××(178618.1)



TK165.G8 B45 ZO09 CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y



Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del I.P.N. Unidad Guadalajara

DE ESTUDIOS AVANZADOS DEL INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL ORDINACIÓN GENERAL DE SERVICIOS, BIBLIOGRÁFICOS

Estimación de Estado y Control Inteligente de Procesos Anaeróbicos de **Tratamiento de Aguas Residuales**

Tesis que presenta:

Rubén Belmonte Izquierdo

para obtener el grado de:

Maestro en Ciencias

en la especialidad de:

Ingeniería Eléctrica

Directores de Tesis

Dr. Edgar Nelson Sánchez Camperos Dr. Salvador Carlos Hernández

Guadalajara, Jalisco, Septiembre de 2009.







Estimación de Estado y Control Inteligente de Procesos Anaeróbicos de Tratamiento de Aguas Residuales

Tesis de Maestría en Ciencias Ingeniería Eléctrica

Por: **Rubén Belmonte Izquierdo** Ingeniero Electrónico Instituto Tecnológico de Morelia 2002-2007

Becario de CONACYT, expediente no. 13531

Directores de Tesis Dr. Edgar Nelson Sánchez Camperos Dr. Salvador Carlos Hernández

CINVESTAV del IPN Unidad Guadalajara, Septiembre de 2009.

Resumen

La digestión anaeróbica es un proceso biológico que se utiliza para tratar residuos biodegradables. Aun cuando este proceso ofrece varias ventajas y beneficios, es sensible a variaciones en las condiciones de operación. Asimismo, algunas variables y parámetros son difíciles de medir debido a restricciones técnicas o económicas; esta problemática impide la aplicación de estrategias de control al bioproceso. Por consiguiente, el diseño de sensores virtuales ha emergido recientemente, en especial, los observadores neuronales, los cuales no requieren estrictamente el conocimiento del modelo matemático del proceso, como ocurre con otro tipo de observadores.

Por otra parte, se requieren estrategias de control para garantizar la operación adecuada del proceso aun en presencia de perturbaciones. Por lo tanto, se requiere de la estimación de variables integradas en estrategias de control a fin de garantizar un funcionamiento adecuado de este bioproceso.

El primer objetivo de esta tesis es estimar las variables de la metanogenesis: biomasa, sustrato y carbono inorgánico en un reactor completamente agitado (CSTR de su nombre en inglés "completely stirred tank reactor") con filtro de biomasa de un proceso utilizado para el tratamiento de aguas residuales. Se propone un observador neuronal, el cual se basa en una red neuronal recurrente de alto orden, que se entrena con un algoritmo del filtro de Kalman extendido. Después, el observador neuronal se integra en un esquema de control inteligente híbrido. Este esquema se basa en un supervisor difuso, el cual utiliza las estimaciones de biomasa y producción de metano para detectar la actividad biológica en el interior del reactor y en caso de ser requerido, aplicar una acción de control L/A (logaritmo/antilogaritmo) con el fin de evitar el lavado del proceso.

Por último, se incluye una validación del observador empleando datos reales de un proceso a escala en laboratorio. La identificación de parámetros se obtiene a partir de experimentos de modo por lotes en un CSTR con filtro de biomasa.

Abstract

Anaerobic digestion is a biological process used to treat biodegradable wastes. Even though this process offers several advantages and benefits, it is sensitive to variations on the operating conditions. Furthermore, some variables and parameters are hard to measure due to economical or technical constraints; this trouble restrains the application of control strategies to the bioprocess. Therefore, design of soft sensors has emerged recently, specially, neural observers, which do not strictly requiere the knowledge of the process mathematical model, like it occurs with another kind of observers.

On the other hand, control strategies are required in order to guarantee adequate operation of the process even in the presence of disturbances. Hence, variables estimation integrated to control strategies are required in order to guarantee adequate performance of this bioprocess.

The first objective of this thesis is to estimate variables of methanogenesis: biomass, substrate and inorganic carbon in a completely stirred tank reactor (CSTR) with biomass filter in a process used for wastewater treatment. A neural observer is proposed, which is based on a recurrent high order neural network, which is trained by an extended Kalman filter algorithm. After that, the neural observer is integrated into a hybrid intelligent control scheme. This scheme is based on a fuzzy supervisor, which uses estimations of biomass and methane production to detect biological activity inside the reactor and if required, to apply an L/A (logarithm/anti-logarithm) control action in order to avoid process washout.

Finally, a validation of the observer using real data from a lab scale process is included. Parameters identification is obtained from batch mode experiments in a CSTR with biomass filter.

Agradecimientos

A mis padres, *Hilda Izquierdo Guzmán* y *José Belmonte Fulgencio*, por el cariño y apoyo que siempre me han brindado, tanto en mis estudios como en mi vida personal; a mis hermanas *Yady* y *Elsy* por todo su cariño y por las enseñanzas que me han brindado.

A Dios por haberme permitido llegar a este momento y por haberme permitido conocer al amor de mi vida... gracias a ti Princesita por escucharme, aconsejarme y por tu comprehensión.

A mis asesores de tesis, **Dr. Edgar N. Sánchez** y **Dr. Salvador Carlos Hernández** por compartir sus conocimientos, por la confianza y apoyo brindado, así como por la paciencia que me tuvieron durante la elaboración de esta tesis.

A las investigadoras **Dra.** Lourdes Díaz Jimémez y **Dra.** América Morales Díaz del Cinvestav Unidad Saltillo por las enseñanzas, comentarios y sugerencias brindadas durante mi estancia en dicha unidad.

A mis sinodales **Dr.** Alexander Georgievich Loukianov y **Dr.** José Javier Ruiz León por sus comentarios que ayudaron a enriquecer este trabajo.

Al personal del rastro de Saltillo, Coahuila por su valiosa colaboración y apoyo para el desarrollo de la etapa experimental de esta tesis.

A la generación Control '07, por todos los buenos y amargos momentos, por las desveladas compartidas, y a todos los compañeros de maestría y doctorado con quienes conviví durante mi estadía en Cinvestav tanto en la Unidad Gdl como en la Unidad Saltillo.

Al **CINVESTAV** por permitirme realizar los estudios de maestría y muy especialmente al **CONACYT** por el apoyo económico.

Finalmente, quiero dedicar esta tesis a mi sobrino **Dario Cervantes Belmonte**, un niño con un carisma especial y un talento inmenso.

Índice general

1.	Intr	oducc	ión	1
	1.1.	Estado del Arte		
	1.2.	Problemática y Trabajo a Realizar		
		1.2.1.	Definición del Problema	4
		1.2.2.	Trabajo a Realizar	5
	1.3.	Organ	ización de la Tesis	6
2.	Con	ceptos	s Preliminares	9
	2.1. Digestión Aneróbica			
		2.1.1.	Descripción del Proceso	10
		2.1.2.	Condiciones de Operación	10
		2.1.3.	Modelo Matemático .	12
	2.2. Redes Neuronales			13
		2.2.1.	Redes Neuronales Recurrentes de Alto Orden Discretas	14
		2.2.2.	Método de Entrenamiento con Filtro de Kalman Extendido	16
		2.2.3.	Diseño de un Observador Neuronal	18
3.	Esti	mació	n de Estados y Estrategia de Control	21
	3.1.	Observador Neuronal para un Proceso Anaeróbico		21
		3.1.1.	Antecedentes	21
		3.1.2.	Diseño	22
		3.1.3.	Guías de Sintonización	23

		3.1.4.	Validación del Observador	25	
	3.2. Estrategia de Control			30	
		3.2.1.	Descripción	30	
		3.2.2.	Supervisor Difuso: Takagi-Sugeno	33	
		3.2.3.	Integración del Observador	35	
		3.2.4.	Validación del Esquema de Control	36	
4.	Estu	udio E	xperimental	41	
	4.1. Descripción del Prototipo		41		
	4.1.1. La		La Biomasa	41	
		4.1.2.	El Sustrato	42	
		4.1.3.	El Reactor Anaeróbico	44	
	4.2.	4.2. Guía de Experimentación		45	
		4.2.1.	Experimento en Modo por Lotes	45	
	4.3.	3. Identificación de Parámetros del Modelo		47	
		4.3.1.	Validación del Modelo	49	
		4.3.2.	Validación del Observador con el Modelo Validado	50	
5.	. Conclusiones y Perspectivas			53	
	5.1.	Conclu	isiones	53	
	5.2.	5.2. Perspectivas			
	Bibl	iografí	57		
A. Cálculo de los Puntos de Equilibrio					
в.	B. Demostración del Teorema 2.1				
C. Protocolo Experimental para la Medición de DQO				75	
D.	D. Artículos Publicados				

Índice de tablas

4.1. Características del agua residual del rastro.

43

Índice de figuras

2.1.	Reactor completamente agitado con filtro de biomasa.	11
2.2.	Diagrama funcional de la digestión anaeróbica.	12
2.3.	Esquema del observador neuronal recurrente de alto orden.	19
3.1.	Comparación del observador neuronal considerando una perturbación en S_{2in} .	26
3.2.	Funcionamiento del RHONO considerando variaciones en μ_{1max} , μ_{2max} y S_{2in} .	27
3.3.	Funcionamiento del RHONO con ruido en las salidas y una perturbación en $S_{2in}. \label{eq:solution}$	28
3.4.	Funcionamiento del RHONO considerando perturbaciones sobre S_{2in} y D_{in} .	28
3.5.	Validación experimental del RHONO propuesto.	29
3.6.	Principio de la técnica L/A.	31
3.7.	Conjuntos difusos para la variable ODL/X_2 .	34
3.8.	Conjuntos difusos para la variable ΔQCH_4 .	35
3.9.	Esquema del control inteligente híbrido.	36
3.10	. Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación pequeña sobre S_{2in} .	37
3.11	Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación mediana sobre S_{2in} .	38
3.12	Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación grande sobre S_{2in} .	39
4.1.	Zeolita natural colonizada por la biomasa.	42
4.2.	Rastro municipal de Saltillo, Coahuila, México.	43

4.3.	Efluentes del rastro municipal de Saltillo, Coahuila, México.	43
4.4.	Configuración CSTR.	44
4.5.	Evolución de las variables CH_4 , pH y DQO en un experimento en modo por lotes.	47
4.6.	Esquema del método del modelo.	48
4.7.	Validación del modelo.	50
4.8.	Validación del observador sobre el modelo validado.	51
B.1.	Ilustración gráfica del Teorema .	73
C.1.	Análisis de DQO.	77

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se presenta de manera breve el estado del arte relacionado con la observación y control de procesos anaeróbicos para tratamiento de aguas residuales. Por otro lado, se presenta y plantea el problema afrontado, que consiste en la medición de variables y en el control de este bioproceso; además, se describe el trabajo a realizar, en donde se incluyen los objetivos de esta tesis, entre ellos la estimación de estados, el control del bioproceso y la identificación de parámetros de un bioreactor. Finalmente, se describe la organización de esta tesis.

1.1. Estado del Arte

Los años recientes se han caracterizado por un crecimiento acelerado de aguas residuales debido al consumo doméstico, industrial o agrícola. Actualmente, la digestión anaeróbica es uno de los métodos más eficientes para el tratamiento de aguas residuales con alta carga orgánica. La digestión anaeróbica ofrece una amplia variedad de ventajas económicas y ambientales; entre ellas, el no requerir de una etapa de oxigenación y el brindar agua tratada así como la producción de metano. Los productos de la digestión anaeróbica se pueden emplear para compensar los costos del tratamiento; por ejemplo, reutilizando y/o reciclando el agua tratada, empleando el biogás para generar energía o usando el bioabono, de alta calidad orgánica, como fertilizante. Además, dada la actual situación energética que se distingue por una demanda creciente de energía, precios elevados de ésta y una resposabilidad medioambiental implícita, este bioproceso tiene una relevancia adicional por la generaración de metano a partir de materiales residuales.

Sin embargo, en los procesos biológicos existen variables y parámetros necesarios para el control de los mismos que son de difícil acceso o que no se pueden medir [1], debido a restricciones técnicas o económicas. Por ejemplo, hay variables que sólo pueden medirse a partir de análisis químicos, los cuales son hechos fuera de línea y provocan retardos; otras variables requieren de sensores que actualmente son de alto costo y presentan poca factibilidad para su integración en sistemas de control. Por lo tanto, el diseño de observadores es un problema prioritario a resolver junto con la selección adecuada de sensores para la implementación de una determinada acción de control. De esta forma, la idea esencial es desarrollar sensores virtuales con la finalidad de estimar variables de difícil acceso, las cuales son de importancia crucial para la aplicación de estrategias de control. Asimismo, la digestión anaeróbica es un proceso sensible a las variaciones en las condiciones de operación, tales como potencial de hidrógeno, temperatura, sobrecargas hidraúlicas u orgánicas, entre otras. Es por ello que con la finalidad de garantizar un funcionamiento adecuado del proceso anaeróbico se requiere de la estimación de variables, aunado a la aplicación de estrategias de control.

En la literatura se han propuesto diferentes observadores. Entre ellos se encuentra el observador asintótico [2], el cual emplea un modelo no lineal y es robusto en presencia de incertidumbre de los parámetros. Sin embargo, la razón de convergencia depende de las condiciones de operación. En [3] se propone un observador en lazo cerrado para mejorar el observador asintótico; no obstante, tanto la sintonización como la implementación son complicadas.

El observador a intervalos, propuesto en [4] y [5], es una buena alternativa para contrarrestar los efectos de las incertidumbres del sistema; sin embargo, la razón de convergencia de la estimación no se puede sintonizar. Además, se puede inducir un efecto de sobreestimación en los intervalos estimados. Por otra parte, el observador propuesto en [6] está dedicado a la estimación de las entradas no medidas además de las variables de estado desconocidas; es un diseño basado en una linealización tangencial, la cual puede limitar el rango de operación del proceso.

En años recientes, se han empleado algoritmos difusos para diseñar observadores y controladores para bioprocesos [7], [8], [9], [10], dado que esta estrategia permite incorporar el conocimiento empírico en estructuras de control y observación; asimismo, los observadores y controladores difusos son fáciles de diseñar e implementar. En [11] se propone un observador Takagi-Sugeno; la idea principal es diseñar varios observadores locales e implementar una interpolación difusa para obtener la estimación de estados global. Esta propuesta ofrece un diseño y sintonización sencillos; sin embargo, es sensible a los cambios rápidos en los sustratos de entrada y el modelo del sistema se debe conocer dado que los observadores locales se desarrollan para modelos linealizados alrededor de diferentes puntos de operación. Por último, en [12] se propone un observador neuronal recurrente para el proceso anaeróbico de tratamiento de aguas. Aun cuando hace una buena estimación de las variables, el tipo de función de activación no permite un aprendizaje rápido de la dinámica del proceso; además, la variación de parámetros influye notablemente en su funcionamiento.

Como se puede ver, frecuentemente se supone el conocimiento completo del modelo del

sistema para el diseño de estimadores de estado no lineales; no obstante, esto no siempre es posible. Además, en algunos casos se proponen transformaciones no lineales particulares; sin embargo, tales transformaciones no son robustas, a menudo, en presencia de incertidumbres. Es por ello que los observadores neuronales son una alternativa interesante para evitar los problemas asociados a los observadores de estado basados en el modelo del sistema. Los observadores neuronales requieren de mediciones factibles de salidas y entradas así como de un algoritmo de entrenamiento a fin de aprender la dinámica del proceso, mientras que el conocimiento del modelo del sistema no es estrictamente necesario [12], [13], [14].

Paralelamente, en las últimas dos décadas se ha desarrollado un interés creciente por mejorar la operación de los bioprocesos a través de la aplicación de esquemas de control avanzados [15], [16], [17]. Los objetivos de control se enfocan en la regulación de la contaminación, en maximizar la producción de biogás y en mantener la estabilidad del proceso; con ello se busca reducir los costos de producción, incrementar el rendimiento y conservar la calidad del producto deseado.

Con la finalidad de afrontar los retos que impone la digestión anaeróbica, entre los que se encuentran la sensibilidad a cambios en las condiciones de operación, las incertidumbres en los parámetros del proceso y la dinámica altamente no lineal, se han implementado varias técnicas de control; por ejemplo: aproximaciones lineales, control robusto, control linealizante, control adaptable, control inteligente. Las aproximaciones lineales [18], [19] son eficientes alrededor de puntos de operación locales; sin embargo, no son fiables para variaciones grandes en las condiciones de operación. El control robusto [20], [21] permite un funcionamiento adecuado del proceso independientemente de los cambios en la dinámica; a pesar de ello, presenta el incoveniente de que se deben predefinir los límites de las incertidumbres. El control linealizante [10], [22] es una buena alternativa puesto que considera las no linealidades del proceso pero requiere del buen conocimiento de la estructura del modelo matemático. Por su parte, el control adaptable [23], [24], [25] requiere del buen conocimiento de la estructura de los parámetros del proceso, lo cual no se puede garantizar. Frecuentemente, estas técnicas presentan estructuras complejas difíciles de implementar.

Respecto al control inteligente, se han aplicado algoritmos de control difusos que permiten detectar sobrecargas orgánicas o componentes tóxicos dentro del sistema [7] y mantener el proceso estable a pesar de dichas perturbaciones. En [26] se utilizan sistemas de control difuso para automatizar bioprocesos y se muestra un estudio breve de aplicaciones industriales, en las cuales se puede incorporar el conocimiento heurístico de los operadores en las estrategias difusas. Otra alternativa interesante son los esquemas basados en el control PID, los cuales son fáciles de diseñar. En [27], [28], [29] se muestran las ventajas que presenta el controlador PI logaritmo/antilogaritmo (L/A), entre ellas, la sencillez que presenta, la facilidad de implementación, el considerar las restricciones de positividad de las variables y su eficiencia para el control de procesos anaeróbicos respecto a otras opciones de control. En conclusión, a fin de garantizar un funcionamiento adecuado del proceso de la digestión aneróbica, es esencial el desarrollo de sensores virtuales integrados en estrategias de control que sean fáciles de implementar.

1.2. Problemática y Trabajo a Realizar

1.2.1. Definición del Problema

La digestión anaeróbica se desarrolla en cuatro etapas sucesivas: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis, cada una con un objetivo determinado y una dinámica específica. La metanogénesis es una etapa muy sensible a las variaciones en la concentración de sustrato; debido a ello, el incremento de biomasa se puede detener por una producción excesiva de sustrato en las etapas anteriores [1]. Dependiendo de la amplitud y duración de estas perturbaciones en la concentración de sustrato, el medio se puede acidificar evitando el crecimiento de biomasa e incluso produciendo la muerte de bacterias; además, las sobrecargas hidráulicas pueden llevar el proceso al lavado (ausencia de bacterias activas al interior del reactor). A partir de estas situaciones, la degradación de sustrato y la producción de metano se pueden bloquear y detener el proceso. De esta forma la definición del problema se centra en los siguientes dos puntos:

Medición de variables.- La producción de metano, el crecimiento de biomasa y la degradación de sustrato son buenos indicadores de la actividad biológica al interior del reactor. Tales variables se pueden emplear para monitorear el proceso y para diseñar estrategias de control. Actualmente existen sensores comerciales de biogás para medir la producción de metano en los bioprocesos [30]. Sin embargo, tanto la biomasa como el sustrato son más restrictivos. Por un lado, los sensores de biomasa son de alto costo y se diseñan desde un punto de vista de la Biología, presentando poca factibilidad para propósitos de Control. Por otra parte, la medición de sustrato se hace fuera de línea mediante análisis químicos que requieren al menos de dos horas; este retraso dificulta el empleo del sustrato en estrategias de control. Es por ello que los observadores de estado son una alternativa interesante para enfrentar esta problemática. Los observadores estiman variables no disponibles para medición directa de un sistema a partir de mediciones de las señales de entradas y salidas. Además, en muchas ocasiones se supone el conocimiento completo o parcial de la dinámica del proceso para hacer el diseño; lo cual, sin embargo, no es posible siempre.

• Control del bioproceso.- Debido a que las sobrecargas hidráulicas pueden provocar el lavado del proceso, se requiere de la aplicación de una acción de control con la finalidad de rechazar perturbaciones y evitar que el proceso se detenga. Además de ello, se busca

lograr una alta eficiencia del proceso que se vea reflejada en una buena producción de biogás. Por tal motivo, tanto la supervisión del comportamiento del proceso así como la implementación de estrategias de control son tareas de suma importancia con el fin de garantizar una operación adecuada de la digestión anaeróbica. La idea principal es desarrollar acciones de control eficientes y fáciles de implementar.

1.2.2. Trabajo a Realizar

En esta tesis se propone un esquema de control inteligente híbrido para un proceso anaeróbico de tratamiento de aguas residuales, el cual toma lugar en un reactor completamente agitado con filtro de biomasa. Inicialmente, se diseña un observador neuronal basado en una red neuronal recurrente de alto orden; el propósito de este observador es estimar las variables de la metanogénesis: biomasa, sustrato y carbono inorgánico. La estructura del observador se basa en la tangente hiperbólica como función de activación y se entrena utilizando un algoritmo del filtro de Kalman extendido. Las principales ventajas que ofrece este observador son su alto desempeño y su bajo nivel de complejidad y sintonización; además de que el conocimiento del modelo no es estrictamente necesario. El observador es validado vía simulacion y experimentalmente (fuera de línea) en un modelo matemático con un sustrato sintético similar al de la industria papelera. Después de esto, se implementa un supervisor difuso con la finalidad de aplicar las acciones de control (agregar una base, razón de dilución) en función de las condiciones de operación. El supervisor se basa en un algoritmo Takagi-Sugeno y requiere de las variables: carga orgánica diaria por unidad de biomasa (ODL/X_2) e incremento en la produccion de metano (ΔQCH_4). La estrategia de control es validada vía simulación.

Por otra parte, se realizan experimentos, en modo por lotes, en un reactor completamente agitado con filtro de biomasa; el sustrato empleado es agua residual de un rastro de Saltillo, Coahuila, México, mientras que como filtro de biomasa se emplea zeolita natural. Se realiza una primera validación experimental de un modelo matemático del reactor utilizado; para ello se lleva a cabo una etapa de identificación de parámetros mediante el método del modelo. Posteriormente se hace una validación del observador con el modelo validado.

Objetivos

Los objetivos de esta tesis son:

- 1. Diseñar y validar un observador neuronal para la estimación de las variables de la metanogénesis en un proceso anaeróbico de tratamiento de aguas residuales.
- 2. Diseñar una estrategia de control que permita un funcionamiento adecuado de la di-

gestión anaeróbica.

- 3. Integrar el observador neuronal a una estrategia de control.
- 4. Identificar los parámetros del bioreactor anaeróbico y validar el observador propuesto bajo estas condiciones.

1.3. Organización de la Tesis

Esta memoria de tesis está organizada de la siguiente manera:

En el **Capítulo 2** se describe, por un lado, el proceso de la digestión anaeróbica, las etapas que la componen, las condiciones de operación que se consideran así como el modelo matemático con el cual se valida el observador y controlador. Por otro lado, se explican las redes neuronales, dando especial énfasis en las redes neuronales recurrentes de alto orden en tiempo discreto y en el filtro de Kalman extendido como método de entrenamiento para las mismas.

En el **Capítulo 3** se propone un observador neuronal para el proceso anaeróbico estudiado, como primer aportación, se hace la descripción del diseño y se establecen guías para la sintonización del esquema propuesto. Se muestra además, la validación vía simulación de dicho esquema comparado con el modelo matemático descrito en el capítulo 2, se compara con el observador propuesto en [12] y se hacen pruebas de variación de parámetros y de perturbaciones en las entradas. Adicionalmente, se describe la estrategia de control propuesta, como otra aportación, y se muestran los resultados en simulación con el observador neuronal integrado a este esquema al aplicar perturbaciones de diferente magnitud.

En el **Capítulo 4**, se explica el prototipo utilizado para la identificación de parámetros, como aportación final y se brinda una guía para la experimentación en un bioreactor real. Por otro lado, se valida el observador propuesto con los nuevos parámetros obtenidos.

En el **Capítulo 5** se presentan las conclusiones finales de esta tesis y se plantean perspectivas para trabajos futuros. Se mencionan los objetivos alcanzados y las mejoras que se pueden realizar al esquema propuesto.

En el **Apéndice A** se describe el cálculo de los puntos de equilibrio del modelo matemático que representa al proceso de digestión aneróbica desarrollado en un CSTR con filtro de biomasa a fin de encontrar las condiciones iniciales del sistema.

En el Apéndice B se presenta la demostración del Teorema 2.1.

1.3. ORGANIZACIÓN DE LA TESIS

En el **Apéndice** C se explica el protocolo experimental, en donde se describe el procedimiento para realizar el análisis de la demanda química de oxígeno (DQO).

En el Apéndice D se enlistan los artículos publicados resultado de este trabajo de tesis.

Capítulo 2

Conceptos Preliminares

En el presente capítulo se abordan los fundamentos teóricos requeridos para el desarrollo de esta tesis. Por una parte, se discute el proceso de la digestión anaeróbica, se hace una descripción general de este bioproceso, las etapas que lo componen, las condiciones de operación consideradas y el modelo matemático que lo representa. Por otra parte, se presentan las redes neuronales; en específico se tratan las redes neuronales recurrentes de alto orden discretas y el filtro de Kalman extendido como un algoritmo de entrenamiento para éstas.

2.1. Digestión Aneróbica

La digestión anaeróbica es un proceso biológico natural por medio del cual las moléculas complejas de materia orgánica (sustrato) son degradadas por diferentes grupos de microorganismos (biomasa) en ausencia de oxígeno. Tal degradación produce, además del agua tratada, un biogás constituido principalmente de metano (CH_4) y dióxido de carbono (CO_2) , así como una cantidad mínima de residuos orgánicos estables. Entre las ventajas y beneficios que ofrece el tratamiento anaeróbico se encuetran:

Alta eficiencia para tratar materia orgánica.

Bajo requerimiento energético y de nutrientes.

No se requiere de oxígeno.

Aporte ambiental (agua tratada y baja producción de residuos orgánicos) y energético (producción de metano).

2.1.1. Descripción del Proceso

La digestión anaeróbica es un proceso complejo y secuencial que se desarrolla en cuatro etapas:

• *Hidrólisis.*- Inicialmente un grupo de microorganismos, llamados bacterias hidrolíticas, degradan el material orgánico complejo en compuestos orgánicos simples.

Acidogénesis.- Durante esta etapa, las bacterias acidogénicas transforman los monómeros solubles en ácidos orgánicos, alcoholes y ácidos grasos volátiles (ácido acético, propiónico y butírico principalmente).

Acetogénesis.- En esta etapa las bacterias acetogénicas convierten los ácidos grasos volátiles en dióxido de carbono e hidrógeno.

Metanogénesis.- Por último, hay dos formas para sintetizar el metano; la primera por medio de la división del ácido acético $(CH_3COOH \rightarrow CH_4 + CO_2)$ en metano y dióxido de carbono, y la segunda, a través de la reducción del dióxido de carbono con hidrógeno $(CO_2 + 8H \rightarrow CH_4 + 2H_2O)$, la cual genera metano y agua. De ambas formas posibles, la reacción del acetato es el principal productor de metano debido a la limitada cantidad de hidrógeno disponible en este proceso [31].

En cada etapa se tiene una dinámica específica; las primeras tres presentan una dinámica rápida en comparación con la metanogénesis, la cual constituye la dinámica más lenta del proceso. Es por ello que la metanogénesis impone la dinámica global del proceso y se considera la etapa limitante. Por consiguiente, la presente tesis considera principalmente dicha etapa.

2.1.2. Condiciones de Operación

Existe una gran variedad de factores que influyen tanto en la razón de digestión como en la producción de biogás. En [32] se presenta una investigación detallada y comparativa referente a la inhibición de los procesos anaeróbicos. Algunos de los factores más importantes se discuten brevemente a continuación.

Temperatura. - Las comunidades de bacterias anaeróbicas pueden soportar temperaturas en el rango desde menor al punto de congelación hasta mayor a 57.2 °C. Sin embargo, la temperatura ideal para que prosperen es alrededor de los 36.7 °C (condiciones mesofílicas).

Potencial de hidrógeno (pH). El rango óptimo para la etapa de la metanogénesis es entre 6 y 8. Los iones de bicarbonato y los ácidos grasos volátiles tienen una gran influencia sobre el nivel de pH. Un nivel mayor a 8 causa la inhibición de la actividad biológica de las bacterias; mientras que un nivel menor a 6, durante un tiempo prolongado, puede causar un daño irreversible o la muerte de las bacterias, lo que genera el cese del proceso debido a la acidificación [33].

Tiempo de retención.- En los sistemas mesofílicos el tratamiento residual requiere de 15 a 30 días para lograr la degradación completa de los compuesto orgánicos.

 Mezclado.- El mezclado mejora el contacto entra el sustrato y la biomasa ya que favorece la habilidad de las poblaciones bacterianas para obtener nutrientes. Además, previene la formación de espuma y de gradientes de temperatura al interior del reactor [31]. Sin embargo, un mezclado excesivo puede desestabilizar el sistema; por lo tanto, se recomiendan velocidades lentas de mezclado.

El proceso de digestión anaeróbica considerado en esta tesis se desarrolla en un reactor completamente agitado con filtro de biomasa y operado en modo continuo [34]. Se considera este modo de operación comúnmente porque permite un tratamiento continuo del agua residual, lo que implica también una producción continua de biogás. Como se muestra en la Figura 2.1, el sustrato S_{2in} se alimenta al reactor con una razón de flujo de entrada Q_{in} , mientras que el agua tratada sale a la misma razón de flujo que la entrada, con el fin de mantener un volumen constante al interior del reactor, esto es: $Q_{out} = Q_{in} > 0$ (modo continuo). Bajo este modo de operación, la razón de dilución se puede calcular como $D_{in} = Q_{in}/V$ El filtro de biomasa tiene por objetivo conseguir una alta concentración de bacterias activas al interior del reactor; por lo tanto, se emplea para mejorar el tratamiento del sustrato y optimizar la producción de metano. En la práctica, la biomasa se fija a un soporte sólido, por ejemplo zeolita, u otros minerales o material biológico, para lograr el comportamiento de un filtro de biomasa.



Figura 2.1: Reactor completamente agitado con filtro de biomasa.

2.1.3. Modelo Matemático

En la Figura 2.2 se muestra un diagrama funcional para la digestión anaeróbica propuesto en [32] y modificado después en [35]. La biomasa se clasifica en dos tipos: X_1 , que corresponde a las bacterias hidrolíticas, acidogénicas y acetogénicas; y X_2 , que corresponde a las bacterias metanogénicas. Por otra parte, la carga orgánica se clasifica en S_1 , que modela las moléculas complejas y S_2 que representa las moléculas que son transformadas en ácido acético. Esta clasificación permite que el proceso se represente en una etapa de dinámica rápida, la cual involucra a la hidrólisis, acidogénesis y acetongénesis y en una etapa de dinámica lenta, la cual corresponde principalmente a la metanogénesis.



Figura 2.2: Diagrama funcional de la digestión anaeróbica.

A partir del diagrama funcional de la digestión anaeróbica, se deduce un modelo matemático del proceso. El modelo resultante consta de un conjunto de cinco ecuaciones algebraicas que modelan los fenómenos físico-químicos (equilibrio ácido-base y conservación de la materia), un conjunto de seis ecuaciones diferenciales ordinarias que modelan los fenómenos biológicos y dos ecuaciones para la fase gaseosa $(CH_4 \ y \ CO_2)$ que se considera como la salida del proceso:

Ecuaciones algebraicas:

$$HS + S^{-} - S_{2} = 0,$$

$$H^{+}S^{-} - K_{a}HS = 0,$$

$$CO_{2d} + B - IC = 0,$$

$$H^{+}B - K_{b}CO_{2d} = 0,$$

$$Z + [H^{+}] - B - S^{-} - [OH^{+}] = 0,$$

(2.1)

donde HS es el ácido acético no ionizado (mol/L), S^- es el ácido acético ionizado (mol/L), H^+ es el ión hidrógeno (mol/L), CO_{2d} es el dióxido de carbono disuelto (mol/L), B es el bicarbonato medido (mol/L), IC es el carbono inorgánico (mol/L), Z es el total de cationes (mol/L), OH^+ es el ion hidróxilo, mientras que K_a y K_b son constantes de equilibrio.

Ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned} X_{1} &= (\mu_{1} - k_{d1}) X_{1}, \\ \dot{S}_{1} &= -R_{6}\mu_{1}X_{1} + D_{in} \left(S_{1in} - S_{1}\right), \\ \dot{X}_{2} &= (\mu_{2} - k_{d2}) X_{2}, \\ \dot{S}_{2} &= -R_{3}\mu_{2}X_{2} + R_{4}\mu_{1}X_{1} + D_{in} \left(S_{2in} - S_{2}\right), \\ \dot{IC} &= R_{2}R_{3}\mu_{2}X_{2} + R_{5}\mu_{1}X_{1} - \lambda R_{1}R_{3}\mu_{2}X_{2} + D_{in} \left(IC_{in} - IC\right), \\ \dot{Z} &= D_{in} \left(Z_{in} - Z\right), \end{aligned}$$

$$(2.2)$$

donde μ_1 y μ_2 son las tasas de crecimiento para X_1 y X_2 respectivamente, D_{in} la tasa de dilución (h⁻¹), S_{1in} es la entrada de sustrato rápidamente degradable (mol/L), S_{2in} es la entrada de sustrato lentamente degradable (mol/L), IC_{in} es la entrada de carbono inorgánico (mol/L), Z_{in} es la entrada de cationes (mol/L), $R_1 \dots R_6$ son coeficientes de rendimiento producto/biomasa, mientras que k_{d1} y k_{d2} son las tasas de mortalidad para las biomasas X_1 y X_2 respectivamente.

Salida del proceso:

$$Q_{CH_4} = R_1 R_3 \mu_2 X_2, Q_{CO_2} = \lambda R_2 R_3 \mu_2 X_2,$$
(2.3)

donde λ es un coeficiente que considera la ley de presión parcial para el CO_{2d} .

La validación experimental del modelo matemático (2.1)-(2.3), que corresponde a un reactor completamente agitado anaeróbico con filtro de biomasa se puede encontrar en [11], [35], [36]. En esta tesis, dicho modelo se utiliza para validar el esquema de control inteligente híbrido propuesto para este proceso anaeróbico.

2.2. Redes Neuronales

Una red neuronal artificial es un procesador paralelo distribuido y masivamente interconectado, inspirado en las redes neuronales biológicas, que almacena conocimiento experimental y lo hace disponible para su uso [37]. Una red neuronal artificial o simplemente red neuronal, como se utiliza en esta tesis, se constituye de un número finito de neuronas (elemento estructural), las cuales están interconectadas entre ellas. La red neuronal presenta algunas similitudes con el cerebro, tales como: el conocimiento se adquiere a través de un proceso de aprendizaje y las conexiones interneuronales llamadas pesos sinápticos se utilizan para almacenar dicho conocimiento, entre otras [38]. Una de las estructuras de redes neuronales más útiles son las redes neuronales recurrentes, las cuales se distinguen de las redes neuronales multicapa en que tienen al menos un lazo de retroalimentación. Esta estructura recurrente tiene un gran impacto en la capacidad de aprendizaje y en el funcionamiento de la red neuronal [37]. Este tipo de arquitectura recurrente contiene memoria, es decir, es un sistema dinámico [39]. El uso de redes neuronales permite desarrollar algoritmos de control robustos a incertidumbres y errores de modelado.

Las redes neuronales recurrentes de alto orden (RHONN de su nombre en inglés "Recurrent High Order Neural Network") son una generalización de la redes Hopfield de primer orden; las RHONN se proponen en [40]. Este tipo de redes posee características tales como:

Modelado eficiente de sistemas dinámicos complejos.

Fácil implementación.

Estructura relativamente simple.

Capacidad de ajustar sus parámetros en línea.

De igual manera, las RHONN discretas poseen las mismas características que las RHONN continuas y son ideales para su uso en modelado, identificación y control de sistemas dinámicos discretos complejos.

2.2.1. Redes Neuronales Recurrentes de Alto Orden Discretas

Considérese el siguiente sistema no lineal de múltiples entradas y múltiples salidas:

$$x(k+1) = F(x(k), u(k)) + d(w(k)),$$
(2.4)

donde $x(k) \in \mathbb{R}^n$ es el vector de estado de la planta, $u(k) \in \mathbb{R}^m$ es el vector de entrada, y $F \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ es una función no lineal, $d(w(k)) \in \mathbb{R}^n$ son las perturbaciones del sistema y k es el tiempo de muestreo.

Considérese también la siguiente RHONN discreta:

$$\hat{x}_i(k+1) = w_i^{\top} z_i(\hat{x}(k), u(k)) \quad i = 1, \cdots, n,$$
(2.5)

donde $\hat{x}_i (i = 1, \dots, n)$ es el *i*-ésimo estado de la red neuronal, w_i es el respectivo vector de pesos adaptado en línea, $u = [u_1, \dots, u_m]^{\top}$ es el vector de entradas externo a la red neuronal

2.2. REDES NEURONALES

y $z_i(\hat{x}, u(k))$ está dada por:

$$z_{i}(\hat{x}, u(k)) = \begin{bmatrix} z_{i_{1}} \\ z_{i_{2}} \\ \vdots \\ z_{i_{L_{i}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \prod_{j \in I_{1}} \psi_{i_{j}}^{d_{i_{j}}(1)} \\ \prod_{j \in I_{2}} \psi_{i_{j}}^{d_{i_{j}}(2)} \\ \vdots \\ \prod_{j \in I_{L_{i}}} \psi_{i_{j}}^{d_{i_{j}}(L_{i})} \end{bmatrix}$$
(2.6)

donde L_i es el respectivo número de conexiones de alto orden, $\{I_1, I_2, \dots, I_{L_i}\}$ es una colección de subconjuntos no ordenados de dimensión $\{1, 2, \dots, n+m\}, d_{i_j}(k)$ son enteros no negativos y ψ_i se define como:

$$\psi_{i} = \begin{bmatrix} \psi_{i_{1}} \\ \vdots \\ \psi_{i_{n}} \\ \psi_{i_{n+1}} \\ \vdots \\ \psi_{i_{n+m}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S(\hat{x}_{1}(k)) \\ \vdots \\ S(\hat{x}_{n}(k)) \\ u_{1}(k) \\ \vdots \\ u_{m}(k) \end{bmatrix}$$
(2.7)

La función de activación $S(\bullet)$ en (2.7), se puede seleccionar entre diferentes alternativas dependiendo del tipo de aplicación. Entre las funciones que se pueden elegir se encuentran:

Función escalón o umbral.

• Función lineal a tramos.

Función sigmoidal (logística, tangente hiperbólica).

Función de base radial (gaussiana).

Entonces, el sistema no lineal (2.4), se puede aproximar mediante la siguiente RHONN discreta de configuración paralela:

$$\chi_i(k+1) = w_i^{*'} z_i(\chi(k), u(k)) + \epsilon_{z_i} \quad i = 1, \cdots, n,$$
(2.8)

donde $\chi_i (i = 1, \dots, n)$ es el *i*-ésimo estado de la red neuronal, ϵ_{z_i} es el error de aproximación acotado, el cual se puede reducir al incrementar el número de pesos ajustables [40]. Se supone que existe un vector de pesos ideal w_i^* tal que $\|\epsilon_{z_i}\|$ se pueda minimizar sobre un conjunto compacto $\Omega_{z_i} \subset \Re^{L_i}$. El vector de pesos ideal w_i^* es una cantidad artificial requerida

para propósitos de análisis [40]. Se supone que dicho vector ideal existe y es constante pero desconocido. Además, el error de estimación de pesos $\tilde{w}_i(k)$ se define como:

$$\tilde{w}_i(k) = w_i^* - w_i(k).$$
 (2.9)

Dado que w_i^* es constante, entonces:

$$\tilde{w}_i(k+1) - w_i(k) = w_i(k) - w_i(k+1), \quad \forall k \in 0 \cup Z^+$$
(2.10)

Entonces el vector de pesos se debe actualizar en línea mediante un algoritmo de entrenamiento.

2.2.2. Método de Entrenamiento con Filtro de Kalman Extendido

El método de entrenamiento mejor conocido para redes neuronales recurrentes es el algoritmo de retropropagación [41]. Sin embargo, dado que es un método de gradiente descendiente de primer orden, su velocidad de aprendizaje puede ser muy lenta [42]. Por ello, recientemente, se han introducido algoritmos basados en el filtro de Kalman extendido (EKF de su nombre en inglés "Extended Kalman Filter") para entrenar redes neuronales. La convergencia de aprendizaje se mejora utilizando los algoritmos basados en el EKF [42], [43].

El filtro de Kalman es un conjunto de ecuaciones matemáticas que brindan una solución computacional eficiente para estimar los estados de un sistema dinámico lineal con estados aditivos y salidas con ruido blanco [44]. En el entrenamiento de redes neuronales basadas en el filtro de Kalman, los pesos de la red se convierten en los estados a estimar, mientras que el error entre la salida de la red y la salida medida de la planta se considera como ruido blanco aditivo. Sin embargo, si el modelo es no lineal, el uso del filtro de Kalman se extiende mediante un proceso de linealización; el filtro resultante es conocido como el EKF. Debido a que la representación neuronal es no lineal, se requiere de un algoritmo del tipo del EKF. El objetivo del entrenamiento es encontrar los valores de los pesos óptimos, los cuales minimicen el error de predicción. En esta tesis se utiliza el algoritmo de entrenamiento basado en el EKF descrito por el sistema (2.11):

$$w_{i}(k+1) = w_{i}(k) + \eta_{i}K_{i}(k)e_{i}(k),$$

$$K_{i}(k) = P_{i}(k)H_{i}(k)M_{i}(k), \quad i = 1, \cdots, n,$$

$$P_{i}(k+1) = P_{i}(k) - K_{i}(k)H_{i}^{\top}(k)P_{i}(k) + Q_{i}(k),$$

(2.11)

con

$$M_{i}(k) = [R_{i}(k) + H_{i}^{\top}(k)P_{i}(k)H_{i}(k)]^{-1},$$

$$e_{i}(k) = y(k) - \hat{y}(k), \qquad (2.12)$$

donde $e_i(k) \in \Re^p$ es el error de observación, $P_i(k) \in \Re^{L_i \times L_i}$ es la matriz de covarianza del error de estimación en el paso $k, w_i(k) \in \Re^{L_i}$ es el vector de pesos adaptados en línea, w_i es el respectivo número de pesos de la red neuronal, $y \in \Re^p$ es la salida de la planta, $\hat{y} \in \Re^p$ es la salida de la red neuronal, η_i es la razón de aprendizaje, $K_i(k) \in \Re^{L_i \times p}$ es la matriz de ganancias de Kalman, $Q_i \in \Re^{L_i \times L_i}$ es la matriz de covarianza del ruido de estimación, $R_i \in \Re^{L_i \times p}$ es la covarianza del ruido de medición y $H_i(k) \in \Re^{L_i \times p}$ es la matriz en la cual cada entrada (H_{ij}) es la derivada de la *i*-ésima salida neuronal con respecto al *ij*-ésimo peso de la red (w_{ij}) ; y está dada por:

$$H_{ij} = \left[\frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w_{ij}(k)}\right]^{\top}$$
(2.13)

donde $i = 1, \dots, n$ y $j = 1, \dots, L_i$. Usualmente P_i, Q_i y R_i son inicializadas como matrices diagonales, con entradas $P_i(0), Q_i(0)$ y $R_i(0)$ respectivamente. Es importante comentar que $H_i(k), K_i(k)$ y $P_i(k)$ para el EKF son acotadas [44]; es decir, existen constantes $\overline{H} > 0, \overline{K} > 0$ y $\overline{P} > 0$ tales que:

1

$$\begin{aligned} \|H(k)\| &\leq \overline{H}, \\ \|K(k)\| &\leq \overline{K}, \\ \|P(k)\| &\leq \overline{P}. \end{aligned}$$
(2.14)

Sea $\hat{y}(k)$ la repesentación de la red neuronal:

$$\hat{y}(k) = \phi(\chi(k), u(k)),$$
 (2.15)

donde ϕ es una función de los estados de la red neuronal y en el caso general, una función del vector de entradas externo a la red. Aplicando la regla de la cadena, $H_{ij}(k)$ se debe calcular como:

$$\frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w(k)} = \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial \chi(k)} \cdot \frac{\partial \chi(k)}{\partial w(k)}.$$
(2.16)

Reescribiendo (2.8) como (2.17), de tal forma que sea linealizada con una rutina de derivadas recurrentes [41], [45], da como resultado el sistema dinámico (2.18).

$$\chi(k+1) = T(\chi(k), u(k), w(k)).$$
(2.17)

Consecuentemente:

$$\frac{\partial \chi(k+1)}{\partial w(k)} = \frac{\partial T(\chi(k), u(k), w(k))}{\partial \chi(k)} + \frac{\partial T(\chi(k), u(k), w(k))}{\partial w(k)},$$
(2.18)

donde $T(\bullet, \bullet, \bullet)$ es una función no lineal de $\chi(k)$, u(k) y w(k); además de que determina el estado de transición de cada neurona. Como se supone que los estados iniciales de la red no dependen de los pesos [41], entonces $H_{ij}(0) = 0$.

2.2.3. Diseño de un Observador Neuronal

En esta subsección se muestra la metodología general para el diseño de un observador neuronal recurrente de alto orden (RHONO de su nombre en inglés "Recurrent High Order Neural Observer"). Este esquema se basa en la propuesta descrita en [46]. Primero se considera el siguiente sistema no lineal, el cual se supone observable:

$$\begin{aligned} x(k+1) &= F(x(k), u(k)) + d(w(k)), \\ y(k) &= h(x(k)), \end{aligned}$$
 (2.19)

donde $x(k) \in \mathbb{R}^n$ es el vector de estado de la planta, $u(k) \in \mathbb{R}^m$ es el vector de entrada, $y(k) \in \mathbb{R}^p$ es el vector de salida, h(x(k)) es una función lineal de los estados del sistema, $d(w(k)) \in \mathbb{R}^n$ es el vector de perturbaciones del sistema, $F(\bullet)$ es un vector de campo suave y $F_i(\bullet)$ sus entradas; entonces (2.19) se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}
x(k) &= \begin{bmatrix} x_1(k) & \cdots & x_i(k) & \cdots & x_n(k) \end{bmatrix}^{\top} \\
d(k) &= \begin{bmatrix} d_1(k) & \cdots & d_i(k) & \cdots & d_n(k) \end{bmatrix}^{\top} \\
x_i(k+1) &= F_i(x(k), u(k)) + d_i(k), \quad i = 1, \dots, n, \\
y(k) &= h(x(k)).
\end{aligned}$$
(2.20)

Para el sistema (2.20) se propone un observador neuronal tipo Luenberger, con la siguiente estructura:

$$\hat{x}(k) = \begin{bmatrix} \hat{x}_{1}(k) & \cdots & \hat{x}_{i}(k) & \cdots & \hat{x}_{n}(k) \end{bmatrix}^{\top} \\
\hat{x}_{i}(k+1) = w_{i}^{\top} z_{i}(\hat{x}(k), u(k)) + g_{i}e(k), \\
\hat{y}(k) = h(\hat{x}(k)), \quad i = 1, \dots, n,$$
(2.21)

con $g_i \in \Re^p$ definido como el vector de ganancias del observador, $z_i(\hat{x}(k), u(k))$ definido como en (2.6): los vectores de pesos se adaptan en línea con un EFK desacoplado determinado como en (2.11). El error de salida se define como:

$$e(k) = y(k) - \hat{y}(k)),$$
 (2.22)

y el error de estimación de estado como:

$$\hat{x}(k) = x(k) - \hat{x}(k)).$$
 (2.23)

Entonces la dinámica de (2.23) se puede expresar como:

$$\hat{x}_i(k+1) = \tilde{w}_i(k) z_i(\hat{x}(k), u(k)) + \dot{\epsilon}_{z_i} - g_i C \hat{x}, \qquad (2.24)$$

con $\in_{z_i} = \in_{z_i} + d_i(k)$. Por otra parte, la dinámica de (2.9) es:

$$\hat{w}_i(k+1) = \tilde{w}_i(k) - \eta_i K_i(k) e(k), \qquad (2.25)$$

Considerando (2.11), (2.22), (2.23), (2.24) y (2.25), se establece el siguiente teorema:

Teorema 2.1. Para el sistema (2.20) el RHONO (2.21), entrenado con el algoritmo basado en el EFK (2.11), asegura que el error de estimación (2.23) y el error en la salida (2.22) sean semiglobalmente uniformemente ultimamente acotado (SGUUB de su nombre en inglés "Semiglobally Uniformly Ultimately Bounded"); además, los pesos del RHONO permanecen acotados.

Para obtener más detalles respecto al diseño y al análisis de estabilidad de este observador neuronal, ver [46]. La prueba del **Teorema 2.1** se presenta en el Apéndice B. En la Figura 2.3 se observa el esquema del observador propuesto.



Figura 2.3: Esquema del observador neuronal recurrente de alto orden.

Capítulo 3

Estimación de Estados y Estrategia de Control

En este capítulo se presenta el esquema propuesto para la estimación de estados de la metanogénesis; para tener acceso a las variables de díficil medición. Posteriormente, el observador neuronal se integra a una estrategia de control inteligente que permite mantener al proceso en la región de operación aun en presencia de perturbaciones en la entrada.

3.1. Observador Neuronal para un Proceso Anaeróbico

En esta sección se propone el diseño de este observador neuronal. Inicialmente se describen los requerimientos previos de diseño; enseguida se presenta el esquema propuesto, y por último se muestra una serie de simulaciones que permiten verificar el buen desempeño del observador neuronal.

3.1.1. Antecedentes

Se propone un observador neuronal discreto para estimar las variables de la metanogénesis: biomasa, sustrato y carbono inorgánico, X_2 , S_2 y *IC* respectivamente. Para ello, el modelo (2.1)-(2.3) se discretiza, por medio de una aproximación de Euler, como se describe a continuación.

Discretización por el Método de Euler

Considere el siguiente sistema no lineal:

$$\dot{x} = f(x) + g(x)u + d(t),$$
(3.1)

donde $x \in \Re^n$, $f(x) : \Re^n \to \Re^n$ y $g(x) : \Re^{n \times m} \to \Re^n$ son funciones no lineales, $u \in \Re^m$ el vector de entradas, $d(t) \in \Re^n$ es un término de perturbación. La discretización por el método de Euler se construye como:

$$x(k+1) = x(k) + T(f(x(k)) + g(x(k) + d(k)u(k)),$$
(3.2)

donde $k \in Z^+$ es el tiempo de muestreo.

22

Aplicando la discretización por el método de Euler al proceso de digestión anaeróbica (2.1)-(2.3):

$$\begin{aligned} X_1(k+1) &= X_1(k) + (\mu_1(k) - k_{d1}) X_1(k), \\ S_1(k+1) &= S_1(k) - R_6 \mu_1(k) X_1(k) + D_{in}(k) \left(S_{1in}(k) - S_1(k)\right), \\ X_2(k+1) &= X_2(k) + (\mu_2(k) - k_{d2}) X_2(k), \\ S_2(k+1) &= S_2(k) - R_3 \mu_2(k) X_2(k) + R_4 \mu_1(k) X_1(k) + D_{in}(k) \left(S_{2in}(k) - S_2(k)\right), \\ IC(k+1) &= IC(k) + R_2 R_3 \mu_2(k) X_2(k) + R_5 \mu_1(k) X_1(k) - \lambda(k) R_1 R_3 \mu_2(k) X_2(k) \\ &+ D_{in}(k) \left(IC_{in}(k) - IC(k)\right), \\ Z(k+1) &= Z(k) + D_{in}(k) \left(Z_{in}(k) - Z(k)\right). \end{aligned}$$
(3.3)

Una vez que se aplica la discretización por el método de Euler, se obtiene un modelo similar a (2.19). Por consiguiente, se puede proponer un RHONO para estimar los estados del sistema discretizado.

3.1.2. Diseño

El RHONO propuesto para la estimación de X_2 , S_2 e IC presenta la siguiente estructura:

$$\hat{X}_{2}(k+1) = w_{11}S(\hat{X}_{2}(k)) + w_{12}S^{2}(\hat{X}_{2}(k)) + w_{13}S(\hat{I}C(k))
+ w_{14}S^{2}(\hat{X}_{2}(k))D_{in}(k) + g_{1}e(k),
\hat{S}_{2}(k+1) = w_{21}S(\hat{S}_{2}(k)) + w_{22}S^{2}(\hat{S}_{2}(k)) + w_{23}S(\hat{I}C(k))
+ w_{24}S^{2}(\hat{S}_{2}(k))S_{2in}(k) + g_{2}e(k),
\hat{I}C(k+1) = w_{31}S(\hat{I}C(k)) + w_{32}S^{2}(\hat{I}C(k)) + w_{33}S(\hat{X}_{2}(k))
+ w_{34}S^{2}(\hat{I}C(k))D_{in}(k) + w_{35}S^{2}(\hat{I}C(k))IC_{in}(k) + g_{3}e(k),$$
(3.4)

con la salida dada como:

$$\hat{Q}_{CH_4} = R_1 R_3 \hat{\mu}_2 \hat{X}_2,
\hat{Q}_{CO_2} = \hat{\lambda} R_2 R_3 \hat{\mu}_2 \hat{X}_2,$$
(3.5)

donde $\hat{\mu}_2$ es la tasa de crecimiento máxima dependiente de \hat{S}_2 , $\hat{\lambda}$ es un coeficiente que considera la ley de presión parcial para el CO_{2d} y depende de \hat{IC} , mientras que g_i son las ganancias del observador tipo Luenberger.

Como se muestra en (3.4), el observador neuronal propuesto tiene una configuración paralela. Además, el vector de pesos se actualiza en línea mediante un EKF dado por (2.11). La función de activación empleada es la tangente hiperbólica:

$$S(x) = \alpha \tanh(\beta x), \tag{3.6}$$

con $\alpha = \beta = 1$. La elección de (3.6) se hace debido a que las funciones de activación antisimétricas permiten que la red neuronal aprenda la dinámica del sistema de una manera más rápida en comparación con otras funciones, cómo se explica en [47]. Además de ello, el cálculo de la derivada de la tangente hiperbólica en (3.10) es más sencillo. En lo que respecta al cálculo de $H_{ij}(k)$, éste se obtiene de la siguiente manera:

$$H_{ij}(k) = \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w(k)} = \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial \chi(k)} \quad \frac{\partial \chi(k)}{\partial w(k)},$$
(3.7)

donde $\chi(k)$ representa cada uno de los estados estimados de la metanogénesis. Entonces:

$$H_{ij}(k) = \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial \chi(k)} \cdot \frac{\partial \chi(k)}{\partial w(k)}.$$
(3.8)

De (3.8), el segundo factor se obtiene a partir de aplicar la regla de la cadena en la estructura del RHONO propuesta:

$$\frac{\partial \chi(k+1)}{\partial w(k)} = \frac{\partial w_i^{\top} z_i(\chi(k), u(k))}{\partial \chi(k)} \cdot \frac{\partial \chi(k)}{\partial w(k)} + \frac{\partial w_i^{\top} z_i(\chi(k), u(k))}{\partial w(k)} \cdot \frac{\partial w(k)}{\partial w(k)},$$
(3.9)

donde w_i es el vector de pesos de cada uno de los estados estimados de la metanogénesis, z_i es función del vector de entradas y de las funciones de activación aplicadas a los estados estimados de la metanogénesis. Por lo tanto, se tiene:

$$\frac{\partial \chi(k+1)}{\partial w(k)} = \frac{\partial \chi(k)}{\partial w(k)} \cdot w_i^{\mathsf{T}} z_i'(\chi(k), u(k)) + z_i(\chi(k), u(k)),$$
(3.10)

donde z'_i es la derivada de las funciones de activación y de las entradas respecto a los estados estimados de la metanogénesis.

3.1.3. Guías de Sintonización

Dado que el algoritmo de entrenamiento basado en el EKF requiere de la puesta a punto de diferentes parámetros, a continuación se establece un procedimiento a fin de lograr la sintonización del observador neuronal propuesto. Primeramente, las matrices de covarianza del EKF se inicializan como matrices diagonales y cumplen con:

24

$$P_i(0) > R_i(0) > Q_i(0).$$
 (3.11)

La condición (3.11) implica que no se requiere de un conocimiento a priori para inicializar el vector de pesos [45]. De hecho, entradas mayores en $P_i(0)$ corresponden a una incertidumbre mayor en el conocimiento a priori. Se recomienda seleccionar $P_i(0)$ en el rango de 100 – 1000, $R_i(0)$ en 1 – 100 y $Q_i(0)$ en 0 – 1, para las otras matrices de covarianza, siempre respetando (3.11). Un valor de cero en la matriz de covarianza del ruido de estimación $Q_i(0)$, representa un proceso ideal [45]. De esta forma, las matrices de covarianza para el EKF se inicializan como matrices diagonales con elementos diferentes de cero:

$$P_1(0) = P_2(0) = P_3(0) = 1000,$$

$$R_1(0) = R_2(0) = 10, R_3(0) = 1,$$
 (3.12)

$$Q_1(0) = Q_2(0) = 1, Q_3(0) = 0.1.$$

Se puede aplicar un escalamiento arbitrario a $P_i(0)$, $R_i(0)$ y $Q_i(0)$ sin alterar la evolución del vector de pesos. Dado que la salida de la red neuronal no depende directamente del vector de pesos, la matriz H se inicializa como H(0) = 0. También se supone que los valores de los pesos se inicializan en valores aleatorios pequeños de media cero y distribución normal.

La razón de aprendizaje (η) determina la magnitud del término de corrección aplicado para ajustar los pesos de las neuronas cuando se entrena; normalmente requiere de valores pequeños para lograr un buen entrenamiento, por lo que se acota en el rango $0 < \eta_i < 1$. El valor de η tiene una gran repercusión en la convergencia del observador; en consecuencia, si η es pequeña entonces el transitorio del estado estimado es sobreamortiguado; si η es grande entonces el transitorio del estado estimado es subamortiguado; por último, si η es más grande que cierto valor crítico entonces el estado estimado se vuelve inestable. Por lo tanto, se recomienda seleccionar inicialmente η en un valor pequeño e incrementarlo gradualmente si es necesario. En [45] se discuten más detalles en cuanto a la influencia de la razón de aprendizaje.

En cuanto a la ganancia del observador tipo Luenberger (g), ésta se obtiene por prueba y error; desafortunadamente hay pocos fundamentos científicos claros que permitan definirla. Sin embargo, en base a la experiencia de entrenamiento obtenida en las simulaciones, es recomendable seleccionarla en el rango $0 < g_i < 0.1$, para obtener un buen funcionamiento del observador neuronal.
3.1.4. Validación del Observador

En esta subsección se presentan los resultados obtenidos al validar el RHONO propuesto (3.4) vía simulación; se hacen pruebas introduciendo perturbaciones en las entradas del sistema y variando las tasas de crecimiento de la biomasas del proceso. Además de ello, se hace una comparación con el observador neuronal propuesto en [12]. Finalmente se realiza una validación experimental fuera de línea empleando datos de un bioreactor, que utiliza un sustrato sintético similar a efluentes de la industria papelera.

Validación vía Simulación

El modelo de la digestión anaeróbica (2.1)-(2.3) y el observador neuronal (3.4) se implementan utilizando Matlab/Simulink[®] El propósito es verificar el funcionamiento del RHONO vía simulaciones.

Como primer prueba, el RHONO se inicializa en valores aleatorios para comprobar la convergencia de la estimación. Además, con el objeto de verificar la sensibilidad al cambio en las entradas del observador, se introduce una pertubación positiva de 30% de S_{2in} en el sustrato de entrada en t = 200 horas y se elimina en t = 500 horas. La simulación se hace suponiendo las mediciones de pH, Q_{CH_4} y Q_{CO_2} así como las entradas del sistema. El RHONO propuesto en esta tesis se compara con el esquema propuesto en [12] bajo las mismas condiciones de operación. Los resultados se pueden ver en la Figura 3.1.

Aun cuando ambos observadores se inicializan en un valor aleatorio, se puede observar que en ambos esquemas, la convergencia de los RHONOs es evidente en el inicio de la simulación. Se obtuvieron otros resultados con inicialización diferente. En ellos se puede ver una fase inicial transitoria diferente; sin embargo, de igual forma tienden al estado estimado. Por lo tanto, se concluye que las condiciones iniciales del RHONO no influyen en el funcionamiento del observador.

Aunque el observador propuesto en [12] es capaz de hacer una buena estimación, cualitativamente, de X_2 , no es capaz de estimar adecuadamente IC ni S_2 . Por su parte, en el RHONO propuesto en esta tesis, se obtienen estimaciones adecuadas de X_2 y S_2 ; no obstante, IC se estima con un error transitorio durante la perturbación pero dicho error se elimina durante el estado estacionario. Este error se puede deber a la estructura propuesta. Es posible que la red neuronal no sea capaz de aprender todas las dinámicas relacionadas a la producción de IC; sin embargo, esto no representa un problema relevante puesto que IC se puede medir. Además, el esquema de control propuesto depende únicamente del crecimiento de biomasa estimada \hat{X}_2 y de la producción de metano como se describe más adelante.

Es importante resaltar, que el esquema propuesto en esta tesis es más simple que el esquema propuesto en [12]. Además, las funciones de activación se definen como la tangente hiperbólica, mientras que en [12] se definen como función logística. Como se explicó anteriormente, las funciones antisimétricas, como la tangente hiperbólica, permiten que la red neuronal aprenda la dinámica del proceso de una forma más rápida y la derivada de dicha función se obtiene de manera más fácil al calcular la matriz H.



Figura 3.1: Comparación del observador neuronal considerando una perturbación en S_{2in} .

Por otro lado, se prueba la tolerancia del observador a los cambios en los parámetros del sistema; tal variación toma lugar en las tasas de crecimiento de las biomasas. Se consideran los siguientes aspectos: una variación positiva de 30 % en la tasa de crecimiento máxima de las bacterias metanogénicas μ_{2max} , una variación negativa de 30 % en la tasa de crecimiento máxima de las bacterias hidrolíticas, acidogénicas y acetogénicas μ_{1max} y una perturbación de 100 % en la entrada de sustrato lentamente degradable S_{2in} .

El funcionamiento del RHONO propuesto se ilustra en la Figura 3.2. Se observa que tras la convergencia del observador, el carbono inorgánico IC se estima con un error despreciable durante el estado transitorio; sin embargo, una vez más, durante el estado estacionario se estima adecuadamente. Por su parte, tanto la biomasa X_2 como el sustrato S_2 se estiman correctamente durante toda la simulación. Así, es claro que la red neuronal ha aprendido la dinámica de estas variables y con ello las estima apropiadamente. Por lo tanto, se verifica la robustez del RHONO propuesto a la variación de parámetros.



Figura 3.2: Funcionamiento del RHONO considerando variaciones en μ_{1max} , μ_{2max} y S_{2in} .

Además, en la Figura 3.3 se considera una perturbación en la entrada S_{2in} y ruido en las salidas. Este ruido representa las incertidumbres o errores de medición en las salidas QCH_4 y QCO_2 . Como se puede ver, bajo estas condiciones, existe un error en la estimación de carbono inorgánico, posiblemente debido a la estructura propuesta para esta variable en (3.4). Sin embargo, la biomasa y el sustrato se estiman correctamente durante, prácticamente, toda la simulación. Con esto se comprueba que a pesar de posibles errores en la medición de la salida, el observador neuronal se mantiene estimando adecuadamente las variables de la metanogénesis.

Finalmente, en la Figura 3.4 se consideran perturbaciones sobre la entradas de 100% de S_{2in} , además de una perturbación de 20% de D_{in} . Ambas perturbaciones son aplicadas al proceso en t = 200 horas y se eliminan en t = 500 horas. Se puede ver que el observador neuronal hace una buena estimación de los estados X_2 y S_2 . A pesar de esto, el observador no logra alcanzar el máximo del estado S_2 al momento de aplicar las perturbaciones; esto es debido al aumento de la magnitud de la perturbación. La variable *IC* se estima con un error durante la perturbación pero se estima correctamente durante el estado estacionario. Es también esta variable, la que tarda más tiempo en llegar a los pesos ideales por lo que al inicio de la simulación se observa un lapso mayor para llegar al estado estimado.



Figura 3.3: Funcionamiento del RHONO con ruido en las salidas y una perturbación en S_{2in} .



Figura 3.4: Funcionamiento del RHONO considerando perturbaciones sobre S_{2in} y D_{in} .

Validación Experimental del Observador Neuronal

En esta subsección se realiza una validación experimental del RHONO propuesto. Los datos reales se obtienen a partir de un experimento realizado en [11], el cual se describe a continuación. Inicialmente, se desarrolla un experimento en modo por lotes en un CSTR con filtro de biomasa; dicho experimento se desarrolla con 5 L de sustrato a 5 g DQO/L. Después de ello, se introduce una etapa de configuración continua con un flujo de entrada de 0.4 L/h a 7.5 g DQO/L para simular un escalón sobre S_{2in} . El sustrato empleado es sintético y similar a los efluentes de una fábrica de papel; ver [11] para una explicación detallada de la puesta en marcha real de un experimento de digestión aneróbica. Como se mencionó antes, la biomasa no se puede medir y el sustrato se mide a partir de análisis químicos con un retardo de al menos dos horas; es por ello que la biomasa X_2 , el sustrato S_2 y el carbono inorgánico IC se obtienen a través del modelo (4.2) utilizando para ello la medición en línea del pH. Los resultados de este cálculo se comparan con los valores obtenidos del observador, cómo se muestra en la Figura 3.5.



Figura 3.5: Validación experimental del RHONO propuesto.

La biomasa se estima con un error despreciable durante toda la simulación; cuando se introduce el escalón en el sustrato de entrada, se puede observar un error en la biomasa estimada. Este error puede ser inducido por el cambio abrupto en las condiciones del sistema; a pesar de ello, el estado estimado converge al estado calculado. En la validación vía simulación se observa que el error de estimación generado al aplicar el escalón va aumentando conforme la amplitud del escalón va creciendo. Dado que la medición de pH está directamente relacionada al carbono inorgánico IC, esta variable se estima con un error mínimo durante toda la simulación. En contraste, la estimación de degradación de sustrato S_2 presenta un error en el estado transitorio, el cual se elimina en el estado estacionario. La causa de estos errores es debido a que la estructura del RHONO propuesto es simple. A pesar de los errores durante el estado transitorio, el observador neuronal es capaz de estimar adecuadamente las tres variables de la metanogénesis. De esta forma, se concluye que el observador neuronal es una muy buena alternativa para estimar aquellos estados importantes en un proceso de digestión anaeróbica.

3.2. Estrategia de Control

En la presente sección se propone un esquema de control inteligente híbrido para la digestión anaeróbica, el cual permite elegir la acción de control más apropiada en función de las condiciones de operación del sistema. Este esquema se basa en un supervisor difuso, el cual emplea la estimación de biomasa y la producción de metano para determinar la actividad biológica al interior del reactor, y en función de ésta, aplicar la acción de control más adecuada para evitar el lavado.

3.2.1. Descripción

Las acciones de control son generadas por un controlador L/A, que es la técnica más apropiada para procesos anaeróbicos [35], [48] ya que ofrece ventajas como:

- Toma en cuenta las restricciones físicas del proceso (positividad) y la saturación de los actuadores.
- No requiere del conocimiento del modelo matemático del proceso.

Permite considerar cualquier tipo de controlador.

Presenta una estructura simple por lo que es fácil de implementar.

El principio de esta técnica se basa en las transformaciones logarítmicas y antilogarítmicas de las variables del proceso, para llevar el espacio de trabajo con restricciones físicas a un espacio sin restricciones. En la Figura 3.6 se muestra el esquema de transformación.



Figura 3.6: Principio de la técnica L/A.

Primero, mediante una transformación logarítmica, se llevan las variables del espacio de trabajo real (espacio restringido) a un espacio de trabajo simulado (espacio sin restricciones), en el cual se puede emplear cualquier controlador clásico; en esta tesis se utiliza un controlador proporcional integral (PI) digital. Posteriormente, se regresa al espacio restringido mediante una transformación antilogarítmica.

Tras una transformación del controlador PI digital aplicando la técnica L/A, se obtiene el controlador PI L/A [33]. La expresión general para el PI L/A está dada por:

$$U_{k} = U_{k-1} \left(\frac{Y_{k-1}}{Y_{k}}\right)^{K_{p}} \left(\frac{Y_{k}^{*}}{Y_{k}}\right)^{K_{i}}$$
(3.13)

con las ganancias calculadas como:

$$K_{p} = \alpha K_{i},$$

$$K_{i} = \frac{1}{1+\alpha} \frac{\ln\left(\frac{U_{max}}{-U^{*}}\right)}{\ln\left(\frac{Y^{*}}{Y^{*}+\Delta}\right)},$$
(3.14)

en donde Y es la variable medida, Y^* es el valor deseado, U_{max} es el valor máximo de control, U^* es el valor de control en el punto de equilibrio, mientras que Δ y α son parámetros de regulación y corrección del controlador PI L/A.

Operación en Lazo Abierto

A partir del conocimiento empírico, se sabe que la digestión anaeróbica es un proceso capaz de trabajar en presencia de perturbaciones pequeñas, puesto que el sistema es capaz de rechazarlas por sí mismo. Sin embargo, en presencia de perturbaciones mayores, se requiere de una acción de control para mantener la estabilidad del proceso y evitar el lavado.

Acción de Control: Agregar una Base

El agregar una base, por ejemplo bicarbonato, es una de las acciones de control frecuentemente utilizadas [33]. Esta acción permite la regulación del pH, en el interior del reactor, a un nivel deseado para la actividad biológica, lo cual favorece, a su vez, la producción de metano. El objetivo de esta acción es mantener fijo el nivel de bicarbonato del proceso de digestión anaeróbica.

La base agregada b_{inc} afecta directamente las entradas de carbono inorgánico IC_{in} ($IC_{in} + b_{inc} - IC$) y de cationes Z_{in} ($Z_{in} + b_{inc} - Z$) en el sistema (2.1)-(2.3). Además, influye indirectamente sobre las variables X_2 y S_2 al ser un intermediario del acoplamiento entre las fases biológica y físico-química [49].

De esta forma, la ley de control L/A (3.13), es adaptada para la acción de control b_{inc} de la siguiente manera:

$$b_{inc_{k}} = (b_{inc_{k-1}} - b_{inc_{min}}) \left(\frac{B_{k-1}}{B_{k}}\right)^{K_{p}} \left(\frac{B^{*}}{B_{k}}\right)^{K_{i}} + b_{inc_{min}}.$$
(3.15)

Las ganancias se calculan a partir de (3.14), con las expresiones mostradas a continuación:

$$K_{p} = \alpha K_{i},$$

$$K_{i} = \frac{1}{1+\alpha} \frac{\ln\left(\frac{b_{inc_{max}} - b_{inc_{min}}}{-b_{inc_{min}}}\right)}{\ln\left(\frac{B^{*}}{B^{*} - \Delta}\right)},$$
(3.16)

donde α y Δ son los parámetros de regulación; Δ tiene una influencia sobre el tiempo de respuesta mientras que α actúa sobre el amortiguamiento; $b_{inc_{max}}$ y $b_{inc_{min}}$ están directamente relacionados con la saturación de los actuadores, ya que representan respectivamente el valor mínimo y máximo del bicarbonato a agregar y B^* es el valor deseado de bicarbonato expresado en mol/L.

En [49] se muestra que mediante la acción b_{inc} el sistema es parcialmente no controlable, puesto que no permite controlar las variables de las etapas rápidas de la digestión aneróbica. Sin embargo, los trabajos de estabilidad y control tratados en esta tesis se sitúan a nivel de la etapa lenta; es decir, la metanogénesis, por lo que dicha limitación no representa una dificultad. En [49] se muestra además que se conserva una buena producción de metano utilizando esta acción de control. Dado que las perturbaciones de amplitud grande no pueden compensarse por esta vía, se requiere de otra acción de control.

Acción de Control: Razón de Dilución

La razón de dilución permite controlar variables biológicas y rechazar perturbaciones de mayor amplitud en comparación con la acción b_{inc} . Sin embargo, la desventaja de esta acción es que la producción de metano se reduce debido al decremento en la tasa de dilución. Además, es necesario preparar un tanque para almacenar un eventual excedente de sustrato.

De esta forma, la ley de control L/A (3.13), es adaptada para la acción de control D_k de la siguiente manera:

$$D_k = D_{k-1} \left(\frac{B_{k-1}}{B_k}\right)^{K_{p_D}} \left(\frac{B^*}{B_k}\right)^{K_{i_D}}$$
(3.17)

Las ganancias se calculan a partir de (3.14), con las expresiones mostradas a continuación:

$$K_{p_D} = \alpha_D K_{i_D},$$

$$K_{i_D} = \frac{1}{1 + \alpha_D} \frac{\ln\left(\frac{D_{max}}{D^*}\right)}{\ln\left(\frac{B^*}{B^* + \Delta_D}\right)}.$$
(3.18)

donde α_D , Δ_D son los parámetros de regulación, D_{max} es el valor máximo de la tasa de dilución, B^* es el valor deseado de bicarbonato expresado en mol/L y D^* es el valor de la tasa de dilución en el punto de equilibrio (h⁻¹).

3.2.2. Supervisor Difuso: Takagi-Sugeno

Con la finalidad de combinar las ventajas de las técnicas de control antes descritas, se desarrolla un supervisor difuso basado en un algoritmo Takagi-Sugeno [50], [51] que permite la combinación de los tres modos de operación dependiendo de la evolución del sistema. La conmutación entre las acciones de control se realiza de forma progresiva a fin de evitar comportamientos oscilatorios. El supervisor difuso emplea dos variables: ODL/X_2 y ΔQCH_4 , las cuales se describen a continuación.

Carga Orgánica Diaria por Unidad de Biomasa

La ODL/X_2 es la cantidad de carga orgánica que una unidad de biomasa puede tratar en un día de trabajo; su importancia radica en que permite conocer los límites de operación del proceso. La ODL/X_2 se define como:

$$ODL_{X_2} = \frac{D_k A_2 S_{2_0}}{X_2}.$$
(3.19)

donde D_k es la razón de dilución (h⁻¹) definida como (3.17), A_2 es la amplitud de la perturbación en el sustrato de entrada S_{2in} (mol/L), S_{2o} es el valor inicial de S_{2in} (mol/L) y X_2 (UA) es la biomasa, que en este trabajo se considera como el estado estimado \hat{X}_2 .

La ODL/X_2 es una variable muy importante para la estabilidad del proceso, puesto que permite tomar una decisión sobre que acción de control aplicar dependiendo de la evolución del sistema. En (3.19) se puede ver que la ODL/X_2 depende de A_2 , por lo que una perturbación grande puede desestabilizar el proceso, para evitarlo, una alternativa es disminuir el valor de D_k .



Figura 3.7: Conjuntos difusos para la variable ODL/X_2 .

En presencia de una perturbación en el sustrato de entrada, la ODL/X_2 puede incrementarse abruptamente a un valor que excede las condiciones de los límites de estabilidad (valor crítico): por consiguiente, el proceso tiende al lavado. Si la ODL/X_2 está sobre su valor crítico entonces se debe aplicar una acción de control que permita el crecimiento de la biomasa y por lo tanto, disminuir el valor de ODL/X_2 y estabilizar el sistema. Por el contrario, si está debajo de su valor crítico, entonces el sistema puede operar en lazo abierto. En este trabajo, el valor crítico se ha determinado por conocimiento empírico. Además, el comportamiento de esta variable se puede representar por medio de conjuntos difusos, los cuales se asocian a una acción de control (lazo abierto, acción b_{inc} , acción D) y la conmutación entre estos conjuntos se realiza mediante un supervisor Takagi-Sugeno. Dicha conmutación es progresiva para evitar comportamientos oscilatorios provocados por una conmutación abrupta. Los límites de los conjuntos difusos se obtienen haciendo pruebas, de manera independiente, de cada una de las acciones de control. Los conjuntos difusos que representan ODL/X_2 se definen como muestra la Figura 3.7.

Incremento en la Producción de Metano

Por otra parte, ΔQCH_4 permite tener una estimación de la amplitud de la perturbación; a partir de ésta se pueda decidir la accion de control que se debe aplicar. Además, el comportamiento de esta variable se puede representar por medio de conjuntos difusos, los cuales se asocian a un modo de operación (lazo abierto, lazo cerrado) y la conmutación entre estos conjuntos se realiza mediante un supervisor Takagi-Sugeno. La variable ΔQCH_4 se define como:

$$\Delta QCH_4 = Q_{CH_4} - Q_{CH_{4eg}}, \qquad (3.20)$$

donde Q_{CH_4} es la producción de metano (mol/h) y $Q_{CH_{4eq}}$ es la producción de metano en el punto de equilibrio (mol/h). Los conjuntos difusos que representan ΔQCH_4 se definen como muestra la Figura 3.8.



Figura 3.8: Conjuntos difusos para la variable ΔQCH_4 .

Los límites de los conjuntos difusos se obtienen haciendo pruebas, de manera independiente, de las acciones de control y de los modos de operación de la digestión anaeróbica.

3.2.3. Integración del Observador

La estructura final del esquema de control inteligente híbrido se muestra en la Figura 3.9. En dicho esquema se puede ver que la estimación de estado de la biomasa \hat{X}_2 se integra al supervisor Takagi-Sugeno, el cual determina, entre las posibles acciones de control, la más conveniente. Con ello se logra estabilizar el sistema y maximizar la producción de metano. En la Figura 3.9 se puede ver también la integración del RHONO en el supervisor difuso. Además, se incluye el modo de operación en lazo abierto, puesto que la digestión aneróbica funciona adecuadamente ante perturbaciones pequeñas; por lo tanto, en esos casos la estrategia de control ofrece una ventaja económica al no requerir agregar una base (ahorro en insumos), ni modificar la razón de dilución, lo que implica el uso de bombas (ahorro en energía de operación).



Figura 3.9: Esquema del control inteligente híbrido.

3.2.4. Validación del Esquema de Control

En esta subsección se muestran los resultados obtenidos al validar el esquema de control inteligente híbrido vía simulación considerando escenarios realistas.

Perturbación Pequeña

El esquema de control propuesto se implementa utilizando Matlab/Simulink[®] Se considera una perturbación típica en la digestión anaeróbica: un escalón sobre S_{2in} con amplitud $A_2 = 0.5$; es decir, un incremento de 50% en S_{2in} , que se introduce en t = 200 horas. Con el fin de permitir la convergencia del estado estimado \hat{X}_2 al estado real X_2 , el estado estimado se utiliza a partir de t = 100 horas. Esto permite evitar el estado transitorio de dicha estimación. El funcionamiento de la estrategia propuesta se ilustra en la Figura 3.10.

Se puede observar que el valor de ΔQCH_4 pertenece al conjunto difuso BAJO, mientras que ODL/X_2 pertenece al conjunto BAJO. Ambos conjuntos difusos están asociados al modo de operación correspondiente al lazo abierto. Esto implica que la variación corresponde a una perturbación pequeña; por lo tanto, no se requiere de una acción de control. Así, el supervisor permite una operación en lazo abierto, por lo que b_{inc} y D mantienen sus valores de equilibrio

durante toda la simulación como se observa en la Figura 3.10. En consecuencia, la biomasa \hat{X}_2 y el bicarbonato medido B presentan un comportamiento típico de lazo abierto.



Figura 3.10: Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación pequeña sobre S_{2in} .

Perturbación Mediana

Se considera un escalón sobre S_{2in} con una amplitud $A_{2in} = 2.0$; es decir, un incremento de 200 % en S_{2in} , en t = 200 horas. El funcionamiento de la estrategia propuesta se observa en la Figura 3.11.

Como se puede ver, al ocurrir la perturbación, tanto ΔQCH_4 como ODL/X_2 incrementan su valor hasta alcanzar un nivel de pertenencia correspondiente al conjunto difuso ALTO, por lo que el sistema adquiere el modo de operación de lazo cerrado aplicando la acción de control D. Al continuar la evolución del bioproceso, ΔQCH_4 continúa perteneciendo al conjunto difuso ALTO, asociado al modo de operación de lazo cerrado; sin embargo, ODL/X_2 decrementa su nivel para pertenecer ahora al conjunto difuso MEDIO, por lo cual se aplica la acción de control b_{inc} , deteniendo la acción previa D. Por último, ΔQCH_4 disminuye su valor hasta pertenecer al conjunto BAJO asociado al modo de operación en lazo abierto, al igual que ODL/X_2 . Lo anterior implica que el sistema vuelva a operar en lazo abierto.



Figura 3.11: Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación mediana sobre S_{2in} .

Perturbación Grande

Se introduce un escalón sobre S_{2in} con amplitud $A_{2in} = 2.7$; es decir, un incremento de 270 % en S_{2in} , en t = 200 horas. El funcionamiento de la estrategia propuesta se observa en la Figura 3.12.

Cuando ocurre la perturbación, ΔQCH_4 incrementa su valor hasta pertenecer al conjunto difuso ALTO, el cual es asociado al modo de operación en lazo cerrado. ODL/X_2 adquiere un nivel de pertenencia al conjunto ALTO; esto implica que la perturbación es grande y el proceso requiere la acción de control D. El supervisor permite la aplicación de dicha acción, con lo que \hat{X}_2 y B presentan un comportamiento de lazo cerrado. Conforme la acción se aplica, ΔQCH_4 mantiene su pertenencia al conjunto ALTO (lazo cerrado) mientras que ODL/X_2 disminuye su valor hasta pertenecer al conjunto MEDIO, el cual está asociado a la acción b_{inc} . En ese momento la acción D se detiene y se aplica la acción b_{inc} . En respuesta a esta situación. \hat{X}_2 y B disminuyen su valor cuando D se detiene; cuando b_{inc} se aplica, tanto \hat{X}_2 como B vuelven a crecer hasta llegar a un nuevo punto de equilibrio. Aunado a esto, el observador induce un comportamiento oscilatorio en \hat{X}_2 . También puede advertirse un incremento en la producción de metano gracias al efecto de la acción b_{inc} . Finalmente, ΔQCH_4 sale del conjunto ALTO y llega al BAJO (lazo abierto) mientras que ODL/X_2 disminuye su valor hasta pertenecer al conjunto BAJO (lazo abierto). Esta situación indica que la perturbación ha sido rechazada completamente. Bajo esas condiciones, el supervisor detiene la acción b_{inc} y el proceso vuelve a su operación en lazo abierto.



Figura 3.12: Funcionamiento del esquema de control inteligente híbrido para una perturbación grande sobre S_{2in} .

Para el caso de perturbaciones mayores a 270% en S_{2in} , la oscilación inducida por el observador impide que el supervisor controle el proceso. Por lo tanto, el sistema tiende al lavado. De cualquier forma existe un valor crítico para el cual el supervisor no puede controlar el bioproceso debido a la magnitud de las perturbaciones.

Capítulo 4

Estudio Experimental

En este capítulo se describe la etapa experimental de este trabajo de investigación, que consiste en experimentos en un proceso anaeróbico utilizado para el tratamiento de aguas residuales de rastro. Se emplea un bioreactor completamente agitado con filtro de biomasa en modo por lotes. Con los resultados de estas pruebas se obtiene una base de datos que permite la identificación de parámetros del proceso con los cuales se valida el observador propuesto.

4.1. Descripción del Prototipo

En el desarrollo de esta sección se describen el material biológico, las aguas residuales y el equipo empleado para la implementación de experimentos de la digestión anaeróbica en un CSTR con filtro de biomasa.

4.1.1. La Biomasa

Los cultivos de bacterias empleados corresponden a bacterias anaeróbicas pertenecientes a una biopelícula formada en zeolita natural a partir de aguas residuales de un rastro de la ciudad de Saltillo, Coahuila. La preparación del material biológico se realizó en trabajos previos [52]; esta etapa consta de una serie de experimentos en modo por lotes para conseguir:

La aclimatación de las bacterias al sustrato.

La colonización de la zeolita por los microorganismos.

El comportamiento hidrodinámico de filtro de biomasa, permite obtener una alta concentración de microorganismos en el interior del reactor [33], lo que favorece un tratamiento eficaz del sustrato y mejora la producción de metano. Para fines prácticos, el filtro de biomasa se implementa inmovilizando las bacterias en un soporte sólido natural o sintético. En [53] se presenta un estudio la digestión de estiércol, en donde la biomasa se inmoviliza en zeolita; en [52] analiza el efecto de diferentes tamaños de partículas de zeolita en la eficiencia de un proceso anaeróbico de tratamiento de aguas residuales de un rastro. En esta tesis se utilizó una zeolita natural proveniente de San Luis Potosí, tamizada para obtener un tamaño de partícula de 9-10 mesh [52]. En la Figura 4.1 se muestra la zeolita depositada en el fondo del reactor y cubierta de biopelícula.



Figura 4.1: Zeolita natural colonizada por la biomasa.

4.1.2. El Sustrato

Las muestras de sustrato fueron tomadas de un rastro de la ciudad de Saltillo, el cual se muestra en la Figura 4.2; dicho rastro cuenta con la certificación federal TIF (Tipo de Inspección Federal), otorgada a las plantas procesadoras de carnes que cumplen con todas las normas de sanidad e higiene del gobierno Mexicano.

Los efluentes de los rastros poseen una fuerte concentración de materia orgánica; se caracterizan por contener una alta concentración de proteínas, grasas, aceites, sólidos suspendidos, otros productos de la industria de la carne y pH básicos. Los efluentes de este rastro se clasifican dentro de la industria alimentaria como mayores a 2000 mg/L [54]. La composición promedio de este tipo de agua residual se muestra en la Tabla 1, mientras que en la Figura 4.3 se muestran fotografías de los efluentes que se generan luego de la separación de residuos sólidos. Estos efluentes llegan a un contenedor de aguas residuales, posteriormente pasan por un proceso de tratamiento aeróbico, finalmente, una parte del agua tratada es empleada para el riego de áreas verdes en el rastro y la otra parte es integrada a la red municipal de agua y saneamiento.

4.1. DESCRIPCIÓN DEL PROTOTIPO



Figura 4.2: Rastro municipal de Saltillo, Coahuila, México.

Elemento	Valor
Sólidos solubles	33.5~%
pH	8.0-8.5
Total de sólidos	$5166 \text{ mg } \mathrm{L}^{-1}$
Total de sólidos volátiles	$3387 \text{ mg } \mathrm{L}^{-1}$
Grasas	$1057 \text{ mg } \mathrm{L}^{-1}$
Alcalinidad	$1791 \text{ mg } \mathrm{L}^{-1}$
DQO	$5945 \text{ mg } \mathrm{L}^{-1}$

Tabla 4.1: Características del agua residual del rastro.



Figura 4.3: Efluentes del rastro municipal de Saltillo, Coahuila, México.

4.1.3. El Reactor Anaeróbico

EL CSTR empleado es un prototipo de laboratorio de la marca $Applikon^{\textcircled{B}}$; este sistema se compone de los siguientes elementos:

- Bioreactor.-. Contenedor de cristal con capacidad de 7 L, que cuenta con una tapa metálica para sellarlo herméticamente, en la cual se ubican los sensores de pH, temperatura, O_2 disuelto, nivel de líquido y velocidad de agitación.
- Controlador ADI 1010.- Dispositivo encargado de la regulación de variables: pH, temperatura, O_2 disuelto, nivel de líquido y velocidad de agitación.

Consola ADI 1025.- Dispositivo conformado por los actuadores para la regulación de variables; entre ellos, bombas para alimentación y extracción de sustrato, transferencia de calor, agregación de bases, etc.

En la Figura 4.4 se observa el bioreactor anaeróbico y los elementos que lo integran.



Figura 4.4: Configuración CSTR.

El prototipo descrito anteriormente se utiliza bajo las siguientes condiciones:

- Agitación.- La velocidad de agitación a la cual se trabaja es de 100 rpm durante todo el experimento.
- Sensores.- Se utiliza el sensor de pH y el de temperatura, la cual se regula por medio de una mantilla que calienta el bioreactor. Por otro lado, se implementa un subsistema para la medición de biogás basado en el desplazamiento de líquido.

Sistema de adquisición de variables.-. Se construye una base de datos de las varibles pH y temperatura mediante el programa $BioXpert\ Lite^{\mathbb{R}}$.

En la Figura 4.4 se muestra la configuración final del CSTR utilizada para la etapa experimental.

4.2. Guía de Experimentación

En esta sección se describe un experimento en modo por lotes del CSTR una vez establecida la configuración y condiciones de operación.

4.2.1. Experimento en Modo por Lotes

En un experimento en modo por lotes, la muestra inicial de sustrato es única durante el proceso. Éste se mantiene sin flujos de entrada ni de salida, es decir $Q_{in} = Q_{out} = 0$. Es recomendable realizar una serie de este tipo de experimentos para determinar la repetitividad de resultados, así como detectar fuentes y tipos de fallas en el prototipo. De la misma manera, los resultados obtenidos son útiles para identificar parámetros del modelo matemático. A continuación se describen las cuatro fases para realizar un experimento en modo por lotes.

Preparación del Sustrato y del Bioreactor

La primer fase consiste en recolectar una muestra de sustrato del rastro. Dada la capacidad del bioreactor se considera un volumen de aproximadamente 5 L. Las muestras fueron tomadas directamente del efluente generado después de la separación de residuos sólidos. Durante el transporte al laboratorio, las muestras se conservan a baja temperatura para evitar actividad biológica o química que eventualmente pudieran provocar las altas temperaturas ambientales de la región. En el laboratorio es necesario separar al menos 2 mL de la muestra para realizar un análisis de DQO (demanda química de oxígeno). Después de colocar la zeolita natural colonizada por biomasa en el fondo del reactor se agrega el resto del agua residual del rastro. Posteriormente se coloca la tapa metálica para evitar la entrada de aire. Se conectan los sensores y se encienden los sistemas de agitación, de control temperatura y de adquisición de datos; asimismo, el sistema de medición de producción de biogás se lleva a equilibrio.

Las condiciones iniciales consideradas en los experimentos realizados fueron: aproximadamente 4.5 L de aguas residuales del rastro, DQO inicial alrededor de 5800 mg/L, 400mL de zeolita natural colonizada, pH inicial alrededor de 7.2. La temperatura en todos los experimentos fue de 37°C.

Fase Inicial del Experimento

Las primeras horas son muy importantes para el desarrollo del experimento. El oxígeno atrapado en la parte superior del reactor es consumido por bacterias anóxicas. Durante las primeras 5 horas, el pH desciende, lo cual es un indicativo de que la etapa de acidogénesis está en desarrollo; posteriormente, el pH vuelve a incrementarse, hasta alcanzar un valor constante, lo que significa que la etapa de acidogénesis ha concluido. En general, el valor de pH en el equilibrio es alrededor de 7. En caso de que el pH llegara a valores menores a 5.5 es necesario agregar una base para llevarlo a un valor cercano a 7. En los experimentos realizados, el valor mínimo alcanzado por el pH fue de 6.36 para después estabilizarse alrededor de 6.6.

Evolución del Proceso

La adquisición de valores de pH y temperatura se realiza de manera automática cada hora: sin embargo, la medición de biogás es manual y debe realizarse cada vez que la bureta de almacenamiento de biogás llegue a su nivel máximo; cada que esto ocurra se requiere purgar (liberar el biogás acumulado) el sistema de medición para regresarlo a su nivel de equilibrio. Asimismo, se requiere tomar muestras diarias (cuando menos dos por día) de sustrato de al menos 2 mL para analizar la evolución de DQO, lo que permite observar la degradación de sustrato. La Figura 4.5 muestra la evolución de pH, DQO y la producción de biogás acumulado en uno de los experimentos realizados.

Fin del Experimento

Esta fase implica que la producción de biogás se detiene, por lo que la digestión anaeróbica ha concluido. Asimismo, la DQO llega a un valor mínimo, lo que se considera como la degradación máxima alcanzada en el bioproceso. Se debe detener el controlador de temperatura, detener el motor de agitación, así como la adquisición de datos. Se debe remover la muestra al interior del reactor, para comenzar con un nuevo experimento.



Figura 4.5: Evolución de las variables CH_4 , pH y DQO en un experimento en modo por lotes.

4.3. Identificación de Parámetros del Modelo

Esta etapa tiene como objetivo el cálculo de los valores de los parámetros del modelo matemático del prototipo. Para ello, se utilizan los datos obtenidos en los experimentos realizados. La identificación de parámetros es necesaria porque el proceso estudiado en esta tesis presenta características diferentes al proceso para el cuál el modelo (2.1)-(2.3) fue validado; por ejemplo, el tipo de sustrato, el tipo y cantidad de bacterias utilizadas son diferentes en uno y otro proceso.

La identificación de parámetros del reactor utilizado en la fase experimental se realiza por medio del método del modelo [55], [56] descrito en la Figura 4.6. El error de salida se minimiza a través de un criterio cuadrático y de un algoritmo de optimización. Como en todo algoritmo de optimización, se deben tomar precauciones necesarias para evitar el cálculo de mínimos locales que se encuentran cercanos a mínimos globales. En el caso general, se conoce un intervalo de valores reales con lo cual la optimización se simplifica y permite la elección de un criterio apropiado.

Los datos de salida de los experimentos realizados se comparan con los resultados del modelo de la digestión anaeróbica definido en (4.2) bajo las mismas condiciones de operación.



Figura 4.6: Esquema del método del modelo.

El error de medición se calcula para definir el criterio $J(\Theta)$ por medio de:

$$J(\Theta) = \sum_{experimentos} \sqrt{\sum_{medicion} \frac{(y_{medida} - y_{simulada})^2}{y_{medida}^2}}.$$
 (4.1)

donde Θ es el vector de parámetros. Teniendo el criterio (4.1), ahora se emplea un algoritmo de optimización no lineal para encontrar el valor de Θ que minimiza $J(\Theta)$; en este caso se emplea la función *minsearch* de *Matlab*[®], la cual es una función no lineal que permite encontrar los parámetros que minimizan el criterio $J(\Theta)$.

Los primeros parámetros que se deben verificar son los biológicos de la metanogénesis; es decir, los rendimientos y los coeficientes de inhibición. Por lo tanto, se considera únicamente el modelo biológico de la etapa lenta dado por:

$$\begin{aligned}
\dot{X}_2 &= \mu_2 X_2, \\
\dot{S}_2 &= -R_3 \mu_2 X_2, \\
Q_{CH_4} &= R_1 R_3 \mu_2 X_2, \\
Q_{CO_2} &= R_2 R_3 \mu_2 X_2,
\end{aligned}$$
(4.2)

con:

$$\mu_2 = \frac{S_2}{k_{s2}(1 + \frac{k_a}{H^+}) + S_2 + \frac{S_2^2}{k_{i2}(1 + \frac{k_a}{H^+})}},\tag{4.3}$$

donde k_a es la constante de equilibrio ácido-base del medio entre S^- y HS, k_{s2} es la constante de saturación de crecimiento de X_2 , k_{i2} es la constante de inhibición por exceso de sustrato S_2 , mientras que R_1 , R_2 y R_3 son coeficientes de rendimiento producto/biomasa.

De esta forma, la medición del pH se utiliza para calcular $H^+ = 10^{-pH}$ El resultado de este cálculo se inyecta en el modelo (4.2). También es necesaria la medición de biogás, ya que se utiliza para definir el criterio de optimización $J(\Theta)$.

Los parámetros a identificar son las constantes de saturación k_{s2} , así como la tasa de crecimiento máxima μ_{2max} y la condición inicial para la biomasa X_2 . Por otra parte, se fijan arbitrariamente los valores de R_1 , R_2 y R_3 . Haciendo estas consideraciones, se ejecuta el algoritmo de optimización; los resultados obtenidos se muestran a continuación:

Valores Fijos:

$$k_{i2} = = 8.22E^{-4},$$

$$R_3 = 350.$$

Valores Identificados:

$$\begin{array}{rcl} \mu_{2max} &=& 0.020, \\ k_{s2} &=& 2.1228 E^{-5}, \\ X_{20} &=& 0.0073, \\ R_1 &=& 0.35, \\ R_2 &=& 0.1. \end{array}$$

4.3.1. Validación del Modelo

A fin de corroborar que los parámetros obtenidos del proceso de identificación sean congruentes, se procede a comparar los resultados de la simulación del modelo (4.2) con los resultados experimentales de biogás y sustrato.

La simulación del modelo entrega resultados en moles; por esta razón, se debe hacer una conversión para obtener unidades comparables con las mediciones de los experimentos. Para el caso del biogás se utiliza el siguiente factor de conversión:

 $mol \Rightarrow L$, factor de conversión: 22.4,

el cual fue obtenido de manera experimental en un sistema de medición similar al utilizado en el desarrollo de esta tesis [35].

Por otro lado, se considera que el sustrato lentamente degradable S_2 es equivalente a la DQO, con el factor de conversión:

$$\frac{mg}{L} \Rightarrow \frac{mol}{L}$$
, factor de conversión: $1.1E^{-5}$

Este factor se obtiene a partir de un análisis de las reacciones químicas que se llevan a cabo en el proceso de transformación de materia orgánica. Para esta tesis, se utilizó un valor de la literatura [35]; para trabajos futuros, es recomendable verificar la composición del sustrato (agua residual) para obtener un factor de conversión más preciso.

La Figura 4.7 muestra los resultados de la validación del modelo, en ésta se despliegan las gráficas de comparación de la producción de biogás y de sustrato lentamente degradable S_2 . Se puede observar que el modelo simulado aun cuando sólo considera la metanogénesis representa adecuadamente los resultados reales ya que aproxima tanto el biogás como la DQO. Con estas pruebas, el modelo (4.2) queda validado para el proceso utilizado. Para complementar la validación, se recomienda realizar experimentos con diferentes escenarios (duración de experimentos, DQO inicial, volumen de sustrato, etc.) a fin de asegurar la validez del modelo en un amplio rango de operación.



Figura 4.7: Validación del modelo.

4.3.2. Validación del Observador con el Modelo Validado

Dado que no se realizaron experimentos en modo continuo, no es posible representar la entrada de un escalón al sistema. Por esta razón, la validación del observador se hace sobre el modelo validado en la sección previa. De esta forma, los parámetros identificados son utilizados en el modelo matemático (2.1)-(2.3); los otros parámetros tienen valores típicos obtenidos de la literatura [11], [35]. La Figura 4.8 muestra una comparación entre los resultados obtenidos de simular el modelo validado experimentalmente y la estimación efectuada por el observador neuronal. Se considera una perturbación sobre la entrada de 100% de S_{2in} en t = 300 y se elimina en t = 600.



Figura 4.8: Validación del observador sobre el modelo validado.

Se puede ver en la comparación que el tiempo de convergencia del observador se incrementa; cabe mencionar que se mantienen las condiciones de sintonización propuestas en el capítulo 3, a excepción de la razón de aprendizaje, la cual se resintoniza a fin de mejorar la convergencia. Esto no representa una gran dificultad puesto que el observador estima adecuadamente los estados aun sin dicha resintonización. Las condiciones iniciales empleadas son las mismas que en el capítulo 3, se observa como estas condiciones provocan un estado transitorio más prolongado, por lo que la convergencia a los pesos ideales que requiere el esquema se retrasa. Este tiempo de convergencia se atribuye a la propia estructura del observador, la cual se ve afectada por la variación de un gran número de parámetros. A fin de mejorar este tiempo, se recomienda una resintonización del observador en lo que se refiere a matrices de covarianza, ganancias del observador y razones de aprendizaje. Aun así, tras la convergencia, se puede ver una estimación apropiada tanto de X_2 como de S_2 ; en especial X_2 es estimada adecuadamente durante el resto de la simulación. Por su parte, \hat{S}_2 después de la convergencia, no logra alcanzar los puntos máximos al momento de aplicar la perturbación; sin embargo, la estimación es adecuada. En cuanto a \hat{IC} se puede ver que es la variable que presenta mayor error de estimación y tiempo de convergencia; a pesar de ello, durante el estado estacionario la estimación es adecuada. Este error se atribuye a la estructura simple que se propone para la estimación de esta variable, la cual presenta la dinámica más compleja de las variables estimadas; sin embargo, aunque IC es una de las variables importantes dentro del proceso, el error de estimación no representa un problema, puesto que IC no es la variable más relevante para indicar la actividad biológica al interior del reactor, además de que puede ser medida.

Finalmente, aun cuando validar el observador fuera de línea no es fácil, esta validación constituye un primer paso para la implementación en tiempo real del esquema propuesto. Para poder realizar una validación en línea de este esquema en el prototipo de laboratorio se requiere contar con datos de IC_{in} , ya sea mediante un sensor o a partir de un cálculo indirecto empleando información disponible (como el pH y el sustrato de entrada), del análisis de DQO en el sustrato de entrada, de válvulas para la regulación de flujos, de bombas para alimentar el sustrato y extraer el agua tratada, además de tanques de almacenamiento para prevenir posibles excesos de sustrato. Asimismo, es recomendable contar con la medición automatizada de Q_{CH_4} y Q_{CO_2} (una opción es el uso de sensores de biogás), que son variables de entrada indispensables para el observador. Adicionalmente, antes de la validación en línea del esquema propuesto, se recomienda realizar un proceso de re-identificación de parámetros con una mayor base de datos experimentales; lo anterior para corroborar y complementar los resultados obtenidos en esta tesis.

Capítulo 5

Conclusiones y Perspectivas

En este último capítulo se establecen las conclusiones obtenidas del trabajo de investigación el cual se divide en una fase de teoría y simulaciones, y en un fase experimental; de ambas fases se obtienen resultados interesantes cuyos puntos más importantes se abordan en este capítulo.

5.1. Conclusiones

En esta tesis se propone, a fin de cumplir con el primer objetivo de la misma, un observador neuronal basado en una red neuronal recurrente de alto orden, entrenada con un filtro de Kalman extendido y cuyas funciones de activación son tangentes hiperbólicas. El objetivo del RHONO es estimar las variables de la metanogénesis: concentración de biomasa, degradación de sustrato y producción de carbono inorgánico, dentro de un proceso de digestión aneróbica desarrollado en un CSTR con filtro de biomasa, operando en modo continuo. El entrenamiento del RHONO se hace en línea. Las variables de la metanogénesis se estiman a partir de las razones de flujo de metano y dióxido de carbono, estas variables son medidas comúnmente en este bioproceso; además, para hacer esta estimación se suponen las mediciones de pH y de las entradas del sistema. Los resultados en simulación muestran la efectividad del observador propuesto aun bajo perturbaciones en el sistema y la robustez del RHONO a la variación de parámetros. Con estos resultados, se concluye que las redes neuronales son una herramienta recomendable para la estimación de procesos biológicos pues los representan adecuadamente.

Por otra parte, debido a que este observador neuronal se puede integrar en estrategias de control que requieran de biomasa y/o sustrato, el esquema propuesto se integra a un supervisor difuso. conformando así un esquema de control inteligente híbrido, con lo cual se cumple uno de los objetivos de la tesis. El diseñar una estrategia difusa por sí misma, no representa una gran dificultad; el problema viene en las variables que emplea dicha estrategia.

Por ello, el integrar sensores virtuales que estimen adecuadamente las variables del proceso debe ser el primer problema a resolver. En este trabajo, dada la correcta estimación de la biomasa X_2 mediante un RHONO, esta variable se puede integrar al supervisor difuso. El esquema de control propuesto permite evitar el lavado en el proceso de digestión anaeróbica al detectar la actividad biológica al interior del reactor basándose en la biomasa estimada X_2 y aplica la acción de control más apropiada dependiendo de la evolución del sistema, alcanzando así otro de los objetivos de la tesis. Los resultados en simulación ilustran la eficiencia de la estrategia de control propuesta.

Por otro lado, a fin de conseguir el último objetivo de la tesis, se lleva a cabo la identificación de parámetros del bioreactor utilizado en la fase experimental. Para esto se realiza una serie de experimentos que requieren de la medición automática de pH, la medición manual de biogás y el análisis de DQO; la validación experimental del RHONO propuesto muestra la aplicabilidad de este esquema. Dado que uno de los factores limitantes en la implementación de estrategias de control es la falta de sensores en línea, los resultados de este observador neuronal son una aternativa interesante que se puede aplicar en bioreactores continuos que tratan diferentes tipos de sustrato, entre ellos, efluentes de aguas residuales de un rastro. Es por ello que las investigaciones deben continuar a fin de implementar el observador neuronal en tiempo real. Esta tarea puede ser compleja, ya que requiere de la configuración en modo continuo del bioreactor en primera instancia, y lo más relevante, la puesta a punto del observador puede ser una tarea díficil sobre todo por la sintonización del mismo. Por ello, se requiere de la realización de una serie de experimentos que permitan verificar el funcionamiento del observador en línea.

5.2. Perspectivas

Para trabajos futuros se recomienda, con la finalidad de aumentar el desempeño del observador neuronal, utilizar una razón de aprendizaje dinámica que dependa de las condiciones de operación del sistema, con el propósito de mejorar la capacidad de aprendizaje de la red neuronal bajo perturbaciones en el sistema. Puesto que se cuenta con la medición en línea de pH, esta variable puede servir de base para la razón de aprendizaje dinámica. Además, el esquema de estimación de estados se puede complementar agregando más términos a la estructura propuesta, esto puede mejorar la tolerancia del observador a la variación de parámetros.

En lo que respecta al supervisor difuso, se deben formalizar los límites de los conjuntos difusos propuestos debido a que se obtuvieron por experiencia. Esto puede mejorar el esquema propuesto en cuanto a los tiempos de respuesta y a la producción de metano.

Por otra parte, en la etapa experimental se puede eficientar el sistema de medición de biogás. Por un lado, debido a que se emplea agua para hacer el desplazamiento de líquido dentro del sistema de medición, que reacciona con el dióxido de carbono producciendo un ácido carbónico por lo que se consume parte del biogás producido. En vez de ello se puede emplear mercurio el cual no reacciona con ninguno de los gases generados. Por otro lado, se puede implementar una electro-válvula al sistema de medición que permita automatizar las purgas. Además de esto, se debe hacer un ánalisis por cromatagrofía de gases del biogás producido para determinar su tipo y los porcentajes que representan en la cantidad total obtenida, o bien agregar sensores de biogás.

También se requiere de otra serie de experimentos en modo por lotes, ésto como una etapa complementaria para la validación del modelo, a fin de corroborar la identificación de parámetros aquí obtenida. Por último, se deben realizar experimentos en modo continuo que permitan hacer la representación en la entrada de un escalón al sistema para poder realizar, en lo sucesivo, la validación en línea del observador, además de la validación experimental de la estrategia de control.

Bibliografía

- S. Carlos-Hernández, N. Oudaak, J. F Beteau, and E. N. Sanchez, "Fuzzy observer for the anaerobic digestion process," in *Proceedings of IFAC Symposium on Structures* Systems and Control, Oaxaca, Mexico, 2004.
- [2] G. Bastin and D. Dochain, On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors. Amsterdam, New York, USA: Elservier Science Publications, 1990.
- [3] O. Bernard and J. L. Gouzé, "Closed loop observers bundle for uncertain biotechnological models," Journal of Process Control, vol. 4, no. 7, pp. 765–774, 2003.
- [4] V. Alcaraz-Gonzalez, J. Harmand, A. Rapaport, J. P. Steyer, V Gonzalez-Alvarez, and C. Pelayo-Ortiz, "Software sensors for highly uncertain wwtps: A new approach based on interval observers," *Water Research*, vol. 36, no. 10, pp. 2515–2524, 2004.
- [5] V. Alcaraz-González and V. González-Álvarez, Robust nonlinear observers for bioprocesses: application to wastewater treatment. Book Chapter in Selected Topics in Dynamics and Control of Chemical and Biological Processes, ser. Lecture Notes in Control and Information Sciences. Springer Berlin/Heidelber, Germany, 2007.
- [6] D. and J. C. Ponsart, J. Harmand, C. Join, and P. Gras, "On-line estimation of unmeasured inputs for anaerobic wastewater treatment processes," *Control Engineering Practice*, vol. 11, no. 9, pp. 1007–1019, 2003.
- [7] A. Muller, S. Marsilli-Libelli, A. Aivasidis, T. Lloyd, S. Kroner, and C. Wandrey, "Fuzzy control of disturbances in a wasterwater treatment process," *Water Research*, vol. 31, no. 12, pp. 3157–3167, 1997.
- [8] A. Puñal, J. Rodríguez, A. Franco, E. F. Carrasco, and E. and J. M. Lema, "Advanced monitoring and control of anaerobic wastewater treatment plants: diagnosis and supervision by a fuzzy-based expert system," Water Science and Technology, vol. 43, no. 7, pp. 191–198, 2001.

- [9] E. Giraldo-Gomez and M. Duque, "Automatic startup of a high rate anaerobic reactor using a fuzzy logic control system,' in *Fifth latin-american workshop-seminar in* wastewater anaerobic treatment, Viña del Mar, Santiago de Chile, 1998.
- [10] O. Bernard, M. Polit, Z. Hadj-Sadok, M. Pengov, D. Dochain, M. Estaben, and P. Labat, "Advanced monitoring and control of anaerobic wastewater treatment plants: software sensors and controllers for an anaerobic digester," *Water Science and Technology*, vol. 43, no. 7, p. 175182, 2001.
- [11] S. Carlos-Hernández, E. N. Sanchez, and J.F. Beteau, "Fuzzy observers for anaerobic wwtp: Development and implementation," *Control Engineering Practice*, vol. 17, pp. 690–702, 2009.
- [12] D. Urrego-Patarroyo, E. N. Sanchez, S. Carlos-Hernández, and J. F. Beteau, "Recurrent neural networks observer for anaerobic processes," in XIII Latin-american Congress of Automatic Control, Mérida, Venezuela, 2008.
- [13] A. S. Poznyak, E. N. Sanchez, and W. Yu, Differential Neural Networks for Robust Nonlinear Control. Singapore: World Scientific Publishing Co., 2001.
- [14] L. J. Ricalde and E. N. Sanchez, "Inverse optimal nonlinear high order recurrent neural observer," in *International Joint Conference on Neural Networks*, Montreal, Canada, 2005.
- [15] J. B. Van Lier, A. Tilche, B. K. Ahring, H. Macarie, R. Moletta, M. Dohanyos, L. W. Hulshoff Pol, P. Lens, and W. Verstraete, "New perspectives in anaerobic digestion," *Water Science and Technology*, vol. 43, no. 1, pp. 1–18, 2001.
- [16] K. Yamuna Rani and V. S. Ramachandra Rao, "Control of fermenters a review," Bioprocess Engineering, vol. 21, pp. 77–78, 1999.
- [17] P. F. Pind, I. Angelidaki, B. K. Ahring, K. Stamatelatou, and G. Lyberato, "Monitoring and control of anaerobic reactors," *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, vol. 82, pp. 135–182, 2003.
- [18] E. Heinzle, I. J. Dunn, and G. B. Ryhiner, "Modeling and control of anaerobic wastewater treatment," Adv. Biochem. Eng. Biotech., vol. 48, pp. 79–114, 1993.
- [19] J. Batstone and J. P. Steyer, "Use of modelling to evaluate best control practice for winery-type wastewaters," *Water Science and Technology*, vol. 52, no. 2, pp. 147–152, 2007.
- [20] J. P. García-Sandoval, V. Gonzalez-Alvarez, B. Castillo-Toledo, and C. Pelayo-Ortiz, "Robust discrete control of nonlinear processes: Application to chemical reactors," *Computer Chemical Engineering*, vol. 32, pp. 3246–3253, 2008.

- [21] S. Stoyanov, "Robust multiple-input-multiple-output control of non-linear continuous fermentation processes," *Bioprocess and Biosystems Engineering*, vol. 23, no. 4, pp. 309-314, 2000.
- [22] I. Simeonov and I. Queinnec, "Linearizing control of the anaerobic digestion with addition of acetate (control of the anaerobic digestion)," Control Engineering Practice, vol. 14, pp. 799-810, 2006.
- [23] D. J. Dochain, M. Perrier, and A. Pauss, "Adaptive control of hydrogen concentration in anaerobic digestion," Ind. Eng. Chem. Res., vol. 30, pp. 129–136, 1991.
- [24] E. Petre, D. Selisteanu, and D. Sendrescu, "Adaptive control strategies for a class of anaerobic depollution bioprocesses," in *Proceedings of IEEE International Conference* on Automation, Quality and Testing, Robotics, Cluj-Napoca, Romania, 2008.
- [25] L. Mailleret, O. Bernard, and J. P. Steyer, "Nonlinear adaptive control for bioreactors with unknown kinetics," *Automatica*, vol. 40, no. 8, pp. 1379–1385, 2004.
- [26] H. Honda and T. Kobayashi, "Fuzzy control of bioprocess," Journal of Bioscience and Bioengineering, vol. 89, no. 5, pp. 401–408, 2000.
- [27] E. N. Sanchez, J. F. Beteau, and S. Carlos-Hernandez, "Hierarchical fuzzy control for a wastewater anaerobic treatment plant," in *Proceedings of the IEEE Systems, Man, and Cybernetics Conference*, Tucson, AZ, USA, 2001, pp. 3285–3290.
- [28] P. Dantigny, J. L. Ninow, and M. Lakrori, "A new control strategy for yeast production based on the l/a approach," *Applied Microbiology and Biotechnology*, vol. 36, no. 3, pp. 352–357, 1991.
- [29] T. Soehartanto and J. F. Beteau, "Selection of the most appropriate control stratefy by using stability model: Application to pulp and wastewater plant," in *Proceedings of the American Control Conference*, San Duego, CA, USA, 1999, pp. 3104–3105.
- [30] Bluesens, http://www.blusens.de. Germany: Bluesens Trade Mark, 2009.
- [31] F Monnet, An Introduction to Anaerobic Digestion of Organic Wastes. Scotland: Remade Scotland/Technical Report, 2003.
- [32] A. Rozzi, "Modelling and control of anaerobic digestion process," Transactions Instrumentation, Modelling and Control, vol. 6, no. 3, pp. 153–159, 1984.
- [33] S. Carlos-Hernández, "Integrated intelligent control strategy for wastewater treatment plants by anaerobic digestion,' Ph.D. dissertation, INPG, Grenoble, France, 2005.

- [34] P. L. McCarty, "Anaerobic waste treatment fundamentals," Public Works, vol. 95, no. 9, pp. 107-112, 1964.
- [35] J. F. Beteau, "Modelling and control of an industrial bioprocess for municipal waste treatment,' Ph.D. dissertation, INPG, Grenoble, France, 1992.
- [36] V. Otton, "Modeling and analysis of a distributed parameters process: Study of the anaerobic digestion in a fluidized bed reactor," Ph.D. dissertation, INPG, Grenoble, France, 1998.
- [37] S. Haykin, Neural Networks: a Comprehensive Foundation. New Jersey, USA: Prentice Hall, 1999.
- [38] E. N. Sanchez, A. Y. Alanís, and G. Chen, "Recurrent neural networks trained with kalman filtering for discrete chaos reconstruction," *Dynamics of Continuous, Discrete* and *Impulsive Systems Series B*, vol. 13, pp. 1–18, 2007.
- [39] M. Norgaard, O. Ravn, N. K. Poulsen, and L. K. Hansen, Neural Networks for Modelling and Control of Dynamic Systems. London, Great Britain: Springer-Verlag, 2000.
- [40] G. A. Rovithakis and M. A. Chistodoulou, Adaptive Control with Recurrent High-Order Neural Networks. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 2000.
- [41] R. J. Williams and D. Zipser, "A learning algorithm for continually running fully recurrent neural networks," *Neural Computation*, vol. 1, pp. 270–280, 1989.
- [42] C. Leunga and L. Chan, "Dual extended kalman filtering in recurrent neural networks," Neural Networks, vol. 16, pp. 223–239, 2003.
- [43] H. Yang, J. Li, and F. Ding, "A neural network learning algorithm of chemical process modeling based on the extended kalman filter," *Neurocomputing*, vol. 70, no. 4, pp. 625–632, 2007.
- [44] Y. Song and J. W. Grizzle, "The extended kalman filter as a local asymptotic observer for discrete-time nonlinear systems," *Journal of Mathematical Systems, Estimation and Control*, vol. 5, no. 1, 1995.
- [45] S. Haykin, Kalman Filtering and Neural Networks. NY, USA: John Wiley & Sons, 2001.
- [46] E. N. Sanchez, A. Y. Alanís, and A. G. Loukianov, Discrete Time High Order Neural Control Trained with Kalman Filtering. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 2008.
- [47] E. N. Sanchez and A. Y. Alanís, Neural Networks: Fundamental Concepts and Applications to Automatic Control. Madrid, Spain: In spanish. Pearson Education, 2006.

- [48] M. Lakrori, "L/a command applications," Ph.D. dissertation, INPG, Grenoble, France, 1989.
- [49] T. Soehartanto, "Stability analysis and control of wastewater treatment processes," Ph.D. dissertation, INPG, Grenoble, France, 1999.
- [50] K. Tanaka and H. O. Wang, Fuzzy Control Systems, Design and Analysis. New Jersey, USA: John Wiley, 2001.
- [51] T. Takagi and M. Sugeno, "Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control," *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, vol. 15, no. 1, pp. 116-132, 1985.
- [52] L. Diaz-Jimenez, E. Herrera-Ramirez, and S. Carlos-Hernandez, "Using natural zeolites to improve anaerobic abattoir wastewater treatment," in *The Third International Meeting on Environmental Biotechnology and Engineering*, Palma de Mallorca, Spain, 2008.
- [53] R. Borja, E. Sanchez, P. Weiland, L. Travieso, and A. Martin, "Kinetics of anaerobic digestion of cow manure with biomass immobilized on zeolite," *The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal*, vol. 54, no. 1, 1994.
- [54] J. Rodríguez, G. J. Sosa, and Y. Garza, "Bioconversión anaerobia como una alternativa para la remoción de dqo contenido en aguas residuales del rastro municipal de la ciudad de saltillo, coahuila, méxico," *Journal of the Mexican Chemical Society*, vol. 46, no. 2, pp. 185–188, 2002.
- [55] J. Richalet, A. Rault, R. Pouliquen, and P. Naslin, Process identification by the model method. Paris, France: Gordon and Preach, 1971.
- [56] L. C. Lawson and R. J. Hauson, Solving Least Square Problems. Philadelphia, USA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1995.
- [57] Y. H. Kim and F. L. Lewis, *High-Level Feedback Control with Neural Networks*. Singapore: World Scientific, 1998.

Apéndice A

Cálculo de los Puntos de Equilibrio

En este anexo se presenta el cálculo de los puntos de equilibrio del modelo matemático del proceso de la digestión anaeróbica. Este modelo sirve de base para validar el esquema de control inteligente híbrido.

El modelo matemático completo que representa el proceso de la digestión anaeróbica en un CSTR con filtro de biomasa está dado por los siguientes conjuntos de ecuaciones:

Ecuaciones algebraicas:

- $HS + S^{-} S_2 = 0, \tag{A.1}$
- $H^+S^- K_a HS = 0, \tag{A.2}$

$$CO_{2d} + B - IC = 0,$$
 (A.3)

$$H^+B - K_b CO_{2d} = 0, (A.4)$$

$$Z + [H^+] - B - S^- - [OH^+] = 0, (A.5)$$

donde (A.1) y (A.2) representan el equilibrio químico entre ácidos y bases, (A.3) representa la formación de carbono, (A.4) muestra el equilibrio entre el bicarbonato y dióxido de carbono, mientras que (A.5) representa los cationes dentro del reactor. Asimismo, el resto de las variables se definen como en (2.1).
Ecuaciones diferenciales:

$$X_1 = (\mu_1 - k_{d1}) X_1, \tag{A.6}$$

$$S_1 = -R_6\mu_1 X_1 + D_{in} \left(S_{1in} - S_1 \right), \tag{A.7}$$

$$X_2 = (\mu_2 - k_{d2}) X_2, \tag{A.8}$$

$$S_2 = -R_3\mu_2 X_2 + R_4\mu_1 X_1 + D_{in} \left(S_{2in} - S_2\right), \qquad (A.9)$$

$$IC = R_2 R_3 \mu_2 X_2 + R_5 \mu_1 X_1 - \lambda R_1 R_3 \mu_2 X_2 + D_{in} \left(IC_{in} - IC \right), \qquad (A.10)$$

$$Z = D_{in} (Z_{in} - Z), (A.11)$$

con las tasas de crecimiento para X_1 y X_2 dadas por A.12 y A.13 respectivamente:

$$\mu_1 = \frac{\mu_{1max}S_1}{k_{s1} + S_1 + \frac{S_1 HS}{k_{s1}}},\tag{A.12}$$

$$\mu_2 = \frac{\mu_{2max}HS}{k_{s2} + HS + \frac{HS^2}{k_{s2}}},\tag{A.13}$$

donde μ_{1max} y μ_{2max} son las tasas de crecimiento máximas de las biomasas X_1 y X_2 respectivamente, k_{s1} y k_{s2} son las constantes de saturacion de crecimiento de las biomasas, mientras que k_{i1} y k_{i2} son las constantes de inhibición por exceso de sustrato. Asimismo, el resto de las variables se definen como en (3.3).

Ecuaciones de salida

$$Q_{CH_4} = R_1 R_3 \mu_2 X_2, \tag{A.14}$$

$$Q_{CO_2} = \lambda R_2 R_3 \mu_2 X_2, \tag{A.15}$$

donde λ se define como en (A.33). Definido así el proceso de digestión anaeróbica, se procede a obtener dos de las variables importantes en el proceso: H^+ y λ .

Cálculo de la ecuación de segundo grado para H^+

Concentrándose en las ecuaciones algebraicas del modelo matemático del sistema...

Por un lado se tiene, a partir de la ecuación (A.1)

$$HS = S_2 - S^-$$
 (A.16)

mientras que a partir de la ecuación (A.2)

$$HS = \frac{H^+S^-}{K_a} \tag{A.17}$$

Igualando (A.16) a (A.17) y despejando para S^- se tiene:

$$S^- = S_2 \left(\frac{K_a}{K_a + H^+}\right) \tag{A.18}$$

Por otro lado se tiene, a partir de la ecuación (A.3)

$$CO_{2d} = IC - B, \tag{A.19}$$

mientras que a partir de la ecuación (A.4)

$$CO_{2d} = \frac{H^+B}{K_b} \tag{A.20}$$

Igualando (A.19) a (A.20) y despejando para B, se tiene:

$$B = IC\left(\frac{K_b}{K_b + H^+}\right) \tag{A.21}$$

Ahora bien, sustituyendo (A.18) y (A.21) en (A.5) se obtiene la ecuación de segundo grado para H^+ :

$$Z + [H^+] - IC\left(\frac{K_b}{K_b + H^+}\right) - S_2\left(\frac{K_a}{K_a + H^+}\right) - [OH^+].$$

Sin embargo, en casos en donde el pH está entre 6 y 8, los valores de $[H^+]$ y $[OH^+]$ son despreciables [49], por lo tanto:

$$Z(K_{b} + H^{+})(K_{a} + H^{+}) = ICK_{b}(K_{a} + H^{+}) + S_{2}K_{a}(K_{b} + H^{+}),$$

$$Z(H^{+^{2}} + (K_{a} + K_{b})H^{+} + K_{a}K_{b}) = K_{a}K_{b}(S_{2} + IC) + (S_{2}K_{a} + ICK_{b})H^{+}$$

Reacomodando para H^{+2} da por resultado la ecuación de segundo grado para H^+ :

$$ZH^{+^{2}} + ((K_{a} + K_{b})Z - K_{a}S_{2} - K_{b}IC)H^{+} - K_{a}K_{b}(S_{2} + IC - Z) = 0.$$
(A.22)

A partir de (A.22) se define lo siguiente:

$$\begin{array}{lll} a & = & Z, \\ b & = & \left(\left(K_a + K_b \right) Z - K_a S_2 - K_b IC \right), \\ c & = & -K_a K_b \left(S_2 + IC - Z \right), \end{array}$$

dado el sentido físico que tiene la digestión anaeróbica la solución para (A.22) se toma como la raíz positiva:

$$H^{+} = -b + \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$
(A.23)

Cálculo de λ

De nuevo concentrándose en las ecuaciones algebraicas del modelo matemático del sistema...

Por un lado se tiene, a partir de la ecuación (A.1)

$$S^{-} = S_2 - HS,$$
 (A.24)

mientras que a partir de la ecuación (A.2)

$$S^- = \frac{K_a H S}{H^+} \tag{A.25}$$

Igualando (A.24) a (A.25) y despejando para HS, se tiene:

$$HS = S_2 \left(\frac{H^+}{H^+ + K_a}\right) \tag{A.26}$$

Por otro lado se tiene, a partir de la ecuación (A.3)

$$B = IC - CO_{2d},\tag{A.27}$$

mientras que a partir de la ecuación (A.4)

$$B = \frac{K_b C O_{2d}}{H^+} \tag{A.28}$$

Igualando (A.27) a (A.28) y despejando para CO_{2d} , se tiene:

$$CO_{2d} = IC\left(\frac{H^+}{H^+ + K_b}\right) \tag{A.29}$$

Ahora bien, se define λ como:

$$\lambda = \frac{P_{CO_2}}{P_t - P_{CO_2}},\tag{A.30}$$

$$P_{CO_2} = \frac{CO_{2d}}{K_h},\tag{A.31}$$

en donde K_h es la constante de Henry de los gases. Sustituyendo (A.31) en (A.30):

$$\lambda = \frac{CO_{2d}}{P_t K_h - CO_{2d}}.\tag{A.32}$$

Finalmente, sustituyendo (A.29) en (A.32) se obtiene la ecuación para el cálculo de λ :

$$\lambda = \frac{H^+ IC}{P_t K_h (K_b + H^+) - H^+ IC}.$$
(A.33)

Cálculo de los puntos de equilibrio

Se pueden encontrar los puntos de equilibrio del sistema a partir del ánalisis del sistema de ecuaciones diferenciales.

Igualando A.6 a cero, se tiene:

$$\dot{X}_1 = (\mu_1 - k_{d1})X_1 = 0.$$

Enfocándose en la solución no trivial, se tiene:

$$\mu_{1} = k_{d1},$$

$$k_{d1} = \frac{\mu_{1max}S_{1}}{k_{s1} + S_{1} + \frac{S_{1}HS}{k_{i1}}},$$
(A.34)
(A.34)

Despejando para S_1 se obtiene el punto de equilibrio:

$$S_{1eq} = \frac{k_{d1}k_{s1}}{\mu_{1max} - k_{d1} - \frac{k_{d1}}{k_{i1}}HS}.$$
(A.35)

Igualando (A.7) a cero, se tiene:

$$\dot{S}_1 = -R_6\mu_1 X_1 + D_{in}(S_{in} - S_1) = 0.$$

Enfocándose en la solución no trivial:

$$X_1 = \frac{D_{in}(S_{1in} - S_1)}{R_6\mu_1}.$$

Debido a que en el punto de equilibrio la tasa de mortalidad es igual a la razón de crecimiento por (A.34), se tiene:

$$X_{1eq} = \frac{D_{in}(S_{1in} - S_1)}{R_6 k_{d1}}$$
(A.36)

Igualando (A.9) a cero, se tiene:

$$\dot{S}_2 = -R_3\mu_2X_2 + R_4\mu_1X_1 + D_{in}(S_{2in} - S_2) = 0$$

Enfocándose en la solución no trivial:

$$X_2 = \frac{R_4\mu_1 X_1 + D_{in}(S_{2in} - S_2)}{R_3\mu_2}$$

Debido a que en el punto de equilibrio las tasas de mortalidad son iguales a la razones de crecimiento, se tiene:

$$X_{2eq} = \frac{R_4 k_{d1} X_1 + D_{in} (S_{2in} - S_2)}{R_3 k_{d2}}$$
(A.37)

Para obtener el punto de equilibrio de S_2 se obtiene a partir de (A.1) y sustituyendo S^- como en (A.25), se tiene:

$$S_{2eq} = \frac{HS(K_a + H^+)}{H^+}$$
(A.38)

Finalmente, igualando (A.10) a cero, se tiene:

$$IC = R_5\mu_1X_1 + R_2R_3\mu_2X_2 - \lambda R_1R_3\mu_2X_2 + D_{in}(IC_{in} - IC) = 0.$$
(A.39)

Debido a que en el punto de equilibrio las tasas de mortalidad son iguales a la razones de crecimiento, sustituyendo λ como en (A.30) y considerando:

$$IC_{in} = Z_{in} = B + S^{-} \quad \text{(debido a (A.5))},$$

$$IC_{eq} = B + CO_{2d},$$

se despeja (A.39) para CO_{2d} y se obtiene:

$$0 = CO_{2d}^{2} - \frac{1}{D_{in}} \left(R_{5}k_{d1}X_{1} + (R_{1} + R_{2})R_{3}k_{d2}X_{2} + P_{t}k_{h}D_{in} + D_{in}S^{-} \right) CO_{2d} + \frac{P_{t}k_{h}}{D_{in}} \left(R_{5}k_{d1}X_{1} + R_{2}R_{3}k_{d2}X_{2} + D_{in}S^{-} \right)$$
(A.40)

Apéndice B

Demostración del Teorema 2.1

En este anexo se presenta la demostración del **Teorema 2.1**, que es uno de los resultados principales en [46].

Teorema 2.1. Para el sistema (2.20) el RHONO (2.21), entrenado con el algoritmo basado en el EFK (2.11), asegura que el error de estimación (2.23) y el error en la salida (2.22) sean semiglobalmente uniformemente ultimamente acotado (SGUUB de su nombre en inglés "Semiglobally Uniformly Ultimately Bounded"); además, los pesos del RHONO permanecen acotados.

Prueba: Considérese la función de Lyapunov candidata:

$$V_{i}(k) = \tilde{w}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{w}_{i}(k) + \tilde{x}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{x}_{i}(k),$$

$$\Delta V_{i}(k) = V(k+1) - V(k),$$

$$\Delta V_{i}(k) = \tilde{w}_{i}(k+1)P_{i}(k+1)\tilde{w}_{i}(k+1) + \tilde{x}_{i}(k+1)P_{i}(k+1)\tilde{x}_{i}(k+1) - \tilde{w}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{w}_{i}(k) - \tilde{x}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{x}_{i}(k).$$
(B.1)

Empleando (2.11) y (2.9) en (B.1):

$$\Delta V_{i}(k) = [\tilde{w}_{i}(k) - \eta_{i}K_{i}(k)e(k)]^{\top} [A_{i}(k)] [\tilde{w}_{i}(k) - \eta_{i}K_{i}(k)e(k)] + [f(k) - g_{i}C\tilde{x}]^{\top} [A_{i}(k)] [f(k) - g_{i}C\tilde{x}(k)] - \tilde{w}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{w}_{i}(k) - \tilde{x}_{i}(k)P_{i}(k)\tilde{x}_{i}(k),$$
(B.2)

con

$$A_{i}(k) = P_{i}(k) - D_{i}(k) + Q_{i}D_{i}(k) = K_{i}(k)H_{i}^{\top}P_{i}(k),$$

$$f(k) = \tilde{w}_{i}(k)z_{i}(\hat{x}(k), u(k)) + \epsilon_{z_{i}}.$$

Entonces, (B.2) se puede expresar como:

$$\begin{split} \Delta V_{i}(k) &= \tilde{w}_{i}^{\top}(k)P_{i}(k)\tilde{w}_{i}(k) - \tilde{w}_{i}^{\top}(k)\left[B_{i}(k)\right]\tilde{w}_{i}(k) \\ &+ \eta^{2}\tilde{x}^{\top}(k)C^{\top}K^{\top}\left[A_{i}(k)\right]K_{i}(k)C\tilde{x}(k) \\ &+ f^{\top}(k)P_{i}(k)f(k) - f^{\top}(k)\left[B_{i}(k)\right]f(k) \\ &+ \tilde{x}^{\top}(k)C^{\top}g_{i}^{\top}\left[A_{i}(k)\right]g_{i}C\tilde{x}(k) \\ &- \tilde{w}_{i}^{\top}(k)P_{i}(k)\tilde{w}_{i}(k) - \tilde{x}_{i}^{\top}(k)P_{i}(k)\tilde{x}_{i}(k), \end{split}$$

$$\begin{split} \Delta V_{i}(k) &\leq \|\tilde{x}(k)\|^{2} \|\eta K_{i}C\|^{2} \|A_{i}(k)\| - \|\tilde{x}(k)\|^{2} \|g_{i}C\|^{2} \|A_{i}(k)\| \\ &- \|\tilde{x}(k)\|^{2} P_{i}(k) - \|\tilde{w}_{i}(k)\|^{2} \|B_{i}(k)\| + |\epsilon_{z_{i}}|^{2} \|A_{i}(k)\| \\ &+ 2 \|\tilde{w}_{i}(k)\| \|z_{i}(\hat{x}(k), u(k))\| |\epsilon_{z_{i}}| \|A_{i}(k)\| \\ &- \|\tilde{w}_{i}(k)\|^{2} \|z_{i}(\hat{x}(k), u(k))\|^{2} \|A_{i}(k)\|, \end{split}$$

 $\operatorname{con} B_i(k) = D_i(k) - Q_i,$

$$\Delta V_i(k) \leq - \|\tilde{x}(k)\|^2 E_i(k) - \|\tilde{w}_i(k)\|^2 F_i(k) + |\epsilon_{z_i}|^2 \|A_i(k)\| + 2G_i(k), \quad (B.3)$$

con:

$$E_{i}(k) = P_{i}(k) - \|\eta K_{i}C\|^{2} \|A_{i}(k)\| - \|g_{i}C\|^{2} \|A_{i}(k)\|,$$

$$F_{i}(k) = \|B_{i}(k)\| - \|z_{i}(\hat{x}(k), u(k))\|^{2} \|A_{i}(k)\|,$$

$$G_{i}(k) = \|w_{i}^{*} - w_{imax}\| \|z_{i}(\hat{x}(k), u(k))\| \|\epsilon_{z_{i}}\| \|A_{i}(k)\|.$$

Entonces $\Delta V_i(k) < 0$ cuando:

$$\|\tilde{x}(k)\| > \sqrt{\frac{|\epsilon_{z_i}|^2 \|A_i(k)\| + 2G_i(k)}{E_i(k)}} \equiv \kappa_1,$$
(B.4)

ó

$$\|\tilde{w}_{i}(k)\| > \sqrt{\frac{\left|\epsilon_{z_{i}}\right|^{2} \|A_{i}(k)\| + 2G_{i}(k)}{F_{i}(k)}} \equiv \kappa_{1}.$$
(B.5)

Por consiguiente, la solución de (2.24) y (2.25) es estable; por lo tanto el error de estimación y los pesos del RHONO son SGUUB [57]. En la Figura B.1 se muestra una ilustración gráfica de este teorema. Considerando (2.21) y (2.22) es fácil ver que el error de salida tiene una relación algebraica con $\tilde{x}(k)$, por esta razón si $\tilde{x}(k)$ es acotada, entonces e(k) también es acotada:

$$e(k) = C\tilde{x}(k),$$

 $||e(k)|| = ||C|| ||\tilde{x}(k)||$



Figura B.1: Ilustración gráfica del Teorema 2.1.

Apéndice C

Protocolo Experimental para la Medición de DQO

El análisis de la demanda química de oxígeno (DQO) es el procedimiento realizado para conocer el nivel de concentración del sustrato utilizado en la fase experimental y permite obtener una grafica de tendencia de la degradación realizada por el proceso de digestión aneróbica.

Los resultados de la DQO se definen como la cantidad de mg de O_2 consumidos por litro de una muestra bajo las condiciones del procedimiento descrito a continuación. En general, la muestra de sustrato se calienta por dos horas con un agente oxidante fuerte, el dicromato de potasio. Los componentes orgánicos oxidables reaccionan reduciendo el ion dicromato en ion cromo verde. Finalmente, por medio de un espectofotómetro se obtiene la DQO de la muestra de sustrato.

El análisis de DQO requiere del siguiente procedimiento:

1. Calentar el reactor a 150°C.

- 2. Tomar una muestra de 2 mL y colocarla en el frasco para el análisis de DQO.
- 3. Tomar al frasco por la tapa e invertirlo 2 ó 3 veces para mezclarlo. Durante el mezclado el frasco se pone muy caliente por lo que se deben tomar precauciones. Depués, colocarlo en el reactor calentado previamente.
- 4. Calentar los frascos por 2 h a 150°C.
- 5. Esperar a que se enfríe hasta los 120°C y agitar nuevamente.
- 6. Dejar enfriar a temperatura ambiente.

- 7. Colocar la muestra de referencia (agua ionizada) para que sirva de punto de partida (cero) en el espectrofotómetro.
- 8. Colocar la muestra a analizar en el espectrofotómetro y registrar el dato de DQO.

El equipo empleado para el análisis de DQO es el siguiente:

Reactor: Digital Reactor Block 200 (DRB 200) $HACH^{\textcircled{R}}$ Permite calentar soluciones en frascos de varias medidas en un rango de 37-165 °C por un periodo de 0-480 minutos. Cuenta con 6 programas de temperatura almacenados y 3 programables.

Frasco para el análisis de DQO: TNT 822 $HACH^{\textcircled{R}}$. 20 – 1500 mg/L DQO

• Espectrofotómetro: Modelo DR 5000 HACH[®]. Espectrofotómetro de análisis Ultravioleta/Visible (UV/VIS) con un rango de longitud de onda de 190 a 1100 nm. Cuenta con un conjunto completo de programas de aplicación.

Dado que la concentración de las muestras iniciales de sustrato es mayor a los 2000 mg/L, las primeras muestras se deben diluir en hasta un 20% (4 mL de agua desionizada por 1 mL de la muestra).

En los experimentos realizados en este trabajo de tesis se realiza al menos una muestra diaria para verificar la evolución de la DQO. Esta gráfica se muestra en la Figura C.1; a partir de la gráfica resultado de las muestras analizadas, se obtiene una línea de tendencia que permite obtener la gráfica de la evolución de DQO que se observa igualmente en la Figura C.1.

En este caso la ecuación de la línea de tendencia está dada por:

$$y_t = -0.1637x_t^3 + 19,009x_t^2 - 579,63x_t + 5905,5.$$
 (C.1)



Figura C.1: Análisis de DQO.

Apéndice D

Artículos Publicados

Los artículos obtenidos producto de esta tesis son los siguientes:

Artículos aceptados para congreso:

R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernández, and E. N. Sanchez, "A New Neural Observer for an Anaerobic Wastewater Treatment Process," in *Second International Workshop on Advanced Computational Intelligence* (IWACI 2009), Mexico city, Mexico, 2009.

R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernández, and E. N. Sanchez, "Hybrid Intelligent Control Scheme for an Anaerobic Wastewater Treatment Process," in *Second International Workshop on Advanced Computational Intelligence* (IWACI 2009), Mexico city, Mexico, 2009.

R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernández, and E. N. Sanchez, "Estrategia Neurodifusa para el Control de un Proceso Anaeróbico de Tratamiento de Aguas Residuales," in *Congreso Nacional 2009 de la Asociación de México de Control Automático* (AMCA 2009), Zacatecas, México, 2009.

R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernández, and E. N. Sanchez, "Estimación de Variables en un Proceso Anaeróbico de Tratamiento de Aguas Residuales mediante Redes Neuronales," in *VII Congreso Internacional sobre Innovación y Desarrollo Tecnológico* (CIINDET 2009), Cuernavaca, México, 2009.

Artículo en revisión para revista:

R. Belmonte-Izquierdo, S. Carlos-Hernández, and E. N. Sanchez, "A New Neural Observer for an Anaerobic Bioreactor," *International Journal of Neural Systems*, Special Issue: Advance in Computational Intelligence, 2009.

El Jurado designado por la Unidad Guadalajara del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional aprobó la tesis

Estimación de Estado y Control Inteligente de Procesos Anaeróbicos de Tratamiento de Aguas Residuales

del (la) C.

Rubén BELMONTE IZQUIERDO

el día 04 de Septiembre de 2009.

Dr. Edgar Nelson Sánchez Camperos Investigador CINVESTAV 3D CINVESTAV Unidad Guadalajara

whe

Dr. José Jåvier Ruíz León Investigador CINVESTAV 3B CINVESTAV Unidad Guadalajara

Dr. Alexander Georgievich Loukianov Investigador CINVESTAV 3C CINVESTAV Unidad Guadalajara

Dr. Salvador Carlos Hernández Investigador CINVESTAV 2A CINVESTAV Unidad Saltillo