

## **Prediciendo la dosis de sulfato de aluminio en el tratamiento de aguas**

## **Predicting the aluminum sulfate dosage in water treatment**

Ana María Morales<sup>1</sup>, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0103-1277>

Gustavo Ramírez-Caballero<sup>2</sup>, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9665-4022>

Martha Barajas-Meneses<sup>3</sup>, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6954-9526>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Polímeros, Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, [mariaana91\\_@hotmail.com](mailto:mariaana91_@hotmail.com)

<sup>2</sup>Grupo de Investigación en Polímeros, Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, [gusramca@uis.edu.co](mailto:gusramca@uis.edu.co)

<sup>3</sup>Grupo de Investigación en Polímeros, Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, [marthabm@uis.edu.co](mailto:marthabm@uis.edu.co)

Autora para correspondencia: Martha Barajas-Meneses,  
marthabm@uis.edu.co

## Resumen

El presente estudio muestra las estrategias usadas para mejorar el proceso de clarificación en la planta de agua desmineralizada en la planta GENSA S. A. E. S. P., de Termopaipa, localizada en Boyacá, Colombia. Se emplearon datos experimentales obtenidos a partir de la prueba de jarras para construir un modelo basado en redes neuronales. Las variables independientes fueron pH, turbiedad, conductividad eléctrica y color del agua cruda, junto con la dosis de polímero floculante. La variable de salida del modelo fue la dosis del coagulante. Se escogió el modelo de una red neuronal de tres capas, el cual fue validado para encontrar 10 neuronas en la capa oculta. La herramienta para entrenar la red neuronal fue optimización no lineal. El cálculo de *chi* cuadrada utilizado para la evaluación del modelo demostró ser eficiente en un 90% de nivel de confianza.

**Palabras clave:** coagulación, correlación, tratamiento de agua, redes neuronales.

## Abstract

The present study shows the strategies used to improve the treatment of clarification of demineralized water in GENSA S. A. E. S. P., Planta Termopaipa, located in Boyacá, Colombia. Experimental data obtained from jar tests were used to build a model based on neuronal nets. The independent variables were pH, turbidity, electrical conductivity, and color

of the raw water along with flocculent dosage. The output variable was the Aluminum Sulfate dosage. A three-layer neural network was chosen as a prediction approach. The model was validated to find ten neurons in the hidden layer. Nonlinear optimization was the tool used to train the neural network. The chi-square value was used to test the model and showed that the model is efficient at 90% confidence level.

**Keywords:** Coagulation, correlation, cross-validation, neural net, water treatment.

Recibido: 15/06/2019

Aceptado: 10/04/2020

## Introducción

El tratamiento del agua para sistemas de enfriamiento y calderas es fundamental para cualquier planta termoeléctrica e incluye el tratamiento convencional y de desionización. El tratamiento convencional del agua se compone de las etapas de coagulación, floculación, sedimentación y filtración, que conducen a la mayor remoción de turbiedad. El proceso coagulación-floculación es un pretratamiento fisicoquímico que requiere de sustancias químicas, las cuales permiten que las partículas se

aglomeren. El tratamiento de desionización conlleva la reducción de iones disueltos y se realiza a través de materiales con capacidad de intercambio iónico (Bhatnagar & Minocha, 2006) y materiales con capacidad de adsorción (Machado-Infante, Ramírez-Caballero, & Barajas-Meneses, 2016). Con el fin de disminuir los costos en el tratamiento del agua, una de las estrategias es la optimización de las cantidades de los materiales requeridos, así que uno de los primeros pasos será la optimización de la dosis de coagulante en el tratamiento convencional.

La prueba de jarras es reconocida en la industria como una herramienta valiosa para simular y optimizar el proceso de coagulación, floculación y sedimentación, lo que permite hacer experimentos, evitando manipular la planta de tratamiento directamente. Un modelo matemático empleando los datos experimentales obtenidos a través de prueba de jarras puede implementarse para predecir la eficiencia de coagulantes en el tratamiento convencional. La utilización de un modelo evita efectuar experimentos adicionales de prueba de jarras que consumen tiempo y materiales. Uno de los modelos más comunes son las redes neuronales artificiales, los cuales son nodos que, como las neuronas del cerebro, están conectadas entre sí y reciben, procesan y transmiten señales provenientes de estímulos externos. Las redes neuronales, como el cerebro, aprenden de la experiencia para cumplir funciones cognitivas como la predicción. Las variables predichas por las redes neuronales son resultado de funciones no lineales de las variables externas. Por ejemplo, los datos de porcentaje de remoción de turbiedad obtenidos con la semilla de mango, la cual se usó como coagulante durante la prueba de jarras, se aplicaron en un modelo basado en una red neuronal de tres capas. El modelo empleó como variables de entrada turbiedad, pH, tiempo de

sedimentación, dosis de semilla de mango y tiempo de contacto. Los valores de coeficientes de determinación  $R^2$  muestran cercanía entre los valores predichos por el modelo y los valores experimentales (Olusola, Olurotimi, Adekilekun, & Adetayo, 2019). En otro caso se utilizaron modelos de redes neuronales para predecir la turbiedad removida y se usaron como variables de entrada turbiedad, alcalinidad, dureza, pH, temperatura del agua cruda, dosis de alumbre, dosis de permanganato y dosis de dióxido de cloro. Las redes neuronales incluyeron aquellas de perceptrón de multicapa donde los pesos se inicializaron por algoritmos genéticos y también por recocido simulado; del mismo modo, mostraron ser capaces de predecir la turbiedad removida con altos coeficientes de correlación (Kennedy, Gandomi, & Miller, 2015).

En general, los modelos basados en redes neuronales son ampliamente usados para cuantificar los efectos de algunos adsorbentes para el tratamiento de aguas. Por ejemplo, una red de tres capas permitió predecir el porcentaje de remoción de microcontaminantes cuando un composite basado en quitosano magnético y biocarbón se emplea como adsorbente en un sistema similar al de la prueba de jarras. Los valores de entrada al modelo fueron la concentración de microcontaminantes y el pH. Los coeficientes de determinación  $R^2$  para evaluar la eficacia de la predicción de la red neuronal indicaron una buena proximidad entre los valores predichos por el modelo y los valores experimentales correspondientes al porcentaje de remoción de microcontaminantes (Mojiri, Kazeroon, & Gholami, 2019). En otro estudio se utilizó biomasa crecida del *Bacillus thuringiensis strain W3* para adsorber As (III). La eficiencia de adsorción se modeló en una red neuronal de tres capas. La primera, capa de variables de entrada; la segunda, una capa oculta, y la

tercera, la variable de salida. Las variables de entrada consistieron en la concentración de As (III), dosis del bioadsorbente, temperatura, pH y tiempo. Los coeficientes de determinación  $R^2$  mostraron una efectiva simulación para predecir la adsorción de los iones de arsénico (Altowayti, Algaifi, Bakar, & Shahir, 2019).

Termopaipa, Gensa S.A. E.S.P. es una de las termoeléctricas más grandes en Colombia, con capacidad de producción de 328 MW. De agosto a diciembre de 2014 se llevaron a cabo una serie de experimentos de pruebas de jarras para determinar las dosis óptimas de sulfato de aluminio como coagulante para reducir la turbiedad del agua cruda al mínimo posible. Con el objetivo de poder ejecutar predicciones de la dosis óptima y así evitar experimentos adicionales con la prueba de jarras, se implementó una red unidireccional. Se utilizaron los coeficientes de correlación de Pearson para estudiar la relación entre variables. Del mismo modo, se empleó la optimización no lineal como herramienta para entrenar la red neuronal, usando *Microsoft Excel Solver*. La validación cruzada se hizo para obtener la mejor arquitectura de la red neuronal. La eficiencia de la red neuronal se demostró a través de los coeficientes de *chi* cuadrada.

## Materiales y métodos

## **Prueba de jarras y parámetros de calidad del agua**

El agua usada para la prueba de jarras se obtuvo del mismo lago que alimenta la planta termoeléctrica. El coagulante elegido fue el sulfato de aluminio y el polímero floculante la poliacrilamida aniónica. El mezclado rápido de la coagulación se llevó a cabo a 100 rpm y reducido a 40 rpm para el mezclado lento de la floculación.

El pH, la turbiedad, la conductividad eléctrica y el color se midieron en el agua que alimenta la planta en unidades de pH, unidades nefelométricas de turbiedad (UNT), conductividad eléctrica (microsiemens/cm,  $\mu\text{S/cm}$ ) y unidades de platino cobalto (UPC), respectivamente. El equipo utilizado para la prueba de jarras fue de seis jarras con agitadores mecánicos de paleta, de marca Phipps & Bird. El pH se midió con un equipo WTW ProfiLine pH 3110; la turbiedad, con un nefelómetro WTW TurB 430 IR; la conductividad eléctrica, con un conductímetro Cond 3210; finalmente, el color se midió con un espectrofotómetro HACH DR 5000. Para el entrenamiento de la red neuronal se usó un total de 27 datos experimentales; cuatro de ellos (obtenidos durante la prueba jarras) se emplearon para evaluar el modelo.

## **Asociación e independencia de las variables**

Los coeficientes de correlación son útiles para detección extrema de colinearidad entre pares de variables, lo que conduciría a problemas como cambios grandes en la respuesta del modelo, cuando ocurren pequeños ajustes en las variables predictoras, haciendo que el modelo sea inestable. Los resultados interpretativos pueden ser erróneos si la colinearidad está presente en el modelo. Si éste es el caso, medidas como sólo seleccionar una, del par de variables altamente correlacionadas, permiten evitar tal clase de problemas (Mason & Perreault, 1991).

Algunos autores recomiendan 0.9, otros 0.7, y otros aconsejan 0.5 como valores máximos de correlación para establecer cuando dos variables se correlacionan. La simplicidad de este método para inspeccionar la colinearidad en los datos experimentales para la construcción de modelos multivariados lo hace muy conveniente (Jayaweera & Azis, 2018; Michael, Trinogga, y Cebrian-Piqueras, 2019):

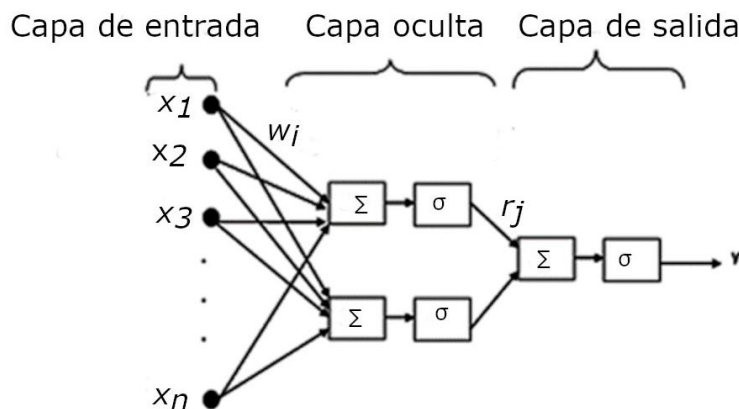
$$R_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (1)$$

## Arquitectura de la red neuronal y validación



La arquitectura de la red neuronal usada en este estudio es un perceptrón de multicapa y corresponde a la clase de red neuronal unidireccional, donde la información fluye desde la primera capa hasta la última sin permitir ciclos de retroalimentación.

Un ejemplo de red neuronal se representa en la Figura 1. La primera capa es una neurona pasiva; consiste en  $D$  neuronas debido a la dimensionalidad  $D$  de los datos experimentales. La segunda capa corresponde a la capa oculta que reciben los datos, los multiplica por el primer set de pesos, los combina de manera lineal y por último los alimenta a una función sigmoidea. La tercera capa representa la de salida, recibe la información de la segunda capa, los combina linealmente y alimenta una segunda función sigmoidea. Para este estudio se utilizó validación cruzada, a fin de calcular un número óptimo de neuronas en la capa oculta.



**Figura 1.** Ejemplo de una red neuronal que corresponde a un perceptrón multilíneal de tres capas, con  $D$  neuronas en la capa de entrada, dos neuronas en la capa oculta y una neurona en la capa de salida.

La variable de salida para la red neuronal se representa así:

$$y = \sigma_2 \left[ \sum_{j=1}^H \left( r_j \sigma_1 \left( \sum_{i=1}^D w_i x_i \right) \right) \right] \quad (2)$$

Donde  $H$  es el número de neuronas en la capa oculta;  $D$ , la dimensionalidad de los datos experimentales que alimentan el modelo;  $w_i$ , el primer set de pesos sinápticos;  $r_j$ , el segundo set de pesos sinápticos y el valor predicho;  $\sigma_1$ , la primera función sigmoidea, y  $\sigma_2$  es la segunda.

El entrenamiento de la red neuronal consiste en encontrar los pesos sinápticos a través de todo el espacio que minimiza el error entre los valores predichos por el modelo y los valores de la variable de salida de los datos experimentales. La búsqueda de tales pesos sinápticos óptimos empieza con valores iniciales y se van ajustando, agregando un valor de  $\Delta w_i$ :

$$w_{1+i} = w_i + \Delta w_i \quad (3)$$

$$\Delta w_i = \gamma \mu_k \quad (4)$$

Donde  $\gamma$  es la tasa de aprendizaje y  $\mu_k$  es la dirección de la búsqueda.

Para este estudio se utilizó el algoritmo de gradiente reducido generalizado, dado por *Solver Excel*, que consiste en la proyección del

gradiente original en la región descrita por los pesos sinápticos. La dirección en que el gradiente reducido se desvanece permite encontrar la dirección de búsqueda del punto óptimo:

$$\mu_k = -g_R \quad (5)$$

Donde  $g_R$  es el gradiente reducido generalizado (Rao, 2009).

Para validar el modelo y lograr un uso eficiente del número de datos experimentales, principalmente cuando éste no es tan alto, se utiliza la validación cruzada. En este tipo de validación, los datos para la evaluación del modelo se toman de los mismos datos experimentales de entrenamiento. Así, se pueden desarrollar varios modelos donde los datos se turnan entre los datos de entrenamiento y de evaluación para cada modelo; entonces, en lugar de desarrollar un solo modelo existen varios de un solo tipo, en los que también es posible evaluar su eficacia de predicción a través del error cuadrado predictivo (ECP).

En este trabajo, uno de los 27 datos experimentales para el entrenamiento de la red neuronal se excluyó, para emplearse en la evaluación del modelo, que resulta del entrenamiento con los otros 26 datos. Cada vez que se excluya un dato experimental diferente de los 27 que hay, es posible crear un modelo distinto; por lo tanto, se pueden desarrollar 27 modelos, cada uno con un dato de evaluación diferente. A cada modelo se le puede evaluar el ECP usando el dato excluido para la evaluación del modelo:

$$ECP = (Y_{(-i)} - y_{(-i)})^2 \quad (6)$$

*ECP* consiste en la diferencia al cuadrado del dato experimental  $Y(-i)$ , del dato excluido para la evaluación con respecto al  $y(-i)$ , que es predicho por el modelo. En el caso estudiado, los tipos de modelos corresponden a redes neuronales con diferentes arquitecturas. Por tanto, se construyen 27 modelos para cada red neuronal de diferente arquitectura con 2, 4, 6, 8, 10 y 12 neuronas en la capa oculta, para un total de 162 modelos. Para cada arquitectura o tipo de modelo es posible identificar el error de validación cruzada (EVC) de la siguiente forma:

$$EVC = \frac{\sum_i^{27} ECP}{k} \quad (7)$$

La arquitectura que tenga un menor valor de EVC será considerada la más óptima (Anders & Korn, 1999; Hadzima-Nyarko, Nyarko, & Ademovic, 2019).

## Evaluación del modelo

Para la evaluación del modelo, el valor de *chi* cuadrada se calculó de esta manera:

$$\chi^2 = \sum_i^N \frac{(y_i - Y_i)^2}{y_i} \quad (8)$$

Donde  $Y_i$  es cada valor observado experimentalmente;  $y_i$  corresponde a cada valor predicho, y  $N$  es el número de total de datos experimentales usados en la evaluación del modelo. La comparación de este valor con un valor crítico dado por la distribución de *chi* cuadrada a cierto nivel de confianza, por lo general 95 o 90% para  $N-1$  grados de libertad, rechaza o acepta la hipótesis nula de que  $y_i$  y  $Y_i$  no presentan diferencias significativas. Si el valor de *chi* cuadrada es menor que el valor crítico, entonces es posible aceptar la hipótesis nula, y concluir que no hay diferencias significativas entre los valores predichos y los experimentales. Por el contrario, si el valor *chi* cuadrada es mayor que el valor crítico, se puede rechazar la hipótesis nula y concluir que  $Y_i$  y  $y_i$  presentan diferencias significativas y por lo tanto el modelo no sería confiable. También se calcularon los residuales entre los datos experimentales y los datos predichos para los datos de entrenamiento.

## Resultados

### Prueba de jarras y parámetros de calidad del agua

La coagulación utilizando sulfato de aluminio ayudó a mejorar la calidad del agua. Datos de los parámetros calidad del agua antes y después de algunas de algunas de la prueba de jarras realizadas se muestran en la Tabla 1. Se observa cómo después de agregar el sulfato de aluminio y lograr la sedimentación, el pH, color y turbiedad del agua tratada disminuye, mientras que el tratamiento conlleva a un aumento de la conductividad eléctrica.

**Tabla 1.** Datos de la calidad del agua antes y después del tratamiento de coagulación durante la prueba de jarras.

pH		Conductividad eléctrica ( $\mu\text{S}/\text{cm}$ )		Color (UPC)		Turbiedad (UNT)	
Agua cruda	Jarras	Agua cruda	Jarras	Agua cruda	Jarras	Agua cruda	Jarras
6.8	5.3	137.6	148.6	117	11	8.8	0.8
6.8	5.7	127	138	271	12	33	0.6
6.8	5.2	130.8	142	289	10	30.3	1
6.9	5.0	133	146	227	12	23	0.67
6.7	5.3	135	149	244	10	27	0.8
7.0	5.8	118	127	238	8	20	0.45
7.0	6.0	119	129	266	8	22	0.38
7.0	5.9	120	135	235	10	23	0.41
7.1	6.0	120	133	260	10	25	0.44

## Asociación entre variables

Los coeficientes de correlación de Pearson obtenidos entre pares de variables se exponen a través de la matriz de correlación en la Tabla 2. La asociación entre la dosis del coagulante con variables como pH, conductividad eléctrica, color, turbiedad del agua cruda y dosis del polímero se indica por los valores de correlación de 0.757, 0.615, 0.712, 0.743 y 0.404, respectivamente. Este tipo de coeficientes de correlación no son muy altos, así que se puede considerar que no hay colinealidad entre variables y, por lo tanto, la dimensión de los datos experimentales se conserva. En conclusión, la dosis de coagulante se determina por pH, turbiedad, conductividad eléctrica y color del agua cruda, así como por la dosis de polímero floculante. Estas observaciones apuntan a que se puede encontrar un modelo que prediga la dosis del coagulante a partir de pH, conductividad eléctrica, turbiedad, color del agua cruda y dosis del floculante, y que todas estas variables son independientes con respecto a la dosis de coagulante. Dichos valores de correlación garantizan que la red neuronal converge en un conjunto de pesos sinápticos óptimos.

**Tabla 2.** Matriz de correlación para los datos experimentales.

Parámetro	pH	Conductividad eléctrica ( $\mu\text{S}/\text{cm}$ )	Color (UPC)	Turbiedad (UNT)	Dosis del polímero (ppm)	Dosis del coagulante (ppm)
pH	0.979	0.639	0.697	0.754	0.373	0.757
Conductividad eléctrica	0.639	0.971	0.833	0.804	0.781	0.615
Color	0.697	0.833	0.972	0.928	0.660	0.712
Turbiedad	0.754	0.804	0.928	0.973	0.580	0.743
Dosis del polímero	0.373	0.781	0.044	0.580	0.984	0.404
Dosis del coagulante	0.757	0.615	0.712	0.743	0.404	0.979

## Validación del modelo

Se utilizó un típico perceptrón de tres capas. La primera capa correspondió a la entrada, donde se introdujeron los 27 datos experimentales del entrenamiento en forma de vectores. Todos los valores fueron escalados entre 0 y 1, sustrayendo el valor más bajo, y dividiéndolos por la diferencia entre máximo y mínimo. El valor máximo tuvo un valor de 1; el valor medio, 0.5; el valor mínimo, 0, como se observa en la Tabla 3.



**Tabla 3.** Valores mínimos, máximos y medio de los rangos para las variables independientes y la variable dependiente.

	pH	Turbiedad (UNT)	Color (UPC)	Conductividad eléctrica ( $\mu\text{S}/\text{cm}$ )	Dosis de floculante (ppm)	Dosis de coagulante (ppm)
Valor mínimo	6.7	7	117	118.5	0	35
Valor máximo	7.3	33.1	289	202	0.7	59
Valor medio	7	20.05	203	160.25	0.35	47

Puesto que cada dato experimental escalado en forma de vector tiene cinco dimensiones correspondientes a pH, conductividad eléctrica, turbiedad, color y dosis del floculante, la capa de entrada tiene cinco neuronas. Cada una de las cinco neuronas de la capa de entrada se conectan a cada una de las neuronas de la única capa oculta a través de cinco conexiones, y cada conexión tiene un peso sináptico. Las cinco componentes de los puntos experimentales escalados se multiplican por los cinco pesos sinápticos; luego se suman para transferir la información a una función sigmoidea.

La información procesada en cada una de las neuronas en la capa oculta se propaga a la capa de salida. Para enviar estos datos a la única neurona en la capa de salida, los datos que vienen de cada una de las neuronas en la capa oculta se multiplican por otro grupo de pesos sinápticos que caracterizan las conexiones desde cada una de las neuronas en la capa oculta con la única neurona en la capa de salida. Esta información se procesa en la única neurona, en la capa de salida, a través de una segunda función sigmoidea, donde se obtiene el valor predicho por el modelo.

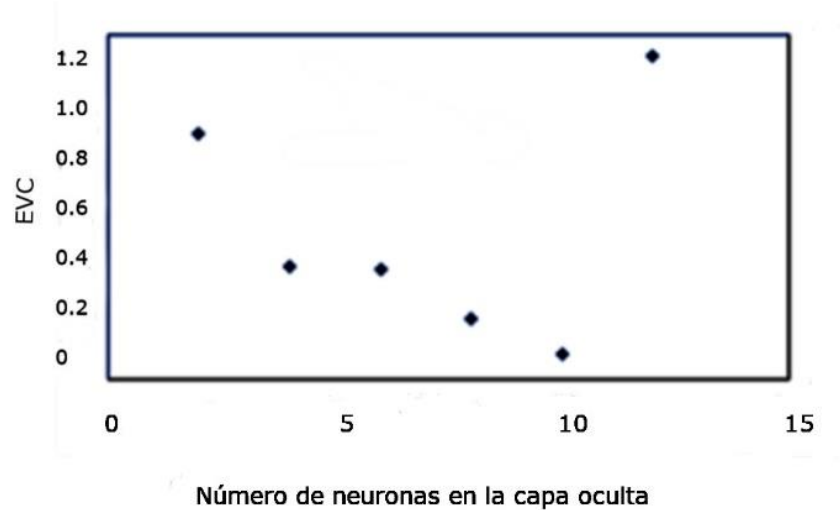
Para encontrar el número óptimo de neuronas en la capa oculta, se

analizaron redes neuronales con 2, 4, 6, 8, 10 y 12 neuronas en la capa oculta a través de validación cruzada. El programa *Solver* de *Microsoft* se usó para entrenar la red neuronal de tres capas. EVC se calculó para los modelos que tenían el mismo número de neuronas en la capa oculta, como se observa en la Tabla 4. El tipo de redes neuronales que tuvo el EVC más bajo fue aquel con 10 neuronas en la capa oculta. La Figura 2 muestra el efecto del número de neuronas en la capa oculta sobre el EVC. Se utilizó un perceptrón de tres capas, con 5, 10 y 1 neurona para la capa de entrada, oculta y de salida, respectivamente.

**Tabla 4.** ECP de los 162 modelos construidos y EVC para cada tipo de modelo con número definido de neuronas en la capa oculta.

Modelos	Número de neuronas en la capa oculta					
	2	4	6	8	10	12
1	0.9083	0.4072	0.3921	0.2208	0.0921	1.1578
2	0.9162	0.3884	0.3809	0.2208	0.0070	1.1040
3	0.0079	0.2956	0.2718	0.1470	0.0916	0.8743
4	0.9101	0.4074	0.3921	0.2209	0.0921	1.1579
5	0.9149	0.4075	0.3807	0.2210	0.0921	1.1578
6	0.8748	0.4074	0.3920	0.2208	0.0921	1.1577
7	0.8964	0.4075	0.3922	0.1933	0.0921	1.1579
8	0.8993	0.4075	0.3923	0.2210	0.0886	1.1579
9	0.8512	0.4013	0.3923	0.2202	0.0892	1.1579

<b>10</b>	0.9084	0.4075	0.3923	0.2206	0.0920	1.1579
<b>11</b>	0.9018	0.4073	0.3922	0.2209	0.0921	1.1579
<b>12</b>	0.9101	0.4075	0.3922	0.2209	0.0921	1.1579
<b>13</b>	0.9101	0.4075	0.3922	0.2200	0.0921	1.1579
<b>14</b>	0.9101	0.4075	0.3923	0.2197	0.0921	1.1579
<b>15</b>	0.8340	0.4075	0.3923	0.2207	0.0921	1.1579
<b>16</b>	0.8352	0.3542	0.3363	0.2206	0.0921	1.1553
<b>17</b>	0.9101	0.3965	0.3776	0.2206	0.0921	1.1553
<b>18</b>	0.9161	0.4054	0.3923	0.2203	0.0921	1.1329
<b>19</b>	0.9105	0.4069	0.3922	0.2210	0.0921	1.1329
<b>20</b>	0.9153	0.4060	0.3918	0.2089	0.0921	1.1329
<b>21</b>	0.9101	0.3896	0.3738	0.1833	0.0921	1.1329
<b>22</b>	0.9104	0.4069	0.3923	0.2184	0.0921	1.1329
<b>23</b>	0.8340	0.4065	0.3893	0.2194	0,0921	1.1329
<b>24</b>	0.9162	0.4031	0.3917	0.2210	0.0921	1.1552
<b>25</b>	0.9101	0.3903	0.3811	0.2210	0.0921	1.1553
<b>26</b>	0.8018	0.3972	0.3819	0.2210	0.0919	0.9398
<b>27</b>	0.9101	0.3981	0.3866	0.2206	0.0921	1.1553
<b>EVC</b>	0.8564	0.3934	0.3831	0.2140	0.0888	1.1255



**Figura 2.** Efecto del número de neuronas en la capa oculta sobre el EVC.

## Evaluación del modelo

Los datos experimentales empleados para entrenar el modelo fueron 27 y 4 datos obtenidos, que se usaron para la evaluación del modelo. La Tabla 5 expone los valores predichos para los datos de entrenamiento y los utilizados para la evaluación del modelo. Los residuales para los datos de entrenamiento están entre -1.47 y 1.03, y son residuales bajos, a causa de que los datos de entrenamiento se utilizaron para encontrar los parámetros del modelo.

**Tabla 5.** Datos de entrenamiento y predicción para el modelo desarrollado.

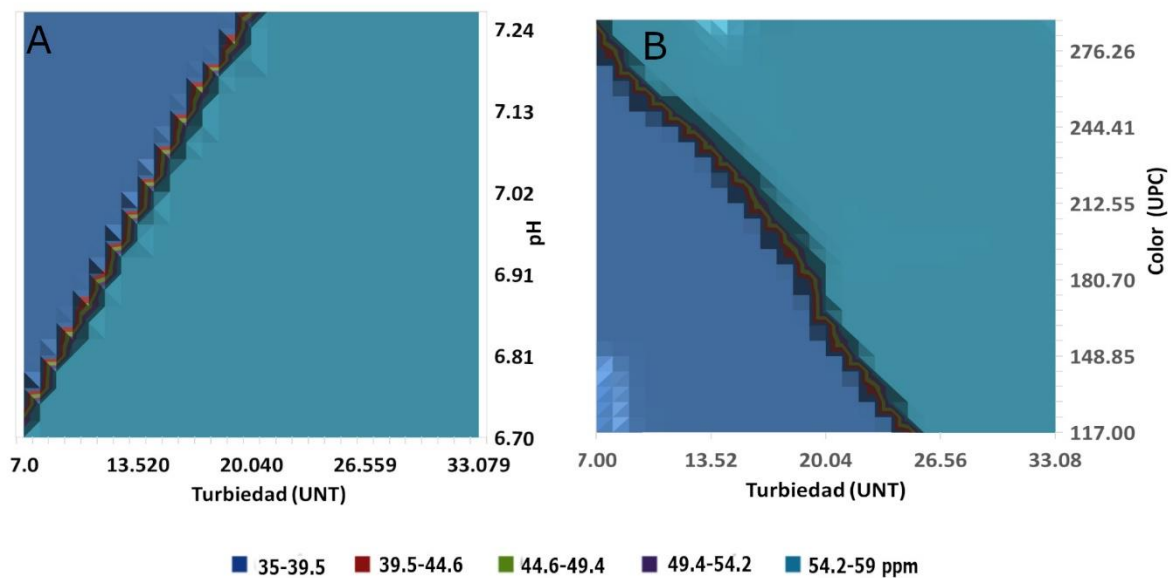
<b>Datos de entrenamiento</b>								
	<b>pH</b>	<b>Cond. eléctrica (µs/cm)</b>	<b>Color (UPC)</b>	<b>Turbiedad (UNNT)</b>	<b>Dosis del floculante (ppm)</b>	<b>Dosis coagulante experimental (ppm)</b>	<b>Dosis según modelo</b>	<b>Residual Y-y</b>
1	6.8	170.3	132	13	0	54	55.00	-1.00
2	6.9	162.7	252	25.7	0	45	45.24	-0.24
3	7.1	128.9	282	27.3	0	44	44.18	-0.18
4	6.9	136.9	217	20.5	0	48	49.08	-1.08
5	6.8	137.6	117	8.87	0	55	55.00	0.00
6	6.8	130.8	289	30.3	0	40	39.76	0.24
7	6.8	127.1	271	33.1	0	37	38.47	-1.47
8	6.7	135	244	27	0	41	40.13	0.87
9	6.9	133	227	23	0	46	44.97	1.03
10	7	118.5	238	20.3	0.6	45	44.98	0.02
11	7	119.5	266	22.7	0.6	45	44.85	0.15
12	7	120.5	235	23.3	0.6	45	44.92	0.08
13	7.1	120	260	25.3	0.7	50	50.18	-0.18
14	7	174	130	7.16	0	45	45.12	-0.12
15	7.1	174.8	177	13.8	0	45	45.21	-0.21
16	7	202	204	15.1	0	50	49.83	0.17
17	7.1	189	135	9.95	0	50	50.51	-0.51

18	7.1	194	157	11.8	0	50	50.37	-0.37
19	7.1	193.1	117	9.4	0	50	50.00	0.00
20	7.1	193.5	144	9.76	0	50	49.66	0.34
21	7.1	191.4	219	18.5	0	50	49.54	0.46
22	7	174.5	156	18.6	0	45	44.84	0.16
23	7.2	182.1	168	12.8	0	45	44.74	0.26
24	7.3	180.5	146	9.41	0	35	35.06	-0.06
25	7.1	175.5	162	11.4	0	45	45.26	-0.26
26	7.3	176.6	183	12.3	0	35	35.08	-0.08
27	7	169.8	163	12.4	0	35	35.01	0.01
<b>Datos de evaluación</b>								
28	6.8	118.6	226	19.88	0	48	50.40	2.40
29	6.8	120.2	213	16.6	0,05	49	51.79	2.79
30	6.8	121.7	257	22.2	0	45	48.78	3.78
32	6.8	125.8	218	21	0	46	48.08	2.08
$\chi^2 = \sum_i^N \frac{(y_i - Y_i)^2}{y_i}$								0.6474

Para evaluar el modelo es importante usar un conjunto de datos que no pertenezcan a los datos experimentales de entrenamiento, así que se emplea un conjunto de cuatro. El valor *chi* cuadrada es de 0.6474 para los datos experimentales de evaluación; es menor que el valor *chi* cuadrado crítico de 6.21 a 90% de confianza, con tres grados de libertad. Por lo tanto, la hipótesis nula se acepta, lo que conlleva a concluir que los valores predichos por el modelo para datos experimentales de evaluación son consistentes con los observados.

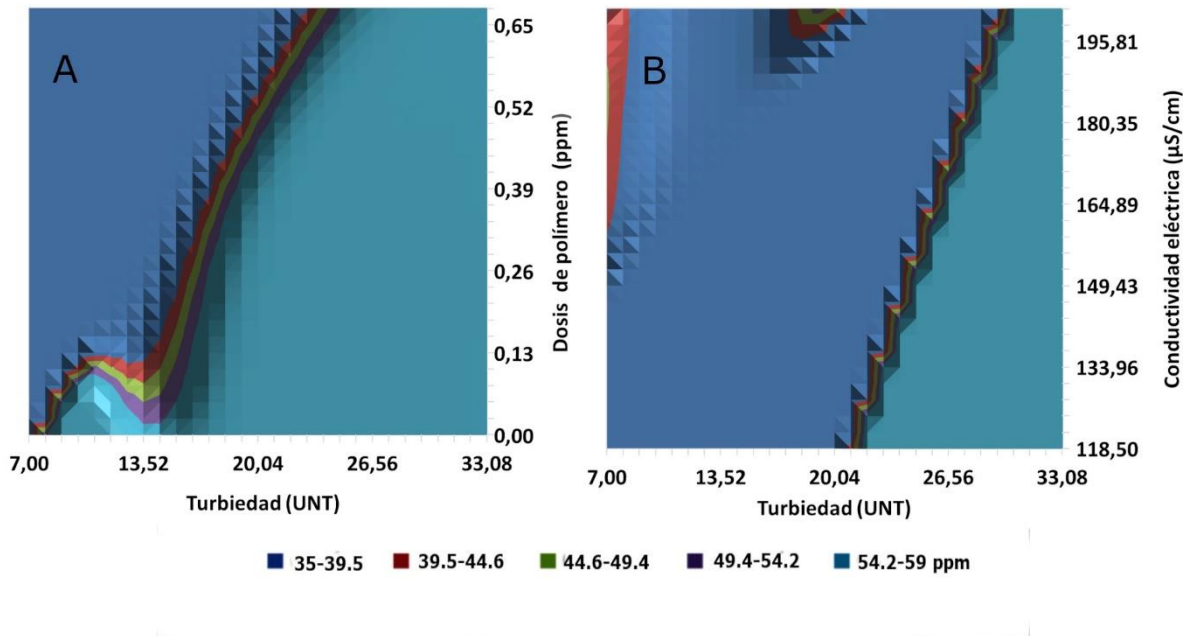
## Discusión

Las relaciones entre turbiedad y dosis de coagulante con respecto al pH, color, conductividad eléctrica y dosis de polímero, según el modelo matemático desarrollado, se exponen en los gráficos de contorno en la Figura 3 y Figura 4.



**Figura 3.** Efecto de la turbiedad, pH y color en la dosis de coagulante. En el gráfico A se observa el efecto de la turbiedad y el pH, mientras que en el gráfico B se observa el efecto de la turbiedad y el color. En la barra inferior

se indican los rangos de los valores de dosis de coagulante predichos por el modelo, indicados por diferente color.



**Figura 4.** Efecto de la turbiedad, conductividad eléctrica y dosis de polímero en la dosis de coagulante. En el gráfico A advierte el efecto de la turbiedad y la conductividad eléctrica, mientras que el gráfico B indica el efecto de la turbiedad y la dosis de polímero. En la barra inferior se presentan rangos de los valores de dosis de coagulante predichos por los modelo, indicados por diferente color.

La Figura 3(A) expone un gráfico de contorno, donde el eje X corresponde a turbiedad; el eje Y, a pH; y el eje Z, a la dosis de coagulante. Se asumieron para el color y la conductividad eléctrica valores mínimos y



constantes de 117 UPC y 118.5  $\mu\text{S}/\text{cm}$ , respectivamente. Además, la dosis del polímero se mantuvo en cero.

La Figura 3(A) muestra dos zonas: una caracterizada por valores de turbiedad mayores de 20 UNT, donde la dosis de coagulante predicha por el modelo está entre 54 y 59 ppm, y es independiente del pH. En la región de valores de turbiedad por debajo de 20 UNT, el pH empieza a tener efecto sobre la dosis de coagulante. Se observa por debajo de 20 UNT que, a medida que se disminuyen los valores de pH y se incrementa la turbiedad, la dosis de coagulante continúa manteniéndose en valores entre 54 y 59 ppm, mientras que un aumento en pH y una disminución en turbiedad logran disminuir la dosis de coagulante a valores entre 35 y 39 ppm.

La Figura 3(B) muestra en el eje X la turbiedad; en el eje Y, al color; y en el eje Z, la dosis de coagulante. Se asumieron valores de pH y conductividad eléctrica de 7.3 y 118.5  $\mu\text{S}/\text{cm}$ , respectivamente. El valor de la dosis de polímero se mantuvo en cero.

De nuevo se identifica una zona de mayor turbiedad por encima de 26 UNT, caracterizada por valores de dosis de coagulante entre 54 y 59 ppm, independientes del color. Cuando la turbiedad está por debajo de 26 UNT, la dosis de coagulante es afectada por el color, pues cuando el valor del color empieza a aumentar y la turbiedad disminuye, la dosis del coagulante continúa manteniéndose entre 54 y 59 ppm. A la vez, en la misma región por debajo de 25 UNT, la disminución de color y aumento de turbiedad conduce a que la dosis de coagulante baje a valores entre 35 y 39 ppm de dosis de coagulante.

Si se compara el efecto del pH y del color, se puede observar que un aumento de pH y una merma de color favorecen la reducción de la dosis de

coagulante si la turbiedad está por debajo de 26 UNT; mientras que por encima de 26 UNT, la dosis de coagulante es independiente del color y del pH.

La Figura 4(A) muestra en el eje X la turbiedad; en el eje Y, la conductividad eléctrica; y en el eje Z, la dosis de coagulante. Se asumió para el pH y el color valores de 7.3 y 117 UPC, respectivamente. La dosis del polímero se mantuvo en cero.

Se observó una zona para valores de turbiedad por debajo de 20 UNT, donde la dosis de coagulante predicha por el modelo está en valores entre 35 y 39 ppm, y es independiente de la conductividad eléctrica.

La conductividad eléctrica empieza a tener efecto sobre la dosis de coagulante en valores de turbiedad entre 20 y 30 UNT. En este rango de turbiedades, donde hay mayor conductividad, se mantiene la dosis de coagulante entre 35 y 39 ppm, y una menor conductividad podría aumentar la dosis de coagulante hasta valores entre 54 y 59 ppm. Después de 30 UNT, la dosis de coagulante se hace independiente de la conductividad, para continuar teniendo valores entre 54 y 59 ppm.

El efecto de la dosis de polímero evidencia que a mayores valores de 25 UNT de turbiedad, la dosis de coagulante predicha entre 54 y 59 ppm es independiente de la dosis de polímero; mientras que a valores de turbiedad menores de 25 UNT, un aumento en la dosis de polímero ayuda a reducir la dosis de coagulante a valores entre 35 y 39 ppm. Este crecimiento en la dosis de polímero es posible sólo hasta 1 ppm por motivos de seguridad, debido a la toxicidad de la poliacrilamida aniónica. Igualmente se observa que no usar polímero sólo contribuiría al incremento de la dosis de coagulante.

## Conclusiones

Un modelo de red neuronal basado en un perceptrón de tres capas permitió predecir la dosis de sulfato de aluminio usado como coagulante, a partir de variables independientes, como pH, conductividad, color, turbiedad del agua cruda y dosis de polímero. La evaluación del modelo con base en una prueba de *chi* cuadrada arrojó resultados en los que el modelo es eficiente en un 90% de nivel de confianza. Los valores mayores de pH, conductividad eléctrica, floculante de hasta 1 ppm y menores valores de color permiten mantener la dosis de coagulante entre 35 y 39 ppm cuando la turbiedad no es relativamente alta. Después de un valor límite de turbiedad de alrededor de 26 ppm, ni el pH, conductividad, color y uso de floculantes favorecen una reducción en la dosis de coagulante y eleva hasta valores entre 54 y 59 ppm.

## Agradecimientos

Los autores desean agradecer a GENSA S. A. E. S. P., Planta Termopaipa, Colombia, por el todo el apoyo durante los experimentos de prueba de jarras.

## Referencias

- Altowayti, W. A., Algaifi, H. A., Bakar, S. A., & Shahir, S. (2019). The adsorptive removal of As (III) using biomass of arsenic resistant *Bacillus thuringiensis* strain WS3: Characteristics and modelling studies. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 172, 176-185.
- Anders, U., & Korn, O. (1999). Model selection in neural networks. *Neural Networks*, 12, 309-323.
- Bhatnagar, A., & Minocha, A. K. (2006). Conventional and non-conventional adsorbents for removal of pollutants from water - A review. *Indian Journal of Chemical Technology*, 13(3), 203-217. Recuperado de <https://doi.org/10.3354/Ab00330>
- Hadzima-Nyarko, M., Nyarko, E. K., & Ademovic, N. (2019). Modelling the influence of waste rubber on compressive strength of concrete by artificial neural networks. *Materials*, 12(4), 561.
- Jayaweera, C., & Azis, N. (2018). Reliability of principal component analysis and Pearson correlation coefficient, for application in artificial neural network model development, for water treatment plants. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, Kuala Lumpur, Malasya.
- Kennedy, M., Gandomi, A., & Miller, C. (2015). Coagulation modeling using artificial neural networks to predict both turbidity and DOM-PARAFAC component removal. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 3(4), 2829-2838.
- Machado-Infante, J., Ramírez-Caballero, G., & Barajas-Meneses, M. J. (2016). Study of the adsorption capacity of Fe(II) dissolved in water by using a mineral rich in Manganese Dioxide (MnO<sub>2</sub>) from Colombia. *DYNA*, 83(196), 223-228. Recuperado de

<https://doi.org/10.15446/dyna.v83n196.53566>

Mason, C., & Perreault, W. (1991). Collinearity, power, and interpretation of multiple regression analysis. *Journal of Marketing Research*, 3, 268-280.

Michael, K., Trinogga, J., & Cebrian-Piqueras, M. (2019). Trait correlation network analysis identifies biomass allocation traits and stem specific length as hub traits in herbaceous perennial plants. *Journal of Ecology*. Recuperado de <https://doi.org/10.1111/1365-2745.13066>

Mojiri, A., Kazeroon, R. A., & Gholami, A. (2019). Cross-linked magnetic chitosan/activated biochar for removal of emerging micropollutants from water: Optimization by the artificial neural network. *Water*, 11(3), 551.

Olusola, O. E., Olurotimi, A. D., Adekilekun, J. L., & Adetayo, A. J. (2019). Kinetics and neuro-fuzzy soft computing modelling of river turbid water coag-flocculation using mango (*Mangifera indica*) kernel coagulant. *Chemical Engineering Communications*, 206(2), 254-267.

Rao, S. S. (2009). *Engineering optimization: Theory and practice* (5<sup>th</sup> ed.). Hoboken, USA: Wiley.