



*El balance del espacio, 1998*



# Redes neuronales artificiales en la purificación de agua

♦ José Alfredo Hernández  
Javier Siqueiros

**E**l agua es un compuesto simple y no una mezcla como el aire. Por consiguiente, el agua pura es una sustancia que consta de moléculas de un sólo tipo. Cuando hablamos de contaminación del agua nos referimos a la presencia de materia extraña en una sustancia pura o natural.

Es el caso, sin embargo, que la mayoría del agua contiene pequeñas cantidades de sales minerales disueltas y estas sustancias contribuyen a menudo a darle un buen sabor. Podemos hablar de agua pura de manantial en el sentido de una mezcla de agua natural con una pequeña cantidad de materia mineral inofensiva y tal vez hasta gustosa.

Así pues, la contaminación del agua es la presencia de materia extraña indeseable que deteriora su calidad. La materia extraña contaminante podrá ser materia inerte, como la de los compuestos de plomo o mercurio, o materia viva, como la de los microorganismos.

Por otra parte, la purificación del agua se ha convertido en una tecnología minuciosa y complicada: si el agua contiene impurezas susceptibles a sedimentarse, se puede dejar el tiempo suficiente para que se produzca la precipitación, o bien, se-

parar las impurezas que pueden ser retenidas por un filtro. Si las partículas son demasiado pequeñas para cualquiera de ambos procesos, se puede conseguir que se peguen unas a otras o que coagulen en alguna forma, de modo que el depósito o la filtración resulten posibles. Si el agua es tan ácida que sea corrosiva, puede neutralizarse el ácido; oxidar los desechos orgánicos; matar los microorganismos; eliminar los malos olores y sabores mediante algún agente apropiado (tal como el carbón activado); “ablandar” el agua dura, de manera que puedan usarse eficazmente detergentes no contaminantes.<sup>1</sup> Sin embargo, todos estos tratamientos implican costos la mayoría de las veces muy elevados, por lo cual se han planteado nuevas alternativas en consonancia con la actual tendencia hacia el desarrollo sustentable. Un ejemplo de esto es el aprovechamiento de la energía térmica con el uso de bombas de calor para la obtención de agua purificada.<sup>2</sup> Actualmente, la utilización de bombas de calor se justifica por su capacidad de ahorro energético y su contribución a la reducción de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>).

La bomba de calor es un dispositivo que extrae el calor de una fuente térmica de baja temperatu-

<sup>1</sup> Turk, A. *et al.*, *Ecología, contaminación, medio ambiente*, Interamericana, McGraw-Hill Companies, 1973.

<sup>2</sup> Huicochea Rodríguez, A., “Puesta en marcha y evaluación experimental de un sistema portátil de purificación de agua integrado a un transformador térmico”, tesis de maestría en ciencias, UAEM, 2003.



ra y lo deposita en otra de temperatura mayor. El calor fluye por naturaleza de las altas a las bajas temperaturas. No obstante, la bomba de calor puede forzar su flujo en sentido contrario, utilizando una cantidad de trabajo relativamente pequeña. Esta bomba puede transferir este calor desde las fuentes naturales del entorno a baja temperatura (como por ejemplo el aire, el agua o la propia tierra), hacia los procesos que requieren calor, como puede ser la calefacción de espacios.

#### **Purificación con bombas de calor por absorción**

Los problemas de contaminación del agua, aunados a las grandes necesidades de la humanidad por obtener este insustituible líquido, nos han impulsado a la investigación y desarrollo de nuevas metodologías de purificación, especialmente para los industriales, quienes buscan purificar sus efluentes con base en los preceptos de un desarrollo sustentable, es decir, aprovechando eficientemente los recursos energéticos naturales sin alterar las condiciones del ambiente. Los sistemas de purificación de agua mediante bombas de calor se han desarrollado con bombas de calor por compresión convencionales; sin embargo, los sistemas de purificación basados en bombas de calor por absorción tienen algunas ventajas significativas respecto a los métodos convencionales.

Las ventajas de estos sistemas son las siguientes:

Se pueden operar normalmente con energía calorífica gratuita de baja calidad y ambientalmente limpia.

Son simples y portátiles, si así se requiere, siempre y cuando se instalen en lugares donde

exista energía eléctrica a 120 voltios y una fuente de desecho de calor a temperaturas iguales o mayores a 65° C.

Requieren poco mantenimiento, poca mano de obra para su instalación y operación y poca adición de químicos.

Son capaces de producir agua de pureza muy alta.

En el Centro de Investigaciones en Ingenierías y Ciencias Aplicadas se desarrolló un sistema portátil en el que se utilizan bombas de calor para la purificación de agua, integrado a un transformador térmico de 700 Watts. En este sistema portátil, las bombas de calor trabajan de la siguiente manera: el proceso inicia cuando se introduce una cantidad de calor de desecho al evaporador y al generador. Este calor puede ser extraído de algún proceso industrial (en este caso, el calor que viene del condensador del sistema de purificación de agua) o de fuentes de colectores solares. En el generador se encuentra la mezcla concentrada en fluido de trabajo. Parte de este fluido se evapora a causa del intercambio de calor con la fuente de desecho. Posteriormente, se envía al condensador, donde se condensa al rechazar cierta cantidad de calor. El producto obtenido se bombea al evaporador, donde, con ayuda del calor de desecho, es evaporado. Este vapor obtenido se envía al absorbedor, donde tiene lugar un proceso de absorción, por la mezcla diluida en el fluido de trabajo y por la mezcla concentrada, la cual proviene de la mezcla de trabajo del generador. Posteriormente, este calor útil, producido por el proceso de absorción, se usa en el sistema de purificación de agua, el cual está integrado a las bombas de calor. Ahora bien, el calor

que se desecha por el condensador de este sistema de purificación se reenvía al evaporador y generador. Esto se convierte en un reciclado de energía, donde aumenta el coeficiente de operación (COP). Este valor representa el calor útil del total de calor suministrado al sistema.

Para conocer y predecir el comportamiento de este sistema, se cuenta con un modelo matemático que considera un balance de materia y energía, que hasta el momento ha funcionado satisfactoriamente en las pruebas experimentales; sin embargo, este modelo no considera las pérdidas de calor del equipo. Ahora bien, el objetivo del presente trabajo es mostrar cómo se pueden aprovechar las tecnologías de vanguardia y cómo se puede hacer uso de las redes neuronales artificiales, en la búsqueda de alternativas de control que satisfagan o superen el modelo matemático actualmente utilizado.

### Redes neuronales artificiales

El cerebro humano se compone de billones de neuronas interconectadas entre sí, que forman circuitos o redes y desarrollan funciones específicas. A grandes rasgos, una neurona típica recoge señales procedentes de otras neuronas mediante un grupo de delicadas estructuras llamadas dendritas. La neurona emite impulsos de actividad eléctrica en una fibra larga y delgada denominada axón, que se divide en millares de ramificaciones. Las extremidades de estas ramificaciones llegan hasta las dendritas de otras neuronas y establecen conexiones llamadas sinapsis, en las cuales se produce la transformación del impulso eléctrico en un mensaje neuroquímico.

Este sistema tan maravilloso que se desarrolla en nuestro cerebro, la función neuronal, se aprovecha tecnológicamente al hacer una analogía entre una metodología computacional y la sinapsis natural. La primera es conocida como Red Neuronal Artificial o Inteligencia Artificial.

En la red neuronal, las entradas de información actúan como las ramificaciones axonales del cerebro humano, es decir, son los parámetros que se van a utilizar como información disponible; posteriormente, se asignan valores numéricos a cada parámetro que conecta cada neurona. Toda esta información ingresa a un núcleo del proceso, encargado de la función de activación —que suele ser alguna función matemática— y de allí se obtiene finalmente una respuesta o solución al problema planteado, esto es, por dónde se transmite el valor de activación a otras unidades.

Esta metodología de redes se desarrolla en *software*, y con ella se pueden construir sistemas capaces de aprender, de adaptarse a condiciones variantes, o inclusive, si se dispone de una cantidad suficientemente grande de datos, de predecir el estado futuro de diversos fenómenos, como si fueran sistemas inteligentes —de ahí el nombre de “inteligencia artificial”. También se usa para la predicción, el reconocimiento de patrones y los sistemas de control adaptativo.

La red neuronal más común es la de capas, cuyas entradas y salidas están conectadas a sus respectivas capas, y en la cual hay una o más capas interconectadas con una capa oculta.

No hay reglas para determinar el número requerido de neuronas en la capa oculta. Comúnmente se usa una aproximación de prueba y error para



determinar una arquitectura óptima (número de neuronas en la capa oculta que conectan las neuronas de entrada y salida); en algunos casos, el proceso de optimización puede usarse para minimizar el número de neuronas ocultas.

Una de las partes de una red neuronal para desarrollar la función requerida radica en una serie de valores numéricos que determinan la fuerza de la conexión. Para “entrenar” una red se usan las entradas conocidas como variables de entrada del proceso o serie de entrenamiento, las cuales consisten en un número de casos de entrenamiento, y cada uno de ellos es una instancia de la combinación de variables de entrada y del valor correspondiente a la salida.

Para ello se emplea un programa matemático de ajuste de los valores numéricos con el objetivo de reducir la diferencia entre la salida deseada y la salida programada (computacionalmente). El programa matemático comúnmente usado se denomina *Back Propagation*, el cual propaga esta información desde una capa hacia otra previa de la red neuronal. Este procedimiento se repite en la serie de entrenamiento durante el tiempo que sea necesario. Una vez que la red neuronal ha sido entrenada, puede aplicarse una nueva entrada a la red, la cual producirá una salida dependiente de los valores numéricos de entrenamiento.<sup>3</sup>

En nuestro caso, las variables de entrada al modelo consisten de 11 variables del proceso<sup>4</sup> y la capa de salida contiene una variable, el Cop. Es difícil especificar el número óptimo de neuronas en la capa oculta, el cual depende del tipo y complejidad del proceso; usualmente se determina por el método de prueba y error. Ahora bien, los valores numéricos de cada variable de entrada son multiplicados por cada valor numérico de cada conexión. El resultado de este producto se suma a un valor numérico determinado. Finalmente, lo anterior proporciona el valor del Cop que permite evaluar la eficiencia del purificador de agua integrado al transformador térmico.

#### **Programa matemático de aprendizaje**

Un programa matemático de aprendizaje (o entrenamiento) es un procedimiento que consiste en ajustar los coeficientes de una red neuronal (valores numéricos) para minimizar una función de error (usualmente cuadrática) en las salidas de la red neuronal para un número de entradas dadas y salidas correctas ya conocidas. Si se usan arreglos no lineales, el gradiente de la función de error puede ser fácilmente programado mediante el procedimiento de regresión lineal. Aquí, el método de Levenberg Marquardt se usó como procedimiento de optimización en las herramientas de Matlab para redes neuronales.

---

<sup>3</sup> Huang, B. y A. S. Mujumdar, “Use of neural network to predict industrial dryer performance”, *Drying Technology-An International Journal*, núm. 11, Mc Gill University Montreal, Quebec, 1993, pp. 525-532 y “Prediction of industrial dryer performance using neural network”, *Drying'92*, Elsevier, Amsterdam, 1992, pp. 1124-1132.

<sup>4</sup> Temperatura de entrada y salida del absorbedor, temperatura de entrada y salida del generador, temperatura de entrada y salida del condensador, temperatura de entrada y salida del evaporador, presión en el absorbedor, presión en el generador y concentración inicial de bromuro de litio.

El programa matemático de Levenberg Marquardt es una aproximación al método de Newton; también se usó para la adecuación del modelo que nos interesa. La raíz cuadrada de la sumatoria cuadrada del error, entre los valores experimentales y los predichos por la red neuronal, fue un criterio para determinar el modelo óptimo encontrado en este trabajo.

#### **Preparación de la base de datos**

Los datos experimentales son proporcionados por Huicochea,<sup>5</sup> quien trabaja en el sistema de purificación de agua mediante bombas de calor por absorción. Dicha información es el resultado de distintas pruebas y corresponde a seis concentraciones iniciales distintas de la solución de bromuro de litio (51.0%, 51.8%, 53.0%, 54.1%, 55.0% y 55.8%). Posteriormente, con el uso de datos experimentales y con ayuda de las ecuaciones termodinámicas, se obtuvieron los valores de las entalpías (H) y calores (Q) de los distintos componentes para calcular el Cop esperado. Los datos experimentales, así como los valores del Cop, se dividieron en dos bloques: uno para el aprendizaje y otro para la validación del modelo. Para la prueba de aprendizaje se usaron las pruebas de 51.0%, 53.0%, 54.1% y 55.0%, y para la validación del modelo matemático las 51.8% y 55.8%, lo cual nos ayuda a lograr un rango de confiabilidad más estable sobre el modelo propuesto.

#### **Resultados y discusión**

La red neuronal artificial propuesta involucra tres neuronas en la capa oculta (son llevados a cabo

40 valores numéricos) para determinar la evolución del Cop del sistema de purificación de agua, considerando un transformador térmico por absorción. Este modelo incluye las variables de temperatura de entrada y salida de los cuatro componentes (absorbedor, generador, evaporador y condensador), las dos presiones del sistema y la concentración inicial del bromuro de litio.

#### **Base de aprendizaje del modelo propuesto**

En esta etapa de aprendizaje notamos que el criterio adoptado por la raíz cuadrada de la sumatoria cuadrada del error, contra el número de iteraciones en computadora —en este caso, 100 iteraciones para entre una y seis neuronas en la capa oculta—, demostró que al ir incrementando el número de neuronas ocultas, la raíz cuadrada de la sumatoria cuadrada del error fue disminuyendo, lo cual es normal, ya que se involucran más parámetros en el modelo. Sin embargo, nosotros notamos que la raíz cuadrada de la sumatoria cuadrada del error, después de tres neuronas en la capa oculta, no cambió significativamente, lo que demuestra que el modelo neuronal se limita a aprender el fenómeno complejo. Por otro lado, es importante mencionar que este criterio de raíz cuadrada de la sumatoria cuadrada del error, es tomado en cuenta para evitar un sobreaprendizaje de los datos experimentales, ya que es un problema que se encuentra frecuentemente en este tipo de modelos. Para llevar a cabo este procedimiento, se verificó que el valor de raíz cuadrada de

<sup>5</sup> Huicochea Rodríguez, A., “Puesta en marcha y evaluación...”, *op. cit.*



la sumatoria cuadrada del error en el bloque del aprendizaje sea mayor que dicho valor en el bloque de validación, tal como lo presentó Hernández Pérez,<sup>6</sup> para impedir el sobreaprendizaje. Por consiguiente, la sumatoria cuadrada del error es un buen criterio para optimizar el número de iteraciones y evitar el sobreaprendizaje. Los valores predichos por el modelo del Cop son buenos, y son reportados en función de los valores de temperatura del absorbedor de salida. Estos valores predichos por el modelo son también comparados con los valores experimentales. Esto demuestra una buena aceptación del modelo neuronal artificial.

Como podemos observar, los valores simulados por el modelo neuronal se superponen a los valores experimentales. Esto indica que el modelo con tres neuronas en la capa oculta ajusta los valores del Cop con una buena capacidad de predecir este comportamiento. Una forma de verificar también los valores predichos por el modelo es comparándolos con los valores experimentales del Cop. Al hacer esto se encontró una tendencia lineal, la cual esperábamos para confirmar dicho modelo.

Una vez encontrado el modelo neuronal en la base de aprendizaje, los 40 valores numéricos se almacenan en la computadora para hacer posteriormente simulaciones del Cop.

#### **Validación del modelo propuesto**

Los valores numéricos encontrados anteriormente son usados en la base de validación para simular los valores experimentales del Cop. Como resultado podemos mencionar que los valores simulados por el modelo neuronal se superponen a los valores experimentales de la base de validación. Esto muestra la gran capacidad de predecir el Cop con este modelo neuronal. La oposición de los valores experimentales del Cop a los valores simulados del Cop presenta una buena linealidad de los datos predichos, y demuestra la aceptabilidad del modelo para predecir.

El estudio expuesto en este artículo muestra que el modelo de redes neuronales artificiales puede ser usado para obtener una buena calidad de estimación del Cop de un sistema de purificación de agua, integrado a un transformador térmico por absorción sobre un rango experimental limitado. Dicho modelo neuronal fue validado con datos experimentales. El interés en este tipo de modelo debe basarse en el supuesto de su elaboración libre de cualquier hipótesis preliminar sobre los fenómenos complejos. Además, estos modelos son simples y rápidos para estimar esta variable compleja del sistema. La aplicación de redes neuronales artificiales sirve para la estimación del estado en línea y para el control del proceso de purificación de agua con un transformador térmico por absorción.

---

<sup>6</sup> Hernández Pérez, J. A. *et al.*, "Neural networks for the heat and mass transfer prediction during drying of cassava and mango", *Innovative Food Science and Emerging Technologies*, núm. 5, 2004, pp. 57-64.