

Simulación de la cinética de adsorción de Cr(VI) empleando una red neuronal artificial

Pellegrini, Jorge*; Apesteguy, Juan ⁽¹⁾; de Celis, Jorge Pablo

Laboratorio de Investigación y Desarrollo en Ingeniería Química, (LIDIQ). Dto. Ingeniería Química, Facultad Regional Avellaneda. UTN. Ramón Franco 5050 (1874). Villa Domínico, Avellaneda. Buenos Aires. Argentina.
jorgepellegrini@yahoo.com.ar

(1) Facultad de Ingeniería. UBA.
Paseo Colón 850 (C1063EHA) Buenos Aires.

RESUMEN.

Se estudió la cinética de adsorción de Cr(VI) empleando carbón activado (CA) como adsorbente, sintetizado a partir de cáscara de nuez.

La cinética evalúa la cantidad de contaminante adsorbido (expresada como q_t , $gr_{Cr(VI)adsorbido}/gr_{CAutilizado}$) en función del tiempo. La adsorción en un medio poroso es un proceso por etapas donde las resistencias predominantes modifican su intensidad a medida que la superficie se satura. El problema de los modelos vigentes, como los modelos de primero y segundo orden [1], es que consideran una resistencia media de magnitud invariante, aproximando así el comportamiento real. Al no correlacionarse con la realidad empírica, la capacidad predictiva se ve afectada [2]. Observando esta carencia, se propone el empleo de una red neuronal artificial (RNA) que prediga el comportamiento experimental.

Para los ensayos cinéticos se puso en contacto muestras de CA, con una solución de 50 ppm de Cr(VI) empleando dosis de $0,1gr_{CA}/100ml_{sc}$. A diferentes tiempos se miden la concentración de la solución remanente.

Para la creación de la RNA se empleó la biblioteca provista por TensorFlow en el entorno de código abierto de Anaconda Python. Se modeló la cinética usando 36 pares de datos, normalizados y se separaron mediante una elección aleatoria uniforme en una relación 2:1 para realizar el entrenamiento y la validación de la red. La RNA creada es del tipo perceptrón simple, utiliza la función de activación sigmoidea y el método de gradiente descendiente para su entrenamiento. Al tener una capa oculta, la cantidad de neuronas y de entrenamientos realizados son las variables que optimizan la capacidad predictiva/generalizadora del modelo, evitando un sobreajuste (*overfitting*) (3). Se utilizó el error cuadrático medio (ECM) para evaluar el desempeño, modificando la cantidad de neuronas en la capa oculta (1 a 10). La cantidad optimizada de entrenamientos fue de 80000 para los casos estudiados y la mejor performance se observó cuando se emplearon cuatro neuronas.

En la Figura 1 se presentan en forma comparativa los valores predichos por los modelos tradicionales y por la RNA frente a los obtenidos experimentalmente.

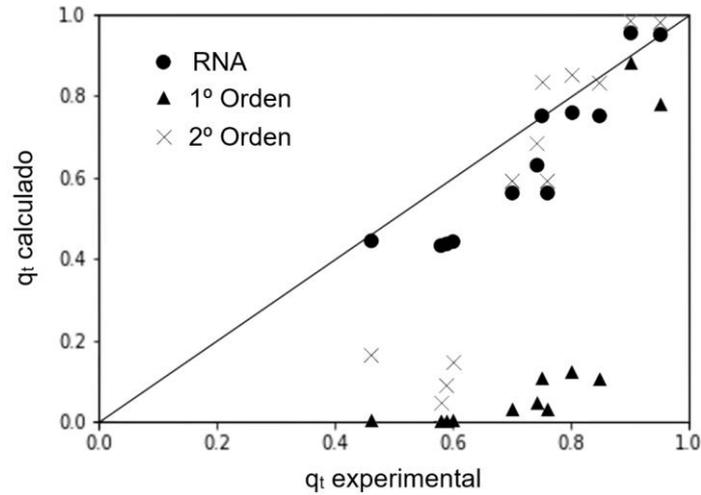
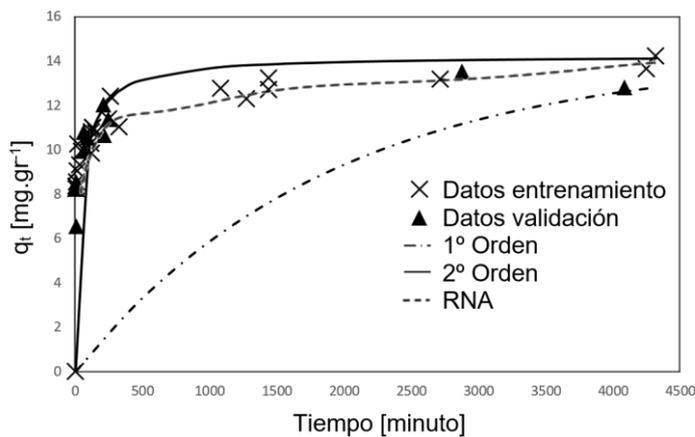


Figura 1. Comparación de los modelos frente a los resultados experimentales.

Finalmente se evaluó la capacidad predictiva estimando la desviación estándar normalizada (Δq) entre los modelos usados. Los resultados alcanzados se aprecian en la Figura 2.



Δq		
1º Orden	2º Orden	RNA
0.90	0.49	0.18

Figura 2. Resultados experimentales de los ensayos cinéticos de adsorción de Cr(VI) y los ajustes de los distintos modelos empleados. Estimación de la desviación estándar normalizada.

A partir de los resultados obtenidos la RNA explicaría la variabilidad de los datos en un 82%, seguido por el modelo de segundo (51%).

Este estudio preliminar indicaría la elevada eficacia de las RNA para el modelado de procesos de adsorción.

Palabras Claves: Adsorción, redes neuronales, cinética.

REFERENCIAS.

- [1] Lima, É. C., Adebayo, M. A., & Machado, F. M. (2015). "Kinetic and Equilibrium Models of Adsorption". *Carbon Nanomaterials as Adsorbents for Environmental and Biological Applications*, 33–69. Switzerland
- [2] Lagergren, S. (1898) "About the Theory of So-Called Adsorption of Soluble Substances". *Kungliga Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar*, 24, 1-39. Stockholm, Switzerland.
- [3] Lawrence, S., & Giles, C. L. (2000). "Overfitting and neural networks: conjugate gradient and backpropagation". *Proceedings of the IEEE-INNS-ENNS International Joint Conference on Neural Networks. IJCNN 2000. Neural Computing: New Challenges and Perspectives for the New Millennium*. Como, Italy.