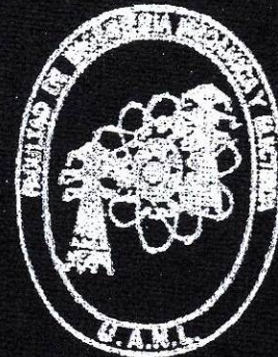
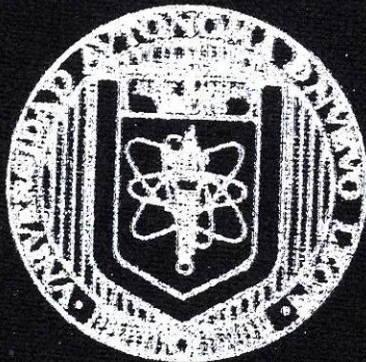


UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA



TEMA DE TESIS

**"ANALISIS ESTADISTICO Y OPTIMIZACION DE LOS
FACTORES DEL PROCESO DE TRATAMIENTO DE
AGUAS RESIDUALES CON METALES PESADOS"**

TESIS

**PARA OPTAR POR EL GRADO DE
INGENIERO ADMINISTRADOR DE SISTEMAS**

PRESENTA

JOSE FRANCISCO VELAZQUEZ AGUILAR

ASESOR: JOSE ARTURO BERRONES SANTOS

SAN NICOLAS DE LOS GARZA, N. L.

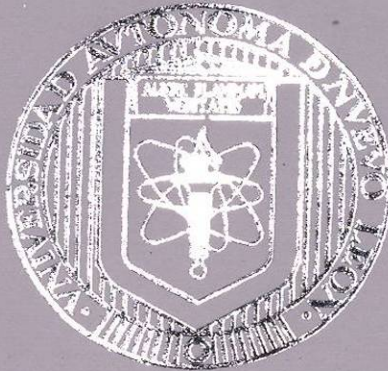
ENERO DE 2006

TL
TD745
.v45
2006
c.1



1080090293

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA



TEMA DE TESIS

**"ANALISIS ESTADISTICO Y OPTIMIZACION DE LOS
FACTORES DEL PROCESO DE TRATAMIENTO DE
AGUAS RESIDUALES CON METALES PESADOS"**

T E S I S

**PARA OPTAR POR EL GRADO DE
INGENIERO ADMINISTRADOR DE SISTEMAS**

P R E S E N T A

JOSE FRANCISCO VELAZQUEZ AGUILAR

ASESOR: JOSE ARTURO BERRONES SANTOS

SAN NICOLAS DE LOS GARZA, N. L. ENERO DE 2006



**Universidad Autónoma de
Nuevo León**



**FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA
Y ELÉCTRICA**

TEMA DE TESIS

**“ANÁLISIS ESTADÍSTICO Y OPTIMIZACIÓN DE LOS
FACTORES DEL PROCESO DE TRATAMIENTO DE
AGUAS RESIDUALES CON METALES PESADOS”**

**TESIS
PARA OPTAR POR EL GRADO DE
INGENIERO ADMINISTRADOR DE SISTEMAS**

PRESENTA

JOSÉ FRANCISCO VELÁZQUEZ AGUILAR

ASESOR: JOSÉ ARTURO BERRONES SANTOS

SAN NICOLAS DE LOS GARZA, N.L. ENERO DE 2006

*A mis Padres,
Como estudiante, conservo la alegría de poder haber hecho lo que
realmente quise, gracias a ustedes.
Dejo el tesón que les aprendí.
un ánimo siempre dispuesto y el espíritu de cuestionar y participar,
siempre guiada por ustedes.
Gracias, un millón de veces por darme las herramientas para
construir este sueño y más gracias aún por vivirlo conmigo
alentándome, corrigiéndome, comprendiéndome ó celebrando
los logros a mi lado.
... Y es que ver el orgullo reflejado en sus rostros siempre ha sido
mi más grande móvil.
Por eso, este "gran logro" no podía ser para nadie más que para
mis dos grandes pilares: ¡Ustedes!*

*Con todo mi corazón gracias.
Su hijo que los adora.*

José Francisco

Agradecimientos

Quiero expresar un gran sentimiento de gratitud a las siguientes personas

A Jehová Dios

Por darme vida, salud, entendimiento y por permitir terminar este sueño

A mis padres José Francisco y María Irene:

Por brindarme un hogar cálido y enseñarme que la perseverancia y el esfuerzo son el camino para lograr objetivos y por infundir en mí la ética, el cariño y el rigor que guían mi transitar por la vida

A mis hermanas Jackeline y Susana

Por su comprensión durante todo este tiempo que hemos pasado juntos, por confiar en mí y por su constante estímulo

A mi asesor el Dr. José Arturo Berrones Santos

Por su generosidad al brindarme la oportunidad de haber trabajado con él, de recurrir a su capacidad y gran experiencia en un marco de confianza, afecto y amistad, fundamentales para la concreción de esta tesis

A todos los profesores del Posgrado de Ingeniería en Sistemas

Por la calidez y apoyo permanente que me brindaron durante todo este tiempo que estuve trabajando en este posgrado y por haberme hecho sentir en casa

A la M.C.: Mónica Alcalá Rodríguez

Por su predisposición permanente e incondicional en aclarar mis dudas y por sus substanciales sugerencias sobre mi proyecto de investigación

A la M.C.: Valeria Paola González

Por su permanente disposición y desinteresada ayuda, por aguantar tanto gorro de mi parte y por sus orientaciones en el tema de Redes Neuronales Artificiales

Al Ing. Cástulo Vela Villarreal

Por haber confiando en mí desde el principio de mi licenciatura hasta la culminación de ella.

A mis compañeros del Posgrado de Sistemas

Por su presencia incondicional, amistad y paciencia, sobre todo a Aristóteles por asesorarme en la realización de mi exposición en el verano científico PISIS 2005

A mis amigos

Por su amistad, calidez, apoyo y compañerismo al compartir inquietudes, éxitos y fracasos durante la realización de nuestra metas

Muchas Gracias a todas estas personas que ya cuentan con un lugar en mi corazón.

Índice

Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iii
Capítulo 1 Introducción	1
Capítulo 2 Metodología Empleada	3
2.1 Representación del sistema	3
2.2 Experimento.....	4
2.3 Simulación del proceso	4
2.4 Modelo de red neurona artificial.....	7
Capítulo 3 Tratamiento de Aguas Residuales	9
3.1 Naturaleza de las aguas residuales	9
3.1.1 Caudales	9
3.1.2 Características de las aguas residuales.....	14
3.2 Caracterización de las aguas residuales industriales.....	18
3.2.1 Orígenes de las aguas residuales industriales.....	18
3.2.2 Aguas residuales de operaciones de proceso.....	19
3.2.3 Aguas residuales de la refinación de petróleo.....	19
3.2.4 Estándares de la descarga de las aguas residuales.....	20
3.3 Floculación	25
3.4 Sedimentación	26
3.4.1 Tipos de sedimentaciones	26
3.4.2 Flujo Horizontal	27
3.4.3 Sólido-Contacto	29
3.4.4 Superficie inclinada	30
Capítulo 4 Redes Neuronales Artificiales	31
4.1 Introducción	31
4.2 Neuronas biológicas	32
4.3 ¿Qué es una red neuronal artificial?.....	35
4.4 Elementos de una red neuronal artificial.....	36
4.5 Analogía con las redes neuronales biológicas	37
4.6 Estructura y formas de conexión	39

4.7 La función de propagación (de red ó base)	40
4.8 La función de activación.....	41
4.9 Modelo matemático (Red Neuronal Artificial).....	46
Capitulo 5 Precipitación Química	48
5.1 Introduccion	48
5.2 Parte experimental	49
5.3 Resultados y discusión.....	53
5.4 Conclusiones.....	59
Capitulo 6 Caso de estudio	60
6.1 Difusión.....	60
6.1.1 Ejemplos de difusión.....	60
6.1.2 La naturaleza de la difusión.....	61
6.2 Descripción del problema	63
6.3 Objetivo General	65
6.4 Simulación del proceso.....	66
6.5 Software estadístico.....	74
6.7 Estudio de las curvas de la simulación de partículas	79
Capitulo 7 Conclusiones y trabajo a futuro	93
Referencias Bibliográficas	94

Capítulo 1

Introducción

Trazas de algunos metales tales como arsénico, cobalto, germanio, níquel, rubidio y vanadio juegan un importante papel en la vida de muchos organismos, así como algunos de estos metales son esenciales para la vida, un exceso de éstos, son una amenaza para la salud humana y para el medio ambiente.

La preocupación por la escasez de agua en cantidad y calidad es una preocupación mundial. Alrededor de 1,200 millones de personas todavía no tienen acceso al agua potable y 2,400 millones de personas no tienen servicios sanitarios adecuados. Cada año mueren cerca de 2 millones de niños a causa de enfermedades ocasionadas por el agua. En los países más pobres, uno de cada cinco niños muere antes de los cinco años de edad, principalmente por enfermedades infecciosas relacionadas con el agua, producidas como consecuencia de la insuficiencia de esta, tanto en cantidad como en calidad. En los últimos 10 años, las enfermedades diarreicas, que son el resultado de la falta de servicios adecuados de agua y saneamiento, han causado la muerte a un número de niños mayor que el total de las personas que han muerto como consecuencia de conflictos armados después de la Segunda Guerra Mundial [1].

Las industrias que actualmente se instalan en los países en vías de desarrollo no cumplen con las normas de vertimiento de los países de origen, las cuales son más rigurosas en general que las nuestras. Se sabe que estas tecnologías son contaminantes y requieren por lo tanto una vigilancia mayor de sus vertimientos y el control adecuado de sus plantas de tratamiento, ya que de otra forma crearían graves daños al entorno [1].

Algunas industrias no tienen plantas de tratamiento, de esta forma el desastre es manifiesto. Cuando la industria posee tratamiento pero no funciona adecuadamente ó no se tiene un control de sus vertimientos ocurren importantes afectaciones sobre las plantas municipales de tratamiento de residuales albañales.

Por tal motivo la Facultad de Ciencias Químicas presenta una alternativa para remover metales pesados de aguas residuales que genera la industria galvánica de la ciudad de Monterrey, con el fin de que las plantas cuenten con un tratamiento de aguas residuales adecuado.

Es precisamente aquí donde entra esta tesis que representa una parte del proyecto de la Facultad de Ciencias Químicas, que consiste en aplicar metodologías matemáticas para el desarrollo de una ecuación matemática que caracterice la evolución en el tiempo de la distribución de tamaño de flóculos para cada uno de los parámetros correspondientes al proceso de precipitación química para la remoción de los metales pesados.

Es precisamente en este tipo de casos donde la metodología que aquí se demuestra se convierte en una herramienta eficaz para determinar claramente las variables del proceso y de esta forma encontrar el mejor modelo que se acople al proceso de precipitación química.

La metodología propuesta integra herramientas de análisis estadístico de datos experimentales, apoyado en software estadístico, además de que se utilizan modelos de simulación y software de optimización.

Capítulo 2

Metodología Empleada

En la Figura 1 se muestra esquemáticamente la metodología utilizada en este trabajo y se discute a detalle a continuación.

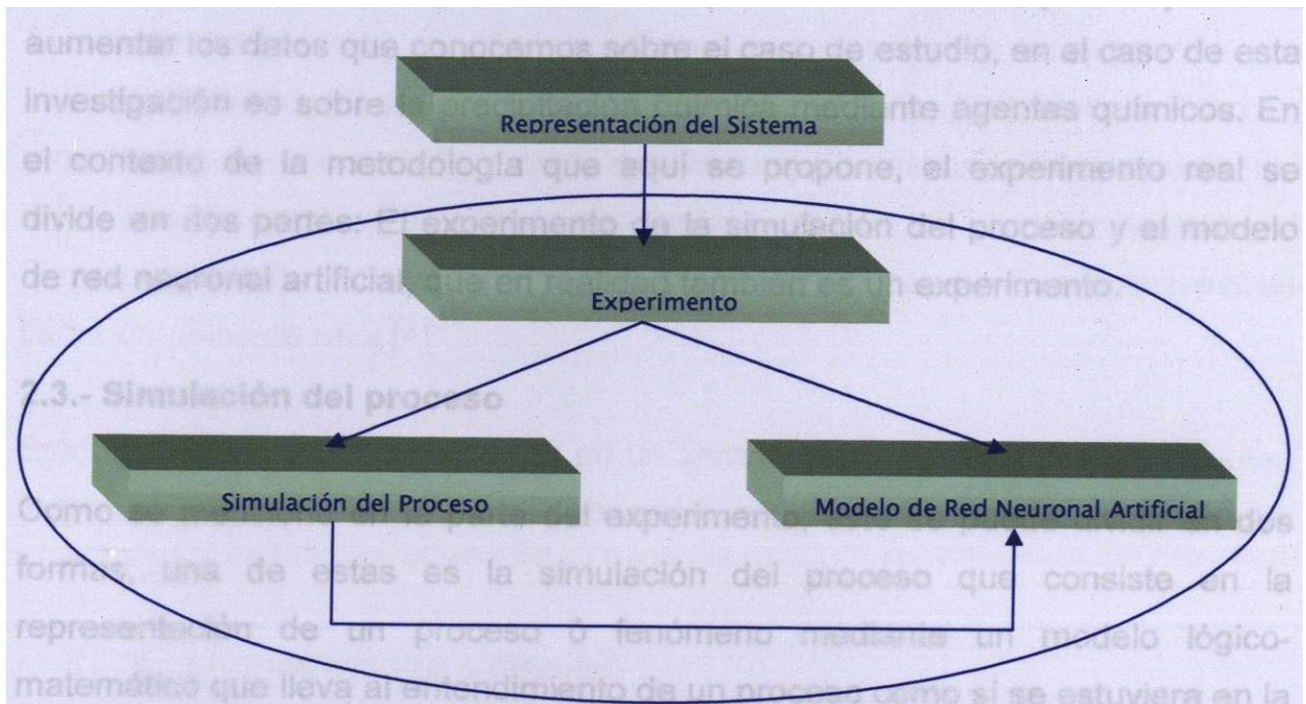


Figura 1 – Metodología Empleada

2.1.- Representación del sistema

En esta parte de la metodología se identifican las variables de interés ó controlables que son los parámetros que podemos variar a discreción dentro del sistema. Se definen también las variables no controlables. También en esta fase se deben identificar las medidas de desempeño que se desean mejorar. El conocimiento previo y la intuición ingenieril pueden utilizarse en esta fase para elevar la probabilidad de que las medidas de desempeño se encuentren en función de las variables controlables.

2.2.- Experimento

El experimento es una colección de técnicas científicas que prescribe la planeación, ejecución y el análisis de pruebas planeadas donde se introducen cambios controlados en un proceso ó un sistema con el objetivo de analizar la variación inducida por estos cambios en una medida de desempeño [2], es decir un experimento se diseña de manera que podamos hacer un descubrimiento de algo desconocido ó percibir una relación previamente oculta, y su objetivo es aumentar los datos que conocemos sobre el caso de estudio, en el caso de esta investigación es sobre la precipitación química mediante agentes químicos. En el contexto de la metodología que aquí se propone, el experimento real se divide en dos partes: El experimento de la simulación del proceso y el modelo de red neuronal artificial, que en realidad también es un experimento.

2.3.- Simulación del proceso

Como se menciona en la parte del experimento, este se puede dividir en dos formas, una de estas es la simulación del proceso que consiste en la representación de un proceso ó fenómeno mediante un modelo lógico-matemático que lleva al entendimiento de un proceso como sí se estuviera en la realidad, esto permite analizar sus características de diferentes maneras [3]. Esto quiere decir que la simulación del proceso me sirve para llegar a mi segunda forma del experimento que es un modelo matemático. La simulación de procesos es una de las más grandes herramientas de la ingeniería industrial, como ya se mencionó se utiliza para representar un proceso mediante otro que lo hace mucho más entendible y simple.

Algunos tipos de simulación de procesos que se pueden realizar son:

- ↓ La simulación de eventos discretos
- ↓ La simulación mediante agentes
- ↓ La simulación por discretización de ecuaciones diferenciales

➤ La simulación de eventos discretos

Este tipo de simulación se refiere a sistemas que pueden ser representados por una secuencia ó serie de eventos. La simulación describe cada evento discreto, moviéndose de uno a otro a medida que el tiempo transcurre, es decir es aquel en el que los cambios de estado del modelo, ocurren en puntos discretos del tiempo (eventos). Cada punto del tiempo en que ocurre uno ó más eventos se llama un golpe de reloj [4].

Este tipo de simulación comienza en un tiempo inicial (igual a 0) y se ejecutan todos los eventos en el orden que deben ocurrir, avanzando de un evento a otro hasta que:

1. No hay mas eventos a ejecutar
2. El tiempo de ejecución del próximo evento supera el máximo previsto como "duración" de la simulación
3. Se ejecutó algún evento que ponga fin a la simulación

Un ejemplo donde se puede aplicar este tipo de simulación es un sistema de inventarios, donde cada semana un operario debe tomar una decisión de cuanto encargar (comprar ó solicitar). En este sistema se identifican tres eventos que son:

- a) Colocar una orden ó solicitud
- b) Llegada de una solicitud
- c) Una venta ó utilización de un producto

En este tipo de caso se puede hacer una simulación donde se pueda pronosticar cuanto deberá de solicitar el operario cada semana de un producto ó varios productos, para evitar un excedente de inventario que provocaría un alto costo mantenerlo.

➤ La simulación mediante agentes

La simulación mediante agentes es un acercamiento para simular el comportamiento de un sistema complejo, en el cual los agentes obren recíprocamente uno con el otro y con su ambiente, usando reglas locales simples. Los agentes se utilizan para la generación del comportamiento del modelo, en un estudio de la simulación [3].

La simulación mediante agentes se utiliza ya en varias categorías de las áreas de aplicación por ejemplo en:

- *Ingeniería*: Ingeniería Eléctrica, Sistemas de Irrigación, Sistemas de Fabricación, Redes, Robótica, Software, así como en transportes logísticos.
- *Gerencia/Económica*: Economía, Comercio, y Gerencia;
- *Sistemas sociales y comportamiento humano*: Sistemas Sociales, comportamiento de psicología/humana, fisiología, negociación y teoría de organización

➤ La simulación por discretización de ecuaciones diferenciales

La simulación por discretización de ecuaciones diferenciales es un método en donde es esencial el concepto de "discretización" ó acción de transformar la realidad de la naturaleza continua en un modelo discreto aproximado, además es también esencial del concepto de "interpolación", ó acción de aproximar los valores de una función a partir de su conocimiento en un numero discreto de

puntos [3]. Por lo tanto este tipo de simulación es un método aproximado desde múltiples perspectivas.

Esta presentación aproximada de la realidad en forma de un modelo matemático permite la resolución del problema. La discretización correcta depende de diversos factores como son el tipo de información que se desea extraer del modelo ó tipo de sollicitación aplicada [3]. Sin embargo queda en manos de la persona que esta realizando el modelo, decir hasta que punto la discretización utilizada en el modelo representa adecuadamente la estructura que se requiere ó se busca.

Este tipo de simulación se utiliza mucho para simular procesos físicos y químicos. Un ejemplo de este tipo de simulación son los problemas relacionados con el movimiento de partículas, que es un ejemplo que se presenta en esta tesis.

De estos tres tipos de simulación que se presentaron, el tercer tipo de simulación que es el de "*Simulación por discretización de ecuaciones diferenciales*", es el que se emplea en esta tesis, por motivo de que se esta transformando un proceso ("la difusión" - distribución de partículas) ó realidad a un modelo matemático (Red Neuronal Artificial), es decir se están aproximando valores de una función a partir de números discretos, donde se programo en código FORTRAN.

2.4.- Modelo de Red Neuronal Artificial

El modelo matemático que se define en este estudio como una red neuronal artificial, no es mas que encontrar una ecuación matemática para un objeto ó proceso no matemático, es decir construir una estructura ó teoría matemática que incorpora las características esenciales del objeto ó 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 [5]:

- ⬇ Redes Neuronales Artificiales de clasificación
- ⬇ Redes Neuronales Artificiales de regresión
- ⬇ Redes Neuronales Artificiales de aproximación
- ⬇ Redes Neuronales Artificiales de optimización

El tipo de problema que se aborda en esta tesis es el de Redes Neuronales Artificiales de aproximación, por el motivo de que tenemos un proceso no lineal el cual se quiere describir a través de un modelo matemático.

Capítulo 3

Tratamiento de Aguas Residuales

3.1.- Naturaleza de las Aguas Residuales

La naturaleza de las aguas residuales es descrita por sus características del flujo y de la calidad. Además, se clasifican las descargas de las aguas residuales en municipales ó industriales. Los caudales y las características de la calidad de las aguas residuales industriales son más variables que las características de calidad de las aguas residuales municipales.

3.1.1.- Caudales

Las aguas residuales municipales son compuestas por las aguas residuales domésticas (ó sanitarias), las aguas residuales industriales, infiltración y afluencia en líneas de la alcantarilla y la salida de grandes tormentas. Las aguas residuales domésticas son aquellas que son descargadas de residencias y de instalaciones comerciales e institucionales [6]. El uso doméstico del agua y las aguas residuales resultantes, son afectados por diferentes factores como el clima, tamaño de la comunidad, densidad del desarrollo, formalidad y calidad del abastecimiento de agua, los requisitos ó las prácticas de la conservación del agua y el grado de servicios medidos ([6] - Proporciono los detalles en la influencia de estos factores). Los factores adicionales que afectan el uso del agua son el grado de industrialización, el costo de agua, y el suministro de presión [7]. Un resultado de la influencia combinada de éstos factores son las fluctuaciones del uso del agua. La tabla 1 resume tales fluctuaciones [6].

Cerca del 60 al 85% de uso del agua se convierte en aguas residuales, con los porcentajes más bajos aplicables a la región semiárida de los Estados Unidos, al sudoeste [6].

Tabla 1 - Fluctuaciones típicas en uso del agua en sistemas de la comunidad

Uso del Agua	Porcentaje del promedio por año	
	Rango	Típico
Diariamente promedio en mes máximo	110-140	120
Diariamente promedio en semana máximo	120-170	140
Máximo día	160-220	180
Máximo hora	225-320	270 ^a

Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991.
 Nota: ^a1.5 x valor máximo del día

Los ingenieros ambientales pueden utilizar datos del caudal de la unidad para desarrollar las estimaciones para los caudales de las aguas residuales de áreas residenciales, de distritos comerciales, y de instalaciones institucionales. Las tablas del 2 al 4, representan los datos para estas categorías del uso, respectivamente.

Los caudales industriales de las aguas residuales varían y son una función del tipo y tamaño de la industria.

Las áreas industriales que tienen poco ó nada de procesos de tipo de riego utilizan de 1000 a 1500 gal/acre por día (9 a 14 m³/ha por día) para los procesos industriales ligeros y medianos son de 1500 a 3000 gal/acre por día (14 a 28vm³/ha por día). ([6] -1 acre = 0.40 hectáreas).

Estimaciones mejores para las industrias se pueden desarrollar con la información industrial.

Tabla 2 - Caudales típicos de las aguas residuales de fuentes residenciales

Fuente	Unidad	Flujo gal/unidad por día	
		Rango	Típico
Apartamento:			
Alto	Persona	35-75	50
Bajo	Persona	50-80	65
Hotel		30-55	45
Residencial Individual:			
Hogar típico	Persona	45-90	70
Un hogar mejor	Persona	60-100	80
Hogar de lujo	Persona	75-150	95
Un hogar viejo	Persona	30-60	45
Cabaña de verano	Persona	25-50	40
Motel:			
Con cocina	Unidad	90-180	100
Sin cocina	Unidad	75-150	95
Parque del Remolque	Persona	30-50	40
Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991			
Nota = 1 - gal x 3.7854			

Tabla 3 - Caudales típicos de las aguas residuales de fuentes comerciales

Fuente	Unidad	Flujo gal/unidad por día	
		Rango	Típico
Aeropuerto	Pasajero	2 – 4	3
Estación de servicio automovilístico	Vehículo	7-13	10
	Empleado	9-15	12
Bar	Cliente	1-5	3
	Empleado	10-16	13
Departamento de Almacén	Espacio de Lavabo	400-600	500
	Empleado	8-12	10
	Huésped	40-56	48
Hotel	Empleado	7-13	10
	Empleado	7-16	13
Edificio Industrial (basura sanitaria solamente)	Empleado	7-16	13
Lavadero (autoservicio)	Maquinaria	450-650	550
	Colada	45-55	50
Oficina	Empleado	7-16	13
Restaurante	Comida	2-4	3
Centro de compras	Empleado	7-13	10
	Espacio de estacionamiento	1-2	2

Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991

Nota = 1 – gal x 3.7854

Tabla 4 - Caudales típicos de las aguas residuales de fuentes institucionales

Flujo gal/unidad por día			
Fuente	Unidad	Rango	Típico
Hospital Medico	Cama	125-240	165
	Empleado	5-15	10
Hospital Mental	Cama	75-140	100
	Empleado	5-15	10
Prisión	Interno	75-150	115
	Empleado	5-15	10
Casa Residentes	Residente	50-120	85
Escuela			
Con cafetería, gym y regaderas	Estudiante	15-30	25
Con cafetería solamente	Estudiante	10-20	15
Sin cafetería y sin gym	Estudiante	5-17	11
Escuela	Estudiante	50-100	75

Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991

Nota: 1 - gal x 3.7854.

El volumen de las aguas residuales generado en un municipio depende de la población servida y otras fuentes tales como descargas industriales de las aguas residuales. Los ingenieros ambientales pueden necesitar utilizar a la población, para proyectar los índices futuros de la generación de las aguas residuales en el área de servicio de una planta de tratamiento de aguas residuales. Algunos métodos matemáticos o gráficos usados para proyectar datos de la población a un año del diseño son:

- ✓ Crecimiento aritmético.
- ✓ Crecimiento geométrico.
- ✓ Coeficiente de incremento que disminuye.
- ✓ Ajuste de curva matemática o lógica.
- ✓ Comparación gráfica con las ciudades similares.
- ✓ Método del cociente.
- ✓ Pronóstico del empleo.

3.1.2.- Características de las aguas residuales

La calidad de las aguas residuales se puede definir por características físicas, químicas, y biológicas. Los parámetros físicos incluyen color, olor, temperatura, los sólidos (residuos), turbiedad, el aceite, y la grasa. Los sólidos se pueden clasificar más a fondo en los sólidos suspendidos y disueltos (tamaño y estabilidad) así como fracciones (fijas) orgánicas (volátil) e inorgánicas. Los parámetros químicos se asociaron al contenido orgánico de las aguas residuales, las cuales incluyen la demanda bioquímica del oxígeno (BOD), la demanda de oxígeno producido por reacción química (COD), el carbón orgánico total (TOC), y la demanda total del oxígeno (TOD). El BOD es una medida de los organismos presentes en el agua, determinada por el oxígeno necesario para biostabilizar los organismos (equivalente al oxígeno de los organismos biodegradables presentes). Los parámetros químicos inorgánicos incluyen salinidad, dureza, el pH, la acidez, la alcalinidad, el hierro, el manganeso, los cloruros, los sulfatos, los sulfuros, los metales pesados (mercurio, plomo, cromo, cobre, y cinc), el nitrógeno (orgánico, amoníaco, nitrito, y nitrato), y el fósforo. Los parámetros bacteriológicos incluyen coliformos, coliformos fecales, patógeno específicos, y virus.

Las consideraciones del diseño para las instalaciones del tratamiento de aguas residuales se basan en parte en las características de las aguas residuales. La tabla 5 enumera algunas de las características principales.

Tabla 5 – Características físicas, químicas y biológicas de las aguas residuales consideradas para el diseño

Física	Química	Biológica
Sólidos	Orgánicos	Plantas
Temperatura	Proteínas	Animales
Color	Carbohidratos	Virus
Olor	Lípidos	
	Surfactantes	
	Fenoles	
	Pesticidas	
	Inorgánicos	
	pH	
	Cloruro	
	Alcalinidad	
	Nitrógeno	
	Fósforo	
	Metales Pesados	
	Materiales Tóxicos	
	Gases	
	Oxígeno	
	Sulfuro de Hidrógeno	
	Metano	

Fuente: Water Pollution Control Federation and American Society of Civil Engineers, 1977.

La tabla 6 demuestra la gama típica de la concentración de varios componentes en aguas residuales domésticas no tratadas. Dependiendo de las concentraciones, las aguas residuales se clasifican como fuertes, medias, o débil. El mineral típico de las demostraciones de la tabla 7 muestra el aumento del mineral en el uso doméstico del agua. Los tipos y los números de microorganismos en aguas residuales domésticas no tratadas varían extensamente, los ejemplos de tales variaciones se demuestran en la tabla 8.

Tabla 6 - Composición típica de las aguas residuales domésticas no tratadas

Contaminantes	Unidad	Concentración		
		Débil	Mediano	Fuerte
Sólidos Totales	mg / l	350	720	1200
Sólidos Disueltos	mg / l	250	500	850
Fijos	mg / l	125	300	525
Volátiles	mg / l	105	200	325
Sólidos Suspendidos	mg / l	100	220	350
Fijos	mg / l	20	55	75
Volátiles	mg / l	80	165	275
Sólidos Estables	mL / l	5	10	20
BOD, mg / l:				
5 – días, 20°C (BOD ₅ , 20°C)	mg / l	110	220	400
TOC	mg / l	80	160	290
COD	mg / l	250	500	1000
Nitrógeno (Total como N)	mg / l	20	40	85
Orgánico	mg / l	8	15	35
Amoníaco libre	mg / l	12	25	50
Nitritos	mg / l	0	0	0
Nitratos	mg / l	0	0	0
Fósforo (Total como P)	mg / l	4	8	15
Orgánico	mg / l	1	3	5
Inorgánicos	mg / l	3	5	10
Cloruros ^a	mg / l	30	50	100
Sulfatos ^a	mg / l	20	30	50
Alcalinidad (como CaCO ₃)	mg / l	50	100	200
Grasa	mg / l	50	100	150
Total Coliformo	no / 100 ml	10 ⁵ - 10 ⁷	10 ⁷ - 10 ⁸	10 ⁷ - 10 ⁹
Compuestos orgánicos volátiles	µg / L	< 100	100 - 400	> 400

Fuente: Metacalf and Hedí, Inc., 1991

Notas: °F = 1.8(°C) + 32

^a Los valores se deben aumentar en la cantidad presente en el abastecimiento de agua doméstica; ver la tabla 7.

Tabla 7- Aumento mineral típico del agua doméstica

Componente	Incremento
Aniones	
Bicarbonato (HCO ₃)	50 – 100
Carbonato (CO ₃)	0 – 10
Cloruro (Cl)	20 – 50 ^b
Nitrato (NO ₃)	20 – 40
Fósforo (PO ₄)	5- 15
Sulfato (SO ₄)	15 - 30
Cationes	
Calcio (Ca)	6 – 16
Magnesio (Mg)	4 – 10
Potasio (K)	7 – 15
Sodio (Na)	40 – 70
Otros Componentes	
Aluminio (Al)	0.1 – 0.2
Boro (B)	0.1 – 0.4
Fluoruro (F)	0.2 – 0.4
Manganeso (Mn)	0.2 – 0.4
Silicona (SiO ₂)	2 – 10
Alcalinidad (como CaCO ₃)	60 – 120
TDS	150 – 380

Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991

Notas: ^a Los valores divulgados no incluyen adiciones comerciales e industriales.^b Excepto la adición de los suavizadores de agua domésticos

Tabla 8 - Los tipos y el número de microorganismos encontrados típicamente en aguas residuales domésticas no tratadas

<i>Organismo</i>	<i>Concentración n/ml</i>
Coliformo	$10^5 - 10^5$
Coliformo Fecal	$10^4 - 10^5$
Estreptococos Fecales	$10^3 - 10^4$
Enterococos	$10^2 - 10^3$
Shigella	Presente ^a
Salmonera	$10^0 - 10^2$
Aeroginosa de los pseudomonas	$10^1 - 10^2$
Clostridium perfringens	$10^1 - 10^3$
Mycobacteria tuberculosis	Presente ^a
Quistes del protozoario	$10^1 - 10^3$
Quistes de Giardia	$10^{-1} - 10^2$
Quistes de Cryptosporidium	$10^{-1} - 10^1$
Ova del helminto	$10^{-2} - 10^1$
Virus entérico	$10^1 - 10^2$

Fuente: Metcalf and Eddy, Inc., 1991.

Nota: ^a Los resultados para estas pruebas se divulgan como positivos ó negativos que se cuantifican generalmente

3.2.- Caracterización de las aguas residuales industriales

3.2.1. - Orígenes de las aguas residuales industriales

Las aguas residuales industriales surgen de las descargas de las industrias y de los procesos asociados que utilizan el agua. Las industrias en Estados Unidos descargan 285 mil millones galones de aguas residuales a diario [10]. El agua se utiliza en la industria para el lavado y transporte del producto, generación del producto, y otros propósitos. Aunque es variable entre las industrias y las plantas dentro de la misma industria, cerca de dos tercios de las aguas

residuales totales generadas de las industrias de ESTADOS UNIDOS resulta de las operaciones de refrigeración [10].

3.2.2.- Aguas residuales de operaciones de proceso

El agua usada para operaciones de proceso (de objetivos de no refrigeración) puede degradarse como consecuencia de introducir sustancias nutritivas, sedimentos suspendidos, bacterias, de materia oxígeno, y sustancias químicas tóxicas. El grado del agente contaminador (el contaminante) esta en función del tipo de industria, procesos de unidad específicos, y el grado de prácticas de minimización de aguas residuales empleadas.

Varios libros resumen las características de las aguas residuales de varias industrias; los ejemplos incluyen a Nemerow (1978) y Nemerow y Dasgupta (1991) [8 y 9]. El último proporciona la información de los tipos y las cantidades de agentes contaminadores del agua, de categorías importantes del sector privado tales como la ropa, el alimento, los materiales, el producto químico, y las industrias de la energía.

3.2.3.- Aguas residuales de la refinación del petróleo

Como un ejemplo de las descargas industriales de las aguas residuales, es la información sobre las descargas del agente contaminador de refinerías del petróleo. La cantidad total de agua usada en una refinería del petróleo se estima para ser de 770 galones por barril de petróleo crudo [8]. Aproximadamente del 80% al 90% del agua, es utilizada para objetivos de refrigeración y no es contaminada excepto por los escapes en las líneas. Las aguas residuales de proceso, comprenden del 10 al 20% del total, donde se pueden incluir, el aceite emulsionado de los escapes, derramamientos, lodos cáusticos, cáusticos inútiles, aguas alcalinas, lodos ácidos y aguas ácidas; incidente de las emulsiones al tratamiento químico; las aguas condensadas de los separadores del destilado; gases ácidos; catalizador inútil y arcillas de

filtración; y productos químicos especiales de la fabricación química del subproducto.

Los agentes contaminadores convencionales y tóxicos se encuentran en aguas residuales de la refinería del petróleo. Los agentes contaminadores convencionales son los que han recibido la atención histórica, mientras que los agentes contaminadores tóxicos se relacionan con los parámetros que reciben la atención de aumento debido a su toxicidad ambiental potencial [11]. Cinco subcategorías de la refinería, basadas en rendimientos de procesamiento y capacidades del proceso, delinean la información sobre características de las aguas residuales según lo definido en la tabla 9. En la tabla 10 se presentan rangos de cargamentos en las aguas residuales crudas de los agentes contaminadores convencionales para las subcategorías de la industria de la refinación del petróleo. Las aguas residuales crudas son el efluente del separador del aceite, que es una parte integral de las operaciones del proceso de la refinería para la recuperación del producto y de la materia prima antes del tratamiento de aguas residuales. La tabla 11 enumera los agentes contaminadores tóxicos que se han medido en las aguas residuales generadas en las refinerías del petróleo; no hay datos de la concentración incluidos.

3.2.4.- Estándares de la descarga de las aguas residuales

Los caudales y las características de la calidad de las aguas residuales en diferentes tipos de industrias varían extensamente. Por lo tanto, los estándares de la descarga de las aguas residuales se relacionan con el tipo de la industria. Por ejemplo, la tabla 12 resume las limitaciones efluentes, basadas en el mejor tratamiento practicable (BPT) para las fuentes del punto, asociadas a la subcategoría que se agrieta de la refinación del petróleo.

Tabla 9 - Subcategorías de la industria de la refinación del petróleo que refleja diferencias significativas en características de las aguas residuales

El rematarse: El rematar y el proceso catalítico, si la facilidad incluye cualquier otro proceso además del rematarse y del proceso catalítico. Esta subcategoría no es aplicable a las instalaciones que incluyen procesos termales (e.g., coquefacción y visbreaking) ó el agrietarse.

El agrietarse: El rematar y el agrietarse, si la facilidad incluye cualesquiera procesos además del rematarse y de agrietarse, a menos que se especifique en una de las subcategorías siguientes enumeraron.

Producto petroquímico: Rematando, agrietándose, y operaciones petroquímicas, si la facilidad incluye cualquier proceso además del rematarse, de agrietarse, y de operaciones petroquímicas ^a, excepto operaciones de fabricación del aceite de lubricante

Lubricante: Rematando, agrietándose, y proceso de fabricación del aceite de lubricante, si la facilidad incluye cualquier proceso además del rematarse, de agrietarse, y de procesos de fabricación del aceite de lubricante, excepto operaciones petroquímicas ^a.

Integrado: El rematar, el agrietarse, procesos de fabricación del aceite de lubricante, y operaciones petroquímicas, si la facilidad incluye cualesquiera procesos además del rematarse, de agrietarse, de procesos de fabricación del aceite de lubricante, y de operaciones petroquímicas ^a.

Fuentes: U.S. Environmental Protection Agency (EPA), 1980, *Treatability manual*, Vol. II—Industrial descriptions, Sec. II.14—Petroleum refining, EPA-600/8-80-042b (Washington, D.C. [July]).

Nota: ^a Las operaciones petroquímicas significan la producción de productos petroquímicos de la segunda generación (es decir, alcohol, cetonas, y estireno) ó del producto petroquímico y de la isomerización de la primera generación (es decir, benceno / tolueno / xileno) cuando el 15% ó más de producción de la refinería está como los productos petroquímicos de la primera generación y productos de la isomerización.

Tabla 10 - Cargamentos crudos de las aguas residuales^a en la red kilogramos/1000 m³ del rendimiento de procesamiento de la materia de base por subcategoría de la industria de refinación del petróleo.

Características	Subcategoría Rematado		Subcategoría Agrietado		Subcategoría Petroquímica		Subcategoría Lubricante		Subcategoría Integrado	
	<i>Rango^b</i>	<i>Media</i>	<i>Rango^b</i>	<i>Media</i>	<i>Rango^b</i>	<i>Media</i>	<i>Rango^b</i>	<i>Media</i>	<i>Rango^b</i>	<i>Media</i>
	Flujo	8-558	66.6	3.29-2750	93	26.6-443	109	68.6-772	117	40-1.37
BOD	1.29-217	3.43	14.3-466	72.9	40.9-715	172	62.9-758	217	63.5-615	197
COD	3.43-486	37.2	27.7-2520	217	200-1090	463	166-2290	543	72.9-1490	329
TOC	1.09-65.8	8.01	5.43-320	41.5	48.6-458	149	31.5-306	109	28.6-678	139
TSS	0.74-286	11.7	0.94-360	18.2	6.29-372	48.6	17.2-312	71.5	15.2-226	59.1
Sulfuros	.002-1.52	0.054	0.01-39.5 ^d	0.94 ^d	.009-91.5	0.86	.00001-20	.014	.52-7.87 ^d	2.00 ^d
Aceite y Grasa	1.03-88.7	8.29	2.86-365	31.2	12.0-235	52.9	23.7-601	120	20-9-269	74.9
Fenoles	.001-1.06	0.034	0.19-80.1	4.00	2.55-23.7	7.72	4.58-52.9	8.29	.61-22.6	3.78
Amoniaco	.077-19.5	1.20	2.35-174	28.3	5.43-206	34.3	6.5-96.2	24.1		
Cromo	.0002-29	0.007	.0008-4.15	0.25	.014-3.86	0.234	.002-1.23	0.046	.12-1.92	0.49

Fuente: U.S. EPA, 1980.

Notas: ^a Después de separador del aceite de la refinería.

^b Probabilidad de la ocurrencia menos que o igual a 10 o al 90% respectivamente.

^c 1000 m³/1000 m³ del rendimiento de procesamiento de la materia de base.

^d Sulfuro.

Tabla 11 - Listado cualitativo de los agentes contaminadores tóxicos del agua, potencialmente en aguas residuales de la refinería del petróleo

Metales e Inorgánicos	Hidrocarburos aromáticas de Polycrylic
Antimonio	Acenaphthene
Arsénico	Acenaftileno
Asbesto	Antraceno
Berilio	Benzo(a) pyrene
Cadmio	Chrysene
Cromo	Fluoranthene
Cobre	Flourene
Cianuro	Naftalina
Plomo	Phenanthrene
Mercurio	Pyrene
Níquel	Biphenyls de Polychlorinate y compuestos relacionados
Selenio	Aroclor 1016
Plata	Aroclor 1221
Talio	Aroclor 1232
Zinc	Aroclor 1242
Phthalates	Aroclor 1248
Bis (2-ethylhexyl) phthalate	Aroclor 1254
Di-n-butyl phthalate	Aroclor 1260
Diethyl phthalate	Aliphatics halogenados
Dimethyl phthalate	Tetracloruro de Carbón
Fenoles	Cloroformo
2-Clorofenol	Diclorobromometano
2,4-Diclorofenol	1,2-Dicloroetano
2,4-Dinitrofenol	1,2-Trans-dicloroetileno cloruro de metileno
2,4-Dimetilfenol	1,1,2,2-Tetracloroetano Tetracloroetileno
2-Nitrofenol	1,1,1-Tricloroetano Tricloroetileno
Pentaclorofenol	Pesticidas
Fenol	Aldrin
4,6-Dinitro-o-cresol	α -BHC
Cresol de Paraclorometa	β -BHC
Aromáticos	δ -BHC
Benceno	γ -BHC
1,2-Diclorobenceno	Chlordane
1,4-Diclorobenceno	4,4'-DDE
Etilbenceno	4,4'-DDD
Tolueno	α -Endosulfan
	β -Endosulfan
	Sulfato de Endosulfan
	Heptachlor
	Isophorone

Fuente: U.S. EPA, 1980

Tabla 12 - Pautas efluentes de la limitación de BPT para las fuentes del punto de la subcategoría que se agrietan de la refinación del petróleo

Agente contaminador ó característica del agente contaminador	Limitaciones del efluente BPT	
	Máximo para cualquier día	El promedio de los valores diarios por 30 días consecutivos no se excederá
	Unidades métricas (kilogramo por 1000 m ³ de feedstock (materia de base)) ³	
BOD 5	28.2	15.6
TSS	19.5	12.6
COD ¹	210	109
Aceite y grasa	8.4	4.5
Compuestos phenolic	0.21	0.10
Amoniaco como N	18.8	8.5
Sulfuro	0.18	0.082
Cromo total	0.43	0.25
Cromo hexavalente	(²)	(²)
	Unidades inglesas (libra por feedstock (la materia de base) de 1000 barriles)	
BOD 5	9.9	5.5
TSS	6.9	4.4
COD ¹	74.0	38.4
Aceite y grasa	3.0	1.6
Compuestos phenolic	0.074	0.036
Amoniaco como N	6.6	3.0
Sulfuro	0.065	0.029
Cromo total	0.15	0.088
Cromo hexavalente	(²)	(²)

Fuente: Code of Federal Regulations, Title 40, Chap. 1, part 419—Petroleum refining point source category, 419-457 (1 July 1991).

Notas: ¹ En cualquier el caso donde el aspirante puede demostrar que la concentración del ion del cloruro en el efluente excede 1000 mg/l (1000 PPM), el administrador regional puede sustituir el TOC como parámetro en lugar del COD. Las limitaciones efluentes para el TOC serán basadas en datos efluentes de la planta que correlaciona el TOC al BOD5. Si establecen a los jueces regionales del administrador que los datos adecuados de la correlación no están disponibles, las limitaciones efluentes para el TOC en un cociente de 2.2 a 1 a las limitaciones efluentes aplicables en el BOD5.

² Dentro de la gama de 6.0 a 9.0

³ La materia de base denota los líquidos del petróleo crudo y del gas natural alimentados a las unidades del rematado

3.3.- Formación de Flóculos

Un paso crucial común a muchos procesos del tratamiento de sólido a líquido es la floculación de partículas suspendidas. Tales procesos incluyen la refinación mineral, el procesado de carbón, la fabricación del producto químico precipitado tal como pigmentos del polvo y el tratamiento de los abastecimientos y de las aguas residuales, para remover los sólidos suspendidos.

Las dimensiones y la estructura de flóculos aglomerados se determinan en gran parte por la agitación controlada, los parámetros líquidos-sólidos, y por la sustancia coagulante que permite la unión de los flóculos (para ver mas detalles sobre la coagulación y los flóculos véase el capítulo 5)

Todo lo que engloba el capítulo 3 sobre el tratamiento de aguas residuales, la formación de los flóculos, es la parte mas importante del experimento real, por parte de la Facultad de Ciencias Químicas, ya que es aquí donde entra su análisis sobre la precipitación química, donde su objetivo es tratar de maximizar el tamaño de los flóculos, que se unen uno con otro, a través del tiempo por medio de una sustancia coagulante y que se dejan sedimentar en un intervalo de tiempo para luego realizar la remoción de estos, todo esto causado por la agitación turbulenta en un reactor nuclear.

Y es aquí también donde entra el análisis de esta tesis, ya que por medio de estos flóculos se busca encontrar un modelo matemático para obtener los óptimos del proceso de floculación, es decir el problema de optimización involucra un ajuste de parámetros que inciden de forma relevante en el proceso de precipitación química (para ver mas detalles véase capítulo 4 y capítulo 6).

3.4.- Sedimentación

La sedimentación, a veces llamada clarificación, se utiliza generalmente en conjunto con la coagulación y la floculación para quitar partículas del floculo y para mejorar la eficacia subsecuente de la filtración. Omitiendo la sedimentación antes de los resultados de la filtración en funcionamientos más cortos del filtro, se obtiene una calidad más pobre del líquido filtrado, y filtros más sucios que son más difíciles de repercutir y extraer. La sedimentación es particularmente necesaria para la alto-turbiedad y el agua altamente coloreada que generan los sólidos substanciales durante los procesos de la coagulación y de la floculación. La sedimentación es a veces innecesaria antes de la filtración (filtración directa) cuando la producción de los sólidos de la floculación es baja y la filtración puede manejarse con eficacia.

La sedimentación se utiliza a veces en una planta de tratamiento de aguas en un lavabo del pre-sedimentación, que permite colocar la gravedad de sólidos más densos que no requieran la coagulación y la floculación para promover la separación sólida. El uso de un lavabo del pre-sedimentación es el más común donde el agua superficial tiene un alto contenido del lógamo ó de la turbiedad. Algunas plantas de tratamiento de aguas residuales utilizan la coagulación antes de la pre-sedimentación.

3.4.1.- Tipos de Sedimentaciones

El diseño de la mayoría de las sedimentaciones entra en una de las categorías siguientes [12]:

- ✚ El flujo horizontal.
- ✚ Sólidos en contacto.
- ✚ Superficie inclinada.

3.4.2.- Flujo Horizontal

En el flujo horizontal, la sedimentación ocurre en lavabos especialmente diseñados. Estos lavabos se conocen como tanques, lavabos, tanques de sedimentación, lavabos de la sedimentación ó clarificadores. Pueden ser rectangulares, cuadrados ó circulares. Los lavabos más comunes son tanques rectangulares y lavabos circulares con una alimentación en el centro.

En lavabos rectangulares (véase la parte A en la figura 2), el flujo es en una dirección y es paralelo a la longitud del lavabo. Esto se llama flujo rectilíneo. En los lavabos circulares se encuentra un centro el cual es el que alimenta (véase la parte B en la figura 2), los flujos del agua son radialmente del centro a los bordes exteriores. Esto se llama flujo radial. Ambos lavabos se diseñan para guardar el uniforme de la distribución de la velocidad y del flujo tan como sea posible de modo que las corrientes y los remolinos no formen y no guarden el material suspendido. Otros patrones del flujo se demuestran en las partes C, D, y E en la figura 2 [12].

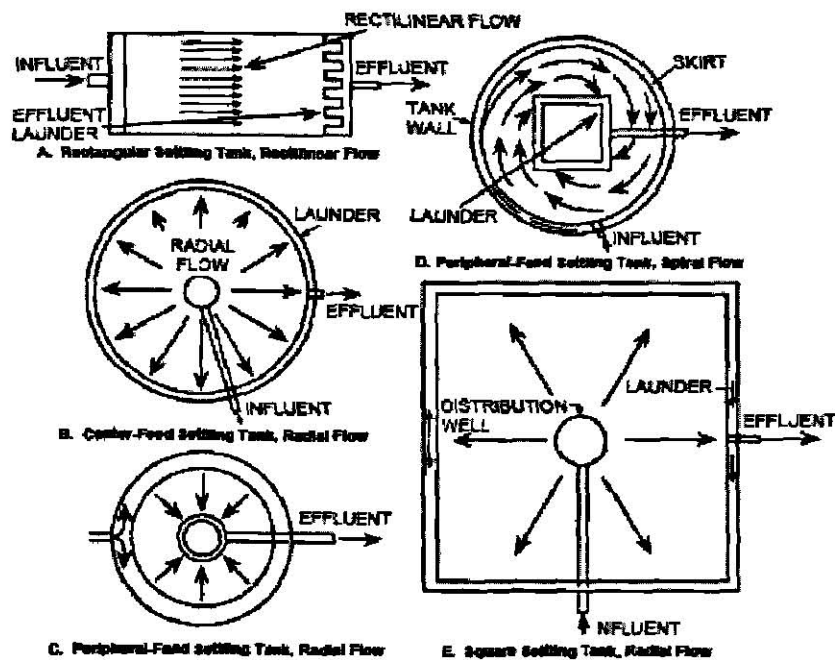


Figura 2 – Patrones del flujo en lavabos de la sedimentación

Los lavabos se hacen generalmente del acero ó del concreto reforzado. El fondo se inclina levemente para hacer retiro del lodo más fácil. En tanques rectangulares, las cuestas del fondo hacia el extremo de la entrada, mientras que en tanques de la circular ó del cuadrado, los fondos son cónicos y cuesta hacia el centro del lavabo.

La selección de cualquier forma depende de los factores siguientes:

- ✚ Tamaño de la instalación.
- ✚ Preferencia de regla de autoridades reguladoras.
- ✚ Condiciones locales del sitio.
- ✚ Preferencia, experiencia, y juicio de la ingeniería del personal del diseñador y de planta.

Las ventajas y las desventajas de los clasificadores rectangulares contra los clarificadores circulares se muestran a continuación:

Ventajas:

- ✚ Menos área de ocupó cuando se utilizan las unidades múltiples
- ✚ Uso económico de paredes comunes con las unidades múltiples
- ✚ Cubierta fácil de las unidades para el control del olor
- ✚ El circular es menos corto
- ✚ Baje las pérdidas del entrada-enchufe
- ✚ Menos consumo de energía para los mecanismos de la colección y del retiro del lodo

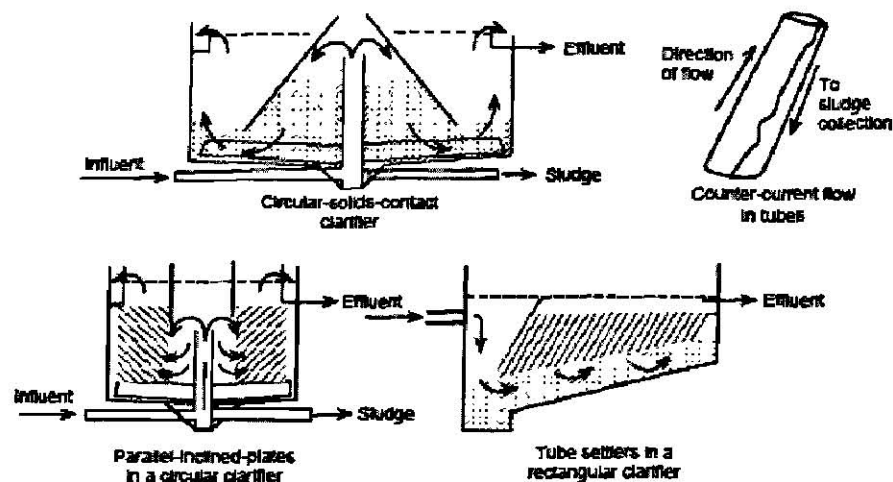
Desventajas:

- ✚ Espacios muertos posibles
- ✚ Sensibilidad a fluir oleadas
- ✚ El equipo de la colección esta restringido por la anchura

- ↓ Vertederos múltiples que implica tener tarifas de cargamento hacia los vertederos
- ↓ Altos costos de mantenimiento de piñones, de cadenas, y de aviadores usados para el retiro del lodo

3.4.3.- Sólido-Contacto

En la parte A de la figura 3 se muestra los principios operacionales de sólido-entrante en contacto con los clarificadores. Los sólidos entrantes se traen en contacto con una capa suspendida del lodo cerca del fondo. Esta capa actúa como manta, y los sólidos entrantes se aglomeran y siguen enredados dentro de esta manta. El líquido se levanta ascendente mientras que una interfaz distinta conserva los sólidos en la parte de abajo. Estos clarificadores tienen funcionamiento hidráulico y tienen un plazo de tiempo para la retención, esto es para que el retiro sea equivalente de los sólidos en clarificadores horizontales del flujo [12].



Types of clarifiers. A. Circular-solids-contact clarifier. B. Parallel inclined plates in a circular clarifier. C. Tube settlers in a rectangular clarifier. D. Counter-current flow in tubes.

Figura 3 – Tipos de Sedimentaciones

3.4.4.- Superficie inclinada

Los lavabos de superficie inclinada utilizan las bandejas inclinadas para dividir la profundidad en secciones más bajas. Así, la profundidad de todas las partículas (y por lo tanto del tiempo que se coloca) se reduce perceptiblemente. Las plantas de tratamiento de aguas residuales utilizan con frecuencia este concepto para aumentar los clarificadores primarios y secundarios sobrecargados existentes. En la parte B de la figura 3 se muestra las operaciones principales de la superficie inclinada.

Los clarificadores de la superficie inclinada proporcionan un área superficial grande, reduciendo el tamaño del clarificador. Ningún efecto del viento existe, y el flujo es laminar. Muchos sobrecargas se presentan en el flujo horizontal los cual no se presentan en este tipo. Las desventajas principales de los clarificadores de la superficie inclinada son [12]:

- Los períodos largos en los depósitos del lodo, (en las paredes internas) pueden causar condiciones sépticas
- La calidad efluente se puede deteriorar, cuando los depósitos del lodo están sin funcionar.
- Las tuberías y los canales internos pueden obstruirse.
- El cortocircuito serie puede ocurrir cuando el fluyente es más caliente que la temperatura del lavabo.

Capítulo 4

Redes Neuronales Artificiales

Las redes neuronales artificiales son de gran importancia para esta investigación, ya que por medio de ellas se pueden crear modelos matemáticos no lineales de procesos Físico-Químicos que carecen de un modelo y donde no es necesario tener el conocimiento sobre estos procesos Físicos-Químicos, ya que por medio de los datos la red neuronal artificial aprende, por esta razón se utilizan las redes neuronales, ya que es el caso que se presenta en el experimento real, que no cuenta con un modelo que lo describa de manera sencilla así como compleja, más bien se representa como un experimento empírico.

También por medio de las redes neuronales se estudian las curvas, que se presentan en el experimento de la simulación de la distribución de un conjunto de partículas, que se difunden en un cierto volumen y de esta manera encontrar la mejor aproximación de ellas con el fin de encontrar el mejor modelo que las describa.

4.1.- Introducción

El cerebro es un procesador de información con unas características muy notables como:

- ✚ Es capaz de procesar a gran velocidad grandes cantidades de información procedentes de los sentidos.
- ✚ Comparar información nueva con la información almacenada y dar respuestas adecuadas incluso en situaciones nuevas.
- ✚ Logra discernir un susurro en una sala ruidosa.

- 👇 Distinguir una cara en una calle mal iluminada.
- 👇 Leer entre líneas en una declaración política.

Pero lo más impresionante de todo es su capacidad de aprender a representar la información necesaria para desarrollar tales habilidades sin instrucciones explícitas para ello.

Aunque todavía se ignora mucho sobre la forma en que el cerebro aprende a procesar la información, se han desarrollado modelos que tratan de mimetizar tales habilidades que son denominados *redes neuronales artificiales* ó *modelos de computación conexionista* (otras denominaciones son *computación neuronal* y *procesamiento distribuido paralelo* ó *P.D.P.*). La elaboración de estos modelos supone en primer lugar la deducción de los rasgos ó características esenciales de las neuronas y sus conexiones, y en segundo lugar, la implementación del modelo en una computadora de forma que se pueda simular [5]. Es obvio decir que estos modelos son idealizaciones burdas de las auténticas redes neuronales, en muchos casos de dudosa plausibilidad neurofisiológica, pero que sin embargo resultan interesantes cuando menos por sus capacidades de aprendizaje.

4.2.- Neuronas Biológicas

El cerebro humano continuamente recibe señales de entrada de muchas fuentes y las procesa a manera de crear una apropiada respuesta de salida.

A grandes rasgos, el cerebro humano se compone de decenas de billones de neuronas interconectadas entre sí formando circuitos ó redes que desarrollan funciones específicas. Estas redes ejecutan los millones de instrucciones necesarias para mantener una vida normal.

Las neuronas son las células que forman la corteza cerebral de los seres vivos y cada una de las neuronas típicas recoge señales procedentes de otras neuronas a través de delicadas estructuras llamadas dendritas. La neurona

emite impulsos de actividad eléctrica a lo largo de una fibra larga y delgada denominada axón, que se divide en millares de ramificaciones.

Las dentritas forman una estructura de filamentos muy fina que rodean el cuerpo de la neurona. El axón es un tubo largo y delgado que se ramifica en su extremo en pequeños bulbos finales que casi tocan las dentritas de las células vecinas.

La pequeña separación entre los bulbos finales y las dentritas se le denomina sinápsis.

Cada neurona está formada por elementos llamados cuerpo, axón y dentritas, como se muestra en la figura 4 y 5.

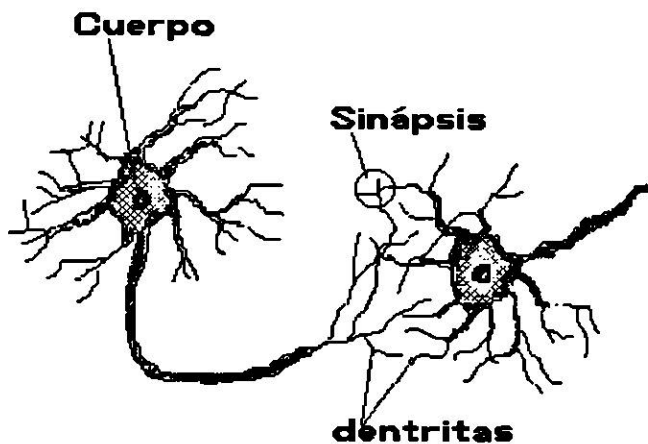


Figura 4 – Neurona Biológica

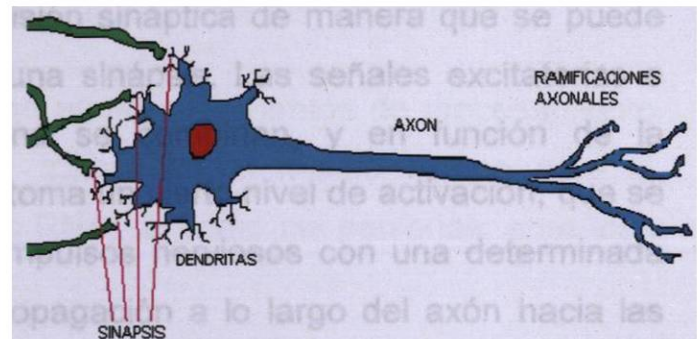


Figura 5 – Neurona y Conexiones sinápticas

Las extremidades de estas ramificaciones del axón llegan hasta las dendritas de otras neuronas y establecen unas conexiones llamadas sinápsis, en las cuales se produce una transformación de impulsos eléctricos en un mensaje neuroquímico, mediante la liberación de unas sustancias llamadas neurotransmisores, como se muestra en la figura 6. Estos impulsos eléctricos que utiliza una neurona para intercambiar información con las demás, viajan por el axón que hace contacto con las dentritas de la neurona vecina mediante las sinápsis.

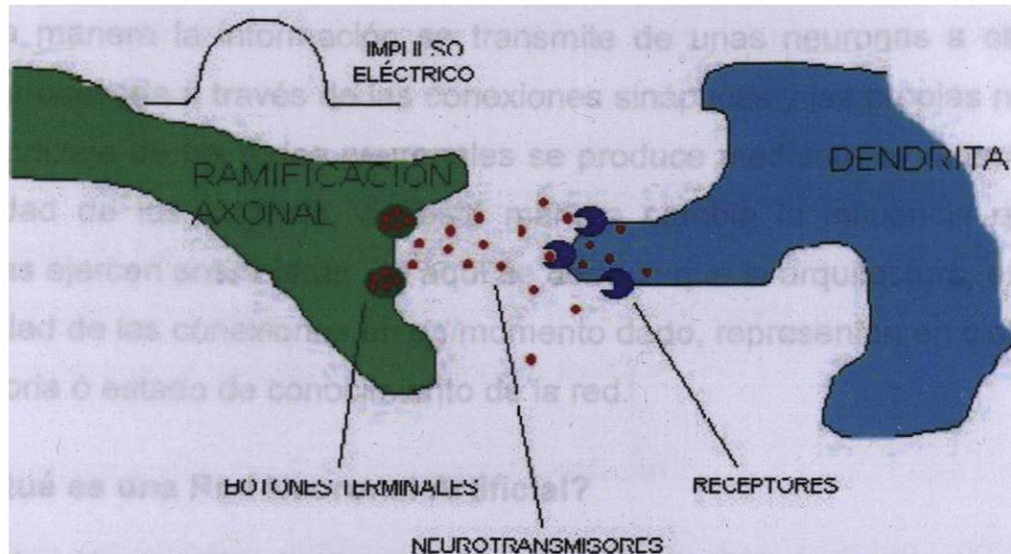


Figura 6 – Detalle de una sinapsis

El efecto de los neurotransmisores sobre la neurona receptora puede ser excitatorio o inhibitorio, y es variable, la intensidad de la corriente transmitida depende de la eficiencia de la transmisión sináptica de manera que se puede hablar de la fuerza ó efectividad de una sinápsis. Las señales excitatorias e inhibitorias recibidas por una neurona se combinan, y en función de la estimulación total recibida, la neurona toma un cierto nivel de activación, que se traduce en la generación de breves impulsos nerviosos con una determinada frecuencia ó tasa de disparo, y su propagación a lo largo del axón hacia las neuronas con las cuales sinapta, como se muestra en la figura 7.

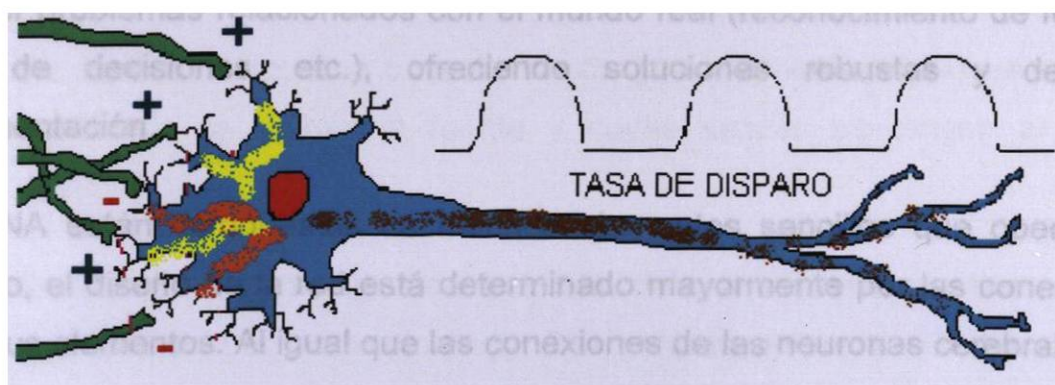


Figura 7 – Activación y disparo de una neurona

De esta manera la información se transmite de unas neuronas a otras y va siendo procesada a través de las conexiones sinápticas y las propias neuronas. El aprendizaje de las redes neuronales se produce mediante la variación de la efectividad de las sinápsis, de esta manera cambia la influencia que unas neuronas ejercen sobre otras, de aquí se deduce que la arquitectura, el tipo y la efectividad de las conexiones en un momento dado, representan en cierto modo la memoria ó estado de conocimiento de la red.

4.3.- ¿Qué es una Red Neuronal Artificial?

Las Redes Neuronales Artificiales son dispositivos ó software programado de manera tal que funcionen como las neuronas biológicas de los seres vivos.

Desde hace algunos años, algunos investigadores han estado creando modelos, tanto en hardware como en software, que interpretan la actividad cerebral en un esfuerzo por producir una forma de inteligencia artificial.

Las RNA están compuestas de un gran número elementos de procesamiento altamente interconectados (neuronas) trabajando al mismo tiempo para la solución de problemas específicos. Las RNA, tal como las personas, aprenden de la experiencia [5].

En cualquier caso, se trata de una nueva forma de computación que es capaz de manejar las imprecisiones e incertidumbres que aparecen cuando se trata de resolver problemas relacionados con el mundo real (reconocimiento de formas, toma de decisiones, etc.), ofreciendo soluciones robustas y de fácil implementación.

Las RNA están compuestas de muchos elementos sencillos que operan en paralelo, el diseño de la red está determinado mayormente por las conexiones entre sus elementos. Al igual que las conexiones de las neuronas cerebrales.

Las RNA han sido entrenadas para la realización de funciones complejas en variados campos de aplicación. Hoy en día pueden ser entrenadas para la

solución de problemas que son difíciles para sistemas computacionales comunes ó para el ser humano.

La idea de las redes neuronales fue concebida originalmente como un intento de modelar la biofisiología del cerebro humano, es decir, entender y explicar como funciona y opera el cerebro. La meta era crear un modelo capaz de emular el proceso humano de razonamiento [5].

4.4.- Elementos de una Red Neuronal Artificial

Las redes neuronales artificiales son modelos que intentan reproducir el comportamiento del cerebro. Como tal modelo, realiza una simplificación, averiguando cuáles son los elementos relevantes del sistema, bien porque la cantidad de información de que se dispone es excesiva ó bien porque es redundante. Una elección adecuada de sus características, más una estructura conveniente, es el procedimiento convencional utilizado para construir redes capaces de realizar determinada tarea, los elementos que debe de componer una red neuronal artificial son los siguientes [5].

1. **Unidad de proceso:** En la neurona artificial 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 ó nivel a un conjunto de neuronas cuyas entradas provienen de la misma fuente y cuyas salidas se dirigen al mismo destino.

2. **Estado de Activación.** Los estados del sistema en un tiempo t se representan por un vector $A(t)$. Los valores de activación pueden ser continuos ó discretos, limitados ó 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 $[0,1]$, ó en el intervalo $[-1,1]$, siendo una función sigmoideal.

3. **Función de Salida ó de Transferencia.** Asociada con cada unidad hay una función de salida, que transforma el estado actual de activación en una señal de salida.

4.5.- Analogía con las redes neuronales biológicas

Las neuronas se modelan mediante unidades de proceso. Cada unidad de proceso se compone de una red de conexiones de entrada, una función de red (de propagación), encargada de computar la entrada total, combinada de todas las conexiones, un núcleo central de proceso, encargado de aplicar la función de activación, y la salida, por dónde se transmite el valor de activación a otras unidades, esto se ilustra en la figura [5].

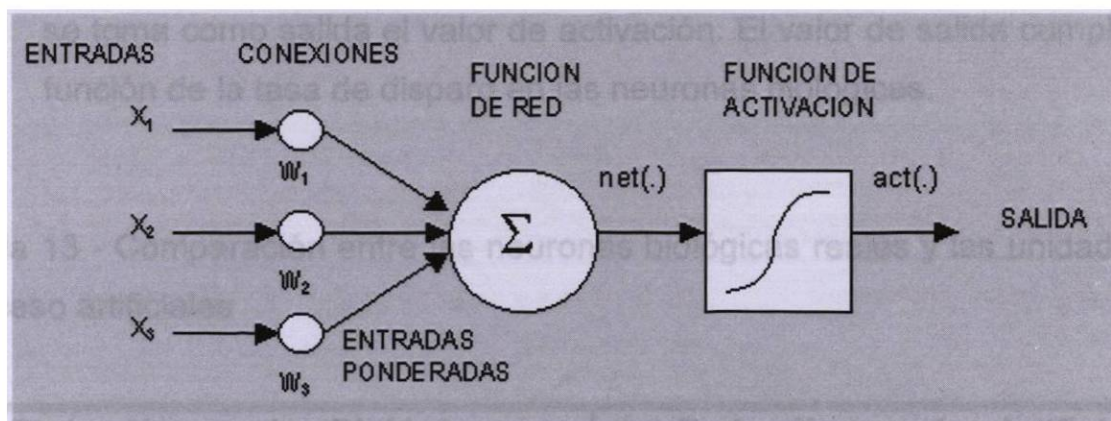


Figura 8 – Unidad de proceso típica

La función de red es típicamente la sumatoria ponderada, mientras que la función de activación suele ser alguna función de umbral ó una función sigmoideal [5].

- **Función de propagación ó de red:** Calcula el valor de base ó entrada total a la unidad, generalmente como una simple suma ponderada de todas las entradas recibidas, es decir, de las entradas multiplicadas por

el peso ó valor de las conexiones. Equivale a la combinación de las señales excitatorias e inhibitorias de las neuronas biológicas.

- **Función de activación:** Es quizás la característica principal ó definitoria de las neuronas, la que mejor define el comportamiento de la misma. Se usan diferentes tipos de funciones, desde simples funciones de umbral a funciones no lineales. Se encarga de calcular el nivel ó estado de activación de la neurona en función de la entrada total.
- **Conexiones ponderadas:** Hacen el papel de las conexiones sinápticas, el peso de la conexión equivale a la fuerza ó efectividad de la sinápsis. La existencia de conexiones determina si es posible que una unidad influya sobre otra, el valor de los pesos y el signo de los mismos definen el tipo (excitatorio/inhibitorio) y la intensidad de la influencia.
- **Salida:** Calcula la salida de la neurona en función de la activación de la misma, aunque normalmente no se aplica más que la función identidad, y se toma como salida el valor de activación. El valor de salida cumpliría la función de la tasa de disparo en las neuronas biológicas.

Tabla 13 - Comparación entre las neuronas biológicas reales y las unidades de proceso artificiales

Redes Neuronales Biológicas	Redes Neuronales Artificiales
Neuronas	Unidades de Proceso
Conexiones Sinápticas	Conexiones Ponderadas
Efectividad de la Sinápsis	Peso de las Conexiones
Efecto excitatorio ó inhibitorio de una conexión	Signo del peso de una conexión
Efecto combinado de la sinápsis	Función de propagación ó red
Activación – Tasa de Disparo	Función de activación – Salida

4.6.- Estructura y formas de interconexión

Para diseñar una red se debe establecer como estarán conectadas unas unidades con otras y determinar adecuadamente los pesos de las conexiones. Lo más usual es disponer las unidades en forma de capas, pudiéndose hablar de redes de una, de dos ó de más de dos capas, las llamadas redes multicapa.

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 bruta suministrada a la red ó realizando un sencillo pre-proceso de la misma, se llama capa de entrada, otra capa actúa como interfaz ó buffer de salida, almacenando la respuesta de la red para que pueda ser leída, se llama capa de salida y las capas intermedias, principales encargadas de extraer, procesar y memorizar la información, se denominan capas ocultas (ver la figura 9).

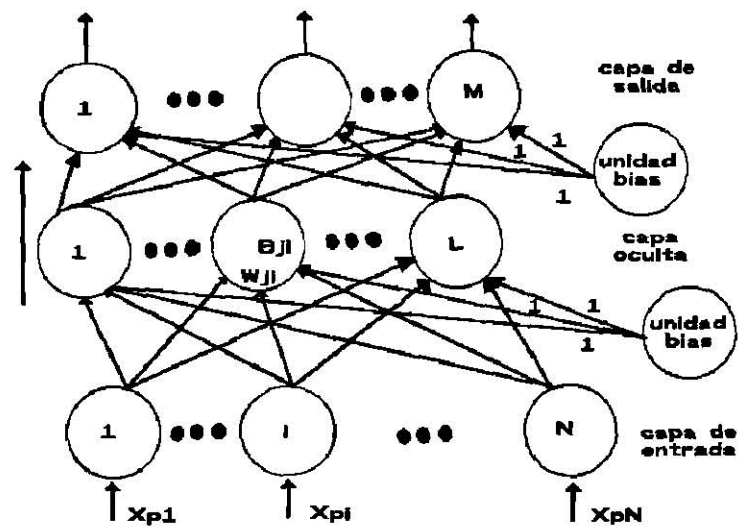


Figura 9 – Modelo de red en cascada de 3 capas

Además del número de capas de una red, en función de como se interconectan unas capas con otras, se puede hablar de redes recurrentes (feed-back) y redes no recurrentes ó redes en cascada (feed-forward). En las redes en cascada la información fluye unidireccionalmente de una capa a otra (desde la capa de entrada a las capas ocultas y de éstas a la capa de salida), y además, no se

admiten conexiones intracapa. En las redes recurrentes la información puede volver a lugares por los que ya había pasado, formando bucles, y se admiten las conexiones intracapa (laterales), incluso de una unidad consigo misma [5].

Las conexiones entre una capa y otra pueden ser totales, es decir, que cada unidad se conecta con todas las unidades de la capa siguiente ó parciales, en las cuales una unidad se conecta con sólo algunas de las capas de la unidad siguiente, generalmente siguiendo algún patrón aleatorio ó pseudo-aleatorio (por ejemplo, mediante algoritmos genéticos).

Desde una aproximación temporal se puede distinguir además entre conexiones sin retardo y conexiones con retardo. Esto permite modelar aspectos dinámicos, por ejemplo para modelos psicofisiológicos de memoria.

4.7.- La función de propagación (de red ó de base)

Como ya se comentó, la función de propagación se encarga de calcular la entrada total de la neurona como combinación de todas las entradas. La función más utilizada con diferencia es la función lineal de base (LBF), que consiste en la sumatoria ponderada de todas las entradas.

Función lineal de base (LBF)

Consiste en la sumatoria de las entradas ponderadas. Se trata de una función de tipo hiperplano, esto es, de primer orden. Dado una unidad j , y n unidades conectadas a ésta, si llamamos X al vector de entradas (que coincide con las salidas de las unidades de la capa anterior) y W_j al vector de pesos de las conexiones correspondientes, esta función quedaría así

$$net_j(X; W_j) = \sum_{i=1}^n x_i w_{ij}$$

Al representar los pesos utilizamos dos subíndices para indicar que conectan dos unidades, i y j , dónde j se refiere la unidad actual [5].

Función radial de base (RBF)

Función de tipo hiperesférico, de segundo orden, no lineal. El valor de red representa la distancia a un determinado patrón de referencia.

$$net_j(X, W_j) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - w_{ij})^2}$$

4.8.- La función de activación

Se suele distinguir entre funciones lineales, en las que la salida es proporcional a la entrada entre las cuales son las funciones de umbral, en las cuales la salida es un valor discreto (típicamente binario 0/1) que depende de si la estimulación total ó no un determinado valor de umbral y las funciones no lineales, no proporcionales a la entrada.

Casi todos los avances recientes en conexionismo se atribuyen a arquitecturas multicapa que utilizan funciones de activación no lineales como una función de umbral, una gaussiana ó en la mayoría de los casos una función sigmoideal (5).

El problema de trabajar con modelos no lineales radica en que son difíciles de describir en términos lógicos ó matemáticos convencionales (5).

Función de umbral

En un principio se pensó que las neuronas usaban una función de umbral, es decir, que permanecían inactivas y se activaban sólo si la estimulación total superaba cierto valor límite; esto se puede modelar con una función escalón: la más típica es el escalón unitario: la función devuelve 0 por debajo del valor crítico (umbral) y 1 por encima.

Después se comprobó que las neuronas emitían impulsos de actividad eléctrica con una frecuencia variable, dependiendo de la intensidad de la estimulación recibida, y que tenían cierta actividad hasta en reposo, con estimulación nula.

Estos descubrimientos llevaron al uso de funciones no lineales con esas características, como la función sigmoïdal, con un perfil parecido al escalón de una función de umbral, pero continúa.

Función sigmoïdal ó logística

Es probablemente la función de activación más empleada en la actualidad [5].

$$act_j (net_j) = \frac{1}{(1 + e^{-s \cdot net_j})}$$

Se trata de una función continua no lineal con bastante plausibilidad fisiológica. La función sigmoïdal posee un rango comprendido entre 0 y 1.

Esto, aplicado a las unidades de proceso de una red neuronal artificial significa que, sea cual sea la entrada, la salida estará comprendida entre 0 y 1.

Esta función depende del parámetro s , que usualmente toma el valor 1, la representación se ilustra en la figura 10.

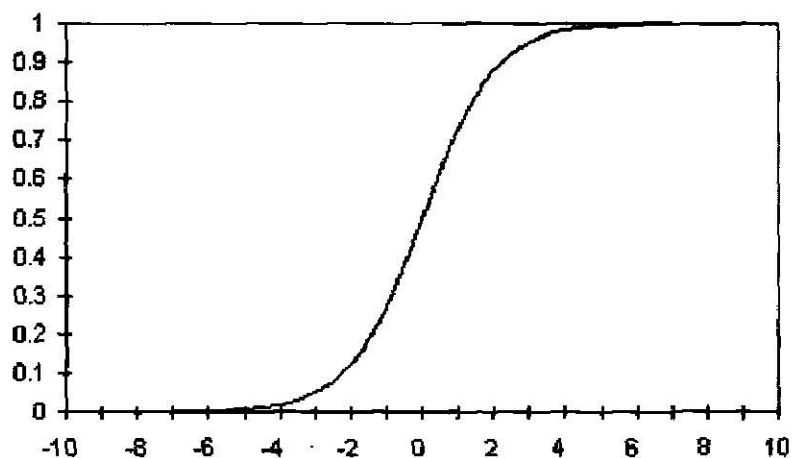


Figura 10 – Función sigmoïdal con $s = 1$

La salida de una unidad vale 0.5 cuando la entrada es nula, esto significa que la unidad tiene cierta actividad aún en ausencia de estimulación. Al aumentar la estimulación la unidad aumenta su activación, y la disminuye si la estimulación es inhibitoria, de forma parecida a como se comportan las neuronas reales.

Presenta las siguientes características deseables (5).

1. Acomodación de señales muy intensas sin producir saturación.
2. Admite señales débiles sin excesiva atenuación
3. Fácilmente derivable, ya que $f'(x) = f(x) * (1 - f(x))dx$

La principal limitación de esta función es que no sirve para expresar polaridades, da siempre valores positivos. Una función alternativa con cualidades parecidas pero con un rango entre -1 y 1 es la función tangente hiperbólica ó función bipolar.

Desde un punto de vista fisiológico, el signo negativo se puede interpretar como una disminución de la tasa de disparo de una neurona por debajo de la tasa de disparo en reposo.

Función bipolar

Otra función de activación para problemas no lineales.

$$\text{act}_j(\text{net}_j) = \frac{2}{(2 + e^{-\text{net}_j/\sigma})} - 1$$

Se trata de una función continua no lineal con bastante plausibilidad fisiológica. La función bipolar posee un rango comprendido entre -1 y 1.

Esto, aplicado a las unidades de proceso de una red neuronal artificial significa que, sea cual sea la entrada, la salida estará comprendida entre -1 y 1 (ver figura 11).

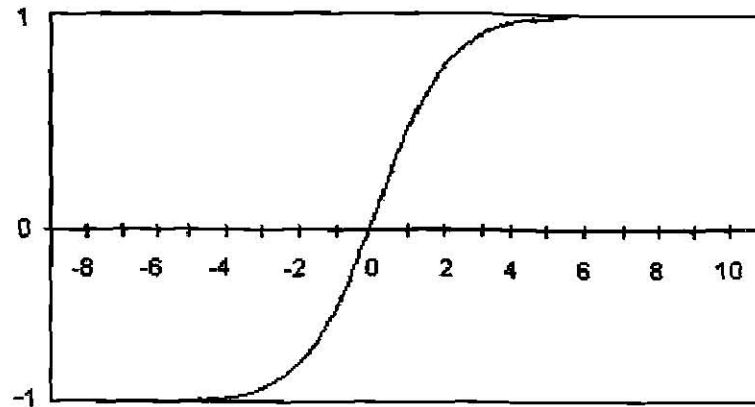


Figura 11 – Función bipolar

Función Gaussiana

$$Act_j (net_j) = c * e^{-net^2 / \sigma^2}$$

Función de Base Radial (RBF)

Estas nuevas redes basadas en RBF construyen sus modelos con funciones de activación que son diferente tanto en la capa oculta como la de salida, es decir, una red RBF está diseñada con neuronas en la capa oculta activadas mediante funciones radiales de carácter no lineal con sus centros gravitacionales propios y en la capa de salida mediante funciones lineales.

A diferencia de las MLP (Perceptron Multicapa), el modelo clásico de las redes RBF está construido con una arquitectura rígida de tres capas: la de entrada, la oculta y la de salida. [5] En general, una red RBF tiene un mejor desempeño con un mayor volumen de datos de entrenamiento.

La construcción de una red RBF requiere de una mayor cantidad de neuronas en los nodos ocultos que en las redes que usan backpropagation.

Aunque las redes RBF no son comúnmente utilizadas en aplicaciones que impliquen un alto volumen de patrones de entrenamiento, se le reconoce como

una red con una alta eficiencia en la fase de entrenamiento. Es un método alternativo para aproximar funciones y clasificar patrones.

Tal como ya se mencionó anteriormente, una red RBF, a diferencia de una MLP, está conformada de tres capas.

1. La capa de entrada que sirve para los ejemplos o patrones de entrenamiento y prueba
2. La capa oculta completamente interconectada entre todos sus nodos con la capa de entrada y activada a través de la función radial (gaussiana)
3. La capa de salida, también completamente interconectada a la capa oculta y activada a través de una función lineal continua.

Bajo esto se tiene que la función que puede describir las RBF, es la siguiente forma.

$$F(t) = \sum_j^N w_j G(\|x - x_j\|)$$

Serie de Fourier (Cosenoidal y Senoidal)

Una alternativa muy utilizada es la llamada Serie de Fourier ó Transformada de Fourier, que permite representar una función como una serie de funciones senoidales y cosenoidales.

Una ventaja de esta representación en compresión de datos, es que permite aproximar funciones, cometiendo un error acotado y parejo en todos los puntos. Pero la principal ventaja de esta transformada se presenta al analizar sistemas lineales como no lineales.

Cabe destacar que la Transformada de Fourier puede dar como resultado una función continua ó discreta, dependiendo de la naturaleza de la señal. En el caso de la Transformada de Fourier, la misma devuelve valores complejos, y

tiene problemas en representar una función no lineal. Por esta razón, en compresión de datos resulta más útil una variante de esta Transformada, conocida como Transformada Discreta Coseno (DCT), que no presenta ninguno de estos problemas. La misma permite representar una función como una sumatoria de funciones coseno. Se puede representar de esta forma:

$$f(t) = \sum \cos (t)$$

.4.9.- Modelo Matemático (Red Neuronal Artificial)

La ecuación matemática de tipo red neuronal que se esta utilizando para esta investigación es la siguiente:

$$\mathcal{J}(t) = \sum_{\ell=1}^{\mathcal{K}} a_{\ell} \mathcal{P} (b_{\ell}t + c_{\ell})$$

Donde:

La ecuación matemática esta en función del tiempo $\mathcal{J}(t)$

$\sum_{\ell=1}^{\mathcal{K}}$ = Es la sumatoria de $\ell = 1$ hasta \mathcal{K} , donde \mathcal{K} representa el número de neuronas a disponer.

a_{ℓ} = Son parámetros de amplitud, que van multiplicando a la función. La finalidad de estos parámetros es el de permitir salirse del rango propuesto para cada función, por ejemplo la función sigmoideal tiene un rango desde $[0,1]$ y la función bipolar tiene un rango de $[-1,1]$, estos tipos de parámetros aumentan la amplitud de estas funciones sin limitarlas a sus rangos.

\mathcal{P} = Es cualquier función lineal ó no lineal, como las que se mencionaron anteriormente, como son la sigmoideal, la bipolar, la gaussiana, de bases radiales, las cosenoidales, etc.

b_l = Son parámetros geométricos que van dentro de la función y la finalidad de estos parámetros es el de controlar aspectos geométricos de las funciones, por ejemplo en la función sigmoïdal controla la no linealidad, depende de la función de activación que se utilice.

c_l = Son parámetros de desplazamiento y la finalidad de estos parámetros es el de controlar la ubicación respecto al origen. Este parámetro puede ir ó no ir en la función, no es obligatorio y solo es para tener una idea de la grafica respecto al origen.

Los parámetro a_l , b_l y c_l son valores que se proporcionan a la red neuronal para que comience la búsqueda de los parámetros óptimos, es decir los valores iniciales para la rutina de optimización

Capítulo 5

Precipitación Química

5.1.- Introducción

A través de la precipitación de metales pesados mediante agentes químicos (mejor conocida como precipitación química), se presenta una alternativa para remover metales pesados de aguas residuales que genera la industria galvánica de la ciudad de Monterrey.

De acuerdo a los análisis el agua contiene:

- ↓ Cromo (Cr^{+3})
- ↓ Férrico (Fe^{+3})
- ↓ Zinc (Zn^{+2})
- ↓ Níquel (Ni^{+2})

En cantidades que rebasa la norma mexicana. La experimentación se realizó utilizando un equipo de prueba de jarras, además se utilizaron cuatro coagulantes como sustancia química para la remoción de los metales, los cuales son:

- ↓ Sulfato de aluminio ($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$)
- ↓ Sulfato férrico (FeSO_4)
- ↓ Sulfato ferroso ($\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$)
- ↓ Cloruro férrico (FeCl_3)

El cloruro férrico fue el que mostró el mejor nivel de remoción de los metales estudiados así como una velocidad de sedimentación más rápida.

También se encontró una relación entre el nivel de remoción con el tamaño de los flóculos.

5.2.- Parte experimental

En la experimentación se utilizó un equipo de prueba de jarras el cual cuenta con:

- ⬇ Paletas de agitación
- ⬇ Control de velocidad de agitación
- ⬇ Control de tiempo de agitación

Aquí mismo se colocan los vasos de precipitados que contienen la muestra para el tratamiento. Con el control de velocidad y de agitación que cuenta el equipo se puede controlar de manera muy precisa las velocidades y tiempos de agitación, esto se puede apreciar en la Figura 12.

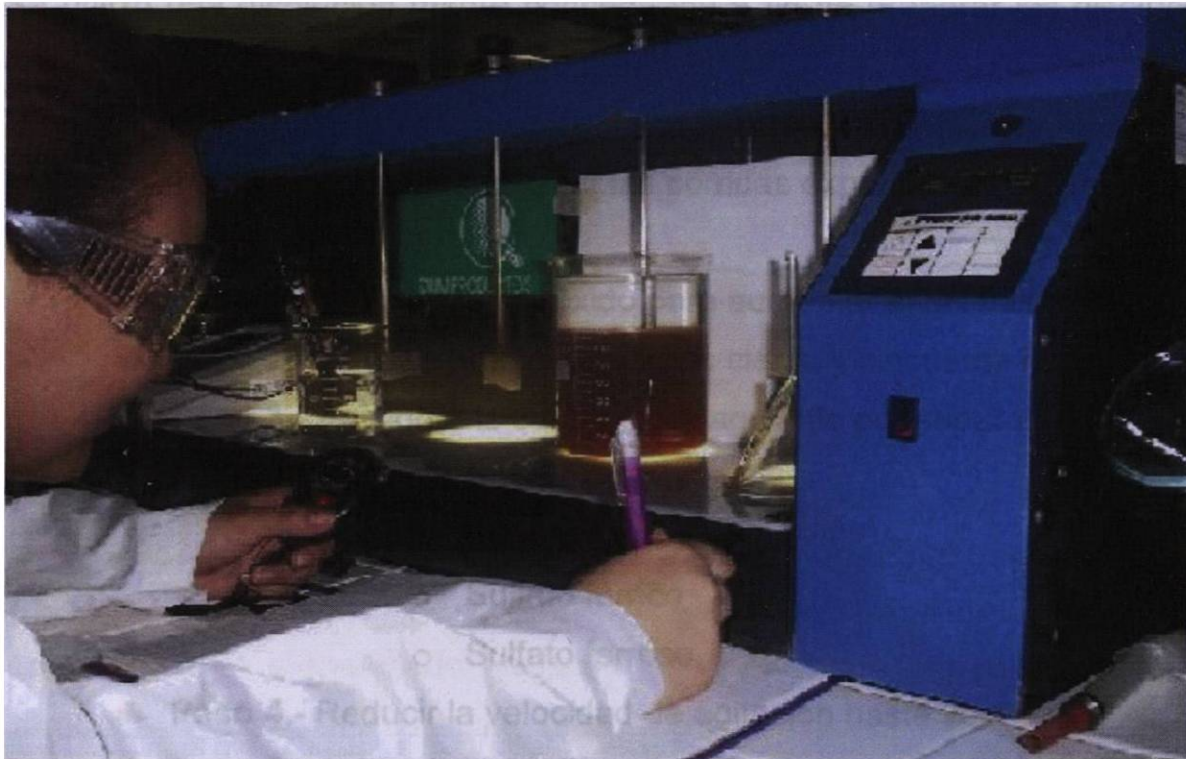


Figura 12 – Prueba de jarras

Se prepararon las disoluciones a tratar utilizando para esto cloruro de zinc (Zn^{+2}), cloruro de níquel (Ni^{+2}), cloruro férrico (Fe^{+3}) y cloruro de cromo (III) (Cr^{+3}) en agua desmineralizada y destilada.

La composición química del agua fue:

- ↓ 447 partes por millón (ppm) de Cr^{+3}
- ↓ 200 partes por millón (ppm) de Fe^{+3}
- ↓ 27 partes por millón (ppm) de Ni^{+2}
- ↓ 750 partes por millón (ppm) de Zn^{+2}

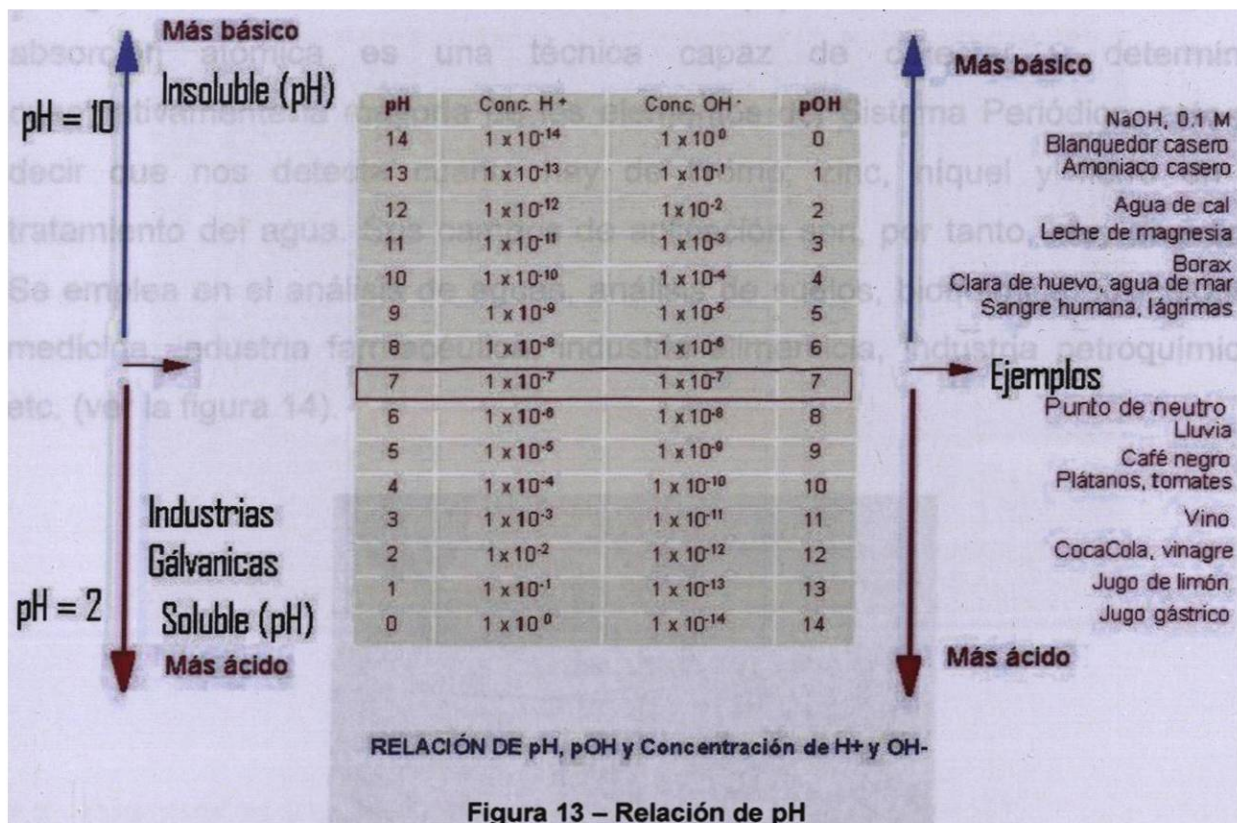
A un valor de pH=2.0, ya que este es el pH y la composición química del agua residual generada en la industria galvanica.

Se utilizó una disolución madre concentrada a fin de preparar las disoluciones con la concentración deseada.

Los pasos que se tomaron para hacer las corridas experimentales fueron:

- ↓ **Paso 1.-** Adición de hidróxido para aumentar el pH hasta diez
- ↓ **Paso 2.-** Agitar a una velocidad de ciento y cincuenta rpm
- ↓ **Paso 3.-** Adicionar la sustancia coagulante por separado
 - Sulfato de aluminio
 - Cloruro férrico
 - Sulfato férrico
 - Sulfato ferroso
- ↓ **Paso 4.-** Reducir la velocidad de agitación hasta veinte rpm
- ↓ **Paso 5.-** Agitar durante diez minutos.
- ↓ **Paso 6.-** Dejar sedimentar por espacio de cuarenta y cinco minutos
- ↓ **Paso 7.-** Separar el líquido de la fase sólida.

En el paso 1 se realiza la adición de hidróxido de sodio, para aumentar el potencial de hidrogeno (pH) de la disolución de trabajo hasta lograr un pH=10, esto con el fin de que los metales pesados que se han disuelto en el agua desmineralizada se transformen en insolubles, es decir que sean estructuras sólidas y de esta forma cuando se adicione el coagulante la extracción sea favorable, otro de los propósitos del potencial de hidrogeno es para verificar la acidez de la composición (ver figura 13).



En el segundo paso se agitó vigorosamente a 150 revoluciones por minuto (rpm) para que se dispersara el hidrogeno, y con esto aumentar el pH a diez como se había mencionado, posteriormente en el tercer paso se adicionó la sustancia coagulante, la cual su función es atraer los metales pesados mediante descargas eléctricas y de este modo se forman flóculos mediante los metales pesados y la sustancia coagulante, mientras pasa el tiempo se van uniendo cada uno de estos flóculos hasta hacerse uno solo, para después extraerlo del agua. Los coagulantes son sulfato de aluminio, cloruro férrico, sulfato férrico y sulfato ferroso, los cuales se probaron cada uno por separado.

En seguida se redujo la velocidad de agitación hasta 20 rpm, para evitar rompimientos de los flóculos y de esta forma obtener tamaños mas grandes para facilitar su extracción y finalmente se neutralizó la disolución de nuevo hasta alcanzar un pH=10, la agitación lenta se realizó durante 10 minutos, se dejó sedimentar por espacio de 45 minutos y finalmente se separó el líquido de la fase sólida.

El agua tratada se analizó utilizando el equipo de absorción atómica. La absorción atómica es una técnica capaz de detectar y determinar cuantitativamente la mayoría de los elementos del Sistema Periódico, esto es decir que nos detecta cuanto hay de cromo, zinc, níquel y fierro en el tratamiento del agua. Sus campos de aplicación son, por tanto, muy diversos. Se emplea en el análisis de aguas, análisis de suelos, bioquímica, toxicología, medicina, industria farmacéutica, industria alimenticia, industria petroquímica, etc. (ver la figura 14).

Como funciona?



Figura 14 – Absorción Atómica

Las curvas de sedimentación se determinaron utilizando una escala métrica graduada en centímetros y milímetros (ver Figura 15), observando la altura de la separación de fases sólida y líquida en el tiempo, las mediciones se realizaron durante 45 minutos totales hasta llegar a la etapa de compresión, 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. Se realizó además un análisis de los sedimentos generados mediante microscopía óptica a fin de estudiar la cinética de la floculación. Se tomaron 15 micrografías (fotografías) a bajos aumentos (40x) para cada diferente prueba en el equipo de jarras. 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.

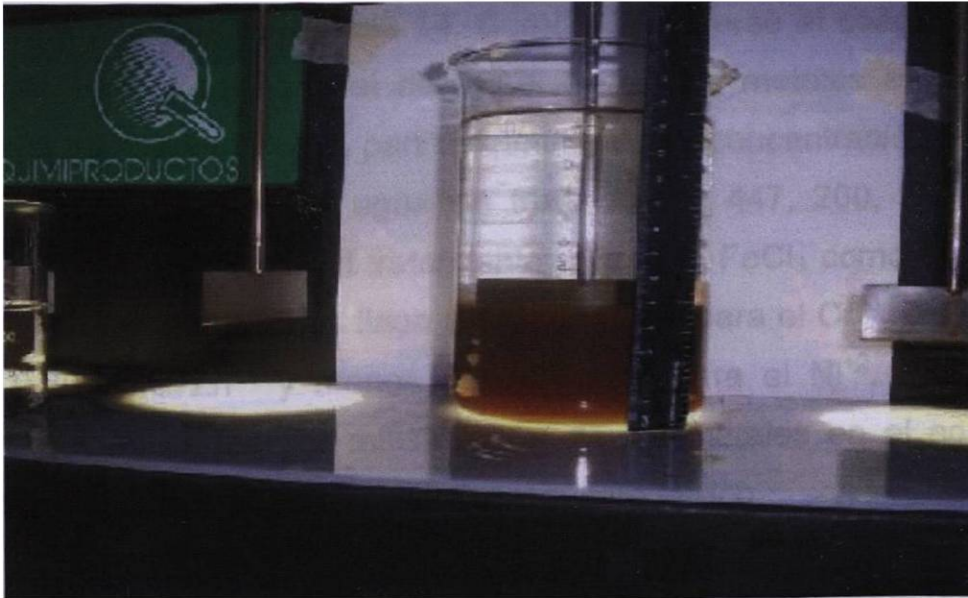


Figura 15 - Muestra de sedimentación

5.3.- Resultados y discusión

De acuerdo a la bibliografía consultada, la precipitación química asistida por sustancias coagulantes es ampliamente utilizada en Estados Unidos de América [14].

Las ventajas que se citan son:

- ✚ El equipamiento requerido no es sofisticado
- ✚ Los reactivos químicos utilizados son económicos y de fácil acceso
- ✚ No se requiere un operario con alto nivel de entrenamiento

En este tratamiento se utilizó la información sobre la solubilidad de los hidróxidos metálicos que se forman, ya que como es bien conocido, la solubilidad de éstos se ve afectada por el pH de la disolución [15]. Se ha reportado el valor de pH óptimo para la remoción de metales tales como zinc, cadmio, manganeso, y magnesio de aguas residuales utilizando la precipitación y coagulación [13].

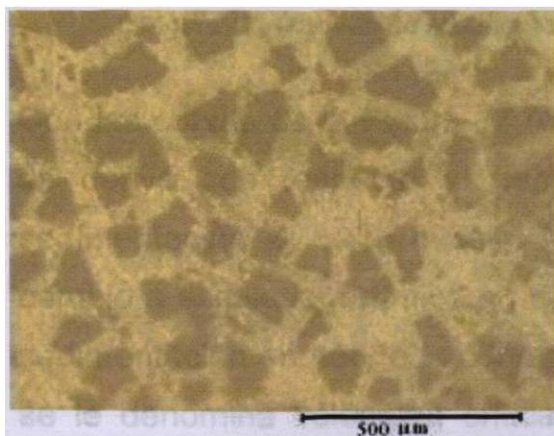
Los resultados del análisis del agua tratada obtenidos por medio de absorción atómica se presentan en la tabla 14. Como puede verse el coagulante cloruro férrico muestran el mejor nivel de remoción de los metales estudiados. Tal como se ha mencionado en la parte experimental la concentración de los iones 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.

Tabla 14. Resultados del análisis químico de las aguas tratadas realizado mediante absorción atómica.

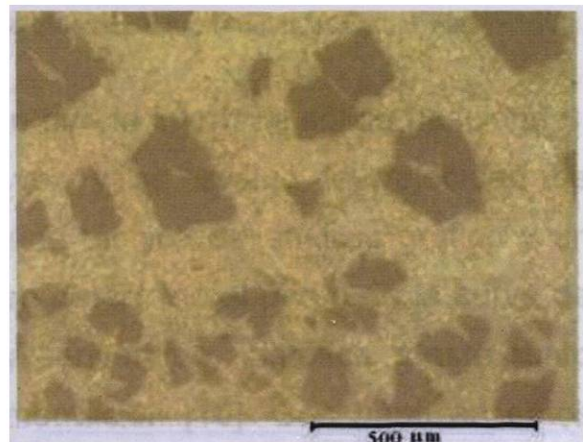
Corrida con Sulfato de Aluminio			Corrida con Cloruro Férrico		
Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)	Ion metálico	C inicial (ppm)	C final (ppm)
Cr^{+3}	447	<0.20	Cr^{+3}	447	0.25
Fe^{+3}	200	0.66	Fe^{+3}	200	0.37
Zn^{+2}	750	19.64	Zn^{+2}	750	0.80
Ni^{+2}	27	<0.20	Ni^{+2}	27	<0.20

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

En este experimento se hizo un estudio cuantitativo sobre el tamaño de los flóculos (coágulos) generados una vez terminada la agitación lenta para los diferentes coagulantes utilizados y se observó que para el caso del FeCl₃ (el coagulante cual mostró los mejores niveles de remoción de metales pesados del agua a tratar) que este daba una curva de distribución de tamaño de partícula mas grande (coágulos mas grandes) en el sedimento. Con estos resultados se concluye que la remoción química de los metales pesados utilizados en este trabajo depende del tamaño de los flóculos formados. En la Figura 16 se presentan muestras representativas de los precipitados para el coagulante sulfato ferroso y cloruro férrico (10 minutos de agitación en el equipo de pruebas de jarras).



Sulfato Ferroso



Cloruro Férrico

Figura 16 – Flóculos ó Coagulantes

En la Figura 17 se muestran las curvas de sedimentación, la cual muestra las distancias de la fase sólida a partir del fondo del recipiente en función del tiempo. A partir de estos resultados puede observarse que el sulfato de aluminio muestra una curva poco aceptable de sedimentación (sedimentación muy lenta del precipitado), para este coagulante la fase sólida está más alejada del fondo del vaso, lo cual no es aplicable a nivel industrial, las curvas de sedimentación del sulfato férrico y la del cloruro férrico son las que muestran un mejor comportamiento (sedimentación mas rápida).

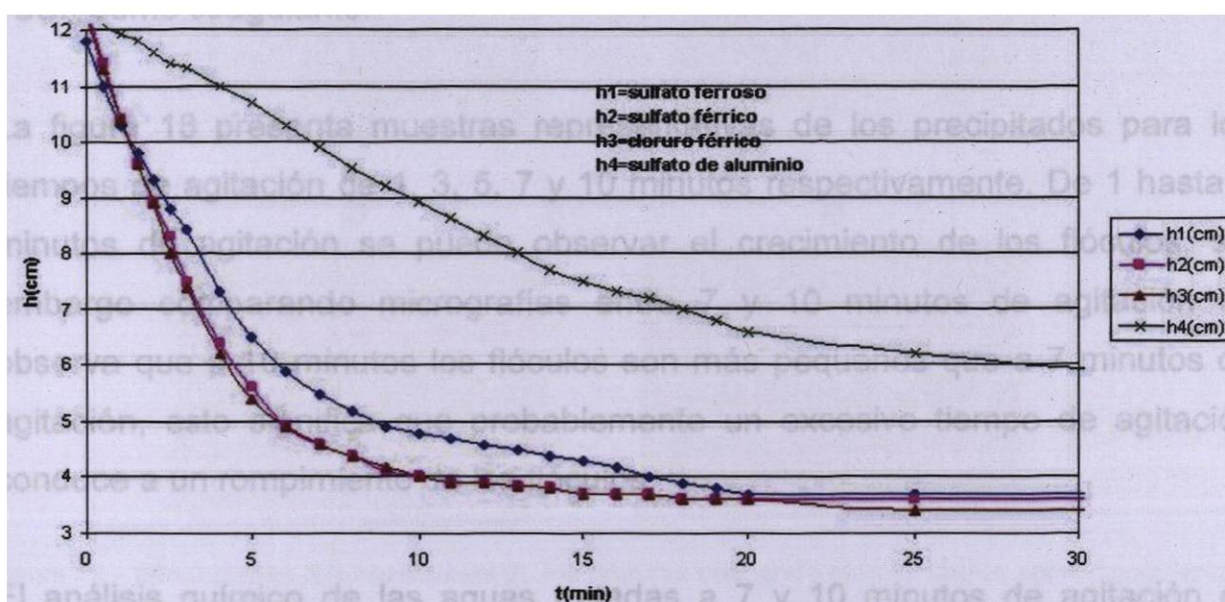


Figura 17 – Curvas de sedimentación para las diferentes sustancias coagulantes

Con las curvas de la Figura 17 (rapidez con que la interfase sólida desciende), se derivó con respecto al tiempo una vez y se evaluó la velocidad de sedimentación en cada minuto. Mediante una técnica de análisis gráfico y un cambio a escala logarítmica en el tiempo, se determinó el punto de la curva de sedimentación en dónde la curva empieza a convertirse asintótica, a este punto se le denomina velocidad crítica de sedimentación [16]. Con base en estos resultados obtenidos se determinó la velocidad inicial de sedimentación, y la velocidad crítica de sedimentación.

Nuevamente el cloruro férrico muestra la más grande velocidad inicial de sedimentación y la más grande velocidad crítica de sedimentación. Esta última se alcanza en 8 minutos, es decir, en menor tiempo que para los otros tres coagulantes probados.

En este experimento también se estudió la cinética de floculación, para esto en el equipo de pruebas de jarras se tomó una muestra representativa del precipitado a cada minuto de agitación (tiempo de agitación total 10 minutos) para el análisis microscópico. En esta parte del estudio se utilizó solamente FeCl_3 como coagulante.

La figura 18 presenta 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, esto significa que probablemente 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 15. Los resultados muestran que a 7 minutos de agitación la remoción de los metales es ligeramente mejor que a 10 minutos, esto es, nuevamente que la remoción depende del tamaño de los flóculos en este estudio realizado.

Con estos resultados previamente presentados se concluye que el tiempo óptimo de agitación es de 7 minutos utilizando FeCl_3 como coagulante.

Con las condiciones de operación especificadas en la parte experimental en el equipo de jarras y un tiempo de agitación de 7 minutos se consiguió el mejor nivel de remoción de los metales estudiados.

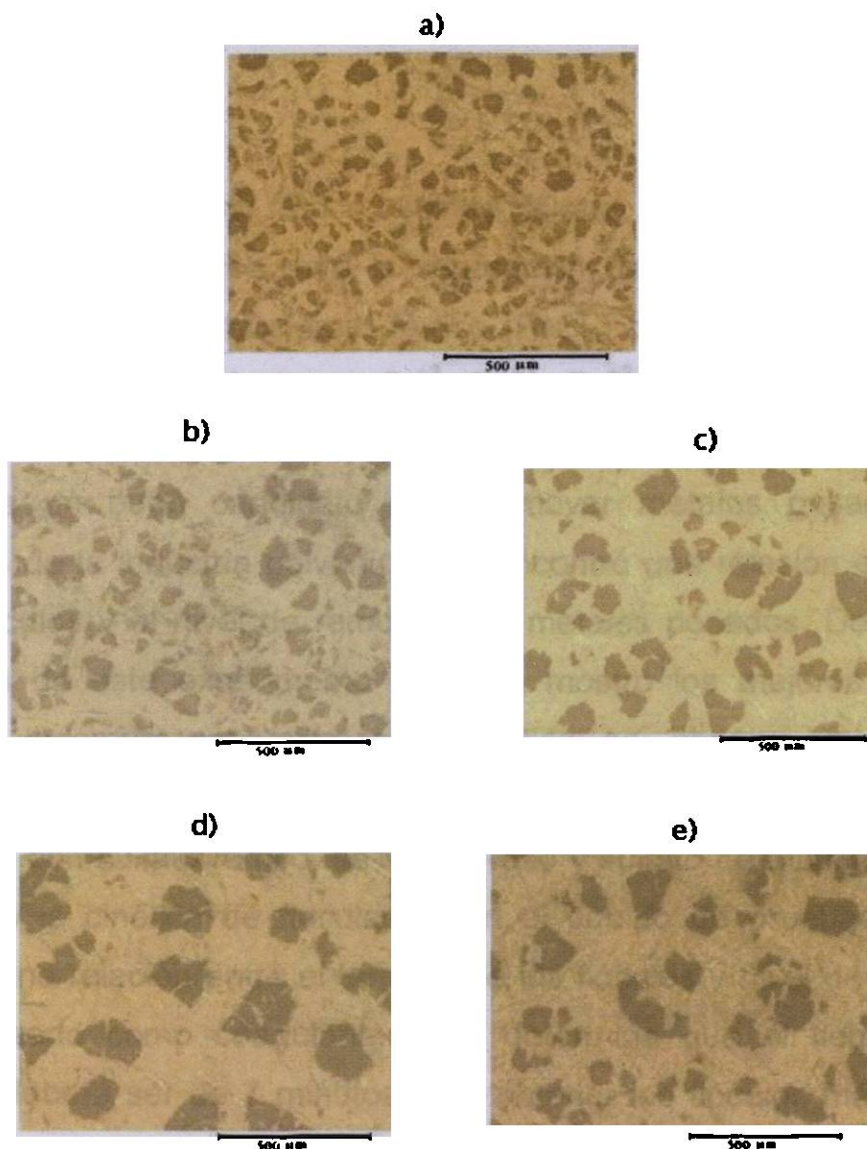


Figura 18 – Micrográficas representativas de los flocúlos utilizando cloruro férrico como coagulante. a) 1 minuto de agitación, b) 3 minutos de agitación, c) 5 minutos de agitación, d) 7 minutos de agitación y e) 10 minutos de agitación

Tabla 15. 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

5.4.- Conclusiones

Los coagulantes cloruro férrico, sulfato férrico, sulfato ferroso y sulfato de aluminio fueron utilizados para la separación de metales pesados de aguas residuales. El coagulante cloruro férrico (FeCl_3) mostró mejores resultados en cuanto a la remoción de iones Cr^{+3} , Fe^{+3} , Zn^{+2} y Ni^{+2} de aguas residuales, además da mejores resultados para la sedimentación de los precipitados, por lo cual sería un buen candidato para remover metales pesados de aguas residuales de la industria galvánica. Se encontró una relación entre el tamaño de los flóculos y el nivel de remoción de metales pesados. De acuerdo a los resultados de este experimento el FeCl_3 mostró los mejores resultados de remoción, además por microscopia óptica se observó que los flóculos (precipitados) fueron más grandes utilizando FeCl_3 comparados éstos con los generados con sulfato férrico, sulfato ferroso y sulfato de aluminio. Igualmente, estudiando la cinética de floculación en el equipo de pruebas de jarras, se encontró una relación entre el tamaño de los flóculos y nivel de remoción para FeCl_3 utilizado como coagulante y se determina que el tiempo óptimo de agitación deberá ser de 7 minutos para obtener los flóculos más grandes y el mejor nivel de remoción de los metales pesados

Capítulo 6

Caso de Estudio

6.1.- Difusión

La difusión, comienza con el desprendimiento ó desplazamiento espontáneo de la materia (partículas), calor, o ímpetu, es un tipo de fenómeno de transporte [17]. Se observa fácilmente, por ejemplo cuando el comestible seco como el espagueti se cocina, las moléculas de agua se difunden en el espagueti, haciéndolo más grueso y más flexible. Es un proceso físico más bien que una reacción química, que no requiere ningún gasto energético neto [17]. En células biológicas, la difusión se describe a menudo como una forma de transporte pasivo, por la cual las sustancias cruzan las membranas.

6.1.1.- Ejemplos de difusión

Estos son algunos ejemplos del fenómeno de transporte difusión

- ✚ Un globo llenado de helio se desinflará poco a poco cada día, porque los átomos del helio se difunden del globo a través de su pared.
- ✚ Las burbujas del bióxido de carbono en bebidas suaves comienzan como núcleos pequeños y crecen debido a la difusión de las moléculas del bióxido de carbono hacia ellas.
- ✚ El calor se difunde a través de las paredes de una taza de café caliente
- ✚ Un gas se distribuye sobre un cuarto por la difusión.
- ✚ Un cubo de azúcar en un vaso de agua que no se revuelve, se disolverá lentamente y las moléculas del azúcar se distribuirán sobre el agua por la difusión.

6.1.2.- La naturaleza de la difusión

Las diversas formas de difusión se pueden modelar de forma cuantitativa, usando la ecuación de la difusión, que va por diversos nombres dependiendo de la situación física. Por ejemplo la difusión bi-molecular de estado estacionario es gobernada por la primera ley de Fick, la difusión termal de estado estacionario es gobernada por la ley de Fourier. La difusión de electrones en plomos de un campo eléctrico es esencialmente a la ley del ohmio [17]. La ecuación genérica de la difusión es dependiente del tiempo, es decir, se aplica a las situaciones del estado no constante.

En todos los casos de la difusión, el flujo neto de la cantidad transportada (átomos, energía, ó electrones) es igual a una característica física (difusividad, conductividad termal, conductividad eléctrica) multiplicada por un gradiente (una concentración, una termal, un gradiente del campo eléctrico). El transporte sensible ocurre solamente si hay un gradiente por ejemplo en la difusión termal, si la temperatura es constante, el calor se moverá tan rápidamente en una dirección como en la otra, no produciendo ningún transporte del calor y cambio en temperatura.

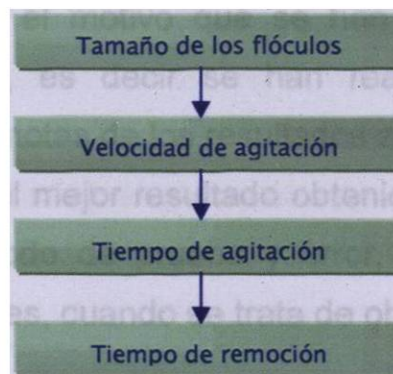
La difusión ocurre como resultado de la segunda ley de la termodinámica, que indica que la entropía ó el desorden de cualquier sistema deben aumentar siempre con el tiempo [17]. Porque las sustancias se difunden en regiones, de una concentración más alta a las regiones de una concentración más baja, van de un estado de una orden más alta a un estado de una orden más baja, de acuerdo con la segunda ley de la termodinámica. Por lo tanto, la difusión es un proceso espontáneo y natural, el querer invertir la difusión se requeriría el gasto de la energía para contrariar la orden más alta del sistema y prevenir una violación de las leyes de la entropía.

La difusión colectiva es la difusión de una gran cantidad de partículas, lo más a menudo posible dentro de un solvente ó sustancia.

Contrariamente al movimiento browniano, que es la difusión de una sola partícula, en la difusión colectiva las interacciones entre las partículas tiene que ser consideradas, a menos que la forma de las partículas sea una mezcla ideal con su solvente. (Las condiciones ideales de la mezcla corresponden al caso donde están idénticas las interacciones entre las moléculas del solvente y las interacciones entre las partículas, en este caso, las partículas no obran recíprocamente cuando están dentro del solvente) [17].

6.2.- Descripción del Problema

El proceso de precipitación de metales pesados mediante agentes químicos involucra un problema de ajuste de parámetros, entre los cuales se han identificado por medio del experimento empírico los parámetros que inciden de forma relevante en el proceso, los parámetros de interés son los siguientes:



El parámetro de interés para esta investigación es el tamaño de los flóculos ya que se requiere obtener el mayor crecimiento de ellos. Además de este parámetro hay otros dos parámetros que juegan un papel muy importante, que son la velocidad y el tiempo de agitación, ya que sin ellos no se podría maximizar el tamaño de los flóculos.

De esta forma se puede afirmar que dependiendo de la velocidad y tiempo de agitación se obtendrá el tamaño del flóculo deseado para la extracción de los metales pesados en un intervalo de tiempo de remoción, este último corresponde a nuestro cuarto parámetro.

Como se mencionó el proceso de remoción es nuestro cuarto parámetro, este el único factor independiente ya que el proceso de remoción se desarrolla mediante la insolubilización de los hidróxidos de los metales citados en el capítulo 5, es decir evitar que se disuelvan en la sustancia líquida, posteriormente se procede a la coagulación a fin de lograr una mejor

separación de las fases sólidas y líquidas. Los criterios de selección del mejor coagulante son: el nivel de remoción de los metales y la mejor curva de sedimentación del precipitado generado

De esta manera se necesita definir los parámetros del sistema para lograr un adecuado funcionamiento entre cada uno de ellos. Ya que los resultados que se obtienen por parte de la Facultad de Ciencias Químicas no se vuelven realmente confiables, por el motivo que se han realizado por medio de la experimentación empírica, es decir se han realizado varias pruebas con diferentes datos, tomando notas de los resultados arrojados por cada una de las pruebas y seleccionando el mejor resultado obtenido. Lo cual hace pensar que se esta utilizando el método de prueba y error, un método muy propicio a obtener errores muy grandes, cuando se trata de obtener los valores óptimos de estos parámetros.

6.3.- Objetivo general

En este caso de estudio se aplicó la metodología descrita anteriormente para evaluar los cuatro parámetros más importantes en el proceso de precipitación química. El objetivo global de esta investigación es definir los parámetros del sistema experimental que maximizan los tamaños de los flóculos para la mejor remoción de los metales pesados.

Primero, se decidió investigar modelos matemáticos que permitirían describir el comportamiento del sistema experimental, es decir hallar una función que se acople a los datos ó muestra experimental que se obtienen al realizar el proceso de precipitación química. Se identificaron varios modelos para describir el tipo de proceso que se esta manejando en este estudio, entre los mas destacados se encuentran, la regresión múltiple, mínimos cuadrados para redes no lineales y redes neuronales artificiales.

Una vez identificados los modelos se prosiguió a estudiarlos a través de simulaciones y de esta forma determinar cual de los modelos se podría acoplar mejor a la muestra original. Se realizo una simulación de dos variables. Las dos variables que se utilizaron para la simulación fueron el tiempo de distribución de "x" partículas (FLÓCULOS) y el volumen bajo el cual la partículas se esta difundiendo (CAJA). Se eligieron cinco diferentes niveles de tiempo para poder estimar la distribución de un conjunto de partículas que se difunden en un cierto volumen respecto a solamente una variable que es el tiempo.

6.4.- Simulación del proceso

Como primer paso, después de haber identificado y probado los modelos matemáticos, se encontró que las redes neuronales artificiales presentaban una mejor descripción de la muestra de los datos simulados, pero a pesar de que varios modelos mostraron resultados muy satisfactorios, se optó por utilizar las redes neuronales artificiales por motivos del modelo matemático de la simulación del proceso, ya que su formulación está basada en la distribución de un conjunto de partículas que se difunden en una caja. De esta manera este tipo de modelo se puede representar como una "Aproximación/Regresión" para el conjunto de datos que se tiene.

De esta forma se sabe que dentro del mundo de las redes neuronales artificiales se encuentran diferentes tipos de algoritmos que sirven para la resolución de problemas de aproximación.

Así que se decidió crear una red neuronal artificial entrenada para datos simulados. ¿Porqué utilizar datos simulados?, esto es debido a que todavía no se cuenta con los datos originales que serán proporcionados por la Facultad de Ciencias Químicas, así que se decidió realizar una muestra de datos que fueran similares a los datos reales.

La simulación representa la evolución en el tiempo, de la distribución de un conjunto de partículas que se difunden en un cierto volumen, se decidió realizar este tipo de simulación ya que este experimento computacional es cualitativamente similar al experimento real que será analizado. Además se propone analizar este tipo de simulación porque ya se sabe como se comporta la distribución en la situación simulada, a esta situación se le conoce como un fenómeno de transporte que a su vez es conocido como "La Difusión" que fue explicado en el tema 6.1 de este capítulo, de esta forma se obtiene una gran

ventaja al saber como podría comportarse el experimento real, cosa que se ignora en este momento.

¿Por qué se dice que son cualitativamente similares? En las siguientes figuras se ilustra y se discute a detalle porque son cualitativamente similares.

En la Figura 19 y 20, se explica el comportamiento del experimento de precipitación química.

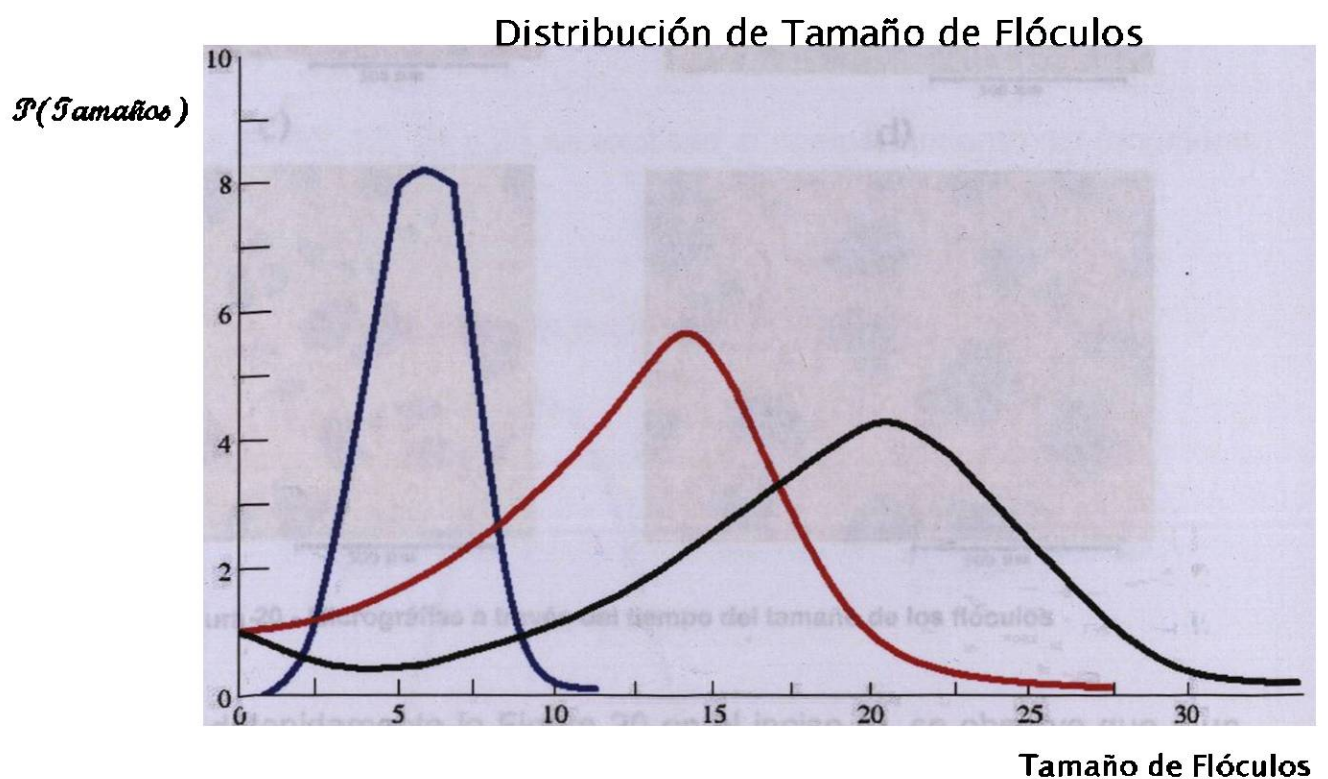


Figura 19 – Distribución de Tamaño de Flóculos

Micrográficas a través del tiempo del tamaño de los flóculos

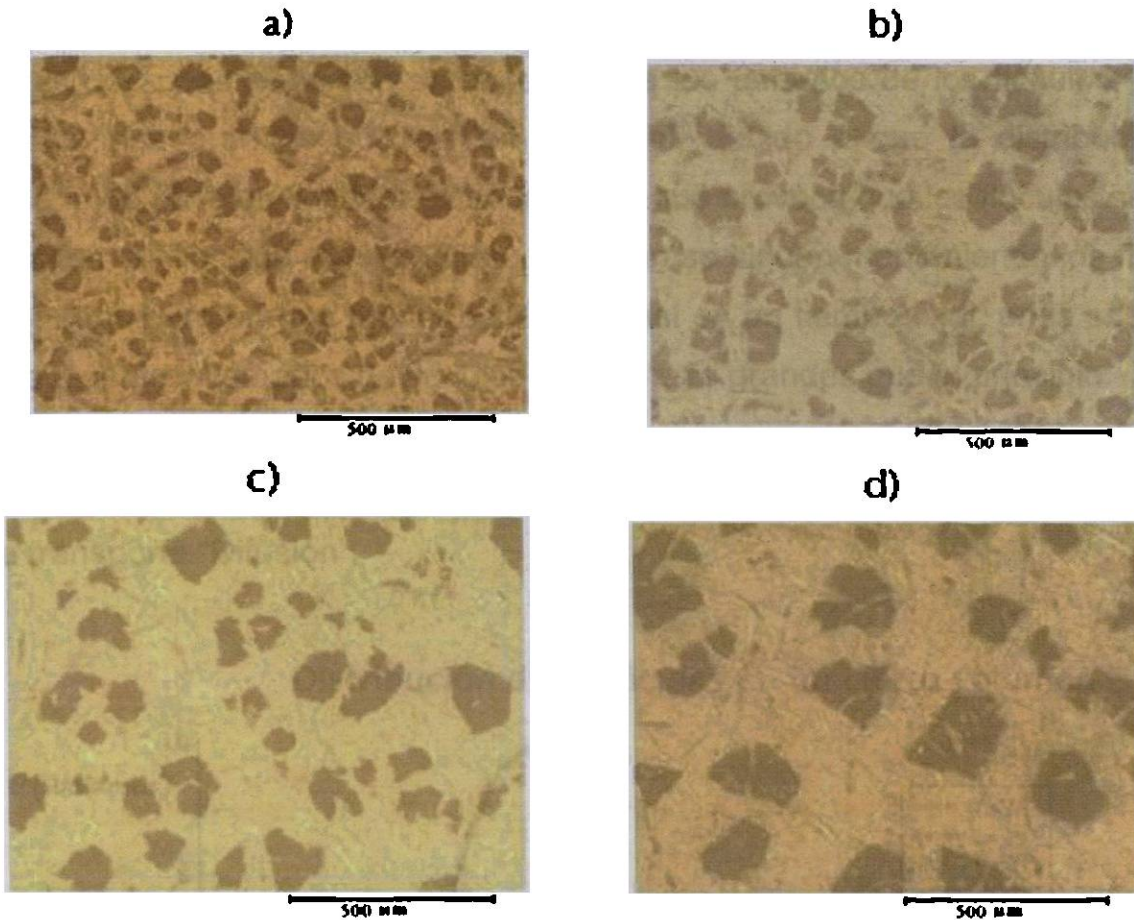


Figura 20 - Micrográficas a través del tiempo del tamaño de los flóculos

Si se observa detenidamente la Figura 20 en el inciso a), se observa que a un tiempo inicial se tiene un gran número de flóculos en tamaño muy pequeños que ya están dispersos en todo el volumen de la sustancia, si se observa el inciso b), se siguen manteniendo flóculos muy pequeños pero en una menor cantidad, si se observa el inciso c), siguen manteniéndose flóculos muy pequeños pero ya son muy mínimos, también se observa que a través del tiempo algunos flóculos se han unido para formar flóculos mucho más grandes que es lo que sucede en el inciso b), c) y d).

De esta manera en la Figura 19, se muestra una distribución de tamaño de flóculos, donde son estos tamaños de flóculos los que se difunden en la sustancia, y se observa que en un tiempo inicial se encuentran tamaños de flóculos muy pequeños, que ya están dispersos en todo el volumen, pero a través que pasa el tiempo se observa que los tamaños de los flóculos ya son mucho mas grandes que al tiempo inicial, debido a que la distribución de tamaño de flóculos tiende a extenderse, lo que provoca que los flóculos se unan para formar flóculos mas grandes, pero aún se siguen manteniendo los flóculos pequeños pero en una menor cantidad y así en un tiempo final, en la sustancia se encuentran tamaños de flóculos mucho mas grandes que al principio.

En las Figuras 21, 22, 23, 24 y 25 se explican el comportamiento del fenómeno de transporte “Difusión”.

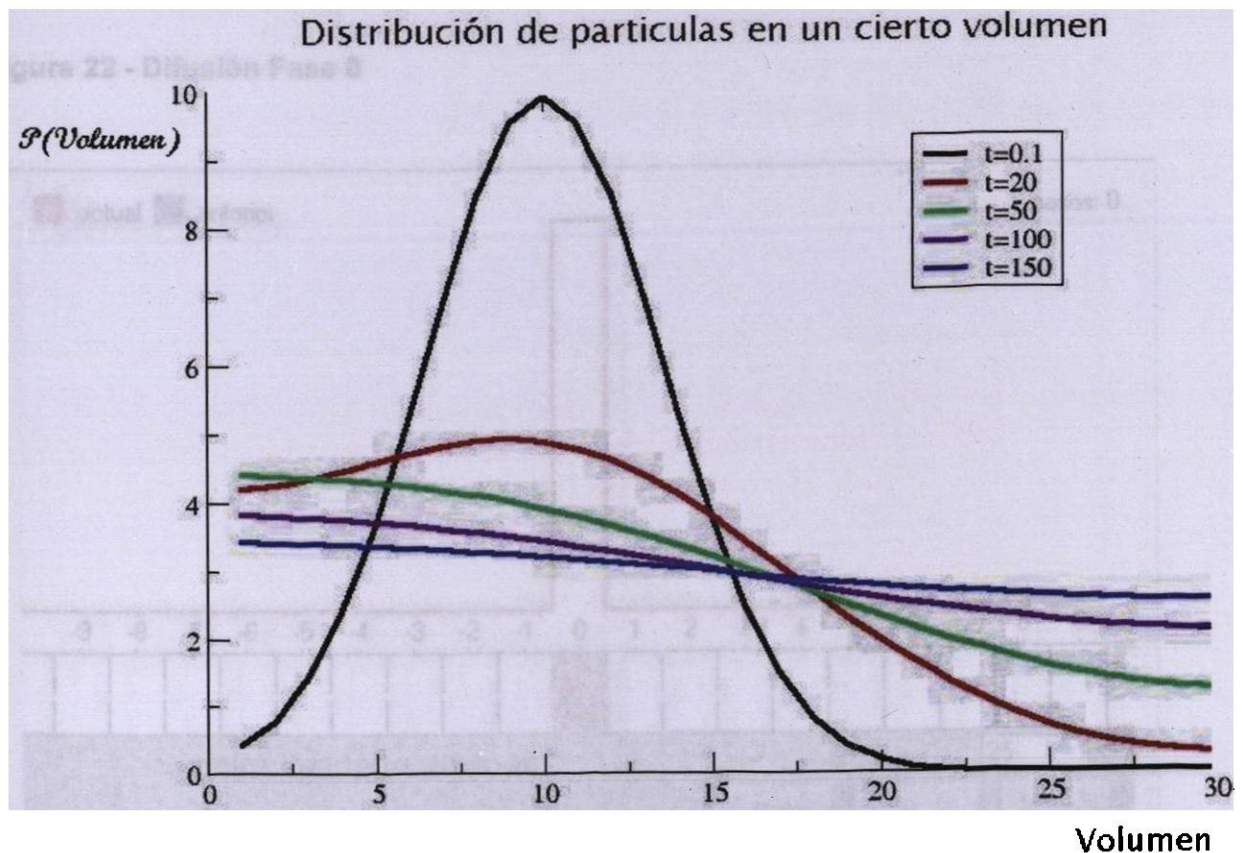


Figura 21 – Distribución de partículas en un cierto volumen

En la Figura 21, se muestra una distribución de partículas en un cierto volumen (CAJA) donde se observa que a un tiempo inicial igual a 0.1 segundos, la distribución de partículas se mantienen en un punto inicial, que es en la fracción de volumen igual 10 (ALTURA), pero a través que pasa el tiempo esta distribución de partículas tiende a difundirse en el volumen total de la caja, de esta manera en los tiempos 20, 50, 100 y 150 segundos respectivamente se observa que la distribución de partículas se encuentra homogéneamente en el volumen total de la caja.

En la siguientes Figuras 22, 23, 24, y 25 se muestra una simulación del fenómeno de transporte "Difusión", donde se ilustra lo anterior descrito para un mejor entendimiento [18].

Simulación del Fenómeno de Transporte "DIFUSIÓN"

Figura 22 - Difusión Fase 0

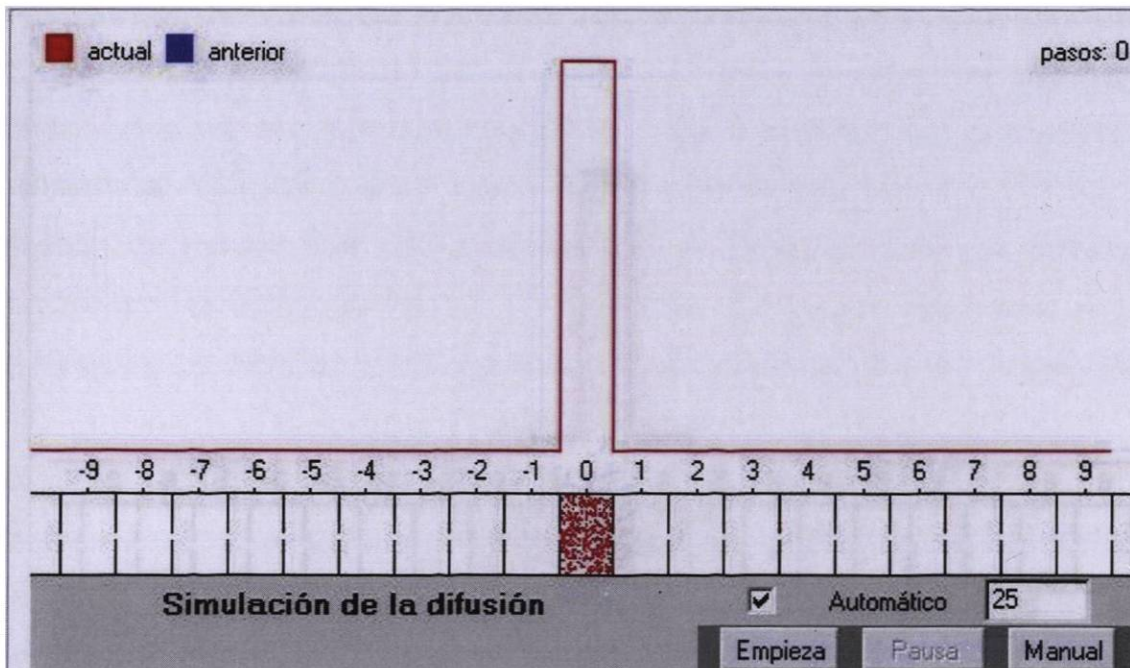


Figura 23 - Difusión Fase 1

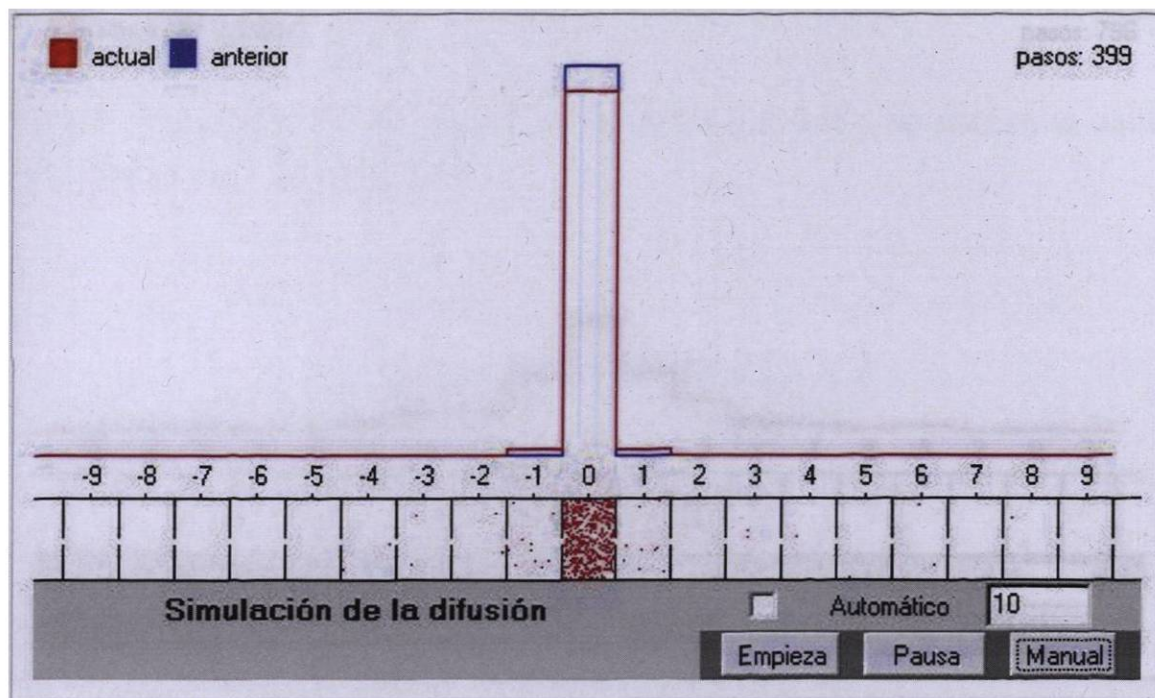


Figura 24 - Difusión Fase 2

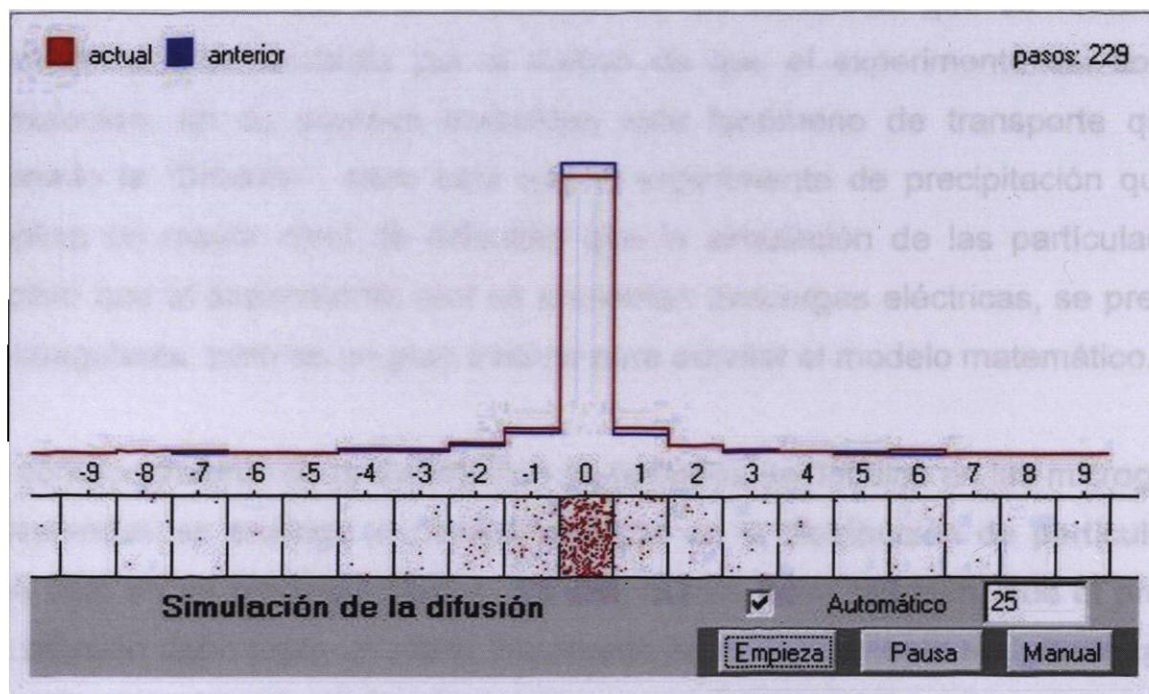
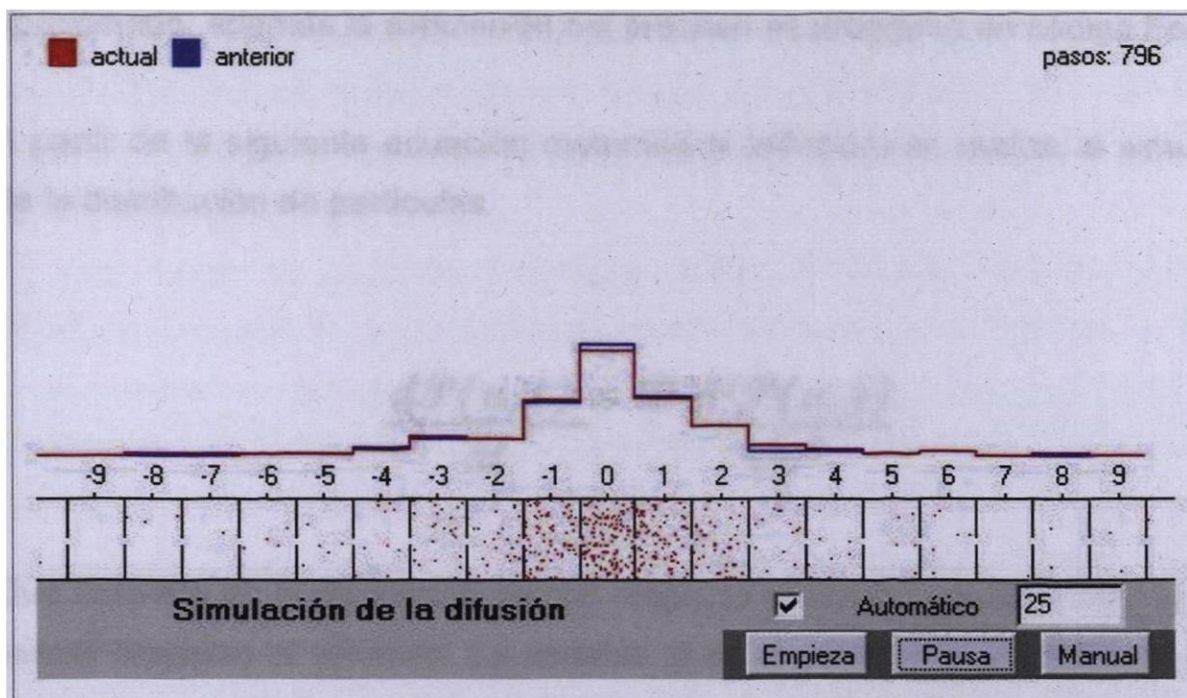


Figura 25 - Difusión Fase 3

De esta manera se puede afirmar que el experimento por parte de la Facultad de Ciencias Químicas y la simulación de las partículas que se realizó, son cualitativamente similares por el motivo de que el experimento así como la simulación, en su proceso presentan este fenómeno de transporte que es llamado la "Difusión", claro está que el experimento de precipitación química implica un mayor nivel de dificultad que la simulación de las partículas, por motivo que el experimento real se presentan descargas eléctricas, se presenta el coagulante, pero es un gran avance para detallar el modelo matemático.

El comportamiento de la distribución de tamaños de flóculos en las micrografías observadas es análogo al comportamiento de la distribución de partículas en una caja en un proceso difusivo. Es interesante notar también, que el proceso de difusión debe jugar un papel importante en el experimento real, dado que es por difusión como las partículas exploran el espacio, se encuentran y finalmente se unen para formar flóculos más grandes.

La simulación se hizo discretizando la ecuación de difusión, es decir transformando la realidad de la naturaleza continua en un modelo discreto aproximado, además la simulación del proceso se programo en código Fortran.

A partir de la siguiente ecuación matemática (difusión) se realizo la simulación de la distribución de partículas.

$$\frac{d\mathcal{P}(u, t)}{dt} = \mathcal{D} \frac{d^2\mathcal{P}(u, t)}{du^2}$$

Que consiste en la derivación parcial respecto al tiempo y la segunda derivada parcial respecto al volumen. La variable \mathcal{D} es el coeficiente de difusión que es proporcional a la temperatura, es decir, sí la temperatura es muy alta, la difusión de las partículas tiende a ser muy rápida, al igual sí la temperatura es muy baja, la difusión de las partículas tiende a ser muy lenta. La temperatura que se utilizo para la simulación del proceso fue respecto al coeficiente de difusión donde $D = 1$, esto significa que si el valor de $D = 2$, la difusión es mas rápida y si el valor de $D = \frac{1}{2}$, la difusión es mas lenta.

6.5.- Software Estadístico

Para llevar a cabo la realización del estudio de las curvas de la simulación del proceso difusivo, se necesitó de la ayuda de un software estadístico para llevar a cabo la implementación de la red neuronal artificial.

En esta parte se propuso investigar sobre diferentes tipos de software estadísticos aparte del ya conocido y popular software estadístico MATLAB, que es ampliamente utilizado en la comunidad universitaria para hacer más real y tangible la educación científica y técnica, además de que es también muy utilizado en las industrias para aumentar sus ventajas competitivas como el aumento de la productividad así como la mejora continua en la creatividad de nuevos productos. Pero así como este software es de gran ayuda para muchas instituciones para otras no lo es, por el motivo de que la compra de la licencia para este producto es demasiado costosa y eso impide que muchas de las empresas no lo tengan y no puedan usarlo para la resolución de problemas.

Por tal motivo se decidió investigar dos tipos de software estadísticos de libre acceso es decir de manera gratuita para cualquier tipo de institución que desee utilizarlos, estos software gratuitos son desarrollados por instituciones educativas con el fin de que los estudiantes tengan una herramienta más para la realización de sus proyectos.

- El primer software científico que se identificó es:



The R Project for Statistical Computing

El software R es un lenguaje estadístico en un ambiente amigable y fácil de utilizar para la resolución de problemas estadísticos y gráficos. Es un proyecto del GNU que es similar a la lengua y al ambiente de S que fue desarrollado en

los laboratorios de Bell (antes AT&T, ahora las tecnologías de Lucent) por Juan Chambers y colegas [19].

R se puede considerar como una sustitución del lenguaje S. Hay algunas diferencias importantes, pero mucho código escrito para los funcionamientos R son similares al S.

R proporciona una variedad amplia de técnicas estadísticas como:

- ✚ La resolución de modelos lineales y no lineales.
- ✚ Pruebas estadísticas clásicas.
- ✚ Análisis del tiempo de series.
- ✚ Clasificaciones
- ✚ Realización de graficas
- ✚ Es altamente extensible.

La lengua de S es a menudo el puente para la investigación en la metodología estadística, y R proporciona una ruta abierta a todas las instituciones a la participación de la investigación estadística. Una de las fuerzas de R es que con el se pueden realizar diagramas bien diseñados de "Producción-Calidad" pueden ser producidos, incluyendo símbolos y fórmulas matemáticas [19].

R está disponible como software gratuito para todo el público, bajo los términos de la licencia en general del GNU de la fundación libre del software.

Además otras de sus ventajas que presenta, es que se compila y funciona en una variedad amplia de plataformas de UNIX y de sistemas similares (FreeBSD incluyendo y Linux), Windows y MacOS [19].

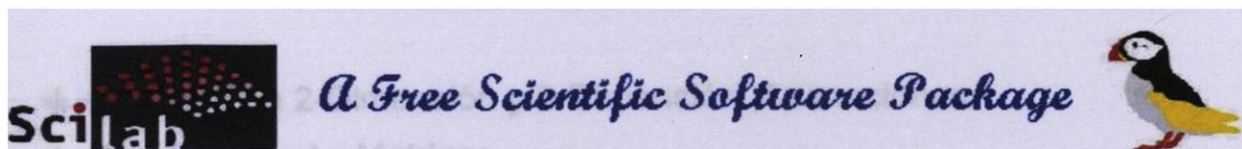
El ambiente de R

R es una habitación integrada de las instalaciones del software para la manipulación de datos, el cálculo y la exhibición gráfica [19]. Incluye

- ✚ Una facilidad para el tratamiento y el almacenamiento de datos.
- ✚ Una habitación de los operadores para los cálculos sobre órdenes, en matrices particulares.
- ✚ Una colección grande, coherente e integrada de las herramientas intermedias para el análisis de datos.
- ✚ Instalaciones gráficas para el análisis de datos.
- ✚ Un buen desarrollo, simple y eficaz del lenguaje de programación que incluye condiciones, lazos, funciones y entrada recurrente definida por el usuario y las instalaciones de la salida.

R, como S, se diseña alrededor de un lenguaje de programación conocido, y que permite que los usuarios agreguen funcionalidad adicional definiendo nuevas funciones. Mucho del sistema sí mismo se escribe en el dialecto de R, que hace mas fácil a los usuarios que sigan las opciones algorítmicas hechas. Para las tareas computacionales intensivas, el código de C, de C++ y del FORTRAN se puede ligar y llamar en cualquier caso. Los usuarios experimentados pueden escribir código de C para manipular objetos de R directamente.

- El segundo software científico que se identifico es:



Es un paquete de software científico para los cálculos numéricos que proporcionan un ambiente gráfico y de uso libre con un gran alcance para la ingeniería y los usos científicos.

Convertido desde 1990 por las siguientes instituciones [19]:

- ✓ **Instituto Nacional de Investigación y en Automatización (INRIA)**
- ✓ **Escuela Nacional de los Puentes y Calzadas (ENPC)**

Ahora es mantenido y desarrollado por Scilab Consortium desde su creación en mayo de 2003 [19]. Es un software de uso libre y que se puede obtener por la vía de Internet desde 1994, Scilab se está utilizando actualmente en ambientes educativos e industriales alrededor del mundo.

Scilab incluye centenares de funciones matemáticas con la posibilidad para agregar recíprocamente programas de varios lenguajes (C, FORTRAN, C++, etc.). Ha sofisticado estructuras de datos (listas incluyendo, los polinomios, las funciones racionales, los sistemas lineales...), un intérprete y un lenguaje de programación del alto nivel [19]. Este tipo de software es muy similar al software conocido como MATLAB, donde comparten funciones muy parecidas.

Scilab se ha diseñado para ser un sistema abierto donde el usuario puede definir nuevos tipos de operaciones y funciones de datos (contribuciones al sistema) con tal solo crear una caja de herramientas y subirla a la red para después a través de Scilab utilizarla. Un número de cajas de herramientas están disponibles con el sistema como [19]:

- ✚ Gráficas en 2-Dimensión y 3-Dimensión, Animaciones.
- ✚ Álgebra lineal y Matrices.
- ✚ Polinomios y funciones racionales.
- ✚ Simulaciones.

- ✚ Scicos: Sistemas dinámicos híbridos para modelar y simular.
- ✚ Control clásico y robusto, optimización de LMI.
- ✚ Optimización diferenciable y no diferenciable.
- ✚ Procesos de señales.
- ✚ Metanet: Gráficos y Redes.
- ✚ Scilab paralelo usando PVM.
- ✚ Estadística
- ✚ Interfase con algebra computacional.
- ✚ Interfase con Tcl/Tk
- ✚ Y un número largo de contribuciones para varios dominios.

Este software se ha construido usando un número de bibliotecas externas.

Scilab trabaja en la mayoría de los sistemas de Unix (GNU/Linux incluyendo) y Windows (9X/2000/XP). Viene con código de fuente, ayuda en línea y manuales de usuario en el idioma inglés [19].

6.7.- Estudio de las curvas a partir de la simulación de partículas por medio de las Redes Neuronales Artificiales.

Después de haber identificado los dos software estadísticos, se prosiguió a escoger uno de ellos, para el estudio de las curvas a partir de la simulación que se creó para la observación de las partículas que se difunden en una caja con un determinado volumen, se realizaron pruebas con diferentes herramientas de cada software, por ejemplo se utilizó el software R para el estudio de curvas de una muestra de datos acerca del número de horas de estudio de 10 personas para presentar un examen de Italiano y sus calificaciones obtenidas.

El estudio de las curvas de este problema se realizó a partir de las funciones de bases radiales, que se mencionaron en el Capítulo 4, y en las cuales se obtuvo una buena descripción del problema anteriormente descrito, y a manera en la cual se aumentaban las neuronas a optimizar se reflejaba un mejor resultado en el ajuste de las curvas.

Pero a pesar de esto, se decidió estudiar las curvas de la simulación del proceso con el software Scilab por motivos de que se encontró una función que resuelve el problema no lineal de los mínimos cuadrados, un método que es muy reconocido, muy fácil y utilizado para el ajuste de curvas que fue sugerido originalmente a principios del siglo XIX por el matemático francés Adrien Legendre.

La función que se encontró es "*leastsq (fun, x0)*" y que se expresa de la siguiente manera:

$$f(x) = [(f(\vec{x}))^2] = \sum_1^N fun^2_i(x)$$

Donde \vec{x} es un vector de parámetros a optimizar en \mathcal{R}^m y f esta en \mathcal{R}^n .

Donde $fun^2_i(x)$ es la función de ajuste, donde se busca minimizar los errores cuadráticos de los conjuntos observados con la función de ajuste, es decir que la distancia entre los datos observados y la función sean lo menos posible.

A través de la función *leastsq* se realizó el estudio de las curvas de la simulación de la distribución de partículas en una caja, la cual se ilustra en la siguiente figura:

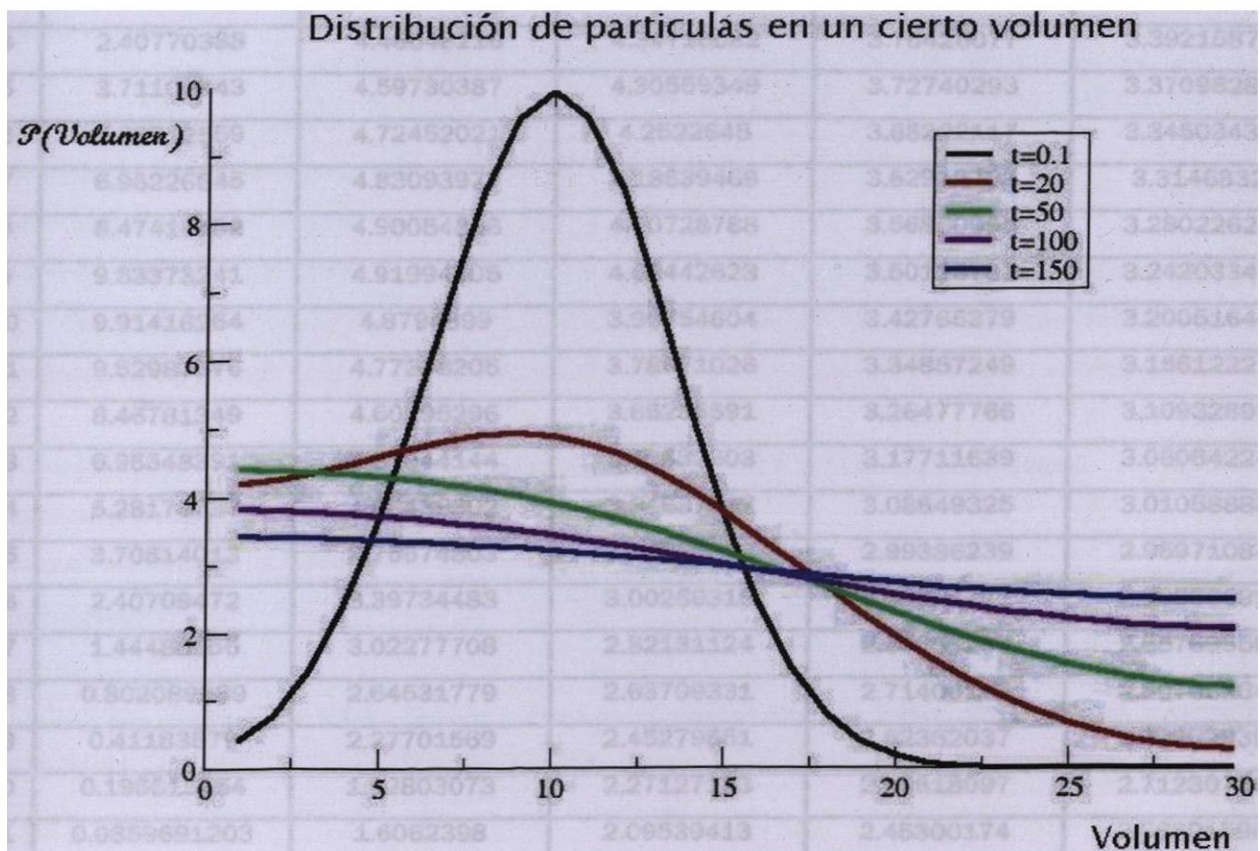


Figura 21 – Distribución de partículas en una caja con un volumen de 30

La simulación se realizó discretizando la ecuación matemática del fenómeno de transporte *difusión*, anteriormente descrita en el punto 6.4 del Capítulo 6 y se programó en código FORTRAN, además en la simulación se tomaron cinco diferentes tiempos como se muestra en la figura 21 que son los siguientes: Tiempos iguales a 0.1, 20, 50, 100 y 150 segundos respectivamente.

La tabla 16 muestra los datos obtenidos por parte de la simulación de la distribución de partículas para cada tiempo, en donde se obtuvo una muestra de 30 datos por cada tiempo.

	Tiempo = 0.1 Segundos	Tiempo = 20 Segundos	Tiempo = 50 Segundos	Tiempo = 100 Segundos	Tiempo = 150 Segundos
1	0.429779798	4.20824766	4.40854168	3.8219552	3.42546988
2	0.802274346	4.25900173	4.39802885	3.81175184	3.41956782
3	1.44402266	4.34881306	4.37774372	3.79246163	3.40842271
4	2.40770388	4.46648216	4.34716082	3.76426077	3.39215875
5	3.71109843	4.59730387	4.30559349	3.72740293	3.37095284
6	5.28712559	4.72452021	4.2522645	3.68222117	3.34503436
7	6.96226645	4.83093977	4.18639469	3.62912703	3.3146832
8	8.47416592	4.90054846	4.10728788	3.56860995	3.28022623
9	9.53373241	4.91994905	4.01442623	3.50123787	3.24203348
10	9.91416264	4.8794899	3.90754604	3.42765379	3.20051646
11	9.52987576	4.77398205	3.78671026	3.34857249	3.15612221
12	8.46781349	4.60295296	3.65235591	3.26477766	3.10932899
13	6.95548391	4.37044144	3.50532603	3.17711639	3.06064224
14	5.28176737	4.08439302	3.34687567	3.08649325	3.01058888
15	3.70814013	3.75574803	3.17865872	2.99386239	2.95971084
16	2.40709472	3.39734483	3.00269318	2.90021777	2.90856099
17	1.44488156	3.02277708	2.82131124	2.80658293	2.85769558
18	0.802089989	2.64531779	2.63709331	2.71400118	2.80766964
19	0.41183579	2.27701569	2.45279551	2.62352037	2.75902939
20	0.195615754	1.92803073	2.27127123	2.53618097	2.71230769
21	0.0859691203	1.6062398	2.09539413	2.45300174	2.66801596
22	0.0349650346	1.3171066	1.92798257	2.37496614	2.6266408
23	0.0131640062	1.06379044	1.77173305	2.30300665	2.58863568
24	0.00458916277	0.847438633	1.62915933	2.23799157	2.5544188
25	0.00148190756	0.667607069	1.50254273	2.18071151	2.52436566
26	0.000443433702	0.522744715	1.39389169	2.13186741	2.49880624
27	0.000123017249	0.410690635	1.30491102	2.09205866	2.47801971
28	3.16578626E-05	0.329136312	1.23697817	2.0617733	2.46223211
29	7.56259942E-06	0.27602157	1.19112813	2.0413816	2.4516151
30	1.76907656E-06	0.249839991	1.1680423	2.03112769	2.44627976

A partir de la función que cuenta el software de Scilab la cual se denomina *leastsq*, se construyó un algoritmo de programación no muy complejo para el ajuste de curvas para cualquier tipo de problema no lineal, el cual se utilizó para la simulación creada. El algoritmo se representa de la siguiente manera:

```
//Se define la función no lineal para la simulación la cual se denomina RNA
function y = rna (t, x)
y = Es igual a cualquier función de activación ó umbral para problemas lineales y no lineales
(Mencionadas en el Capítulo 4)
endfunction

m = Es igual al número de la muestra
tm = Son los valores observados de la pareja x
ym = Son los valores observados de la pareja y
wm = Es una matriz a partir de puros números 1 dependiendo del número de la muestra (Pesos)
xφ = Son los valores iniciales que se proporcionan a la función de la red neuronal artificial para la
búsqueda de los valores óptimos, es decir se da un valor inicial para la rutina de optimización.

// Se define la función MYRNA con objetivo de que minimice los errores cuadráticos
function e = myrna (x, tm, ym, wm)
e = wm. * ( rna (tm, x) - ym)
endfunction

// En esta línea la función leastsq resuelve el problema no lineal de mínimos cuadrados,
encontrando un valor óptimo "xopt" así como un valor óptimo para la "f" (La función).
[f, xopt, gropt] = leastsq (list (myrna, tm, ym, wm), xφ)

tt = linspace (0.1, 1.1 * max (tm), 100) // Calcula los nuevos valores de x
yy = rna (tt, xopt) // Esta línea ejecuta la función con los valores óptimos encontrados
xbasc () // Este comando sirve para limpiar la pantalla de la grafica
plot2d (tm, ym, style = -2) // Este comando grafica los puntos obtenidos a partir de la simulación
plot2d (tt, yy, style = 2) // Este comando grafica el ajuste de curvas de los óptimos encontrados
legend (["Puntos Muestra"], ["Ajuste Curva"]) // Este comando sirve para introducir una leyenda
xtitle ("Un simple ajuste con cuadrados") // Este comando sirve para introducir un título
```

A partir de este algoritmo se realizaron varios estudios de las curvas de la simulación del proceso, se utilizaron diferentes funciones de activación para observar cual de ellas mostraba un mejor resultado en el ajuste de las curvas.

El primer estudio de ajuste de curvas que se realizo, fue con la función de activación “*sigmoidal*”, una función que se utiliza mucho para la aproximación de funciones no lineales, por tal motivo se utilizo como primer recurso. En la figura 26 se muestran los resultados a partir de esta función sigmoidal.

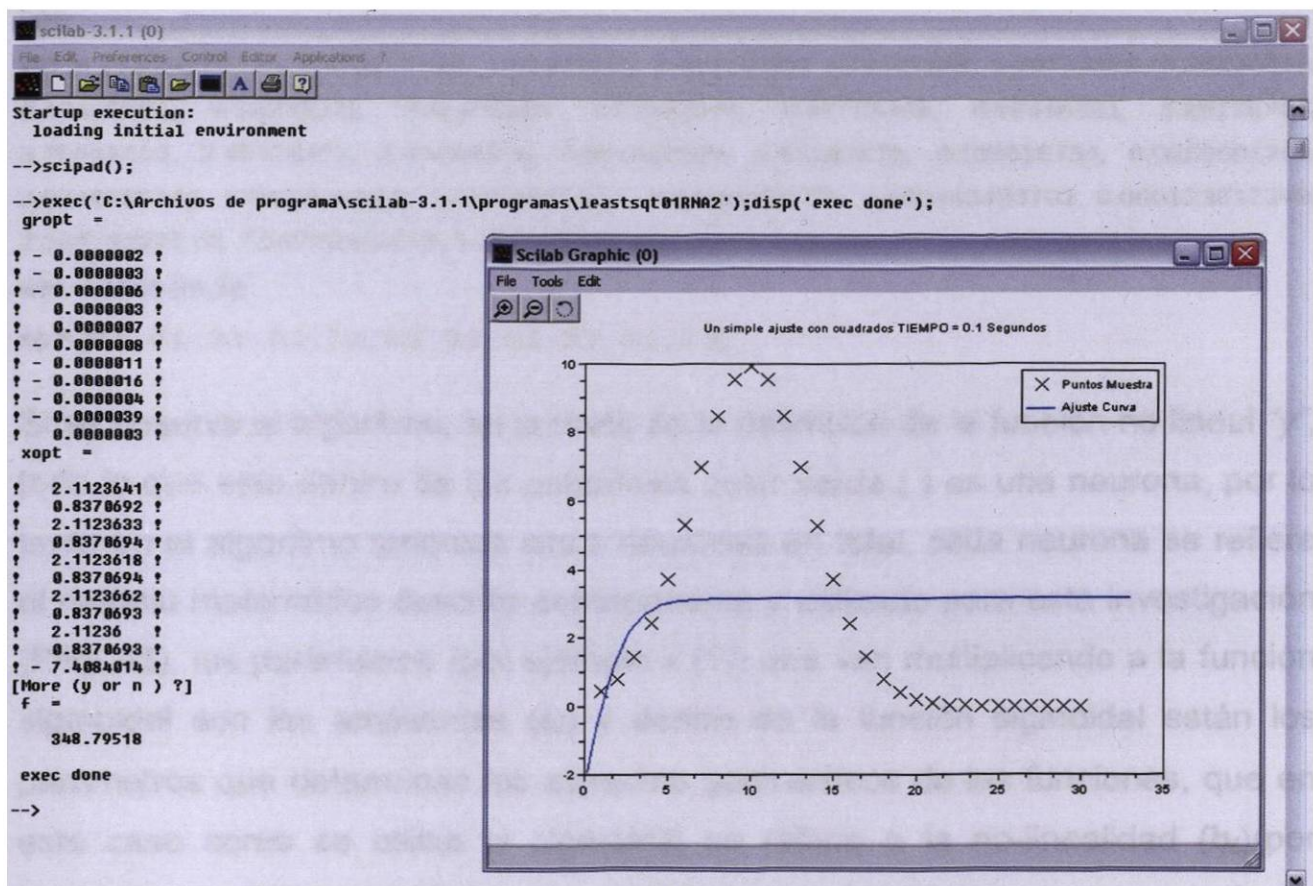


Figura 26 – Función sigmoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 0.1 segundos

Como se observa en la figura 26 la aproximación no fue la que se esperaba para el tiempo igual a 0.1 segundos, en esta corrida se utilizaron 5 neuronas a partir del modelo matemático de la red neuronal artificial mencionada en el capítulo 4 (Pág. 45), donde se presentaron 11 parámetros como valores iniciales para la rutina de optimización.

El siguiente algoritmo fue el que se utilizó para la primera corrida de la función sigmoïdal en un tiempo igual a 0.1 segundos.

```
//Se define la función no lineal para la simulación la cual se denomina RNA
function y = rna (t, x)
y = (x (1) * ((1 + exp (-x (2) * t)) ^ (-1))) + (x (3) * ((1 + exp (-x (4) * t)) ^ (-1))) + (x (5) * ((1 + exp (-x (6)
* t)) ^ (-1))) + (x (7) * ((1 + exp (-x (8) * t)) ^ (-1))) + (x (9) * ((1 + exp (-x (10) * t)) ^ (-1))) + x (11)
endfunction

m = 30;
tm = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29,
30];
ym = [0.429779798, 0.802274346, 1.44402266, 2.40770388, 3.71109843, 5.28712559, 6.96226645,
8.47416592, 9.53373241, 9.91416264, 9.52987576, 8.46781349, 6.95548391, 5.28176737,
3.70814013, 2.40709472, 1.44488156, 0.802089989, 0.41183579, 0.195615754, 0.0859691203,
0.0349650346, 0.0131640062, 0.00458916277, 0.00148190756, 0.000443433702, 0.000123017249,
3.16578626E-05, 7.56259942E-06, 1.76907656E-06];
wm = ones (m,1);
xφ = [0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1];
```

Si se observa el algoritmo, en la parte de la definición de la función no lineal “y”, todo lo que está dentro de los paréntesis color verde () es una neurona, por lo tanto en el algoritmo tenemos cinco neuronas en total, cada neurona se refiere al modelo matemático descrito anteriormente y utilizado para esta investigación (Pág. 45), los parámetros (por ejemplo $x(1)$) que van multiplicando a la función sigmoïdal son las amplitudes (a_i) y dentro de la función sigmoïdal están los parámetros que determinan los aspectos geométricos de las funciones, que en este caso como se utiliza la sigmoïdal se refiere a la no-linealidad (b_i) (por ejemplo $-x(2)$) y al final se encuentra el parámetro que controla el desplazamiento a partir del origen (c_i) ($x(11)$). Si se observa son en total 11 parámetros, los cuales la red neuronal artificial buscara sus valores óptimos a partir de valores iniciales que se escogen al azar ($x\phi$), como se ve en el algoritmo a todos se les dio un valor inicial de 0.1, con ese valor la red neuronal buscara los valores óptimos. También en el algoritmo se cuenta con un número de muestra igual a 30 (m), los valores de la pareja $x(tm)$ son del 1 al 30 y se

cuenta con los 30 datos obtenidos en la simulación que son los valores de la pajera y ($t = 0.1s$) (ym). Después de obtener los resultados anteriores se decidió cambiar los valores iniciales para identificar, si podría haber cambios en el ajuste de curva para el tiempo igual a 0.1 segundos, los nuevos valores iniciales que se introdujeron fueron los siguientes:

```
xφ = [0.1; 0.01; 0.1; 0.02; 0.1; 0.03; 0.1; 0.04; 0.1; 0.05; 4];
```

Se decidió mantener las amplitudes en valores de 0.1, y los parámetros de la sigmoideal se trato que fueran pequeños ya que se encuentran dentro de una exponencial y el parámetro de desplazamiento se decidió que fuera 4 ya que es la mitad de los datos obtenidos por parte de la simulación. La figura 27 muestra los resultados obtenidos al momento de cambiar solamente las condiciones iniciales de los 11 parámetros, no se agregaron más neuronas, y no se cambio de función de activación, solamente se cambió los valores iniciales.

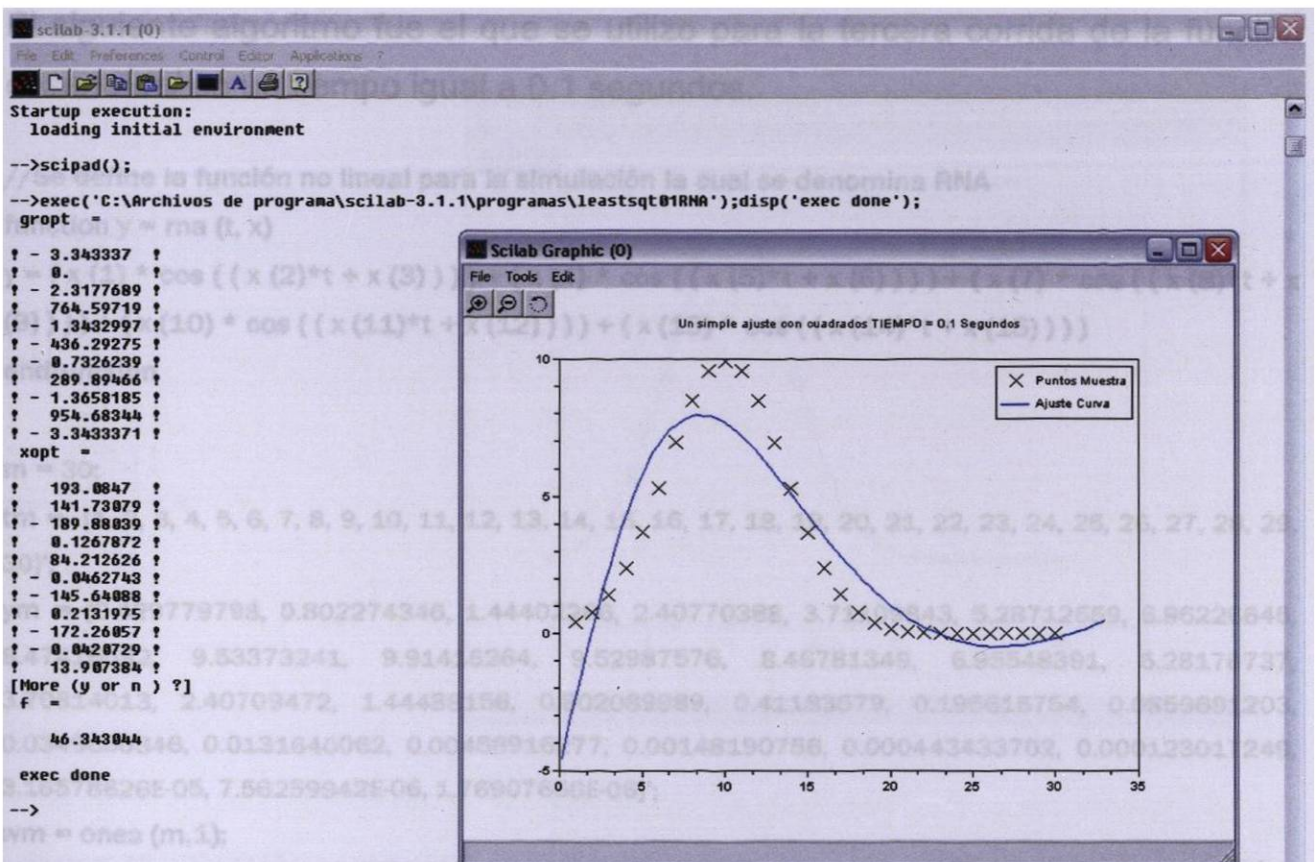


Figura 27 – Función sigmoideal con cinco neuronas con valores iniciales diferentes $T = 0.1$

Como se identifica en el algoritmo solamente se cambio la función *sigmoidal* por la función *cosenoidal*, además ahora ya no se cuenta con 11 parámetros como valores iniciales sino ya se cuenta con 15 parámetros como valores iniciales, esto es porque se utilizo el parámetro de ubicación con respecto al origen (cl) en cada neurona a diferencia del algoritmo de la función *sigmoidal* que solo se utilizo al final de todas las neuronas, por motivo la función cosenoidal cuenta con mas parámetros, además a diferencia de la función *sigmoidal* donde los parámetros que controlan los aspecto geométricos de las funciones se refieren a la no-linealidad (bl), en la función *cosenoidal* se refieren a la frecuencia. Se siguen manteniendo las 5 neuronas en la red, además de que se sigue el mismo modelo matemático de la red neuronal artificial. La figura 28 muestra los resultados obtenidos.

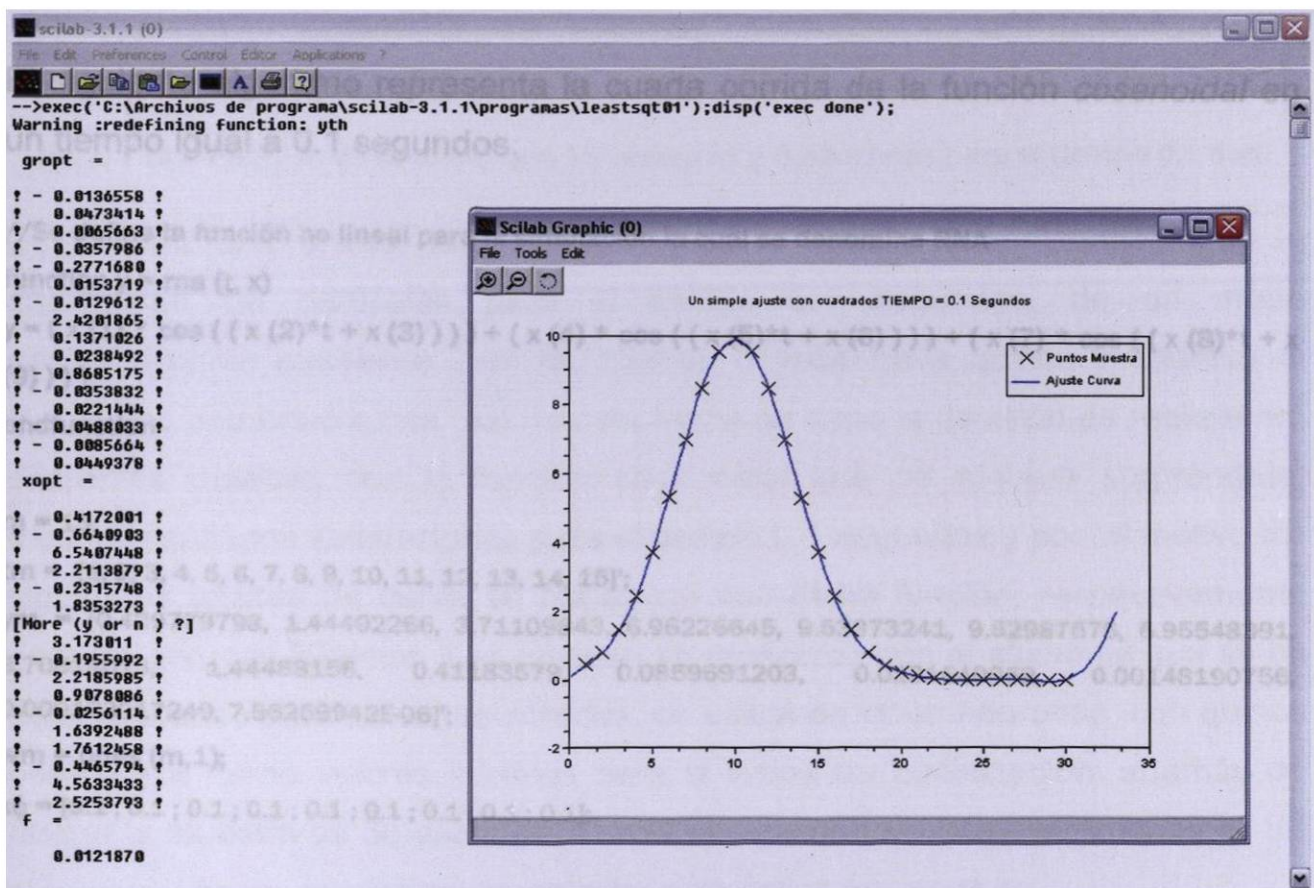


Figura 28 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 0.1 segundos

Al ver la figura 28, se nota que la función cosenoidal de una manera muy eficaz realiza el ajuste de curva, por no decir que lo realiza de una manera excelente, para el tiempo igual a 0.1 segundos de la simulación de distribución de partículas. Todos los valores iniciales para la rutina de optimización fueron de 0.1, lo cual no provoco ningún problema, a diferencia de la función *sigmoidal* donde se tuvieron que modificar para encontrar una mejor solución en el ajuste de las curvas.

Al encontrar que la función *cosenoidal* mostraba resultados muy satisfactorios se formulo la siguiente pregunta ¿Podrá la función cosenoidal realizar un ajuste de curva eficaz, si se reduce el número de muestra a 15? A partir de esta pregunta se decidió tomar datos de la muestra del tiempo 0.1 segundos, en donde se tomaran en un orden salteado y que solo fueran 15 datos.

El siguiente algoritmo representa la cuarta corrida de la función *cosenoidal* en un tiempo igual a 0.1 segundos.

```
//Se define la función no lineal para la simulación la cual se denomina RNA
function y = rna (t, x)
y = ( x (1) * cos ( ( x (2)*t + x (3) ) ) ) + ( x (4) * cos ( ( x (5)*t + x (6) ) ) ) + ( x (7) * cos ( ( x (8)*t + x
(9) ) ) )
endfunction

m = 15;
tm = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]';
ym = [0.429779798, 1.44402266, 3.71109843, 6.96226645, 9.53373241, 9.52987576, 6.95548391,
3.70814013, 1.44488156, 0.41183579, 0.0859691203, 0.0131640062, 0.00148190756,
0.000123017249, 7.56259942E-06]';
wm = ones (m,1);
xφ = [0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1 ; 0.1];
```

Se tomaron 15 muestras, y se tomaron los valores salteados, además se decidió utilizar tres neuronas para ver los efectos que tenía al reducir las neuronas. La figura 29 muestra los resultados obtenidos.

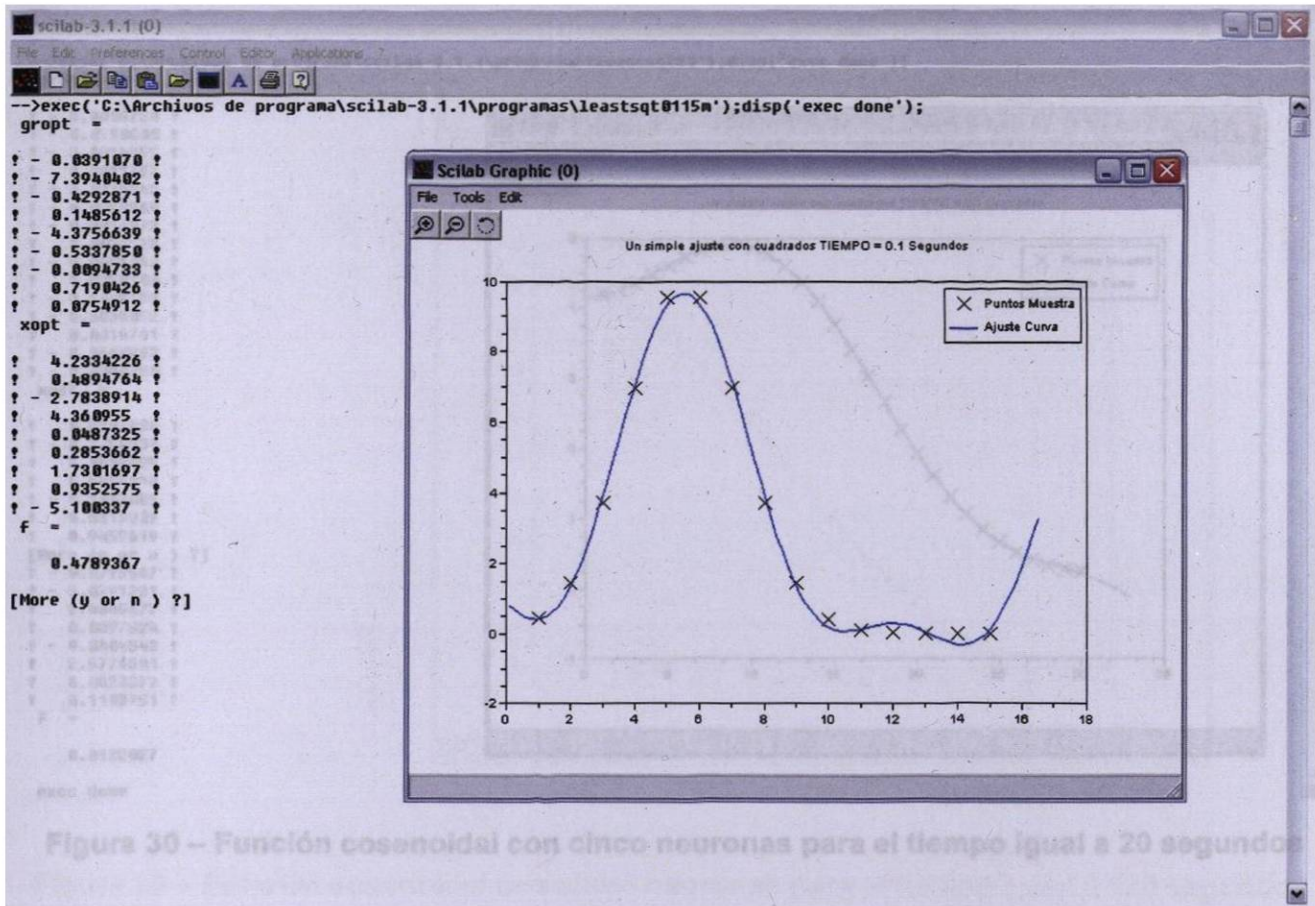


Figura 29 – Función cosenoidal con 15 muestras y 3 neuronas para el tiempo 0.1 seg.

De manera sorpréndete la función *cosenoidal* realizo la aproximación de la distribución de partículas para el tiempo 0.1 segundos, de un modo particularmente excelente, aún reduciendo la muestra a quince y además al reducir las neuronas a tres. Así de esta forma se tomo la decisión de realizar las diferentes pruebas con la función *cosenoidal* que de manera sorpréndete, mostró resultados satisfactorios para el tiempo 0.1 segundos y por tal motivo los siguientes ajustes de curva se realizaron con dicha función, respectivamente para los tiempos faltantes. Las pruebas se realizaron con el algoritmo que se ha estado usando para todas las corridas, se utilizaron cinco neuronas, con quince parámetros como valores iniciales para la rutina de optimización, además de utilizar la muestra de 30 datos para cada tiempo que se muestra en la tabla 16, esto con el fin de mantener un estándar para todas las pruebas.

En las figuras 30, 31, 32 y 33 se muestran los resultados obtenidos para los tiempos 20, 50, 100 y 150 segundos respectivamente.

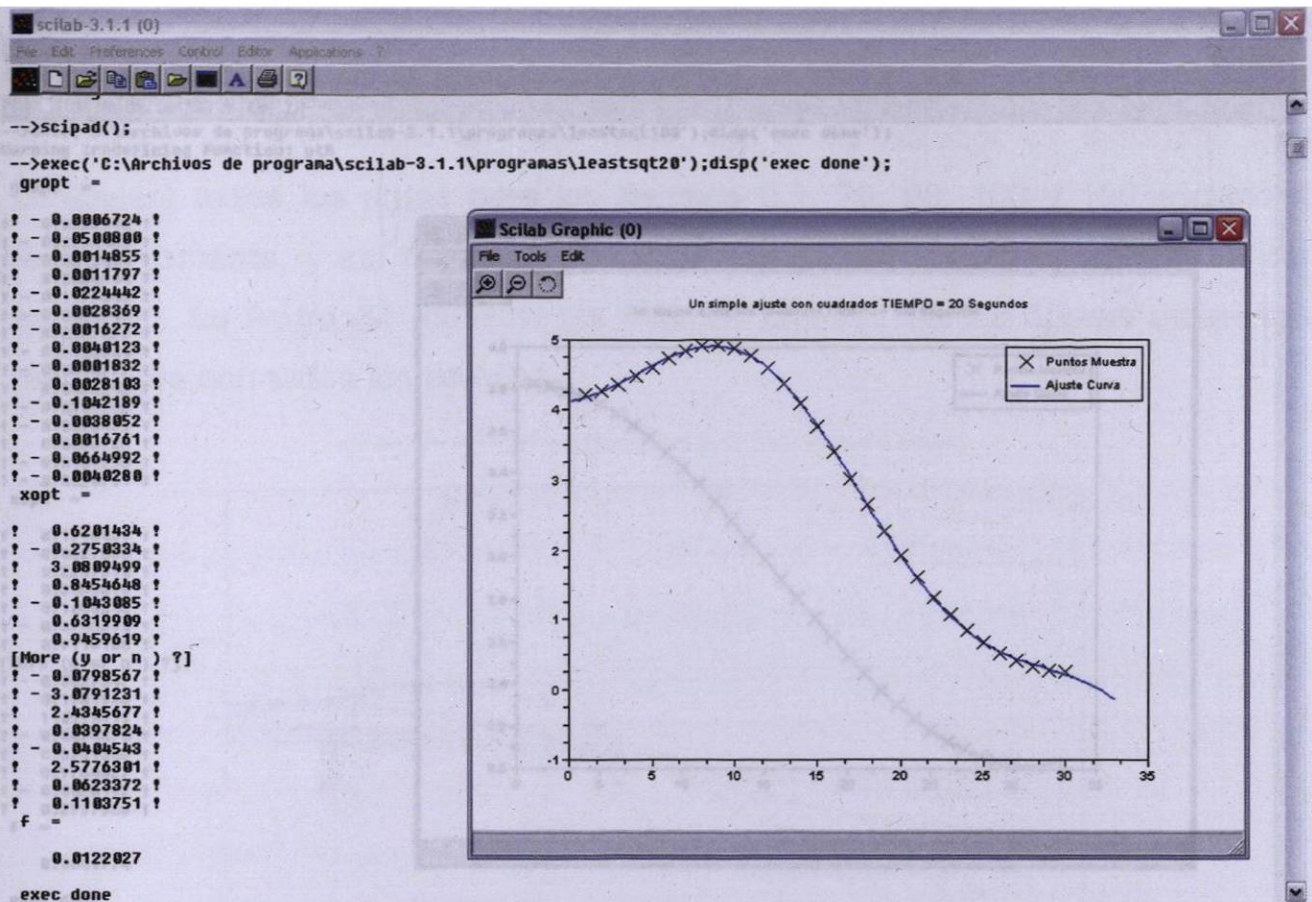


Figura 30 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 20 segundos

Figura 32 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 100 segundos

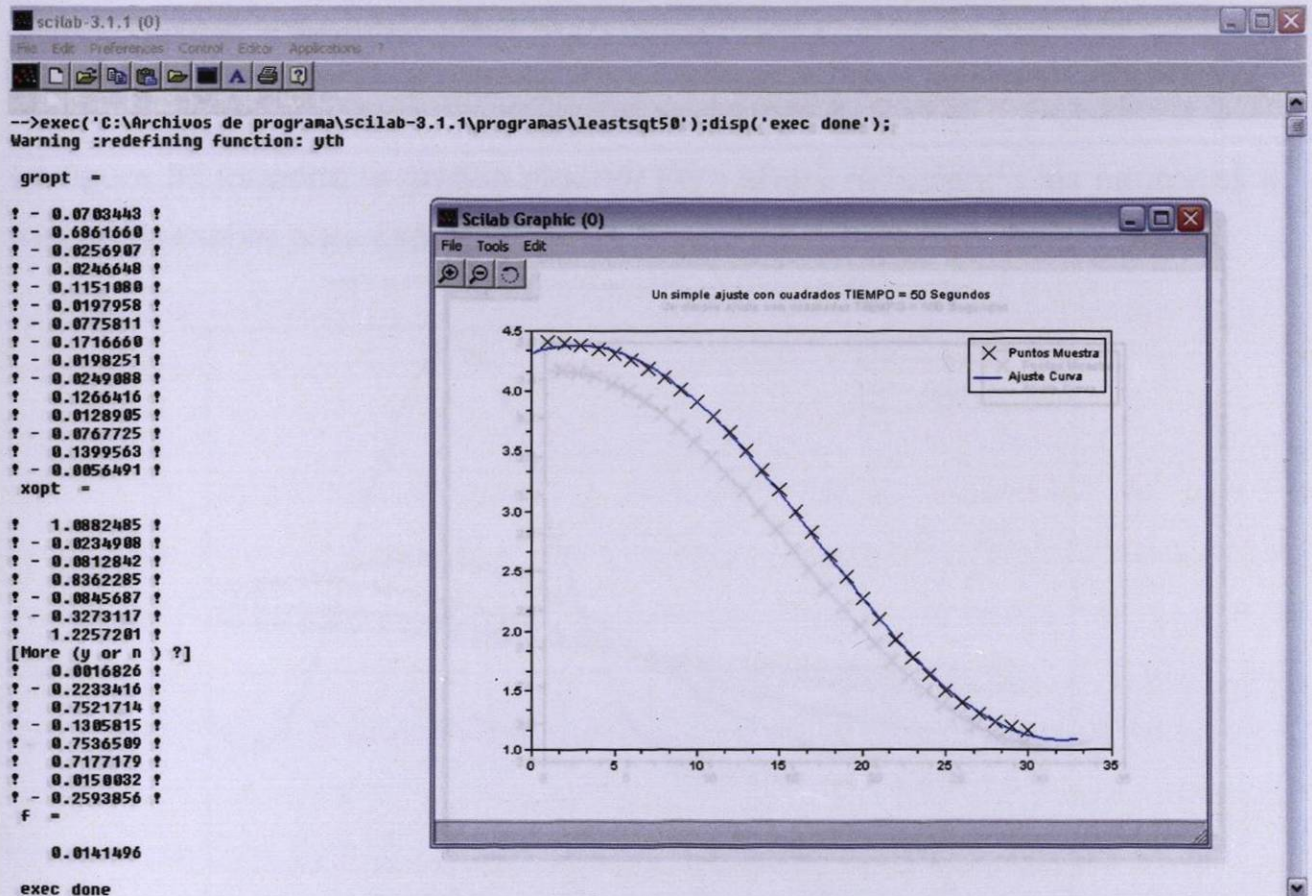


Figura 31 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 50 segundos

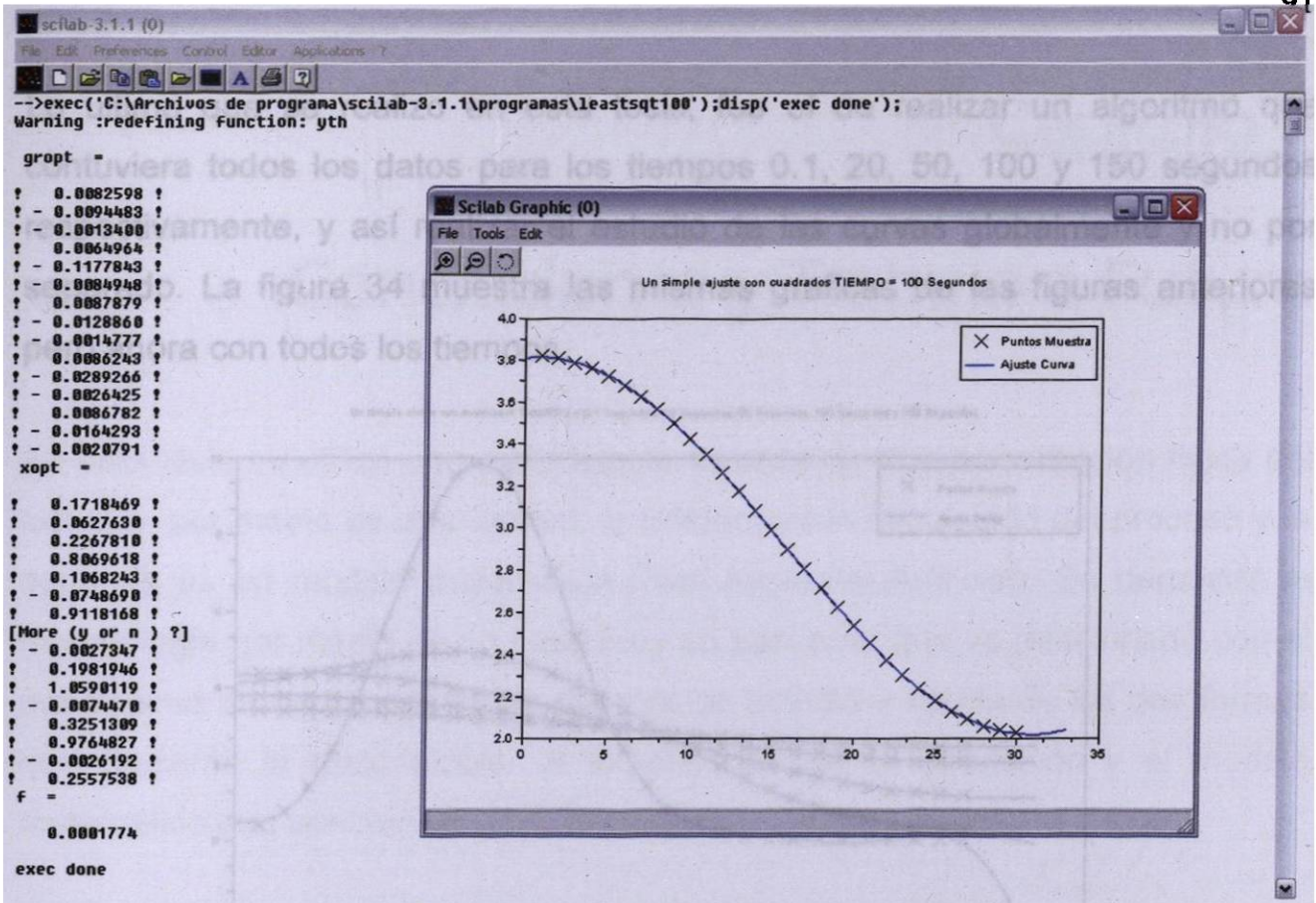


Figura 32 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 100 segundos

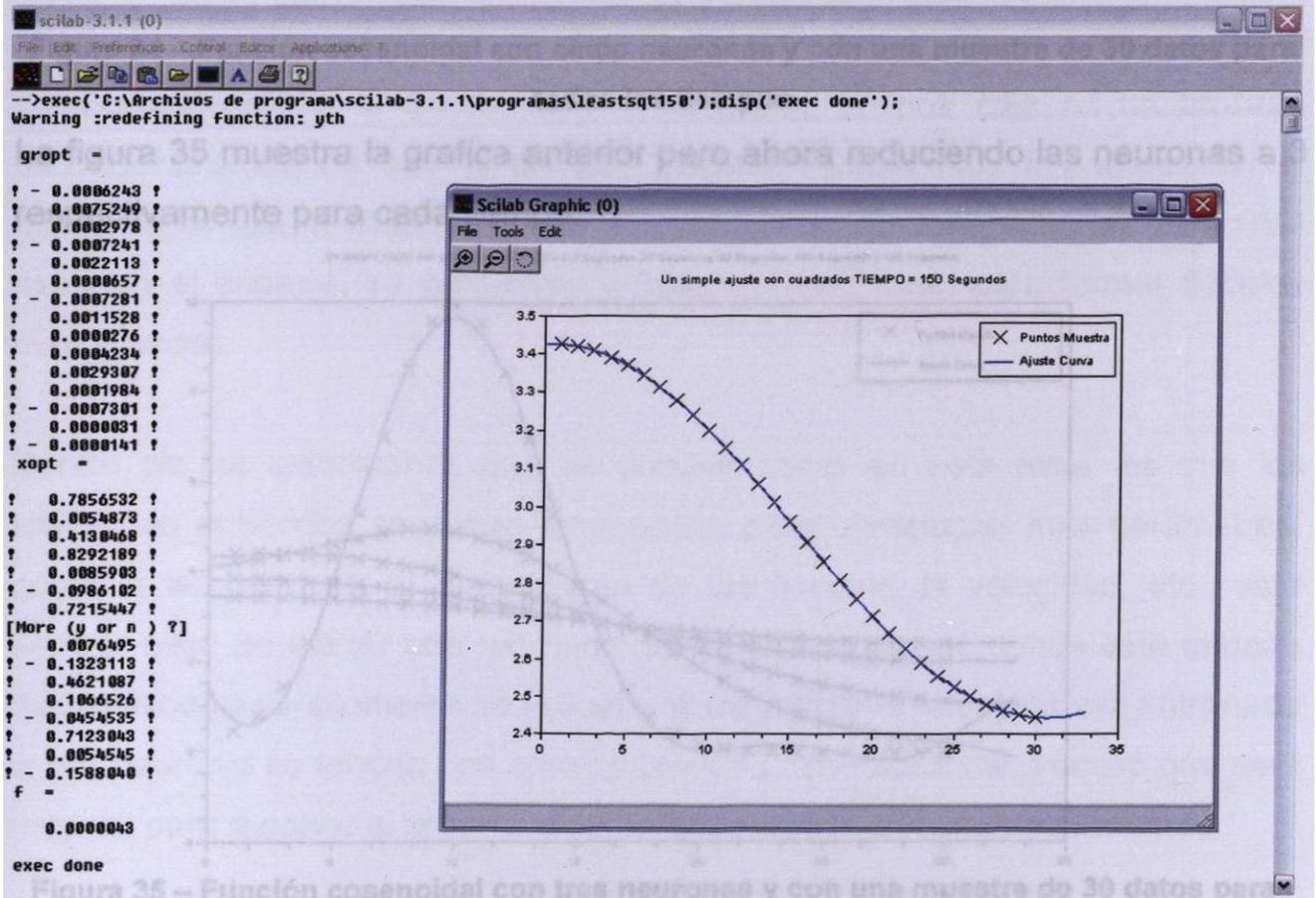


Figura 33 – Función cosenoidal con cinco neuronas para el tiempo igual a 150 segundos

Lo ultimo que se realizo en esta tesis, fue el de realizar un algoritmo que contuviera todos los datos para los tiempos 0.1, 20, 50, 100 y 150 segundos respectivamente, y así realizar el estudio de las curvas globalmente y no por separado. La figura 34 muestra las mismas graficas de las figuras anteriores pero ahora con todos los tiempos.

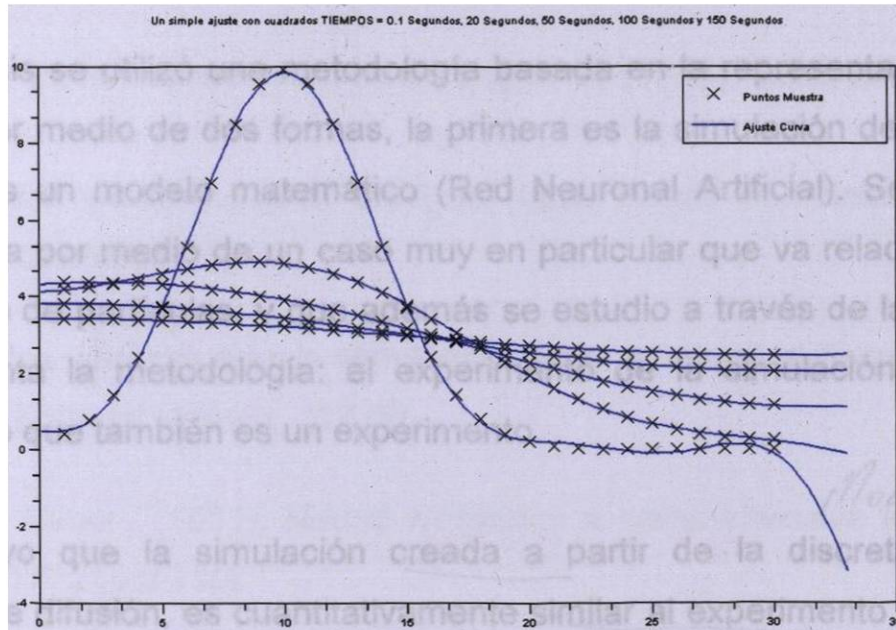


Figura 34 – Función cosenoidal con cinco neuronas y con una muestra de 30 datos para todos los tiempos

La figura 35 muestra la grafica anterior pero ahora reduciendo las neuronas a 3 respectivamente para cada tiempo.

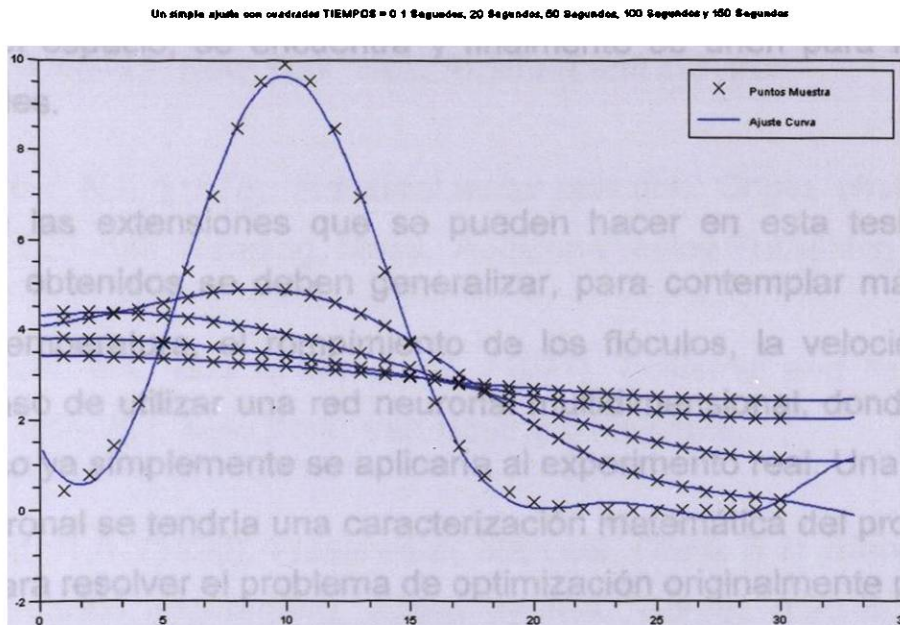


Figura 35 – Función cosenoidal con tres neuronas y con una muestra de 30 datos para todos los tiempos

Capítulo 7

Conclusiones y Trabajo a Futuro

En esta tesis se utilizó una metodología basada en la representación física del sistema, por medio de dos formas, la primera es la simulación del proceso y la segunda es un modelo matemático (Red Neuronal Artificial). Se demostró la metodología por medio de un caso muy en particular que va relacionado con el movimiento de partículas, y que además se estudio a través de las dos formas que presenta la metodología: el experimento de la simulación y el modelo matemático que también es un experimento.

Se concluyo que la simulación creada a partir de la discretización de la ecuación de difusión, es cuantitativamente similar al experimento real, debido a que el comportamiento de la distribución de tamaños de flóculos es análogo al comportamiento de la distribución de partículas en una caja en un proceso difusivo, además de que la difusión juega un papel muy importante en el experimento real, debido a que por este fenómeno de transporte, las partículas exploran el espacio, se encuentra y finalmente se unen para formar flóculos mas grandes.

Modelado directo o inv?

Dentro de las extensiones que se pueden hacer en esta tesis, es que los resultados obtenidos se deben generalizar, para contemplar más parámetros, como la temperatura, el rompimiento de los flóculos, la velocidad, etc., este seria el caso de utilizar una red neuronal multidimensional, donde este método matemático ya simplemente se aplicaría al experimento real. Una vez entrenada la red neuronal se tendría una caracterización matemática del proceso que será muy útil para resolver el problema de optimización originalmente planteado.

Referencias Bibliográficas

- [1] Cumbre Mundial Sobre el Desarrollo Sostenible, Johannesburgo, Sudáfrica, (2002).
- [2] Holman. *Experimental methods for engineers* (1966). Editorial McGraw-Hill.
- [3] Simulation modelling and analysis. Law, Averill M.; Kelton, W. David. Editorial McGraw-Hill, (1991).
- [4] Conceptos y métodos en la simulación digital de eventos discretos. Fishman, George S. Editorial Limusa, (1978).
- [5] Haykin, Simon, (1931). *Neural Networks: a comprehensive foundation* 2nd ed. Editorial Prentice Hall.
- [6] Metcalf and Eddy, Inc. (1991). *Wastewater engineering*. 3d ed. 36, 50–57, 65–70, 93–96, 100–101, and 108–112. New York: McGraw-Hill, Inc.
- [7] Qasim, S.R. (1985). *Wastewater treatment plants—Planning, design, and operation*. 9, 40–41. New York: Holt, Rinehart and Winston.
- [8] Nemerow, N.L. (1978). *Industrial water pollution: Origin, characteristics and treatment*. 529–549. Reading, Mass.: Addison-Wesley Publishing Company.
- [9] Nemerow, N.L. and A. Dasgupta. (1991). *Industrial and hazardous waste treatment*. 387–391. New York: Van Nostrand Reinhold.
- [10] Corbitt, R.A. (1990). Wastewater disposal. Chap. 6 in *Standard handbook of environmental engineering*, edited by R.A. Corbitt. 6.26–6.33. New York: McGraw-Hill, Inc.

[11] U.S. Environmental Protection Agency (EPA). (1980). *Treatability manual*. Vol. II, Industrial descriptions. Section II.14, Petroleum refining. EPA-600/8-80-042b. Washington, D.C. (July).

[12] Montgomery, J. McKee. (1985). *Water treatment principles and design*. John Wiley & Sons, Inc.

mp

[13] Chareerntanyarak, Lertchai., "Heavy metals removal by chemical coagulation and precipitation", *Water Science and Technology* **39** (10-11) 135–138, (1999).

[14] EPA, United States Environmental Protection Agency. "Wastewater Technology Fact Sheet Chemical Precipitation", EPA 832-F-00-018, (2000).

[15] 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).

[16] Foust A.S, L.A Wenzel, C.W Clump, L. Maus, L.B Andersen, "Principios de Operaciones Unitarias", Cía Editorial Continental, México, (1985).

[17] David Halliday y Robert Resnick. *Física Parte 1*. McGraw-Hill, México: 1995

[18] Las graficas de la simulación de partículas se encontraron en la siguiente dirección de Internet:

<http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/transporte/difusión/simulación.htm>

[19] La información sobre los software estadísticos Scilab y R se encontraron en la siguiente dirección de Internet:

<http://www.r-project.org/>

<http://www.scilab.org/>

