceso de aprendizaje, los enlaces ponderados de las neuronas se ajustan de manera que se obtengan unos resultados específicos. Una RNA no necesita un algoritmo para resolver un problema, ya que ella puede generar su propia distribución de los pesos de los enlaces mediante el aprendizaje. También existen redes, que continúan aprendiendo a lo largo de su vida, después de completado el periodo inicial de entrenamiento.
- **Diseño a la medida.** La función del diseñador es únicamente la obtención de la arquitectura apropiada. No es problema del diseñador el cómo la red aprenderá a discriminar; sin embargo, si es necesario que desarrolle un buen algoritmo de aprendizaje que proporcione la capacidad de discriminar de la red mediante un entrenamiento con patrones.
- **Autoorganización.** Las redes neuronales usan su capacidad de aprendizaje adaptativo para organizar la información que reciben durante el aprendizaje y/o

la operación. Una RNA puede crear su propia organización o representación de la información que recibe mediante una etapa de aprendizaje. Esta autoorganización provoca la facultad de las redes neuronales de responder apropiadamente cuando se les presentan datos o situaciones a los que no habían sido expuestas anteriormente.

- Tolerancia a Fallas. Comparados con los sistemas computacionales tradicionales, los cuales pierden su funcionalidad en cuanto sufren un pequeño error de memoria, en las redes neuronales, si se produce una falla en un pequeño número de neuronas, aunque el comportamiento del sistema se ve influenciado, sin embargo no sufre una caída repentina. Existen dos aspectos distintos respecto a la tolerancia a fallas: primero, las redes pueden aprender a reconocer patrones con ruido, distorsionados, o incompleta, segundo pueden seguir realizando su función (con cierta degradación) aunque se destruya parte de la red. La razón por la que las redes neuronales son tolerantes a fallas es que tienen su información distribuida en las conexiones entre neuronas, existiendo cierto grado de redundancia en ese tipo de almacenamiento, a diferencia de la mayoría de los ordenadores algorítmicos y sistemas de recuperación de datos que almacenan cada pieza de información en un estado único, localizado y direccionable.
- Operación en Tiempo Real. Los computadores neuronales pueden ser realizados en paralelo, y se diseñan y fabrican máquinas con hardware especial para obtener esta capacidad.
- Fácil inserción dentro de la tecnología existente. Debido a que una red puede ser rápidamente entrenada, comprobada, verificada y trasladada a una

implementación con equipo de bajo costo, es fácil insertar RNA para aplicaciones específicas dentro de sistemas existentes (chips, por ejemplo). De esta manera, las redes neuronales se pueden utilizar para mejorar sistemas de forma incremental, y cada paso puede ser evaluado antes de acometer un desarrollo más amplio.

Aplicaciones de las Redes Neuronales

Las redes neuronales son una tecnología computacional emergente que puede utilizarse en un gran número y variedad de aplicaciones tecnológicas comerciales o militares.

Hay muchos tipos diferentes de redes neuronales, cada uno de los cuales tiene una aplicación particular más apropiada. Separándolas según las distintas disciplinas algunos ejemplos de sus aplicaciones son (Hilera y Martínez, 2000).

- **Biología:** Aprender más acerca del cerebro y otros sistemas, obtención de modelos de la retina.
- **Industria:** Reconocimiento de caracteres escritos identificación de candidatos para posiciones específicas, optimización de plazas y horarios en líneas de vuelo, explotación de bases de datos, evaluación de probabilidad de formaciones geológicas y petrolíferas, síntesis de voz desde texto.
- **Medio Ambiente:** Analizar tendencias y patrones, previsión del tiempo.
- **Finanzas:** Previsión de la evolución de los precios, valoración del riesgo de los créditos, identificación de falsificaciones e interpretación de firmas.

- **Manufactura:** Robots automatizados y sistemas de control (visión artificial y sensores de presión, temperatura, gas, etc.). Control de producción en líneas de proceso, inspección de calidad y filtrado de señales.
- **Medicina:** Analizadores del habla para la ayuda de audición de sordos profundos, diagnóstico y tratamiento a partir de síntomas y/o de datos analíticos (encefalograma, etc.), monitores en cirugía, predicción de reacciones adversas a los medicamentos lectoras de Rayos X y entendimiento de causa de ataques epilépticos.
- **Militares:** Clasificación de las señales de radar, creación de armas inteligentes, optimización del uso de recursos escasos.

Redes Neuronales y Control de Procesos

Lo que se hace en control es modelar, según los parámetros aprendidos en sistemas dinámicos, los sistemas para luego controlarlos, sin embargo en ese modelamiento se desprecian muchos datos debido a la alinealidad de los mismos, por ejemplo, al modelar un motor se desprecian datos como el desgaste de máquina, esos son valores importantes, pero al tenerlos en cuenta la solución de un sistema se haría imposible, así que se hace necesario despreciar esos términos, sin ellos el modelamiento funciona pero en la vida práctica no es tan preciso.

Ese problema se soluciona con redes neuronales, debido a las teorías anteriormente expuestas, si por ejemplo se modela un sistema de manera tradicional y luego este sufre variación alguna, los planteamientos iniciales ya no funcionan, con las redes neuronales eso ya no sucede, porque el sistema después de haber recibido patrones

iniciales comienza a identificar, acepta, aprende y responde ante diferentes señales. Sin importar que éstas no sean idénticas a los patrones iniciales.

De acuerdo a la información revisada, no se reporta el uso de modelos de redes neuronales para describir y simular los procesos de crecimiento, aglomeración y ruptura de flóculos en un sistema de tratamiento de aguas residuales para la remoción de metales pesados, esto representa la aportación de esta investigación a este campo de estudio.

Andrew V. Kalach (2005), utilizó una red neuronal artificial con entrenamiento para evaluar un sensor de calibración de cuarzo piezoeléctrico en la detección de hidrocarburos alifáticos de cadenas hidrocarbonadas de uno a tres carbonos (AN). El propósito de este estudio fue el análisis cuantitativo y cualitativo de los compuestos (AN), la preparación de las mezclas estudiadas fue realizada en un amalgamador termostático, el análisis fue hecho a 25°C. El análisis cuantitativo dio como resultado un sistema de multicomponentes simulando posibles aplicaciones de un ruido electrónico. Las mezclas de gas modeladas contienen una cantidad de compuestos (AN) de 5×10^3 a 7.5×10^2 g/m³. La sensibilidad de detección de los compuestos (AN) es de 1.5 a 2.3%. La combinación del arreglo neuronal y el sensor piezoeléctrico para la detección de estos compuestos, han resultado en la construcción de equipo analítico para la detección cuantitativa de mezclas complejas de gases.

Barragán Daniel (2001) usó una red neuronal en un sistema de reacciones químicas, aplicando las leyes de la termodinámica, se utilizaron las constantes cinéticas de las reacciones directas e inversas. Se usó una arquitectura para la red neuronal química de dos entradas, una salida con dos capas ocultas conteniendo dos neuronas con retroalimentación, a través de las cuales la información fluye en una sola dirección. La

red neuronal fue entrenada usando diferentes entradas hasta lograr el desarrollo de las operaciones lógicas deseadas, la capacidad de computación de la red fue evaluada utilizando entradas de información aleatorias. Cada neurona en esta red está representada por un reactor tanque agitado conteniendo el sistema de reacción química y las conexiones entre neuronas fueron realizadas mediante la medición de sus velocidades de flujo, la cual representa la señal de salida de la neurona y es controlada de acuerdo a la señal de salida de la capa de entrada. Con la información presentada se demostró que es posible representar numéricamente la producción de calotropía, asociada con las operaciones lógicas de una red neuronal. Específicamente se utilizó una arquitectura 2-1 y 2-2-1 con retroalimentación.

Sotolongo G. y col. (2001) hacen una introducción sobre las particularidades de las RNA, específicamente las basadas en el modelo Kohonen (Mapas auto-organizativos). Utilizando las bases teóricas de las redes neuronales artificiales como una herramienta práctica que permite realizar análisis exploratorios de datos o minería de datos vinculados con los indicadores bibliométricos, Lo importante en el desarrollo de la técnica de las RNA es su útil comportamiento al aprender, reconocer y aplicar relaciones entre objetos y tramas de objetos propios del mundo real. En este sentido, se utilizan las RNA como una herramienta para resolver problemas difíciles, se utilizó para ello el paquete computacional llamado Viscovery SOMine® que retoma, para su funcionamiento, el concepto y los algoritmos de los mapas auto-organizativos. Se hace evidente que las redes neuronales artificiales, específicamente las basadas en el modelo Kohonen, pueden ser aplicadas como una herramienta de análisis con múltiples propósitos, ya que se obtuvieron mapas de dependencia tecnológica por compañía y

mapas de desarrollos tecnológicos en la agricultura y su relación de dependencia del desarrollo económico de los países en América Latina. Por lo que se asegura que el vínculo de la Bibliometría con las redes neuronales se mostró muy fructífero.

Acosta y col. (2001), obtuvieron y analizaron un sistema de reacción de hidrólisis del anhídrido acético en un sistema continuo, compararon tres modelos: el modelo matemático basado en el balance de materia y energía en conjunto con la ecuación de velocidad, el modelo basado en redes neuronales tipo feedforward redes perceptrónicas multicapa (RNPM) y finalmente utilizaron redes neuronales de base radial (RNBR). Obteniéndose desviaciones con respecto al proceso real de menos de un 1.5% para el modelo matemático, menos de un 0.4% para el RNPM y finalmente menos de un 0.05% para el modelo de RNBR.

Muñoz Rodríguez y col. (2003) utilizaron un sistema óptico, para reconstruir la imagen de objetos en 3D, el sistema experimental estudiado consistió en un láser (fuente de luz), una cámara CCD que captura las desviaciones de todas las líneas de luz resultantes, posteriormente estas imágenes son alimentadas a una red neuronal artificial de aproximación, de una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida, sin retroalimentación y con entrenamiento, los resultados obtenidos por la RNA son comparados con los medidos con una máquina de medición de coordenadas, calculándose el error cuadrático medio (rms), el resultado del rms obtenido para la superficie del objeto es de 0.1721 mm.

Ampuero (2004) utilizó una red neuronal para solucionar problemas mutirespuesta, con el objetivo de mejorar la calidad de un sistema, para ello empleó una red neuronal con retroalimentación y entrenamiento mediante el algoritmo

backpropagation-training, comparó la respuesta obtenida para un sistema multivariable resuelto mediante regresión múltiple, con la obtenida en el mismo sistema pero con la aplicación de redes neuronales de forma directa e inversa, utilizó una red neuronal BP con arquitectura 6-5-3 para la red inversa y 3-5-6 para la red directa, esta última etapa con la finalidad de optimizar la respuesta del sistema multivariable, demostró que el uso de redes neuronales permite llegar a valores más cercanos a la realidad (valores objetivos) que cualquiera de los cuatro métodos de regresión múltiple comparada, en este trabajo se presenta una aplicación sobre una faja transportadora metálica para calentamiento y adhesión de conductores de circuitos integrados en placas de plástico. El calentamiento se da en un proceso continuo a través de una corriente de aire caliente (x_1), de la faja metálica a la temperatura (x_2), y de un bloque de calentamiento a alta temperatura (x_3). Se busca obtener la placa de plástico con los circuitos adheridos, pero las placas deben tener determinadas temperaturas, si se sobrepasa demasiado dichas temperaturas, las que representan los valores objetivos, las placas se pueden dañar; Estas condiciones de temperaturas deben alcanzar las placas en diversos puntos (valores objetivos) son: $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6$. La comparación entre los valores objetivos y los obtenidos mediante la aplicación de redes neuronales BP se muestra en la Tabla 1.

TABLA 1
COMPARACION DE VAORES OBJETIVOS Y OBTENIDOS MEDIANTE RNA
TIPO BP.

Valores	x_1 (ft ³ /min)	x_2 (°C)	x_3 (°C)	y_1 (°C)	y_2 (°C)	y_3 (°C)	y_4 (°C)	y_5 (°C)	y_6 (°C)
Objetivo	84.15	450	329.8	190	185	185	190	185	185
Obtenidos	74.75	482.96	322.07	188.34	181.71	184.86	195.51	175.30	190.83
% desv.	11.16	-7.32	2.34	0.87	1.77	0.07	-2.90	5.24	-0.03

Analizando los resultados mostrados en la tabla 1 se obtiene un % de desviación promedio absoluto de las variables mostradas de 3.52%, lo que significa una excelente capacidad de predicción del modelo de red neuronal utilizado; en esta aplicación se observa la ventaja de no requerir un modelo matemático que represente el sistema (como es el caso de los modelos estadísticos robustos conocidos) y que su empleo en sistemas de control de calidad requiere de instrucciones simples.

Delgado (2001) empleó una red neuronal artificial con arquitectura 3-4-1 en la medición de la eficiencia en la recolección de basura del sistema de limpieza de un grupo de municipios catalanes, comparó sus resultados con los obtenidos mediante métodos paramétricos (Econometría) y no paramétricos (Análisis Envoltante de Datos, DEA), para esto empleó como referencia el parámetro R^2 de los tipos de correlaciones obtenidas, para los métodos paramétricos obtuvo un valor de $R^2 = 0.9176$, para la red neuronal obtuvo un valor de 0.9854, con lo cual se puede concluir que el modelo de red neuronal se ajusta al 98.54% de los datos recolectados.

Acosta y col. (2000) emplearon redes neuronales para el estudio de un sistema de potencia, el objetivo de un sistema de potencia es suministrar a las barras de carga potencia activa y reactiva para su consumo conservando los niveles de voltaje dentro de límites establecidos; sin embargo los niveles de tensión en las barras están determinados por las condiciones del sistema, no obstante es posible realizar un control en el nivel de tensión inyectando reactivos en una barra remota, para controlar los niveles de tensión. Cuando se desea especificar el nivel de voltaje en una barra de carga PQ, esta barra se declara como tipo PQV, la barra donde se inyecta potencia reactiva que generalmente es de tipo PV se declara como tipo P, el problema de flujos de potencia está regido por ecuaciones no lineales, este sistema de ecuaciones habitualmente se soluciona mediante el método Newton-Raphson, en forma paralela se utilizó una red neuronal de propagación inversa o Backpropagation, que es una generalización para redes multicapa del algoritmo LMS se compararon dos arquitecturas una 3-10-1 y 4-12-1. Para el arreglo 3-10-1 se logró una convergencia de 6×10^{-6} en 50000 iteraciones, mientras que para la arquitectura 4-12-1 se logró una convergencia de 1×10^{-8} en 361 iteraciones.

García Estévez (2002) utilizó un algoritmo mediante una red neuronal supervisada para calcular el precio de una opción de compra de la compañía telefónica con datos históricos del mercado; el algoritmo conseguido se trasladó a una hoja de cálculo, para facilitar la utilización del mismo, para construir el algoritmo se han empleado seis variables, precio del ejercicio, volumen, "open interest", volatilidad, tiempo hasta el vencimiento y las primas de las "call" de telefónica, además de los valores de las primas de las opciones de compra sobre telefónica mismas que se definieron como valor objetivo, se utilizó una red neuronal de seis neuronas de entrada,

cuatro ocultas y una de salida. Las funciones de transferencia de las neuronas ocultas son del tipo tangente sigmoideas mientras que la función de transferencia de la neurona de la capa de salida es del tipo entidad, el algoritmo de aprendizaje es el Levenberg – Marquardt con parada temprana. La red fue capaz de calcular los precios de 596 contratos diferentes puestos al azar con una precisión del 98%, además encontró la relación no lineal que existe entre conjuntos de datos, por lo que los analistas pueden utilizarla para encontrar relaciones no estudiadas y realizar predicciones alternativas a las del mercado. En este caso el cálculo del precio de la opción viene dado por las relaciones que la red encuentra en las variables típicas utilizadas por el algoritmo Black Scholes más el volumen de contratos y el “open interest” una ventaja de este modelo sobre Black Scholes es la no utilización de la distribución normal estándar.

resulta: Campillo y col. (2005) aplicaron diferentes modelos de red neuronal a la solución de problemas de la química orgánica, especialmente en el campo de la química médica, la metodología empleada se integra dentro de las relaciones cuantitativas entre estructura y actividad (QSAR) o entre estructura y propiedades (QSPR), ambas muy utilizadas en química médica aprovechando la capacidad de predicción de las RNA, misma que se centra en la actividad biológica o propiedades ADMT de nuevos fármacos, se utilizó una estructura 4-3-1, la metodología de reducción de dimensiones proporciona una herramienta de gran utilidad en la predicción tanto de la actividad biológica como propiedades farmacocinéticas, estableciéndose por tanto como una manera sencilla y accesible de evitar costos innecesarios en el desarrollo de nuevas pruebas terapéuticas, se pudo predecir tanto la actividad biológica como otras propiedades tales como la absorción oral, mismas que fueron expresadas en forma numérica, el trabajo actual de este grupo se centra en la evaluación de otras propiedades

terapéuticas, también con el uso de la red neuronal obtenida, en este trabajo no se presenta una cuantificación de la actividad farmacológica, a pesar de que una de las ventajas de RNA es la evaluación numérica de cada variable.

Villada y col. (2008) propone un modelo perceptrón multicapas con conexión hacia delante en cascada tipo filtro Kalman, para el pronóstico del precio de la energía eléctrica en Colombia, se utilizaron dos estructuras de redes incluyendo como entradas la serie de precios diarios en la primera y la serie de precios más el nivel medio de los embalses en la segunda, la selección de la mejor estructura de red, se realizó considerando las siguientes medidas de evaluación dentro y fuera de la muestra: raíz del error medio cuadrático (RMSE), raíz del error medio cuadrático porcentual (RMSPE), error medio absoluto (MAE) y el error medio absoluto porcentual (MAPE), dichos resultados se compararon con un modelo autorregresivo condicional heterocedástico generalizado (GARCH) y con el modelo ARIMA encontrándose ventajas en este último dentro del período de muestreo, pero un mejor desempeño de las redes neuronales en el período fuera de la muestra. Los datos históricos se obtuvieron de la Compañía XM perteneciente al grupo ISA, de los cuales se usaron 120 días para el entrenamiento de la red y los 31 días del mes siguiente para verificación del pronóstico, se destaca que los modelos basados en redes neuronales son en general más fáciles de implementar; muestran además un buen desempeño, presentando un error absoluto dentro del conjunto de datos dentro de muestra de 3.8 y un rango de 0.7 y un error absoluto de 3.7 y rango de 0.3 para los datos fuera de muestra.

Solera (2005) realizó la estimación mediante redes neuronales artificiales (RNA) para pronosticar el valor de la inflación en Costa Rica, en su estudio construyó tres modelos de pronóstico ya que esta técnica de modelación es capaz de capturar relaciones

no lineales entre las variables, con lo cual se constituye en una poderosa alternativa en técnicas de regresión estándar para modelar y pronosticar series de tiempo. En la modelación de variables económicas por lo general se asume una relación lineal. El supuesto de linealidad, sin embargo, no se justifica cuando se identifican efectos asimétricos sobre el nivel de precios de la política monetaria. De los modelos elaborados dos utilizan como insumo, agregados monetarios esperando que éstos contengan información útil acerca de la inflación futura, dado que existe consenso en que la inflación en el largo plazo tiene un origen monetario, se demostró que los modelos de RNA tienen un mejor desempeño en la precisión del pronóstico que los modelos de periodicidad que habitualmente ha utilizado la división económica para pronosticar la inflación, de los modelos comparados solamente el modelo denominado "Ingenuo" no es superado, se emplea como parámetro de comparación el error cuadrático medio (RECM) mismo que tiene un valor de 0.86 para el modelo base empleado, además se probaron dos modelos alternativos mismos que arrojan valores de 1.24 para el de 4 neuronas y 1.05 para el de capa oculta adicional. Para los modelos actuales del Banco Central de Costa Rica los errores cuadráticos medios son: el modelo "Ingenuo" da un resultado de 0.71, el modelo de precios del petróleo da un valor de 1.83, el modelo "pass through" arroja un valor de 1.85, el modelo de mecanismos con un valor de 1.88, el modelo títulos de propiedad da un resultado de 2.02 y el modelo ARIMA un valor de 3.22, por otra parte, se amplió la gama de posibles modelos para analizar la evolución futura de la inflación y se incluyeron las variables monetarias, ausentes en los otros modelos de pronóstico.

De acuerdo a la revisión bibliográfica mostrada; los modelos de redes neuronales se han utilizado para encontrar correlaciones no lineales entre la respuesta de un proceso y los factores de los que depende éste, en procesos tales como: predicción de los índices de inflación, cálculo y predicción de los precios de energía eléctrica, predicción del comportamiento de un sistema de reacción química, evaluación de la eficiencia de proveedores de servicio, control de parámetros de calidad en procesos de manufactura, calibración de sensores químicos. **En el proceso particular de coagulación y floculación para remover metales pesados, no existe una aplicación reportada para el modelamiento dinámico de los mecanismos de crecimiento, aglomeración y ruptura de partículas en un reactor de floculación, para la remoción de metales pesados.** Por lo que en este estudio se propone una metodología para el modelamiento de estos fenómenos, mediante el uso de redes neuronales artificiales, las cuales tienen las siguientes ventajas: pueden ser aplicadas en sistemas complejos en los que influyen muchas variables y para los que no se conoce un modelo matemático o ley que los describa, pueden ser diseñadas con tantas estructuras como sean necesarias para robustecer al modelo, pueden someterse a rutinas de entrenamiento, las cuales proveen al modelo la capacidad para predecir el comportamiento del sistema fuera del intervalo de estudio. El modelo matemático en base a redes neuronales artificiales desarrollado en este estudio, permite: describir al proceso y la influencia que las variables tienen sobre el mismo, controlar el proceso ya que es posible definir las variables para generar determinados tamaños de partícula, simular condiciones de operación para conocer el comportamiento del sistema fuera de los rangos de las variables estudiadas; además con

los resultados generados mediante este modelo, se evitaría la realización de experimentos.

2.6.3 Autómata celular

Un autómata celular es una estructura matemática que modela a un sistema dinámico que evoluciona en pasos discretos. Es adecuado para modelar sistemas naturales que pueden ser descritos como una colección masiva de objetos simples que interactúan localmente unos con otros (Wolfram 1986 y Cipra 1996 / 2002).

Un autómata celular consiste de:

- Una rejilla o cuadrículado (malla) de enteros (conjunto Z) infinitamente extendida y con dimensión $d \in Z^+$, cada celda de la cuadrícula se conoce como célula.
- Cada célula puede tomar un valor en Z a partir de un conjunto finito de estados k .
- Cada célula además se caracteriza por su vecindad, un conjunto finito de células en las cercanías de la misma.
- De acuerdo con esto, se aplica a todas las células de la cuadrícula una función de transición que toma como argumentos los valores de la célula en cuestión y los valores de sus vecinos, y regresa el nuevo valor que la célula tendrá en la siguiente etapa de tiempo. Esta función f se aplica, como ya se dijo, de forma homogénea a todas las células, por cada paso discreto de tiempo.

Al momento de implementar un autómata celular en un sistema de cómputo es necesario, establecer una condición de frontera, esta condición puede ser del tipo abierta, periódica, reflectora o sin frontera. (Packard, Wolfram 1985).

3. Materiales y Métodos

En el presente caso de estudio se trabajó con disoluciones acuosas preparadas con metales pesados, a dos diferentes velocidades de agitación durante el proceso de floculación y se monitoreo con respecto al tiempo el tamaño de partículas, para obtener la distribución del tamaño de partícula, mediante microscopia óptica, para posteriormente alimentar estos datos a una estructura neuronal artificial capaz de reproducir el comportamiento encontrado. Se decidió investigar modelos matemáticos que permitirían describir el comportamiento del sistema experimental, es decir determinar una función que se ajuste a los datos o muestras experimentales que se obtuvieron al realizar el proceso de precipitación química. Se identificaron varios modelos para describir el tipo de proceso que se esta estudiando, entre éstos se encuentran, la regresión múltiple, el balance poblacional y las redes neuronales artificiales, estas estructuras, son de utilidad cuando se trata de encontrar tendencias, patrones de comportamiento, relaciones entre variables aparentemente no existentes a simple vista y presentan desviaciones importantes cuando se trata de encontrar un número como salida del proceso de cálculo, por lo que no sería posible predecir un número ganador en la lotería, ya que es un proceso totalmente al azar.

El trabajo experimental se estructuró en dos partes:

- Experimentos de laboratorio
- Simulación por computadora

3.1 Experimentos de Laboratorio

3.1.1 Pruebas preliminares

En la experimentación preliminar, se utilizó un equipo de prueba de jarras mostrado en la Figura 5, el cual cuenta con un sistema de agitación de paletas, donde pueden colocarse los vasos de precipitados que contienen la muestra para el tratamiento, el equipo puede controlar de manera muy precisa las velocidades y tiempos de agitación. Se prepararon las disoluciones a tratar utilizando para esto cloruro de zinc, cloruro de níquel, cloruro férrico y cloruro de cromo (III) en agua desmineralizada y destilada; la composición química del agua fue 447 ppm de Cr^{3+} , 200 ppm de Fe^{3+} , 27 ppm de Ni^{2+} y 750 ppm de Zn^{2+} a un valor de $\text{pH}=2.0$, ya que éste es el pH y la composición química típica de una agua residual generada en la industria galvánica. Se utilizó una disolución madre concentrada a fin de preparar las disoluciones con la concentración deseada, las corridas experimentales iniciaron con la adición de hidróxido de sodio para aumentar el pH de la disolución de trabajo hasta lograr un $\text{pH}=10$ mientras que se agitaba vigorosamente a 150 rpm, posteriormente se adicionó la sustancia coagulante: Sulfato de Aluminio, Cloruro Férrico, Sulfato Férrico y Sulfato Ferroso, los cuales se probaron cada uno por separado. En seguida se disminuyó la velocidad de agitación hasta 20 rpm y finalmente se neutralizó la disolución de nuevo hasta alcanzar el valor inicial del pH , 10; la agitación lenta se realizó durante 10 minutos, durante este intervalo de tiempo se tomó una muestra de las partículas generadas cada minuto, posteriormente se dejó sedimentar por espacio de 45 minutos y finalmente, al llegar a la etapa de compresión, fue posible separar el líquido de la fase sólida, el agua tratada se analizó utilizando el equipo de absorción atómica, para determinar el contenido de metales pesados presentes

y las curvas de sedimentación se determinaron utilizando una escala métrica graduada en centímetros y milímetros, observando la altura de la separación de fases sólida y líquida en el tiempo, las mediciones se realizaron durante 45 minutos totales, sin embargo a partir de 10 minutos la fase sólida ya no disminuyó sustancialmente su altura, las mediciones se realizaron midiendo la interfase sólido-líquido desde el fondo del vaso mismo que se muestra en la Figura 6, se realizó además un análisis de los sedimentos generados mediante microscopía óptica a fin de estudiar la cinética de la floculación, esta parte experimental se desarrolló empleando FeCl_3 como agente coagulante. Se tomaron 15 micrografías a 40 aumentos para cada diferente muestra de partículas tomada. Las 15 micrografías permitieron analizar al menos 1000 partículas para cada diferente muestra, el tamaño de los flóculos fue obtenido por análisis de imágenes en modo semi-automático.

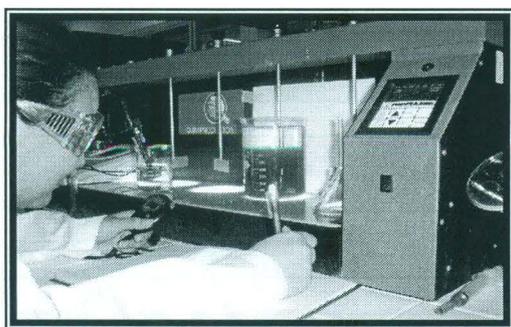


Figura 5 Equipo para pruebas de jarras

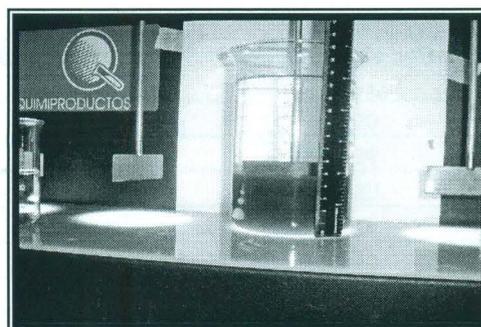


Figura 6 Prueba de sedimentación

3.1.2 Pruebas Experimentales

El trabajo experimental preliminar permitió determinar el tiempo óptimo de agitación, el cual, de acuerdo a los resultados de las pruebas preliminares se determinó como 7 minutos, se procedió a estructurar la segunda parte de la investigación experimental, en ella se buscó evitar la interacción ínter metálica y trabajar por separado con cada uno de los metales (zinc, fierro, cromo y níquel), modificando las velocidades de agitación, estableciéndose un valor para velocidad de agitación alta igual a 40 rpm y baja a 20 rpm, para así identificar los fenómenos de aglomeración y rompimiento por separado, en cada uno de los experimentos.

Se plantea una distribución de trabajo experimental que considere la variación en la velocidad de agitación, estas pruebas se muestran en la Tabla 2.

TABLA 2 TRABAJO EXPERIMENTAL

Prueba:	Solución metálica de:	Concentración (ppm)	Velocidad de agitación (rpm)
Fe 1	Fe ³⁺	200	20
Zn 1	Zn ²⁺	750	20
Ni 1	Ni ²⁺	30	20
Cr 1	Cr ³⁺	450	20
Fe 2	Fe ²⁺	200	40
Zn 2	Zn ²⁺	750	40
Ni 2	Ni ²⁺	30	40
Cr 2	Cr ³⁺	450	40

Cada prueba se procesó de acuerdo al siguiente procedimiento:

- 1) Se prepararon las disoluciones a tratar utilizando para esto cloruro de zinc, cloruro de níquel, cloruro férrico y cloruro de cromo (III) en agua desmineralizada y destilada; se utilizó una disolución madre concentrada a fin de preparar las disoluciones con la concentración deseada.

- 2) Las corridas experimentales inician con la adición de hidróxido de sodio para aumentar el pH de la disolución de trabajo hasta lograr un pH =10 mientras que se agita vigorosamente a 150 rpm.
- 3) Posteriormente se adicionó cloruro férrico como coagulante, en seguida se reduce la velocidad de agitación hasta 20 rpm y finalmente se neutraliza la disolución de nuevo hasta alcanzar un pH = 10.
- 4) La agitación lenta se realizó durante 7 minutos, y a intervalos de un minuto se toman muestras de partículas floculadas, para determinar su tamaño, se deja sedimentar por espacio de 25 minutos y finalmente se separa el líquido de la fase sólida.
- 5) Se realizó un análisis de los sedimentos generados mediante microscopía óptica a fin de estudiar la cinética de la floculación, durante el tiempo total de procesamiento.

Finalmente se repite todo el procedimiento modificando la velocidad de agitación de 20 a 40 rpm (inciso 3).

3.1.3 Procesamiento de las muestras

En total de cada prueba se obtuvieron siete muestras, una por cada minuto de mezclado, cada muestra se separa en cuatro partes, mismas que son fotografiadas en un microscopio óptico utilizando una lente con objetivo de 10x, de cada parte separada se toman 4 fotografías, cada una de ellas, se procesa utilizando el software "Image-Pro-Plus" para obtener la distribución del tamaño y número de partículas y el área de las partículas fotografiadas en cada imagen, misma que es reportada en forma de histograma y se guarda en un archivo con formato de Excel. Por lo que al final del procesamiento, se

obtendrán 224 histogramas, correspondientes a las distribuciones de tamaño de partícula para cada prueba realizada. Cada muestra procesada fue colocada en un portaobjetos en el microscopio óptico en todos los casos observados, seleccionando un área de observación del mismo tamaño, de $875 \times 700 \mu\text{m}$, lo cual permite aseverar que todas las muestras fueron observadas bajo las mismas condiciones.

3.1.4 Distribución del número de partículas por tamaño

Con los datos de número de partículas para cada tamaño, con respecto al tiempo, se realizó un ajuste matemático para encontrar una función que relacione el número de partículas con respecto a su tamaño, dada la naturaleza de las gráficas, se propuso la ecuación (8):

$$N_p = \frac{a}{T^b} \quad (8)$$

N_p = Número de partículas

a y b = parámetros característicos del modelo

T = Tamaño de partícula

Para determinar los parámetros a y b de cada muestra se utilizó la herramienta "Solver" de Excel, con la función error cuadrático medio, como criterio de convergencia. Para demostrar la bondad del ajuste realizado se calculó el coeficiente de correlación, dado por la ecuación (9):

$$R^2 = \frac{\sum (N_{p\text{-estimada}} - N_{prom})^2}{\sum (N_{p\text{-experimental}} - N_{prom})^2} \quad (9)$$

$N_{p\text{-estimada}}$ = Número de partículas estimadas por el modelo

N_{prom} = Número de partículas promedio de la muestra

$N_{p\text{-experimental}}$ = Número de partículas medidas experimentalmente

3.1.5 Modelación mediante redes neuronales artificiales

Una vez obtenidas las distribuciones en forma de histograma, esta información es utilizada para iniciar con la modelación, para ello se emplean redes neuronales artificiales (RNA); misma que se desarrolló empleando la herramienta computacional "Neural". El algoritmo de aprendizaje proporciona una forma de entrenar una red multicapa, para este caso se seleccionó un algoritmo de aprendizaje genético, los algoritmos genéticos (AG) son métodos adaptativos que pueden ser usados para resolver problemas de búsqueda y optimización. Matemáticamente, son procedimientos estocásticos de orden cero, que involucran el cálculo de los valores de una función dada pero no el de sus derivadas, una primera distinción importante entre AG de naturaleza diferente puede hacerse en base al reemplazamiento generacional, "generation gap" (gg), es decir, la fracción de individuos que en cada generación son sustituidos.

El tipo de red neuronal utilizada se denomina con aprendizaje supervisado, ya que se le proporciona a la red el valor de salida relacionado para las neuronas de entrada.

Aunque inicialmente se desarrollaron redes de una sola capa, lo más usual es disponer tres ó más capas: la primera capa actúa como buffer de entrada, almacenando la información suministrada a la red, para el caso del estudio las dos neuronas de entrada, representan respectivamente a la velocidad y al tiempo de agitación, para cada prueba del metal a remover, otra capa actúa como interfase o buffer de salida, almacenando la respuesta de la red, que para este caso vendrá a representar el factor de normalización para recalcular el número de partículas de cierto tamaño, y las capas intermedias, principales encargadas de extraer, procesar y memorizar la información, se denominan

principales encargadas de extraer, procesar y memorizar la información, se denominan capas ocultas y para el caso de la arquitectura probada en las pruebas a 20 rpm fueron 6 neuronas en dos capas ocultas mostrada en la Figura 7 y para las pruebas de 40 rpm, 8, 15 y 16 neuronas en dos capas ocultas, las conexiones entre una capa y otra son totales, es decir, que cada unidad se conecta con todas las unidades de la capa siguiente, siguiendo un patrón aleatorio, ya que se estableció un algoritmo genético de aprendizaje, la funciones de activación empleada es de tipo sigmoideal, por lo que antes de definir el valor de la respuesta de la estructura o neurona de salida, número de partículas, es necesario normalizar la respuesta, con valores entre cero y uno, se utilizó un error cuadrático medio de 0.01 como criterio de convergencia, para todas las corridas probadas, además para cada estructura probada se requería cierto número de iteraciones, en ocasiones con la arquitectura probada se excedía el tiempo de procesamiento (más de 24 horas), y la rutina de entrenamiento dejaba de ejecutarse, por lo que la arquitectura seleccionada, se eligió con base en el tiempo de procesamiento y la calidad del valor de salida.

En la Tabla 3 se muestra el listado de instrucciones para una corrida correspondiente a una de las pruebas de remoción que se realizó a 40 rpm, en ésta se declara a la red neuronal artificial con un algoritmo de aprendizaje genético "*layer init=genetic*", una arquitectura con dos neuronas de entrada "*n inputs=2*" (variables de entrada: tiempo y velocidad de agitación), una neurona de salida "*n output=1*" (número de partículas simuladas), dos capas ocultas con 16 neuronas cada una de ellas "*n hidden1=16*", "*n hidden2=16*". Los datos de entrenamiento son leídos del archivo "*entrenamiento.txt*", el criterio de convergencia se establece mediante la instrucción

“quit error=0.01”, mediante la instrucción “execute: prueba de entrenamiento.txt” se declara los valores de las neuronas de entrada, finalmente los resultados correspondientes al número de partículas distribuidas a lo largo del tiempo y para la velocidad de agitación serán generados en el archivo de texto “salidaentrenamiento.txt”

TABLA 3

LISTADO DE INSTRUCCIONES PARA UNA CORRIDA DE MODELACIÓN
MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

```

network model: layer
layer init: genetic
output model: general
n inputs: 2
n outputs: 1
n hidden1: 16
n hidden2: 16
train: entrenamiento.txt
quit error: 0.01
learn:
output file: salidaentrenamiento.txt
execute: pruebaentrenamiento.txt

```

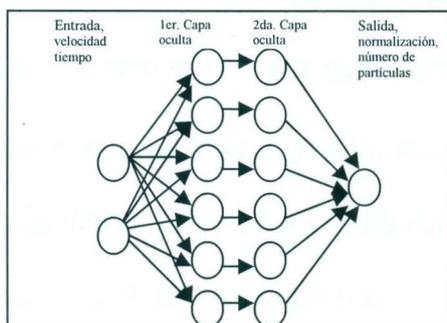


Figura 7 Estructura de Red Neuronal utilizada para experimentos a 20 rpm

3.1.6 Simulación de resultados mediante autómatas celulares.

Adicionalmente al modelo de red neuronal artificial, se probó un modelo matemático basado en un autómata celular probabilístico, donde el espacio y el tiempo son discretos, está definido como una malla unidimensional. Cada célula n en la malla,

está asociada una variable de estado h_n , que es interpretada como el tamaño de un floculo. Se consideran condiciones de frontera periódica, con un vecindario constituido para cada célula, de ella misma y de las dos células adyacentes, la estructura propuesta para el modelo se muestra en la Figura 8 (Sánchez, 2008).

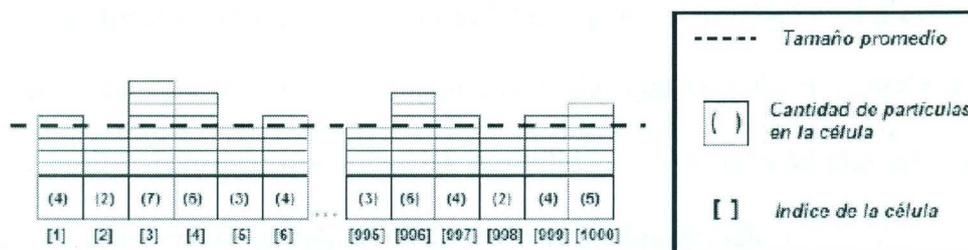


Figura 8 Estructura de autómata celular

Los valores unitarios de las células son llamados partículas y la interacción entre ellas consiste en repartir o recibir partículas. El estado en una célula puede cambiar por cualquier valor de una iteración a otra, dependiendo de una serie de reglas, estas reglas dictan el movimiento de las partículas que dependen del tamaño de los flóculos promedio (h_{prom}) el cual se utiliza también para cuestiones de uniformidad del sistema. Al inicio de la simulación se obtiene el estado inicial para el autómata, durante esta fase se distribuyen (N) partículas sobre las n células del autómata, de esta forma el promedio del tamaño de flóculos se define como $h = N/n$.

El modelo se maneja mediante dos parámetros, la velocidad de agitación (vel) y la fuerza de atracción (fc), estos serán tomados como probabilidades.

Se recorren las células una a la vez hasta completar un ciclo o tiempo de simulación (τ). En cada célula se compara el valor o tamaño de h con el promedio h_{prom} y dependiendo de los parámetros mencionados anteriormente, se reparten o

reciben partículas, $h\tau(n)$ representa el tamaño del flóculo en un ciclo de simulación (τ), en una célula (n), esta variable será evaluada por el autómata y comparada contra el valor promedio (h_{prom}).

Debido a que el autómata utilizado es de naturaleza probabilística, hay que definir todas las funciones de probabilidad utilizadas para la simulación. La evolución del autómata celular está dada por un conjunto de reglas que se definen a continuación, en donde es posible constatar que todas las posibilidades son consideradas de manera exhaustiva para cada una de las células dadas n y para cualquier ciclo τ .

Las reglas son:

$$\triangleright h\tau(n) > h_{prom}$$

1. Con probabilidad $1-fc(1-vel)$ la célula reparte todas las partículas por encima del promedio ($h\tau(n) - h_{prom}$) a sus dos vecinos, el número de partículas que recibe cada vecino es aleatorio.
2. Con probabilidad $fc(1-vel)$ la célula recibe una porción de las partículas de cada uno de sus vecinos.
3. Con una probabilidad $1-vel$ la célula n permanece sin cambios.

$$\triangleright h\tau(n) \leq h_{prom}$$

1. Con probabilidad vel la célula reparte una porción aleatoria de sus partículas a cada uno de sus vecinos, siempre y cuando ambos vecinos tengan una cantidad de partículas superior a h_{prom} .
2. Con probabilidad $1-vel$ el estado de la célula permanece igual.

De acuerdo a lo anterior podemos verlo como una cadena de Markov. Una cadena de Markov es una serie de eventos en la cual la probabilidad de que ocurra un evento depende del evento inmediato anterior. En efecto, las cadenas de este tipo tienen memoria, es decir, "recuerdan" el último evento y esto condiciona las posibilidades de los eventos futuros. Realizando una serie de operaciones para comprobar que las probabilidades son consistentes tomando como base las reglas anteriores obtenemos la ecuación (10):

$$[vel[(1 - fc(1 - vel)) + fc(1 - vel)] + (1 - vel)] + [(1 - vel) + vel] = 1 \quad (10)$$

Por otro lado es muy importante subrayar que el modelo es consistente con los casos límite conocidos para los modelos de balance poblacional dado por la ecuación (11):

$$\frac{\partial(c(x,t))}{\partial t} = v(x) - \mu(x) \quad (11)$$

El término $c(x,t)$ representa el cambio en la diferencia con respecto al estado inicial en el punto x (un punto en el espacio de una, dos o tres dimensiones) al tiempo t , el término $v(x)$ representa la tasa de creación de partículas (nacimiento) y $\mu(x)$ representa la tasa de aniquilación de partículas (muerte), esta ecuación es una versión de la ecuación de Boltzmann en donde las interacciones intermoleculares provienen de procesos de agregación y erosión.

Para el caso límite cuando $v \gg \mu$ corresponde a $vel \rightarrow 0$ y $fc \rightarrow 1$, es decir, eliminar el factor de la dispersidad y tomar la fuerza de unión más alta, esto ocasiona que las partículas tiendan a concentrarse en un subconjunto de células lo que se traduce en el aumento del tamaño de los flóculos.

Para el caso cuando $v \ll \mu$, es decir, $vel \rightarrow 1$ y $fc \rightarrow 0$, ocasiona que los flóculos tiendan a uniformizarse hasta llegar a un estado estable de tamaño de partícula, estos casos descritos son las situaciones extremas, sin embargo en casos intermedios es donde puede obtenerse información interesante y en general reproducible.

3.1.6 Optimización de los parámetros de velocidad y tiempo de agitación en el proceso de eliminación de metales pesados

El modelo de autómatas celulares puede emplearse para optimizar los parámetros del reactor, esta optimización se realiza evaluando las pendientes de los histogramas de distribución y seleccionando aquellas condiciones para las cuales la pendiente se maximiza, ya que bajo esas condiciones también el tamaño del flóculo se hace máximo.

3.1.7 Estudios en sistemas multimetalicos y con agua cruda.

La etapa experimental, fue realizada adicionalmente, en una disolución acuosa que contenía los cuatro metales estudiados, en los mismos niveles de concentración, que los estudios individuales, esta muestra se denominó mezcla 1, para una velocidad de remoción de 20 rpm y mezcla 2 para una velocidad de 40 rpm, así como a una muestra de agua residual cruda proporcionada por una compañía cromadora de la localidad que contenía los mismos metales en los mismos rangos de concentración, estas muestras, se identificaron como cruda 1, para una velocidad de remoción, de 20 rpm y cruda 2 para una velocidad de 40 rpm.

4. Resultados y Discusión

4.1 Efecto de las variables del proceso de tratamiento

En el trabajo experimental preliminar se buscó estudiar las características dinámicas del proceso de floculación en un reactor de remoción de metales pesados, en este tratamiento se utilizó la información sobre la solubilidad de los hidróxidos metálicos que se forman, ya que la solubilidad de éstos se ve afectada por el pH de la disolución, se ha reportado el valor de pH óptimo para la remoción de metales tales como Zn, Cd, Mn, y Mg de aguas residuales utilizando la precipitación y coagulación.

Los resultados del análisis del agua tratada obtenidos por medio de absorción atómica se presentan en la Tabla 4 Como puede verse el coagulante cloruro férrico muestra el mejor nivel de remoción de los metales estudiados. Tal como se ha mencionado en la parte experimental la concentración de los iones Cr^{3+} , Fe^{3+} , Zn^{2+} y Ni^{2+} en el agua sin tratar fueron 447, 200, 750 y 27 ppm, respectivamente, después del tratamiento utilizando FeCl_3 como coagulante la concentración de estos iones llega a ser 0.25 ppm para el Cr^{3+} , 0.37 ppm para el Fe^{3+} , 0.80 para Zn^{2+} y menos de 0.20 ppm para el Ni^{2+} . En general, la concentración en partes por millón (ppm) de los metales en el agua tratada fueron menores utilizando cloruro férrico y sulfato férrico, estos resultados nos permiten establecer la cantidad de agente coagulante que será utilizado en las pruebas experimentales.

TABLA 4.

RESULTADOS DEL ANÁLISIS QUÍMICO DE LAS AGUAS TRATADAS
REALIZADO MEDIANTE ABSORCIÓN ATÓMICA.

Corrida con Sulfato de Aluminio			Corrida con Cloruro Férrico		
Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)	Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)
Cr ³⁺	447	<0.20	Cr ³⁺	447	0.25
Fe ³⁺	200	0.66	Fe ³⁺	200	0.37
Zn ²⁺	750	19.64	Zn ²⁺	750	0.80
Ni ²⁺	27	<0.20	Ni ²⁺	27	<0.20
Corrida con Sulfato Férrico			Corrida con Sulfato Ferroso		
Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)	Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)
Cr ³⁺	447	0.35	Cr ³⁺	447	<0.20
Fe ³⁺	200	0.38	Fe ³⁺	200	0.26
Zn ²⁺	750	1.66	Zn ²⁺	750	1.13
Ni ²⁺	27	<0.20	Ni ²⁺	27	<0.20

De acuerdo al tamaño de los flóculos generados una vez terminada la agitación lenta para los diferentes coagulantes utilizados, se observó que el FeCl₃, usado como coagulante desarrolló los mejores niveles de remoción de cada uno de los metales pesados por separado, del agua a tratar, además, mostró una curva de distribución de tamaño de partícula más grande (coágulos más grandes) en el sedimento. En la Figura 9 se presentan muestras representativas de los precipitados generados con sulfato ferroso y cloruro férrico, los cuales mostraron los mejores niveles de remoción, como puede observarse en la Figura 9, el tamaño de las partículas generadas con cloruro férrico es mayor que las generadas con sulfato ferroso, los niveles de remoción y el mayor tamaño de partícula producida, fueron los criterios para seleccionar al cloruro férrico como la sustancia coagulante para el resto del estudio.

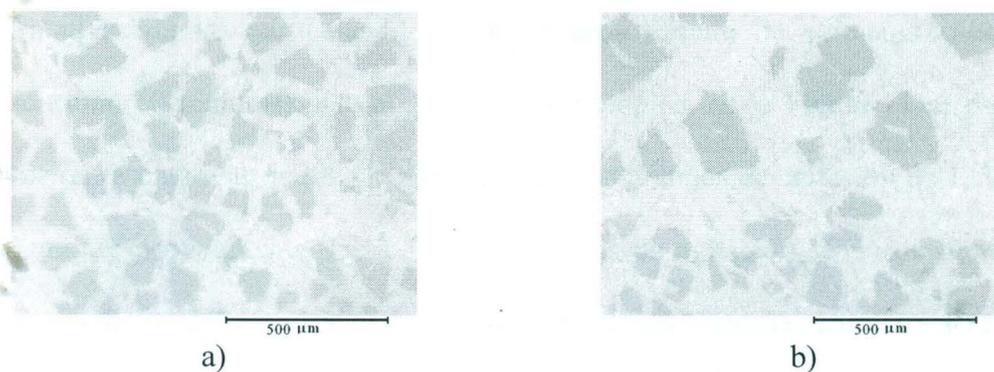


Figura 9 Coagulantes: a) sulfato ferroso, b) cloruro férrico

En la Figura 10 se muestran las curvas de sedimentación, de los cuatro coagulantes probados, a partir de estos resultados, puede observarse que el sulfato de aluminio muestra una curva de sedimentación con menor pendiente (sedimentación muy lenta del precipitado), que para el resto de los coagulantes.

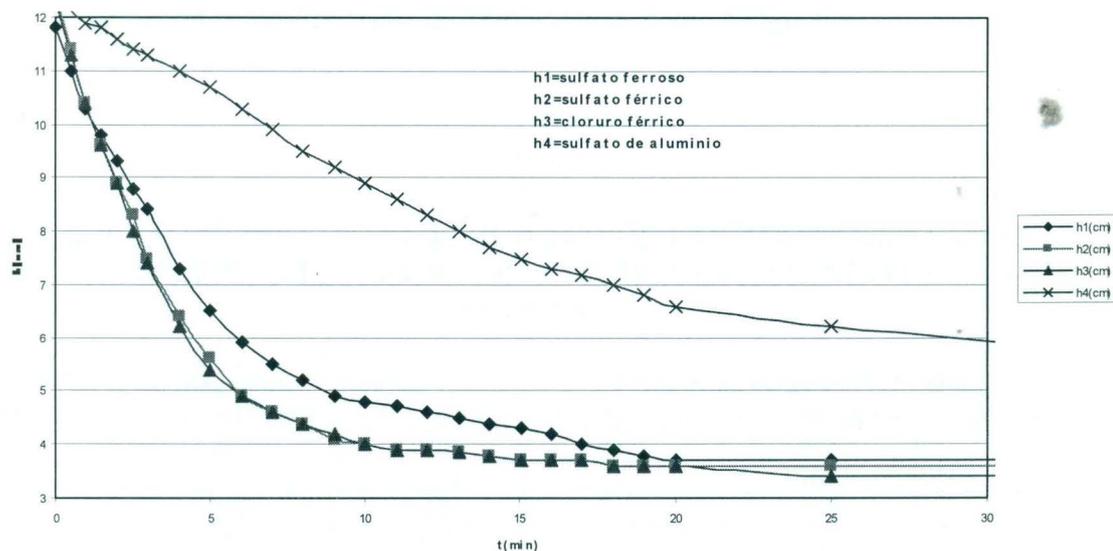


Figura 10 Curvas de sedimentación para las diferentes sustancias coagulantes

Las curvas de sedimentación del sulfato férrico y la del cloruro férrico son las que muestran una mayor pendiente (sedimentación más rápida). Además se estudió la cinética de floculación, para éstos en el reactor de remoción, se tomaron muestras

representativas de las partículas floculadas a cada minuto de agitación (tiempo de agitación total 10 minutos) para el análisis microscópico, en la Figura 11 se presentan muestras representativas de los precipitados para los tiempos de agitación de 1, 3, 5, 7 y 10 minutos respectivamente. De 1 hasta 7 minutos de agitación se puede observar el crecimiento de los flóculos, sin embargo comparando micrografías entre 7 y 10 minutos de agitación se observa que a 10 minutos los flóculos son más pequeños que a 7 minutos de agitación, lo cual significa que un excesivo tiempo de agitación conduce a un rompimiento de los flóculos. El análisis químico de las aguas tratadas a 7 y 10 minutos de agitación es presentado en la Tabla 5, los resultados muestran que a 7 minutos de agitación la remoción de los metales es ligeramente mejor que a 10 minutos, por lo que puede observarse que la remoción depende del tamaño de los flóculos obtenidos, además, tomando como referencia estos resultados es posible concluir que el tiempo óptimo de agitación es de 7 minutos utilizando FeCl_3 como coagulante.

TABLA 5

RESULTADOS DEL ANÁLISIS QUÍMICO DE LAS AGUAS TRATADAS
REALIZADO MEDIANTE ABSORCIÓN ATÓMICA UTILIZANDO FeCl_3 COMO
COAGULANTE.

FeCl_3 como coagulante (7 minutos)			FeCl_3 como coagulante (10 minutos)		
Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)	Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)
Cr^{3+}	447	<0.20	Cr^{3+}	447	0.25
Fe^{3+}	200	<0.20	Fe^{3+}	200	0.37
Zn^{2+}	750	0.25	Zn^{2+}	750	0.80
Ni^{2+}	27	<0.20	Ni^{2+}	27	<0.20

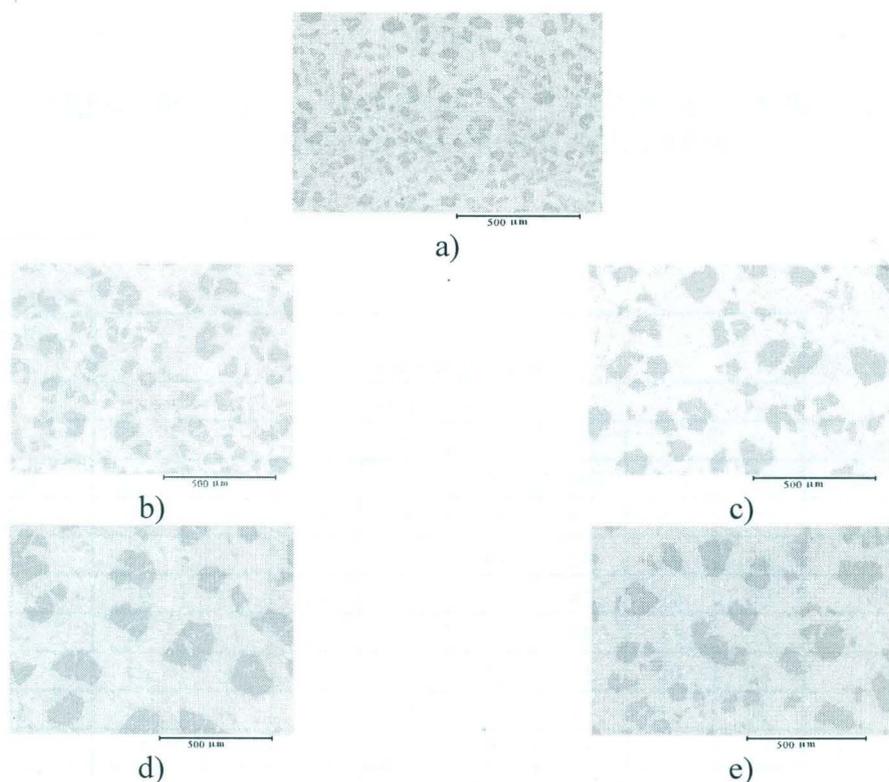


Figura 11 Micrografías representativas de los flóculos utilizando FeCl_3 como coagulante, a) 1 minuto de agitación, b) 3 minutos de agitación, c) 5 minutos de agitación, d) 7 minutos de agitación, e) 10 minutos de agitación.

4.2 Distribución del tamaño y número de partículas, en disoluciones

monometálicas

A continuación se muestran las Tablas 6 a 13, los resultados correspondientes a los histogramas obtenidos de los análisis de imágenes mediante microscopía óptica, procesados en el software “*ImagePro*”, para la remoción del Cr^{3+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} y Zn^{2+} , realizada primero a 20 rpm y posteriormente a 40rpm.

TABLA 6

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA DE REMOCIÓN DE CROMO A 20 RPM

Prueba Cr1	tamaño, μm	Número de partículas							promedio	
		tiempo, minutos								
		1	2	3	4	5	6	7	10	
	≤ 20	283	255	202	196	196	240	304	200	235
	25	51	59	46	45	68	86	77	77	64
	30	37	35	35	20	40	54	49	70	43
	35	19	21	15	40	31	40	42	69	35
	40	25	14	12	11	23	28	21	35	21
	45	14	10	10	13	25	21	20	38	19
	50	12	9	8	15	7	18	18	27	14
	55	11	10	9	5	8	11	17	17	11
	60	6	3	4	8	7	13	14	16	9
	65	5	6	4	4	2	13	5	19	7
	70	4	4	4	6	3	14	4	16	7
	75	6	8	5	6	0	5	5	6	5
	$80 \geq 100$	3	4	2	3	3	6	4	4	

Es posible observar en la Tabla 6 y en la Figura 12, la manifestación del fenómeno de aglomeración de partículas primarias a partir del minuto cero y hasta el minuto 5, el crecimiento de los aglomerados es manifiesto a partir del minuto 5 y hasta el minuto 7, estos resultados son coherentes con lo esperado dado que la baja velocidad de corte permite que las fuerzas cohesivas predominen sobre las de ruptura, incluso al finalizar la agitación y hasta la conclusión de la prueba (minuto 10) se observa una súbita disminución en el número de partículas primarias y a pesar que se detectan menos partículas, estas son de un tamaño mayor ($100\mu\text{m}$) resultado de las fuerzas intermoleculares atractivas, ya que hay ausencia de velocidad de corte, como consecuencia se presenta aglomeración pericinética (Smoluchowski, 1917).

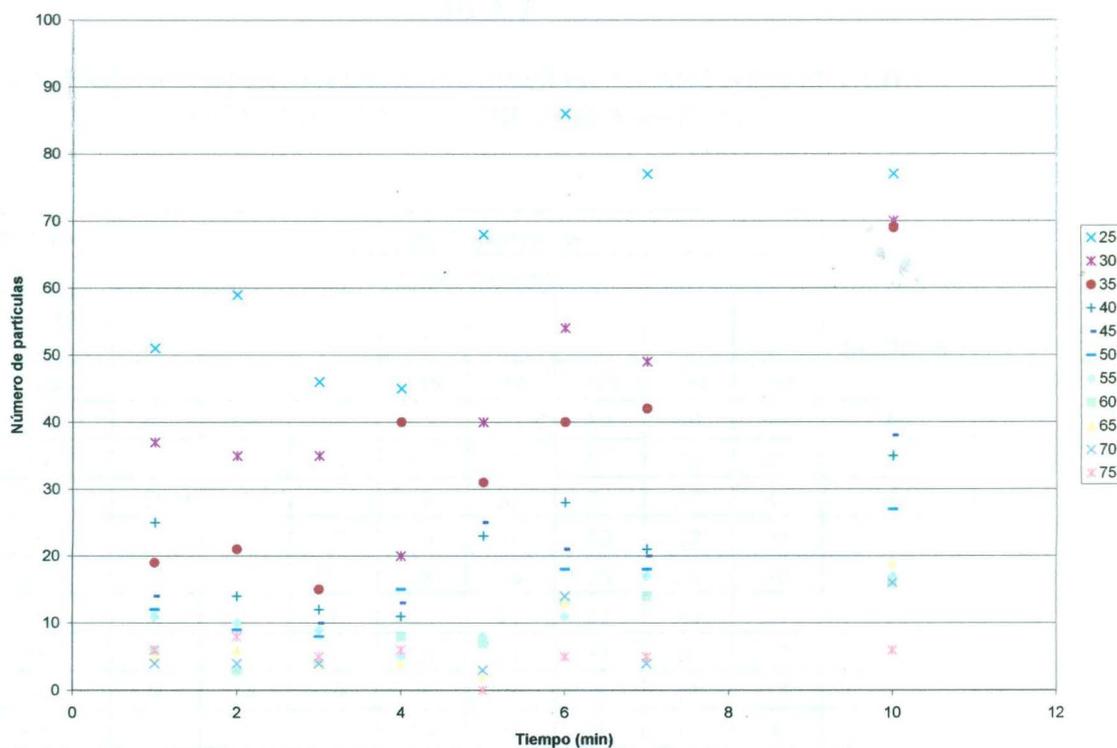


Figura 12 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Cr 1.

Puede observarse en la Tabla 7 y en la Figura 13, que para esta prueba el fenómeno de aglomeración ortocinética de partículas primarias se manifiesta desde el minuto 1 de tiempo de prueba y hasta el minuto cuatro, de hecho es posible observar que a partir de este momento se manifiesta principalmente rompimiento de las partículas que han logrado aglomerarse, dado que hay un incremento considerable de las partículas primarias a partir de este tiempo, y una vez que se ha dejado de agitar, las partículas se reaglomeran y crecen alcanzando un tamaño de partícula de $80\mu\text{m}$ menor que en el caso de la prueba a 20 rpm, lo cual es consecuencia del incremento en la velocidad de corte de esta prueba realizada a 40 rpm.

TABLA 7

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA
DE REMOCIÓN DE CROMO A 40 RPM

Prueba Cr2	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	315	291	277	246	290	275	294	246	279
25	61	69	63	75	52	84	59	73	67
30	33	47	44	60	27	54	38	68	46
35	29	35	30	48	35	24	27	43	34
40	17	33	17	37	16	30	22	25	25
45	18	15	23	28	14	20	20	20	20
50	8	17	9	22	13	21	10	21	15
55	6	10	10	20	11	18	10	17	13
60	9	14	13	9	5	8	13	16	11
65	4	10	5	14	6	9	13	8	9
70	4	9	7	13	4	4	7	8	7
75	4	5	8	7	8	5	6	2	6
$80 \geq 100$	5	4	6	6	3	4	4	6	

TABLA 8

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA
DE REMOCIÓN DE FIERRO A 20 RPM

Prueba Fe1	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	223	247	251.67	278	275	307	195.67	307	261
25	22	46	61	40	53	44	49	41	45
30	24	30	36	26	32	29	32	28	30
35	17	35	24	26	29	22	20	5	22
40	10	23	15	16	16	13	19	16	16
45	10	20	16	7	12	7	11	8	11
50	8	9	13	12	12	5	9	7	9
55	0	8	10	6	3	9	9	7	7
60	5	6	8	10	6	3	5	3	6
65	0	8	10	4	9	6	9	2	6
70	0	11	4	6	4	3	4	1	4
75	7	6	5	12	18	9	7	2	8
$80 \geq 100$	3	4	2	4	3	2	2	1	

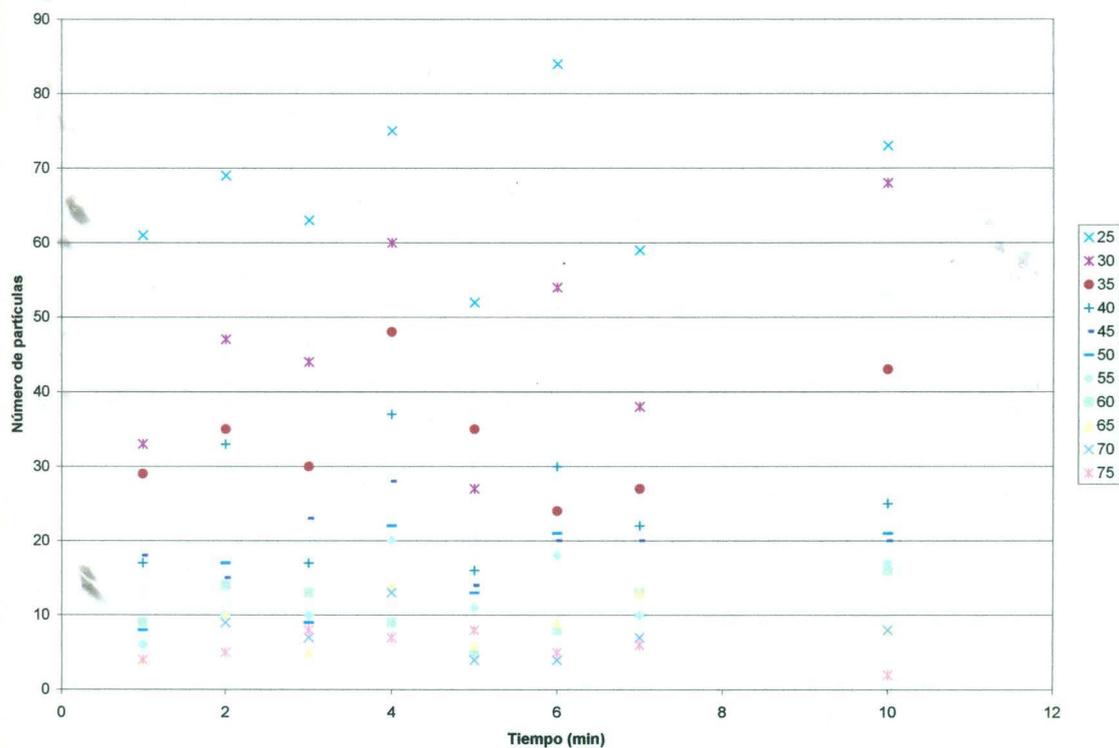


Figura 13 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Cr2.

De acuerdo a los resultados mostrados en la Tabla 8 y en la figura 14, en esta prueba desde tiempo un minuto y hasta el minuto cinco puede identificarse la aglomeración ortocinética, y desde el minuto cinco y hasta que se deja de agitar en el minuto 7, el fenómeno de crecimiento es identificable ya que aparecen más partículas con un tamaño mayor a $40 \mu\text{m}$, permaneciendo entre 4 y 7 minutos, en un tamaño promedio (de 45 a $100 \mu\text{m}$), de hecho el objetivo de manejar esta velocidad de agitación, con bajo esfuerzo de corte, era permitir la manifestación del fenómeno de crecimiento.

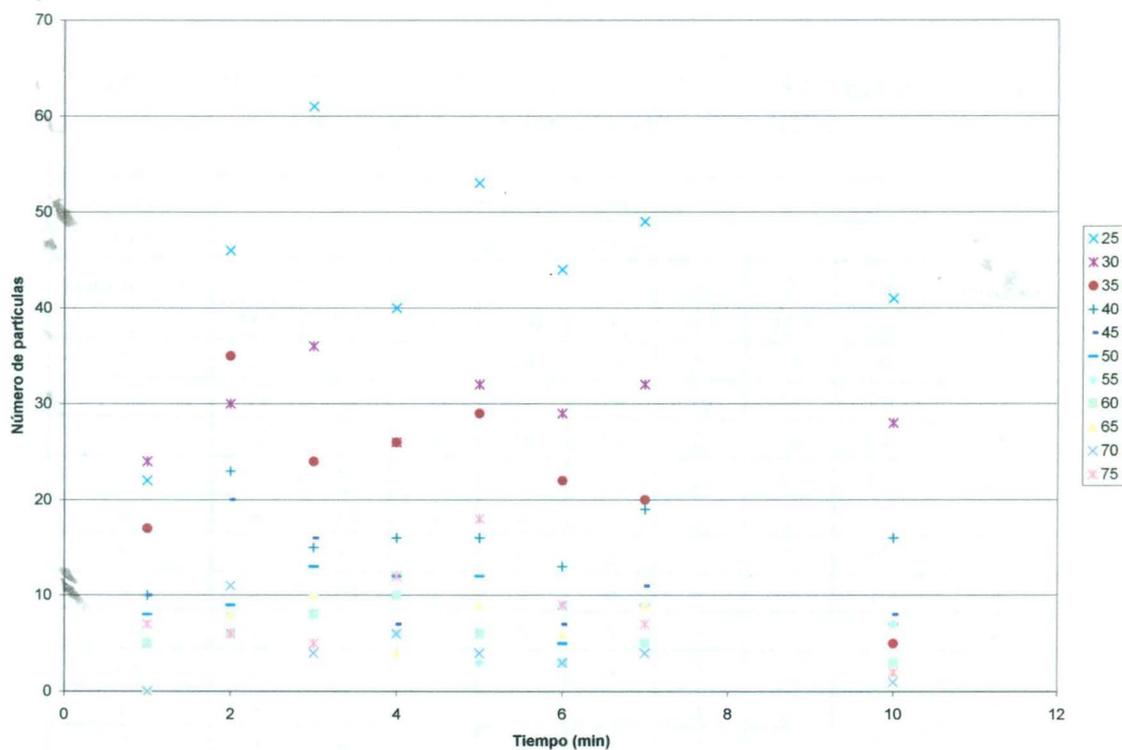


Figura 14 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Fe1.

TABLA 9

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA
DE REMOCIÓN DE FIERRO A 40 RPM

Prueba Fe2	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	384	336	360	349	341	325	323	342	345
25	41	58	25	43	28	29	19	39	35
30	21	33	23	27	18	10	11	28	21
35	15	27	8	16	13	8	16	24	16
40	13	22	8	13	6	10	13	15	13
45	8	14	4	8	6	3	5	11	7
50	1	6	2	6	3	2	7	12	5
55	4	10	4	1	0	1	5	6	4
60	1	6	1	5	5	1	5	7	4
65	2	7	3	4	0	2	3	9	4
70	3	5	0	5	3	1	2	3	3
75	2	6	2	1	2	2	1	3	2
80 ≥ 100	2	3	1	2	2	0	2	3	

De acuerdo a los resultados que se muestran en la Tabla 9 y Figura 15, para esta prueba es posible determinar que para un tiempo comprendido entre uno y cuatro minutos se manifiesta el fenómeno de aglomeración ortocinética, durante toda la prueba existe una cantidad considerablemente grande de partículas primarias, una parte de éstas, son producto de la ruptura por erosión de los aglomerados, y la otra parte representan las partículas primarias que no lograron aglomerarse, el fenómeno de crecimiento esta prácticamente anulado, esto debido a la elevada velocidad de corte, fenómeno que no se presentó en las pruebas a 20 rpm para este metal.

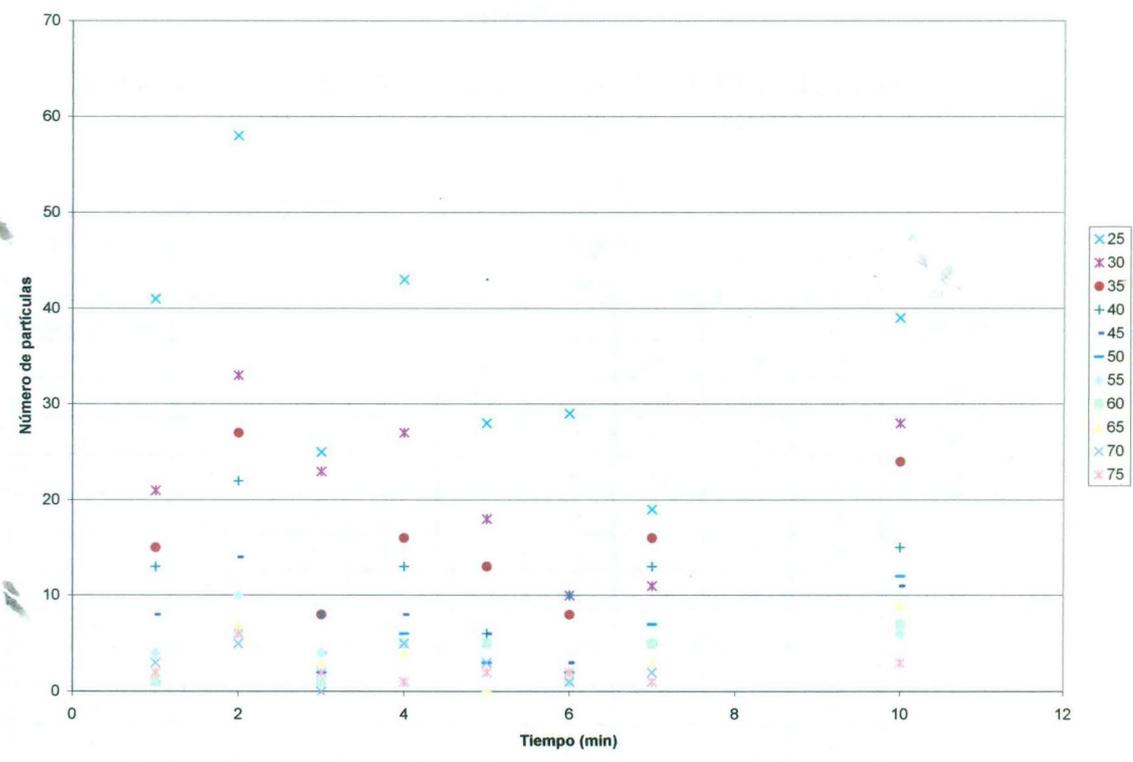


Figura 15 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Fe 2.

TABLA 10

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA DE REMOCIÓN DE NÍQUEL A 20 RPM

Prueba Ni1	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	252	231	238	240	272	291	218	266	251
25	53	74	85	72	74	62	70	65	69
30	38	38	40	57	44	55	38	50	45
35	39	43	57	31	26	31	35	48	39
40	31	25	24	23	24	31	35	36	29
45	13	22	19	28	19	20	23	28	22
50	23	19	21	23	12	10	24	18	19
55	19	21	15	15	7	10	23	20	16
60	15	14	17	14	11	9	21	19	15
65	13	10	20	13	9	8	11	8	12
70	6	6	10	8	5	8	5	6	7
75	4	5	8	8	7	6	9	11	7
$80 \geq 100$	6	4	6	5	4	4	6	4	

En la Tabla 10 y en la Figura 16, es posible identificar para la remoción del níquel la presencia de aglomeración ortocinética para el período comprendido entre cero y cuatro minutos, a partir de este tiempo y hasta los siete de muestreo, las partículas presentan crecimiento, a partir del minuto siete y hasta que la prueba se termina (10 minutos) se manifiesta la aglomeración pericinética, alcanzando un tamaño máximo de partícula de $75\mu\text{m}$, debido a la ausencia de fuerzas de corte. También se observa que para el minuto seis hay un incremento de partículas primarias esto debido a la erosión de los aglomerados ya formados.

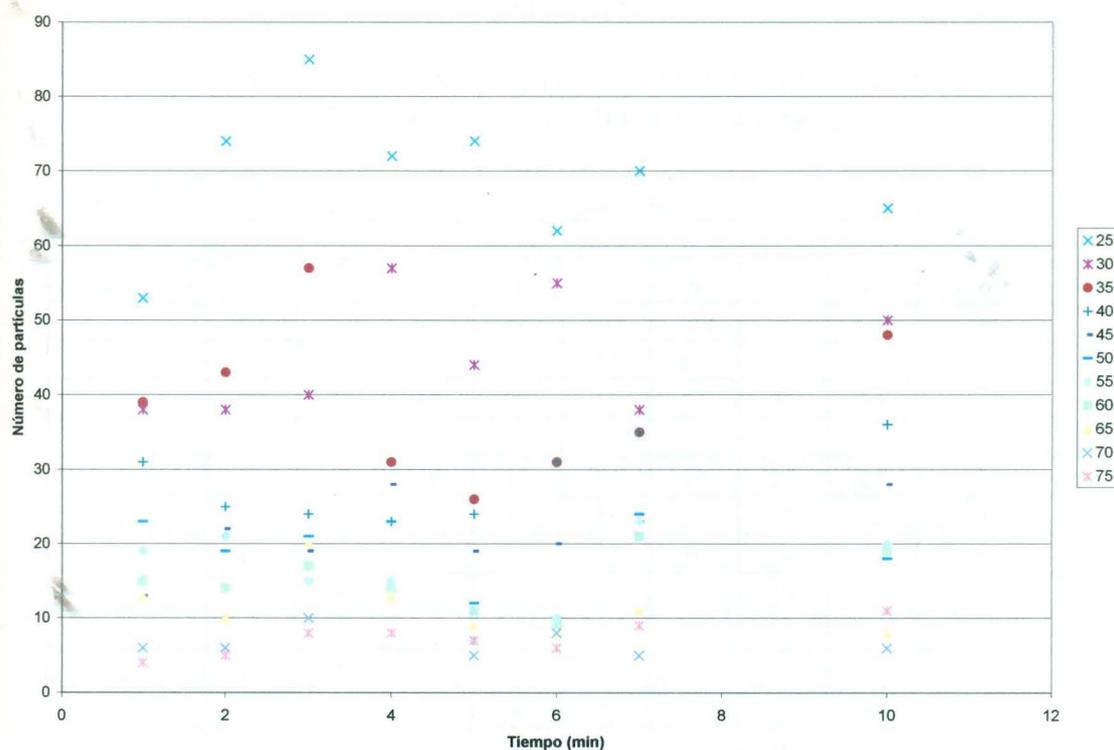


Figura 16 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Ni 1.

En la Tabla 11 y Figura 17 se observa que para tiempos comprendidos entre cero y cinco minutos las partículas presentan aglomeración ortocinética, debido a que las fuerzas de atracción superan a las elevadas fuerzas de corte, a partir del minuto cinco y hasta la conclusión de la prueba, se manifiesta el rompimiento de las partículas aglomeradas, esto debido a la elevada velocidad de corte, lo cual hace imposible identificar el fenómeno de crecimiento y solamente es evidente el fenómeno de ruptura por erosión, mismo que también fue manifiesto en el minuto seis de la prueba a 20 rpm.

TABLA 11

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA
DE REMOCIÓN DE NÍQUEL A 40 RPM

Prueba Ni2	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	270	322	287	293	303	289	325	316	301
25	60	56	55	62	54	60	60	65	59
30	39	30	17	28	25	34	35	34	30
35	33	27	19	24	26	34	26	34	28
40	15	16	18	19	24	19	20	28	20
45	13	11	7	14	21	11	12	16	13
50	17	8	10	10	10	10	9	7	10
55	11	8	9	9	8	7	13	8	9
60	7	7	5	3	5	6	5	8	6
65	10	4	4	5	4	3	5	4	5
70	6	2	1	8	5	7	1	6	5
75	3	7	5	6	3	3	10	7	6
$80 \geq 100$	2	2	2	2	4	3	2	1	2

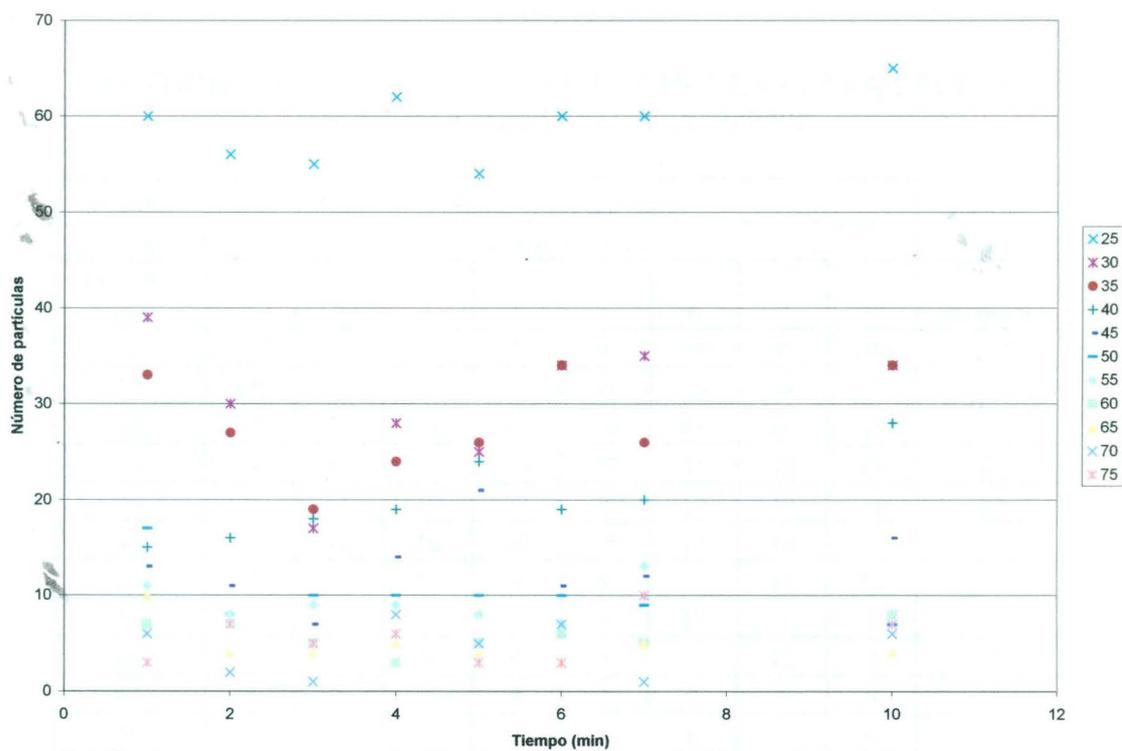


Figura 17 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Ni 2.

TABLA 12

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA DE REMOCIÓN DE ZINC A 20 RPM

Prueba Zn1	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	305	288	243	273	283	299	287	290	283
25	69	56	52	55	71	59	61	67	61
30	38	30	31	46	38	41	49	45	40
35	24	19	20	26	27	31	42	28	27
40	31	15	19	22	22	19	19	21	21
45	10	10	16	10	15	12	15	6	12
50	15	7	10	6	8	13	11	22	12
55	13	4	7	14	9	17	9	8	10
60	7	5	9	6	10	2	12	7	7
65	8	4	3	8	7	2	5	6	5
70	6	5	7	3	3	6	3	10	5
75	4	3	2	3	4	6	2	8	4
$80 \geq 100$	3	3	2	5	3	3	1	3	

De acuerdo a la Tabla 12 y Figura 18, para esta prueba el fenómeno de aglomeración ortocinética se presenta desde el inicio del muestreo y hasta que se alcanza el minuto cinco, a partir de este momento y hasta el minuto siete de agitación el sistema presenta crecimiento de las partículas de $70 \mu\text{m}$, esto dado que el fenómeno de atracción intermolecular, predomina sobre la baja velocidad de corte.

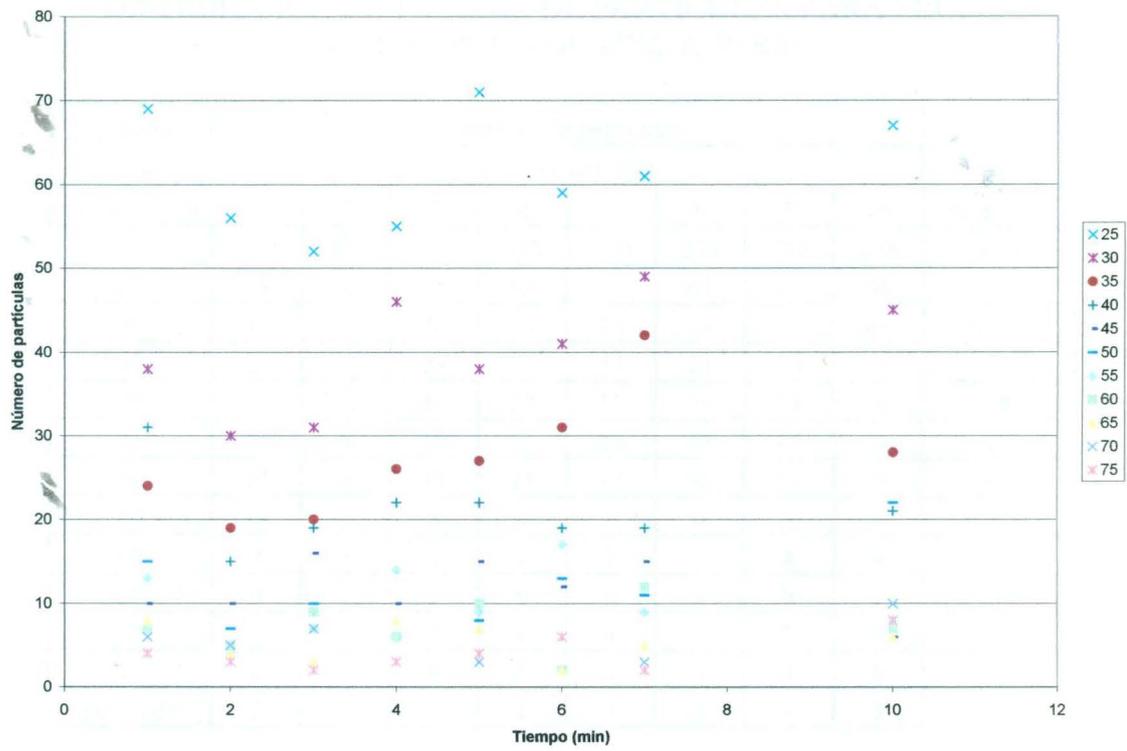


Figura 18 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Zn 1.

TABLA 13

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA PRUEBA DE REMOCIÓN DE ZINC A 40 RPM

Prueba Zn2	Número de partículas								promedio
	tiempo, minutos								
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	279	301	292	318	259	279	287	275	286
25	58	52	45	65	55	61	67	56	57
30	35	22	40	33	46	44	39	43	38
35	22	17	29	25	23	21	30	31	25
40	17	12	13	23	16	26	24	9	18
45	17	6	10	13	20	13	17	8	13
50	15	6	13	11	12	0	15	10	10
55	14	2	8	3	5	0	10	8	6
60	9	3	8	7	7	0	8	4	6
65	4	3	3	6	6	0	9	3	4
70	3	3	3	2	4	0	7	5	3
75	6	7	8	5	5	0	4	6	5
$80 \geq 100$	2	2	2	1	3	0	3	3	

En la Tabla 13 y Figura 19, se muestra que para esta prueba el fenómeno de aglomeración ortocinética, se presenta desde el inicio del muestreo y hasta que se alcanza el minuto cinco, a partir de este momento y hasta el minuto siete de agitación el sistema presenta rompimiento por erosión de las partículas, esto dado que el fenómeno intermolecular de atracción, se ve anulado por la elevada velocidad de corte lo cual se refleja en el bajo número de partículas mayores a $70\mu\text{m}$.

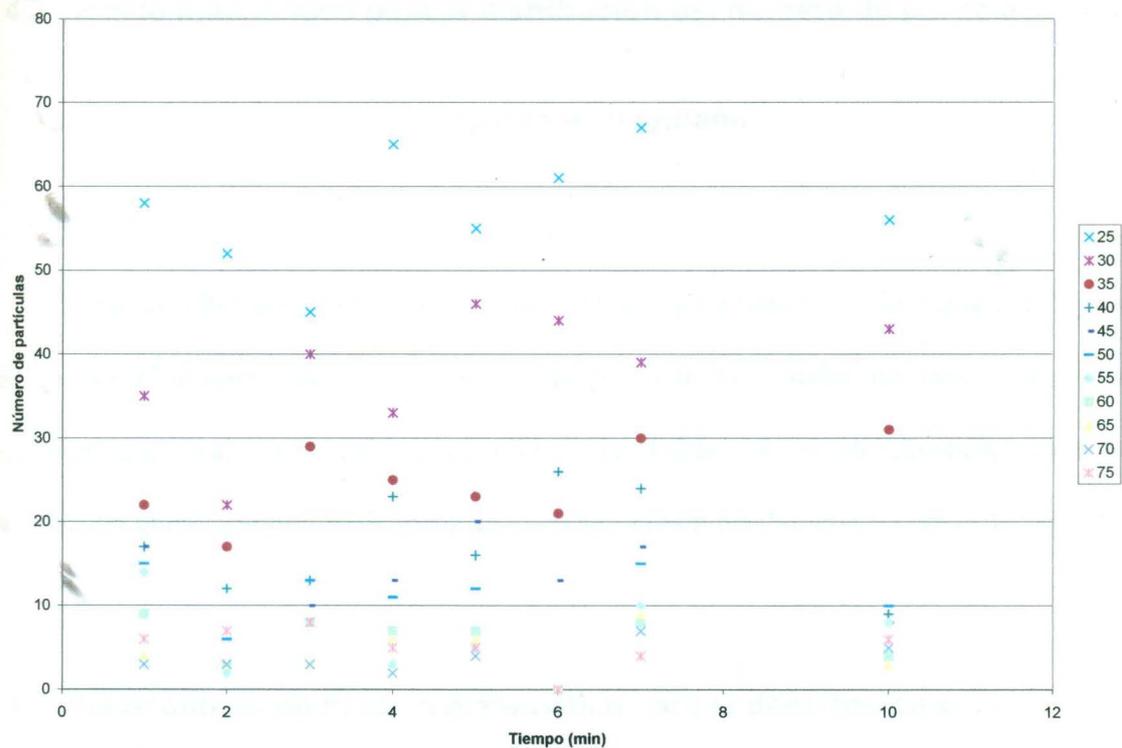


Figura 19 Distribución del número de partículas con respecto al tiempo, para cada tamaño (μm), en la prueba, Zn 2.

4.3 Modelo matemático para la distribución del número de partículas con respecto a su tamaño

Fue posible determinar los valores de los parámetros de la ecuación 8, que representa el número de partículas con respecto a su tamaño en cada tiempo de muestreo, estos valores se pueden consultar en las Tablas 38 a 41 del Apéndice, en estas se presenta el cálculo del % de error de los resultados reproducidos con la ecuación (8).

4.4 Desarrollo de un modelo matemático para la descripción del proceso

Los datos mostrados en las Tablas 6 a 13, (distribuciones) fueron empleados para el entrenamiento de las redes neuronales artificiales probadas, los datos completos de estas distribuciones se muestran en las Tablas 22 a 29 del Apéndice posteriormente se reprodujeron los valores para el número de partículas para cada experimento realizado, mismas que se presentan en las Tablas 30 a 37 del Apéndice, en las Figuras 20 a la 27, se muestra los resultados obtenidos del modelamiento mediante redes neuronales artificiales, durante el proceso de remoción de metales, para cada una de las pruebas realizadas, para el caso de las pruebas a 20 rpm, se utilizó una estructura 2-6-6-1, para el caso de los experimentos a 40 rpm, fue necesario incrementar el número de neuronas de capa oculta, para el caso de las pruebas Cr₂ y Ni₂, se utilizó una estructura del tipo 2-15-15-1, en la prueba Fe₂ se utilizó una arquitectura 2-8-8-1, para la prueba Zn₂ se utilizó una estructura del tipo 2-16-16-16.

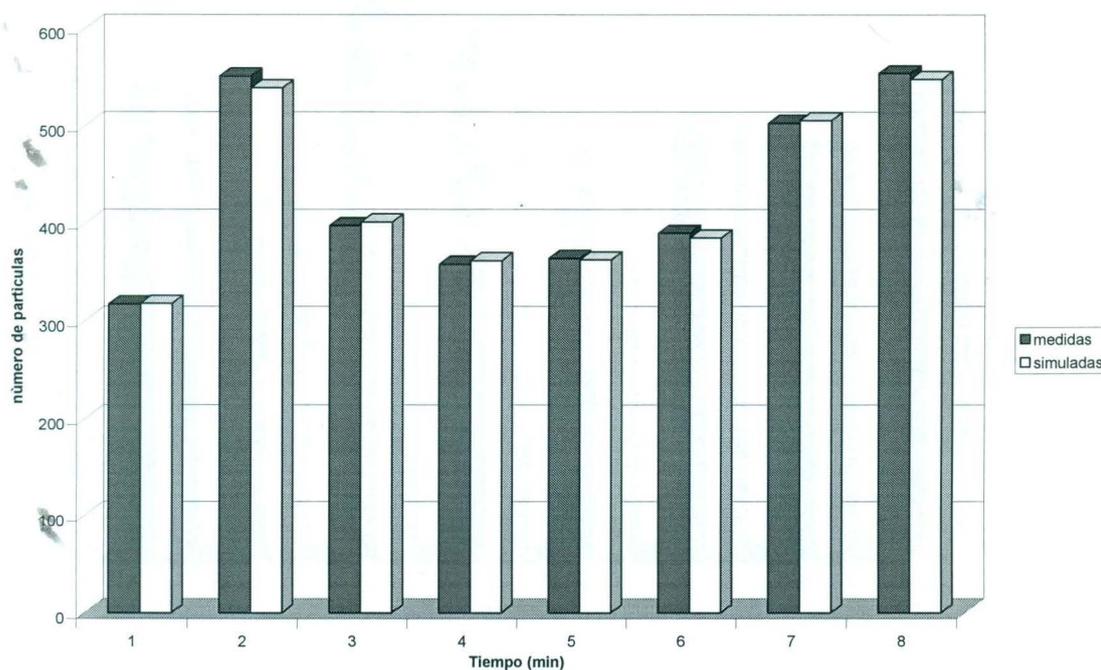


Figura 20 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del Cromo a 20 rpm.

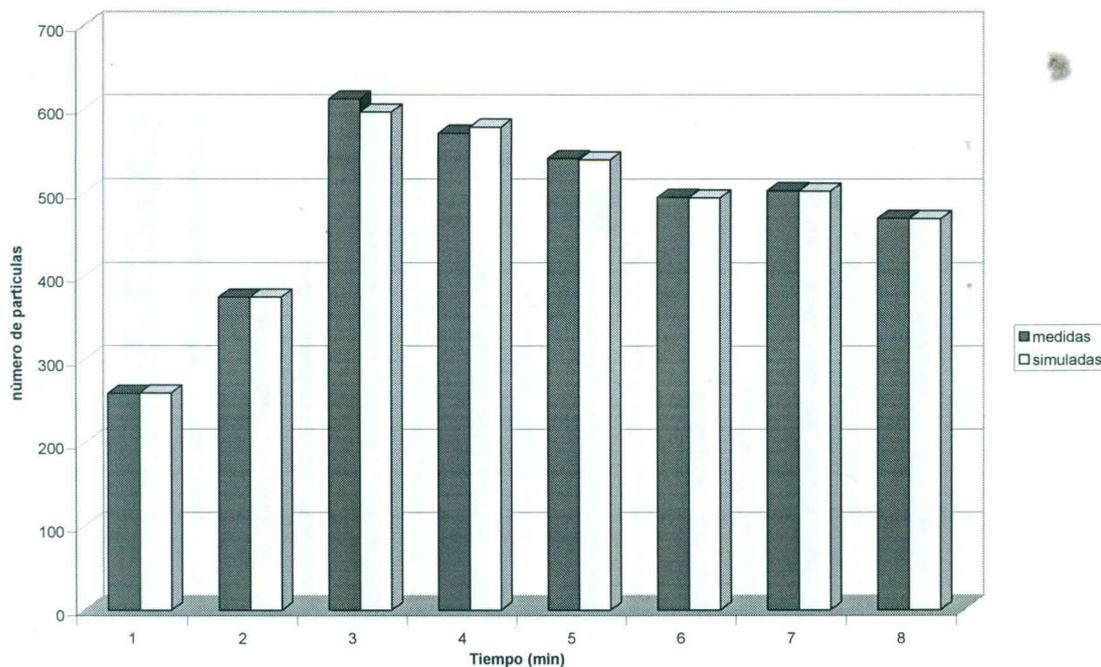


Figura 21 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del Hierro a 20 rpm.

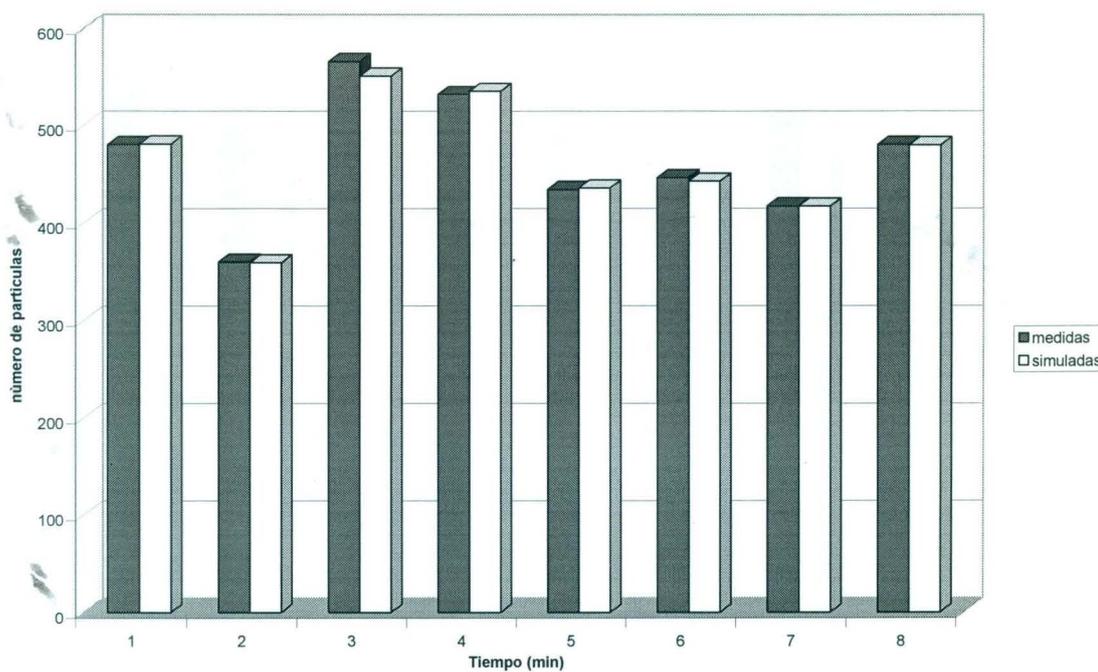


Figura 22 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del Níquel a 20 rpm.

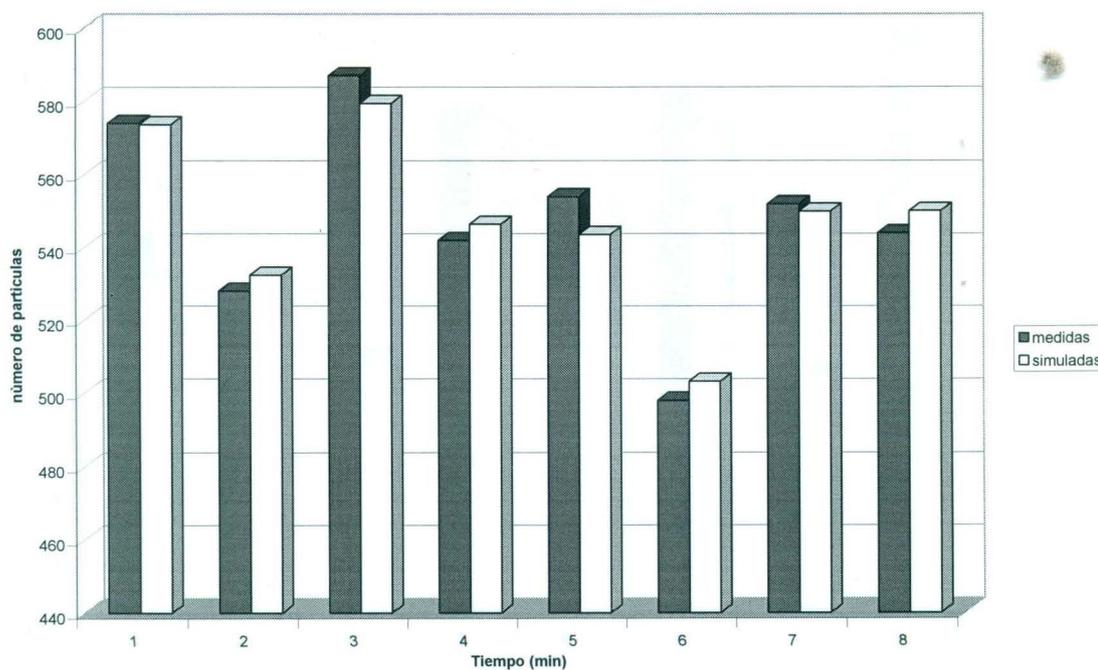


Figura 23 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del Zinc a 20 rpm.

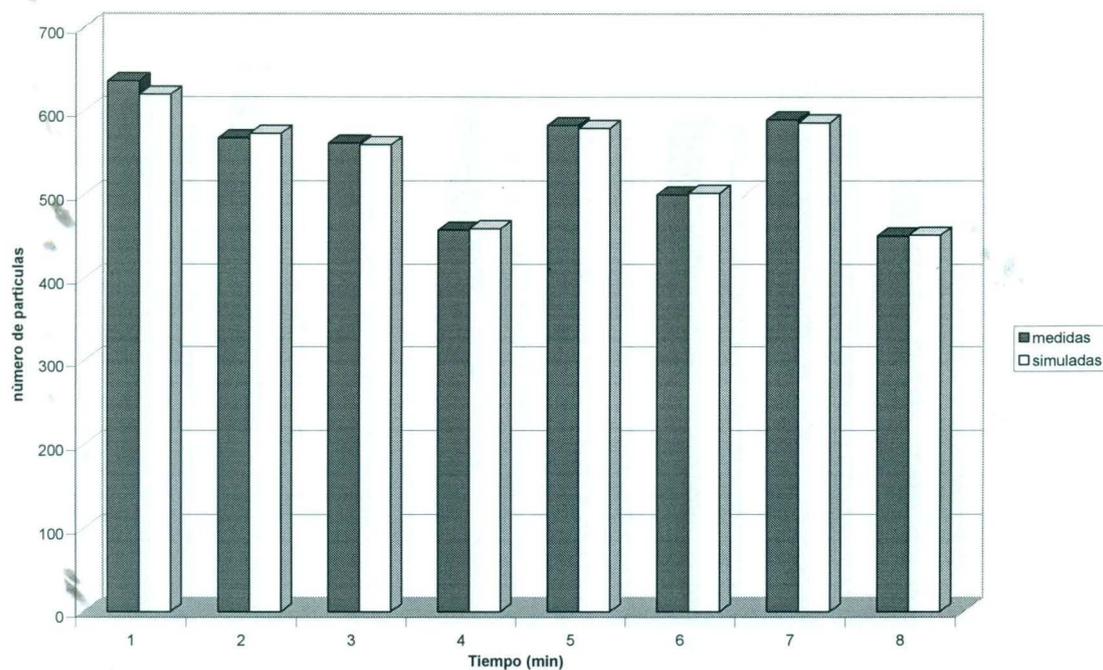


Figura 24 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del cromo a 40 rpm.

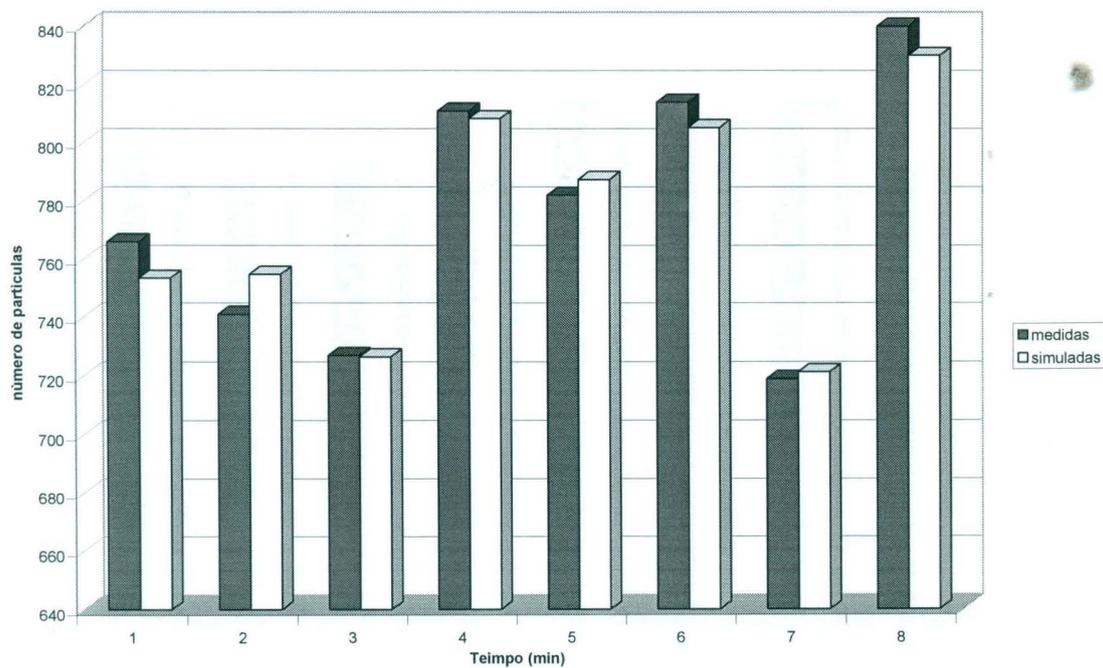


Figura 25 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del hierro a 40 rpm.

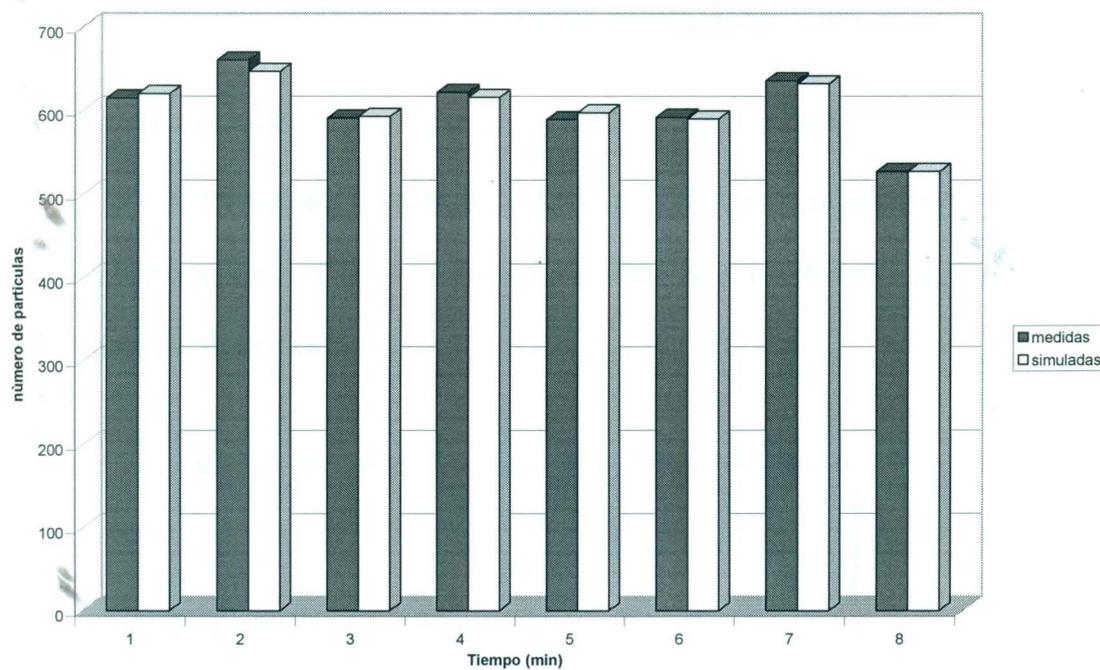


Figura 26 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del níquel a 40 rpm.

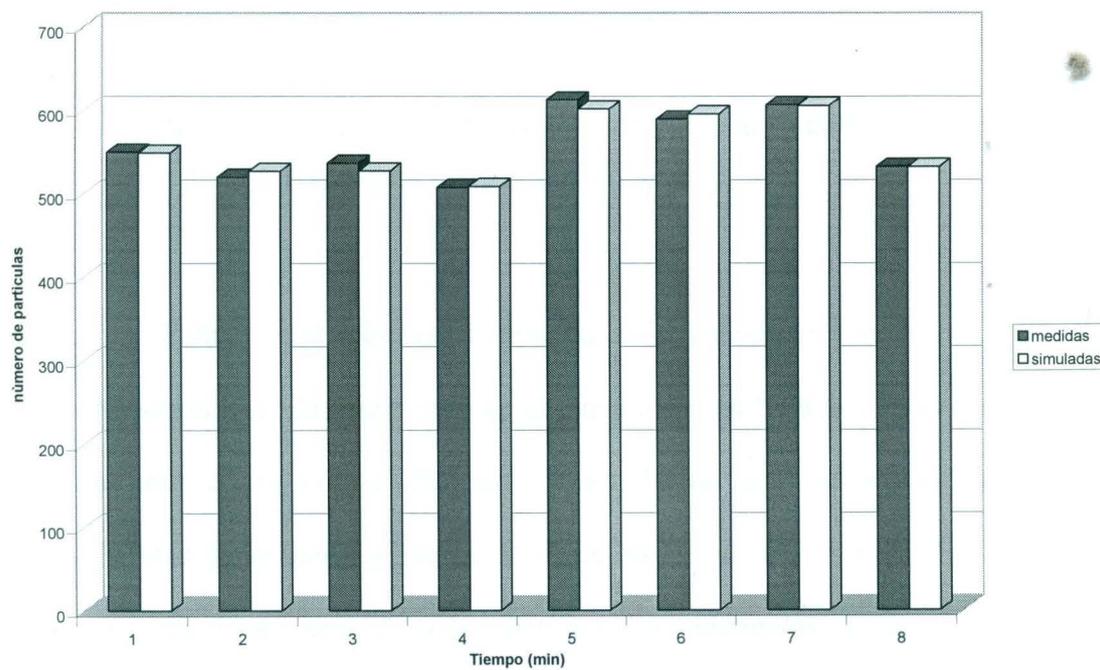


Figura 27 Comparación entre el número de partículas medidas y simuladas por la red neuronal artificial para la remoción del Zinc a 40 rpm

4.4 Simulación mediante autómatas celulares

En esta simulación, se probó la condición límite para cuando $v \gg \mu$, $vel \rightarrow 0$ y $fc \rightarrow 1$, esta condición elimina la dispersión y favorece la concentración de las partículas, por consiguiente un incremento en el tamaño de los flóculos, estos resultados se muestran en la figura 28

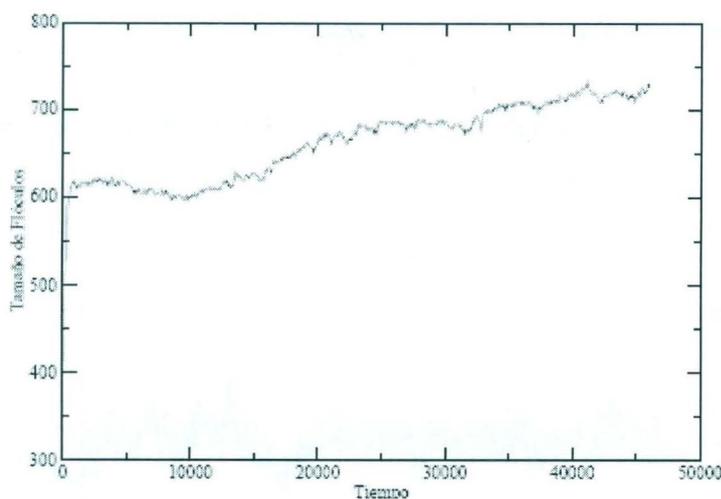


Figura 28 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $vel \rightarrow 0$ y $fc \rightarrow 1$.

Para la simulación con condición límite cuando $v \ll m$, $vel \rightarrow 1$ y $fc \rightarrow 0$ el sistema favorece la estabilidad en el tamaño de los flóculos, estos resultados se muestran en la Figura 29, para la simulación con valores intermedios de velocidad de agitación y fuerza de atracción $1 < vel > 0$ y $1 < fc > 0$, se obtiene un comportamiento parecido a las distribuciones obtenidas mediante microscopía óptica, estos resultados son mostrados en la Figura 30.

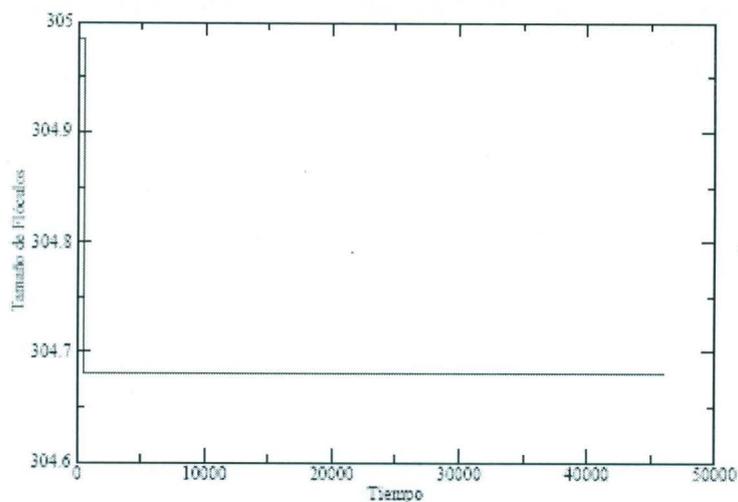


Figura 29 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $vel \rightarrow 1$ y $fc \rightarrow 0$.

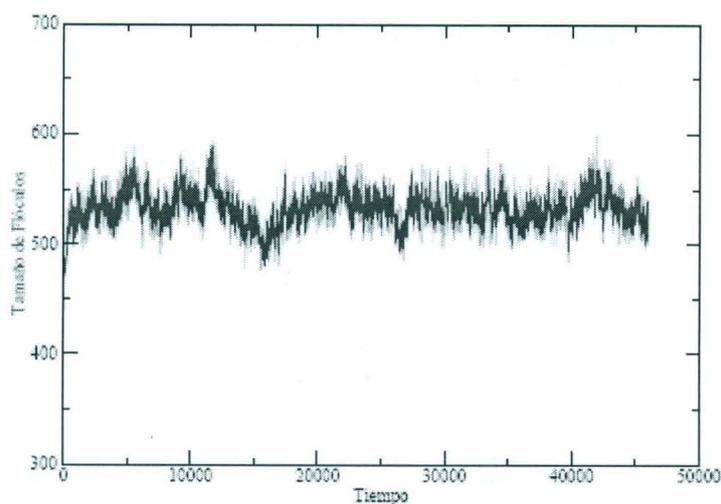


Figura 30 Simulación del comportamiento del tamaño de los flóculos con respecto al tiempo, $1 < vel > 0$ y $1 < fc > 0$

Las gráficas mostradas en la Figura 31 muestran las distribuciones obtenidas por la simulación, donde se observa que el comportamiento es similar a los obtenidos de forma experimental mostrados en la Figura 33; Sin embargo al comparar los resultados de la simulación, con respecto a los valores experimentales, se detecta una diferencia en la escala, por lo que se propone realizar una regresión del tipo leyes de potencia y

comparar la distribución medida y la simulación, mediante el exponente de la ley de potencia (pendiente)

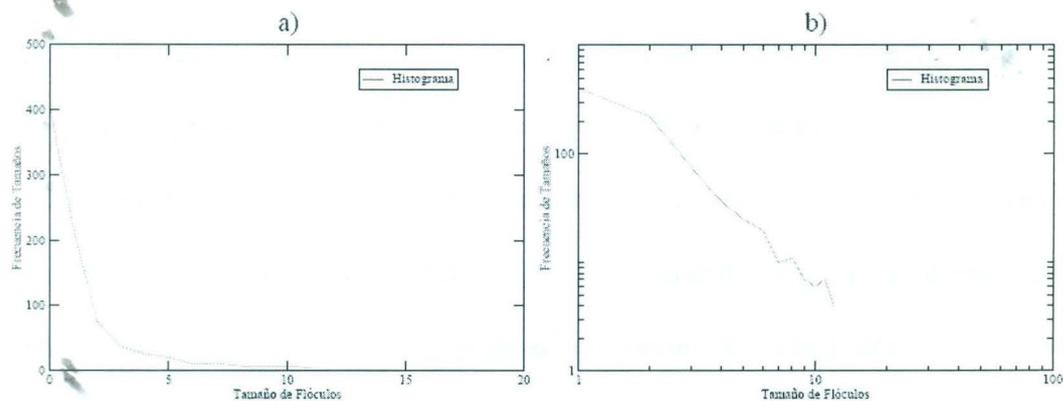


Figura 31 Distribución de tamaños de partícula obtenida mediante simulación con autómatas celulares, y su correspondiente en escala logarítmica

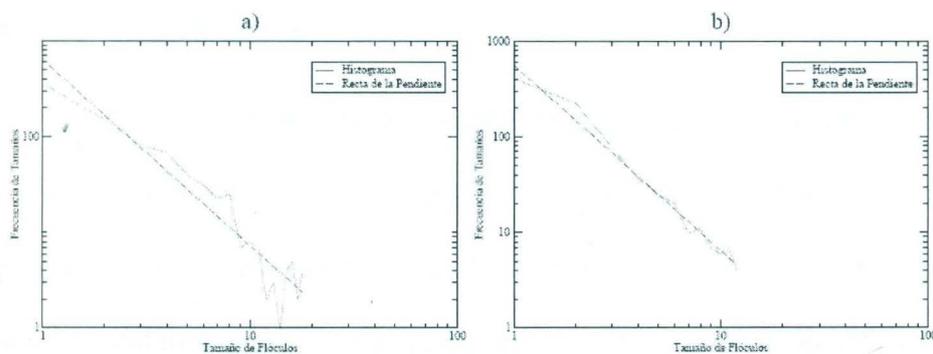


Figura 32 Comparación de la pendiente de la distribución de tamaños de partícula a) medida y b) obtenida mediante simulación con autómatas celulares

La razón por la que se decidió comparar las distribuciones de esta forma es debido a que la pendiente no cambia aunque se escale la gráfica, de esta forma no importa que las distribuciones no sean iguales cuantitativamente sino que pueden ser representadas cualitativamente. Tomando el ejemplo anterior de la Figura 33 b), se calcula se

pendiente y comparándolas podemos ver que son iguales, para este caso es "-1.93526", en la Figura 32 se pueden ver las dos gráficas con la recta obtenida de la regresión lineal. Para comprobar que los histogramas del experimento pueden representarse por la pendiente, es necesario realizar una serie de pruebas estadísticas, para establecer si ambas gráficas provienen de una población con varianza similar, para ello se empleó la prueba F. $F(v_1, v_2)$ denota el valor de la distribución F con v_1 grados de libertad en el numerador y v_2 grados de libertad en el denominador, con la hipótesis nula "el histograma no se describe mediante la pendiente encontrada por regresión de la ley de potencia". Los grados de libertad del numerador se encuentran mediante la fórmula $r-1$, donde r es el número de sujetos en comparación o grupos estadísticamente dependientes mientras que los grados de libertad del denominador se obtienen con $k-1$, donde k es el número de sujetos en la muestra.

Al resolver la prueba F para el histograma de frecuencias de la Figura 32 b) el coeficiente calculado es de 123.4641 con una muestra de 17 datos, de las tablas para la prueba F se obtiene un valor de $F(1,16) = 4.49$, por lo que se puede decir que la varianza del histograma y la regresión no son significativamente diferentes, por lo que es posible representar la gráfica de distribución de frecuencias por su pendiente. Se siguió el mismo procedimiento para la distribución de número de partículas obtenido mediante la simulación, figura 32 a, donde el coeficiente F calculado es de 470.3812, con una muestra de 11 datos y a partir de tablas $F(1,10) = 4.96$, puede observarse que la prueba es superada, por lo tanto la prueba F indica que con un nivel de confianza del 95%, se rechaza la hipótesis nula.

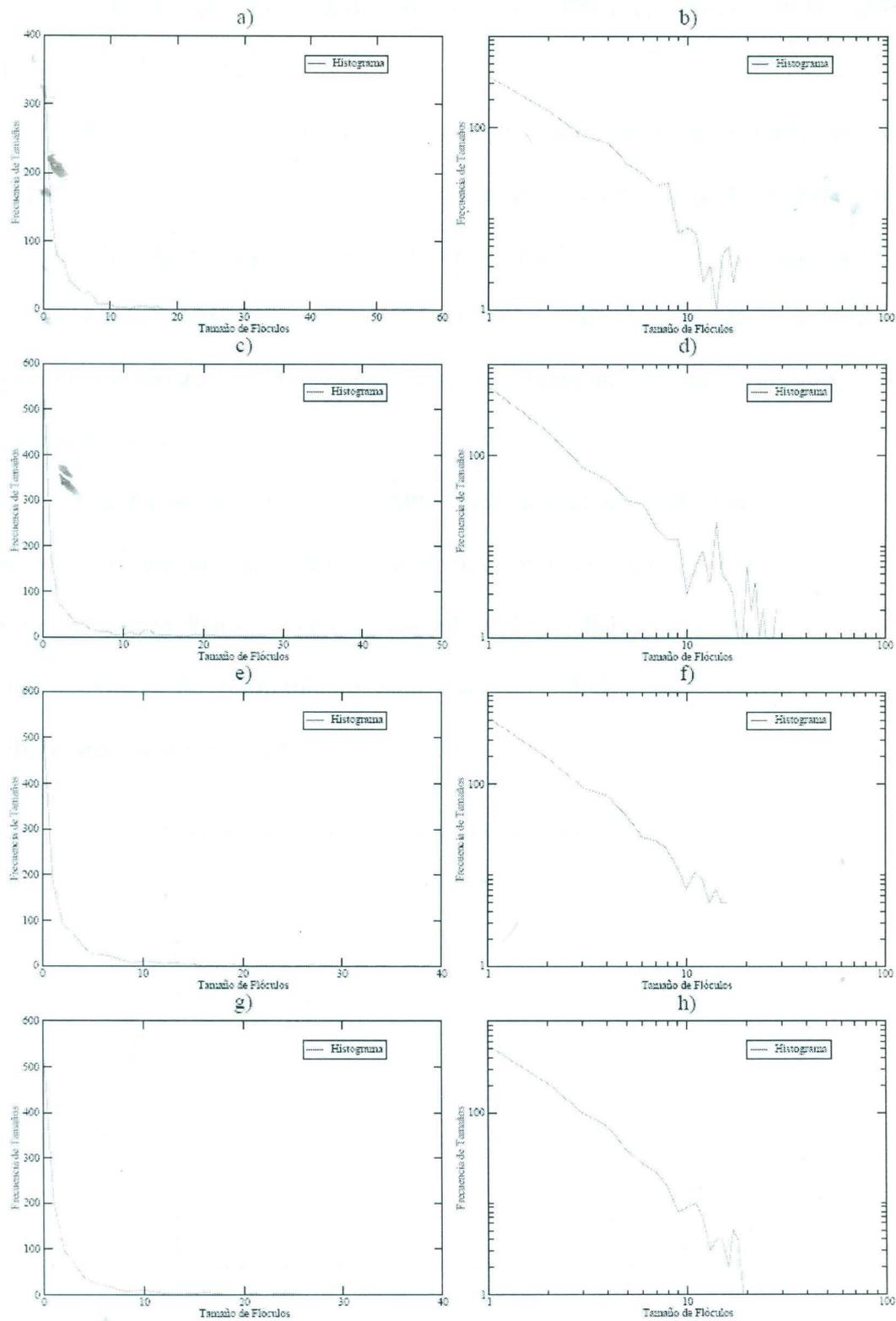


Figura 33 Distribución de tamaños de partícula para el minuto 3 de las pruebas Cr1, Fe1, Ni1 y Zn1 y su correspondiente en escala logarítmica.

Con esta prueba se demuestra que es posible representar los histogramas de frecuencias por sus pendientes.

Reproduciendo este tratamiento de los datos para los histogramas obtenidos experimentalmente se calcula el valor de la prueba F, y el coeficiente F para compararse obteniéndose para el caso del fierro un coeficiente $F = 226.5575$ y un valor de prueba $F = 4.21$, para el níquel el coeficiente F es de 701.49992 y el valor de $F = 4.60$, finalmente para el caso del zinc, el coeficiente F calculado tiene un valor de 336.2126 y un valor de prueba $F = 4.45$

Un factor que puede simularse mediante el uso del autómatas celular, es un incremento en la velocidad de agitación, por encima de los valores probados, observando una disminución muy marcada de la pendiente, lo que sugiere el predominio del fenómeno de rompimiento para esas velocidades, este comportamiento puede observarse en la Figura 34.

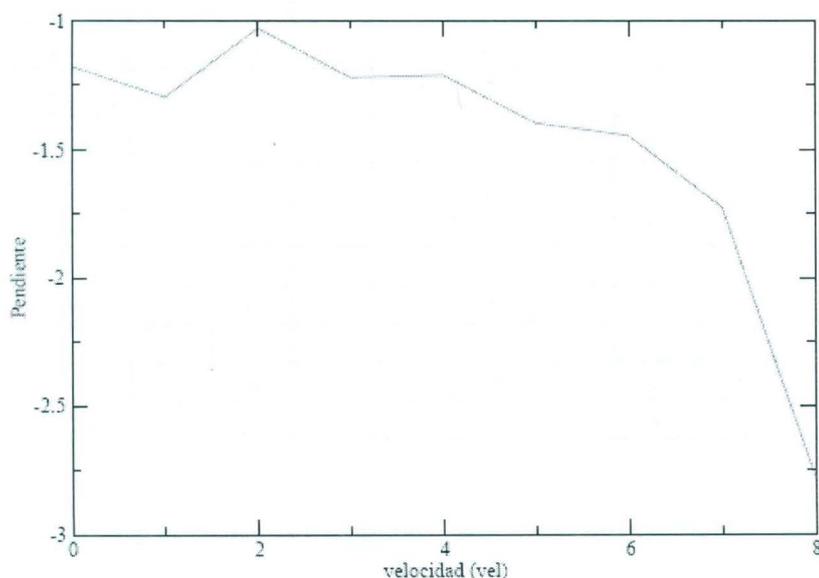


Figura 34 Comportamiento de la pendiente conforme aumenta la velocidad

4.5 Aplicación del modelo de red neuronal artificial a una disolución multimetálica

En la Tabla 14 se muestran los resultados obtenidos para la distribución de tamaño de partícula, estos se emplearon para el entrenamiento y modelado de la estructura de red neuronal artificial en la mezcla 1.

TABLA 14
DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS
PARA MEZCLA 1

Prueba mezcla1	tamaño, μm	Número de partículas								
		Tiempo, minutos								promedio
		1	2	3	4	5	6	7	10	
≤ 20	806	656	655	625	871	975	671	684	743	
25	4	18	16	1	38	7	7	15	13	
30	0	7	2	1	34	1	1	14	8	
35	1	0	0	0	34	1	0	0	5	
40	2	0	0	0	28	0	0	0	4	
45	0	0	0	0	25	0	0	0	3	
50	0	0	0	0	15	0	0	0	2	
55	0	0	0	0	12	0	0	0	2	
60	2	0	0	0	8	0	0	0	1	
65	1	0	0	0	8	0	0	0	1	
70	1	0	0	0	8	0	0	1	1	
75	1	0	0	0	8	0	0	5	2	
80	1	0	0	0	4	0	0	7	2	
$80 \geq 100$	2	0	0	0	15	0	0	0	3	

Los resultados son consistentes con los previamente encontrados, para condiciones hidrodinámicas similares, si bien se observa un cambio en la cantidad de partículas, los fenómenos de aglomeración ortocinética, es identificable en las

disoluciones tratadas a 20 rpm desde el minuto 1 y hasta el minuto cinco, igual que en las disoluciones monometálicas, y el crecimiento de partículas es identificado a partir del minuto cinco y hasta que concluye la prueba a los 10 minutos.

En la tabla 15 se muestran los resultados obtenidos para el modelado del comportamiento del sistema descrito en la mezcla 1, se utilizó la misma estructura de red neuronal que en los experimentos mono metálicos y de acuerdo a los resultados mostrados, es posible asegurar que el comportamiento puede ser descrito por la estructura de red neuronal utilizada.

TABLA 15

RESULTADOS DEL NÚMERO DE PARTÍCULAS MODELADO PARA MEZCLA 1 UTILIZANDO LA RED NEURONAL ARTIFICIAL 2-6-6-1

Tiempo	Número de partículas		Error
	Medidas	Calculadas	
1	806	806.13	-0.016%
2	656	656.76	-0.116%
3	655	639.5025	2.366%
4	625	640.77	-2.523%
5	871	871.1625	-0.019%
6	975	967.59	0.760%
7	671	681.6225	-1.583%
10	684	673.8225	1.488%

En la Tabla 16, se presenta la distribución obtenida para la muestra denominada mezcla 2, esta información se utilizó para modelar el comportamiento del sistema mediante la red neuronal artificial 2-8-8-1, estos resultados se muestran en la tabla 17, estos resultados son consistentes con los previamente obtenidos en las disoluciones

TABLA 17

RESULTADOS DEL NÚMERO DE PARTÍCULAS MODELADO
UTILIZANDO LA RED NEURONAL ARTIFICIAL 2-8-8-1

Tiempo	Número de partículas		
	Medidas	Calculadas	Error
1	1451	1419.8035	2.150%
2	872	887.7218	-1.803%
3	1225	1203.6045	1.747%
4	842	840.7094	0.153%
5	559	544.5603	2.583%
6	690	735.9472	-6.659%
7	965	932.8479	3.332%
10	1127	1129.1682	-0.192%

4.6 Aplicación del modelo de red neuronal artificial a un agua residual cruda

En la Tabla 18 se muestran los resultados de la distribución de partículas para el tratamiento del agua cruda 1, en esta se observa muy poca dispersión de los tamaños obtenidos, sin embargo el comportamiento es consistente con respecto a los resultados detectados para las disoluciones monometálicas, desde el inicio de la prueba y hasta el minuto cinco se identifica la aglomeración ortocinética, dado que esta es promovida por la energía mecánica agregada por la agitación del sistema, a partir del minuto cinco y hasta la conclusión de la prueba es evidente el crecimiento de las partículas previamente aglomeradas.

En la Tabla 19, se encuentran reportados los resultados para el modelamiento del comportamiento del sistema estudiado a 20 rpm, aplicándose la misma estructura de red

neuronal que en las pruebas sometidas a la misma velocidad de agitación, 2-6-6-1; de acuerdo al % de error reportado es posible observar que el desempeño de la red es bastante bueno y puede describir el comportamiento del sistema en estudio.

TABLA 18

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS
PARA PRUEBA DENOMINADA CRUDA 1

Prueba cruda 1 tamaño, μm	Número de partículas								
	tiempo, minutos								
	1	2	3	4	5	6	7	10	promedio
≤ 20	776	610	373	488	378	975	130	45	472
25	3	5	1	2	1	7	2	4	3
30	1	1	1	0	0	1	0	2	1
$80 \geq 100$	0	0	0	0	0	0	0	0	0

TABLA 19

RESULTADOS DEL NÚMERO DE PARTÍCULAS MODELADO
UTILIZANDO LA RED NEURONAL ARTIFICIAL 2-6-6-1

Tiempo	Número de partículas		
	medidos	calculados	error
1	776	781.365	-0.691%
2	610	608.3025	0.278%
3	373	372.45	0.147%
4	488	464.1	4.898%
5	378	405.1125	-7.173%
6	975	936.8775	3.910%
7	130	132.5025	-1.925%
10	45	45.63	-1.400%

TABLA 21

RESULTADOS DEL NÚMERO DE PARTÍCULAS MODELADO
UTILIZANDO LA RED NEURONAL ARTIFICIAL 2-8-8-1

tiempo	Numero de partículas		error
	medidos	calculados	
1	409	408.642	0.088%
2	620	613.18	1.100%
3	435	429.66	1.228%
4	426	425.01	0.232%
5	305	322.772	-5.827%
6	439	425.382	3.102%
7	439	437.584	0.32%
10	434	436.53	-0.58%

5. Conclusiones y Recomendaciones

Conclusiones:

1. Es posible identificar la aglomeración ortocinética en todas las pruebas realizadas
2. El fenómeno de crecimiento sólo puede ser descrito a 20 rpm, lo que se considera baja velocidad de corte y para tiempos de agitación superiores a cuatro minutos
3. El fenómeno de aglomeración y ruptura de partículas es independiente de la naturaleza del metal removido.
4. Se seleccionó el cloruro férrico como sustancia coagulante ya que se obtuvo el mayor tamaño de partícula y niveles de remoción de entre 99.25% y hasta 99.96%.
5. Se estableció un modelo matemático que describe la distribución de partículas, a lo largo de las pruebas y a diferentes tiempos, con coeficientes de correlación $R^2 > 0.998$ en todos los casos estudiados.
6. Es posible identificar la aglomeración ortocinética en todas las pruebas realizadas, ya que este fenómeno ocurre como producto de la agitación mecánica y es evidente debido al incremento en el tamaño de las partículas medidas.
7. El fenómeno de ruptura es manifiesto para las pruebas a 40 rpm, a partir de cinco y hasta siete minutos de agitación mecánica, esto como consecuencia de la elevada velocidad de corte.
8. El fenómeno de aglomeración y ruptura de partículas es independiente de la naturaleza del metal removido, ya que para los cuatro metales probados fueron identificados estos fenómenos para el mismo tiempo de agitación.

9. Las pruebas realizadas para una velocidad de agitación de 20 rpm, permitieron identificar a los fenómenos de aglomeración y crecimiento para los cuatro metales probados, para la muestra multimetálica y para el agua cruda.
10. En las pruebas a 40 rpm se identificaron los fenómenos de aglomeración y ruptura en las pruebas realizadas durante la remoción de los cuatro metales probados, la mezcla multimetálica y el agua cruda.
11. El uso de redes neuronales para simular el número de partículas como una función del tiempo, permitió modelar el comportamiento de todos los sistemas estudiados con desviaciones menores al 3%.
12. Fue posible predecir el número de partículas, para la prueba mezcla1 a 10 minutos de agitación, obteniéndose una desviación del 19%.
13. Fue posible predecir el número de partículas, para la prueba mezcla2 a 10 minutos de agitación, obteniéndose una desviación del 3%.
14. Los fenómenos de aglomeración y crecimiento pueden ser reproducidos mediante el uso de una red neuronal artificial de arquitectura 2-6-6-1, para todos los metales estudiados, sometidos a una velocidad de agitación de 20 rpm.
15. Para que el modelo de red neuronal artificial sea capaz de describir los procesos de aglomeración y rompimiento por erosión, es necesario duplicar el número de neuronas en capa oculta.
16. El número de partículas resultantes de la aglomeración es máximo para todos los experimentos a los cuatro minutos de agitación.
17. El número de partículas primarias aumenta al incrementarse la velocidad de corte, para todas las pruebas experimentales estudiadas, esto debido a que el fenómeno de ruptura predomina sobre el de crecimiento de partículas.

18. La descripción del comportamiento del sistema en estudio mediante el autómata celular propuesto es consistente presentando un nivel de confianza mayor del 95%.

Recomendaciones:

1. Tomando en cuenta los buenos resultados obtenidos en la simulación del comportamiento de este sistema particulado, se recomienda utilizar esta metodología para modelar y simular el comportamiento de otros sistemas particulados como son: crecimiento de un cristal en procesos de cristalización, coagulación y floculación de sistemas de tratamiento de aguas residuales municipales y otros en los que existan varios factores que influyen sobre el tamaño y distribución de las partículas.
2. Explorar los efectos de las variables temperatura y dosis de coagulante sobre las distribuciones del número y tamaño de partículas, para el sistema estudiado en esta investigación.

Referencias Bibliográficas

- 1 Acosta, J. Fernández J. y Becerra L. *Aplicación de las Redes Neuronales para la Identificación de un Sistema no lineal. Un Caso Práctico*, Universidad Nacional Experimental Politécnica "Antonio José de Sucre" (UNEXPO). Barquisimeto, Venezuela, 2005.
- 2 Ahsan T. and Alaerts G.J. *Modeling Separation of Flocculant Particles in Horizontal-Flow Gravel Bed*. Journal of Environmental Engineering, 1254-1260, 1997
- 3 Al-Tarazi, Mousa , A. Bert M. Heesink, Geert F. Versteeg. *Precipitation of metal sulphides using gaseous hydrogen sulphide mathematical modeling*. Chemical Engineering Science, (59), 567-579, 2004.
- 4 Ampuero, J.C. *Aplicación De Redes Neuronales Para Optimizar Problemas Multirespuesta En Mejora De La Calidad*, Industrial data, vol.7, no.2, p.31-34. ISSN 1810, 2004.
- 5 Averill M.; Kelton, Law W. David, *Simulation modelling and analysis*,. Editorial McGraw-Hill, (1991).
- 6 Baltpurvins Karlis A., Robert C. Burns, and Geoffrey A. Lawrance, *Use of the Solubility Domain Approach for the Modeling of Hydroxide Precipitation of Heavy Metals from Wastewater*, Environ. Sci. Technol. 30, 1493-1499, 1996.
- 7 Barragán D., Chan E.B., *Irreversible Thermodynamics of Neural Networks: Calortropy Production in Logic Operations* J. Phys. Chem. B, , 105 (29), pp 7104-7114, **2001**.
- 8 Battistoni P. et al. *Optimization of Chemical and Physical Pretreatments in a Platform for the Treatment of Liquid Industrial Wastes*. Industrial Engineering Chemical Research, no. 40, 4506-4512, 2001.

- 9 Bohin et al. Kinetics of Dispersion for Sparse Agglomerates in Simple Shear Flows: Application to Silica Agglomerates in Silicone Polymers. *Chemical Engineering Science*, vol 52, no. 23, 5193-5204, 1996.
- 10 Boisvert J.P. et al, *Phosphate Adsorption in Flocculation processes of aluminium sulphate and poly-aluminium-silicate-sulphate*. *Water Research*, vol 31, no. 8, 1939-1946, 1997.
- 11 Bratby, J.R., *Interpreting laboratory results for the design of rapid mixing and flocculation systems*. *Journal of the American Water Works Association*, vol 73, no. 6, 312-318, 1981.
- 12 Brian E. Reed y otros. *Physicochemical Processes*. *Water Environment Research*. (71), 584, 1999.
- 13 Camp, T. R. y Stein, P. C. *Velocity gradients and internal work in fluid motion*. *Journal of the Boston Society of Civil Engineers*, vol. 30, 1943.
- 14 Campillo, N.E, y. Páez, J.A *Aplicación de diferentes modelos de redes neuronales artificiales (rna) a problemas de la química médica*, Conference at the faculty of Chemistry, University of Montevideo, Uruguay, 2005.
- 15 Cipra, B. *What's happening in the mathematical Sciences*, vol 3 y 5, American Mathematical Society, EU, 2002.
- 16 Charerntanyarak, Lertchai., *Heavy metals removal by chemical coagulation and precipitation*, *Water Science and Technology* 39 (10-11) 135-138, (1999).
- 17 Charerntanyark L. *Heavy Metals Removal by Chemical Coagulation and Precipitation*. *Water Science Technologies*, vol 39 no. 10, 135-138, 1999.
- 18 Collier A.P. et al. *Growth and Aggregation Rates for Calcite and Calcium Oxalate Monohydrate*. *Particle Technology and Fluidization*, *AIChE Journal*, vol 45, no. 11, 2298-2305, 1999.

- 19 Delgado R. F., "Redes neuronales y eficiencia: aplicación al servicio de recogida de basuras " XI Encuentro de Economía Pública Barcelona, Departamento de Economía, Universidad de Oviedo, 5-6 Febrero 2004.
- 20 Ducoste J.J. and Clark M.M. *Turbulence in Flocculators: Effects of Tank Size and Impeller Type*. AIChE Journal, vol 43, no. 2, 328-338, 1997.
- 21 Dreyfus, T. *Advanced Mathematical Thinking Processes*, en Tall, D. (ed.). *Advanced Mathematical Thinking*, pp. 25-41. Dordrecht: Kluwer Academic Press 1991.
- 22 EPA. *Wastewater Technology Fact Sheet Chemical Precipitation*. EPA 832-F-00-018, September 2000.
- 23 Fair, G. M. y Gemmell, R. S. *A mathematical model of coagulation*. Journal of Colloid Science, abril, 1964.
- 24 Fishman G.S. *Conceptos y métodos en la simulación digital de eventos discretos* Editorial Limusa, (1978).
- 25 Flesch J.C., Spicer P and Pratsinis S. *Laminar and Turbulent Shear-Induced Flocculation of Fractal Aggregates*. Materials, Interfaces and Electrochemical Phenomena, AIChE Journal, vol 45, no.5 1114-1124, 1999.
- 26 Fu Yen, The. *Environmental Chemistry Essentials of Chemistry for Engineering Practice* Vol. 4A. Prentice Hall, New Jersey, 1999.
- 27 Franceschi, M. y otros. *Optimization of the coagulation-flocculation process of raw water by optimal design method*. Water Research, (36), 3561-3572, 2002.
- 28 García Estévez, P. *Modelo de predicción del rendimiento de una cartera mediante una Red Neuronal*, Análisis Financiero, 2º CUATRIMESTRE; (87), 55-59, ISSN 02102358, 2002.

- 29 Guillard, Damien y Lewis Alison. *Optimization of Nickel Hydroxycarbonate Precipitation Using a Laboratory Pellet Reactor*. Ind. Eng. Chem. (41), 3110-3114, 2002.
- 30 Hammer, Mark J. y Hammer, Mark Jr. *Water and Wastewater Technology*. Prentice Hall, New Jersey, 2001.
- 31 Harris, H. S.; Kaufman, W. J. y Krone, R. B. *Orthokinetic flocculation in water purification*. Journal of the Sanitary Engineering Division, Proceedings, ASCE, diciembre, 1966.
- 32 Haykin, Simon, (1931). *Neural Networks: a comprehensive foundation* 2nd ed. Editorial Prentice Hall.
- 33 Hilera, J.R., y Martínez, V.J., *Redes neuronales artificiales, Fundamentos, modelos y aplicaciones*. 390 p. Editorial Alfaomega Ra-Ma, Madrid, España, 2000.
- 34 Hill, P.J. et al. *Particle size distribution by design*. Chemical Engineering Science no. 57, 2125-2138, 2002
- 35 Hunter, R. J. *Zeta potential in colloid science: Principles and applications*. Academic Press, London, 1981.
- 36 Jiang, J.Q. y Graham, N. *Observations of the Comparative Hydrolysis/Precipitation Behavior of Polyferric Sulfate and Ferric Sulfate*. Water Research. 32, 930, 1998.
- 37 Kalach, A.V., Shtykov S.N., Rusanova, T.Y., and Pankin K.E. *Application of Langmuir-Blodgett films as modifiers of piezoresonance Sensors*, Sensors and Actuators B: Chemical, Volume 114, Issue 1, 30, Pages 497-499, March 2006.
- 41 Kiparissides et al. *Population Balance Modeling of Particulate Polymerization Processes*. Industrial Engineering Chemical Research, vol 43, 7290-7302, 2004.
- 42 Lee, Jeong-Dae y otros. *Effect of Coagulation Conditions on Membrane Filtration Characteristics in Coagulation-Microfiltration Process for Water Treatment*. Environ. Sci. Technol. (34), 3780-3788, 2000.

- 43 Metcalf and Eddy, Inc. *Wastewater engineering*. 3d ed. 36, 50–57, 65–70, 93–96, 100–101, and 108–112. New York: McGraw-Hill, Inc., 1991.
- 44 Moudgil M. *Flocculation, Sedimentation & Consolidation*, editores Brij, 1986
- 32 Pandya, J.D. and Spielman, L.A. *Floc Breakage in Agitated Suspensions Theory and data Processing Strategy*, Journal of Colloidal and Interface Science , vol 90, no. 2, 1982.
- 33 Perero, M., *Historia e historias de matemáticas*, México 193 p., 1994.
- 34 Potente H. et J. Flecke, *The Breaking Down and Agglomerating of Fillers in Polymer Melt: A Physical Model for Mathematical Description*, Journal of reinforced Plastics and Composites, 16, 1281-1291, 1997.
- 35 Reynolds, T. and Richards, Paul.A. *Unit Operations and Process in Environmental Engineering* 2a edición PWS Publishing Company, Boston, 1996.
- 36 Ríos, S. 3 Ríos, Algunos progresos y problemas en la ciencia de la decisión, Revista MAtematica Complutense, Volumen 11, número 1, 1998.
- 37 Rwei S.P., I. Manas-Zloczower and D.L. Feke. *Analysis of Dispersion of Carbon Black in Polymeric Melts and Its Effect on Compound Properties*, Polym. Eng. Sci., 32, 130-135 (1992).
- 38 Sánchez de la C. R., *Optimización De Parámetros En Un Modelo Probabilista Para Un Sistema De Ingeniería Química*, Tesis en opción al grado de maestro en ciencias en Ingeniería de Sistemas, FIME, UANL, Junio 2008.
- 39 Solera, R. *Prógnostico De Inflación En Costa Rica: Una Estimación Con Redes Neuronales Artificiales*, Documento de trabajo del Banco Central de Costa Rica, elaborado en el Departamento de Contabilidad Social, 2005.

40. Sotolongo, G., Guzmán, M.V *Aplicaciones de las redes neuronales. El caso de la bibliometría*, Ciencias de la Información. (preprint); 32(1):27-34, 2001.
- 41 Spicer P.T. and Pratsinis S.E. *Shear Induced Flocculation the evolution of floc structure and the shape of the size distribution at steady state*, Water Research, vol 30, no.5 1049-1056, 1996.
- 42 Smoluchowski, M. Versuch einer Mathematischen Theorie der Koagulations-Kinetik Kolloid Losungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, Leipzig, vol. 92, 1917.
- 43 Snel, H. y Arboleda Valencia, J. *Influencia de la escala de turbulencia en el proceso de floculación del agua*. Separata de la revista ACODAL, Bogotá, 1982
- 44 Swift y Friedlander. *The coagulation of hydrosols by Brownian motion and lamimer shear flow*. Baltimore, Department of Chemical Engineering, The Johns Hopkins University, 1963.
- 45 Tambo, N. *A fundamental investigation of coagulation and flocculation*. Sapporo, Department of Sanitary Engineering, Hakkaido University, 1964.
- 46 Tomokita S., *Proc. R.Soc.*, A153, 302 , 1936.
- 47 Turing, A.M., *On computable numbers with an application to the Entscheidungs problem* , Proceedings of the London Mathematical Society, ser 2, vol 43, 230-235, 1937.
- 48 Villada, F y Molina J.D. *Pronóstico del precio de la energía eléctrica usando redes neuronales*. Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia N.º 44. pp. 111-118. 2008.
- 49 Wolfram, S. *A New Kind of Science*, Wolfram Media Inc. Champaing Illinois, 2002. ISBN 1-57955-008-8
- 50 Wolfram, S. and Packard, N.H., *Two-dimensional cellular automata*, Journal of Statistical Physics, Volume 38, Numbers 5-6, 901-946, marzo de 1985.

APÉNDICE

En esta sección encontrará las distribuciones completas de los tamaños de partícula para cada una de las pruebas realizadas, estas distribuciones se obtuvieron de los análisis de las imágenes obtenidas mediante microscopía óptica, mediante el software "Image Pro".

TABLA 22

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE CROMO A 20 RPM

Prueba Cr1	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	554	503	390	364	358	398	551	317
15	201	174	142	144	151	211	242	168
20	94	88	75	79	80	112	119	114
25	51	59	46	45	68	86	77	77
30	37	35	35	20	40	54	49	70
35	19	21	15	40	31	40	42	69
40	25	14	12	11	23	28	21	35
45	14	10	10	13	25	21	20	38
50	12	9	8	15	7	18	18	27
55	11	10	9	5	8	11	17	17
60	6	3	4	8	7	13	14	16
65	5	6	4	4	2	13	5	19
70	4	4	4	6	3	14	4	16
75	6	8	5	6	0	5	5	6
80	0	8	2	6	4	10	3	4
85	4	2	6	5	5	7	4	3
90	4	4	0	4	2	4	5	2
95	5	2	0	0	4	4	4	7
100	0	4	0	0	0	3	5	5

TABLA 23

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE CROMO A 40 RPM

Prueba Cr2	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	636	568	562	458	583	500	590	451
15	202	192	160	185	184	211	187	187
20	106	114	109	95	102	115	104	99
25	61	69	63	75	52	84	59	73
30	33	47	44	60	27	54	38	68
35	29	35	30	48	35	24	27	43
40	17	33	17	37	16	30	22	25
45	18	15	23	28	14	20	20	20
50	8	17	9	22	13	21	10	21
55	6	10	10	20	11	18	10	17
60	9	14	13	9	5	8	13	16
65	4	10	5	14	6	9	13	8
70	4	9	7	13	4	4	7	8
75	4	5	8	7	8	5	6	2
80	6	3	7	8	3	3	9	12
85	8	5	5	4	4	5	2	3
90	3	0	7	6	4	0	2	0
95	4	0	3	7	2	5	4	0
100	2	4	0	6	4	4	2	3

TABLA 24
DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE FIERRO A 20 RPM

Prueba Fe1	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	470	503	495	541	571	612	375	562
15	142	159	170	200	181	212	140	260
20	57	79	90	93	73	97	72	99
25	22	46	61	40	53	44	49	41
30	24	30	36	26	32	29	32	28
35	17	35	24	26	29	22	20	5
40	10	23	15	16	16	13	19	16
45	10	20	16	7	12	7	11	8
50	8	9	13	12	12	5	9	7
55	0	8	10	6	3	9	9	7
60	5	6	8	10	6	3	5	3
65	0	8	10	4	9	6	9	2
70	0	11	4	6	4	3	4	1
75	7	6	5	12	18	9	7	2
80	5	7	2	2	5	6	3	2
85	0	0	3	4	4	2	1	2
90	0	8	3	2	3	1	3	0
95	5	0	0	8	1	1	2	1
100	5	6	3	4	1	1	3	1

TABLA 25

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE FIERRO A 40 RPM

Prueba Fe2	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	840	719	814	782	811	727	741	766
15	207	212	189	193	158	183	176	181
20	105	76	77	73	54	64	53	79
25	41	58	25	43	28	29	19	39
30	21	33	23	27	18	10	11	28
35	15	27	8	16	13	8	16	24
40	13	22	8	13	6	10	13	15
45	8	14	4	8	6	3	5	11
50	1	6	2	6	3	2	7	12
55	4	10	4	1	0	1	5	6
60	1	6	1	5	5	1	5	7
65	2	7	3	4	0	2	3	9
70	3	5	0	5	3	1	2	3
75	2	6	2	1	2	2	1	3
80	3	4	2	1	1	0	1	3
85	3	3	1	4	2	1	1	5
90	0	2	0	1	1	0	3	1
95	2	3	0	1	2	0	2	3
100	1	1	0	1	4	1	2	1

TABLA 26

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE NÍQUEL A 20 RPM

Prueba Ni1	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	480	417	446	434	532	566	360	480
15	182	179	165	183	192	204	176	200
20	95	97	102	103	92	102	119	119
25	53	74	85	72	74	62	70	65
30	38	38	40	57	44	55	38	50
35	39	43	57	31	26	31	35	48
40	31	25	24	23	24	31	35	36
45	13	22	19	28	19	20	23	28
50	23	19	21	23	12	10	24	18
55	19	21	15	15	7	10	23	20
60	15	14	17	14	11	9	21	19
65	13	10	20	13	9	8	11	8
70	6	6	10	8	5	8	5	6
75	4	5	8	8	7	6	9	11
80	10	4	10	7	5	5	11	3
85	7	2	5	3	5	4	7	6
90	6	5	7	9		3	5	2
95	3	5	3	4	2	7	4	3
100	2	4	5	2	2	3	2	6

TABLA 27

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE NÍQUEL A 40 RPM

Prueba Ni2	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	527	636	592	589	622	591	661	615
15	192	239	170	189	198	187	209	232
20	91	91	100	102	88	89	106	102
25	60	56	55	62	54	60	60	65
30	39	30	17	28	25	34	35	34
35	33	27	19	24	26	34	26	34
40	15	16	18	19	24	19	20	28
45	13	11	7	14	21	11	12	16
50	17	8	10	10	10	10	9	7
55	11	8	9	9	8	7	13	8
60	7	7	5	3	5	6	5	8
65	10	4	4	5	4	3	5	4
70	6	2	1	8	5	7	1	6
75	3	7	5	6	3	3	10	7
80	3	2	2	5	5	6	1	1
85	3	4	1	0	4	2	2	1
90	2	0	2	0	5	1	0	0
95	1	0	4	1	2	3	1	3
100	2	2	2	2	2	1	4	2

TABLA 28

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE ZINC A 20 RPM

Prueba Zn1	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	544	552	498	554	542	587	528	574
15	247	196	153	161	209	197	214	189
20	123	117	78	103	98	112	118	107
25	69	56	52	55	71	59	61	67
30	38	30	31	46	38	41	49	45
35	24	19	20	26	27	31	42	28
40	31	15	19	22	22	19	19	21
45	10	10	16	10	15	12	15	6
50	15	7	10	6	8	13	11	22
55	13	4	7	14	9	17	9	8
60	7	5	9	6	10	2	12	7
65	8	4	3	8	7	2	5	6
70	6	5	7	3	3	6	3	10
75	4	3	2	3	4	6	2	8
80	3	5	5	12	4	6	3	5
85	2	3	3	7	2	2	2	0
90	3	5	2	2	5	0	2	3
95	4	1	1	2	4	2	0	6
100	2	3	1	2	0	0	0	0

TABLA 29

DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE PARTÍCULAS PARA
LA PRUEBA DE REMOCIÓN DE ZINC A 40 RPM

Prueba Zn2	Número de partículas							
	tiempo, minutos							
tamaño, μm	1	2	3	4	5	6	7	10
10	533	607	590	613	508	537	520	550
15	208	192	182	216	170	189	223	185
20	96	103	103	126	100	112	119	90
25	58	52	45	65	55	61	67	56
30	35	22	40	33	46	44	39	43
35	22	17	29	25	23	21	30	31
40	17	12	13	23	16	26	24	9
45	17	6	10	13	20	13	17	8
50	15	6	13	11	12	0	15	10
55	14	2	8	3	5	0	10	8
60	9	3	8	7	7	0	8	4
65	4	3	3	6	6	0	9	3
70	3	3	3	2	4	0	7	5
75	6	7	8	5	5	0	4	6
80	6	3	2	2	2	0	6	3
85	2	4	4	1	7	0	1	7
90	0	0	0	0	3	0	2	2
95	0	2	0	1	3	0	4	1
100	2	0	3	1	2	0	1	0

Los datos mostrados en las Tablas 22 a 29, fueron empleados para el entrenamiento de las redes neuronales artificiales, posteriormente se recalcularon las distribuciones para cada prueba realizada, utilizando una estructura de red neuronal 2-6-6-1, para las pruebas a 20 rpm y 2-16-16-1 para la prueba Zn2, 2-15-15-1 para la prueba Cr2 y Ni2, y una estructura 2-8-8-1, para la prueba Fe2, estos resultados se muestran en las tablas 30 a 37, en este mismo apéndice.

TABLA 30

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL, PARA LA REMOCIÓN DEL CROMO A 20 RPM

<i>Prueba Cr1</i>	Número de partículas		
Tiempo (min)	medidas	calculadas	Error
1	554	547.85	1.11%
2	503	505.75	0.55%
3	390	385.03	1.27%
4	364	362.54	0.40%
5	358	361.71	1.04%
6	398	401.59	0.90%
7	551	538.93	2.19%
10	317	317.72	0.23%

TABLA 31

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL CROMO A 40 RPM

<i>Prueba Cr2</i>	Número de partículas		
Tiempo(min)	medidas	calculadas	Error
1	636	620.10	2.50%
2	568	573.54	0.98%
3	562	559.87	0.38%
4	458	459.83	0.40%
5	583	579.65	0.57%
6	500	502.19	0.44%
7	590	586.26	0.63%
10	451	451.94	0.21%

TABLA 32

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL
ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL FIERRO A 20 RPM

Prueba Fe1	Número de partículas		
Tiempo(min)	medidas	calculadas	Error
1	470	469.34	0.14%
2	503	502.27	0.15%
3	495	494.50	0.10%
4	541	539.23	0.33%
5	571	578.22	1.26%
6	612	596.46	2.54%
7	375	375.16	0.04%
10	562	260.41	0.16%

TABLA 33

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL
ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL FIERRO A 40 RPM

Prueba Fe2	Número de partículas		
Tiempo (min)	medidas	calculadas	Error
1	840	830.00	-1.19%
2	719	721.31	0.32%
3	814	805.22	-1.08%
4	782	787.33	0.68%
5	811	808.33	-0.33%
6	727	726.43	-0.08%
7	741	754.74	1.85%
10	766	753.40	-1.65%

TABLA 34

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL
ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DE NÍQUEL A 20 RPM

<i>Prueba Ni1</i>	Número de partículas		
Tiempo (min)	medidas	calculadas	Error
1	480	479.57	-0.09%
2	417	416.80	-0.05%
3	446	442.27	-0.84%
4	434	435.48	0.34%
5	532	535.27	0.61%
6	566	550.94	-2.66%
7	360	359.13	-0.24%
10	480	480.59	0.12%

TABLA 35

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL
ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL NÍQUEL A 40 RPM

<i>Prueba Ni2</i>	Número de partículas		
Tiempo (min)	medidas	calculadas	Error
1	527	527.28	0.05%
2	636	632.31	-0.58%
3	592	589.88	-0.36%
4	589	597.28	1.41%
5	622	615.79	-1.00%
6	591	593.05	0.35%
7	661	647.32	-2.07%
10	615	620.35	0.87%

TABLA 36

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL ZINC A 20 RPM

Prueba Zn1	Número de partículas		
	Tiempo(min)	medidas	calculadas
1	544	550.08	1.12%
2	552	549.96	-0.37%
3	498	503.18	1.04%
4	554	543.62	-1.87%
5	542	546.44	0.82%
6	587	579.43	-1.29%
7	528	532.41	0.84%
10	574	573.68	-0.06%

TABLA 37

RESULTADOS DE LA MODELACIÓN DE LA RED NEURONAL ARTIFICIAL PARA LA REMOCIÓN DEL ZINC A 40 RPM.

Prueba Zn2	Número de partículas		
	Tiempo (min)	medidas	calculadas
1	533	532.64	-0.07%
2	607	606.07	-0.15%
3	590	596.27	1.06%
4	613	602.09	-1.78%
5	508	509.04	0.20%
6	537	527.55	-1.76%
7	520	527.00	1.35%
10	550	549.00	-0.18%

De las distribuciones de tamaño y número de partículas, se realizaron ajustes a un modelo matemático no lineal, mostrado en la ecuación (8), las constantes de proporcionalidad a y b , obtenidas durante el ajuste y el % de error que muestra el modelo se pueden observar en las Tablas 38 a 41.

TABLA 38

CONSTANTES DE PROPORCIONALIDAD a Y b y % DE ERROR QUE EXHIBE EL MODELO PARA LAS PRUEBAS DE REMOCION DE CROMO

Tiempo (min)	Prueba Cr1			Prueba Cr2		
	a	b	% Error	a	b	% Error
1	182853.56	2.52	15.02	294587.95	2.667	11.29
2	161961.6	2.51	4.41	136936.79	2.386	15.94
3	98399.5	2.403	4.96	215465.38	2.588	32.32
4	63259	2.24	3.99	47773.24	2.024	9.52
5	39555	2.044	38.9	259369.95	2.65	24.83
6	25360.6	1.798	30.47	62444.95	2.097	17.51
7	77828.5	2.148	21.11	228487.55	2.59	27.52
10	10375.1	1.514	6.014	47918.77	2.029	18.51

TABLA 39

CONSTANTES DE PROPORCIONALIDAD a Y b y % DE ERROR QUE EXHIBE EL MODELO PARA LAS PRUEBAS DE REMOCION DE FIERRO

Tiempo (min)	Prueba Fe1			Prueba Fe2		
	a	b	% Error	a	b	% Error
1	440207.76	2.971	37.77	1648865.5	3.293	1.921
2	212340.07	2.628	37.06	676546.44	2.974	36.11
3	142631.74	2.462	13.22	2886643.8	3.55	17.57
4	193992.55	2.553	10.24	1846419.2	3.373	29.36
5	328802.67	2.761	23.92	7185250.8	3.947	27.00
6	328802.64	2.727	2.87	2068740.3	3.453	2.01
7	79265.26	2.327	2.52	21247.52	1.77	12.00
10	135174.39	2.374	25.86	1827894.8	3.378	15

TABLA 40

CONSTANTES DE PROPORCIONALIDAD a Y b y % DE ERROR QUE EXHIBE EL MODELO PARA LAS PRUEBAS DE REMOCION DE NIQUEL

Tiempo (min)	Prueba Ni1			Prueba Ni2		
	a	b	% Error	a	b	% Error
1	89315.1	2.27	15.97	144397.1	2.438	1.55
2	42837.52	2.013	11.82	254689.48	2.6	6.92
3	49285.44	2.05	10.68	391694.25	2.822	9.91
4	44081.26	2.009	5.18	251736.98	2.632	9.52
5	130213.6	2.39	9.51	353615.11	2.755	26.73
6	139355.78	2.393	15.7	139355.78	2.393	34.32
7	21247.52	1.77	22.76	335643.45	2.707	8.94
10	52245.89	2.04	5.64	183421.69	2.474	26.71

TABLA 41

CONSTANTES DE PROPORCIONALIDAD a Y b y % DE ERROR QUE EXHIBE EL MODELO PARA LAS PRUEBAS DE REMOCION DE ZINC

Tiempo (min)	Prueba Zn1			Prueba Zn2		
	a	b	% Error	a	b	% Error
1	83778.57	2.183	38.3	135616.59	2.404	3.05
2	165788.4	2.477	19.40	342049.09	2.751	6.84
3	236728.27	2.679	20.03	289605.87	2.692	16.63
4	234860.27	2.631	22.12	182867.18	2.475	13.96
5	127072.36	2.369	9.13	144720.27	2.457	8.08
6	183421.68	2.474	25.73	147006.58	2.438	4.04
7	90745.51	2.234	40.27	81286.75	2.191	6.32
10	178316.18	2.495	13.59	208173	2.579	0.5