



UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO

DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

**Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del
Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos
Activados operando en Tabasco**

Tesis

**Para obtener el título de Licenciatura en:
Ingeniería Ambiental**

Presenta:

César Ignacio Brito de Dios

Directores:

**Dr. José Roberto Hernández Barajas
M. I. A. Jesús Manuel Carrera Velueta**

Villahermosa, Tabasco

Febrero 2013

Modelo híbrido determinístico-
estocástico aplicado a la predicción del
desempeño de un sedimentador
secundario de una planta tipo lodos
activados operando en Tabasco.

Por César Ignacio Brito de Dios

CANTIDAD DE PALABRAS 32268

HORA DE ENTREGA

07-JUL-2025 01:22P.M.

NÚMERO DE
IDENTIFICACIÓN DEL
TRABAJO

117107447

Modelo híbrido determinístico-estocástico aplicado a la predicción del desempeño de un sedimentador secundario de una planta tipo lodos activados operando en Tabasco.

INFORME DE ORIGINALIDAD

14%

ÍNDICE DE SIMILITUD

FUENTES PRIMARIAS

1	cybertesis.uni.edu.pe Internet	441 palabras — 2%
2	cdigital.dgb.uanl.mx Internet	331 palabras — 1%
3	documents.mx Internet	246 palabras — 1%
4	m.monografias.com Internet	193 palabras — 1%
5	vsip.info Internet	177 palabras — 1%
6	tesis.ipn.mx Internet	164 palabras — 1%
7	www.slideshare.net Internet	153 palabras — 1%
8	rd.udb.edu.sv:8080 Internet	134 palabras — < 1%
9	pt.scribd.com Internet	133 palabras — < 1%
10	vdocuments.pub Internet	112 palabras — < 1%

11	es.scribd.com Internet	99 palabras — < 1%
12	www.tdx.cat Internet	99 palabras — < 1%
13	livrosdeamor.com.br Internet	98 palabras — < 1%
14	dspace.esPOCH.edu.ec Internet	97 palabras — < 1%
15	sisbib.unmsm.edu.pe Internet	97 palabras — < 1%
16	biblioteca.itson.mx Internet	94 palabras — < 1%
17	docplayer.es Internet	79 palabras — < 1%
18	hdl.handle.net Internet	74 palabras — < 1%
19	iuaca.ua.es Internet	63 palabras — < 1%
20	core.ac.uk Internet	60 palabras — < 1%
21	tratamientosdeaguasresidales.blogspot.com Internet	57 palabras — < 1%
22	repository.uamerica.edu.co Internet	56 palabras — < 1%
23	www.buenastareas.com Internet	54 palabras — < 1%
24	edoc.pub Internet	

		51 palabras — < 1 %
25	repositorio.uned.ac.cr Internet	50 palabras — < 1 %
26	es.slideshare.net Internet	48 palabras — < 1 %
27	pavcowavin.com.co Internet	42 palabras — < 1 %
28	pirhua.udep.edu.pe Internet	40 palabras — < 1 %
29	www.monografias.com Internet	40 palabras — < 1 %
30	repositorio.uaaan.mx:8080 Internet	38 palabras — < 1 %
31	repositorio.uaaan.mx Internet	37 palabras — < 1 %
32	revistas.unc.edu.ar Internet	35 palabras — < 1 %
33	virtual.usalesiana.edu.bo Internet	29 palabras — < 1 %
34	www.euroinnova.pe Internet	26 palabras — < 1 %
35	bibliotecavirtual.dgb.umich.mx:8083 Internet	25 palabras — < 1 %
36	Erwin Werner, Christian Antileo, Nelson Aros. "Model of active sludge process coupled to a layer based settler for simulation of a dissolved oxygen control scheme", 2017 CHILEAN Conference on Electrical, Electronics	24 palabras — < 1 %

Engineering, Information and Communication Technologies
(CHILECON), 2017

Crossref

37	1library.co Internet	22 palabras — < 1 %
38	iki.rssi.ru Internet	22 palabras — < 1 %
39	ru.dgb.unam.mx Internet	22 palabras — < 1 %
40	repositorio.flacsoandes.edu.ec Internet	21 palabras — < 1 %
41	www.tesis.uchile.cl Internet	21 palabras — < 1 %
42	"Valoración de inmuebles urbanos comparativa modelo regresión multivariable versus redes neuronales artificiales para la ciudad de Morelia Michoacán, México.", 'Universitat Politècnica de Valencia' Internet	20 palabras — < 1 %
43	canaltrece.com.co Internet	20 palabras — < 1 %
44	colinfahey.com Internet	20 palabras — < 1 %
45	rcci.net Internet	20 palabras — < 1 %
46	www.conagua.gob.mx Internet	20 palabras — < 1 %
47	eprints.ucm.es Internet	19 palabras — < 1 %
48	dspace.umh.es Internet	

18 palabras — < 1%

49 www.scribd.com
Internet

18 palabras — < 1%

50 americanae.aecid.es
Internet

17 palabras — < 1%

51 dspace.unach.edu.ec
Internet

17 palabras — < 1%

52 roderic.uv.es
Internet

17 palabras — < 1%

53 www.ctrl.cinvestav.mx
Internet

17 palabras — < 1%

54 www.risti.xyz
Internet

17 palabras — < 1%

55 www.ncbi.nlm.nih.gov
Internet

16 palabras — < 1%

EXCLUIR CITAS

ACTIVADO

EXCLUIR FUENTES

DESACTIVADO

EXCLUIR BIBLIOGRAFÍA

ACTIVADO

EXCLUIR COINCIDENCIAS

< 16 PALABRAS

UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO

"ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE"



DIVISION ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

Villahermosa, Tab., a 05 de Febrero de 2013

ASUNTO: Autorización de Modalidad de Titulación

C. LIC. MARIBEL VALENCIA THOMPSON
JEFE DEL DEPTO. DE CERTIFICACIÓN Y TITULACION
DIRECCIÓN DE SERVICIOS ESCOLARES
P R E S E N T E

Por este conducto y de acuerdo a la solicitud correspondiente por parte del interesado, informo a usted, que en base al reglamento de titulación vigente en esta Universidad, ésta Dirección a mi cargo, autoriza al **C. CESAR IGNACIO BRITO DE DIOS** egresado de la Lic. en **ING. AMBIENTAL** de la División Académica de **CIENCIAS BIOLÓGICAS** la opción de titularse bajo la modalidad de Tesis denominado: **"MODELO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO APLICADO A LA PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE UN SEDIMENTOR SECUNDARIO DE UNA PLANTA TIPO LODOS ACTIVADOS OPERANDO EN TABASCO"**.

Sin otro particular, aprovecho la ocasión para saludarle afectuosamente.

A T E N T A M E N T E

M. EN C. ROSA MARTHA PADRON LOPEZ
DIRECTORA DE LA DIVISIÓN ACADÉMICA
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

C.c.p.- Expediente Alumno de la División Académica

C.c.p.- Interesado

U. J. A. T.
DIVISION ACADÉMICAS
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS



DIRECCIÓN

UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO

"ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE"



DIVISION ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

FEBRERO 05 2013

**C. CESAR IGNACIO BRITO DE DIOS
PAS. DE LA LIC. EN ING. AMBIENTAL
PRESENTE**

En virtud de haber cumplido con lo establecido en los Arts. 80 al 85 del Cap. III del Reglamento de titulación de esta Universidad, tengo a bien comunicarle que se le autoriza la impresión de su Trabajo Recepcional, en la Modalidad de Tesis denominado: **"MODELO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO APLICADO A LA PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE UN SEDIMENTOR SECUNDARIO DE UNA PLANTA TIPO LODOS ACTIVADOS OPERANDO EN TABASCO"**, asesorado por el MIA. Jesús Manuel Carrera Velueta y Dr. José Roberto Hernández Barajas sobre el cual sustentará su examen profesional, cuyo jurado está integrado por MISA. Elizabeth Magaña Villegas, MIPA. Sergio Ramos Herrera, M. en C. Carlos Alberto Torres Balcazar, MIPA. Rosalinda Frías de la O y Dr. Gaspar López Ocaña.

**A T E N T A M E N T E
ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE**

**M. EN C. ROSA MARTHA PADRON LOPEZ
DIRECTORA**

U. J. A. T.
DIVISION ACADÉMICAS
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS



DIRECCIÓN

C.c.p.- Expediente del Alumno.
Archivo.

CARTA AUTORIZACIÓN

El que suscribe, autoriza por medio del presente escrito a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco para que utilice tanto física como digitalmente el Trabajo Recepcional en la modalidad de Tesis denominado: **“MODELO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO APLICADO A LA PREDICCIÓN DEL DESEMPEÑO DE UN SEDIMENTOR SECUNDARIO DE UNA PLANTA TIPO LODOS ACTIVADOS OPERANDO EN TABASCO”**, de la cual soy autor y titular de los Derechos de Autor.

La finalidad del uso por parte de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco el Trabajo Recepcional antes mencionada, será única y exclusivamente para difusión, educación y sin fines de lucro; autorización que se hace de manera enunciativa más no limitativa para subirla a la Red Abierta de Bibliotecas Digitales (RABID) y a cualquier otra red académica con las que la Universidad tenga relación institucional.

Por lo antes manifestado, libero a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco de cualquier reclamación legal que pudiera ejercer respecto al uso y manipulación de la tesis mencionada y para los fines estipulados en éste documento.

Se firma la presente autorización en la ciudad de Villahermosa, Tabasco el Día Cinco de Febrero de 2013.

AUTORIZO



CESAR IGNACIO BRITO DE DIOS



ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	1
2. MARCO TEÓRICO	3
2.1. LAS AGUAS RESIDUALES	3
2.2. TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES	3
2.2.1. Pretratamiento	4
2.2.2. Tratamiento primario	4
2.2.3. Tratamiento secundario	4
2.2.4. Tratamiento terciario o avanzado	5
2.3. SISTEMAS DE TRATAMIENTO CONVENCIONALES	6
2.3.1. Tratamiento por lodos activados	6
2.3.2. Tratamiento por filtros biológicos (filtros rociadores)	7
2.3.3. Tratamiento por lagunas de estabilización	8
2.3.4. Tanque Imhoff	8
2.4. SEDIMENTACIÓN POR GRAVEDAD	9
2.4.1. Sedimentación discreta (Tipo I)	9
2.4.2. Sedimentación floculenta (Tipo II)	9
2.4.3. Sedimentación retardada (Tipo III)	10
2.4.4. Sedimentación por compresión (Tipo IV)	10
2.5. TIPOS DE SEDIMENTADORES	10
2.5.1. Sedimentadores rectangulares	11
2.5.2. Sedimentadores circulares	12
2.6. TEORÍA DEL <i>FLUX</i> DE SÓLIDOS DE KYNCH	13
2.7. MODELO MATEMÁTICO	14
2.8. MODELO DE LA VELOCIDAD DE SEDIMENTACIÓN DISCRETA	15
2.9. DESCRIPCIÓN DEL MODELO DE SEDIMENTACIÓN DE TAKÁCS	17
2.10. REDES NEURONALES ARTIFICIALES	21
2.10.1. Definición de red neuronal artificial	22
2.10.2. Ventajas de las redes neuronales y tipos de redes más importantes	23



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

2.10.3. Elementos de una red neuronal artificial	25
3. ANTECEDENTES	33
3.1. MODELOS DETERMINÍSTICOS	33
3.2. MODELOS ESTOCÁSTICOS	35
3.3. MODELOS HÍBRIDOS	37
4. JUSTIFICACIÓN, OBJETIVOS E HIPÓTESIS	39
4.1. JUSTIFICACIÓN	39
4.2. OBJETIVOS	40
4.2.1. Objetivo general	40
4.2.2. Objetivos particulares	40
4.3. HIPÓTESIS	41
5. MÉTODOS	43
5.1. RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN EXPERIMENTAL	43
5.1.1. Descripción del proceso de la PTAR de Pomoca	43
5.1.2. El muestreo	45
5.1.3. Pre-tratamiento de la información experimental	46
5.2. SOLUCIÓN DEL MODELO DE TAKÁCS	47
5.2.1. Solución numérica del modelo determinístico de Takács	47
5.2.2. Estimación numérica de los parámetros del modelo de la velocidad de sedimentación	48
5.2.3. Ajuste del modelo para diferentes geometrías del sedimentador	54
5.2.4. Preparación de los datos de entrada al modelo determinístico	54
5.3. DESARROLLO DEL MODELO DE RED NEURONAL ARTIFICIAL	55
5.3.1. Descripción de la RNA Backpropagation y el algoritmo de aprendizaje	55
5.3.2. Conformación de bases de datos	61
5.3.3. Elección de topologías de la RNA	66
5.4. DESARROLLO DEL MODELO HÍBRIDO	67
5.4.1. Paso 1 - Ejecución de Modelo Determinístico	68
5.4.2. Paso 2 Entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido	68
5.4.3. Paso 3 - Salida del Modelo Híbrido	68
6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	71
6.1 RESULTADOS DEL MODELO DETERMINÍSTICO	71
6.1.1. Dinámica del modelo de sedimentación de Takács	71



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

6.1.2.	Optimización de los parámetros del modelo de Takács	72
6.1.2.1.	Resultados usando información de literatura especializada	73
6.1.2.2.	Resultados usando información experimental	73
6.1.2.3.	Sensibilidad paramétrica del Modelo de Takács	74
6.2.	RESULTADOS DEL MODELO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES	76
6.2.1.	Experimentos	76
6.3.	RESULTADOS DEL MODELO HÍBRIDO Y COMPARACIÓN FINAL	79
6.3.1.	Experimentos con 40 patrones para entrenamiento	79
6.3.2.	Experimentos con 36 patrones para entrenamiento	80
6.3.3.	Comparación de resultados de los modelos	82
7.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	87
7.1	CONCLUSIONES	87
7.2	RECOMENDACIONES	88
8.	REFERENCIAS	89
	ANEXO A. CORRELACIONES EMPÍRICAS	93
	ANEXO B. INTERFAZ GRÁFICA	101



ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Esquema general del proceso de Lodos Activados.	7
Figura 2. Distribución del diámetro de partícula en lodos activados (Jeppsson, 1996).	7
Figura 3. Esquema clásico de los cuatro tipos de sedimentación en un sedimentador (Jeppsson, 1996)	10
Figura 4. Sedimentador de tipo rectangular.	12
Figura 5. Sedimentador de tipo circular.	13
Figura 6. Representación general del modelo uni-dimensional de sedimentación por capas por Vitasovic con capas equidistantes y área de sección transversal constante (Takács <i>et al.</i> , 1991).	20
Figura 7. Modelo de red neuronal artificial multicapa (<i>Perceptrón Multicapa</i>).	23
Figura 8. Funciones de transferencia típicas que determinan distintos tipos de neuronas.	28
Figura 9. Nodo, unidad o neurona artificial.	29
Figura 10. a) Vista aérea del fraccionamiento Pomoca, el círculo amarillo indica la ubicación de la PTAR, b) Fotografía de la vista principal de la planta. Las imágenes fueron extraídas de la herramienta <i>Google Earth</i> ®	43
Figura 11. Diagrama que muestra el funcionamiento de la PTAR en estudio.	44
Figura 12. Definición de puntos de muestreo para la determinación de SST a diferentes profundidades en un Sedimentador Secundario de dos Etapas de la PTAR Pomoca.	46
Figura 13. Suposición de una curva compuesta de las dos etapas del sedimentador.	55
Figura 14. Diagrama de flujo del modelo de red neuronal multicapa con aprendizaje <i>Backpropagation</i> (Baeza, 2010).	60
Figura 15. Muestra visual del Esquema 1 de entrenamiento realizado en este trabajo, usando como ejemplo 12 patrones de uno de los conjuntos de datos.	64
Figura 16. Muestra visual del Esquema 2 de entrenamiento realizado en este trabajo, usando como ejemplo 12 patrones de uno de los conjuntos de datos.	66
Figura 17. Esquema que representa el funcionamiento del modelo híbrido propuesto en este trabajo.	67
Figura 18. Comportamiento dinámico de los SST en un sedimentador secundario para un tiempo de retención hidráulica, concentraciones iniciales para las 10 capas del modelo de Takács y otros parámetros, de acuerdo al Caso 1 de los datos de Pflanz.	72
Figura 19. Comportamiento dinámico de los SST en un sedimentador secundario para un tiempo de retención hidráulica de 4.5 h y usando los datos obtenidos de la información experimental (curva compuesta baja tasa).	74
Figura 20. Análisis de sensibilidad paramétrica del modelo de Takács. a) v'_0 , b) v_0 y c) r_h .	75
Figura 21. Comparación gráfica de los resultados de validación.	83
Figura 22. Comparación gráfica de los resultados de entrenamiento	85



ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Características de los tipos de redes neuronales más importantes.	24
Tabla 2. Valores de los parámetros del modelo de sedimentación de Tákacs publicados en la literatura especializada.	49
Tabla 3. Diferencias finitas para la primera y segunda derivada de la función f con respecto a x .	52
Tabla 4. Diferencias finitas para la segunda derivada parcial mixta de la función $f(x,y)$	53
Tabla 5. Valores de las neuronas de entrada a la red según la etapa del sedimentador	62
Tabla 6. Valores óptimos para los parámetros del modelo de sedimentación de Takács empleando los datos clásicos de Pflanz	73
Tabla 7. Valores óptimos para los parámetros del modelo de sedimentación de Takács con los datos experimentales a $34.3 \text{ m}^3/\text{h}$.	74
Tabla 8. Resultados de los experimentos realizados con los datos de la Etapa 1 con los dos Esquemas de entrenamiento.	77
Tabla 9. Resultados de los experimentos realizados con los datos de la Etapa 2.	78
Tabla 10. Resultados obtenidos en entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido	81
Tabla 11. Mejores topologías encontradas de acuerdo a los resultados de validación	82
Tabla 12. Comparación numérica de los resultados de validación	83
Tabla 13. Comparación numérica de los resultados de entrenamiento	84



NOMENCLATURA

Notación	
\bar{O}	Promedio de valores observados (cálculo de S)
\bar{P}	Promedio de valores predichos (cálculo de S)
\bar{X}	Media de una serie de valores (Usada en normalización)
A	Área de sección transversal (m^2)
a_1	Parámetro del Modelo 1. (Anexo A)
a_2	Parámetro del Modelo 2. (Anexo A)
b_1	Parámetro del Modelo 1. (Anexo A)
b_2	Parámetro del Modelo 2. (Anexo A)
d_j	Salida deseada de la RNA
f_{ns}	Fracción de sólidos suspendidos no sedimentables
J_{dn}	Flux advectivo de sólidos descendente ($g/m^2 \cdot h$)
J_s	Flux gravitacional de sólidos descendente ($g/m^2 \cdot h$)
J_{up}	Flux advectivo de sólidos ascendente ($g/m^2 \cdot h$)
M	Número de capa en la que se ubica el influente
N	Número de capas en la que se divide el sedimentador
Net_j	Suma Neta de la neurona i
NRSS	Sumatoria de los residuales normalizados al cuadrado
NTU	Unidad Nefelométrica de Turbiedad
P_i	Variable que representa la profundidad de la capa i
PTAR	Planta de Tratamiento de Aguas Residuales
Q_e	Flujo volumétrico del efluente (m^3/h)
Q_f	Flujo volumétrico del influente (m^3/h)
Q_u	Flujo volumétrico de la recirculación (m^3/h)
r^2	Coefficiente de determinación
r_h	Parámetro de sedimentación retardada (m^3/g)
RNA	Red Neuronal Artificial
r_p	Parámetro de sedimentación a baja concentración (m^3/g)
RSS	Sumatoria de los residuales al cuadrado
S	Sesgo fraccional



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

SEC	Sumatoria de errores al cuadrado
SER	Sumatoria de errores relativos
$SERC$	Sumatoria de errores relativos al cuadrado
SST	Sólidos Suspendidos Totales (g/m^3)
v'_0	Velocidad de sedimentación máxima práctica (m/d)
v_0	Velocidad de sedimentación máxima teórica (m/d)
$Valor$	Valor a normalizar (Usado en normalización)
$V_{m\acute{a}x}$	Valor máximo (Usado en normalización)
$V_{m\acute{i}n}$	Valor mínimo (Usado en normalización)
V_{norm}	Valor que devuelve una fórmula de normalización
v_s	Velocidad de sedimentación (m/d)
w_{ij}	Matriz que almacena los valores de los pesos
X_f	Concentración de SST en el influente (g/m^3)
X_i	Concentración de SST en la capa i (g/m^3)
X_{min}	Concentración de SST mínima alcanzable (g/m^3)
X_t	Concentración umbral de SST (g/m^3)
y_i	Salida de la neurona i del modelo de RNA
Letras griegas	
α	Factor de relajación (en el método de optimización Newton-Raphson Multivariable) y factor de aprendizaje en el modelo de RNA
β	Parámetro de ajuste en el Modelo Combinado (Anexo A) y momento en el modelo de RNA
δ	Delta (parámetro relacionado con el cálculo de los pesos)
Δw	Cambio de pesos (Usada en el entrenamiento de la RNA)
Δz_i	Espesor de la capa i (m)

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México



1.

INTRODUCCIÓN

El tratamiento de aguas residuales es uno de los procesos más importantes en la Ingeniería Sanitaria. Un sistema de tratamiento es un conjunto secuencial de operaciones y procesos unitarios en los que se involucran fenómenos físico-mecánicos, químicos y/o biológicos con el propósito de reducir o eliminar contaminantes presentes en el agua de acuerdo a la normatividad vigente.

Existen diversos tipos de tecnologías para el tratamiento de las aguas residuales, algunas de éstas requieren mayor costo de operación que otras, o mayor espacio, según la magnitud del caudal que se desee tratar. Conocer el desempeño de estas plantas es importante por tres razones; la primera porque se pueden obtener criterios de diseño para plantas de tratamiento; segunda, porque permite evaluar el desempeño de las plantas de tratamiento y tercera, porque ayuda a optimizar costos en la operación, sobre todo en las que utilizan procesos complejos que requieren mayores costos de energía eléctrica así como de agentes químicos (Metcalf y Eddy, 1996).

La predicción del desempeño de los procesos y las operaciones unitarias para el tratamiento de aguas se puede realizar utilizando modelos matemáticos mecánicos basados en ecuaciones de conservación de masa y *momentum*, o modelos estocásticos que se basan en eventos aleatorios. En el presente trabajo se realizará la predicción del perfil de concentraciones de Sólidos Suspendidos Totales (SST) en un sedimentador secundario usando un modelo determinístico, un modelo estocástico y el modelo híbrido resultante al combinar los dos anteriores. Con el propósito de analizar las capacidades de predicción de los tres modelos estudiados, se utilizó información real obtenida de una unidad de sedimentación secundaria operando en la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) del Fraccionamiento Pomoca, en Nacajuca, Tabasco.

El modelo determinístico, constituido por ecuaciones diferenciales ordinarias basadas en el balance de masa, es la representación de la sedimentación considerando las variables más importantes involucradas, tales como la velocidad de flujo y la concentración de SST. El modelo estocástico, que



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

está basado en eventos aleatorios, estará representado por un modelo de Red Neuronal Artificial (RNA), el cual fue alimentado con variables de proceso preseleccionadas, para posteriormente analizar cuáles de ellas fueron las más importantes para la predicción. Por su parte, el modelo híbrido consiste en la integración de los dos modelos mencionados y con el propósito de mejorar el desempeño del modelo determinístico en la predicción del perfil de concentraciones de los SST con respecto a la profundidad de la unidad de sedimentación secundaria estudiada.

El presente documento está organizado de la siguiente manera: en el Capítulo 2 se definen los conceptos y principios en los que se fundamenta este estudio. El Capítulo 3 presenta las investigaciones previas directamente relacionadas al modelado matemático de equipos de sedimentación en sistemas de tratamiento de agua. El Capítulo 4 está constituido por la justificación, objetivos e hipótesis establecidos en este estudio. Por su parte, en el Capítulo 5 se detallan los métodos y procedimientos numéricos que permiten solucionar a los dos modelos, determinístico y estocástico, así como una descripción de la integración de ambos para la obtención del modelo híbrido. Los Capítulos 6 y 7 muestran los resultados y discusión de las simulaciones de la operación de sedimentación con los tres modelos matemáticos analizados, así como las conclusiones centrales del presente trabajo.



2.

MARCO TEÓRICO

En este capítulo se definen los conceptos y principios elementales relacionados al modelado matemático de la operación unitaria de sedimentación de sólidos suspendidos en sistemas de tratamiento de agua.

2.1. LAS AGUAS RESIDUALES

Las aguas residuales pueden definirse como las aguas que provienen del sistema de abastecimiento de una población, después de haber sido modificadas por diversos usos en actividades domésticas o industriales principalmente, siendo recogidas por la red de alcantarillado que las conducirá hacia un destino apropiado. Según su origen, las aguas residuales resultan de la combinación de residuos líquidos o aguas portadoras de residuos, que pueden provenir de residencias, oficinas, edificios comerciales e instituciones, junto con los residuos de las industrias y de actividades agrícolas, así como las aguas subterráneas, superficiales o de precipitación que también pueden agregarse al agua residual (Metcalf y Eddy 1996).

La composición de los caudales de agua residuales de una comunidad depende del tipo de sistema de captación de aguas residuales que se emplee y puede incluir los siguientes componentes (Metcalf y Eddy 1996):

- Agua residual doméstica (o sanitaria). Son aquellas procedentes de las zonas residenciales o instalaciones comerciales, públicas y similares.
- Agua residual industrial. Agua residual en la cual predominan descargas industriales y cuya calidad depende del tipo de industria.
- Aguas pluviales. Agua resultante de la escorrentía superficial.
- Agua residual agrícola. Son escorrentías que arrastran fertilizantes (fosfatos) y pesticidas.

2.2. TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES

Un sistema de tratamiento de aguas es un conjunto secuencial de operaciones y procesos unitarios en los que se involucran fenómenos físico-mecánicos, químicos y/o biológicos cuyo propósito es



reducir o eliminar contaminantes presentes en el agua con el propósito de cumplir con la normatividad vigente y pertinente. Generalmente, en lo que se refiere al tratamiento de aguas residuales, los tipos de tratamiento son el pretratamiento, el tratamiento primario, el tratamiento secundario y tratamiento terciario.

2.2.1. Pretratamiento

En el pretratamiento se busca acondicionar el agua residual para aumentar la efectividad de los tratamientos posteriores, y con el propósito de mantener las instalaciones libres de taponamientos y fallas en equipos. Las aguas residuales que fluyen desde los alcantarillados a las PTAR, son muy variables en su flujo y contienen gran cantidad de objetos, en muchos casos voluminosos y abrasivos, y arenas, que por ningún motivo deben llegar a las diferentes unidades donde se realizan los tratamientos y deben ser removidos. Para esto son utilizados comúnmente los tamices, las cribas, los microfiltros y desarenadores, en los cuales quedan retenidos estos materiales.

2.2.2. Tratamiento primario

El tratamiento primario tiene el propósito de remover aquellos contaminantes que pueden sedimentar, como por ejemplo los sólidos sedimentables y algunos suspendidos o aquellos que pueden flotar como las grasas. Gran parte de los sólidos suspendidos en el agua se eliminan en una etapa posterior al pretratamiento, en tanques llamados sedimentadores primarios, en donde se remueve entre un 40 y 60% de los sólidos suspendidos de las aguas residuales y en la cual también se remueve una proporción de DBO_5 (demanda bioquímica de oxígeno a cinco días de incubación). En el tratamiento primario también es posible remover las grasas, ya que los tanques de sedimentación también se equipan con dispositivos para la remoción de espuma, grasas y aceites, los cuales son cuchillas superficiales que arrastran estos contaminantes (Ramalho, 1996).

2.2.3. Tratamiento secundario

El tratamiento secundario se puede clasificar de dos maneras generales, la primera que tiene que ver con la presencia de oxígeno se clasifica en aerobio, anaerobio o facultativo, de los cuales cabe mencionar que los más utilizados y efectivos son los tratamientos aerobios. La segunda clasificación



está relacionada con la posición de la biomasa dentro del biorreactor, en este caso se clasifican en tratamientos o sistemas de biomasa fija y los de biomasa en suspensión.

Los *tratamientos aerobios* son sistemas en los que se aprovecha el metabolismo microbiano aerobio para degradar la materia orgánica presente en las aguas residuales. Entre los procesos aerobios de biomasa suspendida más comunes se pueden citar a los lodos activados y los sistemas lagunares. En referencia a los principales procesos aerobios de biomasa sobre soporte fijo se pueden mencionar a los filtros biológicos. Los *tratamientos anaerobios* son sistemas en los que al igual que otros tratamientos biológicos, la cantidad de biomasa activa y la eficiencia del contacto definen la capacidad de tratamiento. La evolución de estos tratamientos ha sido en el sentido del control de la biomasa activa y los cambios en el tiempo de retención celular y el tiempo de retención hidráulica. Según esta evolución existen tres tipos de sistemas anaerobios: primera, segunda y tercera generación. En los tratamientos de primera generación la biomasa se encuentra sedimentada con un mínimo de contacto con el sustrato, o bien en suspensión, sin recirculación de sólidos *i.e.* fosa séptica, tanque Imhoff o laguna anaerobia. En los tratamientos de segunda generación los microorganismos son retenidos en el reactor o soporte *i.e.* filtro anaerobio o reactor anaerobio de flujo ascendente. Los tratamientos de tercera generación contienen microorganismos en forma de biopelícula adherida al soporte que se expande o fluidiza mediante una corriente de recirculación ascendente *i.e.* un lecho fluidizado (Tchobanoglous *et al.*, 2003).

2.2.4. Tratamiento terciario o avanzado

El tratamiento terciario tiene como propósito remover contaminantes específicos, usualmente tóxicos o compuestos no biodegradables o incluso la remoción complementaria de contaminantes no suficientemente removidos en el tratamiento secundario. Como medio de filtración se puede emplear arena, grava antracita o una combinación de ellas. El pulimento de efluentes de tratamiento biológico se suele hacer con capas de granulometría creciente, duales o de medio múltiple. Los filtros de arena fina son preferibles cuando se desea filtrar flóculos formados químicamente y aunque su ciclo sea más corto pueden limpiarse empleando menor cantidad de agua de retrolavado. Por su parte, la adsorción con carbón activado se utiliza para eliminar los compuestos orgánicos volátiles que no fueron removidos en el tratamiento biológico.



2.3. SISTEMAS DE TRATAMIENTO CONVENCIONALES

En el estado de Tabasco, las PTAR emplean principalmente cinco tipos de tratamiento: lodos activados, filtros percoladores, lagunas de estabilización, tanques tipo Imhoff y humedales artificiales. A continuación se describen brevemente las cuatro primeras tecnologías mencionadas.

2.3.1. Tratamiento por lodos activados

Este proceso fue desarrollado en Inglaterra en 1914 por Arden y Lockett y su nombre proviene de la producción de masa activada de microorganismos capaz de estabilizar un residuo por vía aerobia. El residuo orgánico se introduce en un reactor donde se mantiene un cultivo bacteriano aerobio en suspensión. En el proceso de lodos activados (Figura 1), la mezcla entra al tanque de aireación, donde se mezclan los microorganismos y las aguas residuales con gran cantidad de aire. Bajo estas condiciones los microorganismos oxidan una parte del desecho orgánico a dióxido de carbono y agua, para obtener energía, y sintetizar la otra parte en forma de células microbianas nuevas utilizando la energía obtenida de la oxidación. Luego la mezcla entra al tanque de sedimentación (sedimentador secundario), donde los microorganismos floculantes se asientan y son removidos del efluente. Entonces, los microorganismos sedimentados (el lodo activado) se recircula hacia el inicio del tanque de aireación para mezclarlos de nuevo con el agua residual (Metcalf y Eddy 1996). La mezcla contenida en el reactor es llamada comúnmente licor mezclado. En la corriente de licor mezclado, la distribución de partículas (Figura 2) es de tipo bimodal con partículas primarias (*microflocs*) en el rango de los 0.5 a 5 μm y flóculos (*macroflocs*) en el rango de los 10 a 5000 μm (Jeppsson, 1996).



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

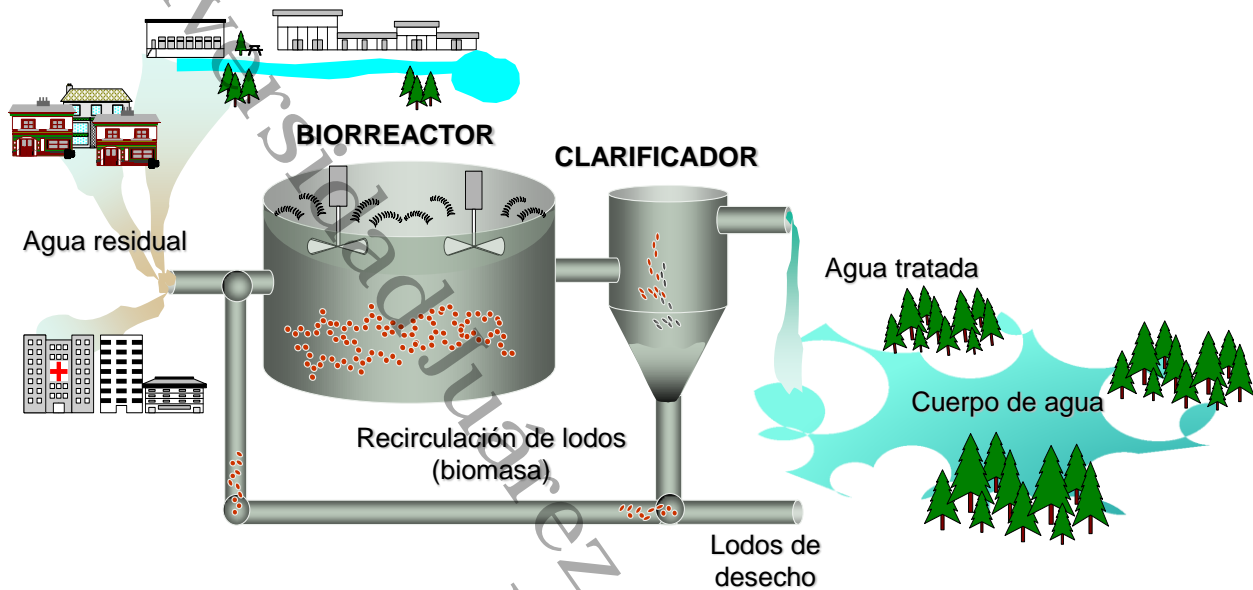


Figura 1. Esquema general del proceso de Lodos Activados. En la figura, se emplea aireación con turbinas superficiales.

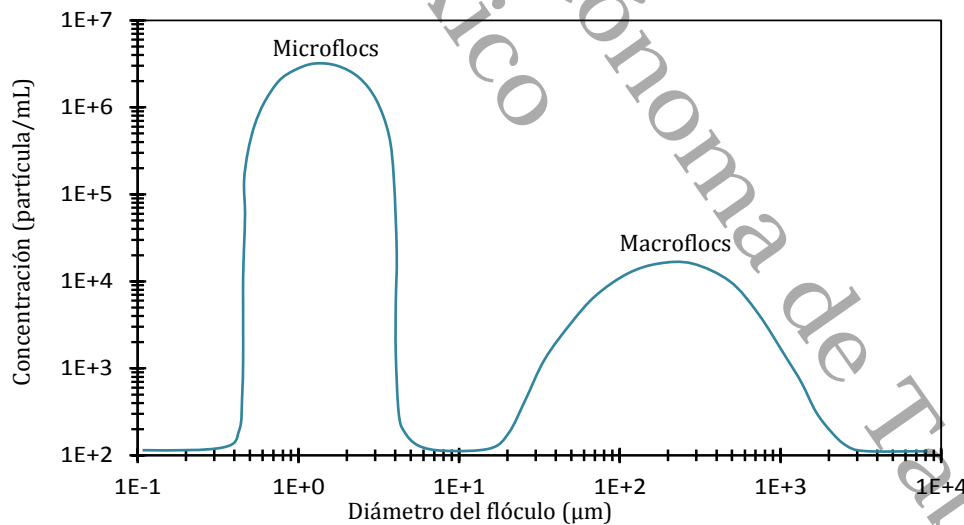


Figura 2. Distribución del diámetro de partícula en lodos activados (Jeppsson, 1996).

2.3.2. Tratamiento por filtros biológicos (filtros rociadores)

Entre los filtros biológicos más comunes podemos mencionar a los filtros percoladores, cuyas tecnologías primitivas resultaron en cierta manera de la necesidad natural de filtrar las aguas



residuales municipales. Debido a que el crecimiento microbiano sobre los filtros los obstruía rápidamente, se usaron medios cada vez más grandes hasta que se alcanzó un tamaño de roca de 2 a 4 pulgadas de manera que la obstrucción fuera mínima. Para tener mayor porosidad, se desarrollaron nuevos soportes, principalmente de plástico, semejantes a los empaques empleados en lechos empacados de procesos de separación de la Ingeniería Química. Dado su alta porosidad y el peso reducido del medio, en la actualidad es muy común el uso de filtros en forma de torre (Tchobanoglous *et al.*, 2003).

2.3.3. Tratamiento por lagunas de estabilización

Las lagunas de estabilización son un sistema lagunar artificial constituido comúnmente por tres tipos de lagunas: lagunas primarias (donde se lleva a cabo la sedimentación primaria y procesos de digestión anaerobia de los lodos sedimentados), lagunas secundarias (en éstas se lleva a cabo la digestión aerobia de la materia orgánica en suspensión, ya sea en sistemas facultativos o en sistemas con aireación asistida, *i.e.* lagunas de oxidación), y lagunas de pulimento (utilizadas para remover contaminantes específicos, *vb. gr.*, fosfatos, metales). Las lagunas facultativas son las más usadas y versátiles entre las diferentes clases de lagunas. Su profundidad oscila entre 1.5 y 2.5 metros. El tratamiento se desarrolla por acción de bacterias aerobias en la capa superior y de bacterias anaerobias o anóxicas en la capa inferior, dependiendo de la mezcla que se induce por la acción del viento. Los sólidos sedimentables se depositan en el fondo de la laguna. El aporte de oxígeno se logra por fotosíntesis y por reaireación natural superficial. Las lagunas facultativas pueden funcionar como lagunas con descarga controlada, laguna de retención total o como unidades de almacenamiento para un tratamiento posterior sobre el suelo (Tchobanoglous *et al.*, 2003).

2.3.4. Tanque Imhoff

Un tanque Imhoff consiste en un tanque de dos niveles en el cual la sedimentación tiene lugar en el compartimiento superior mientras que la digestión y la acumulación de lodos ocurre en la parte inferior. Los tanques Imhoff se utilizan como unidad de tratamiento de aguas residuales provenientes de zonas residenciales y demás zonas que cuenten con sistema de alcantarillado por gravedad o sistemas de recolección a presión con bombas trituradoras. Debido a que no requieren de personal muy calificado por su sencilla operación, los tanques Imhoff se continúan utilizando de



manera ocasional, principalmente en comunidades rurales. Estas unidades no cuentan con unidades mecánicas que requieran mantenimiento y la operación consiste en la remoción diaria de espuma, en su evacuación por el orificio más cercano y en la inversión del flujo dos veces al mes para distribuir los sólidos de manera uniforme en los dos extremos del digestor de acuerdo con el diseño y retirarlos periódicamente al lecho de secado (Tchobanoglous *et al.*, 2003).

2.4. SEDIMENTACIÓN POR GRAVEDAD

La sedimentación por gravedad es una operación unitaria que consiste en la separación de partículas sólidas suspendidas en el agua por medio de la acción de la gravedad y la diferencia de densidades entre estas partículas y el agua. Esta separación se produce porque las partículas que tienen mayor densidad que el agua, son atraídas en dirección al centro de la Tierra debido a la fuerza de gravedad, depositándose en el fondo del cuerpo de agua que las contenga. Dependiendo de la concentración y el tipo de estos sólidos se pueden diferenciar cuatro tipos de sedimentación y que se describen a continuación (Metcalf y Eddy 1996).

2.4.1. Sedimentación discreta (Tipo I)

Se refiere a la sedimentación de partículas en una suspensión con baja concentración de sólidos. Las partículas sedimentan como entidades individuales y no existe interacción sustancial con las partículas vecinas. Eliminación de las arenas del agua residual.

2.4.2. Sedimentación floculenta (Tipo II)

Se refiere a una suspensión diluida de partículas que se agregan o floculan, durante el proceso de sedimentación. Al unirse, las partículas aumentan de masa y sedimentan a mayor velocidad. Este tipo de sedimentación es común en la eliminación de una fracción de los sólidos en suspensión del agua residual en los tanques de sedimentación primaria, y en la zona superior de los sedimentadores secundarios. También elimina los flóculos químicos de los tanques de sedimentación.



2.4.3. Sedimentación retardada (Tipo III)

Este tipo de sedimentación, también denominada zonal, se refiere a suspensiones de concentración intermedia, en las que las fuerzas entre partículas son suficientes para entorpecer la sedimentación de las partículas vecinas. Las partículas tienden a permanecer en posiciones relativas fijas, y la masa de partículas sedimenta como una unidad. Se desarrolla una interfase sólido-líquido en la parte superior de la masa que sedimenta. Este tipo de sedimentación se presenta en los tanques de sedimentación secundaria empleados en las instalaciones de tratamiento biológico.

2.4.4. Sedimentación por compresión (Tipo IV)

Se refiere a la sedimentación en la que las partículas están concentradas de tal manera que se forma una estructura, y la sedimentación sólo puede tener lugar como consecuencia de la compresión de esta estructura. La compresión se produce por el peso de las partículas, que se van añadiendo constantemente a la estructura por sedimentación desde el líquido sobrenadante. Generalmente, se produce en las capas inferiores de una masa de lodo de gran espesor, tal como ocurre en el fondo de los sedimentadores secundarios profundos y en las instalaciones de espesamiento de lodos (Metcalf y Eddy 1996). La Figura 3 muestra un esquema típico de los cuatro tipos de sedimentación mencionados anteriormente.

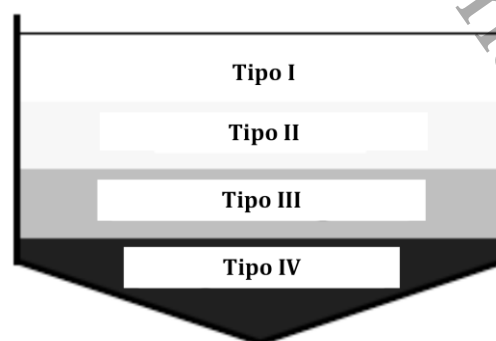


Figura 3. Esquema clásico de los cuatro tipos de sedimentación en un sedimentador (Jeppsson, 1996)

2.5. TIPOS DE SEDIMENTADORES

Los sedimentadores son tanques en los cuales se lleva a cabo la sedimentación, de una manera sistemática, con el fin de realizar lo mejor posible la separación de los sólidos suspendidos en el



agua residual. Dependiendo de la función, los tanques de sedimentación se clasifican en sedimentadores primarios o secundarios. Los tanques de sedimentación primaria conforman la parte inicial de un sistema de tratamiento, y su propósito principal es remover los sólidos suspendidos presentes en el influente de la planta, que generalmente son sólidos de tipo fisicoquímico. Los tanques de sedimentación secundaria se localizan después del proceso biológico de la planta, su desempeño es importante sobre la calidad del efluente de la planta de tratamiento, sobre la eficiencia del proceso de tratamiento biológico y sobre los procesos de tratamiento de lodos. Unos de los procesos más comunes donde intervienen los sedimentadores secundarios es el tratamiento por lodos activados, donde su función es separar la biomasa generada durante la degradación de la materia orgánica y que se encuentra en forma de flóculos biológicos, es decir los lodos activados.

Según su geometría, los sedimentadores pueden ser de forma rectangular o cilíndrica. El flujo horizontal es característico de los sedimentadores rectangulares, a diferencia del flujo radial que ocurre en los sedimentadores circulares.

2.5.1. Sedimentadores rectangulares

Los sedimentadores rectangulares cuentan con barredores con cadenas o puentes móviles, para la recolección de lodos sedimentados. En los sedimentadores rectangulares, la distribución del caudal es crítica por lo que se requiere emplear alguno de los siguientes diseños: canales que ocupan en la totalidad del ancho del sedimentador, con vertederos de entrada, canales de entrada con orificios sumergidos, canales de entrada con compuertas grandes y deflectores, en los cuales los deflectores ubicados en la entrada se utilizan para reducir las altas velocidades de ingreso y para distribuir el flujo a lo largo de la mayor sección transversal posible (Figura 4).

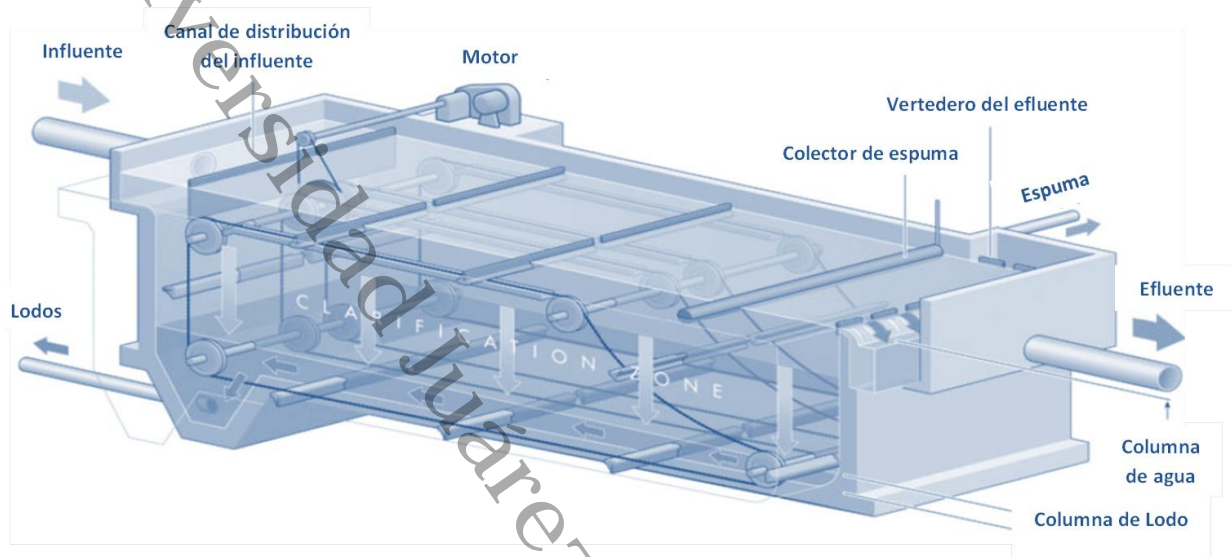


Figura 4. Sedimentador de tipo rectangular.

2.5.2. Sedimentadores circulares

En un sedimentador circular, el agua a tratar se introduce por el centro o por la periferia del tanque, ambas configuraciones dan resultados satisfactorios. En el diseño de tanques circulares con alimentación central, el agua residual se transporta por una tubería suspendida del puente, o debajo del fondo del tanque, hasta el centro del sedimentador. El agua se distribuye uniformemente en todas las direcciones con ayuda de un vertedero circular ubicado en la zona central del tanque. Este tipo de tanques cuenta con un sistema de dos o cuatro brazos que giran lentamente, equipados con barredores de fondo para la remoción de lodos. Los sedimentadores circulares con alimentación perimetral cuentan con un deflector circular suspendido a corta distancia de la pared del tanque, formando un espacio anular por donde se descarga el agua residual en dirección tangencial. El agua residual fluye alrededor del tanque a manera de espiral hasta pasar por debajo del deflector, mientras que el agua clarificada se recoge por medio de unos vertederos colocados a ambos lados de un canal ubicado en la parte central.

El flujo en los tanques circulares es de tipo radial, el agua a tratar se introduce en el sedimentador por el centro o por la periferia del tanque. Este tipo de tanques cuenta con un sistema de dos y



cuatro brazos que giran lentamente, equipados con barredores de fondo para la remoción de lodos y con cuchillas superficiales para remover espumas (Figura 5).

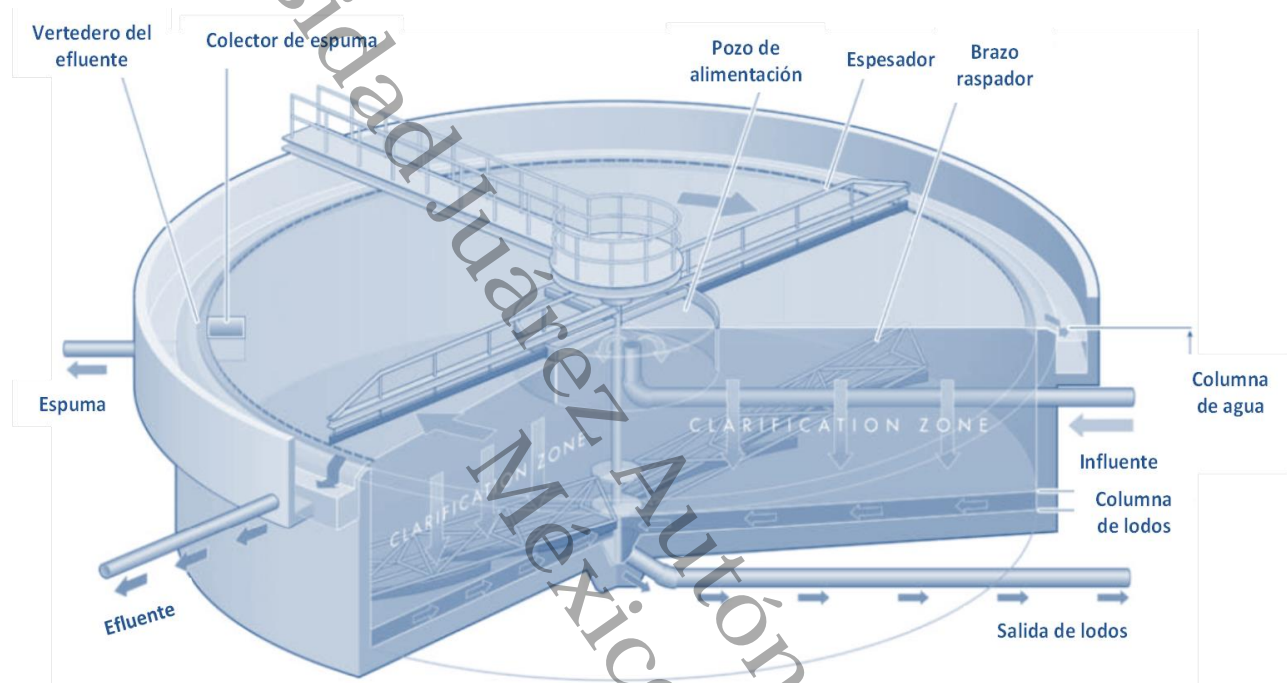


Figura 5. Sedimentador de tipo circular.

2.6. TEORÍA DEL FLUX DE SÓLIDOS DE KYNCH

El origen de la Teoría de la Sedimentación se puede remontar al trabajo de Hazen (1904), quien desarrolló una teoría para la sedimentación continua de partículas discretas que tienen una velocidad de sedimentación idéntica. El modelo fue desarrollado tanto para condición laminar como turbulenta. Camp (1936) modificó la teoría de Hazen incluyendo que las partículas discretas tengan velocidad de sedimentación distribuida. Éste consideró un tanque ideal con flujo horizontal homogéneo, una distribución uniforme del flujo de entrada, sedimentación en caída libre (tipo discreta) y remoción de partículas cuando éstas llegan al fondo. Dobbins (1944) desarrolló un modelo para predecir la concentración en un sedimentador para partículas con velocidad independiente bajo condiciones de turbulencia isotrópica sin purgado de lodos y comenzando a



partir de una concentración de entrada constante, y encontró buenos resultados con prueba a escala piloto usando vidrio acrílico (plexiglás) en polvo como material suspendido (Jeppsson, 1996).

En un trabajo fundamental hecho por Kynch (1952) fue realizado un análisis teórico de la sedimentación, basado en la teoría de Coe and Clevenger (1916). Kynch concluyó que la concentración de sólidos sedimentables en el licor mezclado era de mayor importancia al describir el proceso de sedimentación (Jeppsson, 1996). Las cuatro principales suposiciones de la teoría de Kynch son:

- La velocidad de sedimentación de una partícula depende solamente de la concentración local de partículas.
- Todas las partículas tienen la misma forma, tamaño y densidad.
- La concentración de partículas es constante dentro de cada sección transversal horizontal del sedimentador.
- En la sedimentación continua, la velocidad total de sedimentación es función de la tasa de sedimentación de partículas relativa al líquido y del flujo descendente de la suspensión debido al flujo descendente retirado del fondo del sedimentador.

2.7. MODELO MATEMÁTICO

El modelado es un proceso en el cual se aplican los conocimientos teóricos y prácticos para desarrollar un modelo, físico o abstracto, con el propósito de simular o describir el desempeño de un sistema real. Los modelos son útiles ya que permiten simular escenarios a un bajo costo y con menor dificultad que la experimentación, nos ayuda a la comprensión de la relación entre las causas y los efectos en el mundo real, siendo así una herramienta útil para tomar decisiones (Nirmala, 2002).

Un modelo matemático es la representación matemática de las leyes y principios elementales de la ciencia o de la experiencia, que describen teóricamente a un conjunto de fenómenos y comportamientos que ocurren en un sistema real; entendiendo como sistema a una entidad definida por el espacio y el tiempo dentro de la cual ocurren uno o más tipos de fenómenos, los



cuales son objetos de medición, estudio e interpretación. y por lo tanto son capaces de ayudar a conocer el desempeño de dicho sistema. Las representaciones simbólicas más usadas son las ecuaciones. Los modelos matemáticos se clasifican principalmente en determinísticos y estocásticos. Los modelos *determinísticos* son aquellos que están basados en principios y leyes elementales, tal es el caso de las ecuaciones de conservación de la masa, energía y *momentum*. Una característica importante de los modelos determinísticos es que la representación matemática está fundamentada en ecuaciones que son una función del tiempo y/o el espacio. En cambio, los modelos *estocásticos* se basan en conceptos estadísticos y probabilísticos para el análisis y correlación de tendencias entre las variables dependientes e independientes. En términos del efecto del tiempo, los modelos matemáticos se clasifican en dinámicos y estacionarios. Un modelo es *dinámico* cuando las variables dependientes del modelo cambian con respecto al tiempo. Por el contrario, en los modelos *estacionarios*, las variables dependientes del modelo no cambian con respecto al tiempo (Nirmala, 2002).

Además, la simulación es el conjunto de experimentos y pruebas numéricas que se realizan a partir de un modelo matemático, a fin de relacionar las variables causa-efecto relacionadas con el sistema que se esté modelando. Es aquí donde se obtienen resultados y se evalúa la precisión del modelo.

2.8. MODELO DE LA VELOCIDAD DE SEDIMENTACIÓN DISCRETA

Este modelo, como su nombre lo indica, es aplicable para el cálculo de la velocidad terminal de sedimentación discreta, y está fundamentada en el equilibrio de fuerzas que actúan sobre una partícula suspendida en medio acuoso. A partir de la velocidad terminal es posible calcular la eficiencia de sedimentación de un equipo en función de las características de las partículas. La velocidad terminal es la velocidad que alcanza una partícula cayendo libremente en un fluido estático y sujeto a fuerzas de arrastre, flotación y de gravedad. Este modelo está representado por la Ecuación General para la Estimación de la Velocidad de Sedimentación de tipo Discreta (Ecuación 2.1).



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

$$v = \sqrt{\frac{4}{3} g \frac{(\rho_p - \rho_w) d_p}{C_D \rho_w}} \quad (2.1)$$

donde ρ_p y ρ_w son las densidades de la partícula y el agua, respectivamente, d_p es el diámetro de la partícula esférica, C_D es el coeficiente de arrastre y g es la aceleración gravitacional. El coeficiente de arrastre ha sido correlacionado experimentalmente en función del número adimensional de Reynolds (Re):

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad \text{flujo laminar, } Re < 1 \quad (2.2)$$

$$C_D = \frac{24}{Re} + \frac{3}{\sqrt{Re}} + 0.34 \quad \text{(Fair-Geyer-Okun) flujo en transición, } 1 \leq Re \leq 10,000 \quad (2.3)$$

$$C_D = 0.40 \quad \text{flujo turbulento, } Re \geq 10,000 \quad (2.4)$$

Debe recordarse que Re se calcula por:

$$Re = \frac{v d_p \rho_w}{\mu_w} \quad (2.5)$$

donde v es la velocidad de la partícula; en particular, se trata de la velocidad terminal de sedimentación.

Dado que la mayor parte de los procesos de sedimentación ocurren a muy baja turbulencia, para fines prácticos suele emplearse la suposición de un flujo laminar para el cálculo de la velocidad terminal de sedimentación. En ese caso, sustituyendo la Ecuación 2.2 en la Ecuación 2.1 se obtiene:

$$v_i = \frac{g(\rho_p - \rho_w) d_p^2}{18\mu_w} \quad (2.6)$$



La ecuación anterior es la consecuencia matemática de la *Ley de Stokes* que establece que la fuerza de arrastre de una partícula esférica pequeña en un fluido estático depende de la fuerza de fricción donde los efectos viscosos son relevantes.

2.9. DESCRIPCIÓN DEL MODELO DE SEDIMENTACIÓN DE TAKÁCS

El modelo dinámico de Takács describe los fenómenos físico-mecánicos más representativos del proceso de sedimentación. Las variables de entrada de los modelos determinísticos en este ámbito son parámetros típicos de caracterización de la calidad del agua residual y los modelos permiten representar las variaciones de estos parámetros en función del espacio o el tiempo, según el tipo de planta y los propósitos del estudio. El modelo de Takács recibe como entrada, concentraciones iniciales de SST a diferentes profundidades, y devuelve como resultado, concentraciones simuladas de SST a las mismas profundidades a un tiempo dado de simulación.

El modelo dinámico está basado en la teoría de flujo de sólidos de Kynch, las suposiciones de Vitasovic y la expresión de velocidad terminal de sedimentación de Takács. En el desarrollo del modelo, se ha supuesto que la sedimentación de las partículas se debe exclusivamente a la fuerza de gravedad debido a la diferencia de densidades entre las partículas y el agua. Los perfiles de velocidad horizontal son uniformes y los gradientes de concentración en el eje horizontal son despreciables; como consecuencia, sólo se consideran a los procesos con respecto a la coordenada vertical obteniéndose un modelo uni-dimensional.

El modelo considera que, del total de sólidos presentes, solamente los componentes particulados son potencialmente sedimentables mientras que los componentes solubles abandonan el sedimentador en el efluente. Para calcular las concentraciones de sólidos en función de la coordenada vertical (la altura del sedimentador) en 1986 Vitasovic propuso dividir numéricamente al sedimentador en capas horizontales de espesor constante (Takács, 1991; Mulas, 2006). En cada capa horizontal se establece un balance de masa basado en la teoría de *flux* de sólidos de Kynch de 1952 (Jeppsson, 1996). Esta teoría establece que los sólidos que entran a un sedimentador son transportados hacia el fondo debido a la acción conjunta del *flux* gravitatorio de asentamiento (J_s) y



del flux global promovido por el movimiento del agua, ascendente (J_{up}) y descendente (J_{dn}). En el modelo de Vitasovic se emplean cinco grupos de capas: *i*) la capa extrema superior, *ii*) las capas situadas debajo de la capa extrema superior y encima de la capa donde se encuentra la alimentación, *iii*) la capa donde se encuentra la alimentación, *iv*) las capas situadas por debajo de la capa donde se encuentra la alimentación y encima de la capa extrema inferior, y *v*) la capa extrema inferior.

El modelo de Takács considera originalmente un sedimentador con una geometría cilíndrica, y se divide en n número de capas, de las cuales, una de ellas (la capa número m) será representativa de la zona de alimentación y la número n será la capa del fondo del sedimentador. Según los grupos de capas mencionados antes, el primer grupo corresponde a la Capa 1 que típicamente es representativa del efluente del sedimentador, el segundo grupo incluye las capas de la 2 a la $m - 1$, el tercer grupo corresponde a la capa m que es la alimentación, el cuarto grupo incluye las capas de $m + 1$ a $n - 1$ y el último grupo es la capa n . La zona de clarificación del sedimentador corresponde las capas de la 1 a la $m-1$ (grupos *i* y *ii*), y la zona de espesamiento corresponde a las capas de la $m+1$ a n (grupos *iv* y *v*).

El conjunto de ecuaciones que representan el modelo uni-dimensional de sedimentación usado por Takács es mostrado en la Figura 6, en la que Q_f y X_f son el flujo volumétrico y la concentración en el influente del sedimentador (la alimentación), respectivamente; A es el área de sección transversal y Δz_i es el espesor de la capa i . Los *fluxes* por advección de las diferentes capas se calculan como:

$$J_{up,i} = \frac{Q_e X_i}{A} \quad (2.7)$$

$$J_{dn,i} = \frac{Q_u X_i}{A} \quad (2.8)$$

donde Q_e es el flujo volumétrico del efluente, Q_u es el flujo volumétrico de la recirculación de lodos y X_i es la concentración de SST en la capa i .



Los *fluxes* de sólidos causados por la acción de la gravedad y la diferencia de densidades entre las partículas y el agua, son obtenidos de manera general por medio de la expresión siguiente:

$$J_{s,i} = v_{s,i} X_i \quad (2.9)$$

Para la zona de clarificación (de Capa 1 a Capa $m - 1$), el *flux* de sólidos es definido como:

$$\begin{cases} J_{s,i} & \Leftrightarrow X_{i+1} \leq X_t \\ \min(J_{s,i}, J_{s,i+1}) & \Leftrightarrow X_{i+1} > X_t \end{cases} \quad (2.10)$$

donde X_t es la concentración de SST límite o umbral.

Para la zona de espesamiento (de Capa $m+1$ a Capa n), el *flux* de sólidos se obtiene como:

$$J_{s,i} = \min(J_{s,i}, J_{s,i+1}) \quad (2.11)$$

Una dificultad de la expresión del cálculo del *flux* de sólidos promovido por la fuerza de gravedad es poseer una velocidad de sedimentación $v_{s,i}$ apropiada para modelar al sedimentador, ya que es un parámetro que no se puede medir experimentalmente y por lo tanto la manera de obtener ese parámetro es a base de modelos empíricos que relacionen la $v_{s,i}$ con la concentración de sólidos. Varios modelos han sido propuestos para relacionar a la velocidad de sedimentación con la concentración de sólidos (Jeppsson, 1996), entre los más empleados se pueden mencionar los modelos de Vesilind (1968), Cho *et al.*, (1993) y Takács *et al.*, (1991).

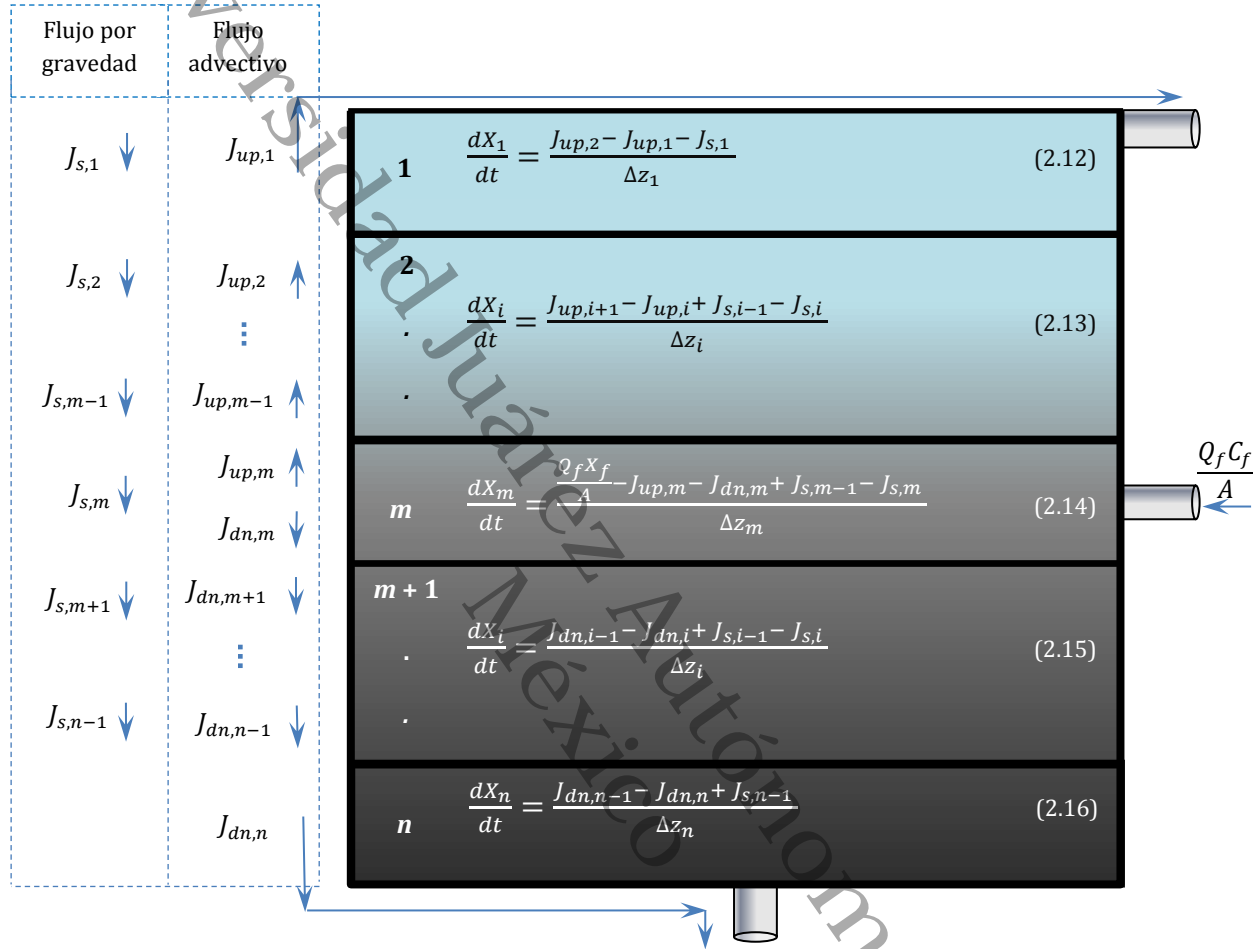


Figura 6. Representación general del modelo uni-dimensional de sedimentación por capas por Vitasovic con capas equidistantes y área de sección transversal constante (Takács *et al.*, 1991).

La expresión de la velocidad terminal de sedimentación de Takács es una función de doble término exponencial y es la expresión más ampliamente usada en modelos de sedimentación en tratamiento de aguas. La ecuación se expresa por:

$$v_s = \max(0, \min(v'_0, v_0(e^{-r_h(X-X_{min})} - e^{-r_p(X-X_{min})})) \quad (2.17)$$



donde v'_0 es la velocidad terminal práctica máxima, v_0 es la velocidad de sedimentación teórica máxima, r_h es el parámetro de sedimentación característico de la zona de sedimentación retardada (partículas mayores con capacidad floculenta), r_p es el parámetro de sedimentación característico de concentraciones bajas de sólidos, X_{min} es la concentración mínima alcanzable SST en el efluente y se obtiene por la multiplicación de X_f por la fracción no sedimentable de SST en el influente (f_{ns}).

En el Apartado 2.8 se define el modelo de la velocidad de sedimentación discreta aplicado a partículas, el cual es más aplicable para la sedimentación de partículas principalmente físico-químicas como los diversos tipos de arena, a las cuales se les puede conocer el diámetro promedio y la densidad. Sin embargo, en la sedimentación secundaria, los sólidos suspendidos son flóculos biológicos principalmente y no es común contar con la distribución de partícula de ellos y además, no predomina la sedimentación discreta. Es por eso que se recurre a la relación empírica entre la concentración de sólidos y la velocidad de sedimentación del modelo propuesto por Takács.

Una vez que se han definido a los *fluxes* de sólidos en cada capa y se ha seleccionado a la función de velocidad terminal, se requiere identificar y clasificar a los componentes del modelo: las variables de entrada, las variables de salida, variables intermedias (si éstas existen), parámetros físicos (inherentes a leyes físicas), parámetros arbitrarios (provenientes de relaciones empíricas) y constantes (valores universales). Como su nombre lo indica, los parámetros arbitrarios de un modelo pueden ser modificados para mejorar la capacidad de predicción del mismo, este procedimiento es conocido como ajuste, estimación de parámetros o parametrización del modelo.

2.10. REDES NEURONALES ARTIFICIALES

En este apartado se define el concepto de red neuronal artificial, indicándose sus diversas clases y ventajas asociadas a ella. Finalmente se establecen los elementos típicos que constituyen a una red neuronal artificial y la forma general de aprendizaje.



2.10.1. Definición de red neuronal artificial

En 1988, Kohonen definió a una red neuronal artificial como redes interconectadas masivamente en paralelo de elementos simples (usualmente adaptativos) y con organización jerárquica, las cuales intentan interactuar con los objetos del mundo real del mismo modo que lo hace el sistema nervioso biológico (Hilera y Martínez, 2000). En las redes neuronales biológicas, las células neuronales (neuronas) corresponden a los elementos de proceso anteriores. Las interconexiones se realizan por medio de las ramificaciones de salida (axones) que producen un número de variables de conexiones (sinapsis) con otras neuronas. Una peculiaridad de las redes neuronales biológicas es su tamaño: en todo el sistema nervioso central hay un orden de 10^{11} neuronas. Pero el número de interconexiones es aún mayor, probablemente del orden de 10^{15} , mientras que las redes neuronales artificiales hasta la actualidad no se acercan al orden de 10^2 , debido a que no parece posible programar las funciones de un sistema tan complejo.

En un modelo neuronal artificial multicapa existe una capa de entrada con n neuronas y una capa de salida con m neuronas y al menos una capa oculta de neuronas internas. Cada neurona de una capa (menos la de entrada) recibe entradas a todas las neuronas y envía su salida a todas las neuronas de la capa posterior (menos la de salida). No hay conexiones hacia atrás (*feedback*) ni laterales entre neuronas de la misma capa. La configuración general típica de una RNA es mostrada en la Figura 7, la cual es una red que puede tener muchas neuronas y capas ocultas conocida como *Red Perceptrón Multicapa* (Hilera y Martínez, 2000).

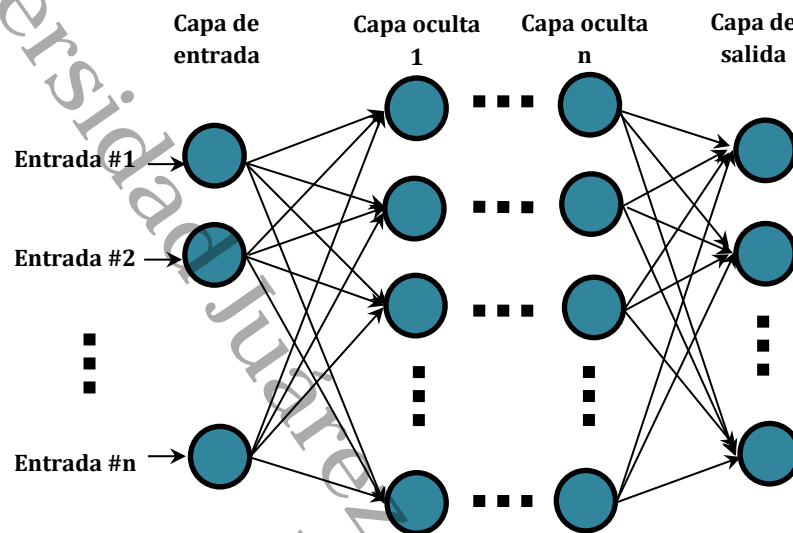


Figura 7. Modelo de red neuronal artificial multicapa (*Perceptrón Multicapa*).

2.10.2. Ventajas de las redes neuronales y tipos de redes más importantes

Debido a su constitución y a sus fundamentos, las redes neuronales artificiales presentan un gran número de características semejantes a las del cerebro. Por ejemplo, son capaces de aprender la experiencia, de generalizar de casos anteriores a nuevos casos, de abstraer características esenciales a partir de entradas que representan información irrelevante, entre otras. Esto hace que ofrezcan numerosas ventajas y que este tipo de tecnología se esté aplicando en múltiples áreas. Según Maren (1990, citado en Hilera y Martínez, 2000) estas ventajas incluyen:

- *Aprendizaje adaptativo*. Capacidad de aprender a realizar tareas basadas en un entrenamiento o una experiencia inicial.
- *Autoorganización*. Una red neuronal puede crear su propia organización o representación de la información que recibe mediante una etapa de aprendizaje.
- *Tolerancia a fallos*. La destrucción parcial de una red conduce a una degradación de su estructura; sin embargo, algunas capacidades de la red se pueden retener, incluso sufriendo un gran daño.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

- *Operación en el tiempo real.* Los computadores neuronales pueden ser realizados en paralelo, y se diseñan y se fabrican maquinas con *hardware* especial para tener esta capacidad.
- *Fácil inserción dentro de la tecnología existente.* Se puede obtener chips especializados para redes neuronales que mejoran su capacidad en ciertas tareas.

Tabla 1. Características de los tipos de redes neuronales más importantes.

Nombre de la red	Año	Aplicaciones más importantes	Comentarios	Limitaciones	Desarrollada por
Perceptron	1957	Reconocimiento de caracteres impresos	La red más antigua	No puede reconocer caracteres complejos	Frank Rosenblatt
Backpropagation	1974-85	Síntesis de voz desde texto. Control de Robots. Predicción. Reconocimiento de Patrones	Red más popular. Numerosas aplicaciones con éxito. Facilidad de aprendizaje Potente	Necesita mucho tiempo para el aprendizaje y muchos ejemplos	Paul Welbos David Parker David Rumelhart
Avalancha	1967	Reconocimiento de habla continua. Control brazos robot	Ninguna red sencilla puede hacer todo esto	No es fácil alterar la velocidad o interpolar el movimiento	Stephen Grossberg
Cerebellatron	1969	Control de movimiento de los brazos de un robot	Semejante a Avalancha	Requiere complicadas entradas de control	David Marr James Albus Andres Pellionez
Hopfield	1982	Reconstrucción de patrones y optimización	Puede implementarse en VLSI. Fácil de conceptualizar	Capacidad y estabilidad	John Hopfield
Máquinas de Boltzmann y Cauchy	1985-86	Reconocimiento de patrones (imágenes, radar y sonar) Optimización	Redes simples. Capacidad de representación óptima de patrones	La máquina de Boltzmann necesita un tiempo muy largo de aprendizaje	Jeffrey Hinton, Terry Sejnowski, Harold Szu
Teoría resonancia adaptativa (ART)	1986	Reconocimiento de patrones (radar, sonar, etc.)	Sofisticada. Poco utilizada	Sensible a la traslación, distorsión y escala	Gail Carpenter Stephen Grossberg

Fuente: Adaptada de Hilera y Martínez (2000).

Algunos de los tipos de redes neuronales más conocidos e importantes, según sus características, ventajas e inconvenientes, son mostrados a continuación en la Tabla 1. Entre las redes neuronales más populares y poderosas se encuentra la red *Backpropagation*, la cual entre sus ventajas está que es muy útil cuando el objetivo central es la predicción y en sí, tiene sus fundamentos en el *Perceptrón Multicapa*. Recientemente se está trabajando también con una red denominada CLASO, la cual es una RNA auto-organizada con aprendizaje en tiempo real que cuenta con tres módulos de



procesamiento: clasificación, agrupación y predicción. Fue desarrollado para la predicción de variables ambientales, y trabaja con patrones conformados por valores máximos, mínimos y promedios móviles de la variable en estudio. La información es tomada de bases de datos históricos.

Es una red formada por una capa de entrada, una capa oculta y la capa de salida. La capa oculta se crea de manera automática cuando el modelo es puesto en operación, durante la fase de construcción y el número de neuronas de la capa oculta, queda determinado por el conjunto de patrones que les son presentados.

Una de las características importante de esta red es que puede ser entrenada satisfactoriamente con menor cantidad de información que la *Backpropagation*, aunque aún está siendo probada (Carrera, 2011).

2.10.3. Elementos de una red neuronal artificial

Los cuatro elementos básicos de una red neuronal artificial son la neurona artificial, la función de salida o de transferencia, las conexiones entre neuronas y la regla de aprendizaje. A continuación se describen las características de estos elementos de red.

La neurona artificial

Todos los modelos de red neuronal constan de dispositivos elementales de proceso: *neuronas*. A partir de ellas, se pueden generar representaciones específicas de tal forma que un estado conjunto de ellas puede significar una letra, número o cualquier otro objeto. Generalmente se pueden encontrar tres tipos de neuronas:

- 1) Aquéllas que reciben estímulos externos, relacionados con el aparato sensorial, que tomarán la información de entrada.
- 2) Dicha información se transmite a ciertos elementos internos que se ocupan de su procesamiento. En las sinapsis y neuronas correspondientes a este segundo nivel es en donde se genera cualquier tipo de representación interna de la información. Puesto que no



tienen relación directa con la información de entrada ni con la de salida, estos elementos se denominan unidades ocultas.

- 3) Una vez que ha finalizado el periodo de procesamiento, la información llega a las unidades de salida, cuya misión es dar la respuesta del sistema.

La neurona artificial pretende imitar las características más importantes de las neuronas biológicas. Cada i -ésima neurona está caracterizada en cualquier instante por un valor numérico denominado *valor o estado de activación* $a_i(t)$; asociado a cada unidad, existe una *función de salida*, f_i , que transforma el estado actual de activación en una *señal de salida*, y_i . Dicha señal es enviada a través de los canales de comunicación unidireccionales a otras unidades de la red; en estos canales la señal se modifica de acuerdo con la sinapsis (*el peso*, w_{ji}) asociada a cada uno de ellos según una determinada regla. Las señales moduladas que han llegado a la j -ésima unidad se combinan entre ellas, generando así la *entrada total*, Net_j .

$$Net_j = \sum_i y_i w_{ji} + b \quad (2.18)$$

donde b significa el umbral de disparo, que típicamente se hace igual a cero.

Función de salida o de transferencia

Cada unidad de una red neuronal transmite señales a aquellas que están conectadas con su salida. Asociada con cada unidad U_i hay una función de salida $f_i(Net_j)$, que transforma el estado de activación en una señal de salida y_j ; es decir:

$$y_j = f_j(Net_j) \quad (2.19)$$

En algunos modelos, esta salida es igual al nivel de activación de la unidad, en cuyo caso la función f_i es la función identidad, $f_j(Net_j) = Net_j$. A menudo, f_j es de tipo sigmoideal y suele ser la misma para todas las unidades.



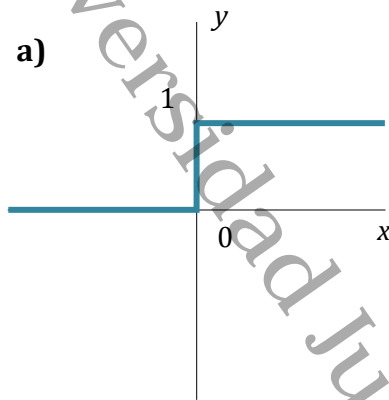
Existen cuatro funciones de transferencia típicas que determinan distintos tipos de neuronas:

- Función escalón
- Función lineal o mixta
- Sigmoidal
- Función tangencial hiperbólica

En la Figura 8 se muestra un ejemplo de cada tipo de función de transferencia mencionado. La función escalón o umbral es una de las formas más fáciles de definir la activación de una neurona. Se asocia a neuronas binarias en las cuales cuando la suma de las entradas es mayor o igual que el umbral de la neurona, la activación es 1; si es menor, la activación es 0 (ó -1).

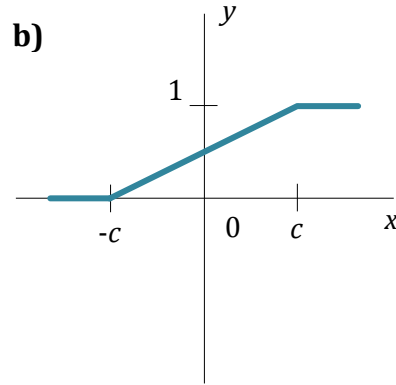
La función lineal o identidad corresponde a la expresión $f(x) = x$. En las neuronas con función mixta, si la suma de las señales de entrada es menor que un límite inferior, la activación se define como 0 (ó -1). Si dicha suma es mayor o igual que el límite superior, entonces la activación es 1. Si la suma de entrada está comprendida entre ambos límites, superior e inferior, entonces la activación se define como la función lineal de la suma de las señales de entrada.

Las funciones mixta y sigmoidal son las más apropiadas cuando se desea como salida a información analógica. Con la función sigmoidal, para la mayoría de los valores del estímulo de entrada, el valor dado por la función es cercano a uno de los valores asintóticos. Esto hace que en la mayoría de los casos, el valor de salida esté comprendido en la zona alta o baja del sigmoide. De hecho, cuando la pendiente es elevada, esta función tiende a la función escalón. Sin embargo, la importancia de la función sigmoidal es que su derivada es siempre positiva y cercana a cero para los valores grandes positivos o negativos; además, toma su valor máximo cuando x es igual a cero. La función tangencial hiperbólica se utiliza cuando las redes neuronales contienen salidas continuas, se utiliza principalmente para la fase de aprendizaje de la red ya que puede ser aplicada mediante una derivada. El perceptrón multicapa con retro-propagación es un ejemplo de una red utilizando esta función, pasando por las capas ocultas intermedias y ajustando los pesos de las conexiones con el objetivo de minimizar el error.

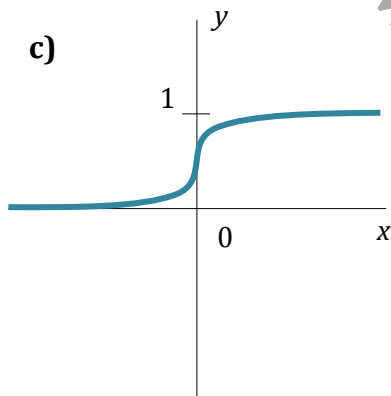


$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

Si el umbral fuera diferente de cero el escalón se desplazaría



$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > c \\ 0 & \text{si } x < -c \\ x/(2c) + 1/2 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.21)$$



$$f(x) = 1/(1 + e^{-ax}) \quad (2.22)$$



$$f(x) = (e^x - e^{-x}) / (e^x + e^{-x}) \quad (2.23)$$

Figura 8. Funciones de transferencia típicas que determinan distintos tipos de neuronas. a) función escalón, b) función lineal o mixta, c) función sigmoideal y d) función tangencial hiperbólica (Hilera y Martínez, 2000).

Un esquema de la neurona artificial es mostrado en la Figura 9, en la que se ilustra la forma en que ésta procesa la información de acuerdo a lo descrito en este apartado. En esta figura V representa la salida de las neuronas y P representa los pesos de la red.

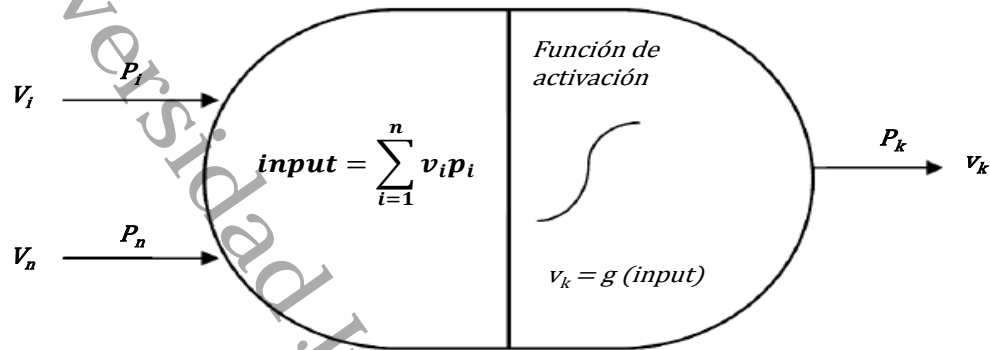


Figura 9. Nodo, unidad o neurona artificial.

Conexiones entre neuronas

Las conexiones que unen a las neuronas que forman una RNA tienen asociado un peso, que es el que hace que la red adquiera conocimiento. Considerando y_i como el valor de salida de la neurona i en un instante dado. Una neurona recibe un conjunto de señales que le dan información del estado de activación de todas las neuronas con las que se encuentra conectada. Cada conexión (sinapsis) entre la neurona i y la neurona j está ponderada por un peso w_{ji} . Normalmente, como simplificación, se considera que el efecto de cada señal es aditivo, de tal forma que la entrada neta que recibe una neurona (potencial postsináptico) Net_j es la suma del producto de cada señal individual por el valor de la sinapsis que conecta ambas neuronas.

Esta regla muestra el procedimiento a seguir para combinar los valores de entrada a una unidad con los pesos de las conexiones que llegan a esa unidad y es conocida como *regla de propagación*. Suele utilizarse una matriz W con todos los pesos w_{ji} que reflejan la influencia que sobre la neurona j tiene la neurona i . W es el conjunto de elementos positivos, negativos o nulos. Si w_{ji} es positivo, indica que la interacción entre las neuronas i y j es excitadora; es decir, siempre que la neurona i esté activada, la neurona j recibirá una señal de i que tenderá a activarla. Si w_{ji} es negativo, la sinapsis será inhibitoria. En este caso, si i está activada, enviará una señal a j que tenderá a desactivar a ésta. Finalmente, si $w_{ji} = 0$, se supone que no hay conexión entre ambas.



Regla de aprendizaje

Existen muchas definiciones del concepto de *aprendizaje*, una de ellas podría ser: *La modificación del comportamiento inducido por la interacción con el entorno y como resultado de experiencias conducentes al establecimiento de nuevos modelos de respuesta a nuevos estímulos externos* (Hilera y Martínez, 2000).

Biológicamente, se suele aceptar que la información memorizada en el cerebro está más relacionada con los valores de las conexiones entre las neuronas que con ellas mismas; es decir, el conocimiento se encuentra en las sinapsis. En el caso de las RNA, el conocimiento se encuentra representado en los valores de los pesos de las conexiones entre neuronas. Todo el proceso de aprendizaje consiste en la modificación de los pesos, de tal manera que estos valores sean optimizados, y así se obtenga la mejor combinación de pesos de tal forma que se logre la mejor asociación entre la información de entrada y la salida deseada.

La RNA consta generalmente de tres etapas, la primera es el *entrenamiento* donde se realiza el aprendizaje de la red, la segunda es la *validación* en la que se evalúa la eficiencia del aprendizaje y la tercera etapa es la *aplicación*, cuando la red ya ha aprendido y está lista para ser usada. Los parámetros generales relacionados con el entrenamiento de una RNA son el *error global*, el *factor de aprendizaje* y el *momento*. Estos parámetros se describen a continuación.

Error global. Este parámetro es el criterio con el cual se evalúa el aprendizaje de una RNA. Básicamente, el objetivo del aprendizaje es llegar al nivel más bajo de la superficie de error generada por los patrones de entrada. Es decir, una vez que se ha obtenido el valor mínimo en esta superficie, el entrenamiento ha terminado. El error global consiste en la suma de todos los errores individuales de cada una de las neuronas de la capa de salida. El error en cada neuronal es la diferencia entre el valor deseado y el valor obtenido. El error global de la red puede caracterizarse por la raíz cuadrada de la media de errores al cuadrado, o "la media cuadrática" (RMS, *Root Mean Square*).



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Factor de aprendizaje. Es un valor que se utiliza en el cálculo del error con el que se modifican los pesos de la red. El factor de aprendizaje (α) debe ser un número pequeño (entre 0 y 1) para asegurar que la red llegue a asentarse en una solución.

Momento. Asociado al factor de aprendizaje, el momento (β) es un parámetro que sirve para evitar que en el entrenamiento se generen oscilaciones. Rumelhart, Hinton y Williams (1986) (citado por Baeza, 2010) sugirieron que para filtrar estas oscilaciones, se añade esta expresión en la estimación de los pesos durante el entrenamiento.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México



3.

ANTECEDENTES

En este capítulo se describen los trabajos realizados previos a éste, en materia de tratamiento de aguas residuales, relacionados con los modelos estocásticos, determinísticos e híbridos; en particular, se enfatiza en los modelos para la predicción de concentraciones de sólidos en sedimentadores.

3.1. MODELOS DETERMINÍSTICOS

Uno de los modelos determinísticos clásicos para la representación dinámica de un sedimentador secundario es el modelo de Takács. Takács *et al.* (1991), realizaron un modelo dinámico con restricciones del proceso de clarificación-espesamiento. Basados en el concepto del *flux* de sólidos y en un balance de masa por cada capa de un sedimentador uni-dimensional, propusieron un modelo que es capaz de simular el perfil de sólidos en la columna de sedimentación, incluyendo la concentración de SST en el efluente y en las profundidades del sedimentador, bajo condiciones de estado estable y dinámico. Los autores modifican el modelo unidimensional del sedimentador por capas propuesto por Vitasovic (1986, citado en Jeppsson, 1996), ya que éste sólo es efectivo para la zona de espesamiento del sedimentador y no para la zona de clarificación. El modelo está basado en las siguientes suposiciones: *i)* Los sólidos de entrada son distribuidos instantáneamente y uniformemente a través del área de sección transversal de la capa del clarificador; y *ii)* Sólo el flujo vertical es considerado en el modelo, despreciándose la dispersión radial de los sólidos suspendidos.

Takács y colaboradores dividieron teóricamente al sedimentador en tres regiones diferentes: la capa de alimentación, las capas encima de la alimentación, y las capas debajo de la alimentación. Ellos proponen dividir arbitrariamente al sedimentador en 10 capas, argumentando que con este número es suficiente para describir satisfactoriamente a la dinámica del perfil de concentraciones de los SST. Además, propusieron una forma alternativa de la función de velocidad de sedimentación para usar en el modelo, basándose en la ecuación de sedimentación exponencial de Vesilind, expresión que usó Vitasovic en su trabajo. Obtuvieron su propia ecuación de la velocidad de sedimentación, la cual es una función con doble término exponencial, en el que el primer término



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

representa a la zona de clarificación y el segundo a la zona de espesamiento. Para validar el modelo usaron tres casos de los datos experimentales de una PTAR a gran escala (conocidos clásicamente como los datos de Pflanz), los cuales son datos registrados a diferentes condiciones de flujo de entrada; *i.e.* 360, 450 y 600 m³/h, denominados como carga baja (Caso 1), carga media (Caso 2) y carga alta (Caso 3), respectivamente. Takács y colaboradores emplearon como criterio de evaluación la sumatoria de los errores relativos al cuadrado, obteniendo los valores de 0.275, 0.254 y 0.157, para los Casos 1, 2 y 3, respectivamente. Particularmente, los errores relativos de la capa superior fueron de 1.1, 0.6 y 0.3, para los Casos 1, 2 y 3, respectivamente; de esta manera el modelo demostró ser eficiente y predice razonablemente bien a la concentración del efluente.

Posteriormente, Coehne *et al.* (1995) comparan diferentes modelos publicados en la simulación del clarificador secundario de una planta de tratamiento de aguas residuales en Siegen, Alemania. Los modelos utilizados son: el modelo de Vitasovic que se basa en la teoría de *flux* de sólidos, el modelo IAWPRC, el modelo de Takács, el modelo de Otterpohl, así como el modelo de Hoen y Schuhen. En este estudio, los parámetros de caracterización (DBO, demanda química de oxígeno o DQO, y SST) estuvieron disponibles para el ajuste, verificación y validación de modelos durante un periodo de simulación de 60 horas consecutivas. Los resultados demostraron que ninguno de los cuatro modelos de velocidad de sedimentación combinado con el modelo de capas de Vitasovic es capaz de simular la concentración de SST en el efluente durante las horas en donde no se presentaron eventos pluviales. Los autores concluyeron que los perfiles de concentración durante la sobrecarga hidráulica causada por dos eventos pluviales ocurridos durante las 60 horas de análisis fueron representados satisfactoriamente por todos los modelos estudiados. Sin embargo, ninguno de los modelos fue capaz de simular situaciones de flujo seco del clima (sobrecarga orgánica) con suficiente precisión.

Por su parte, Watts *et al.* (1996) probaron el modelo uni-dimensional del sedimentador secundario con las restricciones y la expresión de velocidad de Takács *et al.* (1991). Watts y colaboradores discretizaron el modelo con 20 y 50 capas, encontrando que conforme aumentaba el número de capas, aumentaba el error en la predicción. Los autores propusieron modificar el modelo de Takács para incluir el término de dispersión longitudinal (retromezclado) dependiente de la concentración,



obteniendo mejores resultados de manera general con los modelos que no incluyen dispersión. Con el modelo modificado lograron que al incrementar el número de capas, disminuyera el error en la predicción.

3.2. MODELOS ESTOCÁSTICOS

Diversos estudios han sido publicados en relación a modelos estocásticos, particularmente modelos de RNA, para la predicción de parámetros como la DBO y la DQO en efluentes de las PTAR.

Fu y Poch (1994) usaron un modelo de RNA del tipo *backpropagation* para estimar la DQO en un proceso de tratamiento de aguas residuales. Utilizaron varias topologías para la RNA, y encontraron que una estructura multicapa (5, 15, 8 y 1); es decir, con 5 neuronas en la capa de entrada, dos capas ocultas; la primera con 15 neuronas y la segunda con 8, y 1 neurona en la capa de salida, está desarrollada para los modelos de estimación y predicción para un proceso de lodos activados de dimensiones reales. Los cinco parámetros (5 neuronas) usados como entrada a la RNA fueron: el caudal de entrada, DQO en la entrada, la concentración de biomasa, la tasa de consumo de oxígeno en el reactor y el caudal de recirculación. La neurona de salida fue el parámetro a estimar, *i.e.* la DQO de salida. Esta RNA pudo ser entrenada para caracterizar el desempeño de los sistemas considerados.

Dogan *et al.* (2008) usaron el modelo *Artificial Neural Network system* (sistema de RNA) que forma parte de la caja de herramientas de MATLAB 2004 para estimar la DBO en la entrada de plantas de tratamiento biológico de aguas residuales. Ellos también probaron con varias topologías de capas para elegir la estructura de red, y encontraron que la mejor fue de 5, 3, y 1 neuronas en la capa de entrada, oculta y de salida, respectivamente. Los datos históricos usados como entrada a la RNA fueron obtenidos de una planta de tratamiento de aguas residuales localizada en Sakarya, Turquía, con datos diarios de 364 días en el año 2005. Los cinco parámetros de entrada que usaron para la red (capa de entrada) fueron: DQO, caudal de descarga, SST, nitrógeno total, y fósforo total, y el parámetro de salida (capa de salida) fue la DBO en el efluente. Se usaron como criterios para la evaluación del desempeño del modelo al promedio de los errores al cuadrado, el promedio de los errores relativos absolutos y el coeficiente de determinación, obteniendo los valores: 708.01, 10.0%



y 0.919 respectivamente. Se encontró que los modelos de RNA fueron empleados con éxito en la estimación de la DBO diaria en la entrada de plantas de tratamiento biológico de aguas residuales.

Civelekoglu *et al.* (2009) evaluaron una RNA y un sistema de inferencia neuro-difusa adaptativa (ANFIS, del inglés; *adaptive neuro-fuzzy inference system*) como métodos de modelado para estimar la remoción de carbono orgánico, usando la correlación entre la información histórica de los parámetros del influente y efluente de una PTAR biológica aerobia a gran escala. La base de datos utilizada para la construcción de los modelos fue obtenida de una PTAR doméstica localizada en la ciudad de Chania, Isla de Creta, Grecia. Para ambos modelos se realizaron dos pruebas, las cuales fueron: antes y después de un análisis de componentes principales. Antes del análisis de componentes principales, la topología de la RNA fue de 10, 15 y 1 neuronas en la capa de entrada, oculta y de salida, respectivamente. La arquitectura de la capa oculta se eligió usando el enfoque de prueba y error, y encontraron que una capa con 15 neuronas fue suficiente para describir la relación entre las entradas y las salidas. El modelo ANFIS fue estructurado con 10 entradas, 18 reglas de sistemas de inferencia difusa y una salida. El coeficiente de determinación en la etapa de validación para la RNA y el modelo ANFIS fue de 0.9865 y 0.9925. Después del análisis de componentes principales, la topología de la RNA quedó con 3, 5 y 1 neuronas en la capa de entrada, oculta y de salida, respectivamente. El ANFIS resultó con 3 entradas, 9 reglas de sistemas de inferencia difusa y 1 salida. Siendo los tres parámetros de entrada para ambos modelos el caudal de entrada, los SST y el oxígeno disuelto. El coeficiente de determinación en la etapa de validación para la RNA y el modelo ANFIS fue de 0.9683 y 0.9879.

Yilmaz *et al.* (2010) aplicaron tres diferentes técnicas de RNA; la Red Neuronal Perceptrón Multicapa, la Red Neuronal Base Radial y la Red Neuronal de Regresión Generalizada, para evaluar la DQO del efluente de un reactor anaerobio de flujo ascendente sobre un periodo de 130 días en diferentes concentraciones de cianuro. Las variables de entrada fueron la DQO del influente, el tiempo de retención hidráulica y la concentración de cianuro en el influente, y la variable de salida fue la DQO del efluente. Ellos encontraron que el mejor modelo fue el modelo de perceptrón multicapa con una estructura de red (5, 6, 1). Además, usaron como criterios para la evaluación del desempeño del modelo; la raíz de la media de los errores al cuadrado, la media absoluta de los



errores relativos, la media del error absoluto y el coeficiente de determinación. En la etapa de entrenamiento se obtuvieron valores de 104.8 mg/L, 12.2%, 64.8 mg/L y 0.983, respectivamente, y en la etapa de validación se obtuvieron 98.4 mg/L, 29.5%, 79.2 y 0.876, respectivamente. En cambio con la Red Neuronal Base Radial por ejemplo, que fue el segundo mejor en predicción, en la etapa de validación se obtuvieron valores del coeficiente de determinación y la media absoluta de los errores relativos de 0.751 y 37.4%, respectivamente.

3.3. MODELOS HÍBRIDOS

Lee *et al.* (2004) aplicaron un método de modelado híbrido paralelo a una PTAR contaminadas con coque, en la estructura del modelo híbrido, un modelo determinístico es la base dinámica del proceso y un modelo no paramétrico compensa la inexactitud de este modelo mecanístico. Primero un modelo mecanístico simplificado es desarrollado basado en el ASM 1 (por sus siglas en inglés; *Activated Sludge Model No. 1*, Modelo de Lodos Activados No. 1, Henze *et al.*, 1987 citado por Lee *et al.*, 2004) y el conocimiento específico del proceso de tratamiento de aguas residuales de coque. Entonces, el modelo mecanístico es combinado con cinco diferentes modelos no paramétricos (*feedforward backpropagation neural network*, *radial basis function network*, *linear partial least squares (PLS)*, *quadratic PLS* y *neural network PLS*) en una configuración paralela. Estos modelos son alimentados con los mismos datos obtenidos de la operación de la planta para predecir el desempeño dinámico del proceso. El desempeño de cada modelo híbrido paralelo es comparado en base a sus facilidades de construcción, exactitud en la predicción e interpretación del modelo. Para esta aplicación, el modelo híbrido paralelo con *neural network PLS* como modelo no paramétrico tuvo mejor desempeño que los otros modelos híbridos paralelos. Todos los modelos híbridos dieron mejores aproximaciones que el modelo mecanístico solo.

Recientemente, Fang *et al.* (2010) desarrollaron un modelo dinámico integrado (híbrido) a través de la combinación de un modelo mecanístico, una RNA y un modelo de algoritmo genético, con el fin de simular el desempeño de una PTAR municipal a gran escala con fluctuaciones significativas en el influente. Como base del modelo integrado, el modelo mecanístico inicialmente establecido estuvo basado en el modelo de lodos activados (ASM 3) y el módulo EAWAG bio-P, y fue usado para generar parte de los datos de entrada al modelo de redes neuronales. El modelo de RNA fue empleado para



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

construir la relación entre las variables de entrada y salida. Los pesos de la RNA fueron optimizados utilizando un modelo de algoritmo genético. El modelo integrado resultante fue aplicado para simular el desempeño de la PTAR en un tiempo de 5 meses, y los resultados de la simulación fueron comparados con los medidos en la planta. Comparado con los modelos mecanístico y de RNA individuales, el modelo integrado fue capaz de capturar suficiente información residual para compensar la inexactitud del modelo mecanístico y mejorar la capacidad de extrapolación del modelo de RNA. Los autores consideran que el estudio demostró que su modelo es una herramienta efectiva y útil para simular el desempeño de las PTAR.



4. JUSTIFICACIÓN, OBJETIVOS E HIPÓTESIS

En este capítulo se describe la justificación por la que se realiza este trabajo, los objetivos del mismo y la hipótesis establecida.

4.1. JUSTIFICACIÓN

La sedimentación es una de las principales operaciones unitarias en el tratamiento de las aguas residuales municipales, es por eso que contar con un modelo matemático que nos permita comprender a detalle la sedimentación nos da la oportunidad de manipular el proceso de tratamiento de las aguas residuales, en caso de ser necesario. El control en la operación de un sedimentador secundario en una planta de tratamiento por lodos activados es muy importante, ya que para la degradación óptima de la materia orgánica en el reactor, se debe mantener una concentración de sólidos suspendidos (microorganismos) en un rango que se considera ideal para dicha degradación, ésta es convencionalmente alrededor de 1.5 a 3 g/L. Por ello, los sólidos recolectados en el sedimentador secundario son recirculados hacia el reactor por lo que es necesario conocer la concentración de lodos recirculados hacia el mismo. Por otra parte, es deseable poder estimar también la concentración de sólidos suspendidos que permanecen en la corriente de salida del sedimentador pues éste debe cumplir con la normatividad vigente.

La tendencia en materia de modelado y simulación de sistemas ambientales, incluyendo el tratamiento de aguas residuales se orienta a la aplicación de técnicas de Dinámica de Fluidos por Computadora (CFD; por sus siglas en inglés, *Computational Fluid Dynamics*), la cual fusiona métodos numéricos y algoritmos para el análisis de flujos. El inconveniente con estas técnicas, es que los paquetes de cómputo disponibles son costosos y el tiempo computacional requerido para obtener las soluciones numéricas pueden ser elevados. Pocas organizaciones industriales usan este tipo de técnicas para estudiar los fenómenos de flujo en sus instalaciones de tratamiento de aguas residuales debido a los altos costos comerciales de las licencias de *software* (Martínez *et al.*, 2009).



Los modelos usados en este trabajo, ofrecen una forma más sencilla de la sedimentación de partículas, los cuales, apropiadamente calibrados y validados con información adicional, permiten tener los beneficios de estudio que ayudaría a resolver problemas operacionales con la finalidad de mejorar el desempeño de los equipos de sedimentación. A su vez, las mejoras en la operación permitirán obtener una mejor calidad del agua en el efluente de las planta de tratamiento.

4.2. OBJETIVOS

4.2.1. Objetivo general

Desarrollar un modelo híbrido determinístico-estocástico para mejorar la predicción de la concentración de sólidos suspendidos en la sedimentación por gravedad en un clarificador secundario que pertenece a una PTAR municipal de tipo lodos activados operando en Tabasco.

4.2.2. Objetivos particulares

- Reproducir el modelo clásico de sedimentación propuesto por Takács para la estimación de los sólidos suspendidos totales en función de la altura del clarificador secundario.
- Aplicar un modelo de Red Neuronal Artificial para la estimación de los sólidos suspendidos en el proceso de sedimentación por gravedad.
- Obtener un modelo híbrido resultante del acoplamiento de los modelos mecánico y estocástico para la mejora en la predicción de los sólidos suspendidos totales en función de la posición en un clarificador secundario.



4.3. HIPÓTESIS

El modelo híbrido, resultante de la combinación del modelo determinístico y el modelo de RNA propuesto en este trabajo, mejorará la predicción del perfil de concentraciones de sólidos suspendidos dentro de una unidad de sedimentación secundaria de escala real, en comparación con la predicción individual de cada uno de los dos modelos.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México



5.

MÉTODOS

En este capítulo se describen los métodos y técnicas usadas para resolver los modelos usados en este trabajo (Modelo de sedimentación de Takács, la red *backpropagation* y el Modelo Híbrido). Además se describe la obtención de la información experimental.

5.1. RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN EXPERIMENTAL

5.1.1. Descripción del proceso de la PTAR de Pomoca

La unidad de sedimentación secundaria que ha sido seleccionada como objeto de estudio, se localiza en la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) tipo Lodos Activados del Fraccionamiento Pomoca (Municipio de Nacajuca), en la zona conurbada de Villahermosa, Tabasco, con coordenadas $18^{\circ}03'11.64''$ Latitud Norte y $92^{\circ}56'02.57''$ Longitud Oeste. Una vista aérea de la planta en estudio y una fotografía de la vista principal de la misma, es mostrada en la Figura 10.

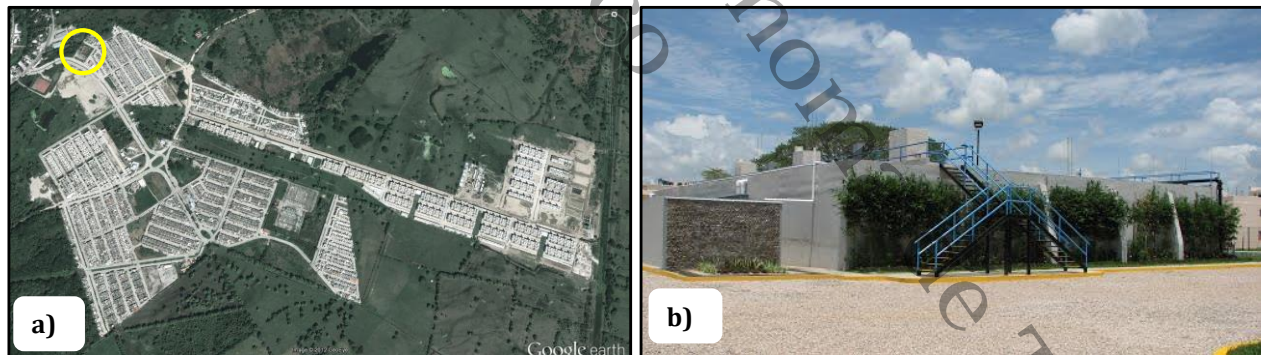


Figura 10. a) Vista aérea del fraccionamiento Pomoca, el círculo amarillo indica la ubicación de la PTAR, b) Fotografía de la vista principal de la planta. Las imágenes fueron extraídas de la herramienta *Google Earth*®

En esta planta, el agua residual proveniente del sistema de alcantarillado del Fraccionamiento Pomoca entra a un cárcamo, del cual es posteriormente bombeado directamente a los reactores. La planta cuenta con tres reactores que trabajan en paralelo, y cada reactor está conectado a un sedimentador secundario; y cada sedimentador a su vez está dividido en dos etapas de iguales



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

dimensiones (Figura 11). Cada etapa tiene una altura total de 4.5 m; en los primeros 2.5 m el sedimentador tiene una geometría de un paralelepípedo con un volumen de 60 m^3 aproximadamente y el resto es de tipo pirámide truncada invertida con un volumen de 23.8 m^3 aproximadamente. En la Etapa 1 entra el licor mezclado que sale del reactor; por lo tanto hay altas concentraciones de sólidos suspendidos, siendo en esta etapa donde se elimina una gran cantidad de éstos. En la Etapa 2 entra el agua tratada que sale de la primera; así que aquí es común encontrar concentraciones de sólidos mucho más bajas y es donde se busca reducir al mínimo la concentración de sólidos suspendidos. De esta manera se concluye que la Etapa 1 funciona como el espesador del sedimentador y la Etapa 2 como el clarificador. La salida del agua del sedimentador se conduce a un tanque de cloración para posteriormente ser vertido a un cuerpo de agua.

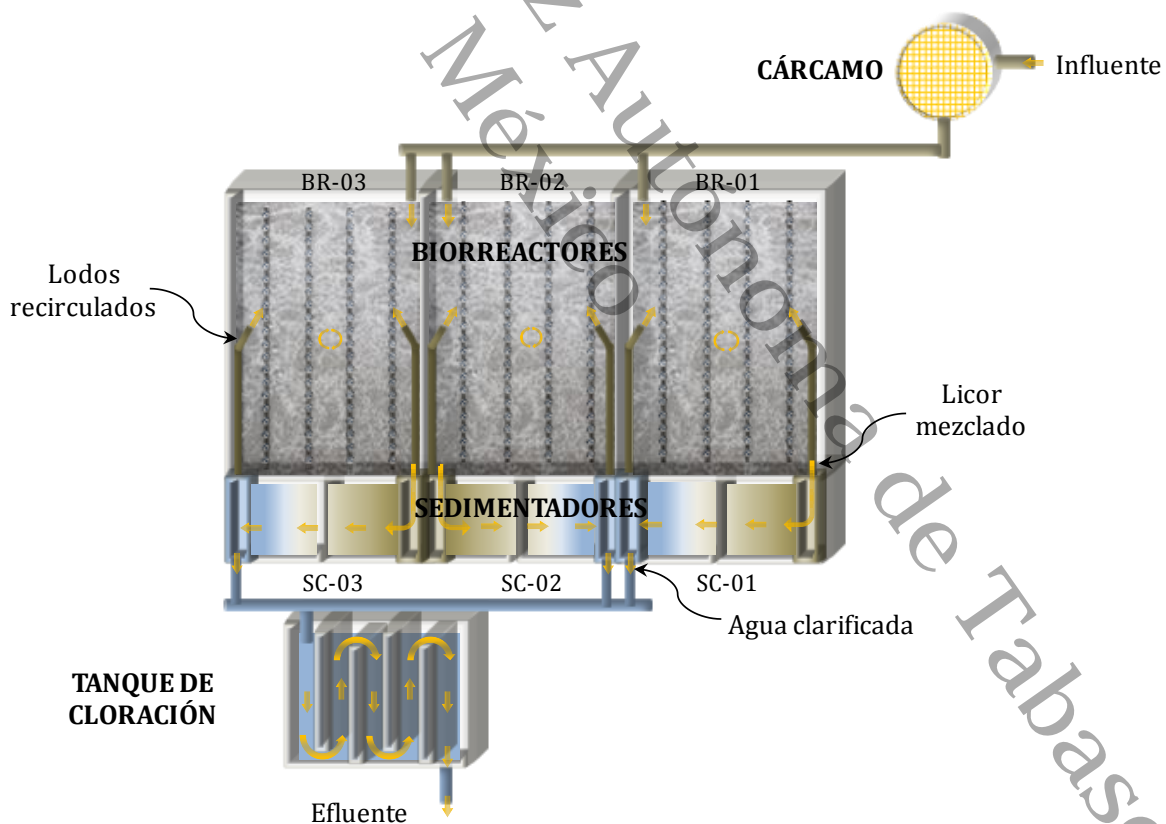


Figura 11. Diagrama que muestra el funcionamiento de la PTAR en estudio.



5.1.2. El muestreo

Con el fin de realizar la estimación de los parámetros óptimos de la ecuación de la velocidad de sedimentación de Takács, conformación de las bases de datos para alimentar la RNA, y posteriores experimentos con los tres diferentes modelos (modelo de Takács, modelo de RNA y el Modelo Híbrido resultante de la combinación de ambos), recientemente se realizó un muestreo en el sedimentador en cuestión a partir del cual se obtuvieron los datos requeridos (INITEC-UJAT, 2012).

El muestreo se realizó de acuerdo a los lineamientos y recomendaciones de la normatividad mexicana (NMX-AA-003-1980). Los parámetros medidos en campo fueron: temperatura, conductividad eléctrica, pH, turbiedad, color, sólidos sedimentables y sólidos disueltos totales. Estos parámetros se determinaron con una frecuencia de muestreo de 4 horas durante 7 días de muestreo. Se analizó la conveniencia de realizar el muestreo desde las 08:00 horas hasta las 04:00 horas del día siguiente, y debido a que la operación de la PTAR de Pomoca es de tipo intermitente (particularmente el sistema de aireación por difusores), se trató de que los equipos sopladores estuvieran encendidos unos 15 minutos antes de cada muestreo. Como criterio de conveniencia se evaluaron los flujos de entrada y salida del sedimentador por lo que se requirió aforar dichos caudales a la misma frecuencia de muestreo. Para conocer el perfil de turbiedad y SST dentro del sedimentador secundario en estudio, se recolectaron muestras simples tomadas a diferentes profundidades, y por cada una de ellas se midieron los parámetros de turbiedad y color. Además, se determinó en laboratorio la concentración de SST de una muestra representativa de una jornada diaria de muestreo (muestra compuesta) en varios puntos de muestreo, y a dichas muestras se les determinó en campo la turbiedad con el fin de encontrar una correlación que permita obtener valores de SST por cada dato de turbiedad.

Cabe mencionar que la información tomada no es exactamente igual en las dos etapas del sedimentador en relación a las profundidades a las que se tomaron las muestras. Ambas etapas coinciden en que se les recolectaron muestras a 1, 2, 2.5 y 3 metros de profundidad así como en el punto de recirculación que se estima que se encuentra aproximadamente a 2.7 m; la diferencia consiste en que a la Etapa 1 se le tomó muestras en la zona de alimentación que se estima que está aproximadamente a 1.7 m de profundidad y a la Etapa 2 se le tomó muestras al efluente que se



encuentra a 0.7 m. En total se tienen valores correspondientes a seis diferentes profundidades para cada etapa del sedimentador. La Figura 12 muestra un esquema general de la descripción del muestreo del sedimentador.

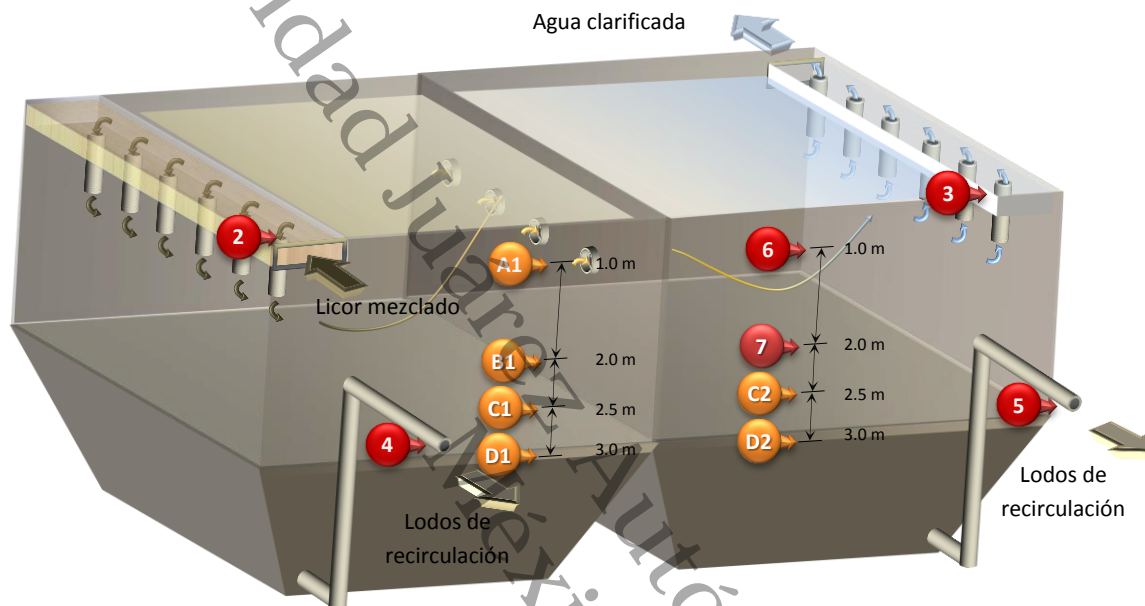


Figura 12. Definición de puntos de muestreo para la determinación de SST a diferentes profundidades en un Sedimentador Secundario de dos Etapas de la PTAR Pomoca. Los puntos de muestreo definidos por números son puntos de muestreo globales para el balance general de masa de Demanda Química de Oxígeno, Nitrógeno Total y Sólidos Suspendedos Totales (SST). Los puntos de muestreo definidos por letras son puntos específicos para determinar únicamente SST. El punto de muestreo (No. 1) en la corriente de lodos de desecho (en exceso) no es mostrado.

5.1.3. Pre-tratamiento de la información experimental

La base de datos original del muestreo no se utiliza directamente para realizar la ejecución de los experimentos de los modelos de este trabajo, ya que por las características de cada modelo, éstos necesitan información de entrada en forma particular. Por lo tanto, es necesario realizar un tratamiento a la información experimental con el fin de ejecutar los modelos de manera correcta.

El modelo de sedimentación de Takács requiere como información de entrada la concentración de SST a diferentes profundidades; sin embargo, éste es un parámetro difícil y costoso de determinar en laboratorio, además de la dificultad asociada al monitoreo de la calidad del agua dentro de un sedimentador a diferentes profundidades. Por su parte, el modelo de RNA requiere mucha



información de SST para realizar el entrenamiento y la validación. Finalmente, el modelo híbrido propuesto en este trabajo, que es la combinación de los dos anteriores, consecuentemente necesitará la misma información y, desafortunadamente, no fue posible llevar a cabo un muestreo en campo y un análisis de laboratorio tan extenso.

Por lo anterior, se recurrió a una técnica de correlación entre turbiedad y concentración de SST con el fin de generar suficiente información de SST para realizar los experimentos de los modelos. El desarrollo del modelo para realizar las correlaciones es mostrado en el Anexo A de este trabajo, en el cual se presentan las bases para realizar dicha correlación.

5.2. SOLUCIÓN DEL MODELO DE TAKÁCS

En este apartado se describen los métodos numéricos requeridos para la solución y estimación de parámetros del modelo de Takács.

5.2.1. Solución numérica del modelo determinístico de Takács

Como resultado de las suposiciones y la estructura del modelo, éste está constituido por un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) cuya variable independiente es el tiempo y donde n representa el número seleccionado de capas horizontales en las que se divide numéricamente al sedimentador. La selección del número de capas es un paso importante en la representación matemática de la sedimentación. Takács *et al.* (1991) encontró que un número de capas igual a 10 es suficiente para representar satisfactoriamente a la sedimentación. Por su parte, Diehl (1996), Watts *et al.* (1996) y Jeppsson (1996) emplearon entre 30 y 50 capas pero ellos incluyeron el término de dispersión axial en el modelo, por lo que el sistema de ecuaciones se transforma en ecuaciones diferenciales parciales (EDP) que requieren mayor rigor numérico (Jeppsson, 1996). En este estudio se probaron 10 capas tal y como lo propone Takács *et al.* (1991), ya que en este modelo según el trabajo de Watts, si se incrementa el número de capas a cerca de 20 o más disminuye su capacidad de predicción.

La solución del modelo dinámico requiere de una selección adecuada del método numérico. Si el modelo se emplea considerando los términos de acumulación en cada capa horizontal, entonces se



requiere de una técnica numérica para la solución de las EDO. Entre los métodos numéricos clásicos se encuentra la familia de Runge-Kutta. Estos métodos son altamente recomendables para sistemas de EDO no rígidos. En el caso de que el sistema de EDO sea un sistema rígido y que además se desacople a la expresión de Takács como una ecuación algebraica independiente de la EDO, se recomienda emplear métodos de diferencias regresivas para problemas de índice mayor. En este trabajo se ha considerado resolver el sistema EDO usando el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

5.2.2. Estimación numérica de los parámetros del modelo de la velocidad de sedimentación

Cuando sea requerido, el ajuste del modelo determinístico debe llevarse a cabo a partir de un método general de optimización no lineal. La estimación de parámetros en este proyecto, consiste en emplear el método de Newton-Raphson multivariable para generar nuevos valores de los parámetros físicos del modelo que mejoren la capacidad de predicción. La mejora de la capacidad de predicción se establece cuando se minimiza la función objetivo del método de optimización. Es deseable que esta función objetivo sea la misma que se selecciona como criterio de comparación durante la validación de los modelos.

El Método de Newton-Raphson multivariable puede emplearse para estimar los parámetros óptimos de un modelo matemático cuando se define una función objetivo que debe ser minimizada. En este apartado se describe brevemente el Método de Newton-Raphson multivariable y su aplicación en el ajuste del modelo unidimensional de sedimentación de acuerdo a las suposiciones y propuestas de Kynch, Vitasovic y Takács, tal y como se definió en apartados previos.

Selección de Parámetros para Estimación Numérica

En particular, el modelo unidimensional de sedimentación emplea la función doble exponencial de Takács para calcular la velocidad terminal de sedimentación. Esta función posee cuatro parámetros que pueden ser determinados numéricamente: la velocidad de sedimentación máxima teórica (v_0), la velocidad de sedimentación máxima práctica (v'_0), el parámetro de sedimentación a baja concentración (r_p), y el parámetro de sedimentación retardada (r_h).



Valores Iniciales y Límites Superior e Inferior de los Parámetros Seleccionados

De acuerdo a información experimental disponible a escalas piloto e industrial, diversos autores han propuesto valores para los cuatro parámetros de la función doble exponencial de Takács. Por citar algunos estudios, en la Tabla 2 se presentan algunos valores estimados numéricamente bajo condiciones de operación y suposiciones de modelo diferentes. Basados en estos datos, se usaron valores similares de acuerdo al caudal de entrada como valores iniciales. Los límites superior e inferior son aproximadamente igual al 200% y 50% del valor inicial, respectivamente.

Tabla 2. Valores de los parámetros del modelo de sedimentación de Takács publicados en la literatura especializada.

Parámetro	Caudal del influente, m ³ /h				
	360	450	600	256	250
	Takács <i>et al.</i> (1991)			Mulas (2006)	Jeppsson (1996)
v_0 (m/d)	214.2	370.0	172.8	210	145
v'_0 (m/d)	150.2	142.9	112.1	274	100
r_p (m ³ /g)	5.71×10^{-3}	2.86×10^{-3}	2.70×10^{-3}	2.50×10^{-3}	2.70×10^{-3}
r_h (m ³ /g)	3.64×10^{-4}	3.78×10^{-4}	2.93×10^{-4}	4.01×10^{-4}	4.20×10^{-4}

El Método de Newton-Raphson Multivariable

El método de Newton-Raphson multivariable es una generalización del método de Newton de una sola variable para la búsqueda de raíces de una función continua $f(x)$. Como resultado, se obtiene el esquema iterativo siguiente:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n - [Hf(\mathbf{X}_n)]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}_n) \quad (5.1)$$

En donde \mathbf{X} es definida para el caso del modelo de Takács de la siguiente manera:

$$\mathbf{X} = [v_0, v'_0, r_p, r_h] \quad (5.2)$$

$Hf(\mathbf{X}_n)$ es conocido como la matriz hessiana, o simplemente *el hessiano* el cual se define por las segundas derivadas de la función en términos del vector de variables \mathbf{X} :



$$Hf(\mathbf{X}_n) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

Relajación del Método de Newton-Raphson

En ciertas aplicaciones de optimización, el método de Newton-Raphson puede descender muy rápido causando problemas de convergencia o bien, puede descender muy lentamente hacia la convergencia. En tales casos, es computacionalmente práctico incluir un parámetro de relajación α en la Ecuación 5.1 para controlar el gradiente de convergencia:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n - \alpha [Hf(\mathbf{X}_n)]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}_n) \quad (5.4)$$

En el caso de un descenso muy rápido se recomienda sub-relajar la convergencia con $0 < \alpha < 1$. Por el contrario, cuando el descenso es muy lento se sugiere sobre-relajar la convergencia empleando $\alpha > 1$. Dado que este parámetro es arbitrario, no existe un procedimiento formal para su estimación por lo que el valor dependerá de la naturaleza del problema.

Cuando se emplea el Método de Newton-Raphson para la estimación de parámetros y éstos pueden ser varios órdenes de magnitud diferentes entre sí, es aconsejable considerar que el parámetro de relajación sea diferente para cada parámetro (vector \mathbf{X}). De acuerdo a lo anterior, se puede introducir un vector de parámetros de relajación α como se muestra a continuación:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n - \alpha [Hf(\mathbf{X}_n)]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}_n) \quad (5.5)$$

Además de los parámetros de relajación, una medida precautoria adicional consiste en establecer cambios máximos entre \mathbf{X}_n y \mathbf{X}_{n+1} los cuales suelen expresarse como un cambio porcentual. Los cambios máximos porcentuales pueden ser diferentes para cada parámetro de acuerdo a la sensibilidad exhibida. Por ello, es aconsejable realizar un análisis de sensibilidad de los parámetros



del modelo antes de establecer los cambios máximos porcentuales. Adicional a esto, se toma otra medida que consiste en establecer valores máximos y mínimos que puede alcanzar cada parámetro y del cual no pasará, esto sirve para mantener los valores de los parámetros en un rango deseado.

La función objetivo

Se ha definido previamente que f es una función de las variables contenidas en el vector \mathbf{X} . En la aplicación del método de Newton-Raphson a la estimación de parámetros del modelo unidimensional (los cuatro parámetros de la velocidad terminal de Takács) debe definirse la forma de la función objetivo a minimizar. Existe una serie de funciones que se emplean para comparar la capacidad de predicción de un modelo, la mayoría de ellas son constituidas por la sumatoria de las desviaciones de error. Las dos funciones objetivo más comunes son la *Sumatoria del Error al Cuadrado* (*SEC*, ver Ecuación 5.6) y la *Sumatoria de los Errores Relativos* (*SER*, ver Ecuación 5.7); ambas relacionan a las concentraciones experimentales de SST en cada capa definida en el modelo con las concentraciones calculadas por el mismo.

$$f(x) = \sum (y_{obs_i} - y_{est_i})^2 \quad (5.6)$$

$$f(x) = \sum \frac{abs(y_{obs_i} - y_{est_i})}{y_{obs_i}} \quad (5.7)$$

En este trabajo es incluida la *Sumatoria de Errores Relativos al Cuadrado* (*SERC*) como otra función objetivo con el fin de comparar resultados con otros autores, la cual está definida en la Ecuación 5.8.

$$f(x) = \sum \left(\frac{abs(y_{obs_i} - y_{est_i})}{y_{obs_i}} \right)^2 \quad (5.8)$$



donde y_{obs} es el vector que contiene los valores de los datos observados, y_{est} es el vector de los datos estimados por el modelo, i es el índice de un valor específico del vector.

Las diferencias finitas para la estimación de derivadas de una función

Una aproximación de una derivada en términos de un conjunto de valores discretos es llamada aproximación de diferencias finitas. Matemáticamente, las fórmulas de diferencias finitas se obtienen de una expansión en Series de Taylor de una función. Dependiendo del signo del incremento infinitesimal considerado en la expansión, así como del orden del truncamiento de la serie, pueden obtenerse aproximaciones para la primera y segunda derivada de una función tales como las que se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Diferencias finitas para la primera y segunda derivada de la función f con respecto a x .

Derivada	Aproximación de diferencias finitas	Tipo	Error
f_x	$\frac{f_{i+1}-f_i}{\Delta x}$ (5.9)	Progresiva	$O(\Delta x)$
	$\frac{f_i-f_{i-1}}{\Delta x}$ (5.10)	Regresiva	$O(\Delta x)$
	$\frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x}$ (5.11)	Central	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-f_{i+2}+4f_{i+1}-3f_i}{2\Delta x}$ (5.12)	Progresiva	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{3f_i+4f_{i-1}+f_{i-2}}{2\Delta x}$ (5.13)	Regresiva	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-f_{i+2}+8f_{i+1}-8f_{i-1}+f_{i-2}}{12\Delta x}$ (5.14)	Central	$O(\Delta x)^4$
f_{xx}	$\frac{f_{i+2}-2f_{i+1}+f_i}{(\Delta x)^2}$ (5.15)	Progresiva	$O(\Delta x)$
	$\frac{f_i-2f_{i-1}+f_{i-2}}{(\Delta x)^2}$ (5.16)	Regresiva	$O(\Delta x)$
	$\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{(\Delta x)^2}$ (5.17)	Central	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-f_{i+2}+16f_{i+1}-30f_i+16f_{i-1}-f_{i-2}}{12\Delta x}$ (5.18)	Central	$O(\Delta x)^4$

También pueden obtenerse aproximaciones para las segundas derivadas parciales con respecto a dos variables diferentes; para lo cual se ha hecho una recopilación de 8 fórmulas de diferencias finitas que mostraron ser más efectivas, cuando se hicieron comparaciones con ecuaciones derivadas analíticamente (Tabla 4).

Además, como su nombre lo indica, el incremento infinitesimal es un cambio infinitamente pequeño en la variable X . Los valores típicamente seleccionados para este incremento oscilan entre 1×10^{-1} y



1×10^{-10} para la estimación de la primera derivada, y entre 1×10^{-1} y 1×10^{-6} para el cálculo de la segunda derivada. Es aconsejable que el incremento infinitesimal de la segunda derivada sea al menos un orden de magnitud mayor que el incremento seleccionado en la estimación de la primera derivada. En el caso de que los valores del vector variable \mathbf{X} sean de órdenes de magnitud diferentes, podría preferirse expresar al incremento infinitesimal como un valor porcentual de cada valor contenido en el vector \mathbf{X} . De esta manera, se aconseja que el incremento infinitesimal oscile entre 0.1 y 1% del valor de \mathbf{X}_n para la estimación de la primera derivada y de un orden de magnitud mayor en la estimación de la segunda derivada.

Tabla 4. Diferencias finitas para la segunda derivada parcial mixta de la función $f(x,y)$

Derivada	Aproximación de diferencias finitas	Tipo	Error
f_{xy}	$\frac{f_{i-1,j-1} - f_{i,j-1} - f_{i-1,j} + 2f_{i,j} + f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j} - f_{i,j+1}}{2\Delta x \Delta y}$ (5.19)	P-R/R-P	$O(\Delta x)$
	$\frac{-(f_{i-1,j+1} - f_{i,j+1} - f_{i-1,j} + 2f_{i,j} + f_{i+1,j-1} - f_{i+1,j} - f_{i,j+1})}{2\Delta x \Delta y}$ (5.20)	P-P/R-R	$O(\Delta x)$
	$\frac{f_{i-2,j-2} - f_{i,j-2} - f_{i-2,j} + 2f_{i,j} + f_{i+2,j+2} - f_{i+2,j} - f_{i,j+2}}{8\Delta x \Delta y}$ (5.21)	P-R/R-P	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-(f_{i-2,j+2} - f_{i,j+2} - f_{i-2,j} + 2f_{i,j} + f_{i+2,j-2} - f_{i+2,j} - f_{i,j+2})}{8\Delta x \Delta y}$ (5.22)	P-P/R-R	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1} - f_{i-1,j+1} + f_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y}$ (5.23)	C-C	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{f_{i+1,j+2} - f_{i+1,j-2} - f_{i-1,j+2} + f_{i-1,j-2}}{8\Delta x \Delta y}$ (5.24)	C-C	$O(\Delta x) (\Delta y)^2$
	$\frac{f_{i+2,j+1} - f_{i+2,j-1} - f_{i-2,j+1} + f_{i-2,j-1}}{8\Delta x \Delta y}$ (5.25)	C-C	$O(\Delta x)^2 (\Delta y)$
	$\frac{f_{i+2,j+2} - f_{i+2,j-2} - f_{i-2,j+2} + f_{i-2,j-2}}{16\Delta x \Delta y}$ (5.26)	C-C	$O(\Delta x \Delta y)^4$

Aplicación de las diferencias finitas al Método de Newton-Raphson Multivariable

El método de Newton-Raphson Multivariable utiliza diversas derivadas numéricas, tanto de primer como de segundo orden para calcular los nuevos valores de los parámetros. Estas derivadas se calculan con las fórmulas de diferencias finitas, de las cuales se ha hablado previamente. De estas fórmulas, es posible recopilar varias con el fin de tener varias opciones de cálculo al momento de ejecutar el método de optimización. Las opciones son definidas según el tipo de derivada numérica y orden de éstas, además del tamaño del incremento de los parámetros.



5.2.3. Ajuste del modelo para diferentes geometrías del sedimentador

El modelo clásico de Takács fue propuesto originalmente para un sedimentador cilíndrico, sin embargo, el sedimentador secundario que es analizado en este trabajo posee un área de sección transversal rectangular con un cono invertido en la parte inferior (tipo tolva). Por lo tanto, se ha modificado el modelo de Takács para considerar diferentes geometrías del clarificador, particularmente aquellos con área de sección transversal variable.

Como consecuencia, además de la geometría tradicional que es la cilíndrica, se adicionan dos más; la primera es la de tipo cilíndrica en la parte superior con tolva tipo cono truncado invertido, la segunda es de tipo paralelepípedo en la parte superior con tolva tipo pirámide truncada invertida.

Para realizar este ajuste dentro del modelo de Takács se modificó el concepto de las capas equidistantes, considerando como criterio el volumen y no el espesor de las capas, de tal manera que el sedimentador se divide en n capas que poseen el mismo volumen.

5.2.4. Preparación de los datos de entrada al modelo determinístico

Como se ha dicho en apartados anteriores, se cuenta con información de turbiedad tomada en un muestreo de 7 días, la cual es utilizada por una curva de correlación para generar la misma cantidad de información pero de SST, que es la que se utiliza para el modelo determinístico. A su vez, también se ha mencionado que por cada etapa del sedimentador, se cuenta con valores de concentración de SST a 6 diferentes profundidades. Pero se ha propuesto dividir al sedimentador en estudio en 10 capas, por lo tanto, el perfil inicial de concentración de SST debe contener 10 valores a diferentes profundidades.

Para cada etapa de sedimentador, se clasificó toda la información de acuerdo al caudal de entrada con el fin de formar dos o tres conjuntos de datos que correspondan a diferentes caudales promedio (baja, media o alta tasa de flujo). Después, una inspección a la información experimental permitió establecer que la Etapa 1 del sedimentador se comporta como una etapa de espesamiento mientras que la Etapa 2 se comporta como una etapa de clarificación, generándose entonces, para cada tasa de flujo promedio una curva compuesta, que se obtiene superponiendo los datos medidos en los



puntos de muestreo de la Etapa 2 sobre los datos de la Etapa 1. Cada curva compuesta es un perfil de concentraciones con 12 valores de SST que representa al sedimentador secundario como una sola unidad. Estos perfiles fueron ajustados matemáticamente por interpolación para que al final se obtuviera un perfil de concentraciones de SST con 10 valores por cada caudal promedio (Figura 13).

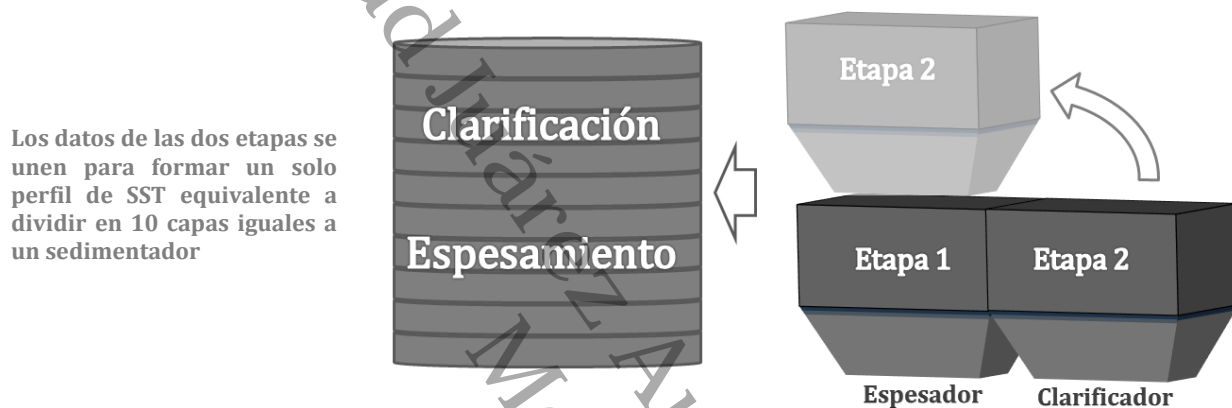


Figura 13. Suposición de una curva compuesta de las dos etapas del sedimentador.

5.3. DESARROLLO DEL MODELO DE RED NEURONAL ARTIFICIAL

Como se mencionó en el Apartado 2.10.2 la *Backpropagation* es una RNA fundamentada en el Perceptrón Multicapa; es decir, la topología de la red *Backpropagation* es el Perceptrón Multicapa, y el algoritmo con el cual se realiza el entrenamiento de esta red (optimización de pesos) es al que se denomina *Backpropagation* (retro-propagación del error) por la forma en que realiza el aprendizaje. A continuación se describe este modelo de RNA así como la conformación de la base de datos y la topología de la red.

5.3.1. Descripción de la RNA *Backpropagation* y el algoritmo de aprendizaje

Rumelhart, Hinton y Williams en 1986, basándose en los trabajos de Werbos (1974) y Parker (1982) formalizaron un método para que una RNA aprendiera la asociación que existe los patrones de entrada a la misma y las salidas correspondientes. Este método conocido en general como *Backpropagation* está basado en la generalización de la *regla delta* (Hilera y Martínez, 2000).



Regla delta generalizada

El método que sigue la regla delta generalizada se basa en la actualización de los pesos en forma proporcional a la delta, o diferencia entre la salida deseada y la obtenida (i.e. $\delta = \text{salida deseada} - \text{salida obtenida}$).

Dada una neurona (unidad U_i) y la salida que produce y_i , el cambio que se produce en el peso de la conexión que une la salida de dicha neurona con la unidad U_j (w_{ji}) para un patrón de aprendizaje p determinado es:

$$\Delta w_{ji}(t + 1) = \alpha \delta_{pj} y_{pi} \quad (5.27)$$

donde el subíndice p se refiere al patrón de aprendizaje concreto y α es la constante o tasa de aprendizaje.

El punto en el que difieren la regla delta generalizada de la regla delta es el valor concreto de δ_{pj} . Por otro lado, en las redes multinivel, a diferencia de las redes sin neuronas ocultas, en principio no se puede conocer la salida deseada de las neuronas de las capas ocultas para poder determinar los pesos en la función de error cometido. Sin embargo, inicialmente sí podemos conocer la salida deseada de las neuronas de salida. Según esto, si consideramos la *unidad U_j de salida*, entonces definimos:

$$\delta_{pj} = (d_{pj} - y_{pj})f'(Net_j) \quad (5.28)$$

donde d_{pj} es la salida deseada de la neurona j para el patrón p y Net_j es la entrada neta que recibe la neurona j .

Algoritmo Backpropagation

Este algoritmo es aplicable a una red formada por una capa de entrada, una capa de salida y al menos una capa oculta. Tomando en cuenta que la información es ingresada a la red por patrones, cabe mencionar que las expresiones siguientes se ejecutan para cada patrón que es presentado.



El aprendizaje se realiza mediante la utilización de un conjunto predefinido de pares de entradas-salidas dados como ejemplo; dicho proceso emplea un ciclo definido como propagación-adaptación de dos fases.

Primero se aplica un patrón de entrada como estímulo para la primera capa de neuronas de la red, éste se propaga a través de todas las capas superiores hasta generar una salida. La información de entrada es presentada a la primera capa de la red, la cual debe tener tantas neuronas como variables de entrada existan. Estas neuronas almacenan los valores de entrada y los transfieren hacia adelante para calcular las entradas a las siguientes neuronas.

La entrada a las neuronas de las capas ocultas y la de salida se obtiene mediante la suma neta expresada en la Ecuación 2.18 que por comodidad se reproduce aquí nuevamente:

$$Net_j = \sum_i y_i w_{ji} \quad (2.18)$$

donde j es la j -ésima neurona de la capa que recibe el estímulo mediante la suma pesada de las neuronas de la capa anterior ($i = 1..n$), y es la variable que representa la salida de las neuronas de la capa anterior, w es la variable que representa la matriz de pesos correspondiente y Net_j es la entrada neta a la neurona j . Esta suma es procesada por la función de transferencia mostrada en la Ecuación 2.19 que nuevamente se reproduce aquí y la cual genera una salida en cada neurona de la capa referida, que se convierte en la entrada para la siguiente capa, así sucesivamente hasta la capa de salida.

$$y_j = f_j(Net_j) \quad (2.19)$$

donde f representa a la función de transferencia, la cual puede ser alguna de las que se mencionaron anteriormente en la Figura 8.



Se compara el resultado obtenido en las neuronas de salida con la salida que se desea obtener y se calcula un valor de error para cada neurona de salida (Ecuación 5.29).

$$E = \frac{1}{2} \sum_i (d_j - y_j)^2 \quad (5.29)$$

donde E es el error global y d_j es el valor deseado para la neurona j .

A continuación, estos errores se transmiten hacia atrás, partiendo de la capa de salida, hacia todas las neuronas de la capa intermedia que contribuyan directamente a la salida, recibiendo el porcentaje de error aproximado a la participación de la neurona intermedia en la salida original. Este proceso se repite por cada capa, hasta que todas las neuronas de la red hayan recibido un error que describa su aportación relativa al error global. Basándose en valor del error recibido, se reajustan los pesos de conexión de cada neurona, de manera que en la siguiente vez que se presente el mismo patrón, la salida esté más cercana a la deseada; es decir, el error disminuya. Lo anterior se repite con todos los patrones de entrada disponibles, al concluir los cálculos con el último patrón se dice que ya ha transcurrido una época. Se realizan las épocas que sean necesarias hasta que el error descienda al valor mínimo posible.

Este paso es muy importante, ya que es en éste donde se lleva a cabo la modificación de los pesos. Para este propósito se utiliza el *factor de aprendizaje* (α), el cual cabe repetir que debe ser un número (entre 0 y 1). Un valor pequeño significa que la red tendrá que hacer una gran número de épocas o iteraciones. Si es muy grande, los cambios de pesos son muy grandes, avanzando muy rápidamente por la superficie del error, con el riesgo de saltar el mínimo y estar oscilando alrededor de él, pero sin poder alcanzarlo. Es recomendable comenzar el aprendizaje de una red con valores de α grandes y así, acercarse rápidamente al mínimo. Cuando el error comience a oscilar se recomienda disminuir gradualmente el valor de alfa para dar pasos cada vez más pequeños y no saltar el mínimo, y de esta manera conseguir que el error baje al valor mínimo posible.

Otro parámetro que es utilizado para la actualización de la matriz de pesos es el momento (β), que es una constante que determina el efecto en $t+1$ del cambio de los pesos en el instante t . Con éste



momento se consigue la convergencia de la red en menor número de iteraciones, ya que si en t el incremento de un peso era positivo y en $t+1$ también, entonces el descenso por la superficie de error en $t+1$ es mayor. Sin embargo, si en t el incremento era positivo y en $t+1$ es negativo, el paso se da en $t+1$ es más pequeño, lo cual es adecuado, ya que eso significa que se ha pasado por un mínimo y que los pasos deben ser menores para poder alcanzarlo.

Así, la actualización de los pesos se realiza de la siguiente manera:

$$w_{ji}(t + 1) = w_{ji}(t) + [\Delta w_{ji}(t + 1)] \quad (5.30)$$

$$\Delta w_{ji}(t + 1) = \alpha \delta_j y_i + \beta \Delta w_{ji}(t) \quad (5.31)$$

$$\delta_j = (d_j - y_i) f'(Net_j) \quad \text{si es una neurona de salida} \quad (5.32)$$

y

$$\delta_j = \left(\sum_k \delta_k w_{kj} \right) f'(Net_j) \quad \text{si es una neurona oculta} \quad (5.33)$$

donde k es el índice que hace referencia a una neurona que pertenece a la capa posterior a la capa actual.

Cuando el procedimiento anterior se realiza inicialmente, los valores de los pesos (w) y los cambios de los pesos (Δw) se inicializan con valores aleatorios normalmente entre 0 y 1.

La importancia de la red *backpropagation* consiste en su capacidad de autoadaptar los pesos de las neuronas de las capas intermedias para aprender la relación que existe entre un conjunto de patrones dados como ejemplo y sus salidas correspondientes. La Figura 14 describe de manera detallada y resumida el algoritmo de entrenamiento y validación de este modelo. Para este estudio, la red neuronal propuesta fue programada con apoyo de *Visual Basic for Applications of Excel* en el cual se programó una interfaz que permite definir una topología de red de hasta 5 capas ocultas.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

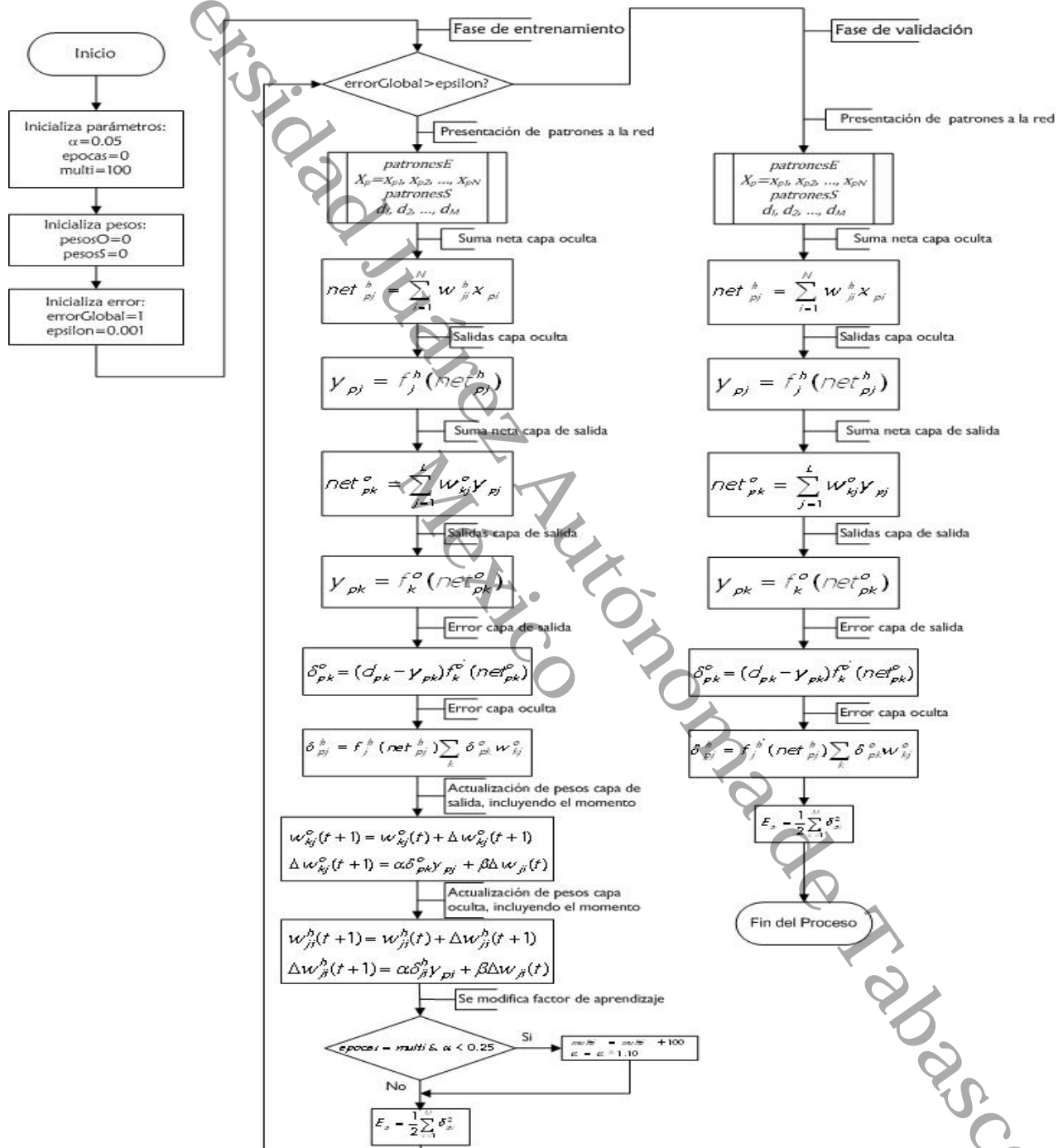


Figura 14. Diagrama de flujo del modelo de red neuronal multicapa con aprendizaje Backpropagation (Baeza, 2010).



5.3.2. Conformación de bases de datos

La topología de la red es la de tipo perceptrón multicapa con una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida. El número de neuronas de la capa oculta quedó determinado por la información de entrada a la red y las neuronas de la salida, en este caso, fue dado por el parámetro a estimar. Para definir las neuronas de la capa oculta se diseñaron diversos experimentos, para lo cual se requirió organizar la información de acuerdo a los siguientes criterios:

- *Parámetros:* la base de datos original tiene información de turbiedad a diferentes profundidades, pero empleando una curva de correlación entre este parámetro y los sólidos suspendidos, los experimentos se pueden realizar tanto para turbiedad como para sólidos suspendidos.
- *Etapas del sedimentador:* Se obtuvo información de las dos etapas del sedimentador, por lo que se tiene prácticamente la misma cantidad de información para cada etapa y los experimentos se pueden realizar para cada una por separado.
- *Normalización:* la información que se introduce a la red en ocasiones debe ser normalizada para evitar diferencias considerables en el orden de magnitud de los datos; y así, lograr que la minimización del error global sea más rápida y/o efectiva.

En referencia a los parámetros, para conformar las bases de datos de los experimentos numéricos se emplearon a la turbiedad y a la concentración de los sólidos suspendidos; el color no se consideró porque la turbiedad tiene más relación con la concentración de sólidos suspendidos, que es el parámetro con más relevancia en este trabajo por fines de comparación.

La información de los parámetros antes mencionados se obtuvo de un muestreo realizado durante siete días iniciando el ciclo de muestreo a las 8:00 horas, cada cuatro horas, hasta las 4:00 horas del día siguiente. En cada hora se registraron datos en seis profundidades diferentes en ambas etapas del sedimentador. La base de datos está constituida por 42 patrones, donde cada uno contó con 7 valores diferentes (hora de muestreo y valores de turbiedad o sólidos suspendidos a seis



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

profundidades), siendo los elementos del patrón el número de neuronas de la capa de entrada (Tabla 5).

Tabla 5. Valores de las neuronas de entrada a la red según la etapa del sedimentador

Neurona	Valores
1	Hora en que se tomó muestra
2	Información a profundidad *
3	Información a profundidad **
4	Información a profundidad 2.0 m
5	Información a profundidad 2.5 m
6	Información a profundidad 2.7 m
7	Información a profundidad 3.0 m

* 1 y 0.7 m para Etapa 1 y Etapa 2, respectivamente

** 1.7 y 1 m para Etapa 1 y Etapa 2, respectivamente

Con la información muestreada es posible realizar diversas combinaciones de los parámetros para el entrenamiento; sin embargo, se eligieron dos formas diferentes de conformar las bases de datos, que de acuerdo a la lógica usada en este trabajo, se consideraron los más adecuados para lograr el aprendizaje de la red. Se eligió un 70% de los datos para la fase entrenamiento y el resto para la validación.

Con relación a la normalización de datos, este procedimiento consiste en transformar temporalmente todos los valores de una serie de datos en valores que tengan el mismo orden de magnitud; por ejemplo entre 0 y 1, lo que nos ayuda a distribuir de forma uniforme los valores de entrada en una escala uniforme para que no distorsionen los resultados del análisis en casos extremos. Algunas fórmulas de normalización que se pueden usar son las que menciona Baeza (2010):

$$V_{Norm} = A \left(\frac{Valor - \bar{X}}{\bar{X}} \right) + B \tag{5.34}$$

$$V_{Norm} = A \left(\frac{Valor - V_{mín}}{V_{máx} - V_{mín}} \right) + B \tag{5.35}$$

$$V_{Norm} = A \left(\frac{Valor}{V_{máx}} \right) + B \tag{5.36}$$



donde V_{Norm} es el valor normalizado, $Valor$ es el valor real; \bar{X} , V_{min} y V_{max} son la media, el valor mínimo y el máximo de la serie de datos a normalizar, respectivamente. A y B son coeficientes con los cuales se puede trabajar para generar valores normalizados en un rango deseado, estos valores se determinan de manera arbitraria.

Debido a que existen diversas formas para agrupar los datos con el propósito de realizar experimentos numéricos para el entrenamiento de la red neuronal, a continuación se describen los esquemas experimentales que fueron analizados en este estudio.

Esquema 1

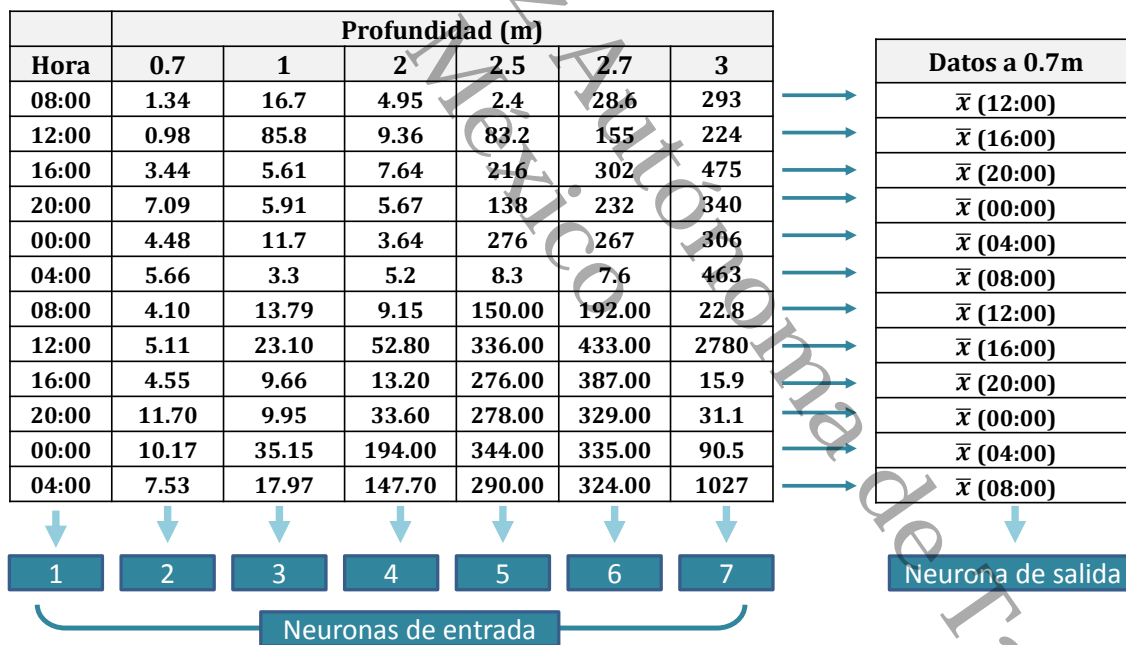
En este primer Esquema del diseño de experimentos, se tomaron los patrones de cinco días de muestreo para el entrenamiento. Un día de muestreo equivale a seis patrones, por lo tanto, cinco días de muestreo son 30 patrones, el 71% de los datos. El resto se usó para la validación. Como los datos fueron tomados cada cuatro horas de manera continua durante los siete días, se afirma que existe una relación entre la información registrada en un tiempo t y la información registrada en el tiempo $t+1$. De esta manera, se busca que la información de las 08:00 horas se asocie con la información de las 12:00, la información de las 12:00 se asocie con la de las 16:00 horas, y así sucesivamente.

El método de entrenamiento del modelo neuronal se realizó de la siguiente manera: se presenta el primer patrón, que cuenta con los datos tomados a las 08:00 horas en capa de entrada de la red, éste es asociado con el promedio de los datos recolectados a las 12:00 horas de los siete días a cada profundidad en la capa de salida, el patrón de las 12:00 horas se asocia con el promedio de los datos a las 16:00 horas y este proceso se repite hasta lograr el entrenamiento de la red para la predicción de los parámetros.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Lo que se pretende es predecir el perfil de concentración de SST a diferentes profundidades, es decir, que con la información de entrada a la primera capa de la red, a una hora determinada, se obtengan las predicciones a las diferentes profundidades, en la siguiente hora de muestreo. Pruebas preliminares permitieron observar que la asociación de un patrón de entrada con 6 valores en la capa de salida genera errores globales muy grandes durante el entrenamiento, y a menor número de neuronas de salida es menor el valor inicial del error global en el entrenamiento. Por lo tanto, se realizó un experimento para cada profundidad, quedando conformada la topología de la red con 7 neuronas en la capa de entrada y 1 neurona en la capa de salida. La Figura 15 muestra la forma en que se lleva a cabo el entrenamiento de la red de acuerdo al Esquema 1 con los datos experimentales.



Cada columna es la información que entra a una neurona
 Cada fila es un patrón

Figura 15. Muestra visual del Esquema 1 de entrenamiento realizado en este trabajo, usando como ejemplo 12 patrones de uno de los conjuntos de datos.



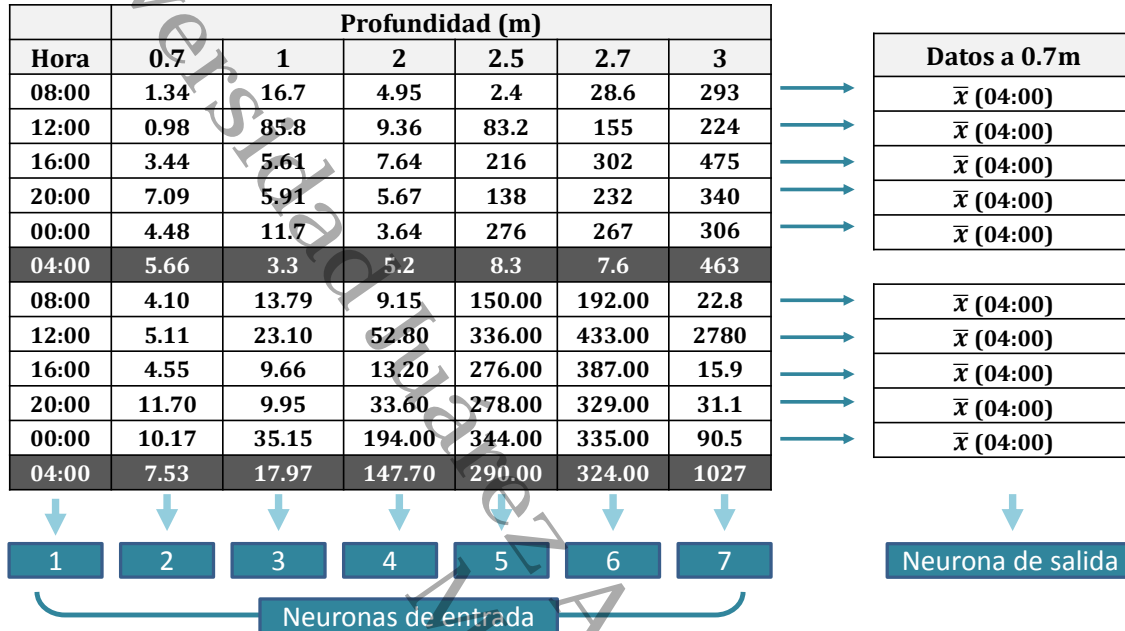
De esta manera se efectuaron experimentos para turbiedad y sólidos suspendidos totales para predecir los valores de concentración a las seis diferentes profundidades en cada etapa del sedimentador, haciendo un total de 24 experimentos realizados con el Esquema 1.

Esquema 2

Siguiendo con la afirmación de que los datos tomados en un tiempo determinado t están relacionados con los datos tomados en el tiempo $t+1$ y éstos con los tomados en el tiempo $t+2$ y así sucesivamente; este Esquema de entrenamiento consiste en asociar de manera ordenada todos los datos disponibles de 5 diferentes horarios con un horario en particular. Por ejemplo, se toman los datos muestreados a las 8, 12, 16, 20 y 24 horas para entrenar la red, para predecir la concentración del parámetro en cuestión a las 4:00 horas del día siguiente y así sucesivamente.

Al igual que en el Esquema 1, se usan los primeros cinco días de muestreo para el entrenamiento, pero en este caso, para cada día, se extrae la fila de datos correspondientes al horario a predecir. De esta extracción queda una matriz de valores tomados a una misma hora y a diferentes profundidades, y de ésta se calculan promedios para tener un valor por cada profundidad y cada uno de estos promedios calculados se usa como valor en las neuronas de la capa de salida de red. Los datos no extraídos son los que se usan como valores de entrada para la primera capa de la red (Figura 16). Para el Esquema 2 se realizaron experimentos para turbiedad y sólidos suspendidos totales para cada profundidad y para cada hora muestreada. El total de experimentos a realizar con este Esquema de entrenamiento muestra claramente que es necesario realizar más experimentos que con el Esquema 1.

De esta manera se realizaron experimentos para turbiedad y sólidos suspendidos totales para predecir los valores de concentración a las seis diferentes profundidades en cada etapa del sedimentador y por cada horario, haciendo un total de 144 experimentos realizados con el Esquema 2.



Cada columna es la información que entra a una neurona
 Cada fila es un patrón, y los patrones marcados en color oscuro son los que se extraen del conjunto de patrones en el caso de las 04:00 horas

Figura 16. Muestra visual del Esquema 2 de entrenamiento realizado en este trabajo, usando como ejemplo 12 patrones de uno de los conjuntos de datos.

5.3.3. Elección de topologías de la RNA

El número total de experimentos diseñados para los Esquemas 1 y 2 se replican para diferentes topologías de red, en el que se consideran distintos números de neuronas en la capa oculta. Por fines prácticos y por ser una manera sencilla de resolver muchos problemas, las neuronas de la capa oculta de la red serán elegidas por el método de prueba y error, ya que existen técnicas de optimización más precisas para la selección de la mejor topología, pero resultan ser más complejas y costosas en tiempo; un ejemplo de esto son los *algoritmos genéticos*. Se proponen diferentes topologías para la red, las cuales cambian principalmente en el número de capas y en el número de neuronas de la capa oculta. Como resultado, se elige la topología con la mejor predicción.



5.4. DESARROLLO DEL MODELO HÍBRIDO

El modelo híbrido se propone que funcione de tal manera que la RNA quede asociada al modelo de sedimentación de Takács, el cual es un modelo que a partir de información previa nos genera como salida la concentración de SST a diferentes profundidades a un tiempo dado. El modelo *backpropagation*, debido a que es un modelo capaz de obtener predicciones a partir de casi cualquier tipo de datos, se propone que sea alimentado con la salida del modelo determinístico, prediciendo la concentración de los sólidos a partir de los errores obtenidos por el modelo determinístico (Figura 17); en esta figura, la variable P representa la profundidad del sedimentador y t el tiempo. Una vez obtenidos los resultados de los tres modelos (determinístico, estocástico e híbrido), se hace una comparación con el fin de evaluar sus desempeños.

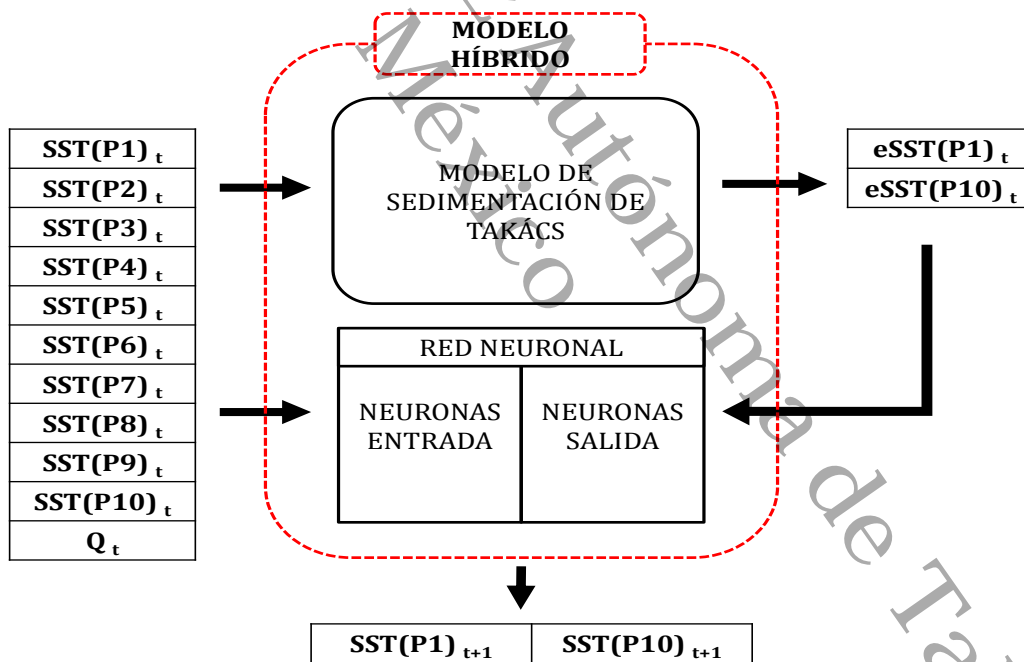


Figura 17. Esquema que representa el funcionamiento del modelo híbrido propuesto en este trabajo.

Podríamos clasificar el funcionamiento del modelo híbrido en tres pasos importantes para realizar las predicciones que se compararán con los modelos por separado.



5.4.1. Paso 1 - Ejecución de Modelo Determinístico

Una vez que se ha hecho el ajuste del modelo determinístico, se procede a realizar simulaciones con todos los datos de SST; que deben estar ordenados en una matriz de n filas por m columnas, donde n es el número de conjuntos de datos a diferentes tiempos que alimentarán al modelo determinístico, y m es el número de profundidades o capas en las que se divide el sedimentador. Cada fila es un perfil de concentraciones iniciales que junto con el valor del caudal, alimentan el modelo y mediante el cual se obtiene un perfil de concentraciones predichas a un tiempo de simulación dado. Cabe resaltar que debido a la suposición mencionada en los métodos (flujo permanente y estado estacionario), después del tiempo de simulación, las concentraciones esperadas son las mismas concentraciones iniciales. Así, se calculan las diferencias entre los valores esperados y los valores obtenidos por el modelo, generando una matriz de diferencias o errores, de dimensión n por m . Estos errores se obtienen calculando la diferencia absoluta entre el valor observado y el valor simulado.

5.4.2. Paso 2 Entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido

El modelo de RNA está compuesto de dos etapas que son el entrenamiento y la validación, por tal razón, la mayor parte de la matriz de errores generada por el modelo determinístico se usa para el entrenamiento y el resto para la validación. La red neuronal se entrena para predecir los errores que genere el modelo determinístico. Para ello, se usa como entrada a la red, las concentraciones iniciales usadas por el modelo determinístico, la hora a la que pertenece el patrón y el valor del caudal, haciendo para este caso un total de 12 variables en la capa de entrada. Esta información es asociada al promedio de los errores generados por el modelo de sedimentación de Takács a las diferentes profundidades y horarios, de manera que la red aprenda a predecir los errores correctamente. Esto se realiza tanto en el entrenamiento como en la validación y la información de entrada debe ser normalizada de acuerdo a como se ha descrito en apartados anteriores.

5.4.3. Paso 3 - Salida del Modelo Híbrido

Una vez entrenada la red, el modelo híbrido toma como entrada un nuevo patrón de valores iniciales, el cual es introducido al modelo determinístico para que devuelva un perfil de concentraciones simulado, por otro lado, el mismo patrón de valores iniciales se introduce a la red neuronal para predecir el error que generará el modelo determinístico. Finalmente, los valores



obtenidos por el modelo determinístico a cada profundidad, se suma (o resta, según sea el caso) con el error predicho por el modelo estocástico a la profundidad correspondiente. Lo anterior se repite para todos los patrones disponibles.

El criterio para saber si los errores predichos por la RNA son sumados o restados a la salida del modelo de sedimentación de Takács es denominado *sesgo fraccional*, el cual ha sido usado por (Vlachogianni, 2010) de acuerdo a la Ecuación 5.37.

$$S = 2 \left(\frac{\bar{O} - \bar{P}}{\bar{O} + \bar{P}} \right) \quad (5.37)$$

donde S es el sesgo fraccional, \bar{O} es el promedio de los valores observados y \bar{P} el promedio de los valores predichos por el modelo de sedimentación. El resultado de esta ecuación nos devuelve un valor que puede ser positivo o negativo; si es positivo indica que en esa serie de datos predomina la subpredicción y si es negativo indica lo contrario, que predomina la sobrepredicción. Así que al resultado se le extrae el signo y con base en éste se suma o resta el error predicho al valor de salida del modelo de sedimentación. Esto es, si el signo es negativo, se le resta el error al valor de salida del modelo determinístico y en caso contrario, se le suma a éste.

De acuerdo a la hipótesis establecida en esta investigación, se espera que los resultados sean mejores que los obtenidos con el modelo determinístico y el estocástico por separado, usando los mismos valores de entrada.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México



6.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos de acuerdo a la metodología planteada y se realiza una discusión de ellos. Los resultados incluyen algunas figuras y tablas.

6.1 RESULTADOS DEL MODELO DETERMINÍSTICO

6.1.1. Dinámica del modelo de sedimentación de Takács

Una vez programado este modelo, se procedió a realizar experimentos con el fin de corroborar que los resultados tuvieran una tendencia lógica con relación al funcionamiento de un sedimentador. Como se menciona en el apartado de la metodología de este trabajo, se configuró el modelo para simular 10 capas para todos los experimentos, por lo tanto, se tienen 10 series de valores de concentración con respecto al tiempo de simulación, que se pueden graficar de manera independiente en dos dimensiones, o agrupadas en un solo plano en tres dimensiones. Por practicidad se muestra en la Figura 18 una gráfica en tres dimensiones en la que se observa el comportamiento de los SST con respecto al tiempo a las diferentes profundidades a las que se encuentran las capas. Este primer experimento ha permitido conocer el efecto de las condicionantes del modelo de Takács sobre el perfil de concentraciones (Ecuaciones 2.9 y 2.10). Estas restricciones del modelo de Takács causan una distorsión en la predicción del perfil de sólidos suspendidos y, según Watts *et al.* (1996), este modelo con restricciones disminuye aún más su capacidad de predicción cuando se desea dividir conceptualmente al sedimentador en un mayor número de capas, por ejemplo, 20 y 50 capas.

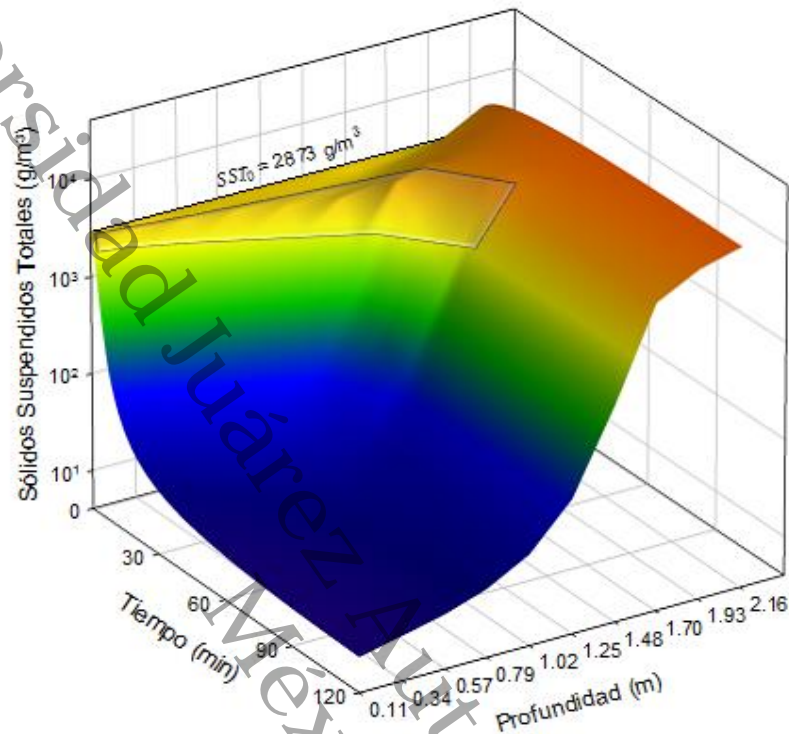


Figura 18. Comportamiento dinámico de los SST en un sedimentador secundario para un tiempo de retención hidráulica, concentraciones iniciales para las 10 capas del modelo de Takács y otros parámetros, de acuerdo al Caso 1 de los datos de Pflanz. Los parámetros de Takács son tomados de la Tabla 2 de este trabajo. El área acotada indica las discontinuidades provocadas por las restricciones de Takács. Se fijó una concentración inicial igual a $2,872 \text{ g/m}^3$ para todas las capas.

6.1.2. Optimización de los parámetros del modelo de Takács

La herramienta de optimización no lineal de Newton-Raphson Multivariable reproducida en este trabajo fue usado para la optimización de los parámetros del modelo de Takács. Este apartado consta de dos partes importantes; la primera es la optimización de los parámetros usando la información que usó Takács *et al.* (1991); ésta se realiza con la finalidad de validar el modelo de optimización. La segunda parte se trata de la aplicación del modelo de optimización a un caso real, que es el uso de la información de muestreo recolectada en la PTAR de Pomoca, Nacajuca; muestreo que se menciona y describe en el Apartado 5.1.2 de este trabajo.



6.1.2.1. Resultados usando información de literatura especializada

Para realizar la optimización de parámetros se considera que el caudal de entrada es constante y que la carga másica también permanece constante. El perfil de concentración de SST inicial, los tiempos de retención usados y los valores de otros parámetros del modelo se toman de la literatura consultada (Watts *et al.* 1996, Takács *et al.* 1991); donde de acuerdo a Watts, el criterio de optimización usado por Takács es la Sumatoria de Errores Relativos al Cuadrado, y por lo tanto se usa el mismo criterio en este trabajo. De esta manera se obtienen los resultados de la Tabla 6, en la cual además se hace una comparación de los resultados obtenidos y los de la literatura a las mismas condiciones.

Tabla 6. Valores óptimos para los parámetros del modelo de sedimentación de Takács empleando los datos clásicos de Pflanz

Parámetro	Caudal del influente, m ³ /h					
	360	450	600	360	450	600
	Takács <i>et al.</i> (1991)			Este trabajo		
v_o (m/d)	214.2	370.0	172.8	325.6	163.5	157.9
v'_o (m/d)	150.2	142.9	112.1	165.2	126.4	80.2
r_p (m ³ /g)	5.71×10^{-3}	2.86×10^{-3}	2.70×10^{-3}	6.01×10^{-3}	7.55×10^{-3}	3.42×10^{-3}
r_h (m ³ /g)	3.64×10^{-4}	3.78×10^{-4}	2.93×10^{-4}	3.79×10^{-4}	3.13×10^{-4}	3.12×10^{-4}
SERC	0.275	0.254	0.157	0.110	0.242	0.151

6.1.2.2. Resultados usando información experimental

Para la optimización de parámetros con los datos experimentales, en el Apartado 5.2.3 se describe la metodología para obtener los conjuntos de datos que se utilizaron para realizar los experimentos de optimización de parámetros con los datos experimentales. Se buscó formar tres juegos clasificados como baja, media y alta tasa de flujo, pero debido a la operación intermitente de la planta, solo fue posible formar el conjunto de datos para baja tasa con un flujo volumétrico promedio de 34.3 m³/h. En la Tabla 7 se muestran los parámetros que fueron estimados usando estos conjuntos de datos.



Tabla 7. Valores óptimos para los parámetros del modelo de sedimentación de Takács con los datos experimentales a 34.3 m³/h.

Parámetro	Valor estimado
v_o (m/d)	681.7
v'_o (m/d)	20.8
r_p (m ³ /g)	9.869×10^{-2}
r_h (m ³ /g)	4.349×10^{-4}
SERC	0.798

Los datos observados (curva compuesta) y los estimados con el modelo usando los parámetros de la Tabla 7 son mostrados en la Figura 19. En la curva de valores simulados se pueden apreciar las discontinuidades del modelo de Takács causados por las restricciones del modelo.

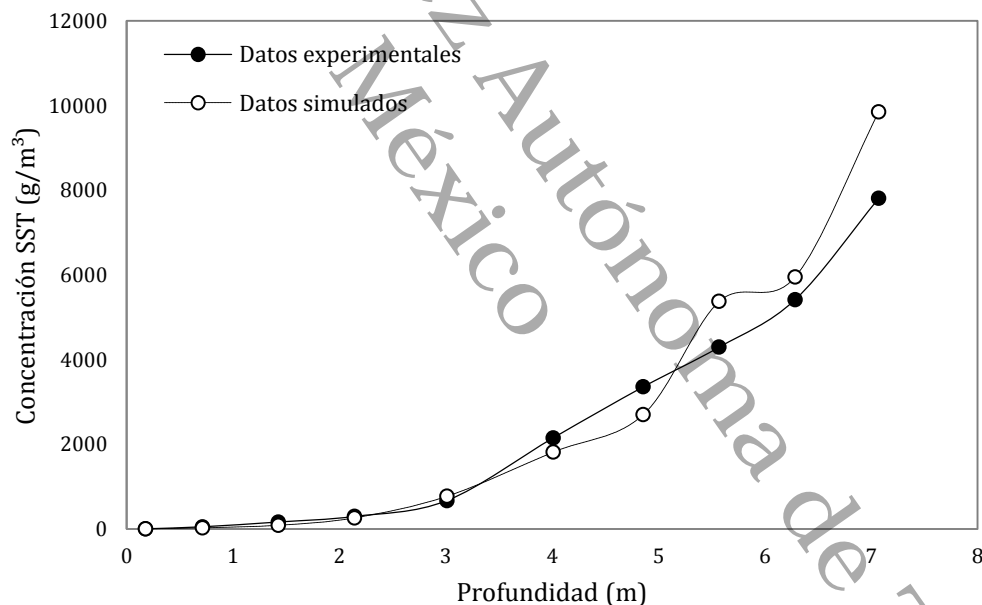


Figura 19. Comportamiento dinámico de los SST en un sedimentador secundario para un tiempo de retención hidráulica de 4.5 h y usando los datos obtenidos de la información experimental (curva compuesta baja tasa). Cada punto representa el valor de la concentración de sólidos en cada capa.

6.1.2.3. Sensibilidad paramétrica del Modelo de Takács

Después que se han obtenido los valores optimizados de los parámetros del modelo de Takács, se ha procedido a realizar un análisis de sensibilidad paramétrica, en la cual se ejecuta el modelo de



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

sedimentación variando cada parámetro en un $\pm 20\%$ de su valor optimizado. En la Figura 20 se muestran los resultados de este análisis.

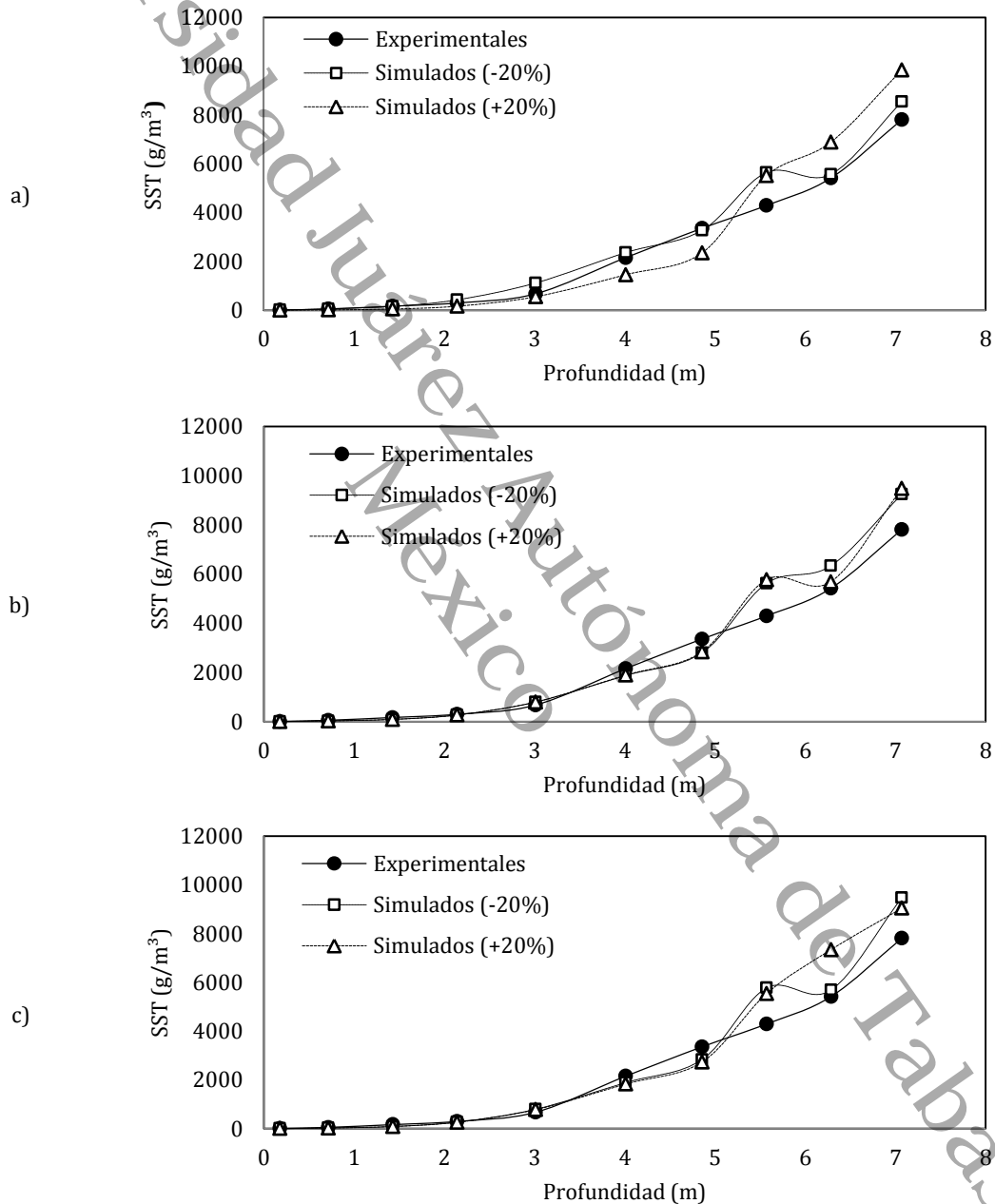


Figura 20. Análisis de sensibilidad paramétrica del modelo de Takács. a) v'_0 , b) v_0 y c) r_h .



Debe notarse que en la Figura 20 no se incluyen resultados para el parámetro de sedimentación discreta (r_p) debido a que el perfil de concentraciones no mostró sensibilidad a éste. Por el contrario, en la Figura 20a y la Figura 20c se observa que una disminución del 20% en alguno de los valores óptimos de los parámetros v'_0 y r_h generan perfiles de concentraciones con las mismas discontinuidades que aquellas exhibidas por los valores óptimos de los parámetros (Figura 19). Debe recordarse que estas discontinuidades se deben a las restricciones en forma de condicionales del modelo en referencia al límite o umbral de la concentración de sólidos. Las mismas Figuras 20a y 20c muestran que, con un incremento de un 20% en alguno de los parámetros v'_0 y r_h se obtienen perfiles de concentraciones de sólidos sin la existencia de estas discontinuidades. Por su parte, y a diferencia de los parámetros mencionados anteriormente, un incremento de un 20% en el valor óptimo del parámetro v_0 muestra las discontinuidades asociadas al modelo de Takács aunque éstas no se presentan con una disminución del 20% en el valor óptimo de v_0 .

En general, debe notarse (Figuras 19 y 20) que el modelo de Takács resulta ser particularmente útil en la predicción de las concentraciones de SST para las capas superiores del sedimentador (zona de clarificación) y que las restricciones del modelo en la zona de espesamiento no permiten una predicción razonablemente satisfactoria en las capas inferiores del mismo.

6.2. RESULTADOS DEL MODELO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

6.2.1. Experimentos

En apartados anteriores se plantean las posibles formas de entrenamiento de la red, y de acuerdo a esto, se realizaron experimentos en los que la información fue normalizada de acuerdo a la Ecuación 5.35 dejando los valores en un intervalo entre 1 y 2. Se encontró que algunos experimentos mostraron tener mejor relación entre los patrones de entrada y su correspondiente salida, resultando en valores del error global bajos en el entrenamiento. Sin embargo, el descenso del error global fue demasiado lento para todos los experimentos, de tal manera que a pesar de tener valores iniciales del error global bajos, su descenso no fue significativo aún después de 24 horas de ejecución. Esto puede deberse a que la red *Backpropagation* es un modelo que requiere mucha información de entrada para el entrenamiento, y los datos experimentales usados en este trabajo



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

fueron insuficientes. Además, tomando en cuenta la naturaleza de los datos, y como ya se ha analizado anteriormente, cada etapa no funciona como un sedimentador independiente, sino que uno es complemento del otro, siendo la Etapa 1 el espesador y la Etapa 2 el clarificador, y los experimentos se realizaron para cada etapa por separado y no en conjunto. A pesar de lo mencionado anteriormente, podemos destacar que ninguno de los experimentos mostró oscilación en el valor del error global al momento del entrenamiento. Sin embargo, el valor del error descendía muy lentamente, y precisamente por tal razón, con el Esquema 2 de entrenamiento no se realizaron todos los experimentos planeados, debido a que esta vía de entrenamiento requiere hacer 6 veces más la cantidad de experimentos del Esquema 1.

Así que para los datos de la Etapa 1 del sedimentador se probaron todos los experimentos que indica el Esquema 1 de entrenamiento, y con el Esquema 2 solo la predicción a las 04:00, 08:00 y 12:00 horas (Tabla 8). Para los datos de la Etapa 2 se probaron todos los experimentos que indica el Esquema 1 de entrenamiento (Tabla 9).

Tabla 8. Resultados de los experimentos realizados con los datos de la Etapa 1 con los dos Esquemas de entrenamiento.

Profundidad a predecir (m)	Topología	Factor de Aprendizaje	Función de Transferencia	Variables Usadas	Error Global	
					Límite Inferior	Límite Superior
1	7,5,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.597	1.660
	7,10,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,13,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,16,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
2	7,5,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.089	0.380
	7,10,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,13,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,16,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
2.5	7,5,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	1.180	1.620
	7,10,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,13,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,16,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
3	7,5,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.769	1.060
	7,10,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,13,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,16,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
4.5	7,5,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.342	0.584
	7,10,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,13,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7,16,1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Como se puede observar en las Tablas 8 y 9, sólo se usó una capa oculta, esto se debe al hecho de que el empleo de más de una capa oculta no mejoró significativamente al error global.

Tabla 9. Resultados de los experimentos realizados con los datos de la Etapa 2.

Profundidad a predecir (m)	Topología	Factor de Aprendizaje	Función de Transferencia	Variables Usadas	Error Global	
					Límite Inferior	Límite Superior
0	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.058	0.058
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
1	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.911	0.915
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
2	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.079	0.090
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
2.5	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	2.55	2.60
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
3	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	2.10	2.20
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
4.5	7, 5 , 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb	0.23	0.404
	7, 10, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 13, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		
	7, 16, 1	0.9, 0.1	Sigm, TangHip	SST, Turb		

Para todos los casos probados en entrenamiento, se encontraron mejores resultados en aquellos que usaron 16 neuronas en la capa oculta, una función de transferencia tangencial hiperbólica y en los que se usó la turbiedad como variable de entrada. El uso de la variable turbiedad muestra tener en todos los casos un mejor desempeño que cuando se usó la concentración de SST. Lo anterior es especialmente relevante si se considera que la turbiedad es un parámetro fisicoquímico que se puede determinar en campo y de manera instantánea, a diferencia de la concentración de sólidos



suspendidos, cuya determinación requiere de la obtención, manejo y transporte de la muestra de agua para su posterior análisis en laboratorio.

En relación al *factor de aprendizaje*, algunos experimentos mostraron su mejor desempeño con valores de 0.1 y otros con valores de 0.9; el parámetro *momento* se fijó en 0.2 para todos los experimentos. El mejor experimento encontrado, de acuerdo al valor del error global que se obtuvo, fue el de los datos de la Etapa 2 a la profundidad de 0 m (efluente del sedimentador), usando el Esquema 1 de entrenamiento, con la variable turbiedad, función tangencial hiperbólica, 16 neuronas en la capa oculta y un valor de 0.9 del factor de aprendizaje, el cual proporcionó un error global de 0.058.

6.3. RESULTADOS DEL MODELO HÍBRIDO Y COMPARACIÓN FINAL

Como un ejercicio para probar el entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido, el cual como se ha mencionado en el apartado de la Metodología se entrena para predecir el error que genera el modelo determinístico; se realizaron primero experimentos usando 40 patrones para el entrenamiento, lo que equivale al 95% de la base de datos. Por lo tanto no se realizó la validación en esta experimentación. Posteriormente se procedió a realizar experimentos más exhaustivos usando 36 patrones para el entrenamiento de la red y 6 para la validación.

6.3.1. Experimentos con 40 patrones para entrenamiento

Se creó una base de datos, conformada por una matriz de entrada con 40 patrones y 12 variables correspondientes a las concentraciones de las 10 profundidades, el caudal y la hora, que equivalen a un total de 12 neuronas en la capa de entrada; esta información fue asociada al promedio de los errores del modelo de sedimentación a las diferentes horas para la primera y la última capa del sedimentador en la salida, haciendo un total de 2 neuronas en la capa de salida. La base de datos se sometió a un proceso de normalización mediante la Ecuación 5.35, dejando los valores normalizados en un intervalo de valores entre 0 y 1. Posteriormente, se realizó el entrenamiento usando 13 neuronas en la capa oculta, con un factor de aprendizaje de 0.15, un valor de momento de 0.2, la función de transferencia tangencial hiperbólica y un criterio de convergencia de 0.001. Se hizo solo este experimento en base a lo observado en la experimentación con el modelo de RNA independiente.



De acuerdo a los resultados de salida del entrenamiento, se observó que para la profundidad de la Capa 1 del sedimentador, el Modelo Híbrido muestra un valor del Coeficiente de determinación (r^2) distinto al del modelo determinístico, y para este caso resulta ser significativamente mejor (0.0438 para modelo determinístico y 0.1302 para el Modelo Híbrido). Para el caso de la profundidad de la Capa 10, el valor de r^2 del Modelo Híbrido es muy cercano al del modelo determinístico, y también resultó superior (0.3637 para el modelo determinístico *versus* 0.4047 para el Modelo Híbrido). En cierta forma y de acuerdo a la hipótesis establecida en esta investigación, son resultados esperados debido a que son los mejores resultados que el Modelo Híbrido puede obtener, ya que en el entrenamiento se realiza la optimización de los pesos para la salida deseada.

6.3.2. Experimentos con 36 patrones para entrenamiento

Los experimentos que a continuación se describen estuvieron basados en los experimentos realizados en el apartado anterior, con la diferencia principal de que se usaron 36 patrones para el entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido. La base de datos con la que se realizaron los experimentos de entrenamiento y validación es la misma que se usó para la ejecución del modelo determinístico. Se realizaron los experimentos para la predicción de los SST a todas las profundidades o capas en la que se divide el sedimentador. La RNA del Modelo Híbrido fue entrenada usando como criterios de convergencia valores entre 1×10^{-4} y 1×10^{-8} ; también se probaron diferentes topologías de la red, variando el número de neuronas en la capa oculta. El aprendizaje se realizó haciendo bases de datos de la información a las diferentes profundidades por separado, ya que comúnmente mientras mayor sea el número de neuronas en la capa de salida, se presentan mayores dificultades para que el error global disminuya. De esta manera la red quedó conformada con 12 neuronas en la capa de entrada y 1 en la capa de salida. Para casi todos los casos se probaron 5, 8, 9, 11 y 15 neuronas en la capa oculta, la función de transferencia tangencial hiperbólica, factor de aprendizaje igual a 0.125 y momento igual a 0.2. En relación al factor de aprendizaje se tomó este valor porque con valores más altos se generaban oscilaciones que no permitían que el error global descendiera.

Un resumen de los resultados de entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido es mostrado en la Tabla 10, que muestra principalmente el valor de error global alcanzado en cada experimento y el número de épocas realizadas. No se podría afirmar que existe una tendencia clara en relación al



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

descenso del error, debido a que el criterio de convergencia no ha sido el mismo para todos. Sin embargo, se observa que los casos donde las neuronas de la capa oculta fueron 5 y 15 se requerían más épocas para llegar a un cierto valor de error global. En algunos casos, el entrenamiento se tornaba muy lento y por tal razón no se incluyeron los valores en la tabla mencionada anteriormente.

Tabla 10. Resultados obtenidos en entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido

Profundidad	Topología	Error Global	Épocas	Profundidad	Topología	Error Global	Épocas
P1	12, 5, 1	1×10^{-6}	699 175	P6	12, 5, 1	1×10^{-7}	1 277 250
	12, 8, 1	1×10^{-8}	100 108		12, 8, 1	1×10^{-7}	645 209
	12, 9, 1	1×10^{-8}	57 915		12, 9, 1	1×10^{-4}	82 055
	12, 11, 1	1×10^{-6}	40 138		12, 11, 1	1×10^{-7}	240 704
	12, 15, 1	1.8×10^{-5}	1 400 000		12, 15, 1	1×10^{-7}	864 110
P2	12, 5, 1	1×10^{-7}	240 648	P7	12, 5, 1	1×10^{-7}	124 869
	12, 8, 1	1×10^{-7}	85 263		12, 8, 1	1×10^{-7}	45 088
	12, 9, 1	1×10^{-4}	21 592		12, 9, 1	1×10^{-4}	20 927
	12, 11, 1	1×10^{-4}	19 047		12, 11, 1	1×10^{-7}	56 087
	12, 15, 1	1×10^{-7}	124 208		12, 15, 1	1×10^{-7}	118 774
P3	12, 5, 1	1×10^{-7}	277 289	P8	12, 5, 1	1×10^{-7}	101 470
	12, 8, 1	1×10^{-7}	45 571		12, 8, 1	1×10^{-7}	54 362
	12, 9, 1	1×10^{-4}	26 415		12, 9, 1	1×10^{-4}	16 528
	12, 11, 1	1×10^{-4}	47 630		12, 11, 1	1×10^{-7}	59 677
	12, 15, 1	1×10^{-7}	302 529		12, 15, 1	1×10^{-7}	124 243
P4	12, 5, 1	1×10^{-7}	146 865	P9	12, 5, 1	2.4×10^{-7}	1 080 000
	12, 8, 1	1×10^{-7}	70 141		12, 8, 1	-	-
	12, 9, 1	1×10^{-4}	21 616		12, 9, 1	1×10^{-4}	132 143
	12, 11, 1	1×10^{-4}	51 828		12, 11, 1	-	-
	12, 15, 1	-	-		12, 15, 1	-	-
P5	12, 5, 1	1×10^{-7}	153 349	P10	12, 5, 1	-	-
	12, 8, 1	1×10^{-7}	28 950		12, 8, 1	1×10^{-8}	37 093
	12, 9, 1	1×10^{-4}	14 110		12, 9, 1	1×10^{-8}	34 809
	12, 11, 1	1×10^{-7}	27 714		12, 11, 1	-	-
	12, 15, 1	1×10^{-7}	130 836		12, 15, 1	-	-

Se llevó a cabo el proceso de validación para todos los casos en los que se realizó el entrenamiento y los mejores resultados se eligieron para la comparación, considerando que la topología correspondiente a ese resultado ha sido la mejor. De esta manera se genera la Tabla 11, en la que se presenta la topología elegida como más óptima para cada caso.



Tabla 11. Mejores topologías encontradas de acuerdo a los resultados de validación

Profundidad	Mejor topología
P1	12,5,1
P2	12,15,1
P3	12,5,1
P4	12,8,1
P5	12,8,1
P6	12,15,1
P7	12,5,1
P8	12,11,1
P9	12,5,1
P10	12,8,1

6.3.3. Comparación de resultados de los modelos

No se realizó la comparación con el modelo de RNA porque éste no logró llegar al criterio de convergencia requerido, por tal razón se procedió a comparar únicamente los resultados que se pudieran obtener con el Modelo Híbrido. Y cabe recalcar que los datos disponibles para entrenar y validar los modelos no son suficientes. Sin embargo, a pesar de la escasa información disponible, los resultados obtenidos mostraron ser satisfactorios para el análisis de la hipótesis establecida en este trabajo.

Para realizar la comparación de los dos modelos en cuestión, se decidió usar por parte del Modelo Híbrido los resultados usando los errores predichos en la validación. Como se ha descrito anteriormente, se usaron 6 patrones para la validación; estos 6 patrones son los correspondientes a 24 horas a partir del día lunes 08:00 horas de la semana en la que se realizó el muestreo. Los resultados de estos 6 patrones se promediaron para cada profundidad, generando el promedio diario de un perfil de concentraciones de SST en el sedimentador, predicho para el día lunes. La misma información fue generada de los resultados del modelo determinístico y por supuesto de la información experimental. En la Tabla 12 se muestran el perfil de concentraciones resultante de ambos modelos, los cuales a su vez también son mostrados de manera gráfica en la Figura 21.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Tabla 12. Comparación numérica de los resultados de validación

Profundidad (m)	SST observados	SST Modelo Determinístico	SST Modelo Híbrido
0.18	15.9	6.0	15.7
0.71	30.7	12.6	33.9
1.43	28.2	46.7	119.2
2.14	72.4	158.8	413.5
3.01	263.0	524.5	423.7
4.01	702.2	1364.4	2125.2
4.86	2151.7	2129.3	2347.0
5.57	3523.8	4585.7	2982.1
6.29	4762.2	4538.0	3469.7
7.07	7512.2	7619.9	5802.7
	r^2	0.9786	0.9343

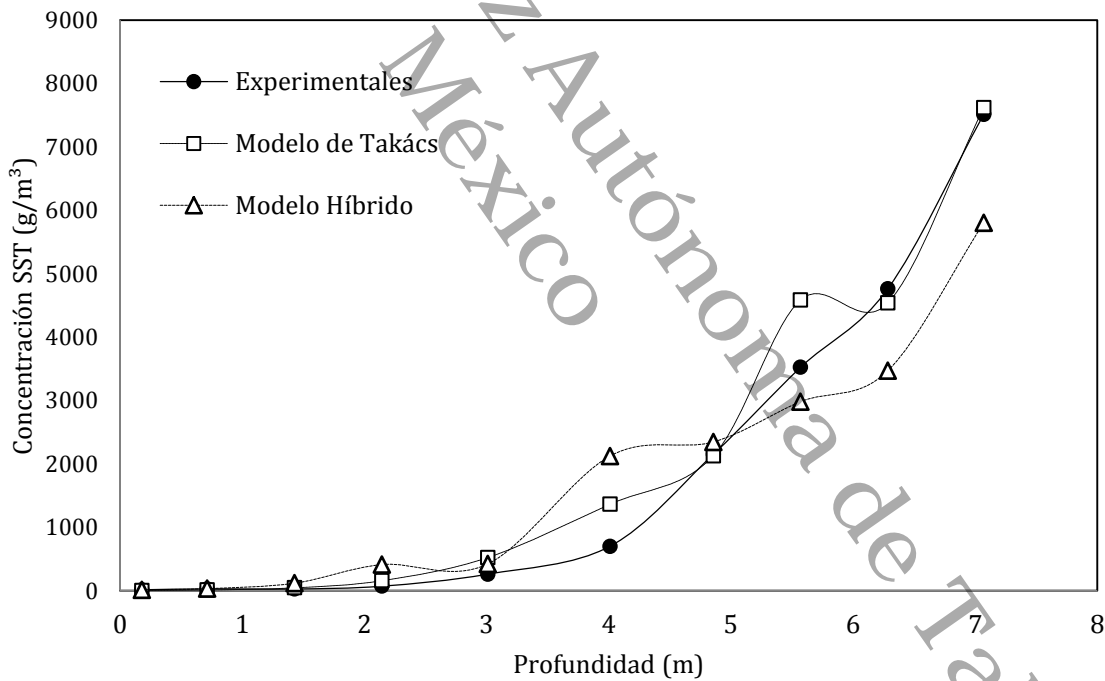


Figura 21. Comparación gráfica de los resultados de validación.

Como se puede observar, el Modelo Híbrido no mejoró los resultados generados por el modelo determinístico, sin embargo, no se puede descartar la posibilidad de que con más información el Modelo Híbrido pueda mejorar dichos resultados. Así mismo, en la Tabla 13 se muestra el perfil



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

promedio de concentraciones de SST con los que se realizó el entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido; tanto los valores experimentales como los obtenidos por los modelos, dichos resultados se muestran gráficamente en la Figura 22. Con la información del entrenamiento se obtuvieron resultados ligeramente mejores con el Modelo Híbrido, esto se debe a que son los resultados óptimos obtenidos por la RNA del Modelo Híbrido como consecuencia de la optimización de los pesos de la red. De cualquier manera demuestra que el entrenamiento es satisfactorio y que con mayor cantidad de información, los resultados de validación podrían llegar a mejorar y consecuentemente superar en predicción al modelo de sedimentación de Takács.

Tabla 13. Comparación numérica de los resultados de entrenamiento

Profundidad (m)	SST observados	SST Modelo Determinístico	SST Modelo Híbrido
0.1786	40.2	9.1	37.4
0.7143	40.6	31.7	49.7
1.4286	206.7	98.8	229.1
2.1429	428.3	288.3	525.9
3.0116	638.1	845.6	585.1
4.0116	2293.9	2029.7	3132.7
4.8571	3346.7	3096.8	3726.2
5.5714	4437.6	6148.2	4530.3
6.2857	5766.0	6630.5	5382.9
7.0714	8321.6	9492.6	7587.6
	r^2	0.9806	0.9822



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

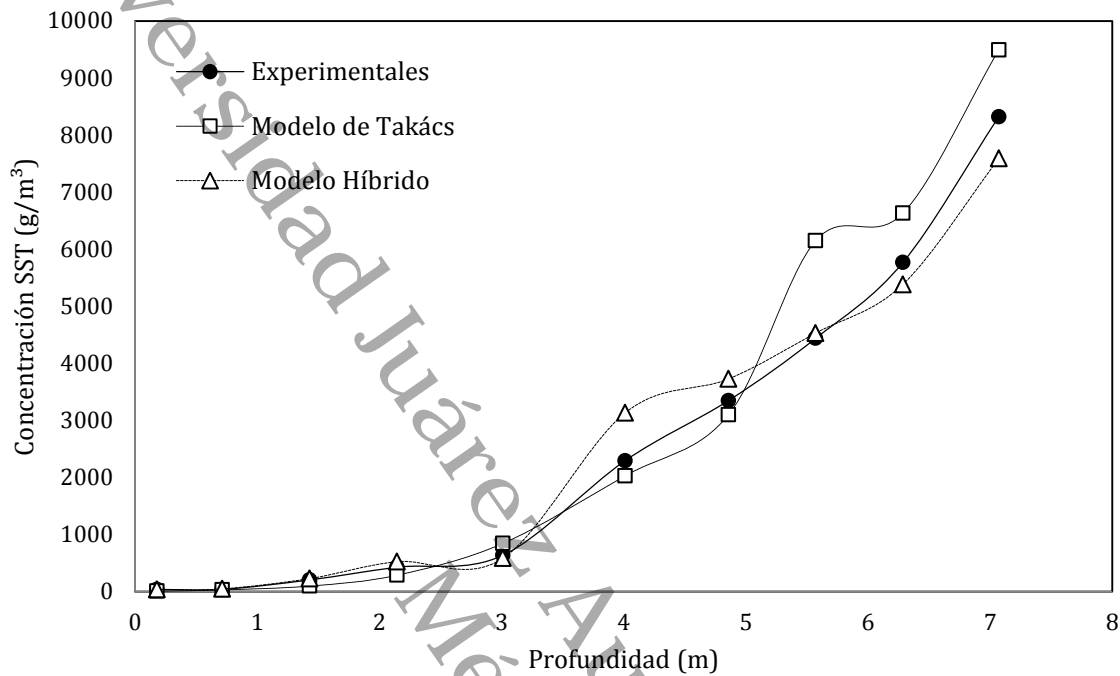


Figura 22. Comparación gráfica de los resultados de entrenamiento

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.
México



7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7.1 CONCLUSIONES

- Se reprodujo el modelo de sedimentación de Takács, con el cual se hizo un análisis del comportamiento dinámico del Modelo de Takács de acuerdo a la información de la literatura. A partir del empleo del método clásico de optimización de parámetros de Newton-Raphson Multivariable se actualizaron los parámetros del modelo de Takács con la propia información experimental presentada en Takács *et al.* (1991) y Watts *et al.* (1996).
- Con esta misma herramienta, se realizó la estimación de parámetros de un conjunto de datos obtenido a partir de la información experimental recolectada de la PTAR del Fraccionamiento Pomoca, Nacajuca obteniéndose con el modelo de Takács una satisfactoria predicción del perfil de concentraciones, particularmente en la zona de clarificación del sedimentador.
- Se reprodujo el modelo de RNA *Backpropagation* con el cual se realizaron experimentos usando la información experimental; sin embargo, no se consiguió el entrenamiento del modelo, y esto puede atribuirse a la escasa información experimental.
- De acuerdo a los resultados obtenidos con el entrenamiento de la RNA del Modelo Híbrido, se concluye que la salida del Modelo Híbrido podría mejorar los resultados del modelo determinístico con la información adecuada; sin embargo, en este caso los resultados de la validación no mostraron mejorar a los del modelo determinístico, pero fueron satisfactorios y similares a los del modelo determinístico. Al igual que en el punto anterior, esto se atribuye a la escasez de información experimental.



7.2 RECOMENDACIONES

Con el propósito de mejorar las capacidades de predicción del modelo híbrido propuesto en la determinación del perfil de concentraciones de SST en un sedimentador secundario de escala real, se recomienda lo siguiente:

- Asociar el modelo de sedimentación de Takács a un modelo de reactor de lodos activados como el ASM 1 (Activated Sludge Model) con el fin de obtener un modelo más robusto que pueda predecir con más eficiencia lo que sucede en el reactor y en el sedimentador secundario.
- Probar nuevas opciones de entrenamiento de la red, como la normalización, capas y neuronas ocultas y otras funciones de transferencia. Esto para los casos en los que el error global durante el entrenamiento no logró disminuir significativamente.
- Probar otros algoritmos de entrenamiento para la red Perceptrón Multicapa.
- Probar otros modelos de RNA que no requieran demasiada información para realizar el aprendizaje. Por ejemplo, se propone el empleo del modelo CLASO que está siendo utilizado para la predicción de la calidad del aire en Tabasco.



8.

REFERENCIAS

Baeza S., (2010) *Predicción de la Calidad del Aire en base a PM_{10} en Villahermosa, Tabasco mediante la Aplicación de Redes Neuronales Artificiales*, Tesis de Licenciatura en Ingeniería Ambiental, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

Carrera J. (2011) *Propuesta de una Red Neuronal Auto-Organizada con Aprendizaje en Tiempo Real para la Predicción de la Calidad del Aire en base a PM_{10} en Villahermosa, Tabasco*.

Civelekoglu G., Yigit N. O., Diamadopoulus E. and Kitis M. (2009) *Modelling of COD Removal in a Biological Wastewater Treatment Plant Using Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System and Artificial Neural Network*. *Water Science and & Technology*. 60.6, 1475-1487.

Christensen V.G., Ziegler A.C., Jian X. (2008) *Continuous Turbidity Monitoring and Regression Analysis to Estimate Total Suspended Solids and Fecal Coliform Bacteria Loads in Real Time*, Technical Report, Kansas Water Science Center, Lawrence, USA.

Crites R. and Tchobanoglous G. (1998) *Small and Decentralized Wastewater Management Systems*, McGraw-Hill Science, USA.

Diehl S. and Jepsen U. (1998) A model of the settler coupled to the biological reactor. *Water Research*, 32(2): 331 – 342.

Dogan E., Ates A., Yilmaz E. C. and Eren B. (2008) Application of Artificial Neural Networks to Estimate Wastewater Treatment Plant Inlet Biochemical Oxygen Demand. *Environmental Progress*. 27(04), 439-446.

Fang F., Ni B. J., Xie W. M., Sheng G. P., Liu S. G., Tong Z. H. and Yu H. Q. (2010) An Integrated Dynamic Model for Simulating a Full-Scale Municipal Wastewater Treatment Plant Under Fluctuating Conditions. *Chemical Engineering Journal*. 160, 522–529.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Fu C. and Poch M. (1994) System Identification and Real-Time Pattern Recognition by Neural Networks for an Activated Sludge Process. *Environment International*, 21(1), 57-69.

Hilera J. y Martínez V. (2000) *Redes Neuronales Artificiales: Fundamentos, Modelos y Aplicaciones*. Ed. ALFAOMEGA GRUPO EDITOR, S. A. de C. V.

Holenda B., Pásztor I., Kárpáti Á., and Rédey Á. (2006) *Comparison of one-dimensional secondary settling tank Models*. *E-Water*, Official Publication of the European Water Association. Recurso electrónico: www.ewaonline.de.

INITEC-UJAT, 2012. *Reporte de Muestreo del Proyecto "Modelo de Indicadores de Eficiencia de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales Municipales de Tabasco: Fase II"*. Fondo CONACYT PRO-INNOVA 2011, Impulsora Nacional de Innovación Tecnológica y Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

Jeppsson U. (1996) *Modelling Aspects of Wastewater Treatment Processes*, PhD Dissertation Thesis, Lund University, Lund, Sweden.

Koenhe M., Hoen K. and Schuhen M. (1995) Modelling and Simulation of Final Clarifiers in Wastewater Treatment Plants. *Mathematics and Computers in Simulation*. 39, 609-616.

Laines-Canepa J. R., Hernández-Barajas J. R., y López-Vidal R. (2011) *Evaluación del Desempeño de Tres Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales Municipales de Tabasco*, Memorias del Primer Encuentro de Investigación en la Región Usumacinta, 2 a 4 de marzo, Villahermosa, México.

Lee D. S., Vanrolleghem P. A. and Park J. M. (2005) *Parallel Hybrid Modeling Methods for a Full-Scale Cokes Wastewater Treatment Plant*. *Journal of Biotechnology*. 115, 317-328.

Metcalf y Eddy (1996). *Ingeniería de Aguas Residuales, Tratamiento y Reutilización*. McGraw Hill, México.

Martínez G., Loría H., Taboada D., Ramírez F., Navarrete J. L., and Jiménez H. (2009) *Approximate Method for Designing a Primary Settling Tank for Wastewater Treatment*. *Ind. Eng. Chem. Res.* 48, 7842-7846.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Mulas M. (2006) *Modelling and Control of Activated Sludge Processes*, PhD Thesis Dissertation, Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Italy, January.

NMX-AA-003-1980 *Aguas Residuales. Muestreo*. Norma Mexicana, Diario Oficial de la Federación, 25 de Marzo de 1980.

Packman JJ, Comings KJ, Booth DB (2000) *Using Turbidity to Determine Total Suspended Solids in Urbanizing Streams in the Puget Lowlands*, The Center for Urban Water Resources Management, University of Washington, USA.

Ramalho R. S. (1996) *Tratamiento de Aguas Residuales*. EDITORIAL REVERTÉ S. A. Sevilla, España.

Randerson TJ, Fink JC, Fermanich KJ, Baumgart P, Ehlinger T. *Total Suspended Solids-Turbidity Correlation in Northeastern Wisconsin Streams*, The Lower Fox River Watershed Monitoring Program, Delavan WI, 3-4 marzo de 2005.

Sadar MJ, Engelhardt TL (2002) *Determining Correlation of Nephelometric Turbidity Measurement to Suspended Solids in Industrial Samples*, Technical Report, Hach Company,

Takács I, Patry G. G., and Nolasco D. (1991) *A Dynamic Model of the Clarification-Thickening Process*. *Water Research*, 25(10), 1263 – 1271.

Tchobanoglous G., Burton F. L. and Stensen D. H. (2003) *Metcalf and Eddy's Wastewater Engineering: Treatment and Reuse*, 4th edition, Mc Graw-Hill, New York, USA.

Vlachogianni A. (2010) *Evaluation of a multiple regression model for the forecasting of the concentrations of NOx and PM10 in Athens and Helsinki*

Watts R. W., Svoronos S. A. and Koopman B. (1996) *One-Dimensional Modeling of Secondary Clarifiers Using a Concentration and Feed Velocity-Dependent Dispersion Coefficient*. *Water Research*. 30(9), 2112-2124.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Yilmaz T., Seckin G. and Yuceer A. (2010) *Modeling of Effluent COD in UAF Reactor Treating Cyanide Containing Wastewater Using Artificial Neural Network Approaches. Advances in Engineering Software.* 41, 1005–1010.



ANEXO A. CORRELACIONES EMPÍRICAS

A.1. Correlaciones empíricas empleadas para la predicción de SST a partir de información de turbiedad

En este apartado se presentan correlaciones empíricas para la estimación de los sólidos suspendidos totales de muestras de agua de diferentes etapas del proceso de lodos activados en términos de la turbiedad, medida para las mismas muestras.

Estas correlaciones fueron propuestas con base en la revisión de la literatura abierta y especializada. Se realizaron estudios previos selectos en los que se propusieron correlaciones empíricas entre los SST y la turbiedad del agua, en los cuáles se encontró que la mayoría de los modelos consideran variables logarítmicas y modelos de regresión lineal para el ajuste de la información experimental (por ejemplo, Packman *et al.*, 2000; Sadar y Engelhard, 2002; Randerson *et al.*, 2005; Christensen *et al.*, 2008). Por ello, se proponen aquí tres modelos: el Modelo No. 1 emplea el logaritmo de los valores normalizados de turbiedad para desarrollar un modelo de regresión lineal. Por su parte, el Modelo No. 2 emplea directamente los valores normalizados de turbiedad y SST. Debido a que el Modelo No. 1 correlaciona mejor a valores de SST grandes y que el Modelo No. 2 correlaciona mejor a valores de SST pequeños, se propone una combinación lineal de ambos modelos, para obtener un tercer modelo, que es llamado “Modelo Combinado”.

El Modelo No. 1

El Modelo No. 1 de Correlación Empírica Turbiedad-Sólidos Suspendidos Totales, considera a los valores máximos para la normalización de las variables. En el caso de la normalización de la variable turbiedad se ha sumado la unidad a la variable normalizada para evitar valores negativos al transformar la variable a su forma logarítmica de base 10. Para fines de una mejor predicción, la normalización de la variable sólidos suspendidos totales (SST) no requiere de la transformación logarítmica. Como resultado, las variables normalizadas NTU_1^* y SST^* son:



$$NTU_1^* = \log \left(\frac{NTU_i}{NTU_{max}} + 1 \right) \quad (A.1)$$

$$SST^* = \frac{SST_i}{SST_{max}} \quad (A.2)$$

La correlación lineal simple resultante para el Modelo No. 1 es:

$$SST^* = 3.451698 NTU_1^* + 0.006309 \quad (A.3)$$

En la Figura A.1 se presenta el desempeño de correlación del Modelo No. 1. La información estadística relevante indica que el coeficiente de determinación r^2 para el Modelo No. 1 es de 0.9632. La prueba estadística F nos indica que el valor F es 287.87, un valor significativamente superior al valor F crítica que es igual a 4.84. Lo anterior permite concluir que existe una correlación altamente significativa entre las variables SST y Turbiedad.

La sumatoria del residual al cuadrado (RSS, del inglés *residual sum of squares*) para la comparación de las concentraciones experimentales de SST con las concentraciones calculadas es:

$$RSS_1 = \sum (SST_{exp} - SST_{calc})^2 = 3,228,738.$$

Por su parte, la sumatoria de los residuales normalizados al cuadrado (NRSS) es:

$$NRSS_2 = \sum \left(\frac{SST_{exp} - SST_{calc}}{SST_{exp}} \right)^2 = 0.06316.$$

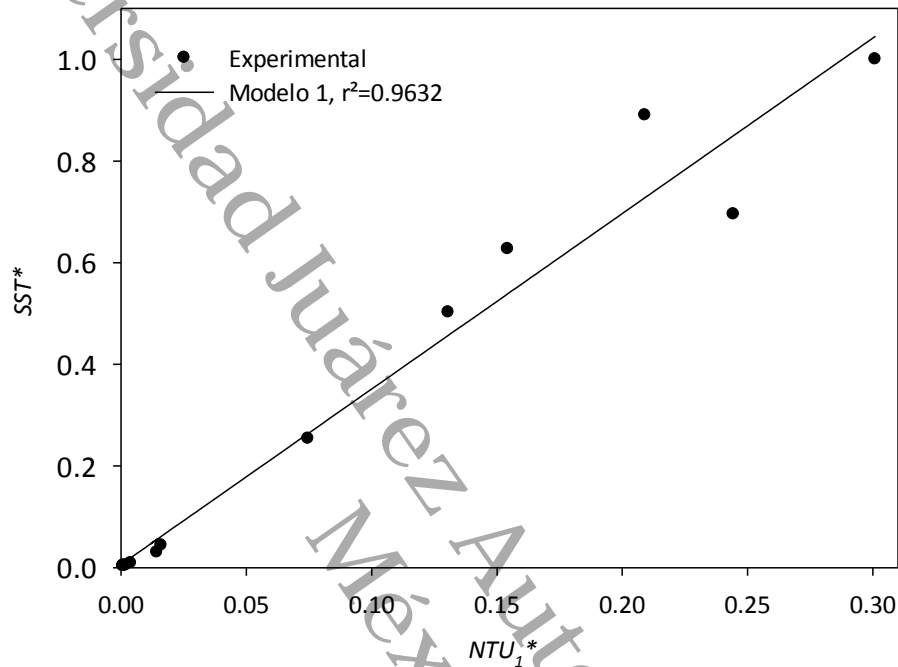


Figura A.1. Desempeño del Modelo No. 1 en la correlación Turbiedad-SST.

El Modelo No. 2

Para el desarrollo del Modelo No. 2 no se emplea la transformación logarítmica de los valores de turbiedad sino que simplemente se normalizan (NTU_2^*) con respecto al valor máximo (NTU_{max}) y se correlacionan con los valores normalizados de SST (SST^* dado en Ec. A.2)

$$NTU_2^* = \frac{NTU_i}{NTU_{max}} \quad (A.4)$$

En este caso, resultó que una correlación potencial simple es superior a un modelo lineal, por lo que la expresión del Modelo No. 2 es:

$$SST^* = 1.156805(NTU_2^*)^{0.982735} \quad (A.5)$$



Para este modelo No. 2, el coeficiente de determinación r^2 es de 0.9906.

En la Figura A.2 se presenta el desempeño de correlación del Modelo No. 2. La prueba estadística nos indica que el valor F es 1160.9, un valor significativamente superior al valor F crítica que es igual a 4.84. Lo anterior permite concluir que existe una correlación altamente significativa entre las variables SST y Turbiedad.

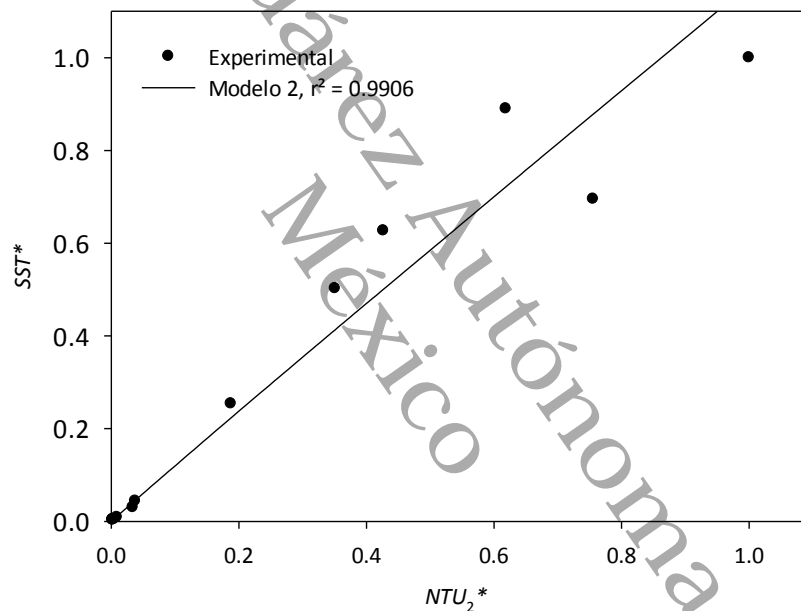


Figura A.2. Desempeño del Modelo No. 2 en la correlación Turbiedad-SST.

La sumatoria del residual al cuadrado (RSS, del inglés *residual sum of squares*) para la comparación de las concentraciones experimentales de SST con las concentraciones calculadas es:

$$RSS_2 = \sum (SST_{exp} - SST_{calc})^2 = 5,677,530.$$

Por su parte, la sumatoria de los residuales normalizados al cuadrado (NRSS) es:

$$NRSS_2 = \sum \left(\frac{SST_{exp} - SST_{calc}}{SST_{exp}} \right)^2 = 0.71431.$$



Comparación de Modelos

En la Figura A.3 se presenta la comparación gráfica del desempeño de los dos modelos de correlación propuestos. En ambos modelos se empleó la técnica de mínimos cuadrados para la estimación de los parámetros en la correlación de Turbiedad-SST; sin embargo, los valores de los coeficientes de determinación no son comparables debido a que las variables empleadas durante la regresión fueron transformadas a variables logarítmicas y/o normalizadas. Para tener una base de comparación se emplea un gráfico de correlación y se estima el coeficiente de determinación entre los valores experimentales de SST y los valores calculados, considerando a la ordenada en el origen igual a cero. Como resultado de este procedimiento, se espera que una correlación satisfactoria ocurra cuando la pendiente estimada y el coeficiente de determinación se aproximen a la unidad. En la Figura A.4 se presenta el resultado de este procedimiento de comparación. Nótese que el Modelo No. 1 posee el mejor coeficiente de determinación (r^2 igual a 0.9626 versus 0.9406 del Modelo No. 2) pero el Modelo No. 2 ofrece el mejor valor de la pendiente (1.0016 versus 0.9789 del Modelo No. 1).

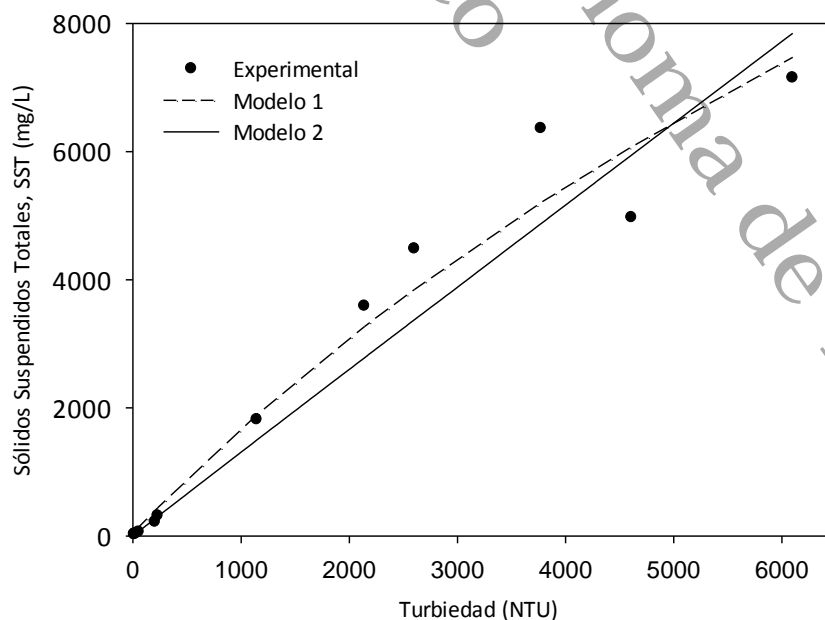


Figura A.3. Comparación de la capacidad de predicción de los modelos empíricos propuestos.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

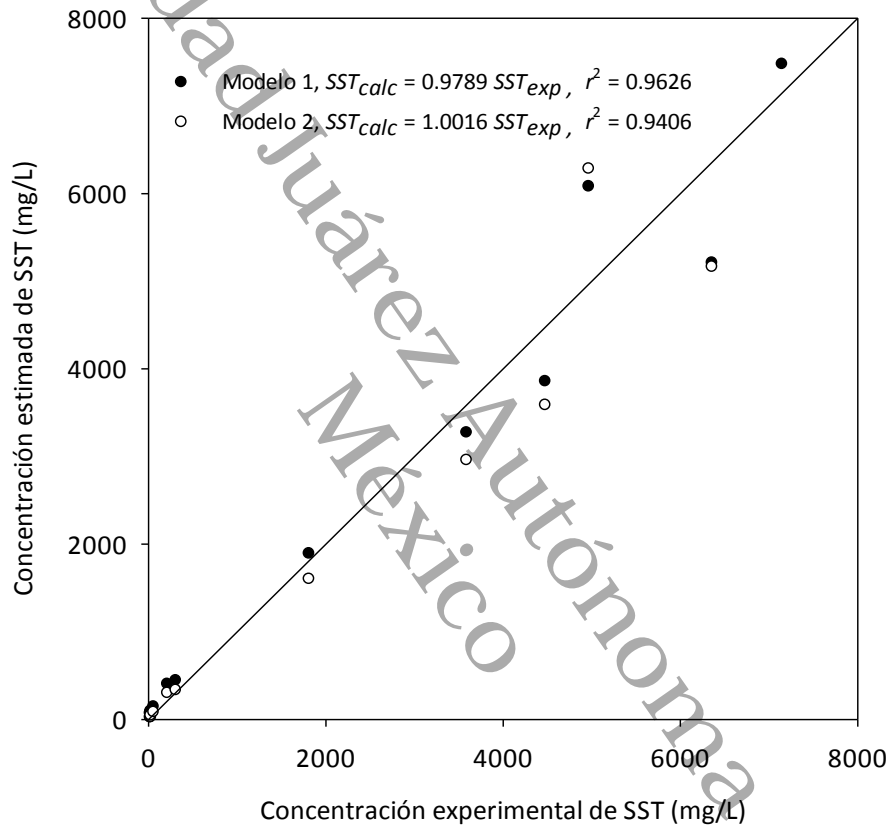


Figura A.4. Comparación de la capacidad de predicción de los modelos empíricos propuestos.

Una inspección detallada de los valores calculados por ambos modelos nos indica que el Modelo No. 1 es especialmente preciso para valores de SST mayores; por ejemplo, para un valor de turbiedad de 6100 NTU, el valor de SST experimental fue de 7,150 mg/L. A partir del Modelo No. 1, el valor de SST estimado es de 7,474 mg/L, en comparación con el valor estimado empleando el Modelo No. 2, que es igual a 8,271 mg/L. Por su parte, el Modelo No. 2 resultó especialmente preciso en la estimación de valores de SST pequeños; por ejemplo, para un valor de turbiedad de 12 NTU, el valor de SST experimental fue de 24 mg/L. El Modelo No. 1 predice un valor de SST estimado de 66 mg/L mientras que el Modelo No. 2 fue superior, estimando un valor de SST de 18 mg/L.



Como resultado, se propone una combinación lineal de ambos modelos para obtener simultáneamente las bondades de ambos.

El Modelo Combinado

La expresión propuesta para el Modelo Combinado es:

$$SST^* = \beta(a_1 NTU_1^* + b_1) + (1 - \beta)[a_2(NTU_2^*)^{b_2}] \quad (A.6)$$

Debido a la introducción de un nuevo parámetro de ajuste β , es necesario estimar los cinco parámetros simultáneamente. Para ello se empleó el optimizador *Solver* de Microsoft Excel® utilizando el método GRG No lineal, con diferencias finitas centrales para el cálculo de las derivadas. Los resultados de los parámetros se muestran en la Tabla A.1 en donde son comparados con los valores de los modelos empíricos. Nótese que los valores recalculados para a_1 , b_1 , a_2 y b_2 difieren ligeramente de los valores calculados originalmente para cada modelo empírico ajustado por separado.

Tabla A.1. Valores de los parámetros usados por los tres diferentes modelos de correlación

PARÁMETRO	MODELO		
	MODELO 1	MODELO 2	MODELO COMBINADO
a_1	3.451698	-	3.513689
b_1	0.006309	-	0.000843
a_2	-	1.156805	1.177231
b_2	-	0.982735	0.818032
β	-	-	0.839656

Para realizar la comparación entre el Modelo Combinado propuesto y los dos anteriores se estima el coeficiente de determinación entre los valores experimentales de SST y los valores calculados.



Así, se muestra a continuación en la Tabla A.2 un resumen de los criterios de comparación calculados a los tres modelos con el fin de comparación.

Tabla A.2. Coeficientes de determinación (r^2) y NRSS₂ de los tres modelos de correlación

CRITERIO	MODELO		
	MODELO 1	MODELO 2	MODELO COMBINADO
r^2	0.963195	0.911010	0.959317
NRSS ₂	2.1060	4.6054	1.0797

En relación al coeficiente de determinación el Modelo 1 muestra un mejor valor al de los otros dos modelos, sin embargo, para el criterio NRSS₂ el Modelo Combinado muestra el mejor resultado. Y este último es usado debido a que fue el criterio NRSS₂ el que se usó para calcular y optimizar los coeficientes del Modelo Combinado.

En la Figura A.5 se presenta la comparación gráfica del desempeño de los dos modelos de correlación propuestos.

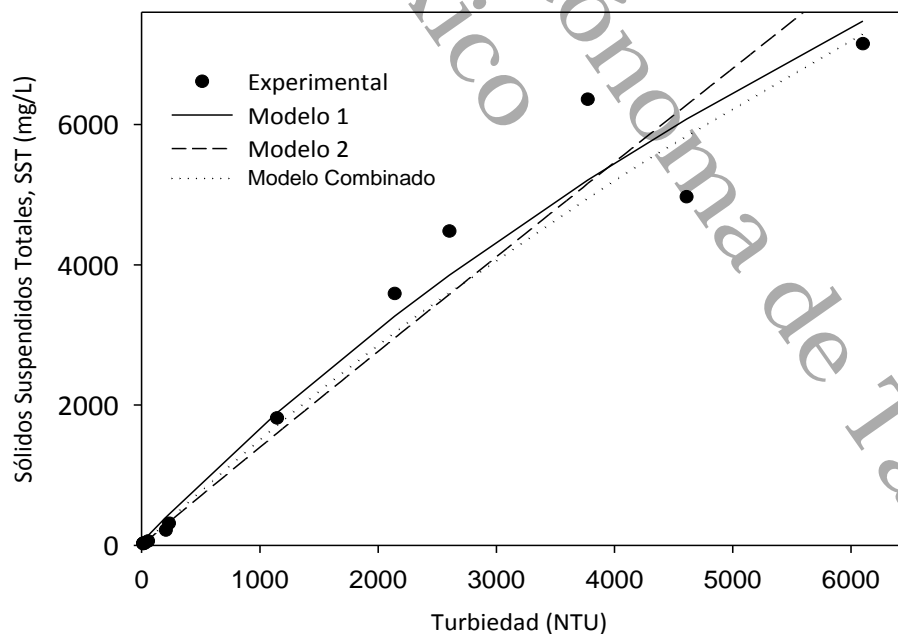


Figura A.5. Comparación de la capacidad de predicción de los tres modelos propuestos.



ANEXO B. INTERFAZ GRÁFICA

Para la evaluación de los modelos usados en este trabajo, se ha requerido probar diferentes valores de los parámetros relevantes para cada modelo. Además, se usaron diversas opciones de cálculo en algunas etapas de los modelos con la finalidad de encontrar las condiciones óptimas que permitan obtener los resultados deseados. Para ello se diseñó una interfaz gráfica de usuario con la que se pueden ejecutar y evaluar los modelos de una forma práctica. La Figura B.1 muestra la ventana principal, la cual sirve para elegir a cuál de los tres modelos se desea ingresar. A continuación se describe brevemente en qué consiste la interfaz gráfica de usuario, y la forma en que permite facilitar los cálculos.

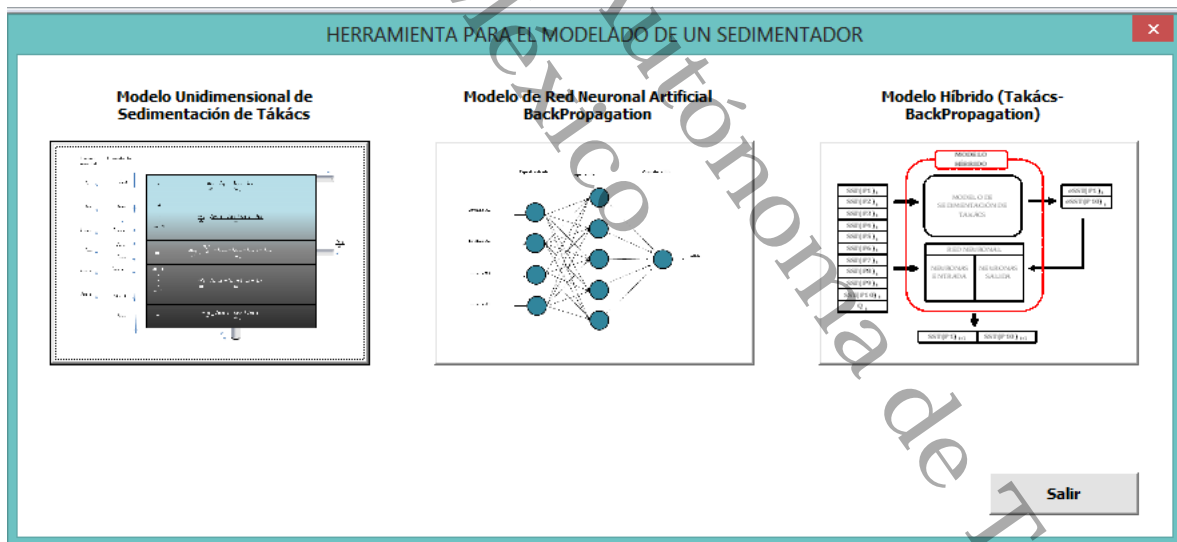


Figura B.1. Ventana principal de la interfaz gráfica de usuario.

B.1. Modelo de sedimentación de Takács

La primera etapa para la ejecución del modelo unidimensional de sedimentación de Takács es la selección de la geometría del sedimentador, en la que a su vez se elige el número de capas en la que se desea dividir el sedimentador y se calculan las dimensiones de éstas. Esta información se obtiene



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

en la ventana denominada “MODELO DE SEDIMENTACIÓN DE TAKÁCS”, en la pestaña “DISEÑO”; aquí se ingresa también la información relacionada con la operación del sedimentador en cuestión. La Figura B.2 muestra esta ventana, en la cual se puede observar los objetos usados para facilitar el ingreso de la información y la realización de los cálculos.

La interfaz gráfica cuenta con otra pestaña importante denominada “ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS”, la cual es mostrada en la Figura B.3. Como su nombre lo indica, aquí es donde se realiza la estimación de parámetros del modelo de velocidad de sedimentación de Takács (v_0, v'_0, r_p, r_h). En ésta se incluye un campo en el cual se ingresan los valores iniciales de los parámetros, incluyendo los valores de los parámetros para la minimización como el *factor de relajación*, el cambio máximo porcentual, el valor límite máximo y mínimo. Por otro lado, se tiene un espacio en el cual se eligen las opciones relacionadas con el método de diferencias finitas para el cálculo de las derivadas numéricas dentro del método de optimización Newton-Raphson Multivariable, estas opciones incluyen el tipo de derivada, el orden de éstas y el tamaño del diferencial.

MODELO DE SEDIMENTACIÓN DE TAKÁCS

1. DISEÑO | 2. ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS | 3. RESULTADOS Y SIMULACIÓN

DIMENSIONES DEL SEDIMENTADOR

Geometría: Paralelepípedo con tolva piramidal

Cilindro con tolva cónica

Paralelepípedo con tolva piramidal

Longitud sección rectangular (m)	1
Ancho sección rectangular (m)	1
Altura sección rectangular (m)	1

Dimensiones de la sección piramidal

Longitud final (m)	.5
Ancho final (m)	.5
Altura (m)	1

Número de capas de la sección cilíndrica: 7

Número de capas de la sección cónica:

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Caudal del Influyente Q_f (m^3/h)	34.3	No. de capa donde está el influente:	8
Caudal del Efluente Q_e (m^3/h)	6.9	Tiempo de residencia (h):	4.5
Caudal de recirculación de Lodos Q_r (m^3/h)	27.4		
Concentración del influente X_f (g/m^3)	4780		

Figura B.2. Interfaz para la información de diseño y operación del sedimentador.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Otro campo dentro de esta pestaña es donde se ingresan las concentraciones iniciales de SST a las diferentes profundidades, en donde se cuenta con un *botón alternador* que permite elegir entre las geometrías de las capas del sedimentador calculadas en la pestaña de “DISEÑO” o ingresarlas manualmente junto con las concentraciones de SST iniciales. Por último, se cuenta con el espacio donde se eligen las opciones relacionadas con la convergencia, tales como la función objetivo, el criterio de convergencia y el máximo número de iteraciones que se desean realizar; en este mismo campo se incluye un *botón de comando* denominado “Ver molécula computacional” que muestra una pequeña ventana en la cual se puede ver gráficamente cuántas veces el modelo es llamado para realizar las derivadas (Figura B.4), esto sirve para tener una idea de que tan rápida o lenta puede ser una *iteración*. El *botón de comandos* denominado “Estimar Parámetros” sirve para iniciar la optimización de los parámetros y los envía a una pestaña llamada “Estimación de parámetros” que a su vez se encuentra dentro de la pestaña “RESULTADOS Y SIMULACIÓN”.

PARÁMETROS OPTIMIZABLES EN EL MODELO UNIDIMENSIONAL DE SEDIMENTACIÓN	Valores iniciales	Limite máximo	Limite mínimo	Cambio máximo (%)	Factor de relajación
Velocidad de sedimentación máxima práctica, v_0' (m/d)	523.24580	800	100	10	0.7
Velocidad de sedimentación máxima teórica, v_0 (m/d)	1538.2880	1500	100	10	0.7
Parámetro de sedimentación a baja concentración, r_p (m ³ /g)	0.00398711	0.02	0.0002	10	0.7
Parámetro de sedimentación retardada, r_h (m ³ /g)	0.0006319	0.02	0.0001	10	0.7

Altura (m)	SSTabs (mg/L)	dz (m)	dvol (m ³)
0.178571429	14.7	0.3571	8.5714
0.714285714	28.8	0.7143	17.1429
1.428571429	60.8	0.7143	17.1429
2.142857143	102.6	0.7143	17.1429
3.011573426	238.2	1.0231	17.1429
4.011573426	1488.7	0.9769	6.6435

Figura B.3. Interfaz para la estimación de parámetros.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

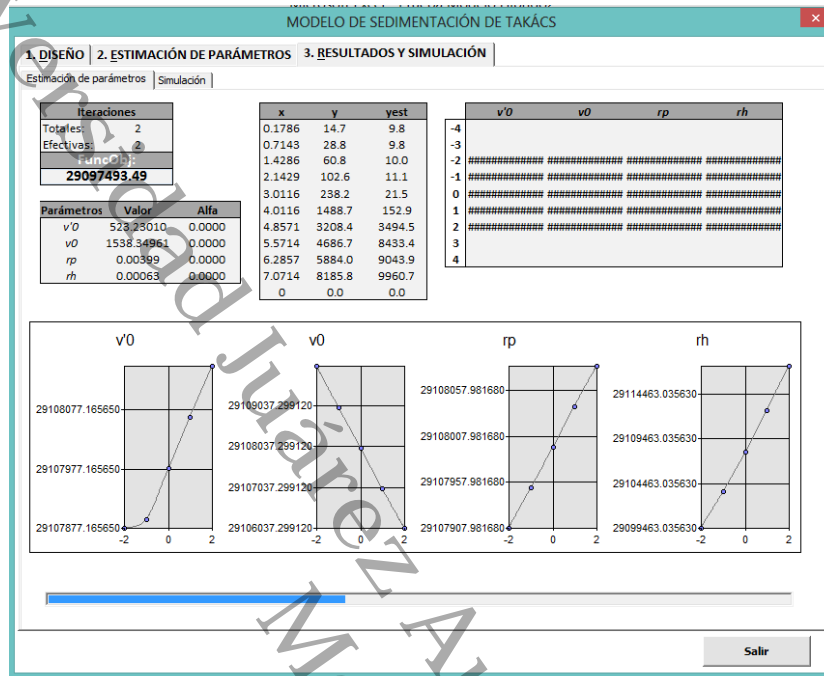


Figura B.5. Interfaz para visualizar resultados de optimización.

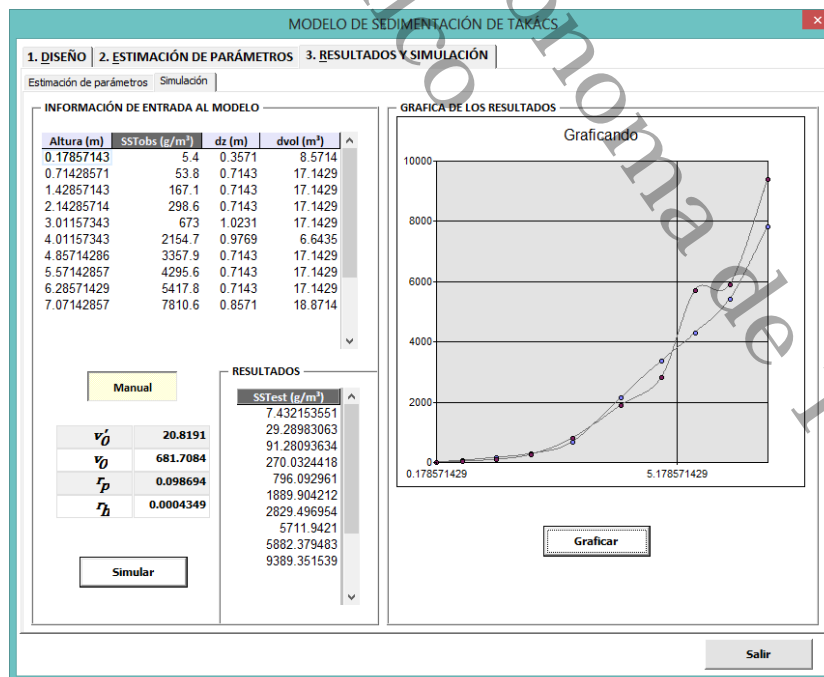


Figura B.6. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.



B.2. Modelo de RNA *Backpropagation*

El modelado de la RNA consta de dos partes importantes que son el entrenamiento y la validación. Para el entrenamiento se requiere realizar una serie de pruebas en las que están involucrados el factor de aprendizaje y el momento, las capas y neuronas ocultas así como la función de transferencia. Para esto se ha diseñado una ventana que lleva por título “RNA BACKPROPAGATION”, en ésta hay una pestaña llamada “ENTRENAMIENTO” (Figura B.7), dentro de la cual se carga de un archivo *Microsoft Excel* los patrones de entrenamiento (Botón “Examinar”). También es posible elegir más de un valor para las neuronas ocultas, función de transferencia y factor de aprendizaje; y de esta manera sacar varios experimentos de entrenamiento sin la necesidad de que se detenga el proceso para variar los valores de los parámetros. Para cada versión de entrenamiento se guarda automáticamente los resultados en un archivo de *Microsoft Excel* al terminar en entrenamiento. Éste termina cuando se llega al criterio de convergencia que es ingresado dentro de la misma ventana.

The screenshot shows the 'RNA BACKPROPAGATION' software window with two tabs: '1. ENTRENAMIENTO' (selected) and '2. VALIDACIÓN'. The 'ENTRENAMIENTO' tab contains the following fields and controls:

- Patrones de entrenamiento:** A text box with the path 'C:\Users\César Ignacio\Desktop\Avances Tesis CIBD Excel\EXPERIMENTOS' and an 'Examinar' button.
- Número de capas y neuronas ocultas:** A section with a 'Capas ocultas' dropdown set to '1' and a table for hidden layers.
- Parámetros para la minimización del error:** A section with input fields for 'Factor de aprendizaje' (0.9), 'Momento' (0.2), 'Epsilon' (0.001), 'Error global', and 'Épocas'.
- Selección de la(s) funciones de transferencia:** A section with a label 'Funciones de transferencia:' and two checkboxes: '1. Función sigmoideal' (checked) and '2. función tangencial hiperbólica' (unchecked).
- Buttons:** 'Entrenar' and 'Salir' buttons are located at the bottom right of the window.

Figura B.7. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.

Para realizar la validación, se diseñó una pestaña denominada “VALIDACIÓN” (Figura B.8), en la cual se cargan las matrices de pesos generadas en el entrenamiento y los patrones de validación.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Posteriormente se utiliza un botón para realizar la validación y se imprimen los resultados dentro de la misma pestaña.

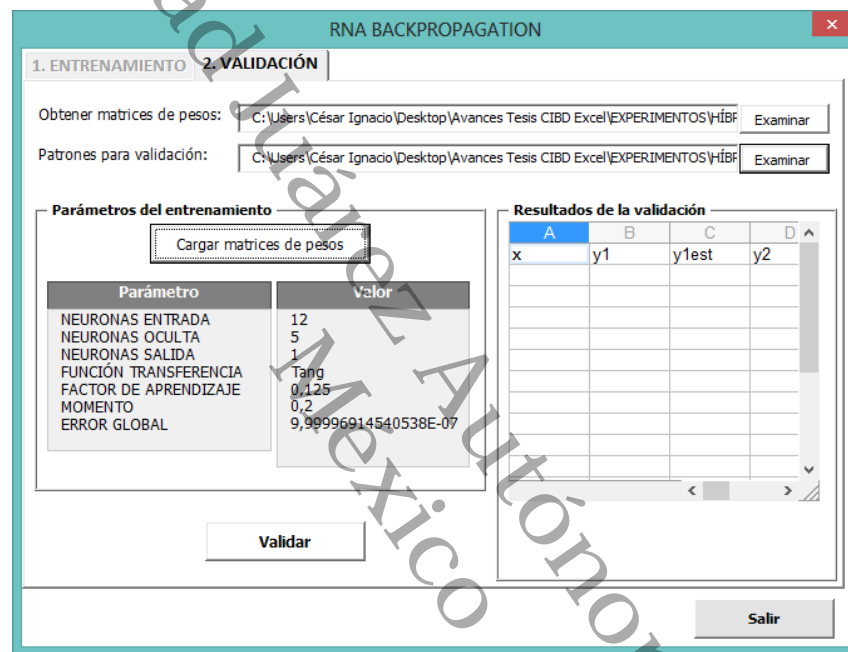


Figura B.8. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.

B.3. Modelo Híbrido (Takács-Backpropagation)

La interfaz gráfica denominada "MODELO HÍBRIDO" consiste básicamente desarrollar los pasos metodológicos descritos en el apartado de la Metodología de dicho modelo. Lo primero que se realiza es la ejecución múltiple del modelo de sedimentación de Takács. Para ello se diseñó una pestaña llamada "MODELO DE TAKÁCS" (Figura B.9), que para iniciar requiere cargar de un archivo *Microsoft Excel* que debe contener la información de entrada al modelo, contiene un campo en el cual se ingresan algunos valores iniciales relacionados con el diseño y operación del sedimentador. Finalmente cuenta con un espacio en el que se realiza la simulación e imprimen los resultados, mismos que pueden ser guardados en un archivo de *Microsoft Excel*.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

Altura (m)	dz (m)	dvol (m ³)
0.178571429	0.3571	8.5714
0.714285714	0.7143	17.1429
1.428571429	0.7143	17.1429
2.142857143	0.7143	17.1429
3.011573426	1.0231	17.1429
4.011573426	0.9769	6.6435
4.857142857	0.7143	17.1429
5.571428571	0.7143	17.1429
6.285714286	0.7143	17.1429
7.071428571	0.8571	18.8714

Figura B.9. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.

Para llevar a cabo los experimentos con la RNA se requiere calcular los errores y el sesgo a partir de las salidas del modelo determinístico, esto se llevó a cabo en la pestaña llamada “PREPARACIÓN DE DATOS” (Figura B.10), en ésta se toman los valores impresos por el modelo de Takács y se realizan los cálculos del error y la normalización, mostrando tres opciones de normalización. Los resultados se imprimen en esta misma pestaña y se pueden guardar en un archivo *Microsoft Excel*.

Con estos datos calculados se ejecutó la RNA con la interfaz gráfica “RNA BACKPROPAGATION” y los resultados se desnormalizaron usando una pestaña denominada “DESNORMALIZACIÓN DE RESULTADOS” (Figura B.11), en la cual se carga un archivo *Microsoft Excel* que debe contener la información requerida para la desnormalización, en otro espacio se indica la fórmula con la que fueron normalizados los datos y el último campo es donde se realiza la operación y se imprimen resultados, los cuáles también pueden ser guardados en un archivo *Microsoft Excel*.



Modelo Híbrido Determinístico-Estocástico Aplicado a la Predicción del Desempeño de un Sedimentador Secundario de una Planta tipo Lodos Activados operando en Tabasco

The screenshot shows the 'MODELO HÍBRIDO' software interface. It has three tabs: '1. MODELO DE TAKÁCS', '2. PREPARACIÓN DE DATOS', and '3. DESNORMALIZACIÓN DE RESULTADOS'. The 'SELECCIÓN DE FÓRMULA DE NORMALIZACIÓN' section contains three radio buttons and their corresponding formulas:

- 1.
$$N_3(Valor) = 2 * \left(\frac{Valor - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \right) - 1.0$$
- 2.
$$N_1(Valor) = \frac{Valor}{X_{max}}$$
- 3.
$$N_2(Valor) = \frac{Valor - \bar{X}}{\bar{X}}$$

Below the formulas is a 'Calcular' button. To the right, the 'IMPRESIÓN DE ERRORES, SESGOS Y NORMALIZACIÓN DE LOS DATOS' section shows a spreadsheet with columns A through G and rows 1 through 16. A 'Guardar libro' button is located below the spreadsheet. At the bottom right of the window is a 'Salir' button.

Figura B.10. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.

The screenshot shows the 'MODELO HÍBRIDO' software interface. It has three tabs: '1. MODELO DE TAKÁCS', '2. PREPARACIÓN DE DATOS', and '3. DESNORMALIZACIÓN DE RESULTADOS'. The 'FÓRMULA DE NORMALIZACIÓN USADA' section contains three radio buttons and their corresponding formulas:

- 1.
$$N_3(Valor) = 2 * \left(\frac{Valor - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \right) - 1.0$$
- 2.
$$N_1(Valor) = \frac{Valor}{X_{max}}$$
- 3.
$$N_2(Valor) = \frac{Valor - \bar{X}}{\bar{X}}$$

Below the formulas is a 'Cargar' button. To the right, the 'RESULTADOS' section shows a spreadsheet with columns A through G and rows 1 through 16. A 'D_ENTRADA' dropdown menu is located below the spreadsheet. Below the spreadsheet are 'Guardar libro' and 'Desnormalizar' buttons. At the bottom right of the window is a 'Salir' button.

Figura B.11. Interfaz para realizar simulaciones del modelo de sedimentación.